



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
QUÍMICA- METALURGIA

ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE DESGASIFICACIÓN DE ALUMINIO CON ROTOR
INYECTOR VARIANDO EL PUNTO DE INYECCIÓN DE GAS Y EL DISEÑO DEL ROTOR
ASISTIDO POR MODELADO MATEMÁTICO Y PLANTA PILOTO

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
DOCTOR EN INGENIERÍA

PRESENTA:
M. en I. MARICRUZ HERNÁNDEZ HERNÁNDEZ

TUTOR PRINCIPAL
DR. MARCO A. RAMÍREZ ARGÁEZ, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM
COMITÉ TUTOR
DR. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM
DR. JOSÉ ALEJANDRO GARCÍA HINOJOSA, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM

MÉXICO, D. F. FEBRERO 2015



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: DR. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA
Secretario: DR. ARTURO JUÁREZ HERNÁNDEZ
Vocal: DR. JOSÉ ROBERTO ZENIT CAMACHO
1^{er}. Suplente: DR. JOSÉ LUIS CAMACHO MARTÍNEZ
2^{do}. Suplente: DR. MARCO A. RAMÍREZ ARGAEZ

Lugar o lugares donde se realizó la tesis:

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA METALÚRGICA, FACULTAD DE QUÍMICA, UNAM.

TUTOR DE TESIS:

DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGAEZ

FIRMA

Contenido

Lista de Figuras.....	6
Lista de Tablas.....	10
Resumen.....	11
Abstract.....	13
Capítulo I	
Estado del arte	
Introducción.....	14
Estado del Arte.....	14
1.1 El Hidrógeno en el aluminio.....	16
1.2 Métodos para la determinación del contenido de hidrógeno en aluminio y sus aleaciones.....	17
1.3 Formación de porosidades y su impacto en las propiedades mecánicas de las piezas de aluminio.....	19
1.4 Métodos de desgasificación del aluminio.....	22
1.5 Procesos industriales en la refinación del aluminio.....	24
1.6 Mecanismos de desgasificación del aluminio.....	28
1.7 Modelos matemáticos.....	29
1.8 Modelación física.....	34
1.9 Simulación numérica.....	35
1.10 Evolución del diseño geométrico del rotor inyector utilizado en la desgasificación de aluminio.....	36
Justificación.....	40
Objetivo general.....	40
Objetivos particulares.....	40
Hipótesis.....	41
Capítulo II	
Metodología	
2.1 Modelo físico H ₂ O-O ₂	42
2.1.1 Criterios de similitud para el diseño del modelo físico.....	42
2.1.2 Equipo y procedimiento experimental.....	47
2.1.3 Diseño de experimentos.....	51
2.2 Modelado matemático.....	52
2.2.1 Modelo matemático de la desgasificación del modelo físico de agua.....	52
2.2.2 Balances en reactores tipo batch.....	54
2.3 Modelación numérica del flujo de fluidos computacional CFD.....	56
2.3.1 Suposiciones en el desarrollo del modelo numérico.....	58
2.3.2 Ecuaciones de transporte gobernantes.....	58
2.3.3 Ecuaciones gobernantes en MFR.....	61
2.3.4 Ecuaciones para la modelación de flujos multifásicos.....	63
2.3.5 Condiciones de frontera e iniciales.....	67
2.3.6 Algoritmo de solución.....	69
2.4 Planta piloto.....	70
2.4.1 Procedimiento experimental.....	71
Capítulo III	
Resultados y análisis de resultados	
3.1 Modelo Físico agua-oxígeno.....	75
3.1.1 Constante de transferencia de masa experimental, $k_m A_b$	79
3.1.2 Eficiencia en el consumo de gas (ECG).....	81
3.1.3 Análisis estadístico.....	84
3.1.4 Constante de transferencia de masa teórica (rotor estándar).....	86
3.1.5 Validación del modelo matemático de la desgasificación con el modelo físico de agua (rotor estándar).....	88
3.1.6 Optimización de $k_m A_b$ y ECG.....	89

3.2 Resultados de la modelación matemática de flujo de fluidos CFD.....	91
3.2.1 Agitación sin inyección.....	91
3.2.2 Agitación e inyección.....	96
3.2.3 Validación de los resultados de modelado numérico de flujo de fluidos CFD.....	105
3.2.4 Números de potencia y bombeo.....	109
3.3 Planta piloto.....	111
Capítulo IV	
Conclusiones	
Conclusiones.....	115
Bibliografía.....	118
Anexo.....	125

Agradecimientos

A la Universidad Nacional Autónoma de México, especialmente a la Facultad de Química.

Al CONACYT por la beca otorgada para realizar mis estudios de doctorado.

A la comunidad docente de metalurgia.

Al Dr. Marco A. Ramírez Argáez por el apoyo brindado.

Lista de Figuras

Capítulo I

Figura No.	Descripción	Página No.
1	Localización geográfica de la producción de Aluminio primario de 1990 al 2011.	
2	Demanda Mundial de Aluminio primario y secundario de 1950 al 2020.	
3	Solubilidad del hidrógeno en el aluminio líquido y otras aleaciones.	
4	Etapas de la formación de las porosidades durante la solidificación de aluminio líquido.	
5	a) Efectos sobre la resistencia a la tensión en función del porcentaje de la porosidad para tres tipos de aleaciones. b) Propiedades mecánicas del aluminio en función de la velocidad de solidificación.	
6	Eficiencias de desgasificado comparativas de tres diferentes técnicas de inyección.	
7	Esquema del proceso GBF y resultados de la simulación numérica del porcentaje de gas presente.	
8	Esquema del proceso SNIF e imagen del diseño geométrico del rotor estator utilizado.	
9	Grados de dispersión de las burbujas propuestos por Oldshue y diseño geométrico de rotores utilizados por Saternus.	
10	Diseños geométricos de rotores utilizados en la industria química.	
11	Diseños geométricos de rotores registrados por FOSECO para la desgasificación de aluminio líquido.	
12	Rotores utilizados por Nilmani.	

Capítulo II

1	Esquema del modelo físico con las principales dimensiones utilizadas en el criterio de similitud geométrica.	
2	a) Reactor Industrial de la empresa Cooper Crouse Hinds y plano general del modelo físico con factor de escala de 1:1 (figura b).	
3	Rotores de Nylamid® utilizados; a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado, c) nueva propuesta de rotor.	
4	Esquema del modelo físico de agua.	
5	(a) Tacómetro digital, (b) Oxímetro digital, y (c) Rotámetro utilizados en la experimentación del modelo físico.	
6	Foto del arreglo experimental de la Figura 4 e instrumentación del reactor: 1. Junta rotativa, 2. Oxímetro, 3. Rotor de Nylamid (liso), 4. Flecha de Nylamid, 5. Compresor, 6. Flujoímetro, 7. Motor, 8. Reactor, 9. Recipiente externo del reactor.	
7	Volumen de control en el reactor con el gas de purga.	
8	Esquema representativo de la aplicación de la técnica de MFR al dominio de cómputo, incluyendo la discretización del mismo.	
9	Diagrama de la solución numérica del proceso.	
10	Geometrías realizadas para los tres tipos de rotores utilizados en la simulación numérica; rotor estándar, rotor estándar muescado y rotor nueva propuesta de izquierda a derecha, respectivamente.	
11	Condiciones a la frontera del sistema y tipo de malla generada; hexaédrica para el fluido estático y tetraédrica para el fluido rotativo.	
12	Arreglo experimental utilizado para las pruebas a escala piloto.	
13	Relaciones de dimensiones de la planta piloto.	

14	Diseños geométricos de grafito del rotor inyector utilizado en la planta piloto.	
15	Dispositivo AISCAN en funcionamiento dentro del horno con aluminio líquido.	
16	Proceso de desgasificación de aluminio con el rotor inyector y la inyección del gas de argón de purga.	
17	Introducción de termopar para control de la temperatura y atomización directa en el horno con pistola de pintura de agua caliente para la re-introducción del hidrógeno al fundido.	
Capítulo III		
1	Imágenes de la desgasificación en el modelo físico de agua utilizando inyección convencional en los tres diferentes tipos de rotores utilizados: a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado y c) nueva propuesta de rotor.	
2	Imágenes de la desgasificación en el modelo físico de agua utilizando inyección novel en los tres diferentes tipos de rotores utilizados: a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado y c) nueva propuesta de rotor.	
3	Curvas de desgasificación para el rotor estándar.	
4	Curvas de desgasificación para el rotor estándar muescado.	
5	Curvas de desgasificación para la nueva propuesta de rotor.	
6	Coefficientes de transporte de masa, $k_m A_b$, para los tres diferentes tipos de rotores utilizados en función de las variables del proceso.	
7	Validación del modelo matemático de balance de masa que predice las cinéticas de desgasificado teóricas comparándolas con las cinética medidas experimentalmente. a) Inyección de gas convencional, b) Inyección de gas novel.	
8	Optimización para la inyección convencional (GIR, izquierda) y novel (GSR, derecha) en MATLAB®.	
9	Ambiente MATLAB® mostrando la línea del comando con los resultados de optimización obtenidos a través del algoritmos “gamultiobj” para los dos tipos de inyección (GSR y GIR).	
10	Contornos de fases y presión (Pa) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 290 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).	
11	Vectores de velocidad ($m \cdot s^{-1}$) de los tres diseños geométricos de rotores sin inyección de gas de purga y 290 RPM.	
12	Contornos de viscosidad de Eddy (Pa·s) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 290 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).	
13	Contornos de energía cinética turbulenta ($J \cdot kg^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 290 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).	
14	Contornos de fases y presión (Pa) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (izquierda), rotor estándar muescado (centro) y rotor nuevo diseño (derecha).	
15	Vectores de velocidad ($m \cdot s^{-1}$) de los tres diseños geométricos de rotores sin inyección de gas de purga y 580 RPM.	
16	Contornos de viscosidad de Eddy (Pa·s) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM sin inyección de gas; a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado y c) rotor nuevo diseño.	
17	Contornos de energía cinética turbulenta ($J \cdot kg^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y sin inyección de gas; rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).	

18	Contornos de la formación del vórtice y el patrón de caudal de líquido expulsado por los tres diferentes diseños geométricos de rotores utilizados.	
19	Contornos de presión (Pa) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).	
20	Vectores de velocidad ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).	
21	Contornos de fracción de gas para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).	
22	Contornos de viscosidad de Eddy ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).	
23	Contornos de energía cinética turbulenta ($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).	
24	Contornos de presión (Pa) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).	
25	Vectores de velocidad ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).	
26	Contornos de fracción de gas para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).	
27	Contornos de viscosidad de Eddy ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).	
28	Contornos de energía cinética turbulenta ($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).	
29	Perfiles radiales de velocidad (V^*) experimentales [96, 128] y simulados para dos diferentes planos en el rotor estándar, 9 y 18 cm.	
30	Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor estándar con inyección convencional a 580 RPM con dos flujos de gas.	
31	Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor estándar muescado con inyección convencional a 580 RPM con dos flujos de gas.	

32	Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor nuevo diseño con inyección convencional a 580 RPM con dos flujos de gas.	
33	Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor estándar con inyección novel a 580 RPM con dos flujos de gas.	
34	Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor nuevo diseño con inyección novel a 580 RPM con dos flujos de gas.	
35	Vectores de velocidad en FLUENT para los tres diferentes diseños geométricos de rotores a 580 RPM y sin inyección de gas.	
36	Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando las condiciones de temperatura y concentración inicial de hidrógeno en el fundido para el rotor estándar donde las figuras oscuras indican la evolución del contenido de hidrógeno y las figuras blancas la evolución de la temperatura.	
37	Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando las condiciones de temperatura y concentración inicial de hidrógeno en el fundido el rotor estándar muescado donde las figuras oscuras indican la evolución del contenido de hidrógeno y las figuras blancas la evolución de la temperatura.	
38	Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando las condiciones de temperatura y concentración inicial de hidrógeno en el fundido para el rotor nuevo diseño donde las figuras oscuras indican la evolución del contenido de hidrógeno y las figuras blancas la evolución de la temperatura.	
39	Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando la cinética de desoxidación adimensional para los tres tipos de rotores utilizados.	

Lista de Tablas

Capítulo I		
Tabla No.	Descripción	Página No.
1	Procesos comerciales de refinación de aluminio y condiciones de operación de los mismos.	
2	Evolución del diseño geométrico del rotor inyector de acuerdo a patentes registradas.	
Capítulo II		
1	Dimensiones del modelo físico y del reactor.	
2	Parámetros operacionales escalados del modelo de agua basados en los criterios de similitud.	
3	Propiedades físicas de los fluidos utilizados.	
4	Niveles de las variables o factores utilizados en el modelo físico de agua.	
5	Diseño de experimentos 2^3 .	
6	Correlaciones Lemoine de los coeficientes de transferencia de masa para las dos diferentes técnicas de inyección del gas de purga [85].	
7	Parámetros del modelo de turbulencia.	
8	Características de las diferentes mallas para los tres rotores simulados.	
9	Resumen de los principales variables de operación que caracterizan la Simulación numérica.	
10	Resumen de los principales parámetros del método de solución utilizado en la Simulación numérica.	
11	Dimensiones principales de la planta piloto.	
Capítulo III		
1	Parámetros cinéticos obtenidos mediante el ajuste de los datos experimentales (Ecuación 3.1).	
2	Concentraciones iniciales de oxígeno disuelto, al 90 % de desgasificado, y tiempo total para 90 % de desgasificado para cada uno de los 3 rotores empleados en este estudio y con todas las diferentes condiciones experimentales.	
3	Eficiencia en el consumo de gas de purga.	
4	Análisis estadístico mostrando el efecto de las principales variables y los errores estándar para el rotor estándar.	
5	Análisis estadístico mostrando el efecto de las principales variables y los errores estándar para el rotor muescado.	
6	Análisis estadístico mostrando el efecto de las principales variables y los errores estándar para el rotor nuevo.	
7	Correlaciones utilizadas del artículo de Lemoine [85] para el cálculo de $k_m A_b$ para las inyecciones tipo GIR y GSR.	
8	Número de potencia para los tres diferentes diseños geométricos de rotores.	
9	Capacidad y número de bombeo para los tres rotores utilizados.	
10	Concentración inicial y final de hidrógeno (ml/100g) para los tres rotores utilizados obtenidos en la planta piloto con aluminio líquido.	

Resumen

El objetivo general de este trabajo es contribuir al estudio y entendimiento del proceso metalúrgico de desgasificación de aluminio líquido mediante la técnica de rotor-inyector en reactores tipo batch con el fin particular de incrementar la eficiencia de dicho proceso. Se estudian principalmente dos variables independientes del proceso de desgasificación: el punto de inyección del gas en el reactor y la comparación del desempeño de tres tipos de diseños geométricos de rotores-inyectores, dos de los cuales son diseños comerciales. Para obtener un estudio detallado del proceso de desgasificación, el trabajo realizado está dividido en tres partes principales que incluyen: **a)** Modelado físico del proceso de desgasificación a través de la experimentación en un modelo físico de H_2O-O_2 inyectando N_2 , **b)** Experimentación en una planta piloto de desgasificación de aluminio líquido con la técnica del rotor inyector y variando los diseños geométricos del mismo, y finalmente, **c)** Simulación numérica de la dinámica de fluidos del sistema.

En la parte de la simulación física, se utilizó un modelo físico de agua-aire con inyección de nitrógeno con el fin de desoxidar el agua a través del uso de tres diferentes diseños geométricos de rotor inyector y combinando las variables experimentales de proceso de velocidad de agitación, flujo de gas inyectado y tipo de inyección. Con los resultados experimentales se obtuvieron coeficientes de transporte de masa, los cuales determinaron la cinética del proceso, así como también se obtuvo la eficiencia en el consumo de gas de purga para cada condición experimental. La cinética de desoxidación obtenida experimentalmente fue validada exitosamente a través de un modelo matemático desarrollado previamente [1], el cual describe el proceso de desgasificado en un sistema agua-oxígeno mediante un balance de masa global en un reactor tipo batch. El rotor propuesto de nuevo diseño obtuvo la mejor eficiencia en los experimentos en el modelado físico, debido al grado de agitación producida en el líquido, la buena dispersión y tamaño de las burbujas obtenidas, con lo que se concluye que dicho diseño es una buena opción en la remoción de hidrógeno del aluminio líquido. Respecto al tipo de inyección de gas, ambas técnicas utilizadas mostraron una cinética de desgasificación similar, sin embargo en términos de consumo de gas de purga, la inyección novel obtuvo un mejor desempeño. Adicionalmente, el análisis estadístico realizado para evaluar el efecto de las variables de operación sobre el consumo de gas y la constante cinética ratificaron que la velocidad de rotación del rotor y el flujo de gas inyectado, así como su mutua interacción son los efectos más significativos de manera general para los tres tipos de rotores utilizados.

La simulación numérica del proceso de desgasificación se realizó utilizando un software comercial de dinámica de fluidos, FLUENT 14.5, mediante el cual se simuló las condiciones de fluidodinámica, variando parámetros como la velocidad de giro del rotor, la técnica de inyección, el flujo de gas y el diseño geométrico de rotor. Se utilizó un modelo bifásico Euleriano, basado en las ecuaciones fundamentales de conservación de masa y de la cantidad de movimiento que gobiernan el flujo de fluidos y el transporte de masa en el reactor, acoplado a la técnica de VOF para la descripción de la superficie libre y la técnica de marcos de referencia múltiples. La predicción de los vórtices en la superficie libre fue exitosa para los tres tipos de rotores utilizados. Asimismo, se ratificó la ventaja del rotor de nuevo diseño al mostrar éste mejores características de agitación y bombeo.

En la parte de experimentación en planta piloto, se desgasificó aluminio líquido a través de la inyección de argón industrial manteniendo constantes los valores de las variables experimentales para los tres diferentes diseños geométricos de rotor inyector,

obteniendo de esta manera la evolución del contenido de hidrógeno con el tiempo. El nuevo diseño de rotor obtuvo los menores y mejores tiempos de desgasificado, corroborando los resultados obtenidos en el modelado físico y en la simulación numérica respecto a un mejor desempeño del mismo en comparación con los otros dos modelos de rotores utilizados.

Abstract

This work is aimed to contribute to the study and understanding of the aluminum degasification by using the rotor injector technique in batch reactors in search of increasing the process efficiency. It was mainly studied two degasification process independent variables: reactor bottom injection point and evaluation of geometric design of three different types of rotor injector, two of them are commercial designs. To obtain a detail analysis of degasification process, the study is divided into three mainly sections that include: a) Physical modeling of the degasification process throughout physical experimentation in H₂O-O₂ model injecting N₂, b) Trial plant experimentation of liquid aluminum degasification by using rotor injector technique and varying the rotor injector geometric design, and finally, c) Numerical simulation of the system fluid dynamics.

A physical model of water-air with nitrogen injection was used in the physical simulation section to deoxidize water by using three different geometric design of rotor injector and combining experimental process variables of rotor speed, gas flow rate, and injection type. By the experimental results was obtained mass transfer coefficients, which determined the process kinetics. Besides, gas consumption efficiency was reached for each experimental condition. Deoxidation kinetics attained experimentally was validated successfully through a mathematical model developed previously [1], which describes the degasification process of water-oxygen system by using a global mass balance in batch reactors. The proposal of the new rotor design achieved the best experimental efficiency in the physical modeling due to the high level agitation produce in the liquid, excellent dispersion and size of the bubbles. With the last results it can be conclude that the new rotor geometric design is a good choice for the hydrogen removal in liquid aluminum. Regards to gas injection type, the two gas injection used showed similar degasification kinetics, but the novel gas injection type achieved the best gas purge consumption. Furthermore, the statics analyze performed to evaluate variables operation effect over gas consumption and kinetics constant confirmed that rotor speed and gas flow rate injected, and the mutual interaction between them, are the more significant effects for the three different rotors used.

Numerical simulation of the degasification process was carried out using commercial software of fluid dynamics, FLUENT 14.5. Through this software was simulated the fluid dynamic conditions of speed rotor, injection technique, gas flow rate, and geometric rotor design. It was developed a two-phase Eulerian model based on the conservation equations of mass and momentum that govern the turbulent two-phase fluid flow phenomena and mass transport present in the physical model of the refining aluminum ladle. Moreover, the VOF and MFR techniques were used to describe the free surface and model the entire ladle. The vortex prediction at the free surface was successful for the three rotors used. Further, the advantage to use the new rotor design was demonstrated showing the best characteristics of agitation and pumping effect.

Experimental section with liquid aluminum and argon industrial gas injection was carried out keeping constant variables values for the three geometric designs of rotor injector. The hydrogen level with the time was obtained. The new rotor design achieved the lowest and best degasification times, ratifying the results obtained in physical modeling and numerical simulation.

Capítulo I Estado del arte

Introducción

La limpieza de las aleaciones de aluminio es una de las principales preocupaciones actuales en la industria metalúrgica debido al incremento en la demanda de productos de alta calidad y a las múltiples aplicaciones industriales de este metal y sus aleaciones, destacando entre éstas las industrias aeronáutica y naval, automoción, construcción y embalaje, entre otras. En la Figura 1 se muestra el incremento en la producción mundial del aluminio primario en las últimas dos décadas, donde es posible observar un incremento constante y el impacto en la cifra total de la producción de China, la cual es mayor al 30% del total. El aluminio presenta la ventaja de ser un metal 100% reciclable, y debido a su empleo tan extendido y generalizado en la sociedad moderna es fácilmente recuperable para su reciclado, lo que se traduce en un aumento en la utilización de procesos de refinación de aluminio secundario (también se le conoce con el mismo nombre al cambio morfológico del eutéctico Al-Si, sin embargo, en este trabajo el término refinación se refiere a la limpieza de las aleaciones de aluminio). En la Figura 2 se muestra la demanda de aluminio primario y secundario, donde se aprecia la importancia gradual del aluminio secundario. Desde el punto de vista energético, la industria del aluminio es responsable de consumir cerca del 3% de la electricidad mundial y se encuentra entre los sectores económicos que más energía consumen. La creciente demanda de piezas de aluminio de mayor calidad, la tendencia a la reducción de emisiones contaminantes para la protección del ambiente y la disminución de los costos de operación en los procesos de refinación, son factores que impulsan el estudio, desarrollo y mejoramiento en la eficiencia de los procesos de refinación del aluminio.

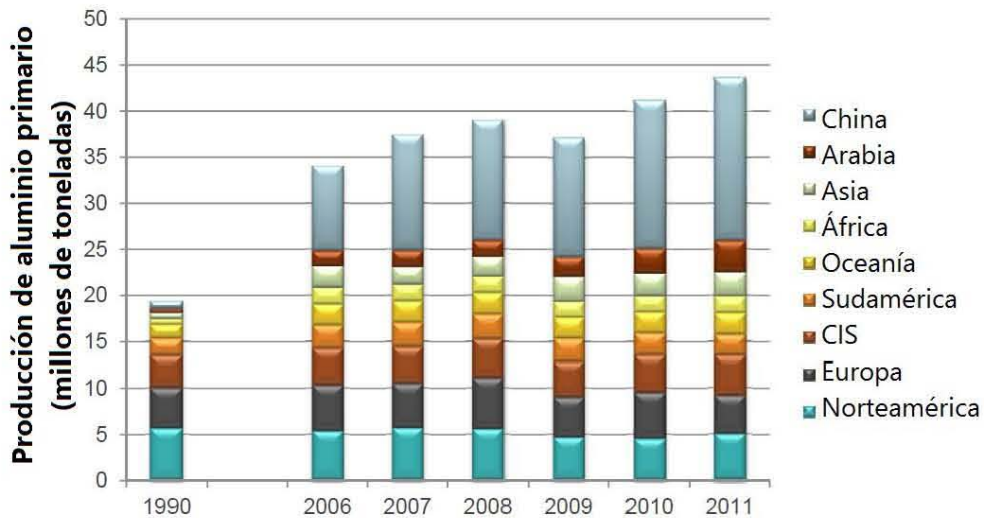


Figura 1. Localización geográfica de la producción de Aluminio primario de 1990 al 2011 [2].

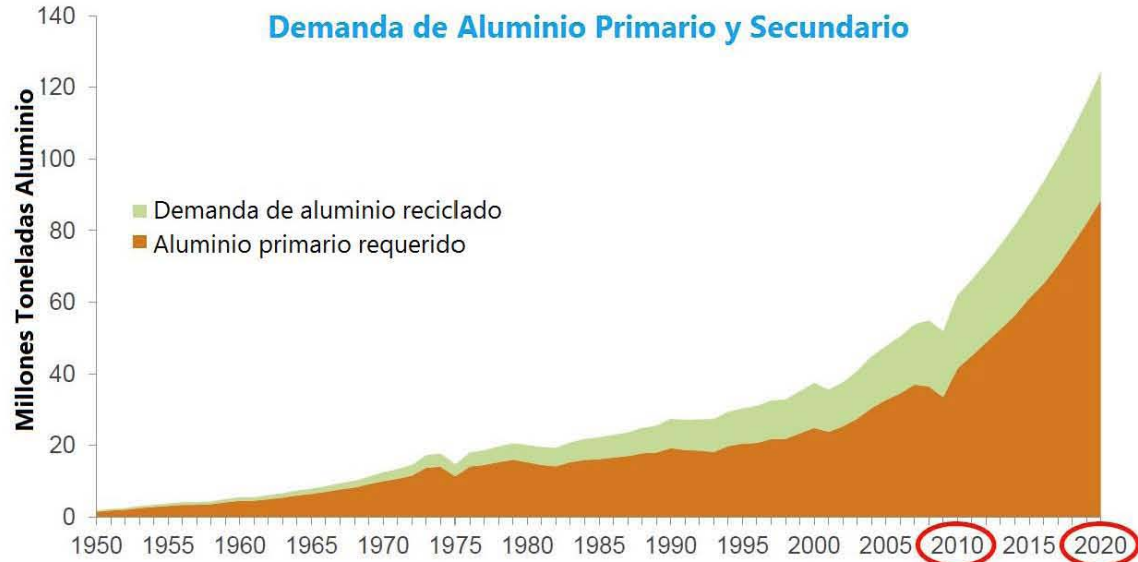


Figura 2. Demanda Mundial de Aluminio primario y secundario de 1950 al 2020 [3].

El principal objetivo de los procesos de refinación es remover las impurezas presentes en el fundido como son las inclusiones de óxidos no metálicos, metales alcalinos e hidrógeno (en particular, al proceso de remoción de hidrógeno se le conoce como desgasificación), debido a que estos elementos no deseados causan detrimento en las propiedades mecánicas de las piezas de aluminio. Diversos procesos de refinación han sido desarrollados para la remoción de estas impurezas y pueden ser clasificados de acuerdo a algunos criterios primordiales como son el tipo de aleación de aluminio a fundir, el tipo de gas o mezclas de reactivos a inyectar, el tipo de reactor a utilizar, así como el proceso y método de refinación. Usualmente algunos métodos de refinación son combinados para satisfacer los requerimientos solicitados de las piezas de aleaciones de aluminio.

El estudio y entendimiento de la termodinámica y de la cinética del proceso de desgasificación del aluminio en una etapa temprana condujo al desarrollo de modelos matemáticos simples y de experimentación con los objetivos principales de estudiar la teoría de remoción de impurezas, la solubilidad del hidrógeno en el aluminio y el coeficiente de transferencia de masa del hidrógeno y otros elementos en el aluminio. Una vez establecidas las bases termodinámicas y cinéticas que gobiernan la refinación del aluminio y sus aleaciones, se presentó el surgimiento de diversos procesos industriales con mejor eficiencia, bajo costo y menos contaminantes. Después de la implementación de estos procesos en la industria, la modelación mediante la herramienta de dinámica de fluidos computacional (CFD, por sus siglas en inglés) ha sido la guía en las últimas dos décadas para el estudio, diseño y optimización de los procesos de refinación del aluminio mediante el uso de las bases termodinámicas y cinéticas que controlan el proceso.

Los métodos de inyección de gas en el aluminio líquido incluyen el uso de lanzas, el cual ha perdido aplicación industrial, el uso del tapón poroso y el uso del rotor-inyector. En la actualidad, el método más utilizado para la refinación del aluminio es la inyección de gas o mezclas de gases de refinación a través de un rotor inyector. El presente estudio está enfocado al proceso de remoción de hidrógeno disuelto en aluminio líquido a través de la técnica de purga de gases inertes con un rotor-inyector; en este proceso, un gas inerte o una combinación de gases inertes y reactivos es inyectada a través del rotor, el cual también es un impulsor que transmite momento al

líquido y lo impulsa hacia las paredes del reactor. El mecanismo general de remoción del hidrógeno es por difusión a través de la intercara metal-gas. Diversos factores influyen la eficiencia en la remoción de hidrógeno, tales como el tipo de aleación, la temperatura, el contenido inicial de hidrógeno, el tipo y flujo de inyección del gas de purga, el tiempo y área de contacto del gas inyectado y las condiciones ambientales externas, tales como la humedad y la atmósfera circundante.

Debido a la opacidad del aluminio fundido y a las condiciones adversas de temperatura es difícil hacer experimentación rigurosa en plantas de fabricación de aluminio, por lo que la modelación física se ha popularizado como una herramienta útil para el análisis de procesos de refinación de metales. El modelo físico agua-aire es comúnmente utilizado para simular la desgasificación del aluminio, donde el agua representa al aluminio líquido y el nitrógeno al gas inerte inyectado, mientras que el oxígeno disuelto en agua representa al hidrógeno disuelto en el aluminio. En dicho modelo se deben cumplir los criterios de similitud geométrica, dinámica y cinemática para poder aplicar y escalar el conocimiento generado del modelo físico a un reactor industrial, aunque se ha afirmado que la similitud cinemática entre el agua y el aluminio es imposible de satisfacer por las diferencias en las viscosidades cinemáticas entre el aluminio y el agua [3]. A continuación se presenta una reseña exhaustiva y extensa del estado del arte en cuanto a la desgasificación de aluminio puro y algunas de sus aleaciones, que abarca las bases termodinámicas y cinéticas que describen la rapidez de desgasificado a lo que se denomina cinética de desgasificado, pasando por estudios teóricos de modelado físico y matemático, así como aspectos tecnológicos del desgasificado, revisando patentes de procesos de desgasificado, técnicas y aparatos para medir el hidrógeno y el efecto que tiene la presencia del mismo en la calidad de las piezas de aluminio.

Estado del Arte

1.1 El Hidrógeno en el aluminio

El hidrógeno es el único gas con una solubilidad significativa en el aluminio líquido. La principal fuente de hidrógeno en aleaciones de aluminio es la humedad en el aire, además, también contribuyen en menor grado la humedad de los elementos aleantes, el tipo de combustible utilizado en la fundición, las herramientas y los refractarios. Aunque existen muchas fuentes de hidrógeno, su concentración inicial en el fundido es determinada principalmente por la humedad en la atmósfera del horno, es decir, la presión parcial del hidrógeno sobre el metal líquido, por la temperatura de fundición y por la composición de la aleación. Este hidrógeno reacciona con el aluminio líquido resultando como producto hidrógeno monoatómico, el cual difunde a través de la capa de óxido hacia el fundido, tal y como se establece a través de las ecuaciones (1.1) y (1.2).



Para el aluminio puro, sólo una veinteava parte del hidrógeno que se disuelve en el líquido es retenido en la solución del aluminio sólido en condiciones de equilibrio termodinámico. Las otras diecinueve partes serán rechazadas durante la solidificación y pueden formar poros que impacten negativamente en las propiedades mecánicas de la pieza a fabricar. Por lo tanto, es de vital importancia alcanzar valores bajos de

concentración de hidrógeno en el aluminio líquido después del proceso de desgasificación. La dependencia de la solubilidad del hidrógeno en el aluminio líquido con la temperatura se muestra en la Figura 3.

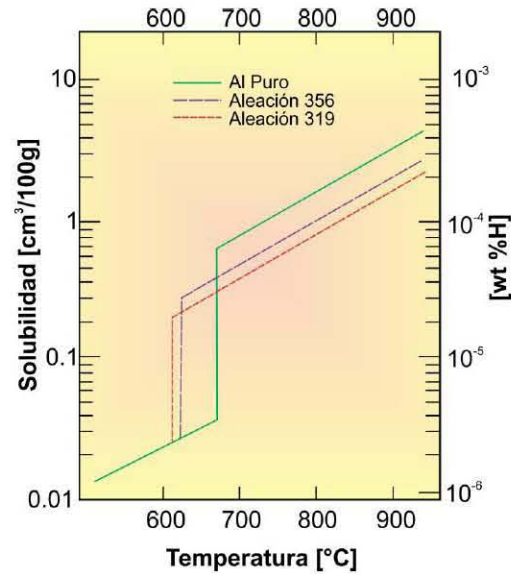


Figura 3. Solubilidad del hidrógeno en el aluminio líquido y otras aleaciones [4].

El contenido de hidrógeno y la solubilidad en aluminio y sus aleaciones se expresa en unidades de mililitros de hidrógeno a temperatura y presión estándar por cada 100 gramos de aluminio (ml/100 g a 723K, o 0° C, y 1 atm) o en partes por millón (ppm). Se han obtenido experimentalmente diversas ecuaciones relacionadas con la solubilidad de hidrógeno en el aluminio, aunque ninguna ha sido universalmente aceptada. El primer estudio sobre cantidad e identidad de gases disueltos en aluminio y sus aleaciones fue realizado por Sieverts en 1929 [5]. En dicho estudio se demostró que el hidrógeno era el único gas disuelto en aluminio y lo difícil que era llegar a una cuantificación certera de la solubilidad de dicho gas. Debido a los valores relativamente pequeños de gas involucrado, la solubilidad del hidrógeno no fue conocida con exactitud hasta la realización de los cuidadosos experimentos de Ransley y Neufeld [6] y Opie y Grant [7]. La dificultad de medir con exactitud la solubilidad del hidrógeno en el aluminio se incrementa en las aleaciones de éste debido a los múltiples componentes metálicos contenidos, entre ellos silicio, cobre y magnesio. Estos elementos aleantes o impurezas tienen diferentes coeficientes de interacción con el hidrógeno y como resultado la actividad del hidrógeno varía en un amplio rango que va desde 1×10^{-6} hasta 8×10^{-6} . A partir de los datos obtenidos de la solubilidad del hidrógeno en el aluminio, se han realizado avances en el desarrollo y mejora de métodos de desgasificación del aluminio y sus aleaciones, así como en el desarrollo de rotores de diversas geometrías y materiales.

1.2 Métodos para la determinación del contenido de hidrógeno en aluminio y sus aleaciones

En lo que respecta a las técnicas para la determinación del contenido de hidrógeno en fundidos de aleaciones de aluminio, éstas aún se encuentran en constante desarrollo debido a la dificultad de la evaluación del contenido de hidrógeno durante la fundición. Sin embargo, las técnicas existentes pueden ser divididas de acuerdo a su uso en la

práctica en análisis cuantitativos de laboratorio, análisis in-situ cuantitativos y métodos semi-cuantitativos.

Los análisis de laboratorio proporcionan de manera cuantitativa la concentración de hidrógeno en el aluminio y sus aleaciones, sin embargo su uso está limitado al laboratorio. En esta categoría se incluyen los métodos de sub-fusión de Ransley [8], el método de fusión portador de nitrógeno [9] y el método de fusión al vacío [10]. Estos métodos se basan en la extracción del hidrógeno del metal ya sea en estado sólido o líquido, a alta temperatura y a muy bajas presiones. La cuantificación del hidrógeno extraído se realiza midiendo su presión o a través de su conductividad térmica. A pesar de la precisión de estas técnicas, su naturaleza demandante de largos tiempos de prueba y costosos equipos de laboratorio, así como la aplicación de rigurosos estándares por personal calificado, limita su uso directo en la línea de producción, sin embargo, son ampliamente utilizadas en la investigación.

Entre los métodos cuantitativos in-situ se incluyen los dispositivos Telegas y Alscan (desarrollados por Ransley, Talbot y Barlow en 1958), el dispositivo CHAPEL, el método electroquímico y los métodos de tira de hidrógeno y difusión. Estos métodos proporcionan una medida cuantitativa in-situ de la concentración de hidrógeno en fundidos de aluminio y sus aleaciones. El principio básico del método de los dispositivos Telegas y Alscan es la recirculación de un gas de acarreo en un circuito cerrado. Una pequeña cantidad del gas de acarreo (nitrógeno, argón o helio) es llevada en contacto con la aleación de aluminio fundida y recirculada a través de una sonda cerámica sumergida en el baño. El hidrógeno difunde dentro del gas recirculante de acarreo hasta que éste alcanza su presión de equilibrio. En esta condición de equilibrio, la concentración de hidrógeno disuelto en el fundido es proporcional a la raíz cuadrada de su presión parcial en la atmósfera situada sobre el baño metálico (ley de Sievert). La presión de hidrógeno en el gas de acarreo se mide utilizando un sensor de conductividad térmica del gas (catarómetro). Al conocer la solubilidad, la concentración de hidrógeno puede ser calculada, sin embargo, debido a que la solubilidad es función de la composición del metal y la temperatura, la concentración de hidrógeno no puede ser calculada directamente, por lo que el dispositivo relaciona la lectura de hidrógeno obtenida con una tabla de calibración. El factor de corrección utilizado para el dispositivo Telegas es la relación de la solubilidad del hidrógeno para la aleación y del aluminio puro [11], mientras que el analizador Alscan [12] introduce dos factores de corrección, uno para la temperatura y otro para la composición del metal. Una ventaja del dispositivo Alscan sobre el Telegas es que el primero utiliza una probeta porosa desechable de cerámico, la cual permite la circulación del gas evitando la penetración del fundido, además que aumenta la resistencia al choque térmico. El analizador Alscan también cuenta con un dispositivo de agitación, lo que refresca la interface metal/probeta proporcionando una rápida respuesta en tiempo y reproducibilidad. Comparando las dos técnicas anteriormente descritas, las técnicas in-situ son mucho más rápidas en la determinación cuantitativa del contenido de hidrógeno en aluminio y además pueden ser utilizadas en línea con buena precisión, aunque también tienen altos costos debido al precio del dispositivo, así como al costo de las probetas y la vulnerabilidad de las mismas.

Los métodos semi-cuantitativos proporcionan una medida aproximada de la concentración de hidrógeno en aleaciones de aluminio y se incluyen en esta categoría la prueba de presión reducida en conjunto con algunas variaciones en sus principios básicos de operación, así como el método de atenuación ultrasónica. La prueba de presión reducida consiste en la solidificación de una pequeña muestra de la aleación de aluminio bajo una presión reducida y controlada. La determinación del gas contenido se

realiza a través de la observación del comportamiento de la solidificación de la muestra, es decir, el cambio de volumen experimentado debido al aumento de la porosidad a consecuencia de la reducción de la presión, o mediante mediciones de la densidad o análisis de porosidad del espécimen solidificado. Debido a su versatilidad y disponibilidad económica, la prueba de presión reducida en sus diferentes variantes ha sido ampliamente utilizada en la industria del aluminio en una gran variedad de usos incluyendo la producción y control de calidad de las piezas producidas. Debido a la poca precisión de esta prueba, se utiliza generalmente de forma cualitativa, teniendo presente que el nivel de porosidad producido no depende solamente de la cantidad de hidrógeno contenido, sino también de la cantidad de inclusiones presentes en la aleación. Otro método semi-cuantitativo comercialmente utilizado, aunque no muy confiable es la prueba de la primera burbuja. En esta técnica, la presión es gradualmente reducida mientras que la superficie queda visible y en un momento dado, una burbuja de hidrógeno rompe la superficie del baño líquido y en este momento se registran la temperatura y la presión. Se supone que la presión a la cual surge la primera burbuja es igual a la presión parcial de hidrógeno en el aluminio y entonces la concentración de hidrógeno puede ser calculada de acuerdo a la ley de Sievert.

1.3 Formación de porosidades y su impacto en las propiedades mecánicas de las piezas de aluminio

El hidrógeno afecta el comportamiento de las aleaciones de aluminio sólo cuando éste causa la formación de poros. En las fundiciones de aleaciones de aluminio, de forma general, los defectos de porosidad pueden ser provocados por la formación de gases en el seno del metal líquido o bien como consecuencia de la contracción volumétrica del propio metal a lo largo de los procesos de enfriamiento y posterior solidificación (rechupes), siendo éste último el factor más importante en la formación de la porosidad. Es difícil determinar cuáles poros se forman debido al hidrógeno y cuáles debido a la contracción. Actualmente, ambos factores juegan un papel en la formación de la mayoría de los poros, haciendo difícil separar el efecto del hidrógeno. Por tal razón, los estudios del efecto del hidrógeno son usualmente conducidos sobre bases comparativas. En el caso de las porosidades generadas por la contracción del metal, es posible obtener información previa sobre sus localizaciones preferenciales puesto que estas irregularidades se originan preferencialmente en los llamados centros térmicos de las piezas o zonas de última solidificación. Por el contrario, el comportamiento de las porosidades por hidrógeno en aluminio responde a criterios diferentes como el cambio en la solubilidad en el metal líquido a medida que éste se enfría tras ser colado.

Aunque el mecanismo fundamental de la formación de microporosidades aún no está claramente establecido, el siguiente mecanismo es generalmente aceptado y consta de cuatro etapas representadas en la Figura 4 [13]. En la etapa I, durante la solidificación, el líquido interdendrítico se enriquece gradualmente con hidrógeno conforme la fracción del metal sólido incrementa, ya que la mayoría del hidrógeno es rechazado en la interface sólido-líquido. Conforme la solidificación progresa, el contenido de hidrógeno en el líquido continúa aumentando, excediendo el límite de su solubilidad hasta alcanzar un valor en el cual los poros se pueden formar. Idealmente, un poro de gas debería nuclear en este punto, sin embargo, requiere el establecimiento de una nueva superficie y debido a esta barrera energética de superficie, el contenido de hidrógeno en el líquido continúa incrementándose por arriba del límite de su solubilidad hasta alcanzar el valor de formación del poro. En dicho punto, los poros comienzan a nuclear (etapa II). La nucleación ocurre predominantemente en la raíz de las dendritas o

en otros sitios de heterogeneidades, tales como inclusiones. Como el diámetro del poro es extremadamente pequeño cuando éste se forma (menor a $20\mu\text{m}$) y su velocidad de crecimiento es muy pequeña, la concentración de hidrógeno en el líquido no es severamente afectada durante este periodo. Después de que el poro ha crecido hasta su diámetro completo, la burbuja puede desprenderse ella misma del brazo de la dendrita y puede ser transportada dentro del seno del líquido. Durante este estado (etapa III), la burbuja crece instantáneamente y de ahí que el contenido de hidrógeno en el líquido descienda rápidamente. Subsecuentemente, la velocidad de formación del poro disminuye ligeramente debido a que la concentración de hidrógeno en el líquido es disminuida por el crecimiento de poros (etapa IV). El crecimiento de los poros continúa hasta que la fundición está completamente sólida. La concentración de hidrógeno a la cual el poro comienza a nuclear es un valor crítico para la formación del poro, sin embargo ésta depende más de la velocidad de enfriamiento del metal debido a que los poros nuclean predominantemente en las raíces de las dendritas y el tamaño del poro estará determinado por el espacio interdendrítico, el cual se establece por la velocidad de enfriamiento. Contenidos iniciales de hidrógeno altos proporcionan a los poros más tiempo para crecer, resultando en una gran cantidad de porosidad total y un mayor tamaño de poro. Cuando el contenido inicial de hidrógeno es por debajo de $0.05\text{ ml}/100\text{g}$, la fracción sólida de umbral es 1.0, indicando que la formación de porosidad puede ser suprimida bajo estas condiciones [14]. No obstante, Ransley y Neufeld encontraron que el umbral crítico de la concentración de hidrógeno para la formación de porosidad en fundidos de aluminio es de $0.12\text{ ml}/100\text{ g}$, lo cual es tres veces mayor que el valor de la solubilidad de hidrógeno en aluminio puro [6].

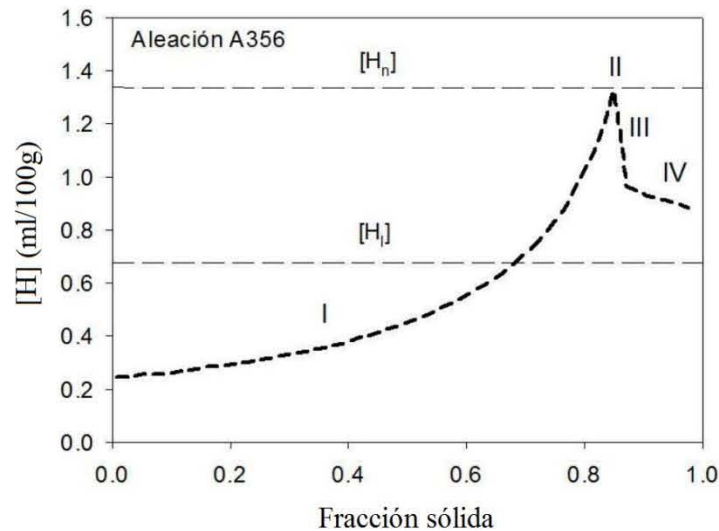


Figura 4. Etapas de la formación de las porosidades durante la solidificación de aluminio líquido [13].

Las porosidades formadas por el hidrógeno contenido en el aluminio actúan como discontinuidades que influyen negativamente en las propiedades físicas y mecánicas del material. La presencia de estas irregularidades en una determinada zona sometida a esfuerzos mecánicos puede actuar de punto de partida para la formación de otros defectos como son los agrietamientos. Respecto a las propiedades tensiles, éstas se reducen drásticamente como se puede observar en la Figura 5a, donde se muestran los resultados obtenidos en dos diferentes estudios [7, 15]. El esfuerzo de cedencia se afecta ligeramente debido a que esta propiedad está relacionada más cercanamente al estado

metalúrgico de la matriz del aluminio que a los defectos en la estructura. Los efectos nocivos sobre la elongación se observan particularmente en fundiciones solidificadas a altas velocidades de enfriamiento, con la pérdida de los beneficios que usualmente resultan en la refinación de microestructura debido a la porosidad. Respecto a la resistencia a la tensión, una variable importante en la fundición es la velocidad de enfriamiento. Frang y Gragner [16] demostraron que incrementando la velocidad de enfriamiento es posible disminuir la cantidad y tamaño de poros. En la Figura 5b se observa el efecto de la velocidad de enfriamiento sobre las propiedades de resistencia a la tensión, porcentaje de elongación y esfuerzo de fluencia de una aleación de aluminio con diferentes concentraciones de hidrógeno. Adicionalmente, los poros pueden comenzar los orígenes de grietas por fatiga, las cuales actúan como sitios para la intensificación de esfuerzos. De esta forma, la porosidad puede reducir la resistencia a la fatiga y reducir la resistencia de la aleación. La porosidad también puede degradar la rigidez de la presión en la fundición y causar defectos superficiales que deben ser maquinados, pulidos o anodizados. En aplicaciones especiales, el hidrógeno puede tener un efecto positivo sobre las aleaciones. Por ejemplo, cuando la mayor preocupación es la integridad de la superficie en bruto de la fundición, la adición de hidrógeno puede compensar los efectos de contracción y prevenir algunos defectos superficiales, aunque tales aplicaciones son raras. El contenido tolerable de hidrógeno en una fundición depende de las condiciones de solidificación tales como grosor de la fundición y el método de fundición, así como de las propiedades requeridas. Para extrusiones, un contenido final de hidrógeno en el fundido debajo de 0.15 ml/100g es usualmente suficiente. Para latas de bebida, láminas, discos de memoria y fundiciones de alta integridad para ingeniería y automotriz, un nivel de 0.10 ml/100g o menor puede ser requerido, mientras que para la industria aeroespacial los niveles recomendados para obtener piezas libres de porosidad son de 0.06 ml/100g [17].

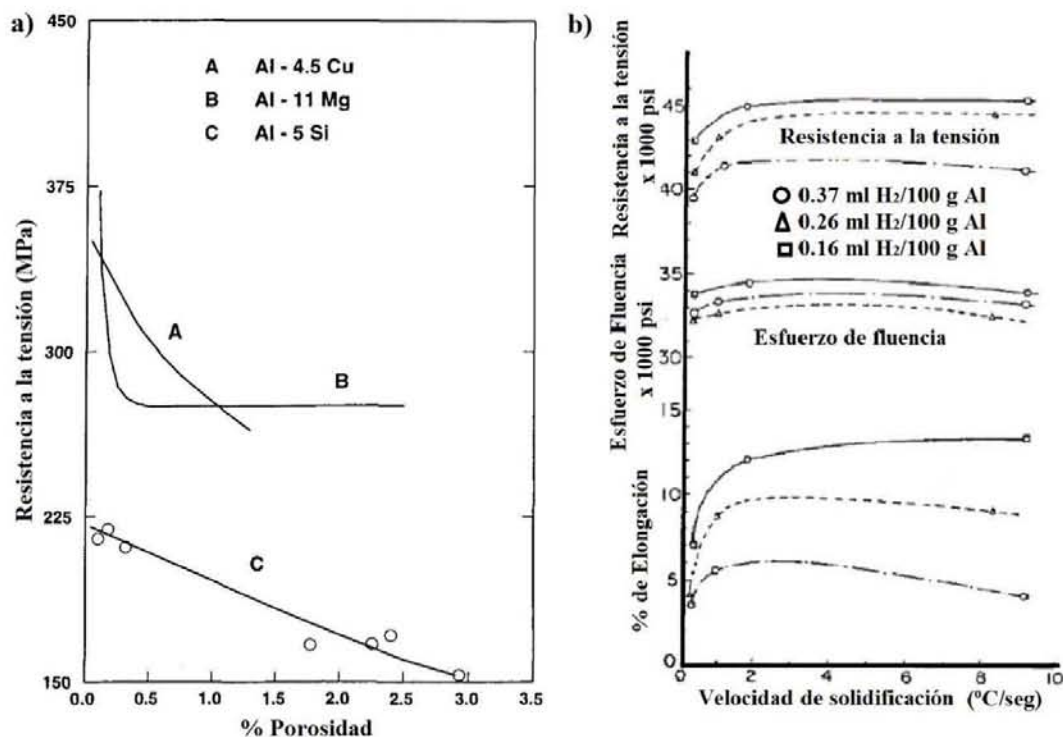


Figura 5 a) Efectos sobre la resistencia a la tensión en función del porcentaje de la porosidad para tres tipos de aleaciones [7, 15]. **b)** Propiedades mecánicas del aluminio en función de la velocidad de solidificación [16].

1.4 Métodos de desgasificación del aluminio

La primera referencia respecto a la purga con gases en fundidos metálicos se remonta hacia 1856 para el acero [18]. El purgado para fundidos de aluminio fue mencionado por primera vez por D. R. Tullis en 1928 [19], quien utilizó gas cloro puro reconociendo el potencial de dicho gas como un agente alterno de desgasificación. Como resultado, casi inmediatamente fueron desarrolladas mezclas de cloro con gases inertes, especialmente nitrógeno. A finales de 1920, se propuso el método para pasar cloro o un gas combinado con cloro a través de un metal fundido utilizando una lanza estática [20]. En 1931, Koch utilizó una mezcla de cloro y nitrógeno para la remoción de Fe y Si en aleaciones comerciales de aluminio [21] y en 1948 el convertidor cloro/nitrógeno fue desarrollado y puesto en operación, utilizando las consideraciones del trabajo de Röntgen y Hass [22]. Un par de estas unidades fueron utilizadas hasta a principios de 1960 en Europa. Posteriormente, el monóxido de carbono fue agregado a la mezcla de cloro-gas inerte para disminuir la formación de óxido de aluminio en la superficie interior de la burbuja, incrementando el transporte de hidrógeno a través de la intercara gas-fundido. En general, el uso del gas cloro para la remoción de impurezas alcalinas del aluminio tuvo un amplio uso, favoreciendo las condiciones para la remoción de inclusiones, sin embargo su toxicidad ha limitado su uso en los procesos modernos de refinación de aluminio. Otros gases halógenos como el hexafluoruro de azufre han sido investigados como una alternativa para el proceso de desgasificación [23]. En la actualidad, la inyección de polvos en el aluminio fundido para su refinación incluye sales como el fluoruro de aluminio (AlF_3), cloruro de magnesio ($MgCl_2$), mezclas de cloruro de sodio y potasio, fluoruro de calcio o fluoruro de aluminio y criolita.

El método de inyección giratoria de un flujo no gaseoso surge como una necesidad debido al incremento en las restricciones ambientales por las emisiones producto del uso del cloro como desgasificante. Éste método permitió la substitución del gas cloro con un flujo con partículas finas de sal. Con este cambio se disminuyeron las emisiones de cloro en un 95%. Un tipo de sal empleada en este proceso es el $MgCl_2$, el cual en un inicio ha sido fundido en conjunto con otros compuestos que disminuyen el punto de fusión de la sal y posteriormente se pulveriza el conjunto para su adición al fundido. La efectividad del $MgCl_2$ en la remoción de especies alcalinas fue determinada por Celik y colaboradores [24], quienes encontraron que tanto la cantidad removida como la velocidad de remoción eran proporcionales a la cantidad de magnesio en el aluminio fundido, ya que una mayor tensión superficial en el aluminio líquido disminuye el contacto sólido-líquido entre las impurezas y el metal fundido, lo que facilita la adhesión de las partículas sólidas a las burbujas y su desplazamiento con ellas hacia la superficie. El gas halógeno producido por la inyección del flujo de sales cambia la tensión superficial del metal líquido y conforme el flujo de nitrógeno mezclado alcanza la superficie, éste aglomera las impurezas del metal líquido (óxidos). Cuando partículas no metálicas se encuentran presentes como impurezas, el resultado es un incremento en la tensión superficial del metal. Este incremento da como resultado una disminución en la fluidez del metal líquido.

Después del desarrollo de los mezcladores de gas, las investigaciones se focalizaron en la tecnología de la inyección del gas de purga. En los primeros inicios del tratamiento de inyección de gas en el aluminio fundido se utilizaban lanzas simples de tubo para introducir el gas de purga en el baño líquido. Sin embargo, la inyección de gas a través de lanzas estacionarias genera burbujas de gran tamaño que tienen un corto tiempo de residencia en el baño, resultando en una limitada dispersión de las burbujas debido a la

pobre recirculación del fundido. Debido a lo anterior, se implementó la inyección a través de múltiples lanzas, sobre todo en hornos de mayor capacidad para incrementar la velocidad de flujo de gas, lo que favoreció la dispersión de las burbujas mejorando la homogeneidad del baño y con ello la calidad del metal. Algunas técnicas adicionales se utilizaron con el propósito de modificar la lanza, ya sea mediante la adición de pequeños tapones porosos al final de la lanza o mediante la modificación del orificio de inyección de la lanza para obtener altas velocidades de inyección del gas [25].

En la década de 1970 el gas se introducía a alta velocidad a través de toberas, y buscando incrementar la dispersión y distribución del gas en el reactor se desarrollaron los tapones porosos al fondo del horno, introducidos en la metalurgia del aluminio en 1973 [26]. Asimismo, se implementó el uso de múltiples tapones porosos para alcanzar mayores eficiencias de desgasificado. Debido a que los tapones porosos fueron implementados principalmente dentro de la tecnología del horno, la aplicación en la industria del aluminio es limitada.

El primer uso de un dispositivo mecánico para producir burbujas finas en aluminio fundido data de los estudios de Szekely, quien manufacturó una celda de grafito y la sumergió en el aluminio líquido [27, 28]. Esto representó un significativo avance en la refinación de aleaciones de aluminio, removiendo el hidrógeno hasta niveles aceptables. El dispositivo de Szekely también incorporó la inyección de un flujo de cloro para la remoción de elementos alcalinos. El proceso de desgasificación resultante del trabajo de Szekely tuvo una importante contribución a la industria. Sin embargo, debido al costo y complejidad que proveía dicho equipo, la tecnología era solamente factible para un limitado número de compañías y en consecuencia se empezaron a desarrollar paralelamente otras tecnologías y otros dispositivos de rotor-inyector, generando el registro de patentes desde 1972 [29].

En 1980 en Noruega se comenzó a estudiar y modelar el proceso de desgasificación por un grupo compuesto por T. Engh, T. Pedersen y G. K. Sigworth, el cual modeló con detalle el proceso de desgasificado de aluminio a la par que realizó mejoras en el diseño del rotor inyector contribuyendo significativamente a dicho proceso [30, 31].

El potencial en la industria del aluminio del sistema de inyección rotatorio con dispersantes de gas de purga con altos esfuerzos cortantes fue percibida a principios de 1990, pero no fue hasta recientemente cuando éste comenzó a ser utilizado ampliamente para aluminio fundido. Este proceso no sólo incrementa el área de la interface metal líquido-burbujas, sino que también mejora la agitación del metal fundido, acelerando los mecanismos convectivos turbulentos de masa. El efecto global es el mejoramiento de la velocidad de remoción de metales alcalinos, inclusiones e hidrógeno. Adicionalmente, reduce los tiempos de flujo mejorando la productividad y disminuyendo el consumo del gas inyectado hasta en un 60% (Figura 6).

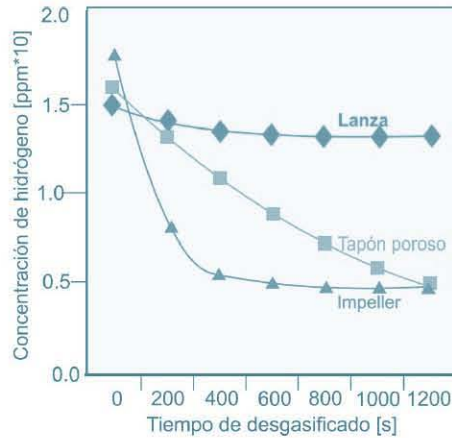


Figura 6. Eficiencias de desgasificado comparativas de tres diferentes técnicas de inyección.

En lo que se refiere a la clasificación de los métodos aplicados en la industria para la refinación del aluminio, se encuentra la clasificación de acuerdo a los cuatro tipos de inyección: la inyección de gas inerte, inyección de gas reactivo, inyección de polvos no reactivos e inyección de polvos reactivos [32]. La inyección con gas reactivo, Cl_2 , fue uno de los métodos más utilizados hace dos décadas y en la actualidad en desuso debido a las normas ambientales vigentes. Actualmente, los métodos utilizados para la refinación del aluminio son la inyección de gas inerte, solo o en combinación con pequeñas cantidades de gas reactivo y la mezcla de estos gases con polvos reactivos. En el siguiente apartado se realiza una reseña de los procesos de refinación del aluminio tipo batch y continuos.

1.5 Procesos Industriales en la refinación del aluminio

Para alcanzar la remoción completa de las impurezas e inclusiones del aluminio fundido, el proceso de refinación incluye los siguientes pasos: a) un pre-tratamiento en el crisol, b) tratamiento en el horno de fundición, c) desgasificación usando las técnicas de inyección, d) flotación y e) filtración. Después de que el aluminio fundido primario es obtenido de la celda primaria de electrólisis es pre-tratado en una cuchara. Esto se denomina tratamiento del aluminio en el crisol (Proceso TAC, por sus siglas en inglés), y en él los metales alcalinos y alcalinotérreos son removidos a través de la inyección de polvos de AlF_3 . Después el aluminio es refinado mediante la inyección de una mezcla de gas nitrógeno o argón con gas cloro para remover las inclusiones, impurezas y elementos contaminantes. Estos procesos se llevan a cabo en reactores tipo batch. Después de estos pasos de refinación, la purificación del aluminio fundido continúa en reactores en línea, con procesos como la desgasificación para la remoción del hidrógeno y la filtración. Posteriormente, el aluminio limpio es vaciado y solidificado en lingotes de forma controlada y llevado a algún proceso de maquinado y acabado superficial. Estas etapas son determinantes en la calidad del producto, ya que mientras en la etapa de refinación son eliminadas las impurezas y gases, en la etapa de colada se pueden optimizar la velocidad y dirección de la solidificación para controlar porosidad y operar las velocidades de enfriamiento para así poder conseguir la calidad metalúrgica deseada.

Entre los procesos de refinación del aluminio tipo batch se encuentran el proceso tradicional de inyección de gas cloro o mezclas de gas cloro con gas argón o nitrógeno utilizado con el principal objetivo de remoción de impurezas y elementos alcalinos [24],

y es uno de los primeros pasos en el proceso de refinación del aluminio. Otros procesos como el proceso TAC (Treatment Aluminum Crucible), desarrollado por Alcan en 1983 para la remoción de elementos alcalino y alcalinotérreos [33], utilizan polvos de AlF_3 que promueven una efectiva reacción sólido-líquido con el aluminio fundido como clave del proceso. Para optimizar este proceso se busca que el vórtice formado alcance la máxima penetración combinándolo con una recirculación rápida de las partículas a través del fundido. El continuo flujo de fluoruros en la superficie del fundido causa aglomeración y lleva a la formación de pellets, los cuales son agentes activos para la remoción de elementos alcalinos y previenen la formación de escoria durante el mezclado. En el proceso IMN inventado en 1977 por el Institute of Non-ferrous Metals en Polonia, el gas es inyectado a través de un tapón poroso colocado en el fondo del reactor y la remoción de hidrógeno se lleva a cabo en un flujo contracorriente, obteniendo eficiencias de remoción de hidrógeno del fundido de hasta un 75% [34, 35]. A diferencia de los procesos anteriores, donde el rotor solamente sirve para agitar el fundido mientras que los polvos son agregados por la parte superior del reactor, en los procesos RFI (Rotary Fluxing injection) y RGI (Rotary Gas Injection), [36] se utiliza el rotor como inyector del reactivo de purga. En dichos procesos se utiliza el cloruro de magnesio o potasio con gas nitrógeno y la mezcla de gas de cloro y nitrógeno como gas de arrastre, alcanzando en ambos procesos remoción de inclusiones de hasta el 95%. Mientras el proceso TAC toma lugar en la olla de pre tratamiento, los procesos RGI y RFI se realizan en el horno de fundición. El crisol de pre-tratamiento tiene una relación superficie-volumen relativamente mayor y es agitado a una velocidad que promueve la cinética del proceso de tal forma que el tratamiento comienza rápidamente. El propósito de este proceso es preparar al aluminio para que en el horno de fundición se lleve a cabo la remoción de impurezas en un tiempo menor. En el proceso RDU (Rapid Degassing Unit) desarrollado por FOSECO en 1986 [37], se utiliza un rotor con doble propósito: a) bombear al aluminio líquido del fondo del reactor para obtener un baño heterogéneo, y b) cortar el gas inyectado para proveer de pequeñas burbujas, creando una mayor área de contacto entre las burbujas y el aluminio líquido. Sin embargo, la vida del rotor sólo es de seis semanas alcanzando eficiencias de hasta el 70% de hidrógeno removido. El proceso GBF (Gas Bubbling Filtration), también utilizado como proceso continuo, fue inventado por la compañía Showa Aluminium en 1977 [38] y es uno de los primeros procesos en no utilizar cloro como gas de purga, utilizando sólo gas argón. En este proceso se crea una gran turbulencia en la parte media del reactor debido a la colisión de los flujos provenientes de la superficie y del fondo del reactor, como resultado del diseño geométrico del rotor utilizado, lo cual rompe las burbujas en tamaños menores y las dispersa homogéneamente en el baño. Los experimentos en modelación física han mostrado tamaños de burbuja menores a 5 mm [39] (Figura 7). Este proceso alcanza eficiencias en la remoción de hidrógeno de hasta el 60-80%. El proceso RAM (Removal of Alkaline Metals) fue desarrollado por la compañía noruega Hydro en 1995 para la remoción de metales alcalinos [40]. En este proceso la remoción de metales alcalinos está determinada principalmente por la velocidad de alimentación de AlF_3 y la velocidad de rotación, influyendo sólo ligeramente la temperatura y el flujo de gas inyectado. Se han reportado eficiencias en la remoción de sodio y calcio donde se observa que la remoción de calcio es mayor que la de sodio y también que ésta ocurre más rápidamente en reactores de mayor tamaño debido al incremento en el tiempo de residencia de las burbujas del gas de purga [41].

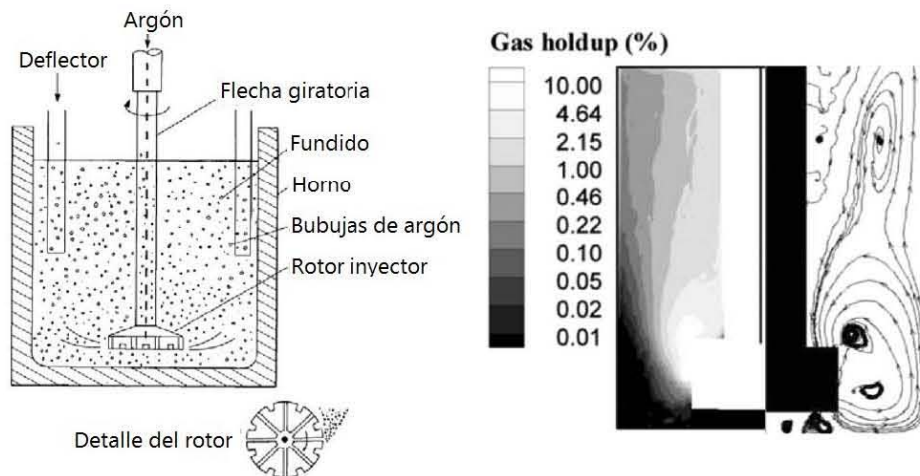


Figura 7. Esquema del proceso GBF [38] y resultados de la simulación numérica del porcentaje de gas presente [39].

Entre los primeros procesos de refinación continuos se encuentran los procesos 503 [42] y 622 [43] desarrollados por ALCOA, en donde un dispensador de gas rotatorio es la clave del proceso. En la experimentación realizada en un modelo de agua-aire a escala completa simulando al proceso 503 se encontraron tamaños de burbuja menores a 2 mm de diámetro en la zona de reacción y en el resto del reactor el 90% de las burbujas menores a 4 mm. El proceso 622 se desarrolló posteriormente como una mejora del proceso 503, utilizando menos gas cloro (>2%) y más gas inerte en la mezcla de gases de inyección. El proceso SNIF (Spinning Nozzle Inert Flotation Process) desarrollado en 1974 por Union Carbide Corporation [44] mostró un avance al variar el diseño geométrico del rotor utilizado (Figura 8), el cual consta de dos componentes, un estator y un rotor giratorio, lo que resulta en la formación de burbujas de gas más finas y en el incremento en la distribución de las mismas en todo el baño, lo que finalmente aumenta la intensidad de agitación. El diámetro de burbuja reportado es de 5 mm. El proceso ALPUR [45] desarrollado por Pechiney Aluminium Engineering en 1975 utiliza un diseño de rotor con perforaciones oblicuas que impulsa el metal líquido hacia las paredes del reactor maximizando la interacción del flujo del metal con el gas inyectado. En este proceso se inyecta mezclas de gas argón con bajo contenidos de gas cloro (0-5%). Existen otro tipo de procesos donde no se utilizan partes rotatorias, como el proceso MINT [46] implementado por Clumpner en 1979 en la Swiss Aluminium Ltd., en el cual se inyecta el gas de purga a través de un jet de alta velocidad, con lo se aseguran tamaños de burbujas cercanos a los 5mm, aunque dicho tamaño depende del número de Reynolds del orificio de inyección. En el desarrollo de los procesos subsecuentes se observa la tendencia de disminuir la cantidad de Cl_2 utilizada en la mezcla de gas de purga inyectado. En Polonia se desarrolló un proceso similar al proceso MINT denominado URC-7000 [47]. En el proceso DMC [48] (Degassing MultiCast) desarrollado por Metallics Systems en 1986 se hace uso de tapones porosos en lugares estratégicos del reactor, el cual tiene un diseño especial para adecuar que el flujo de metal entre en contacto con el gas inyectado. El proceso GIFS (Gas Injection Fluxing System) creado por Noranda Aluminum en 1992 [49] utiliza dos rotores de grafito y el reactor está dividido en cuatro secciones para facilitar la remoción de la escoria y realizar la desgasificación y limpieza del metal en las dos secciones intermedias, para asegurar la salida del metal limpio en la última sección. Los procesos ADF (Alcan Filter Degasser) [50] y ACD (Alcab Compact Degasser) [51] fueron desarrollados por Alcan International Ltd. en 1989 y 1995, respectivamente. El proceso

ADF utiliza un reactor dividido por una placa cerámica orientada horizontalmente, mientras que en la parte baja del reactor el gas de refinación se inyecta a través de un rotor, en consecuencia el gas inyectado pasa por las perforaciones de la placa del cerámico y asciende en sentido contrario con respecto al flujo del metal. El proceso ACD consiste de una serie de rotores inyectores separados por deflectores verticales que dividen el reactor en diferentes secciones por donde el metal circula. El gas argón inyectado se distribuye homogéneamente en el metal líquido alcanzando fracciones de gas de 10-15%. Air Product and Chemical Incorporation en la década de los 80's implementaron el proceso SIGMA [52], el cual burbujea gas a través de una base porosa en el fondo del reactor con una atmósfera controlada sobre el fundido. El uso del gas no tóxico SF₆, incrementa la remoción de hidrógeno y proporciona una capa protectora sobre la superficie del metal fundido que evita la reabsorción del hidrógeno. El tamaño de burbuja calculado es de 0.15 mm. Por último, los procesos en línea HI (HI10, HI422, HI43X) [53] fueron diseñados por la compañía noruega Hydro Hycast y tienen características similares al proceso RAM. En la Tabla 1 se muestran los procesos tipo batch y continuos, así como las condiciones de operación y la cantidad de hidrógeno obtenida al final del proceso.

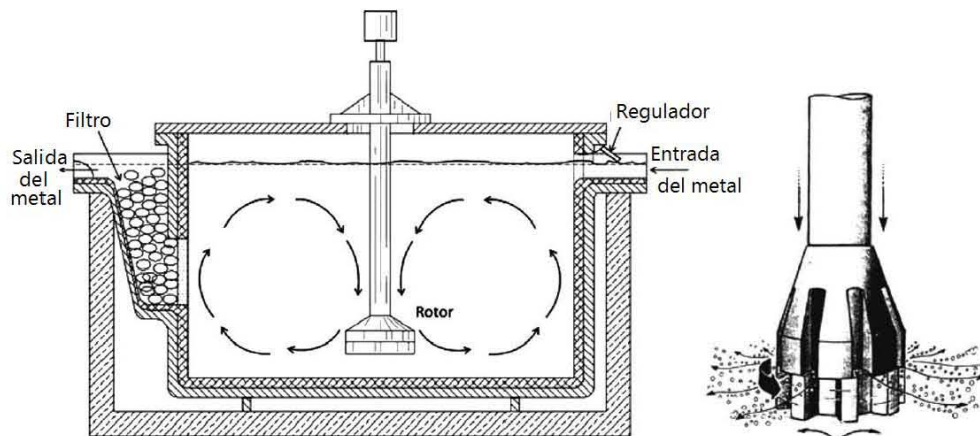


Figura 8. Esquema del proceso SNIF e imagen del diseño geométrico del rotor estator utilizado [44].

Tabla 1. Procesos comerciales de refinación de aluminio y condiciones de operación de los mismos.

Proceso (compañía y año)	Tipo	Hidrógeno eliminado (cm ³ /100g Al)	Gas de inyección	Flujo de gas (L/min)	Velocidad de agitación (rpm)
TAC (Alcan, 1983)	Batch/ continuo		Ar-Cl ₂ , polvos AlF ₃	NA	100-300
IMN (IMN, Poland 1977)	Batch	0.09-0.25	Ar-Cl ₂ ; N ₂ - Cl ₂		NA
RDU (FOSECO, 1986)	Batch	0.07-0.35	Ar-Cl ₂ ; N ₂ - Cl ₂	45-60	225-400
GBF (Showa Aluminum, 1977)	Batch	0.05-0.12	Ar	40-200	600-950
RAM (Hydro, 1995)	Batch				500-900
ALCOA 622 (ALCOA, 1978)	Continuo	0.13-0.23	Ar- 2%Cl ₂	90-140	200
SNIF (Union Carbide Corporation, 1974)	Continuo	0.07-0.08	Ar-5%Cl ₂ , sales	<140	400-500
ALPUR (Pechiney Aluminium Engineering, 1975)	Continuo	0.1	Ar- 0-5%Cl ₂	50-250	200
MINT (Swiss Aluminum Ltd., 1979)	Continuo	0.06	Ar- 0.5-3%Cl ₂	550-750	NA
GIFS (Noranda Aluminum, 1992)	Continuo	0.1	Ar- 0.5-2%Cl ₂	100-250	200-350
AFD (Alcan, 1989)	Continuo	<0.1	Ar-0-5%Cl ₂	60-120	NA
SIGMA (Air Product and Chemical Incorporation, 1989)	Continuo	<0.1	Ar, SF ₆	180	NA
HycastRAM (Hydro Hycast, 1989)	Batch/ Continuo	0.1	AlF ₃	30-60	500-900
DMC (Metaullics System, 1986)	Continuo	<0.1	Ar/N ₂ - 10%Cl ₂	30-50	NA

1.6 Mecanismo de desgasificación del aluminio

Se considera que la remoción de hidrógeno disuelto en aluminio líquido consta de las siguientes etapas:

1. Transporte de hidrógeno disuelto en el aluminio hacia la superficie de la burbuja del gas de purga por la combinación de mecanismos de transporte convectivos y difusivos.
2. Transporte difusivo de átomos de hidrógeno a través de la capa límite de la burbuja.
3. Adsorción química de átomos de hidrógeno sobre la superficie de la burbuja.
4. Reacción de átomos de hidrógeno para formar moléculas de hidrógeno y su posterior desorción de la superficie de la burbuja.
5. Difusión del hidrógeno molecular gaseoso dentro de la burbuja de gas inerte.
6. Remoción del hidrógeno contenido en la burbuja al ser ésta liberada en la superficie libre del fundido.

De acuerdo a la evidencia experimental, el transporte difusivo a través de la capa límite es el mecanismo controlante del proceso, donde la fuerza motriz de desgasificado es la diferencia de concentración de hidrógeno dentro de la capa límite [31]. En tiempos largos de desgasificado donde la concentración de hidrógeno en el fundido es muy baja, la fuerza motriz de desgasificado disminuye significativamente y la eliminación de

hidrógeno, la cual en un principio dependía de la transferencia de masa, cambia a depender del equilibrio termodinámico, por lo que se requiere una gran cantidad de gas de purga para remover el hidrógeno disuelto.

1.7 Modelos matemáticos

En relación con los modelos matemáticos, la revisión realizada por Zhang [32, 54] muestra cuatro tipos de modelos, los cuales predicen la evolución en el tiempo de la remoción de hidrógeno para reactores tipo batch y continuos. Todos estos modelos suponen que la desgasificación está controlada por la transferencia de masa del hidrógeno en la interface líquido-burbuja del lado de la fase líquida, donde los parámetros claves son el área interfacial y el coeficiente global de transporte de masa, el cual depende de las condiciones de agitación del baño metálico (fuerza de agitación, patrones de flujo y turbulencia). De estos cuatro tipos de modelos, el modelo más frecuentemente encontrado en la literatura es el llamado “*modelo de regresión experimental*” donde el área total interfacial y el coeficiente de transporte de masa son obtenidos mediante el ajuste de la ecuación que describe la cinética de desgasificado obtenida a través del balance de masa global, suponiendo una cinética de primer orden. Este tipo de modelo fue aplicado a la remoción de Mg del aluminio mediante la inyección de Cl_2 con una lanza por Fu y Evans [55]. Dichos autores estudiaron en un reactor a escala los tamaños y tiempos de residencia de las burbujas en el fundido mediante técnicas acústicas para el desarrollo de un modelo matemático que calcula el cambio en el contenido de AlCl_3 en una burbuja que asciende a través del metal fundido. Dicho modelo, al introducir un factor de corrección obtiene buenos resultados al aplicarlo a nivel industrial. También este tipo de modelo se ha aplicado a la remoción de oxígeno del agua [56-59]. Han y colaboradores [60] utilizaron un modelo de $\text{H}_2\text{O}-\text{O}_2$ agitado por un rotor para simular la cinética de desgasificación del hidrógeno en aleaciones base magnesio, donde se determinó que la remoción de oxígeno es determinada por la rapidez de transporte de masa del oxígeno disuelto en el agua hacia la interface líquido-burbuja. El área superficial de las burbujas de aire y los coeficientes de transferencia de masa del oxígeno en agua fueron calculados teóricamente y comparados con los experimentos llevados a cabo en el modelo de agua mostrando una buena concordancia. El modelo desarrollado por Hu y Zhang [57] simula la desgasificación en aleaciones base magnesio y haciendo uso de un modelo físico de agua-oxígeno equipado con la técnica de rotor inyector obtuvieron el área superficial de las burbujas de gas inyectado y el coeficiente de transporte de masa. Finalmente, utilizando el modelo propuesto por Warke y colaboradores [61], el cual está basado en un balance general de masa, determinaron la concentración de hidrógeno en el metal fundido para validar los resultados de eficiencia de desgasificado obtenidos mediante el modelo desarrollado, encontrando resultados aceptables entre ambos. Sano y Mori [62] determinaron la etapa controlante en el proceso de desgasificado a través de la inyección de un gas inerte en el seno de un metal líquido utilizando el método de la lanza en un sistema de plata líquida con oxígeno disuelto y gas argón como gas de purga, estableciendo que la difusión en la interface líquido-burbuja de lado del líquido controla la cinética. Wang y colaboradores [63] desarrollaron un experimento ortogonal para evaluar el efecto de cuatro parámetros de operación en equipos de desgasificación, como son la velocidad de flujo de gas, la velocidad de rotación del rotor, el tiempo de desgasificado y el tiempo del proceso, concluyendo que la velocidad de rotación es el parámetro de mayor importancia en la refinación del aluminio. La experimentación se realizó en un reactor industrial, utilizando gas argón como gas de purga y aleación

Al7075. Warke y Makhlof [61] desarrollaron un modelo matemático para la remoción tanto de hidrógeno como de partículas sólidas en aleaciones de aluminio, mediante el uso de la técnica de rotor inyector. Aplicando un balance de masa total en el reactor y suponiendo que el metal líquido se encuentra homogéneamente mezclado y en consecuencia, el hidrógeno disuelto no presenta variaciones respecto a la posición, obtuvieron la ecuación (1.3):

$$\left[k_{aire-Al} \cdot A_s (C_H^s - C_H) \right] - \left[k_{H-Al} \cdot A_b (C_H - C_H^{eq}) \right] = V_{Al} \cdot \frac{d}{dt} C_H \quad (1.3)$$

La ecuación anterior representa la rapidez de cambio de la concentración de hidrógeno en el baño metálico, es decir, la diferencia entre el flujo de hidrógeno que entra desde la atmósfera hacia el metal líquido (primer término del lado izquierdo) menos el flujo de hidrógeno que sale del metal a través de las burbujas del gas de purga, y en donde las constantes de transferencia de masa para el hidrógeno y aire en aluminio líquido están representadas por $k_{aire-Al}$ y k_{H-Al} , respectivamente. Asimismo, el área de la superficie del baño y el área superficial de las burbujas de gas están representadas por A_s y A_b , respectivamente y la concentración de hidrógeno en la superficie, y al equilibrio por C_H^s y C_H^{eq} , mientras que V_{Al} representa el volumen del baño metálico. La ecuación de balance poblacional de partículas se utilizó para modelar las partículas sólidas y obtener la rapidez de cambio de partículas dentro del metal líquido. La validación se realizó con datos experimentales y simulación numérica obteniendo buenos resultados. Asimismo, Rasch y Myrbostad [64] utilizaron este tipo de modelación matemática para predecir la remoción de impurezas en diferentes condiciones industriales. Como se puede observar, estos modelos carecen de la generación de un conocimiento fundamental del proceso y no son modelos universales, ya que los parámetros cinéticos son válidos únicamente bajo las condiciones específicas del proceso mediante el cual fueron obtenidos y no pueden ser trasladados a otros sistemas.

El segundo tipo de modelo es el *modelo de Dantzig* [65], el cual supone que existe una columna de burbujas de forma cilíndrica de radio b , dentro de un cilindro concéntrico de radio mayor, R , donde no hay burbujas de gas y que la transferencia de masa en la columna donde se lleva a cabo el burbujeo es más rápida que en la región externa debido a la turbulencia generada por las burbujas. La desgasificación está controlada por la difusión de hidrógeno desde el cilindro exterior hacia la columna de la pluma. Por supuesto, este modelo no puede ser aplicado a los sistemas agitados por rotores. La ecuación de difusión desarrollada por Dantzig es la ecuación (1.4):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) \quad b \leq r \leq R \quad (1.4)$$

En este modelo, la concentración, C , no es función solamente del tiempo t , como en los modelos presentados en esta sección, sino también de la posición radial local, r , en el reactor. En este modelo, D es el coeficiente de difusión, el cual es afectado por las condiciones de flujo como la velocidad de flujo de gas, la presión, el área interfacial, entre otros, por lo tanto, D es la clave para obtener la concentración de las impurezas. Este modelo se validó con diferentes flujos de gas y tamaños de reactor, obteniendo resultados aceptables.

Finalmente, dos modelos más complejos fueron desarrollados por Botor [66-68] y por Engh y Sighworth [69-72]. De estos modelos, los cuales se desarrollaron sobre un balance de masa inicial en un elemento de volumen, *el modelo de Engh* es por mucho el más complejo y detallado de todos. La remoción de impurezas del aluminio, según el

modelo desarrollado por Engh, se describe a continuación con las ecuaciones (1.5), (1.6) y (1.7):

$$\ln \frac{C_H}{C_H^{ini}} = \frac{100 \cdot f_H \cdot K_{H-Al} \cdot Z \cdot MW_H \cdot \dot{G}_{Ar}}{M_{Al} \cdot P_{total}} \cdot t \quad (1.5)$$

Donde

$$Z = 1 - \exp(-\psi) \quad (1.6)$$

y:

$$\psi = \frac{k_{H-Al} \cdot \rho_{Al} \cdot A_b \cdot P_{total}}{100 MW_H \cdot \dot{G}_{Ar} \cdot f_H \cdot K_{H-Al}} \quad (1.7)$$

Donde la variable adimensional Z representa la capacidad de remoción de impurezas por las burbujas de gas de purga cuando salen por la superficie del baño líquido. En la ecuación (1.5) C_H y C_H^{ini} representan la concentración de hidrógeno al tiempo t e inicial, respectivamente, el coeficiente de transferencia de masa para el hidrógeno en aluminio es k_{H-Al} , el área superficial de las burbujas es A_b , la densidad del aluminio líquido es ρ_{Al} , P_{total} es la presión total en la burbuja, MW_H es la masa molecular del hidrógeno, \dot{G}_{Ar} es el flujo de gas de purga inyectado, M_{Al} es la masa total del baño de aluminio líquido, f_H el coeficiente de actividad henriano de hidrógeno en aluminio líquido y t es el tiempo. El parámetro adimensional, ψ , es una combinación de la cinética, las condiciones termodinámicas y las características de la fase gaseosa como son la velocidad del flujo de gas, \dot{G}_{Ar} , y el área interfacial entre el fundido y las burbujas de gas inyectado, A_b . En la ecuación que define dicho parámetro, K_{H-Al} define a la constante de equilibrio para la reacción de la ecuación (1.1). Este modelo puede ser utilizado para la remoción de hidrógeno, así como para las impurezas de metales alcalinos y alcalinotérreos. Este modelo también propone un parámetro denominado concentración adimensional, $\psi / [\%H]$, el cual representa la relación de la habilidad del hidrógeno de difundir hacia la burbuja del gas de purga durante su ascenso y la capacidad de purga del gas para remover el hidrógeno disuelto. Al inicio de la desgasificación ($\psi / [\%H] < 0.3$), la difusión del hidrógeno en la fase líquida de la interface burbuja-fundido controla la cinética de remoción, pero a tiempos mayores ($\psi / [\%H] > 2.0$) el proceso está controlado por el equilibrio termodinámico. Por lo tanto, son necesarias grandes cantidades del gas de purga para remover el hidrógeno disuelto en el aluminio debido a los bajos valores de la presión parcial en equilibrio en un fundido con baja concentración de hidrógeno o debido a la baja fuerza motriz de la desgasificación. No obstante, el modelo aún requiere del área superficial total de las burbujas y del coeficiente del transporte de masa como parámetros cinéticos claves. Es importante determinar el coeficiente de transferencia de masa adecuado antes de utilizar este modelo, ya que factores como el tamaño de burbuja, la velocidad de flujo de gas y la tensión superficial afectan a dicho coeficiente.

El modelo de Botor [66-68] para la remoción de hidrógeno del aluminio fundido, el cual está basado en la ecuación de difusión de Maxwell-Stefan, se muestra a continuación en la ecuación (1.8):

$$\dot{G}_{Ar} \cdot \Delta P_{H_2} = 1000 \frac{M}{M_{Al}} \frac{dC_H}{dt} = k_{H-Al} \cdot A_b \cdot \Delta \pi \quad (1.8)$$

Donde ΔP_{H_2} es el cambio de la concentración molar de hidrógeno en la fase gaseosa, C_H es la fracción molar de hidrógeno en el aluminio fundido, k_{H-Al} tiene unidades de mol/m²s y $\Delta\pi$ es la fuerza motriz (gradiente de fuerzas). Este modelo toma en cuenta las siguientes consideraciones para su desarrollo: la concentración es uniforme en todo el baño metálico; la concentración es uniforme dentro de las burbujas de gas y éstas tienen forma esférica, son del mismo tamaño en todo el baño y su presión interna es constante; la cinética de reacción en la interface gas-fundido no es el paso controlante; la reacción en la superficie del metal es despreciable, y la transferencia de masa de la fase gaseosa en la interface metal-gas no es el paso controlante.

Los parámetros determinantes en el paso controlante del proceso de desgasificación, es decir, *el área total interfacial y el coeficiente de transferencia de masa* han sido objeto de muchos estudios, ya que la cinética de remoción depende de los valores de estas dos cantidades. En lo que respecta al tamaño de burbuja, en la mayoría de los estudios sobre la refinación del aluminio se ha supuesto un valor constante de la misma. Simensen y Nilmani [73] desarrollaron un modelo sobre la remoción de elementos alcalinos del aluminio líquido utilizando un gas reactivo de purga, en el cual incluyeron el efecto de la distribución del tamaño y expansión de las burbujas de gas conformen ascienden a través del baño metálico. En la industria de la producción del acero también se ha realizado una gran cantidad de trabajo en este tópico como lo muestra la extensa revisión realizada por Mazumdar [74, 75] y el trabajo de Iguchi y colaboradores [76], el cual calcula la velocidad de ascenso de las burbujas en acero líquido. Johansen y Grådahl [58] llevaron a cabo observaciones visuales con una probeta óptica en un modelo de agua-oxígeno del reactor Hycast, determinando que el tamaño de burbuja es fuertemente dependiente de la velocidad de agitación únicamente en el área circundante del rotor, dejando esta dependencia en la parte cercana a la superficie del reactor. También encontraron que la turbulencia generada no tiene un efecto significativo en la transferencia de masa de las burbujas. Asimismo, mediciones de conductividad y ultrasonido [74, 75, 77] se han llevado a cabo en modelos físicos para determinar el tamaño de las burbujas. Las mediciones acústicas reportadas por Fu para medir los tiempos de residencia de las burbujas reportaron un área interfacial mayor a la calculada debido a la forma no esférica de las burbujas [78]. En lo que respecta a la dificultad de estudiar el tamaño y el tiempo de residencia de las burbujas en el aluminio líquido en el proceso de desgasificación del aluminio, hasta la fecha los modelos físicos de agua han sido utilizados para medir el tamaño de las burbujas y su tiempo de residencia, aunque es bien sabido que el aluminio líquido tiene mayor tensión superficial que el agua y por lo tanto el tamaño de burbuja presente en el aluminio es mayor, afectando directamente al tiempo de residencia de las mismas.

Se han reportado pocas correlaciones para estimar el tamaño de burbuja en sistemas agitados con impulsores basados en la fuerza de agitación [72, 79], aunque algunos autores sugieren tamaños de burbujas en aluminio líquido por debajo de 5 mm [72] y otros reportan un amplio rango de tamaño de burbuja, incluyendo pequeñas burbujas justo debajo del rotor y de cuádruple tamaño cerca de la superficie libre debido a la coalescencia de las mismas [58]. También se ha determinado que el tamaño de la burbuja depende del instrumento de inyección (lanza, rotor, difusor o tapón poroso), pero es independiente del tipo de gas inyectado, como lo demostró Tovia y colaboradores en su trabajo [80]. En dicho estudio se varió la identidad de gases inyectados, incluyendo gases inertes y reactivos y mezclas de ambos, demostrando que el tamaño de burbuja es independiente del gas de purga utilizado. Asimismo, se ha expresado el grado de dispersión de las burbujas determinado en la relación entre la

energía de agitación debido al rotor y la energía de agitación debido a las burbujas. Chen y Zhao [81] analizaron los patrones de flujo en un modelo de agua del proceso de refinación de aluminio utilizando rotor inyector considerando la relación entre la fuerza radial y la fuerza boyante que prevalece en el área cercana al rotor. Oldshue [82] presentó cuatro grados de dispersión de las burbujas en el reactor, Figura 9: el desbordamiento, en donde se forman pequeños géiseres en la superficie del metal líquido y no existe dispersión de las burbujas de gas, presentando éstas tamaños relativamente grandes; dispersión mínima, donde las burbujas sólo pueden observarse en el área de la generación y existe una falta de dispersión en todo el volumen del reactor; íntima dispersión, donde las burbujas de gas están bien mezcladas con el líquido y existe una falta de burbujas solamente cerca de las paredes y en el fondo del reactor; y dispersión uniforme, donde las burbujas crean cadenas hasta la superficie del reactor y todo en reactor se encuentra mezclado uniformemente, siendo este tipo de dispersión la más deseada en el proceso. Saturnus [83] estudió el grado de dispersión de las burbujas de gas inyectado variando el tipo de rotor utilizado, usando tres diferentes tipos de geometrías, (Figura 9), mostrando mejor grado de dispersión el rotor de la Figura 9a. Otros parámetros relacionados a las burbujas, tales como la cantidad de gas remanente, el tiempo de residencia y la velocidad terminal de ascenso de las burbujas han sido descritos con ecuaciones algebraicas simples [32, 56, 84].

En lo que se refiere a los coeficientes de transferencia de masa, la mayoría de los valores son obtenidos mediante teorías estándar (la teoría de capa límite o la teoría de la penetración) o mediante el ajuste de la curva de la ecuación cinética obtenida del balance de masa y solamente algunas pocas correlaciones han sido reportadas por unidades de desgasificación con rotor (Engh). El trabajo realizado por Lemoine [85] es importante en el sentido que ha reportado correlaciones para el área total interfacial y los coeficientes de transporte de masa obtenidos de una gran cantidad de datos experimentales en reactores de diferentes tamaños, usando diferentes fluidos con propiedades físicas diferentes y empleando distintos diseños de rotores para la inyección del gas a través de estos (gas-induced o GIR) así como también inyección debajo del rotor (gas-sparging, GSR).

Entre los estudios relativos al coeficiente de transferencia de masa del hidrógeno en el aluminio fundido destacan el estudio de Pehlke y Bement [86], así como los estudios de Botor [66-68], en donde ambas investigaciones indicaron que el coeficiente de transferencia de masa incrementa conforme el tamaño de burbuja disminuye.

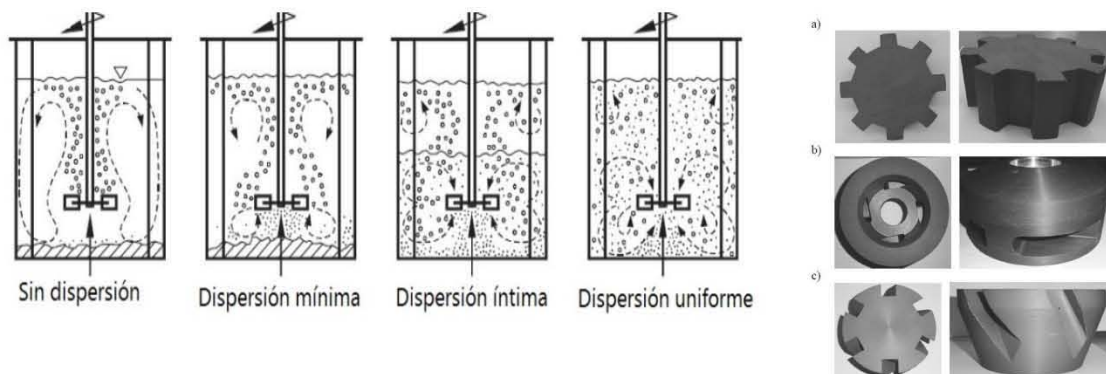


Figura 9. Grados de dispersión de las burbujas propuestos por Oldshue [82] y diseño geométrico de rotores utilizados por Saturnus [83].

1.8 Modelación física

La modelación física ha sido aplicada ampliamente en los procesos de ingeniería metalúrgica para optimizar las operaciones existentes y el diseño de nuevos procesos, pero aún más importante ha sido ésta en la ayuda para la comprensión de fenómenos complejos en los procesos que son difíciles de medir o visualizar en reactores metalúrgicos. Se han construido modelos transparentes para observar y medir los patrones de flujo [87, 88], la cinética de desoxidación [3, 56, 89, 90], el desarrollo de diferentes diseños geométricos de impulsores [3, 88, 90-92], el estudio de los tamaños de burbujas, así como la distribución del gas dentro del reactor [56, 59, 80, 81], y la medición de los efectos de algunos parámetros operacionales tales como la velocidad del flujo de gas y la velocidad del rotor [3, 89, 92]. Grandfiel y colaboradores [3] utilizaron un modelo de agua a escala completa para medir la velocidad de desoxidación del agua utilizando varios diseños geométricos de rotores inyectoros con diferentes parámetros de operación, concluyendo que la velocidad de rotación es un factor determinante en la distribución y tamaño de burbujas, y que los resultados obtenidos en el modelo de agua deben ser utilizados con cautela de forma industrial en el aluminio líquido. Chen y Zhao [39] utilizaron un modelo de agua a escala completa de la unidad de tratamiento ALPUR para caracterizar los patrones de flujo del reactor a través de un parámetro que engloba la fuerza de agitación del gas de purga y del rotor. Saternus y Botor [89] también construyeron modelos de agua para dos tipos de reactores industriales tipo batch y continuo, donde el rotor sólo agita el baño, ya que el gas es inyectado a través de tapones porosos. Con los resultados obtenidos determinaron cuatro tipos diferentes de patrones de flujo y obtuvieron la dispersión de burbujas en estos reactores. Camacho y colaboradores [88] utilizaron un modelo físico de H_2O-O_2 para estudiar la fluido dinámica de la desgasificación del aluminio utilizando la técnica de rotor inyector y variando la geometría del rotor utilizado. Entre los resultados que reportaron se incluyen mapas vectoriales de velocidad, así como perfiles radiales en diferentes planos para cada diseño geométrico de rotor. Algunos autores afirman que los resultados de los modelos físicos pueden ser trasladados fácilmente a las fundiciones industriales [93], mientras que otros previenen al lector de no escalar directamente los resultados de los modelos físicos a los reactores industriales [56], por lo que en este tema hay cierta controversia. Johansen y colaboradores [56] determinaron que entre los parámetros utilizados en el modelo físico de agua que no se deben escalar directamente a planta se encuentra la velocidad de rotación, más aún cuando se trata de bajas velocidades de rotación. Lo anterior se debe a que existe una velocidad de rotación crítica donde el tamaño de las burbujas es mayor y la dispersión de las burbujas es problemática. En el aluminio líquido la velocidad de rotación debe ser mayor a la utilizada en los modelos físicos de agua, ya que las burbujas de gas inyectado tienen mayor tamaño en el aluminio líquido y por lo tanto necesitan una mayor fuerza radial para romperse y dispersarse. Boeuf y colaboradores [93] utilizaron diferentes parámetros experimentales incluyendo diferentes diseños geométricos de rotor y determinaron que los resultados encontrados en el modelo de agua pueden ser transpuestos al aluminio líquido con un número reducido de pruebas confirmativas en aluminio fundido. Bujalski y colaboradores [94] utilizaron un modelo de agua y aire para comparar dos métodos de refinación de aluminio, el método de inyección de cloro y la agitación mecánica con inyección de flujos sólidos, con el objetivo de comparar el mezclado en un horno de fundición de aluminio. Utilizando las técnicas de PIV, mezclado por decoloración y mediciones de potencia para los diferentes diseños geométricos de rotores utilizados, demostraron que el uso del modelo físico de agua es

extenso y actualmente es la mejor forma de simular la refinación de aluminio con la versatilidad de poder utilizar diversos métodos de refinación y variar diseños de reactores y rotores inyectoros, así como la relación de altura y diámetro de los mismos.

1.9 Simulación numérica

La simulación numérica basada en cálculos computacionales ha ganado importancia desde la década pasada, donde los patrones de flujo, la estructura turbulenta y el gas retenido o “gas holdup” son parámetros estimados mediante la resolución de las ecuaciones de conservación de masa, de cantidad de movimiento y los modelos de turbulencia aplicados a modelos bifásicos ya sea bajo el marco de referencia Euleriano-Euleriano o Euleriano-Lagrangiano. Los resultados que ha arrojado la resolución de ecuaciones en medios discretizados han sido satisfactorios al momento de compararlos con resultados experimentales. Las simulaciones se realizan usualmente en 3D utilizando diferentes softwares comerciales, como FIDAP [38], Fluent [95, 87], Phoenix [96] y otros [97]. A pesar de que estos modelos son complejos y ayudan a entender el fenómeno de agitación dentro de los reactores, no proporcionan una conexión entre los fenómenos de flujo de fluidos y fenómenos de transporte de masa para predecir apropiadamente la remoción de inclusiones sólidas o hidrógeno. Warke [61] proporciona una relación importante al integrar la remoción de inclusiones y de hidrógeno en un modelo CFD, aunque la simulación de flujo de fluidos reportada [95] aún carece de una convergencia adecuada, indicando que una adecuada representación de la dinámica de fluidos es aún un reto en estos sistemas.

La simulación numérica del proceso de desgasificación de aluminio con la técnica de rotor inyector se enfrenta a la dificultad de la modelación de todo el sistema debido a la complejidad del mismo que incluye dos fases, una líquida, el aluminio líquido, y dos fases gaseosas, el gas de purga y el hidrógeno disuelto. Esta dificultad en modelar tal sistema surge de la inhabilidad del software y hardware disponibles para manejar modelos matemáticos que provean una detallada descripción de los patrones de flujo dentro del baño metálico, incluyendo la turbulencia creada por la rotación del impeler y el flujo de gas de purga inyectado, la interacción entre las fases líquida y gaseosa y la interacción entre el gas de purga y el hidrógeno disuelto. Para simplificar el análisis y obtener una solución viable, los primeros trabajos se enfocaron en los patrones de flujo inducidos por las burbujas de gas inyectadas [98, 99]. Johansen [100] y colaboradores, así como Hop y colaboradores [101] modelaron los patrones de flujo inducidos por el rotor mediante el uso de ecuaciones de transporte para una sola fase. Ellos supusieron que el gas de purga, en forma de burbujas, se introduce en el dominio computacional como una fase dispersa y monitorearon su trayectoria utilizando un marco de referencia Lagrangiano. Waz y colaboradores [102] utilizaron una aproximación similar y un modelo Euleriano-Lagrangiano para modelar la remoción de hidrógeno en aluminio fundido. Todos los estudios anteriores restringieron el movimiento del metal en la superficie libre para simplificar el modelo, y en consecuencia excluyeron el efecto del vórtice sobre los patrones de flujo y su análisis. Maniruzzaman y Makhlof [103, 104] utilizaron un modelo multifásico Euleriano-Euleriano, en el cual modelaron el sistema de las fases interactuando como dos sistemas separados pero interdependientes. El primer subsistema involucra los patrones de flujo turbulentos derivados de la rotación del rotor y el flujo de gas, y el segundo subsistema involucra la dinámica de partículas, así mediante la modelación separada fue posible incluir la complejidad del sistema sin costo de tiempo computacional. Además, dicho estudio incluyó el movimiento de la superficie del fundido, reflejando la formación del vórtice, sin embargo, el modelo

utilizó una geometría bidimensional. Warke [61, 95] modeló la desgasificación a través del rotor inyector dividiendo el sistema en tres subsistemas separados pero relacionados entre sí. El primer subsistema trata de los campos de flujo turbulentos originados por la rotación del impulsor y el flujo de gas y es modelado utilizando ecuaciones estándar de turbulencia y el modelo Euleriano de fase discreta para la formulación del fluido multifásico. El segundo y tercer subsistema trata con la dinámica de remoción de las partículas y el hidrógeno disuelto, respectivamente. Ambos subsistemas se relacionan con la modelación de la fluidodinámica del primer subsistema a través de la aceptación de parámetros como la energía de disipación turbulenta y la distribución de las burbujas. Los trabajos más actuales en este rubro incluyen la modelación 3D de todo el sistema, así como la modelación de la superficie libre para la formación del vórtice, como lo muestra el trabajo realizado por Ramos y colaboradores [96], basado en un modelo Euleriano-Euleriano donde se varían parámetros de operación como la velocidad de rotación, el flujo de gas inyectado y el punto de gas de inyección. En este trabajo se propone un tipo de inyección novel por el fondo del reactor, lo cual mejora la agitación en el fundido debido a un aumento en la estructura turbulenta así como en la distribución de burbujas más pequeñas con mayor área superficial de gas purgante dentro del sistema, y en consecuencia, una aceleración de la cinética de desgasificado. El modelo de este trabajo fue validado con mediciones experimentales obtenidas por la técnica de Velocimetría de Imágenes de partículas (PIV, por sus siglas en inglés), mediante la comparación de los perfiles radiales de velocidad del líquido, obteniendo una buena correlación tanto en tendencia como en magnitud.

1.10 Evolución del diseño geométrico del rotor inyector utilizado en la desgasificación de Aluminio

A diferencia de los diseños geométricos utilizados en la industria química (Figura 10), la evolución de los diseños geométricos del rotor inyector en la industria metalúrgica se ha visto limitada por la agresividad de las condiciones de operación en metales fundidos, las cuales incluyen alta temperatura, erosión y corrosión provocadas por el baño metálico, prevención del tamaño de vórtice formado e inyección de gases y otras sustancias. Los aspectos anteriores han influenciado en el diseño geométrico del rotor inyector y en el material del mismo. Sin embargo, como se mencionó anteriormente, desde mediados del siglo pasado se han desarrollado diversas geometrías para los rotores (Figura 11), derivados de estudios en modelos físicos de agua y en aluminio líquido. En la Tabla 2 es posible observar una reseña de la evolución de los diseños geométricos del rotor inyector de acuerdo a patentes registradas. Los primeros diseños geométricos se desarrollaron principalmente para agitar al fundido, de tal forma que el gas o la inyección de partículas tuvieran un buen mezclado con el aluminio líquido y disminuyeran las impurezas del mismo. Sin embargo, posteriormente se observó que si se inyectaba gas cerca del área del rotor, las burbujas de gas disminuían de tamaño y se distribuían más homogéneamente en todo el reactor, al ser éstas empujadas hacia las paredes por la fuerza radial del rotor. Finalmente, surgió la propuesta de diseños geométricos monolíticos de rotores inyector [105], ya que los rotores antiguos constaban de muchas piezas, lo que dificultaba el montaje del rotor y el reemplazo del mismo. La posición centrada del rotor dentro del reactor es la que más comúnmente se utiliza, sin embargo, se han propuesto otras posiciones excéntricas del rotor, así como diferentes alturas del rotor inyector con respecto al fondo del reactor y el uso de deflectores en diferentes posiciones. El diseño geométrico usual del rotor inyector utilizado es el de un disco plano sin alabes o propelas, el cual tiene cavidades o cortes

transversales con el propósito de ejercer un esfuerzo cortante sobre el fluido y el gas inyectado para promover la turbulencia en el baño. La formación de burbujas mediante el rotor inyector es muy diferente en comparación con la técnica de la lanza y de los tapones porosos debido a que el esfuerzo de corte creado por el rotor inyector rompe las burbujas en tamaños menores. Dos de los diseños geométricos utilizados en este trabajo están patentados por FOSECO [106] y actualmente son de los más utilizados a nivel comercial, Figura 11.

Respecto a la eficiencia de desgasificado de los rotores inyector, se conoce que, basados en pruebas experimentales llevadas a cabo en modelos físicos de agua a escala completa, la mayoría de los rotores actualmente disponibles ofrecen eficiencias de desgasificado similares cuando operan bajo condiciones de operación recomendadas por los proveedores y no existe una teoría unificada que explique esto [107]. Chen y Nilmani evaluaron la eficiencia de desgasificado de varios diseños comerciales de rotores inyector [117], Figura 12, a través de las características de la transferencia de masa utilizando la ecuación de transferencia de masa estándar comúnmente utilizada en ingeniería química para reactores gas-líquido agitados mecánicamente. La ecuación derivada fue validada utilizando datos obtenidos en modelos de agua haciendo uso de varios diseños comerciales de rotores. En este estudio se realizó una revisión de ecuaciones que relacionan la potencia de entrada cuando el gas es inyectado en el tanque y el número de potencia del rotor, con la potencia sin gasificación, así como la relación del producto kA utilizado en operaciones ingenieriles (coeficiente de transferencia de masa y área interfacial gas-líquido para la transferencia de masa), el cual involucra los números adimensionales de Sherwood y Schmidt, número de flujo de gas, número de Reynolds del rotor y variables geométricas que relacionan la altura del líquido, el diámetro del rotor y el diámetro del tanque [108]. Como resultado de lo anterior, se obtiene que el producto kA es directamente proporcional a la raíz cuadrada de la velocidad de inyección del gas de purga, e inversamente proporcional a la raíz cuadrada del área transversal del reactor. Por lo tanto, para una velocidad de inyección de gas dada, es benéfico tener un reactor tan pequeño como sea posible. Esto se ve reflejado en la reciente tendencia del uso de unidades de tratamiento compactas en línea [51]. El estudio de Chen y Nilmani también demostró que kA es linealmente proporcional a la velocidad de rotación y a la raíz cuadrada del diámetro del rotor.

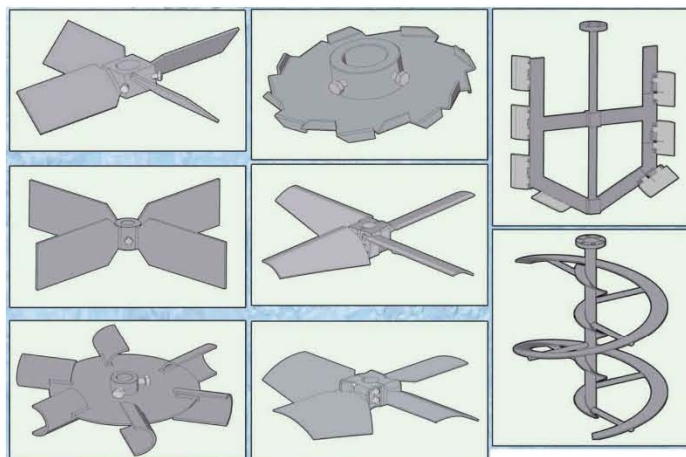
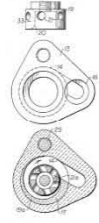

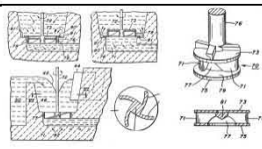
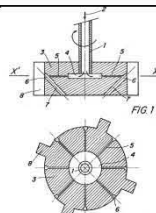
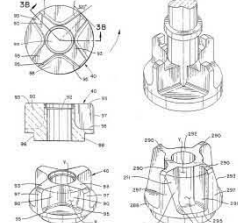


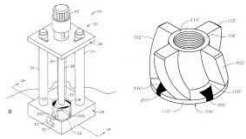
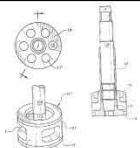
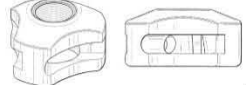
Figura 10. Diseños geométricos de rotores utilizados en la industria química.



Figura 11. Diseños geométricos de rotores registrados por FOSECO para la degasificación de aluminio líquido [106].

Tabla 2. Evolución del diseño geométrico del rotor inyector de acuerdo a patentes registradas.

Diseño geométrico	Año	Autor
	1962	Victor D. Sweeney y colaboradores, USA [109].
	1974	Fenton C. Koch, USA [110].
	1976	Van Linden, J. H. L. y colaboradores, USA [111, 112].
	1984	Grenole, J. G. y colaboradores [113]
	1996	Ronald E. Gilbert y colaboradores [114]

	<p>2000</p>	<p>Paul V. Cooper [105]</p>
	<p>2001</p>	<p>Chris T. Vild [115]</p>
	<p>2010</p>	<p>Dirk Schmeisser, Foseco International Limited [116]</p>

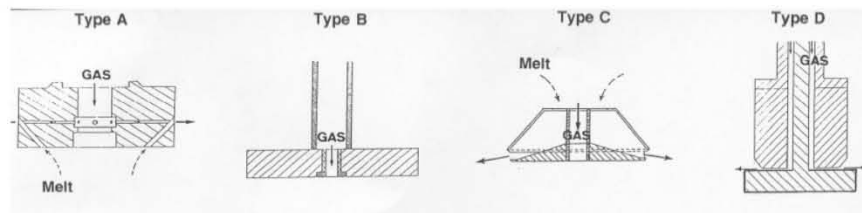


Figura 12. Rotores utilizados por Nilmani [117].

Justificación

Los procesos de desgasificación del aluminio han mejorado sustancialmente en los últimos años. Sin embargo, el incremento en la demanda de aleaciones de aluminio de mayor calidad, la necesidad actual en el ahorro de energía en los procesos metalúrgicos, así como las estrictas regulaciones en los niveles de contaminación, son la principal motivación de este trabajo para contribuir en el conocimiento y proponer cambios que se traduzcan en la mejora e innovación de los métodos existentes de desgasificación, específicamente el de rotor-inyector. A pesar de que esta tecnología está en una etapa madura de desarrollo y las bases científicas que gobiernan su operación se han establecido adecuadamente, aún es posible su optimización partiendo de un conocimiento profundo de los fenómenos gobernantes del proceso. Adicionalmente, el avance en las herramientas computacionales de simulación numérica y la disponibilidad de éstas estimula la proximidad e interés en temas que involucran el comportamiento de flujos complejos. En este trabajo se presenta un análisis de proceso en donde se investigó el efecto de las principales variables de operación y de diseño sobre el consumo de gas y la cinética de desgasificado de aluminio con la técnica del rotor inyector. En base a este estudio, se pudo optimizar la operación y se propone que el diseño del rotor es una de las variables más importantes del proceso, por lo que como resultado del trabajo se propone un diseño de rotor que mejore el desempeño de la desgasificación, mejorando la cinética y optimizando el consumo del gas de purga.

Objetivo General

Entender, medir, predecir y optimizar la cinética del proceso de desgasificación de aluminio a través de la técnica de rotor inyector en reactores tipo batch, partiendo del estudio de las bases termodinámicas y cinéticas del proceso, con el fin de incrementar la eficiencia de la desgasificación mediante el uso de modelado físico, simulación numérica y experimentación en planta piloto con aluminio líquido.

Objetivos particulares

Una vez entendida y cuantificada la cinética de desgasificado a través de las principales variables del proceso, los siguientes objetivos son:

Evaluar el desempeño de tres diseños geométricos distintos de rotores y dos tipos de inyección de gas (la inyección convencional por el rotor y la flecha y la inyección novel por el fondo de la olla), utilizando el modelado físico.

Analizar la cinética de desgasificado en función de las dos principales variables de proceso, la velocidad de rotación y el flujo de gas de purga inyectado.

Realizar pruebas en planta piloto con aluminio líquido para la evaluación del desempeño en el proceso de desgasificación de tres diseños distintos de rotores.

Hipótesis

Un modelo matemático del proceso de desoxidación del agua validado adecuadamente mediante simulación física convierte a dicho modelo en una herramienta válida y fiable de análisis de proceso dirigida a optimizar el proceso de desgasificado del aluminio líquido.

El análisis de las diferentes variables de proceso de la desgasificación del aluminio líquido a través de la técnica de rotor inyector, así como la adecuada interpretación física de la dependencia de las mismas, son la base para el estudio y en consecuencia, el incremento en la cinética de dicho proceso.

El diseño geométrico del rotor inyector y el punto de inyección del gas de purga son variables de operación en el proceso de desgasificado del aluminio líquido las cuales al ser rediseñadas pueden incrementar la cinética del proceso y en consecuencia, la eficiencia del mismo.

Los resultados experimentales obtenidos en el modelo físico de agua de la fluido dinámica y el comportamiento de las burbujas del gas de purga inyectado sobre la remoción de oxígeno del agua pueden ser trasladados al proceso real del reactor con aluminio líquido siguiendo estrictos criterios de similitud.

Capítulo II

Metodología

La parte experimental de este trabajo se desarrolló en tres etapas. En la primera etapa se realizaron experimentos en el modelo físico de agua-oxígeno inyectando N_2 para simular la desgasificación de aluminio a través de la técnica de rotor inyector. En esta etapa se estudió la cinética de desgasificación del sistema a través de la obtención de las curvas de evolución del contenido de oxígeno disuelto en agua en el tiempo, las cuales validaron un modelo matemático sobre este mismo sistema de desoxidación de agua desarrollado por otro estudiante en un trabajo previo [1]. En la segunda etapa se realizó la simulación numérica del sistema de desgasificado de aluminio en un reactor tipo batch. En esta etapa, a través de los principios fundamentales de conservación de masa y momento para flujos bifásicos, se determinó la dinámica de fluidos y la estructura turbulenta de la olla de desgasificado utilizando la técnica de rotor inyector. En la tercera y última etapa, se realizaron experimentos a escala piloto para estudiar la cinética de eliminación de hidrógeno disuelto en aluminio puro comercial empleando los tres diferentes diseños geométricos de rotores inyectores. En las primeras dos etapas se utilizaron diferentes variables de operación del proceso, mientras que en la tercera etapa se mantuvieron fijas las variables de operación para poder evaluar la eficiencia de desgasificado de los tres diseños geométricos de rotores inyectores, dada la dificultad que implicó el desarrollo de los experimentos con metal líquido.

2.1 Modelo físico H_2O-O_2

La determinación de las características de flujo de fluidos en un proceso real de tipo metalúrgico es extremadamente difícil debido a la opacidad y altas temperaturas características de estos procesos. Bajo estas severas condiciones es sumamente arduo llevar a cabo investigaciones experimentales sobre el proceso real para mejorar la eficiencia o desarrollar procesos alternos. Por lo tanto, se recurre a la *modelación física*, en donde el principal objetivo es alcanzar una representación realista del proceso bajo estudio a través de la representación del sistema con materiales que puedan manipularse fácilmente utilizando el adecuado escalamiento del proceso y satisfaciendo rigurosos criterios de similitud. Los modelos físicos son diseñados típicamente para que los fenómenos de transferencia de momento, masa y calor sean fácilmente cuantificables utilizando fluidos diferentes a los fluidos reales y utilizando los números adimensionales pertinentes que garanticen similitudes de transporte entre el sistema real y el modelo físico. En el caso específico de la desgasificación de aluminio utilizando la técnica del rotor inyector, el agua toma el lugar del aluminio líquido y el oxígeno disuelto en el agua reemplaza al hidrógeno disuelto en el aluminio, mientras que el nitrógeno inyectado como gas de purga sustituye al argón o mezclas de gases inertes y reactivos comúnmente utilizadas en este proceso. La simulación física del proceso de desgasificación se realizó en un modelo a escala completa de un reactor industrial de la empresa Cooper Crouse Hinds (Figura 2a).

2.1.1 Criterios de similitud para el diseño del modelo físico

La construcción del modelo físico debe satisfacer las condiciones de la teoría de similitud [118]. Tomando como base lo anterior, en la construcción del reactor se cumplieron con los criterios de similitud relacionados con los fenómenos bajo estudio.

Debido a que este estudio se enfoca en la cinética de transferencia de masa del proceso, el mecanismo de convección es el de mayor importancia y por lo tanto, la dinámica de flujo de fluidos debe satisfacer este criterio de similitud. Entre los criterios de similitud empleados se encuentra la *similitud geométrica*, la cual establece que todas las dimensiones entre el sistema real y el modelo conserven la misma relación a través de un factor de escalamiento. En este caso el factor de escala utilizado es la unidad debido a que el modelo tiene una escala 1:1 del reactor industrial y por lo tanto, todas las dimensiones entre el modelo físico y el reactor industrial son las mismas.

El criterio de *similitud dinámica* establece relaciones similares de fuerzas entre el sistema real y el modelo físico. Dichas fuerzas se caracterizan con números adimensionales, los cuales se obtienen al formar los cocientes de las fuerzas involucradas, y que promueven el flujo de fluidos en el proceso. Al asegurarse que el valor numérico de estos números adimensionales es el mismo en el reactor real y en el modelo, se puede aseverar que los resultados obtenidos pueden ser utilizados en el reactor industrial. Los números adimensionales característicos en este proceso son el número de Reynolds (fuerzas inerciales entre fuerzas viscosas) y el número de Froude modificado (fuerzas inerciales entre fuerzas gravitacionales o boyantes). Estos dos números adimensionales gobiernan la dinámica de fluidos de la desoxidación del agua ya que las fuerzas inerciales y viscosas son determinantes cuando el rotor gira y las fuerzas boyantes se incluyen cuando la fase gaseosa es inyectada. Respecto a la condición de flujo bifásico, se debe considerar la diferencia de la tensión superficial para el agua y el aluminio, lo cual provoca burbujas mayores y de formas diferentes para el aluminio líquido [102] y como consecuencia, el criterio de similitud dinámica no se cumple en su totalidad. Para describir la contribución de la fase gaseosa inyectada al sistema, se consideran los números de Weber y Froude modificado, lo que involucra las densidades y tensiones superficiales de los fluidos. El número de Weber relaciona las fuerzas inerciales y las fuerzas de tensión superficial, lo que determina la estabilidad de las burbujas del gas de purga, y como se mencionó anteriormente dicta una de las principales restricciones del uso del modelo físico de agua. Finalmente, debido a que las burbujas del gas de purga inyectado se forman justo debajo del punto de inyección cuando el gas abandona el rotor y se encuentran con el fundido, el cual está siendo fuertemente agitado, la estabilidad de las burbujas depende de un cierto tamaño, el cual está determinado por la relación entre las fuerzas centrifugas y las fuerzas de tensión superficial, suponiendo burbujas de forma esférica. Es decir, si las fuerzas de tensión superficial dominan, la burbuja será estable con el tamaño de salida del punto de inyección, pero si las fuerzas de campo centrifugas dominan, la burbuja perderá estabilidad y se romperá en burbujas de menores tamaños. Esta condición es importante debido a que determina la diferencia de diámetros de burbujas entre el sistema con aluminio líquido y el sistema con agua.

El criterio de *similitud cinemática* observa fundamentalmente si las velocidades en los puntos correspondientes de los dos sistemas se encuentran en la misma relación fija y deriva de la propiedad intrínseca de los líquidos a fluir, es decir, la viscosidad cinemática. En este caso particular, este criterio aplica para el movimiento de ambas fases involucradas, es decir, en el movimiento del gas y del líquido tanto del modelo como del sistema real. Una relación de fuerzas constante en ambos sistemas satisface la similitud cinemática siempre y cuando se utilice en el modelo físico un fluido con un valor similar de viscosidad cinemática al fluido real. En este caso, la viscosidad cinemática del agua a temperatura ambiente es de $1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ mientras que la del aluminio líquido a 750° C es de $0.492 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ [119]. Debido a estas diferencias en la viscosidad cinemática, para el modelado de la desgasificación la práctica común ha sido

utilizar sistemas a escala completa en donde el número de Reynolds es similar [3, 93]. En este caso en específico, los criterios de similitud térmica y química no aplican debido a que se considera un proceso isotérmico y las reacciones químicas no intervienen en dicho proceso. El escalamiento de la velocidad de rotación del rotor y del flujo de gas de purga inyectado se realizó utilizando datos de operación del reactor industrial. A continuación se detalla el escalamiento realizado con los números adimensionales.

Definimos a λ como el factor de escala, el cual representa la relación de diámetros característicos entre el modelo físico y el reactor, y en este caso tiene el valor de la unidad (ecuación 2.1.1), donde D_m corresponde al diámetro característico del modelo y D_r es el diámetro característico del reactor real. En la Figura 1 se muestran las principales dimensiones utilizadas para satisfacer el criterio de similitud geométrica y en la Tabla 1 las dimensiones de ambos sistemas.

$$\lambda = \frac{D_m}{D_r} \quad (2.1.1)$$

La similitud dinámica se obtuvo igualando el número de Reynolds para ambos dispositivos, como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\frac{\rho_r \cdot V_r \cdot D_r}{\mu_r} = \frac{\rho_m \cdot V_m \cdot D_m}{\mu_m} \quad (2.1.2)$$

Donde ρ es la densidad, μ es la viscosidad, y V es la velocidad promedio del fluido, mientras que los índices m y r se refieren al modelo y al reactor industrial respectivamente.

En donde a través de la introducción del término de viscosidad cinemática, ν , se obtiene la velocidad de rotación del modelo físico, según la ecuación (2.1.3):

$$V_m = \left(\frac{\nu_m}{\nu_r} \right) \cdot \lambda^{-1} \cdot V_r \quad (2.1.3)$$

Introduciendo la ecuación (2.1.4), en donde se relaciona la velocidad angular en metros por segundo, V , a partir de la velocidad con unidades de revoluciones por minuto, V_{RPM} , se obtiene la ecuación (2.1.5):

$$V = V_{RPM} \cdot d \cdot \pi \quad (2.1.4)$$

$$V_{RPM_m} = \frac{\nu_m}{\nu_r} \cdot \lambda^{-1} \cdot V_{RPM_r} \cdot \frac{d_m}{d_r} \quad (2.1.5)$$

Finalmente, reemplazando la ecuación (2.1.1) en la ecuación anterior, se obtiene la velocidad de rotación del modelo físico basado en la velocidad de rotación del reactor industrial y satisfaciendo el criterio de similitud dinámica:

$$V_{RPM_m} = \frac{\nu_m}{\nu_r} \cdot \lambda^{-2} \cdot V_{RPM_r} \quad (2.1.6)$$

En la ecuación anterior es posible observar que la velocidad de rotación del modelo depende directamente de la velocidad de rotación del reactor industrial, así como de la relación de la propiedad de viscosidad cinemática del agua y del aluminio.

Para obtener el flujo de gas de purga a inyectar también se utiliza el criterio de similitud dinámica a través del número modificado de Froude, el cual relaciona las fuerzas boyantes resultantes del ascenso de las burbujas del gas de purga de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\frac{U_{p_m}^2}{g \cdot d_m} = \frac{U_{p_r}^2}{g \cdot d_r} \quad (2.1.7)$$

Donde U_p son las velocidades de ascenso de las burbujas sin considerar el arrastre de las burbujas provocada por el rotor.

Introduciendo la ecuación (2.1.1) y despejando la velocidad de ascenso de las burbujas para el modelo físico, se obtiene la siguiente ecuación:

$$U_{p_m} = \lambda^{1/2} \cdot U_{p_r} \quad (2.1.8)$$

La velocidad de ascenso de la burbuja [120] se representa en la siguiente ecuación:

$$U_p = \frac{4.5 \cdot Q^{1/3} \cdot L^{1/4}}{R^{1/4}} \quad (2.1.9)$$

Al introducir la ecuación (2.1.9) para el modelo físico y el reactor en la ecuación (2.1.8) y utilizando el concepto de factor de escala presentado en la ecuación (2.1.1), se obtiene el flujo de gas para el modelo físico, Q_m , en función del flujo de gas usado en el reactor, Q_r :

$$Q_m = \lambda^{3/2} \cdot Q_r \quad (2.1.10)$$

En la ecuación (2.1.10) se puede observar que debido a la escala utilizada entre el modelo y el reactor industrial los flujos de gas de purga inyectados son los mismos para el modelo físico y el reactor industrial. En la Tabla 2 se muestran los parámetros operacionales del modelo de agua obtenidos a partir del escalamiento y en la Tabla 3 se muestran las propiedades físicas de los diferentes fluidos utilizados en ambos sistemas, siendo las del aluminio función de la temperatura.

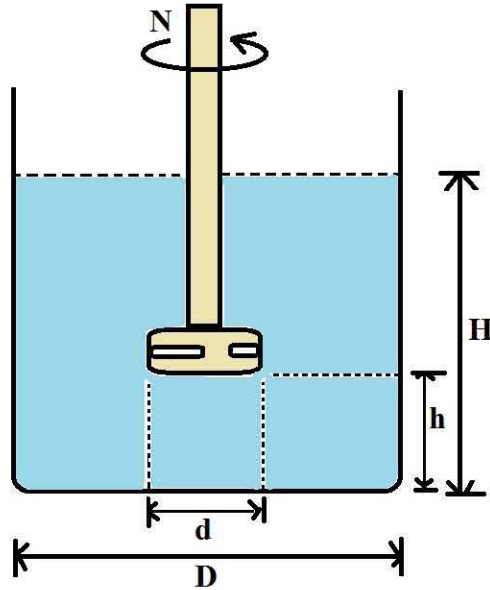


Figura 1. Esquema del modelo físico con las principales dimensiones utilizadas en el criterio de similitud geométrica.

Tabla 1. Dimensiones del modelo físico y del reactor.

	Reactor industrial		Modelo físico	
	Nomenclatura	Dimensiones (m)	Nomenclatura	Dimensiones (m)
Altura del líquido	H_r	0.5	H_m	0.5
Altura del rotor	h_r	0.15	h_m	0.15
Diámetro del reactor	D_r	0.5	D_m	0.5
Diámetro del rotor	d_r	0.16	d_m	0.16
Radio del reactor	R_r	0.25	R_m	0.25
Diámetro externo del reactor	$D_{ext,r}$	1.3	$D_{ext,m}$	0.54
Altura del reactor	A_r	1.06	A_m	0.63

Tabla 2. Parámetros operacionales escalados del modelo de agua basados en los criterios de similitud.

	Velocidad Angular (m/s)	RPM	Número Reynolds	Velocidad ascenso burbuja (m/s)	Número Froude Modificado	Número Weber
Reactor Industrial	1.32	158	1202683	0.2694	0.0148	2281
	2.639	315	2405550	0.4275	0.0372	9119
Modelo Físico	2.4295	290	1202722	0.2694	0.0148	40347
	4.86	580	2405449	0.4275	0.0372	161454

Tabla 3. Propiedades físicas de los fluidos utilizados.

Fluido	Temperatura (° C)	Densidad (Kg/m ³)	Viscosidad (Kg/ms) x10 ⁻³	Viscosidad Cinemática (m ² /s) x 10 ⁻⁶	Tensión Superficial (N/m)
Agua	20	998	1.001	1.002	0.073
Aluminio	700	2370	1.30	0.548	0.9
	750	2357	1.16	0.492	
	800	2345	1.07	0.456	
Argón	20	1.78	---	---	---
Aire	20	1.185	1.2	0.1124	---
Nitrógeno	20	1.2	0.018	0.322	---

2.1.2 Equipo y procedimiento experimental

Equipo experimental

La construcción del modelo involucró la fabricación de una estructura metálica de barras huecas de acero soldadas, construidas para sostener un taladro que gira con un motor eléctrico de velocidad variable, una junta rotativa que mantiene estática la flecha al girar, lo cual permite la inyección de gas. El modelo físico fue construido en el departamento de Metalurgia de la Facultad de Química [121, 122], basado en los planos diseñados en el CIATEQ. El reactor está construido de acrílico de 1 cm de espesor, diámetro interno de 0.5 m y altura de 0.63 m (ver Figura 2b), contenido en un tanque rectangular lleno de agua para evitar las distorsiones y aberraciones ópticas ocasionadas por la curvatura de las superficies. La flecha y los rotores fueron maquinados en Nylamid®; el rotor estándar es un diseño comercial (Figura 3a), el rotor estándar muescado tiene el mismo diseño que el rotor estándar pero con muescas circulares en la parte superior (Figura 3b), ambos rotores son diseños comerciales de FOSECO Ltd., y finalmente, el tercer rotor, el cual es un diseño propuesto por el Dr. José L. Camacho, quien trabajó su doctorado con este grupo de investigación pero que no pudo probar adecuadamente el desempeño de dicho rotor (Figura 3c), el cual si se pudo comprobar en este trabajo. La flecha a la cual se ensambla el rotor, tiene una perforación interna de 0.5 cm de diámetro mediante la cual se inyecta el gas de purga en la inyección convencional.

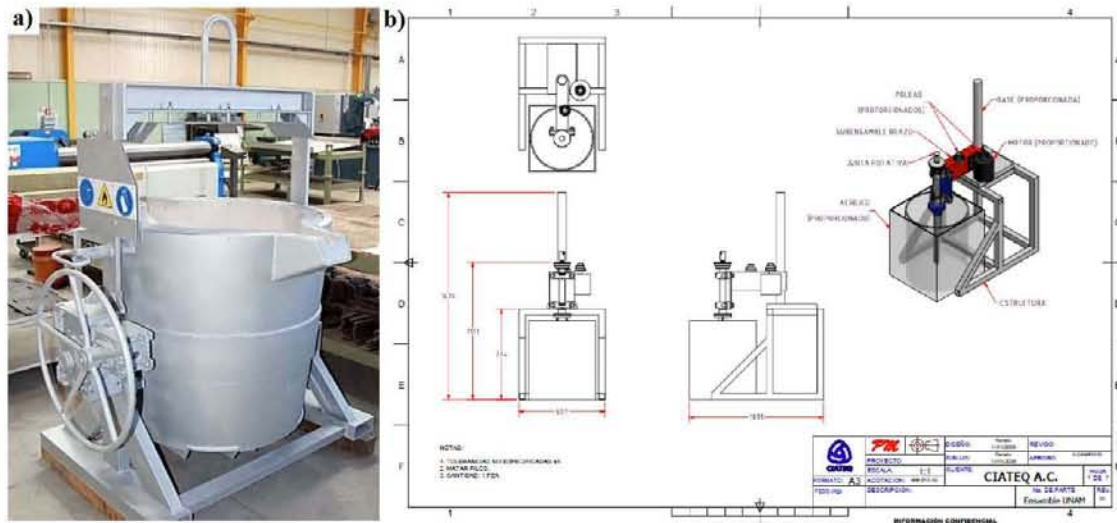


Figura 2. a) Reactor Industrial de la empresa Cooper Crouse Hinds y plano general del modelo físico con factor de escala de 1:1 (figura b).

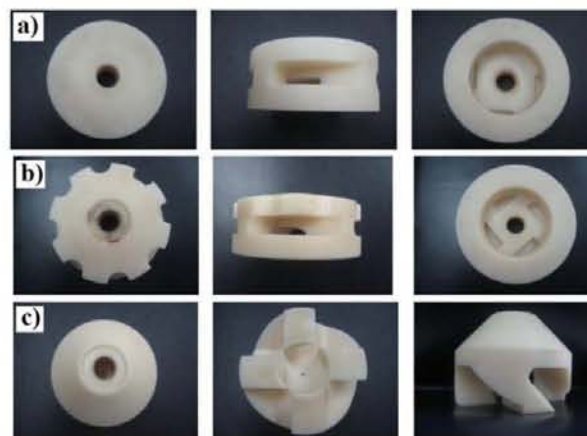


Figura 3. Rotores de Nylamid® utilizados; a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado, c) nueva propuesta de rotor.

Procedimiento experimental

Para evaluar experimentalmente la cinética de eliminación del oxígeno disuelto en el agua, se saturó el agua con oxígeno a través de la inyección de aire mediante un compresor hasta alcanzar una concentración de 6 ppm de oxígeno a una temperatura de 20 ± 1 ° C. Posteriormente, se inicia la agitación con el rotor a la velocidad indicada y se comienza con la inyección del gas de purga a través del punto de inyección correspondiente, ya sea por el rotor o el fondo del reactor, en este caso se utilizó como gas de purga nitrógeno de grado industrial (99.9% de pureza). Conjuntamente, se registran las lecturas de oxígeno indicados por el oxímetro con un electrodo de ión específico de la marca HANNA® modelo HI 9146 (Figura 5) cada 15 segundos hasta alcanzar la desgasificación total. Se utilizaron dos diferentes flujos de inyección de gas de purga, 10 y 40 L/min, dos diferentes valores de velocidad de rotación, 290 y 580 rpm y dos diferentes tipos de inyección del gas de purga, la técnica convencional en donde el gas es inyectado por el rotor y la técnica novel, en donde el gas es inyectado por el fondo del reactor. La velocidad de rotación indicada se obtuvo mediante el ajuste de las

bandas del motor y midiéndose con un tacómetro digital Lutron DT-2236 en RPM a través del uso de una cinta reflectiva colocada en la flecha. El flujo de gas de purga inyectado se reguló utilizando un rotámetro colocado a la salida del tanque de gas. Cada experimento, de los ocho que corresponden al diseño de experimentos tomando en consideración sólo tres de las cuatro variables (flujo de gas, velocidad de rotación del rotor y punto de inyección del gas) en el modelo físico se llevó a cabo por triplicado. En la Figura 4 se muestra un esquema del arreglo experimental del modelo físico de agua en operación. En la Figura 5 se muestra el tacómetro (Figura 5a) y oxímetro digitales (Figura 5b), así como el rotámetro utilizado para la inyección de aire (Figura 5c). En la Figura 6 se muestra una foto del esquema mostrado en la Figura 4.

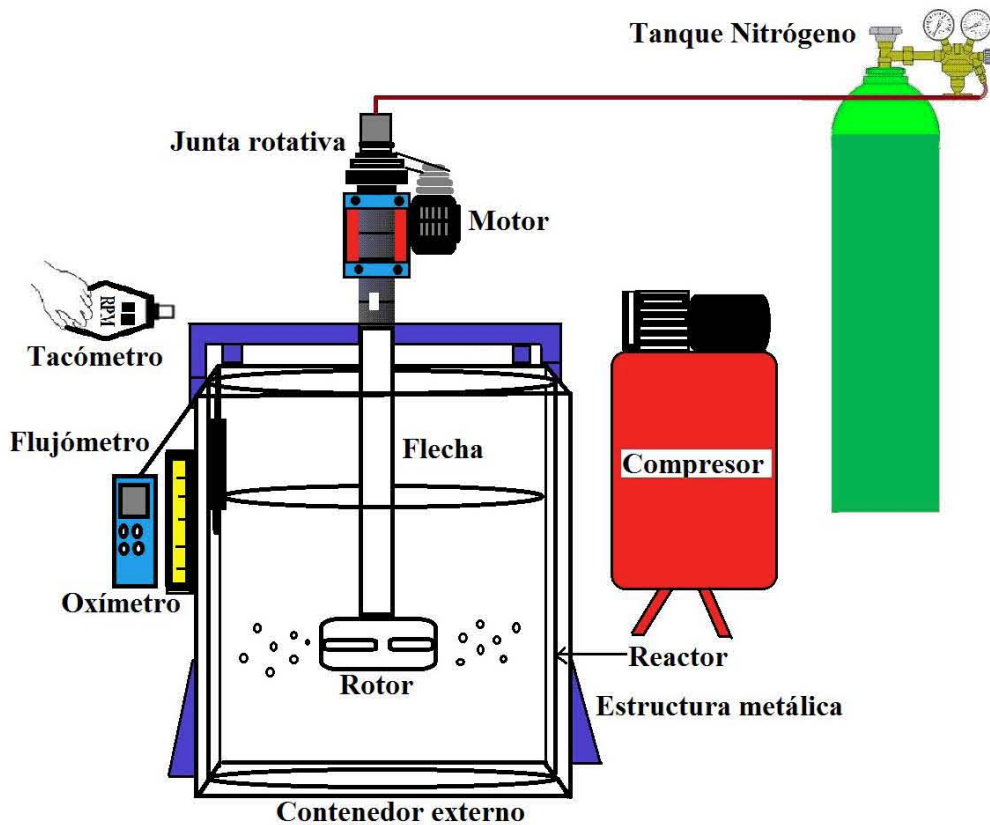


Figura 4. Esquema del modelo físico de agua.



Figura 5. (a) Tacómetro digital, (b) Oxímetro digital, y (c) Rotámetro utilizados en la experimentación del modelo físico.



Figura 6. Foto del arreglo experimental de la Figura 4 e instrumentación del reactor: 1. Junta rotativa, 2. Oxímetro, 3. Rotor de Nylamid (liso), 4. Flecha de Nylamid, 5. Compresor, 6. Flujómetro, 7. Motor, 8. Reactor, 9. Recipiente externo del reactor.

2.1.3 Diseño de experimentos

En la Tabla 4 se muestran los niveles de las variables o los factores utilizados en la primera etapa de experimentación en el modelo físico de agua. Como referencia se realizaron experimentos con el rotor liso, por lo tanto los resultados obtenidos no se muestran en el capítulo correspondiente. Los otros rotores, corresponden a diseños comerciales de Foseco® (rotor estándar y estándar muescado), así como una nueva propuesta desarrollada por este grupo de investigación. El punto de inyección de gas varía entre la inyección convencional a través del rotor y la inyección por el fondo de la olla, a la que denominamos inyección novel. Los valores de los niveles de las otras dos variables surgen al escalar los valores típicos de operación en una unidad industrial de desgasificación.

Tabla 4. Niveles de las variables o factores utilizados en el modelo físico de agua.

	FACTORES			
	Geometría Rotor Inyector	Inyección de N ₂	Velocidad agitación (RPM)	Flujo gas inyectado (L/min)
NIVELES	Liso, <i>L</i>	Novel, <i>N (+)</i>	290 (-)	10 (-)
	Estándar, <i>E</i>	Convencional, <i>C (-)</i>	580 (+)	40 (+)
	Estándar muescado, <i>EM</i>			
	Nueva Propuesta, <i>NP</i>			

El diseño de experimentos factorial, tomando solamente en cuenta las variables con dos niveles, es decir, punto de inyección, flujo de gas y velocidad de rotación, genera un diseño factorial a dos niveles 2^3 , lo cual resulta en un total de 8 experimentos que se presentan en la Tabla 5 que se corrieron para cada uno de los rotores empleados en este trabajo. Separadamente se realizaron experimentos para ver exclusivamente el desempeño de cada rotor manteniendo el resto de las variables fijas.

Tabla 5. Diseño de experimentos 2^3 .

No. Experimento	Variable		
	Punto de inyección de N ₂	Velocidad agitación (RPM)	Flujo gas inyectado (L/min)
1	+	+	+
2	+	+	-
3	+	-	+
4	+	-	-
5	-	+	+
6	-	+	-
7	-	-	+
8	-	-	-

2.2 Modelo matemático

2.2.1 Modelo matemático de la desgasificación del modelo físico de agua

El modelo desarrollado para describir el proceso de desgasificación de un sistema de H₂O-O₂ fue desarrollado en un trabajo previo por un alumno de licenciatura [1]. Las condiciones del sistema, así como las características del mismo se detallan en la sección del modelo físico de agua. El modelo matemático realizado está basado en el modelo desarrollado por Engh y Sigworth, el cual es un balance de masa global para el hidrógeno disuelto en aluminio líquido [4-6]. En la reformulación de este modelo, el oxígeno disuelto se utilizó en lugar del hidrógeno.

El mecanismo de desgasificación en el sistema H₂O-O₂ ocurre de acuerdo a los siguientes pasos:

- a) El oxígeno se transporta dentro del líquido hacia la vecindad de las burbujas de nitrógeno mediante convección y difusión.
- b) Transporte difusivo a través de la capa límite que rodea la burbuja.
- c) Adsorción en la superficie de la burbuja del oxígeno
- d) Desorción química del oxígeno en la superficie de la burbuja.
- e) Difusión del oxígeno hacia el centro de la burbuja del gas de purga.
- f) Remoción del oxígeno a través de la superficie del líquido

Las suposiciones que se consideraron para el desarrollo del modelo matemático son las siguientes:

1. Baño isotérmico y bien agitado de tal forma que la concentración de oxígeno disuelto es la misma en todo el reactor.
2. La presión parcial de oxígeno dentro de las burbujas en una misma sección horizontal o altura en el volumen de control se considera la misma y es mucho más pequeña que la presión total dentro de la burbuja.
3. La etapa controlante del proceso es el transporte de masa del oxígeno disuelto en la capa límite de la burbuja.
4. No se considera variación en el tamaño de la burbuja durante su ascenso debido a la poca profundidad del baño (0.5 m).
5. El área superficial de las burbujas es función solamente de la altura del baño.
6. Las burbujas son esferas rígidas de tamaño constante.
7. Se desprecia la coalescencia de las burbujas.

La disolución de oxígeno en agua, la cual ocurre en forma molecular a diferencia de la disolución atómica del hidrógeno en el aluminio, se expresa en la siguiente reacción:



El modelo se basa en un balance de masa en un volumen de control del reactor con burbujas del gas de purga elevándose a través del fluido (Figura 7). Por lo tanto, considerando el ascenso de una burbuja del gas de purga dentro del volumen de control de espesor Δh , el balance de masa para la reacción anterior (ecuación (2.2.1)) está determinado por la ecuación (2.2.2), donde el término del lado izquierdo representa los moles de oxígeno que son transportados por segundo desde el seno del fluido hasta la intercara burbuja-líquido y el término del lado derecho es el incremento de oxígeno en las burbujas del gas de purga:

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \rho_{H_2O} \Delta A_b}{100 \cdot MW_{O_2}} (C_{O_2} - C_{O_2}^{eq}) = G_{N_2} \cdot \Delta \left(\frac{P_{O_2}}{P_{tot}} \right) \quad (2.2.2)$$

En donde $C_{O_2} - C_{O_2}^{eq}$ es la fuerza motriz para la difusión de oxígeno; $C_{O_2}^{eq}$ es la concentración al equilibrio de oxígeno en el agua en ppm; $k_{O_2-H_2O}$ es el coeficiente de transporte de masa en $m \cdot s^{-1}$; ΔA_b es el área superficial de las burbujas en el volumen de control en m^2 ; \dot{G} es la rapidez de flujo molar del gas de purga en $kmol \cdot s^{-1}$; P_T y P_{O_2} son la presión total dentro de la burbuja y la presión parcial de oxígeno, respectivamente en atm. La presión parcial de oxígeno en la burbuja se relaciona con la concentración de oxígeno disuelto en el baño a través de la constante de equilibrio, $K_{O_2-H_2O}$, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$K_{O_2-H_2O} = \frac{P_{O_2}}{C_{O_2}^{eq} \cdot f_{O_2}} \quad (2.2.3)$$

El coeficiente de actividad henriano de oxígeno en agua, f_{O_2} , y la actividad henriana del oxígeno disuelto, h_{O_2} se relacionan de la siguiente manera:

$$h_{O_2} = f_{O_2} \cdot C_{O_2} \quad (2.2.4)$$

Combinando las ecuaciones anteriores (ecuaciones (2.2.2), (2.2.3) y (2.2.4)), se obtiene (2.2.5):

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = \frac{1}{P_T} \cdot \frac{\Delta P_{O_2}}{\left(C_{O_2} - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}} \right)} \quad (2.2.5)$$

Ordenando los términos anteriores:

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b \cdot P_T}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = \int_0^{P_{O_2}^\circ} \frac{dP_{O_2}}{\left(C_{O_2} - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}} \right)} \quad (2.2.6)$$

Integrando desde el fondo hasta la superficie del baño, $P_{O_2}^\circ$ se obtienen las siguientes ecuaciones:

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b \cdot P_T \cdot C_{O_2}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = \int_0^{P_{O_2}^\circ} \frac{dP_{O_2}}{\left(1 - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} \cdot C_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}} \right)} \quad (2.2.7)$$

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b \cdot P_T \cdot C_{O_2}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = - \frac{f_{O_2} \cdot C_{O_2}}{K_{O_2-H_2O}} \cdot \ln \left(1 - \frac{K_{O_2-H_2O}}{f_{O_2} \cdot C_{O_2}} \cdot P_{O_2}^\circ \right) \quad (2.2.8)$$

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b \cdot P_T \cdot K_{O_2-H_2O}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2} \cdot f_{O_2}} = \ln \left(\frac{C_{O_2}}{C_{O_2} - \frac{P_{O_2}^\circ}{f_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}}} \right) \quad (2.2.9)$$

Al introducir el número adimensional Z , el cual representa la capacidad de las burbujas del gas de purga para remover el oxígeno disuelto cuando éstas abandonan el baño a través de la superficie y es un parámetro sugerido por Engh [4], se define en la siguiente ecuación:

$$Z = \frac{K_{O_2-H_2O} \cdot P_{O_2}^\circ}{f_{O_2} \cdot C_{O_2}} \quad (2.2.10)$$

El parámetro Z es una medida del equilibrio dentro de las burbujas o en otras palabras, la eficiencia termodinámica. Sustituyendo Z en la ecuación (2.2.8), se obtiene la siguiente relación:

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot A_b \cdot P_T \cdot C_{O_2}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = -\frac{f_{O_2} \cdot C_{O_2}}{K_{O_2-H_2O}} \cdot \ln(1 - Z) \quad (2.2.11)$$

A continuación se define otro parámetro adimensional, ψ , el cual se define como la habilidad del hidrógeno para difundir hacia las burbujas durante su ascenso, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\psi = \frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot A_b \cdot P_T \cdot K_{O_2-H_2O}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2} \cdot f_{O_2}} \quad (2.2.12)$$

En la ecuación anterior es posible observar que si se mantiene constante la temperatura, la constante de equilibrio queda fija y por lo tanto, la única forma de incrementar ψ es disminuyendo el tamaño de burbuja, lo cual incrementa el área interfacial de las burbujas del gas de purga, A_b , o a través del incremento de la constante de transferencia de masa, $k_{O_2-H_2O}$, esto último mediante el aumento en la agitación del fluido. Entonces, la ecuación (2.2.9) se reduce a la siguiente relación:

$$Z = 1 - \exp(-\psi) \quad (2.2.13)$$

2.2.2 Balance en reactores tipo batch

En este tipo de reactores, el balance de masa del oxígeno disuelto, C_{O_2} , se expresa de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$-\frac{M_{H_2O}}{100 \cdot MW_{O_2}} \cdot \frac{d}{dt} C_{O_2} = \dot{G}_{N_2} \cdot \frac{P_{O_2}^\circ}{P_T} \quad (2.2.14)$$

Sustituyendo el valor de $P_{O_2}^\circ$ obtenido de la ecuación (2.2.10) en la ecuación (2.2.14), se obtiene:

$$\frac{dC_{O_2}}{C_{O_2}} = \frac{100 \cdot f_{O_2} \cdot Z \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}}{M_{H_2O} \cdot P_T \cdot K_{O_2-H_2O}} dt \quad (2.2.15)$$

Integrando la ecuación anterior desde $C_{O_2} = C_{O_2}^{ini}$ hasta $C_{O_2} = C_{O_2}$, y desde $t=0$ hasta $t=t$, se obtiene la siguiente relación:

$$\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ini}} = \exp \left[-\frac{100 \cdot f_{O_2} \cdot Z \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2} \cdot t}{M_{H_2O} \cdot P_T \cdot K_{O_2-H_2O}} \right] \quad (2.2.16)$$

En donde $C_{O_2}^{ini}$ y C_{O_2} representan la concentración inicial de oxígeno disuelto y la concentración de oxígeno disuelto al tiempo t en el reactor, respectivamente. La evolución del oxígeno disuelto, C_{O_2} , con el tiempo se puede determinar con la ecuación (2.2.16) una vez que los parámetros operacionales están establecidos y mediante la determinación del coeficiente de transferencia de masa y el área interfacial del gas de purga.

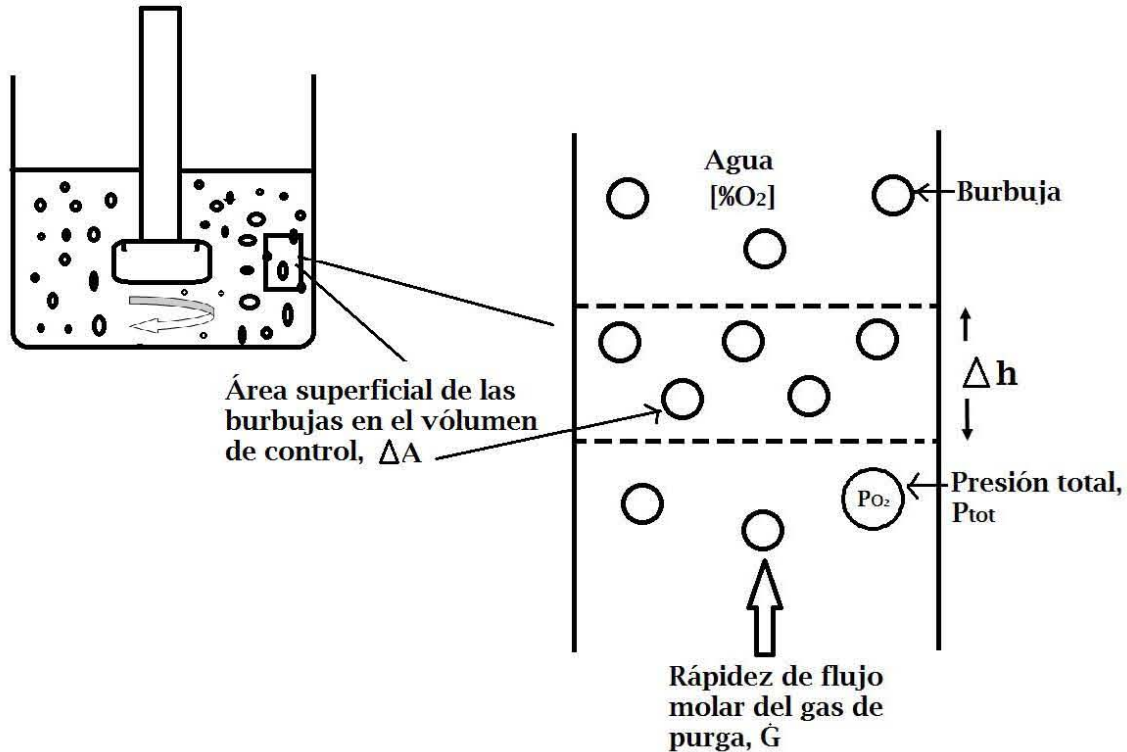


Figura 7. Volumen de control en el reactor con el gas de purga.

Las correlaciones utilizadas para el desarrollo del modelo matemático fueron una exhaustiva investigación de propiedades cinéticas, tales como la densidad del agua (ρ_{H_2O}) y el nitrógeno (ρ_{N_2}), la viscosidad del agua (μ_{H_2O}) y del nitrógeno (μ_{N_2}), la constante de equilibrio ($K_{O_2-H_2O}$), la tensión superficial agua-nitrógeno (σ_{H_2O}) y la difusividad del oxígeno en el agua ($D_{O_2-H_2O}$). Para el cálculo de los coeficientes de transferencia de masa en las técnicas de inyección convencional e inyección novel se utilizaron las correlaciones propuestas por Lemoine [85], las cuales se muestran en la Tabla 6. Los tipos de inyección considerados del trabajo de Lemoine son la inyección por el fondo (GSR, Gas Sparging Reactor) y la inyección a través del rotor (GIR, Inducing Gas Reactor).

Tabla 6. Correlaciones de Lemoine de los coeficientes de transferencia de masa para las dos diferentes técnicas de inyección del gas de purga [85].

Tipo de inyección	Ecuaciones	Unidades
GSR (Inyección novel)	$k \cdot A = 1.383 \times 10^5 \cdot \frac{D_{H_2O-O_2}^{0.500} \cdot \varepsilon^{0.155} \cdot d_b^{0.414}}{\rho_{N_2}^{0.0600}} \cdot \left(\frac{P^*}{V_l}\right)^\delta \cdot U_g^\eta \cdot \exp(-2.011 \cdot Xw)$ $\delta = 7.010 \times 10^{-6} \cdot d_{imp}^{-0.395} \cdot d_r^{4.183} \cdot N^{2.230} \cdot \mu_l^{0.126} \cdot H_L^{-0.658}$ $\eta = 0.420 \cdot d_{imp}^{-2.385} \cdot d_r^{-2.485} \cdot N^{-3.238} \cdot \sigma_l^{-0.261} \cdot H_L^{3.249}$	s^{-1}
GIR (Inyección convencional)	$k \cdot A = 2.564 \times 10^3 \cdot \frac{D_{H_2O-O_2}^{0.500} \cdot \varepsilon^{0.575}}{\rho_{N_2}^{0.060} \cdot d_b^{0.402}} \cdot \left(\frac{P^*}{V_l}\right)^\delta \cdot U_g^\eta \cdot \exp(-2.402 \cdot Xw)$ $\delta = 4.664 \times 10^{-4} \cdot d_r^{0.124} \cdot N^{0.593} \cdot \mu_l^{-0.769}$ $\eta = 9.475 \times 10^{-5} \cdot d_{imp}^{0.363} \cdot N^{0.967} \cdot \rho_l^{-0.470} \cdot \mu_l^{-0.884} \cdot H_L^{-1.440}$	s^{-1}

En la tabla anterior $\left(\frac{P^*}{V_l}\right)$ es la potencia por unidad de volumen, U_g es la velocidad vertical de las burbujas del gas de purga, N es la velocidad de rotación, ε es la fracción retenida del gas de purga, 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 distancia entre el rotor y la superficie libre del baño y d_{imp} es el diámetro del rotor. Los exponentes de las correlaciones anteriores, δ , η , λ , y γ , son parámetros obtenidos mediante análisis estadístico.

2.3 Modelación numérica del flujo de fluidos computacional CFD

La dinámica de fluidos computacional determina una solución numérica para las ecuaciones gobernantes del flujo de fluidos mientras avanza en la solución a través del espacio o tiempo para obtener una descripción numérica del flujo de fluidos completo de interés. El aspecto más importante en esta herramienta es entender la relación entre el flujo y el objetivo del diseño. Los métodos de la dinámica de fluidos están basados en los principios fundamentales de conservación de masa, de cantidad de movimiento y de energía. Estos métodos involucran la solución de las ecuaciones de conservación de masa, momento, y energía en una cantidad finita de puntos discretos en el espacio y en el tiempo dentro del dominio de estudio, denominadas celdas o subdominios. La solución obtenida provee variables de flujo, tales como velocidad, presión, temperatura, densidad, concentración, etc. La disponibilidad y avances en el software comercial hacen más atractiva y confortable el uso de esta herramienta para el entendimiento y diseño de una amplia gama de procesos. Los códigos de CFD (Computational Fluid Dynamics, por sus siglas en inglés) contienen principalmente tres elementos: i) un pre-procesador, ii) un procesador y iii) un post-procesador. En el pre-procesador se diseña la geometría del dominio y se genera la división o discretización del mismo en un número mucho más pequeño de sub-dominios, los cuales no pueden traslaparse, dicha división se conoce como malla y ésta contiene los elementos o volúmenes que conforman el dominio. Además, en el pre-procesamiento se indica el tamaño del sistema en el espacio y en el tiempo, las dimensiones, coordenadas y simetrías del sistema. Asimismo, se determinan los materiales, las ecuaciones gobernantes y las condiciones iniciales y de frontera a emplearse así como algunos parámetros numéricos. Por esto, el pre-procesamiento es la etapa más importante del modelado CFD. En el procesador las ecuaciones diferenciales parciales gobernantes con las condiciones de frontera específicas son resueltas a través de algoritmos y métodos numéricos. En el post-procesador los resultados se analizan a través de gráficos de vectores, contornos u otras ayudas visuales y también se obtienen balances específicos, entre otros resultados.

Existen diferentes formas de resolver las ecuaciones no lineales de Navier Stokes. Entre los métodos más utilizados se encuentran el método de diferencias finitas, el método de volumen finito y el método de elemento finito. El software comercial FLUENT 14.5 utiliza el método de volumen finito. En este método el dominio computacional se divide en un número de pequeños bloques denominados celdas y a través de la discretización del dominio es posible la solución de las ecuaciones diferenciales parciales como un conjunto de ecuaciones algebraicas, las cuales se resuelven con técnicas iterativas. La base central de los métodos de solución es el balance general de una propiedad transportada por unidad de masa y que ésta además se conserva, Φ , dentro del volumen de control. Esta propiedad puede ser la energía (temperatura), la cantidad de movimiento (o las componentes de la velocidad), la masa de un fluido o la concentración de especies químicas. En otras palabras tenemos que:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Velocidad de cambio de} \\ \phi \text{ respecto al tiempo en el} \\ \text{volumen de control} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Convección de } \phi \\ \text{en el volumen de} \\ \text{control} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{Difusión de } \phi \\ \text{en el volumen} \\ \text{de control} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{l} \text{Generación o} \\ \text{disipación de } \phi \text{ en el} \\ \text{volumen de control} \end{array} \right]$$

La teoría de dinámica de fluidos computacional en la cual está basado ANSYS FLUENT está disponible en una extensa serie de estudios [123]. El presente estudio utilizó dicho software para la simulación de la dinámica de fluidos de la desgasificación de aluminio a través de la técnica de rotor inyector y por lo tanto, la teoría base y las ecuaciones de los modelos utilizados fueron seleccionados de la teoría de ANSYS.

Respecto a la simulación numérica del proceso de desgasificación, la complejidad de la geometría de los rotores inyectores requirió de la modelación completa del sistema y se utilizó el método multifásico Euleriano acoplado a la técnica VOF para poder modelar el vórtice formado, así como el método de turbulencia de dos ecuaciones κ - ϵ y la técnica de marcos de referencia múltiples, MFR por sus siglas en inglés. Mediante la técnica MFR, el fluido se dividió en dos zonas, una zona cilíndrica alrededor del cuerpo del rotor inyector, la cual está separada del resto del fluido a través de una interface, y otra zona para el resto del fluido, como se muestra en la Figura 8. En todos los elementos que conforman el interior de la zona cilíndrica alrededor del rotor inyector, la velocidad de rotación es considerada como la velocidad del rotor inyector, mientras que la velocidad del rotor se fija como cero en relación a este marco de referencia. El resto del fluido es considerado como un marco de referencia estacionario. Respecto a la flecha, la parte que se contempla en el marco de referencia perteneciente al rotor inyector, también se considera con velocidad cero, mientras que la parte externa tiene una velocidad de rotación correspondiente a la condición particular del problema. Todas las propiedades se comparten entre las dos zonas en la interface. En el método multifásico Euleriano, las diferentes fases son tratadas matemáticamente como un continuo interpenetrado y las fracciones de volumen de todas las fases se presumen como continuas en espacio y tiempo, y su suma es igual a uno. Entre los métodos disponibles para modelar flujos multifásicos, el método Euleriano es el más adecuado para la modelación de fases dispersas muy finas. Dos sets de ecuaciones de cantidad de movimiento y continuidad son resueltos, uno para cada una de las fases y el acoplamiento se logra a través de la presión y los coeficientes de intercambio entre las fases [124]. El método VOF (Volume of Fluid, por sus siglas en inglés) permite rastrear cada fase del fluido en la interface agua/aire y está diseñado para dos o más fluidos inmiscibles. La formulación del modelo VOF considera que dos o más fases no se encuentran interpenetradas [124]. En la fracción de volumen de control, la fracción de todas las fases suma la unidad. Las zonas para todas las variables y propiedades son compartidas por las fases y representan los valores promedio del volumen, mientras que la fracción volumen de cada una de las fases es conocida en cada posición. Así, las variables y propiedades en cualquier celda son puramente ponderadas de acuerdo a las fracciones de cada una de las fases de una mezcla de esas fases, dependiendo de los valores de la fracción de volumen de cada fase. El acoplamiento del modelo Euleriano al modelo VOF permite la modelación completa de todo el sistema, mostrando la formación del vórtice en la superficie libre del fluido y a la vez la predicción de la cantidad de gas de purga retenido en el sistema, lo cual aproxima mejor la simulación a las condiciones reales del proceso. Respecto a la turbulencia, existen una gran variedad de modelos disponibles de complejidad variable. Estos modelos incluyen desde el modelo simple de longitudes de mezcla hasta modelos más complejos como el de los remolinos de Eddy [125]. El modelo κ - ϵ es el modelo más aceptado entre los dos extremos. Éste es un modelo semi empírico basado en las ecuaciones de transporte para

la energía cinética turbulenta (κ) y su velocidad de disipación (ε). La ecuación de transporte para κ es obtenida de ecuaciones exactas, mientras que la ecuación de transporte para ε es obtenida usando inferencia o razonamiento físico [126]. Las dos ecuaciones de transporte son resueltas a través del dominio para obtener κ y ε . El modelo κ - ε supone que el flujo es totalmente turbulento y que los efectos de la viscosidad molecular son despreciables. Los esfuerzos de Reynolds se presumen proporcionales al gradiente de la velocidad principal donde la constante de proporcionalidad es la viscosidad. El modelo κ - ε fue propuesto por Launder y Spalding en 1972 [126] y desde entonces ha sido de los modelos más utilizados para simular la turbulencia debido a que computacionalmente es económico, robusto y razonablemente preciso para un amplio rango de flujos turbulentos. Aún cuando sólo se puede modelar la turbulencia isotrópica, el modelo κ - ε es en gran medida el modelo de turbulencia más extensamente aceptado y usado.

2.3.1 Suposiciones en el desarrollo del modelo numérico

Debido a la complejidad inherente del proceso y la naturaleza de fenómenos complejos tal como la turbulencia, es de vital importancia establecer suposiciones que permitan simplificar el problema y facilitar la solución del mismo. El modelo fue desarrollado en el software de dinámica de fluidos computacional FLUENT® 14.5, bajo las siguientes suposiciones:

1. Propiedades físicas constantes para ambas fases.
2. La fase líquida se establece como la fase continua y las burbujas de gas como la fase dispersa.
3. La fase líquida se define como un fluido incompresible y newtoniano.
4. Las burbujas del gas de purga inyectado son esferas rígidas y de tamaño constante.
5. El baño líquido se considera isotérmico y se desprecia el calentamiento por fricción, así como los gradientes térmicos.
6. Se aplica el modelo de turbulencia κ - ε solamente a la fase líquida, por considerar turbulenta únicamente dicha fase.
7. Condiciones de no deslizamiento e impermeabilidad en el fondo y paredes del reactor, así como en la flecha y cuerpo del rotor inyector.

2.3.2 Ecuaciones de transporte gobernantes

Considerando un pequeño volumen o elemento de fluido en movimiento se pueden identificar dos cambios principales que ocurren en dicho elemento. En el primero, el elemento se trasladará y posiblemente rotará en el espacio, mientras que en el segundo, este elemento se distorsionará ya sea por un esfuerzo a lo largo de cualquiera de sus ejes ó a través de una distorsión angular que causará que éste cambie de forma. El proceso de traslación es referido como convección, mientras que el proceso de distorsión se relaciona con los gradientes en el campo de velocidad y es un proceso de tipo difusivo. Las ecuaciones gobernantes caracterizan, a lo largo del tiempo, los cambios en el fluido resultantes de los procesos convectivos, difusivos y otras fuentes de la cantidad transportada o conservada. Las ecuaciones de transporte que gobiernan la dinámica de fluidos del proceso se presentan a continuación.

Ecuación general de conservación de masa

A través de la ley de conservación de masa se deduce la ecuación de continuidad, para la fase líquida (*l*):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l) = 0 \quad (2.3.1)$$

Para la fase gas (*g*), la ecuación de continuidad es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) = 0 \quad (2.3.2)$$

Donde \vec{v}_l y \vec{v}_g son las velocidades, mientras que α_l y α_g son las fracciones de la fase *l* y *g*, respectivamente, y ρ es la densidad del fluido.

Ecuación general de conservación de movimiento

La ley de conservación de movimiento se utiliza para calcular los campos de presión y velocidad en el fluido y representa un balance global de la cantidad de movimiento. La ecuación que gobierna esta ley para la fase *l* es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \vec{v}_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{v}_l \vec{v}_l) = -\alpha_l \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_l + \alpha_l \rho_l \vec{g} + \vec{F}_l \quad (2.3.3)$$

Y para la fase *g* es:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g \vec{v}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \vec{v}_g \vec{v}_g) = -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_g + \alpha_g \rho_g \vec{g} + \vec{F}_g \quad (2.3.4)$$

Donde p es la presión estática, $\bar{\tau}_l$ es el tensor de esfuerzos o término difusivo, $\rho \vec{g}$ es la fuerza gravitatoria y \vec{F}_l es el vector de fuerzas externas, el cual representa el intercambio de movimiento entre la fase dispersa y la fase continua y es de gran importancia debido a que el arrastre que ejerce el gas sobre el líquido durante su ascenso promueve en gran medida la agitación del sistema. El valor de dicho término tiene la misma magnitud para ambas fases pero con signo contrario y se calcula según la ecuación (2.3.5). En las ecuaciones anteriores, el tensor de esfuerzos y la transferencia de momento en la interface o vector de fuerzas externas, \vec{F}_l , son significativos para el cálculo correcto del patrón de flujo y la retención de la fase gaseosa.

$$\vec{F}_l = C_f (u_i - u_j) \quad (2.3.5)$$

En la ecuación (2.3.5), el coeficiente de fricción, C_f , es una función del coeficiente de arrastre, C_D , para el cual existe un gran número de correlaciones reportadas [127], más adelante se hará una referencia particular a la formulación utilizada en FLUENT. La diferencia entre la ecuación de conservación de movimiento de la fase líquida y la fase gaseosa radica en el tensor de esfuerzos. Para la fase líquida es igual a la viscosidad efectiva y para la fase gaseosa se iguala a la viscosidad molecular debido a la previa suposición de que sólo se considera turbulencia dentro de la fase líquida. La viscosidad efectiva se define como la suma de la viscosidad molecular más la viscosidad turbulenta, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \quad (2.3.6)$$

Modelo de turbulencia κ - ϵ

En un flujo turbulento la velocidad se puede descomponer en un valor estable principal, U , más un componente fluctuante de velocidad $u'(t)$, lo cual proporciona la velocidad actual o real, $u(t)=U+u'(t)$. En general, es más atractivo caracterizar el flujo turbulento por medio de valores principales de los componentes de la velocidad y la presión (U, V, W, P , etc.) y las propiedades estadísticas de sus respectivas fluctuaciones (u', v', w', p' , etc.). La substitución de la velocidad en términos de los componentes de la velocidad principal y la fluctuación da como resultado la ecuación de Navier Stokes promediada de Reynolds, por sus siglas en inglés RANS. Las ecuaciones de continuidad y momento se muestran a continuación:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho U_i) = 0 \quad (2.3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho U_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho U_i U_j) = -\frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left[\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot U \right] \right] + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) \quad (2.3.8)$$

Los términos adicionales que aparecen en la ecuación (2.3.8) representan los efectos de la turbulencia, y en donde los esfuerzos de Reynolds están representados por $-\rho \overline{u'_i u'_j}$.

En el presente trabajo se utilizó el modelo estándar de turbulencia κ - ϵ , sin embargo FLUENT tiene tres tipos diferentes de modelos κ - ϵ de turbulencia, estos son el modelo estándar κ - ϵ , el modelo RNG κ - ϵ (Renormalization-group) y el modelo Realizable κ - ϵ . Los últimos dos modelos han sido desarrollados basados en el modelo estándar pero con aplicaciones concretas. Mientras que el modelo RNG es aplicable a flujos rotatorios con un amplio rango de números de Reynolds, el término del modelo Realizable significa que satisface ciertas restricciones matemáticas sobre los esfuerzos de Reynolds, y por lo tanto este modelo predice más certeramente el flujo alrededor de jets y flujos que involucran separación de fases.

Como modelo de dos ecuaciones, el modelo de turbulencia κ - ϵ introduce dos ecuaciones de transporte adicionales en el cálculo, una para el cómputo de la energía cinética turbulenta (κ) y otra para la disipación de la energía turbulenta (ϵ). De estas dos variables adicionales, una tercera sirve para calcular la viscosidad turbulenta local. La ecuación de transporte para la energía cinética turbulenta es la siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \kappa) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \kappa \bar{v}_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa} \right) \frac{\partial \kappa}{\partial x_j} \right] + G_\kappa + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_\kappa \quad (2.3.9)$$

Y la ecuación de transporte para la velocidad de disipación de la energía cinética turbulenta es:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \epsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \epsilon \bar{v}_i) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\epsilon} \epsilon + \frac{\epsilon}{\kappa} (G_\kappa + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{\kappa} + S_\epsilon \quad (2.3.10)$$

Donde G_k y G_b representan la generación de energía cinética turbulenta debido a los gradientes promedio de velocidad y a efectos boyantes, respectivamente, y μ_t es la viscosidad turbulenta. Los efectos boyantes se presentan cuando hay gradientes de temperatura y en respuesta a los efectos de la fuerza de gravedad. Y_M es la contribución

a la velocidad global de disipación debido a la dilatación fluctuante en procesos de turbulencia compresibles. S_κ y S_ϵ son términos fuentes definidos por el usuario. $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$ y $C_{3\epsilon}$ son constantes, σ_κ y σ_ϵ son los números de Prandtl para κ y ϵ , respectivamente. Los parámetros estándar del modelo estándar de turbulencia aplican para un amplio rango de flujos turbulentos:

$$G_k = -\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i} \quad (2.3.11)$$

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.3.12)$$

En la ecuación (2.3.11) $\overline{u'_i}$ es el promedio de la fluctuación de la velocidad de la componente i en el tiempo. En la ecuación (2.3.12), Pr_t es el número de Prandtl turbulento que es la razón entre la viscosidad turbulenta, μ_t , y la difusividad térmica turbulenta. Para el modelo κ - ϵ estándar, el número de Prandtl turbulento tiene un valor de 0.85. La componente de la fuerza de gravedad es g_i y β es el coeficiente de expansión térmica. La viscosidad turbulenta, μ_t , representa la relación entre los esfuerzos turbulentos y los gradientes de velocidad, como señala la siguiente ecuación:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \quad (2.3.13)$$

Los valores de $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, C_μ , σ_κ y σ_ϵ son las constantes empíricas asociadas al modelo de turbulencia y se muestra en la Tabla 7 sus respectivos valores.

Tabla 7. Parámetros del modelo de turbulencia.

Parámetros del modelo de turbulencia κ - ϵ estándar		
$C_{1\epsilon}=1.44$	$C_{2\epsilon}=1.92$	$C_\mu=0.09$
$\sigma_\kappa=1.0$	$\sigma_\epsilon=1.3$	

Los valores presentados en la Tabla 7 fueron determinados experimentalmente en un sistema de agua y aire pero se ha comprobado que son aplicables a un rango amplio de sistemas.

2.3.3 Ecuaciones gobernantes en MFR

Una aproximación para la simulación de flujos alrededor de partes móviles como agitadores con aspas consiste en simular un marco de referencia en movimiento que bajo ciertas suposiciones se logra resolver en un estado estacionario. El objetivo principal de los marcos de referencia múltiples (MFR, por sus siglas en inglés) es convertir el movimiento de la parte móvil que está en estado transitorio a un problema más sencillo en estado estacionario siempre y cuando la velocidad de rotación permanezca constante. En FLUENT ANSYS el método de solución por default de las ecuaciones de transporte es un marco de referencia estacionario (o inercial). Sin embargo, algunos problemas pueden ser resueltos ventajosamente en un marco de referencia móvil (o no inercial). Algunos ejemplos de estos problemas son casos con partes móviles como las aspas rotatorias, estatores, etc. En un marco de referencia móvil, las ecuaciones de movimiento se modifican para incorporar los términos de aceleración adicional, los cuales ocurren debido a la transformación de marco de referencia estacionario a móvil. Para algunos problemas, el dominio computacional

entero se mueve y forma parte de un marco de referencia único y es denominado método de marco de referencia único. Para problemas más complejos es necesario utilizar varios marcos de referencia con la combinación de marcos de referencia estacionarios y móviles y el dominio computacional se divide en zonas múltiples con interfaces bien definidas entre dichas zonas. El tratamiento de las interfaces en la técnica de MFR se realiza en estado estable, mientras que si se busca una interacción inestable entre las partes estacionarias y móviles, la técnica de mallas deslizantes es la utilizada.

Las velocidades del fluido transformadas del marco estacionario al marco rotatorio se describen con la siguiente ecuación:

$$\vec{v}_r = \vec{v} - \vec{u}_r \quad (2.3.14)$$

Donde \vec{v}_r es la velocidad relativa, es decir la velocidad desde el punto de vista del marco rotatorio, \vec{v} es la velocidad absoluta y la velocidad de giro, es decir la velocidad debido al marco móvil, y \vec{u}_r está dado por la siguiente ecuación:

$$\vec{u}_r = \vec{\omega} \times \vec{r} \quad (2.3.15)$$

Donde $\vec{\omega}$ es la velocidad angular del marco de referencia rotatorio relativo al marco de referencia estacionario y \vec{r} es la distancia del volumen de control estacionario desde el marco de referencia rotatorio.

Las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento en el marco de referencia rotatorio se formulan de dos diferentes formas, utilizando la velocidad relativa, \vec{v}_r , como la variable dependiente, y se conoce como la *formulación relativa* ó mediante el uso de la velocidad absoluta, \vec{v} , como la variable dependiente y se conoce como *formulación absoluta*. Ambas formulaciones son utilizadas en la solución basada en la presión por FLUENT (pressure based solver), mientras que la formulación de la velocidad absoluta se utiliza en la solución basada en la densidad (density based solver). Las ecuaciones gobernantes de flujo de fluidos en estado estable para un marco de referencia rotatorio en términos de la formulación de la velocidad absoluta se describen a continuación.

Ecuación de conservación de masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{v}_r = 0 \quad (2.3.16)$$

Ecuación de conservación de cantidad de movimiento:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v}_r \vec{v}) + \rho (\vec{\omega} \times \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau} + \vec{F} \quad (2.3.17)$$

La ecuación de conservación de cantidad de movimiento contiene dos términos adicionales de aceleración: la aceleración por la fuerza Coriolis ($2\vec{\omega} \times \vec{v}_r$) y la aceleración debido a la fuerza centrípeta ($\vec{\omega} \times \vec{\omega} \times \vec{r}$). El esfuerzo viscoso se define en la siguiente ecuación:

$$\vec{\tau}_r = \mu \left[(\nabla \vec{v}_r + \nabla \vec{v}_r^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v}_r I \right] \quad (2.3.18)$$

El dominio computacional, utilizando el método de MFR, para el caso específico de este problema se dividió en dos zonas, una estacionaria y la otra rotatoria ó móvil, con una interface separando ambas zonas (Figura 8). La zona rotatoria se resuelve utilizando las ecuaciones de marcos de referencia móviles, mientras que la zona estacionaria se resuelve con el marco de referencia estacionario. La interface entre la zona móvil y estacionaria se resuelve mediante las ecuaciones de transporte presentadas para el modelo de marcos de referencia múltiples (MRF). La zona rotatoria, la cual incluye al rotor y el fluido alrededor del mismo, no se mueve físicamente, es decir, la malla permanece fija en el cómputo. En la interface entre la zona estacionaria y la móvil se desarrolla una transformación del marco de referencia local para permitir que las variables de flujo en una zona puedan ser utilizadas para calcular los fluxes en la frontera de la zona adyacente. En la interface entre el flujo estacionario y móvil se supone una velocidad equivalente. El tratamiento en la interface aplica tanto para la velocidad y sus gradientes, ya que estas cantidades vectoriales cambian con el marco de referencia. Las cantidades escalares, tales como la temperatura, presión, densidad, energía cinética turbulenta, etc., no requieren ningún tratamiento especial y por lo tanto son transferidas localmente sin ningún cambio. En la interface los términos difusionales discretizados en un dominio requieren los valores para velocidades en otro dominio. En el uso de la formulación de velocidad absoluta las velocidades se almacenan en un marco de referencia absoluto en ambas zonas y debido a esto no se requiere transformación alguna en la interface para los vectores de velocidad.

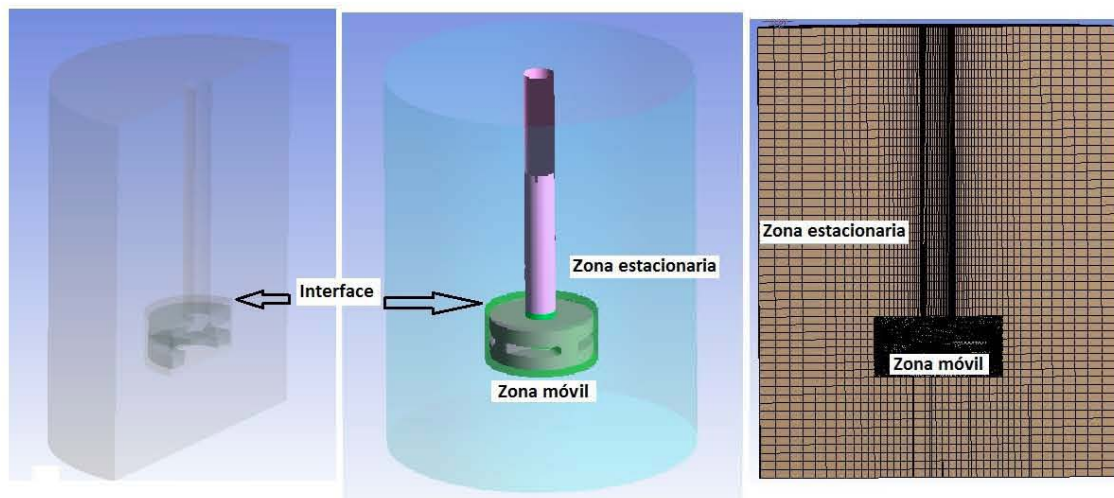


Figura 8. Esquema representativo de la aplicación de la técnica de MFR al dominio de cómputo, incluyendo la discretización del mismo.

2.3.4 Ecuaciones para la modelación de flujos multifásicos

Existen dos aproximaciones para los cálculos numéricos de flujos multifásicos: la aproximación Euleriana-Lagrangiana y la aproximación Euleriana-Euleriana. El modelo de fase discreta Lagrangiano en FLUENT se basa en la aproximación Euleriana-Lagrangiana. En este modelo la fase fluida es tratada como un continuo mediante la resolución de las ecuaciones de Navier Stokes, mientras que la fase dispersa se resuelve a través del seguimiento de un gran número de partículas o burbujas en todo el campo de flujo calculado. La fase dispersa puede intercambiar momento, masa y energía con la fase fluida. En la aproximación Euleriana-Euleriana, las diferentes fases son tratadas

matemáticamente como un continuo interpenetrado y debido a que el volumen de una fase no puede ser ocupado por otras fases se introduce el concepto de fracción de volumen de fase. Estas fracciones de volumen se suponen como funciones continuas de tiempo y espacio y su suma es igual a uno.

En FLUENT están disponibles tres diferentes modelos multifásicos Euleriano-Euleriano: el modelo de volumen de fluido (VOF), el modelo de mezcla (mixture model) y el modelo Euleriano (Eulerian model).

Las ecuaciones en el marco Euleriano (modelo Eulerian) que resuelve FLUENT, se muestran a continuación:

Ecuación de continuidad:

$$\frac{1}{\rho_{rq}} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (2.3.19)$$

Donde ρ_{rq} es la densidad de la fase de referencia, o la densidad promediada de volumen de la fase q^n en el dominio de solución. La solución de la ecuación (2.3.19) para cada fase secundaria en conjunto con la condición de la suma de uno de la fracción de volumen permite el cálculo para la fracción de volumen de la fase primaria. Este tratamiento es común para flujos fluido-fluido y granulares.

Ecuación de momento fluido-fluido

La conservación de momento para una fase de fluido q es:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) + m_{pq} \vec{v}_{pq} - m_{qp} \vec{v}_{qp}) + (\vec{F}_q + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{wl,q} + \vec{F}_{vm,q} + \vec{F}_{td,q}) \quad (2.3.20)$$

Donde \vec{g} es la aceleración debido a la gravedad, \vec{F}_q es la fuerza de cuerpo externo, $\vec{F}_{lift,q}$ es la fuerza de empuje o boyante, $\vec{F}_{wl,q}$ es una fuerza de lubricación de la pared, $\vec{F}_{vm,q}$ es la fuerza virtual de masa, $\vec{F}_{td,q}$ es una fuerza de dispersión turbulenta, p es la presión compartida por todas las fases y K_{pq} es el coeficiente de intercambio de momento entre las fases y \vec{v}_p y \vec{v}_q son las velocidades de las fases.

Para flujos conformados por fluidos, cada fase secundaria se presume en forma de burbujas o gotas, impactando en la asignación de una fase en particular a cada fluido. En flujos donde la cantidad de los fluidos es diferente, el fluido predominante debe ser modelado como fase primaria ya que el fluido disperso se modelará en gotas o burbujas. El coeficiente de intercambio para estos tipos de fluidos, burbuja-líquido o gas-líquido se escribe de manera general de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$K_{pq} = \frac{\rho_p f}{6\tau_p} d_p A_i \quad (2.3.21)$$

Donde A_i es el área interfacial, f es la función de arrastre, la cual se define diferente de acuerdo a los modelos de coeficientes de intercambio y τ_p es el tiempo de relajación de partícula y se define en la siguiente ecuación:

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu_q} \quad (2.3.22)$$

Donde d_p es el diámetro de las burbujas o gotas de la fase p . La mayoría de las definiciones de la función de arrastre, f , incluyen al coeficiente de arrastre, C_D , el cual basa su definición en el número relativo de Reynolds (Re). La función de arrastre difiere entre los modelos de coeficiente de arrastre. En situaciones donde la fase primaria no se encuentra presente dentro del dominio, K_{pq} debe tender a cero y es por ello que de acuerdo a la ecuación (2.3.21) la función de arrastre siempre es multiplicada por el volumen de la fase primaria, q .

Los modelos de coeficiente de arrastre que están disponibles en FLUENT son los siguientes: el modelo de Schiller y Naumann [129], el cual es el método por default utilizado por FLUENT y aceptado para su uso en general en todos los flujos fluido-fluido; el modelo de Morsi y Alexander [130], el cual es el modelo más completo y es aplicable a un amplio rango del número de Reynolds; el modelo simétrico, el cual se recomienda en fases dispersas que se convierten en continuas en otra parte del dominio computacional; el modelo de Grace y el modelo de Tomiyama, ambos modelos se ajustan bien a flujos gas-líquido donde las burbujas pueden tener un amplio rango de formas; y finalmente el modelo de Ishii. En este trabajo se utilizó el modelo estándar manejado por FLUENT, es decir, el modelo de Schiller y Naumann, el cual define la función de arrastre de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$f = \frac{C_D Re}{24} \quad (2.3.23)$$

donde

$$C_D = \begin{cases} 24(1 + 0.15Re^{0.687})/Re & Re \leq 1000 \\ 0.44 & Re > 1000 \end{cases} \quad (2.3.24)$$

Donde Re se refiere al número relativo de Reynolds. El número relativo de Reynolds para la fase primaria q y la fase secundaria p se presenta a continuación:

$$Re = \frac{\rho_q |\vec{v}_p - \vec{v}_q| d_p}{\mu_q} \quad (2.3.25)$$

Fracción volumen

La descripción del flujo multifásico como una interpenetración continua, incorpora el concepto de las fracciones de volumen de cada fase, denotado por α_i . Las fracciones volumen representan el espacio ocupado por cada fase, y las leyes de conservación de masa y momento se deben satisfacer para cada fase individualmente. El volumen de la fase líquida (l), V_l , está definida por:

$$V_l = \int_V \alpha_l dV \quad (2.3.26)$$

Donde:

$$\sum_{p=1}^n \alpha_l = 1 \quad (2.3.27)$$

Método de Volumen de Fluido (VOF)

El modelo de Volumen de fluido (VOF, por sus siglas en inglés, Volume of fluid) es un modelo multifásico diseñado para dos o más fluidos [123]. Está optimizado para el caso donde la interface entre los fluidos inmiscibles es de interés, pero puede ser utilizado en la modelación multifásica en general. En el modelo VOF un sólo conjunto de ecuaciones de momento es compartido por los fluidos y la fracción de volumen de cada uno de los fluidos en cada celda computacional es rastreada a través del dominio. El seguimiento de la(s) interface(s) entre las fases se lleva a cabo mediante la solución de la ecuación de continuidad para la fracción de volumen de una (o más) de las fases. Para la fase q^n (fracción de volumen del fluido), la ecuación tiene la siguiente forma:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (2.3.28)$$

Donde \dot{m}_{qp} es la transferencia de masa desde la fase q hacia la fase p y \dot{m}_{pq} es la velocidad de transferencia de masa de la fase p hacia la q . Por default, el término fuente del lado derecho de la ecuación (2.3.28), S_{α_q} , es cero pero se puede especificar una constante o una fuente de masa definida por el usuario para cada fase. El término fuente puede ser construido para simular la transferencia de masa entre las fases. Las propiedades en las ecuaciones de transporte son determinadas por la presencia de la composición de fases en cada punto del dominio computacional. La ecuación de fracción de volumen no se resolverá para la fase primaria debido a que la fracción de volumen de la fase primaria será calculada basada en la siguiente restricción:

$$\sum_{p=1}^n \alpha_q = 1 \quad (2.3.29)$$

Las propiedades que aparecen en las ecuaciones de transporte se determinan mediante la presencia de las fases que conforman cada volumen de control. Por ejemplo, en un sistema bifásico, donde los subíndices 1 y 2 representan a cada una de las fases, la densidad en cada celda está dada por la siguiente ecuación:

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 \quad (2.3.30)$$

En general, para un sistema de n fases, la fracción de volumen promediada de la densidad de masa (ρ) se expresa de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\rho = \sum \alpha_q \rho_q \quad (2.3.31)$$

Todas las otras propiedades son calculadas de esta manera. Una única ecuación de momento se resuelve a través de todo el dominio computacional y el campo de velocidad resultante se comparte entre las fases. La ecuación de cantidad de movimiento es dependiente de la fracción de volumen de cada fase a través de las propiedades de densidad y viscosidad.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2.3.32)$$

La ecuación anterior declara que la fase dispersa se mueve en el seno del fluido con las propiedades del fluido en cada localización siendo determinadas por la cantidad de cada

fase presente. Una limitante de la aproximación de campos compartidos es que en los casos donde existen grandes diferencias de velocidades entre las fases presentes, la exactitud de las velocidades calculadas cerca de la interface puede verse adversamente afectada.

2.3.5 Condiciones de frontera e iniciales

Los patrones de flujo, la distribución del gas de purga, la velocidad de disipación de la energía cinética turbulenta, así como los contornos de presión en el líquido son determinados mediante la solución del modelo anteriormente descrito. En la Figura 9 se muestra un diagrama de flujo representando el procedimiento de solución. El paso inicial fue la creación de las geometrías en tres dimensiones de los tres diferentes tipos de rotores inyectoros. Para cada geometría se realizó un mallado de celdas tetragonales en la zona del rotor y de celdas hexagonales en el resto del dominio computacional con el fin de obtener una malla no estructurada. La cantidad de celdas varían en las diferentes geometrías, en la Tabla 8 se muestra el tipo de geometría, así como el tipo y cantidad de celdas. El diseño de la geometría y el mallado de la misma se realizaron en los programas Modeling Design y Meshing pertenecientes al paquete ANSYS. En las Figuras 10 y 11 se muestran las diferentes geometrías y el tipo de malla generada.

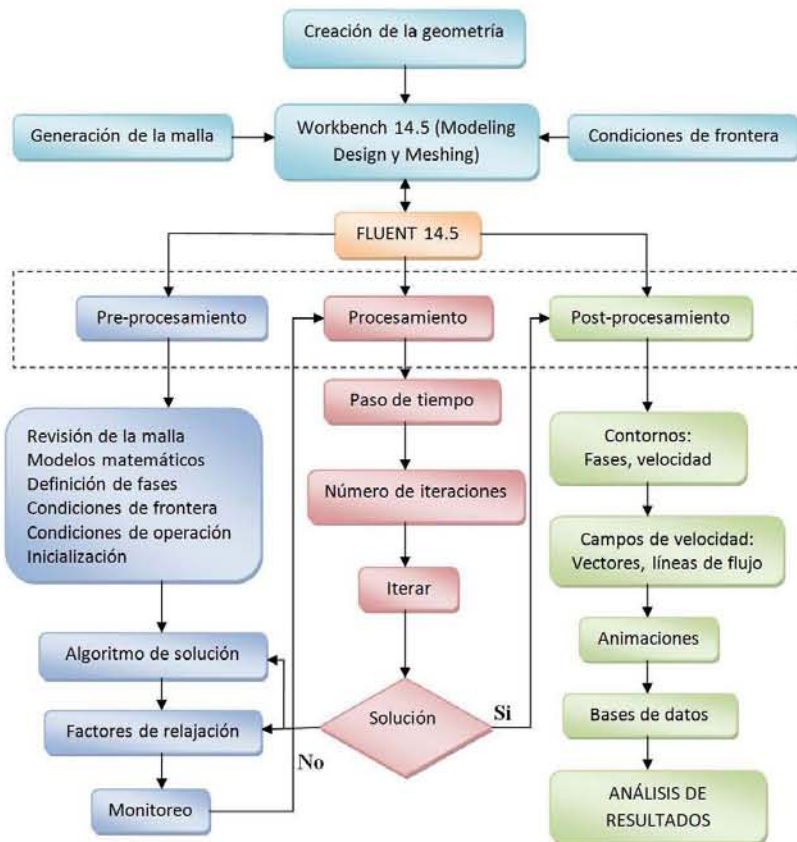


Figura 9. Diagrama de la solución numérica del proceso.

Para obtener la solución del problema anteriormente descrito con las ecuaciones de transporte presentadas, es necesario definir las condiciones de frontera para las derivadas espaciales, así como las condiciones iniciales para las derivadas temporales.

Un marco de referencia que rota con la velocidad angular deseada se utiliza para modelar la frontera entre la zona de fluido alrededor del rotor inyector y la malla de la interface. Una condición de frontera similar se impone en una parte de la flecha del rotor. Por otro lado, una pared que rota con momento angular de cero, relativa al marco de referencia, es utilizada para modelar la condición de frontera en la superficie del rotor y la salida de gas. En la superficie libre se impone la presión atmosférica y en esta frontera es posible el intercambio de aire hacia adentro o fuera del sistema y las paredes del tanque (fondo y pared) se declaran como paredes estacionarias. Todas las otras superficies se suponen con condiciones de no deslizamiento e impermeabilidad, así como cero turbulencia donde los esfuerzos cortantes son aproximados mediante una función de pared semi-empírica. En los puntos de inyección tanto convencional como novel, el gas entra con una velocidad axial. En la Figura 11 se esquematiza las condiciones de frontera del sistema. En la Tabla 9 se muestran las principales variables de operación que caracterizan la simulación numérica del proceso.

Los cálculos que implican sólo agitación del reactor con el rotor inyector se realizaron en estado estable, mientras que los cálculos que incluyen la inyección del gas de purga se realizaron en estado transitorio. Las soluciones de los cálculos en estado estable fueron utilizadas como condiciones iniciales de flujo para los cálculos en estado transitorio. Todas las condiciones de frontera utilizadas para obtener la solución en estado estable fueron retenidas en la solución en estado transitorio multifásica, excepto las condiciones de frontera usadas para modelar la inyección del gas de purga en los puntos de inyección característicos de cada cálculo. La condición de frontera utilizada en la inyección de gas en el fluido consistió en un cálculo en magnitud de velocidad del flujo de gas (velocity inlet) y la fracción de volumen se fijó en uno, es decir, en el punto de salida del gas la fase está formada únicamente por dicho gas. En el cálculo de la velocidad de inyección del gas se presume que el gas se comporta idealmente.



Figura 10. Geometrías realizadas para los tres tipos de rotores utilizados en la simulación numérica; rotor estándar, rotor estándar muescado y rotor nueva propuesta de izquierda a derecha, respectivamente.

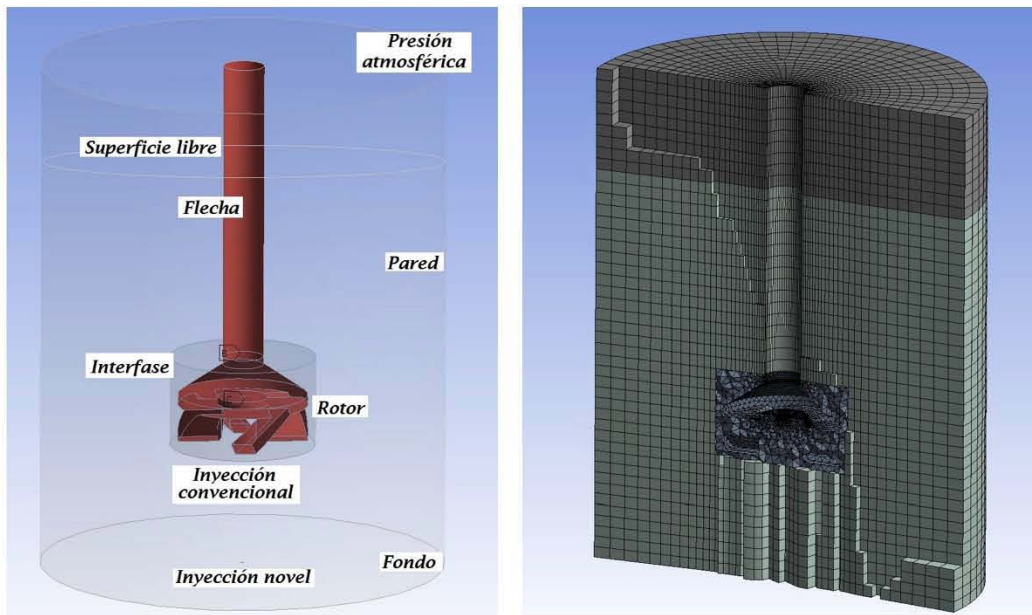


Figura 11. Condiciones a la frontera del sistema y tipo de malla generada; hexaédrica para el fluido estático y tetraédrica para el fluido rotativo.

Tabla 8. Características de las diferentes mallas para los tres rotores simulados.

Geometría	Elementos		Total
	hexaédricos	tetraédricos	
Rotor estándar	250,000	70,000	320,000
Rotor estándar muescado	275,000	75,000	350,000
Rotor diseño propuesto	300,000	85,000	385,000

Tabla 9. Resumen de los principales variables de operación que caracterizan la Simulación numérica.

<i>Característica</i>	<i>Descripción</i>
<i>Tipo de fluido</i>	<i>Incompresible, Newtoniano</i>
<i>Tipo de flujo</i>	<i>Turbulento</i>
<i>Número de Reynolds</i>	<i>>155,000</i>
<i>Modelo de turbulencia</i>	<i>k-ε</i>
<i>N</i>	<i>290 y 580 rpm</i>
<i>Temperatura del fluido</i>	<i>25° C</i>
<i>Dimensiones del reactor</i>	<i>Diámetro 0.25 m., altura 0.5 m</i>
<i>Puntos de inyección</i>	<i>Uno (convencional o novel)</i>

2.3.6 Algoritmo de solución

La simulación numérica se desarrollo a través del código comercial de dinámica de fluidos computacional FLUENT ANSYS 14.5. Las simulaciones se llevaron a cabo en un equipo de cómputo de escritorio marca Mac core Intel, Core i7 de 3.4 GHz. La malla generada por el programa Modeling Design de ANSYS tiene la particularidad de que es una malla no estructurada debido a los elementos tetraédricos y hexaédricos utilizados en la misma. De acuerdo a las características propias de flujo multifásico se utilizó el

modelo Euleriano acoplado a la técnica de VOF para poder simular tanto la fase dispersa del gas inyectado como la formación del vórtice en la superficie libre. Asimismo, la técnica de MFR fue utilizada para la simulación del movimiento del rotor. Las ecuaciones de dinámica de fluidos sin inyección del gas de purga fueron resueltas primero en estado estable. Bajo la convergencia de estas ecuaciones, la introducción de la fase gaseosa de la inyección del gas de purga se realizó en estado transitorio. Los criterios de convergencia para todas las variables se mantuvieron en 1×10^{-5} . El algoritmo SIMPLE fue utilizado para resolver las ecuaciones gobernantes en todos los casos. Los valores de relajación para todas las variables fueron los valores de default utilizados por FLUENT. En la Tabla 10 se muestran las características del método de solución.

Tabla 10. Resumen de los principales parámetros del método de solución utilizado en la Simulación numérica.

<i>Característica</i>	<i>Descripción</i>
<i>Modelos de solución flujos multifásicos</i>	<i>Euleriano acoplado a VOF</i>
<i>Modelo de turbulencia</i>	<i>κ-ϵ</i>
<i>Método de resolución de ecuaciones</i>	<i>Método de volumen finitos</i>
<i>Algoritmo de resolución de ecuaciones</i>	<i>SIMPLE</i>
<i>Discretización espacial</i>	
<i>Gradiente</i>	<i>Least Squares Cell Based</i>
<i>Momento</i>	<i>Second order Upwind</i>
<i>Fracción de Volumen</i>	<i>QUICK</i>
<i>Energía cinética turbulenta</i>	<i>Second order Upwind</i>
<i>Velocidad disipación energía cinética turbulenta</i>	<i>Second order Upwind</i>
<i>Formulación transiente</i>	<i>Primer orden implícito</i>
<i>Factores de relajación</i>	<i>Por default</i>
<i>Criterios de convergencia</i>	<i>1e-05 para todos los residuales</i>
<i>Marco de referencia</i>	<i>Absoluto</i>
<i>Número de pasos de tiempo</i>	<i>20000</i>
<i>Intervalo de tiempo de paso de tiempo</i>	<i>0,001 segundos</i>
<i>Número de iteraciones por paso de tiempo</i>	<i>30</i>
<i>Número de elementos</i>	<i>≈400 000</i>
<i>Tipos de elementos</i>	<i>Hexaédricos y tetraédricos</i>

2.4 Planta piloto

Se realizaron pruebas a escala piloto para estudiar la cinética de eliminación de hidrógeno disuelto en aluminio puro comercial (99.5% de pureza), utilizando la técnica de rotor inyector para evaluar tres diferentes diseños geométricos de rotores mediante la inyección de gas argón de grado industrial (99.9%). En la Figura 12 se muestra el arreglo experimental utilizado para las pruebas de desgasificado de aluminio. Se utilizó un horno de crisol con quemador de gas y con una chimenea alejada del fundido para extraer los gases de combustión. Mediante la agitación continua y la atomización directa de agua caliente con una pistola de pintura se creó un ambiente de abundante humedad que introdujo el hidrógeno al aluminio líquido. La velocidad de rotación utilizada del rotor-inyector se estableció en 290 RPM y el flujo de argón en 10 L/min para las tres

diferentes geometrías de rotores. Estas variables permanecieron fijas para establecer únicamente el efecto de cambio de diseño geométrico del rotor inyector. La medición de hidrógeno disuelto en el aluminio se realizó con un analizador AISCAN®. La velocidad de rotación se verificó con un tacómetro digital.

2.4.1 Procedimiento experimental

El procedimiento experimental fue el siguiente: se realizó la fusión de aluminio a una temperatura aproximada de 780°C, posteriormente se gasificó el fundido con la atomización de agua sobre el aluminio líquido hasta alcanzar la concentración inicial de hidrógeno, $[H]_0$. La concentración de hidrógeno en el aluminio se midió con el equipo AISCAN, introduciendo para ello la probeta y termopar propios del equipo en el fundido estático y registrando la cantidad inicial de hidrógeno en el fundido. El equipo AISCAN para medir hidrógeno en aluminio líquido es muy preciso por su técnica, basada en establecer equilibrios termodinámicos y por lo tanto, requiere de un tiempo mínimo de residencia del sensor dentro del fundido para obtener la cantidad de hidrógeno disuelto. Este tiempo de residencia supera los tres minutos e impide medir el hidrógeno de manera continua conforme se realiza el desgasificado. Debido a lo anterior, se realizaron desgasificados a distintos tiempos, midiéndose el contenido de hidrógeno después de cada tiempo de desgasificado. Se inició con el proceso de desgasificado mediante la introducción en el baño líquido del rotor hasta la altura indicada con el flujo de inyección de argón por el primer lapso de tiempo predeterminado de 1 minuto. Posteriormente, se retiró el rotor y la flecha y se midió la concentración de hidrógeno en el fundido estático con el equipo AISCAN. Este procedimiento se repitió para tiempos de desgasificado de 3 y 10 minutos, para lo cual se tuvo que regasificar el fundido al mismo nivel inicial en cada prueba.

En la Tabla 11 se detallan las dimensiones principales del equipo piloto. En la Figura 13 se muestran las relaciones de dimensiones de la planta piloto, así como del rotor inyector, mientras que en la Figura 14 se muestran los tres diferentes diseños geométricos de grafito del rotor-inyector.

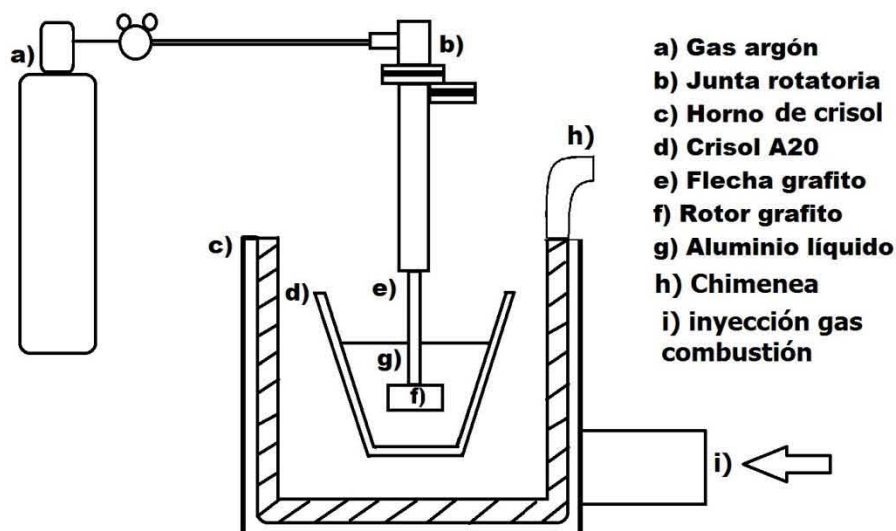


Figura 12. Arreglo experimental utilizado para las pruebas a escala piloto.

Tabla 11. Dimensiones principales de la planta piloto.

	Diámetro (m)	Altura (m)	Volumen total (m ³) $V = \frac{1}{3} \pi \cdot h \cdot (R^2 + r^2 + R \cdot r)$	Volumen de Aluminio líquido (m ³)	Aluminio (Kg)	Altura del rotor, h, (m)
Crisol A20	0,145	0,20	0,00321	0,001863	5,027	0,035
Flecha	0,0265	10,5	---	---	---	
rotor	0,045	0,0205	---	---	---	

Nota: El volumen del crisol se realiza para un cono truncado invertido, donde radio superior es R igual y el radio inferior es r.

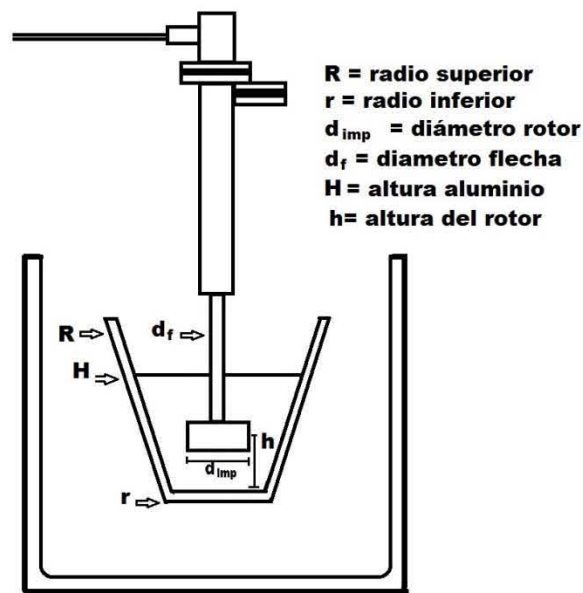


Figura 13. Relaciones de dimensiones de la planta piloto.



Figura 14. Diseños geométricos de grafito del rotor inyector utilizado en la planta piloto.

También se debe señalar que el principal reto durante esta experimentación fue mantener la cantidad inicial de hidrógeno y la temperatura inicial al mismo nivel. La *cantidad inicial de hidrógeno* que se esperaba encontrar en el aluminio líquido fluctuó en los experimentos debido a las condiciones atmosféricas y a la forma de introducir el hidrógeno dentro del fundido, ya que en el primer experimento se utilizó un vaporizador con una baja potencia de inyección. Así mismo, *la temperatura inicial* fue determinante en las concentraciones iniciales de hidrógeno, sin embargo fue un parámetro de operación muy difícil de controlar debido al quemador y al diseño del horno, ya que aún después de alcanzar la temperatura de trabajo, el fundido presentaba un incremento de temperatura difícil de controlar, esto debido a que el horno carecía de un sistema fino de control de temperatura. Inicialmente se planeaba trabajar con una ventana de 30 grados de temperatura, sin embargo, sólo al final se pudo aproximar dicho control al implementar la medición de la temperatura de cada 2 a 5 minutos con un termopar adicional. En las Figuras 15, 16 y 17 se muestran fotos de la planta piloto en funcionamiento, del analizador AISCAN en funcionamiento dentro del fundido, así como de los procedimientos de control de temperatura y regasificación del fundido.



Figura 15. Dispositivo AISCAN en funcionamiento dentro del horno con aluminio líquido.



Figura 16. Proceso de degasificación de aluminio con el rotor inyector y la inyección del gas de argón de purga.



Figura 17. Introducción de termopar para control de la temperatura y atomización directa en el horno con pistola de pintura de agua caliente para la re-introducción del hidrógeno al fundido.

Capítulo III

Resultados y análisis de resultados

3.1 Modelo físico agua-oxígeno

A continuación se muestran los resultados obtenidos en el modelo físico de agua. En las Figuras 1 y 2 se muestran las fotografías de los tres rotores probados en este trabajo utilizando la técnica de inyección convencional (Figura 1) y la inyección novel (Figura 2), respectivamente. En estas figuras se puede apreciar la distribución y tamaño de las burbujas del gas de purga de una forma cualitativa en los tres tipos de rotores utilizados, así como en las diferentes condiciones de operación. En las imágenes correspondientes a los casos con altas velocidades de agitación se observa una mayor cantidad de burbujas con tamaño menor, las cuales se encuentran mejor distribuidas en todo el volumen del reactor, en comparación con los casos con menor velocidad de agitación. Al aumentar el flujo de gas inyectado, también se observa un aumento en la concentración de burbujas en el reactor. El mayor tamaño de burbujas dentro del reactor se observa a bajas velocidades de agitación y altos flujos de gas (290 RPM y 40 L/min), en donde dicha concentración de burbujas se centra principalmente en el cuerpo de la flecha y del rotor sin llegar a las paredes del reactor. En lo que respecta al tipo de inyección de gas utilizada no se aprecian grandes diferencias entre ambas formas de inyectar el gas, aunque de manera cualitativa se aprecia que al aumentar el flujo de gas inyectado y la velocidad de agitación se observa mayor cantidad de burbujas, así como una mejor distribución de las mismas, sobre todo para el rotor estándar muescado y para la nueva propuesta de rotor. Finalmente, la mayor diferencia en las figuras en discusión, es el tipo de rotor utilizado. De acuerdo a las imágenes, la nueva propuesta de rotor tiene una mayor potencia de agitación al mostrar la mayor concentración de burbujas de menor tamaño. Se debe recordar que burbujas finas uniformemente distribuidas, aumenta el área superficial burbuja-líquido y acelera el desgasificado.

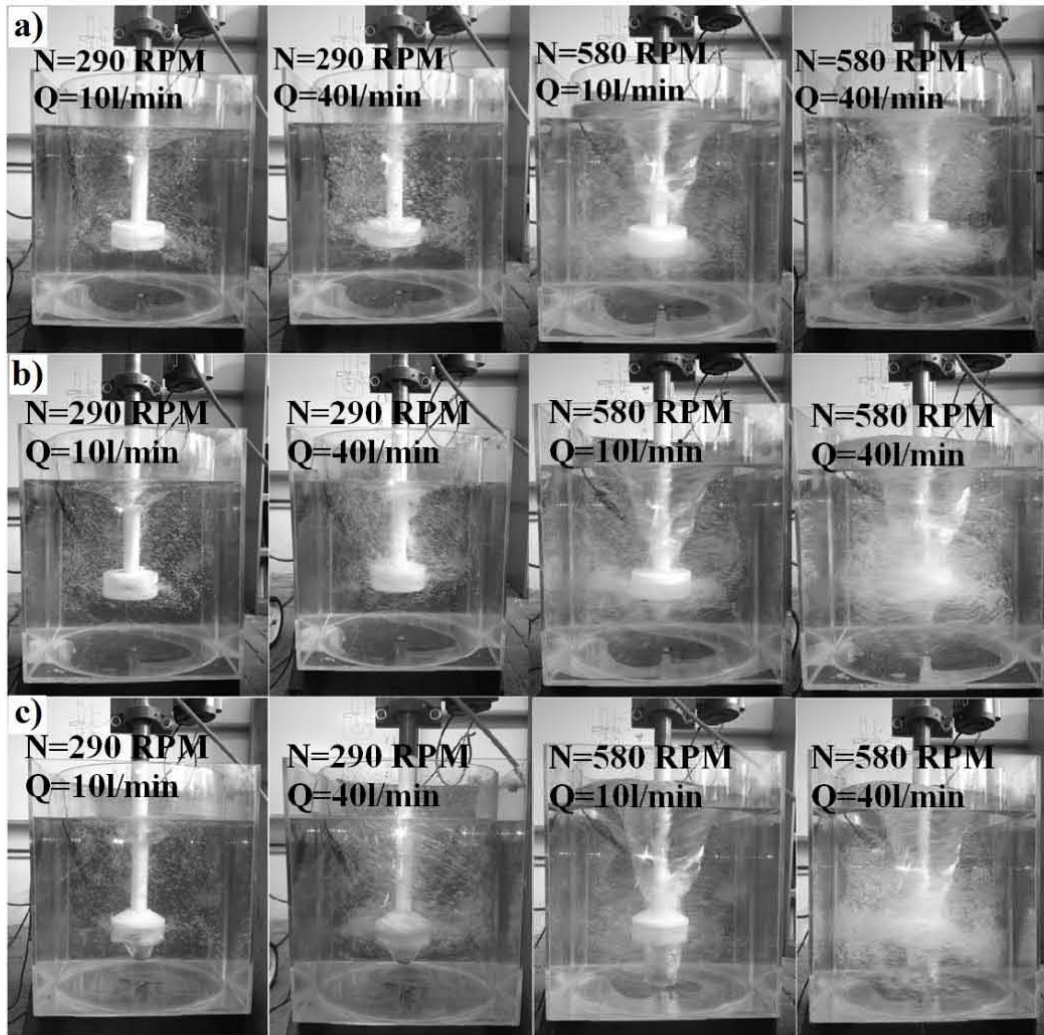


Figura 1. Imágenes de la desgasificación en el modelo físico de agua utilizando *inyección convencional* en los tres diferentes tipos de rotores utilizados: a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado y c) nueva propuesta de rotor.

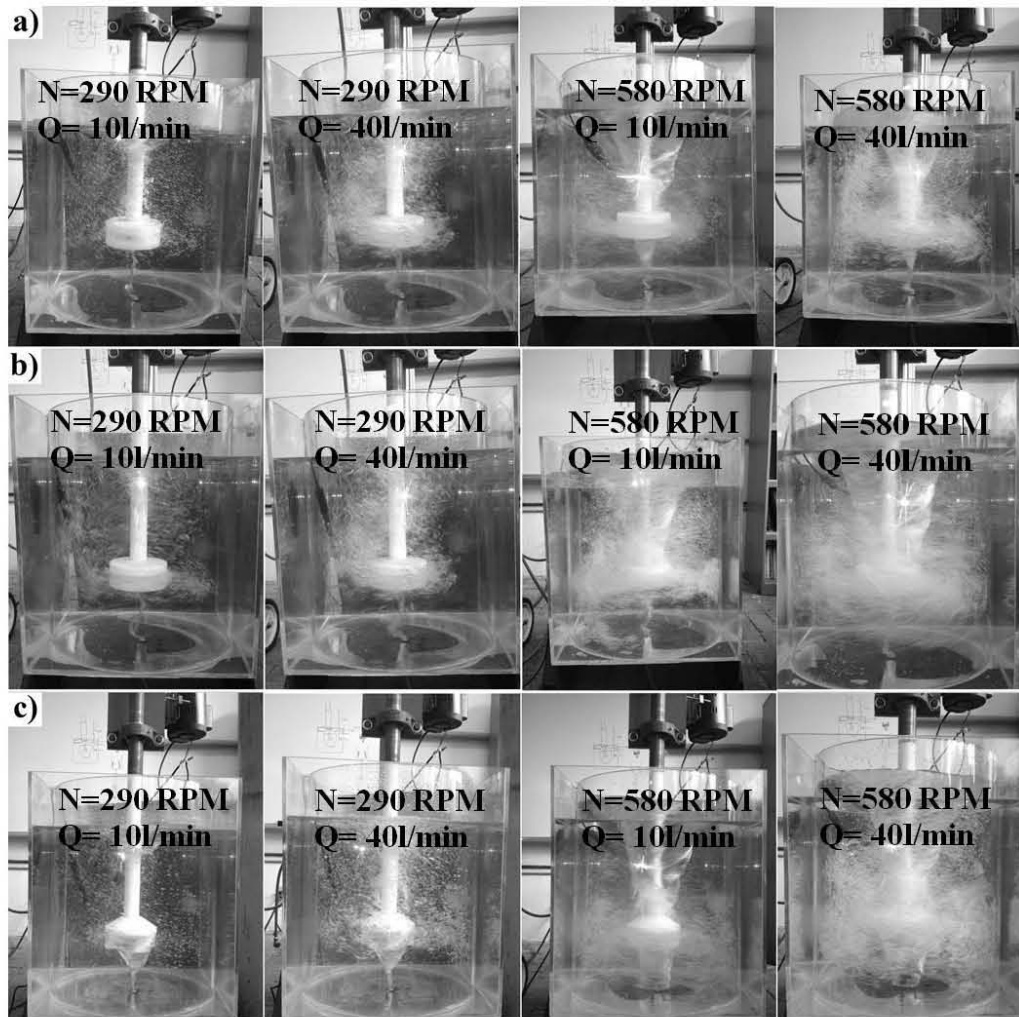


Figura 2. Imágenes de la desgasificación en el modelo físico de agua utilizando *inyección novel* en los tres diferentes tipos de rotores utilizados: a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado y c) nueva propuesta de rotor.

En las Figuras 3, 4 y 5 es posible observar la evolución del contenido de oxígeno disuelto en agua en forma adimensional (concentración de oxígeno instantánea, $[O_2]$, dividida entre la concentración de oxígeno inicial, $[O_2^*]$) en función del tiempo para el rotor estándar (Figura 3), estándar muescado (Figura 4) y la nueva propuesta de rotor (Figura 5), respectivamente. En dichas imágenes se grafican comparativamente los dos tipos de inyección de gas de purga utilizadas; los símbolos blancos se refieren a la inyección convencional, mientras que los símbolos oscuros son para la inyección novel o por el fondo del reactor. Estas figuras representan la cinética de eliminación del oxígeno del agua utilizando nitrógeno como gas de purga. Los menores tiempos de desgasificado se alcanzaron con altas velocidades de agitación y altos flujos de gas de purga inyectado (580 RPM y 40 l/min) para los tres rotores utilizados, mientras que los tiempos más largos de desgasificación se obtuvieron utilizando bajos flujos de gas y bajas velocidades de agitación (290 RPM y 10 l/min). El rotor estándar (Figura 3) obtuvo el tiempo más corto de desgasificación con 580 RPM y 40 l/min, siendo éste de 330 segundos para la inyección convencional y en 315 segundos para la inyección novel. El rotor estándar muescado (Figura 4) obtuvo su mejor cinética de desgasificado con las mismas condiciones que el rotor anterior en un tiempo de 270 segundos tanto para la inyección convencional como para la novel. La nueva propuesta de rotor (Figura

5) mostró ser el más eficiente en la cinética de desgasificación de todos los rotores probados, alcanzando la completa remoción del oxígeno en 225 segundos para la inyección convencional y en 270 segundos para la inyección novel en las condiciones de 580 RPM y 40 l/min. En lo que concierne a las técnicas de inyección utilizadas, se observa que para el rotor estándar y la nueva propuesta de rotor existe una leve mejoría para la inyección novel para todos los casos presentados, aunque es mínima la mejora de la inyección por el fondo con respecto a la inyección convencional a través del rotor. En el rotor estándar muescado se observa que la inyección novel propicia una cinética de desgasificado más rápida para los casos de bajas velocidades de rotación y ambos flujos de gas (290 RPM con 10 y 40 l/min). Para este mismo rotor es posible observar un comportamiento particular para la condición de alta velocidad de rotación y bajo flujo de gas inyectado (580 RPM y 10 l/min) para ambos tipos de inyección, donde la curva de desgasificación adopta un comportamiento asintótico, presentando las peores condiciones de desgasificación. Esto puede ser explicado debido a que la alta turbulencia generada y el gran tamaño del vórtice formado por la agitación promueven la entrada de oxígeno de la atmósfera a través de la superficie libre y la desgasificación de las burbujas del gas de purga es anulada por la reabsorción del oxígeno atmosférico en la superficie libre.

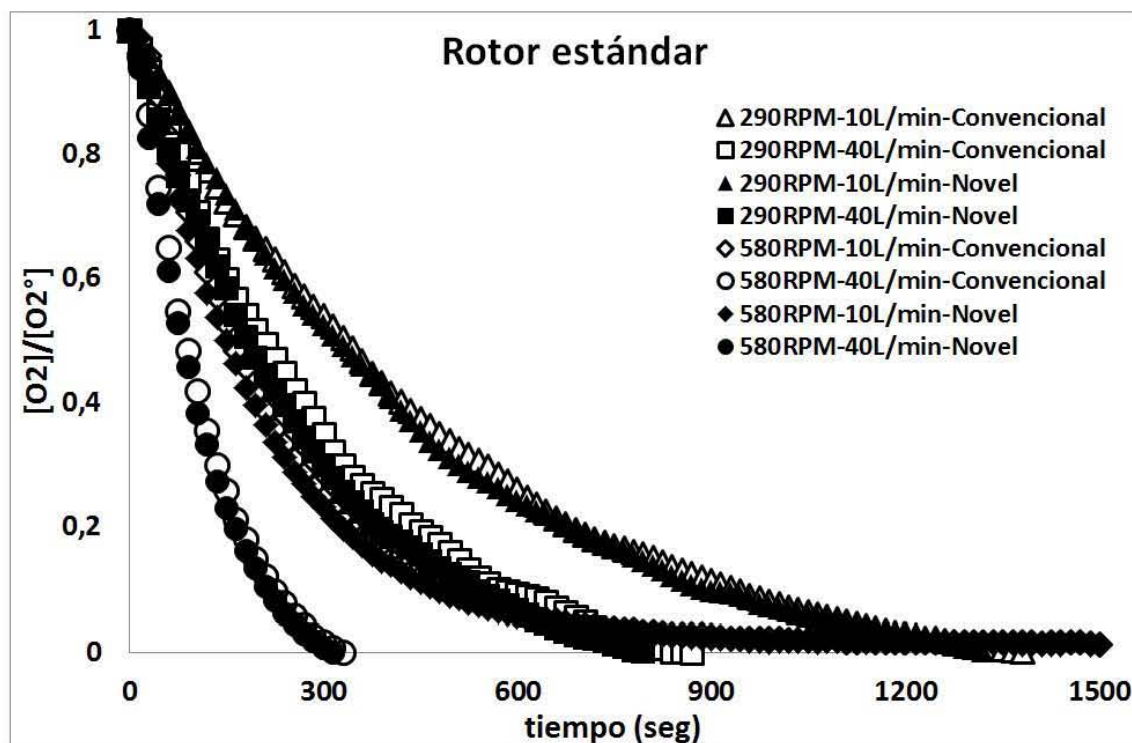


Figura 3. Curvas de desgasificación para el rotor estándar.

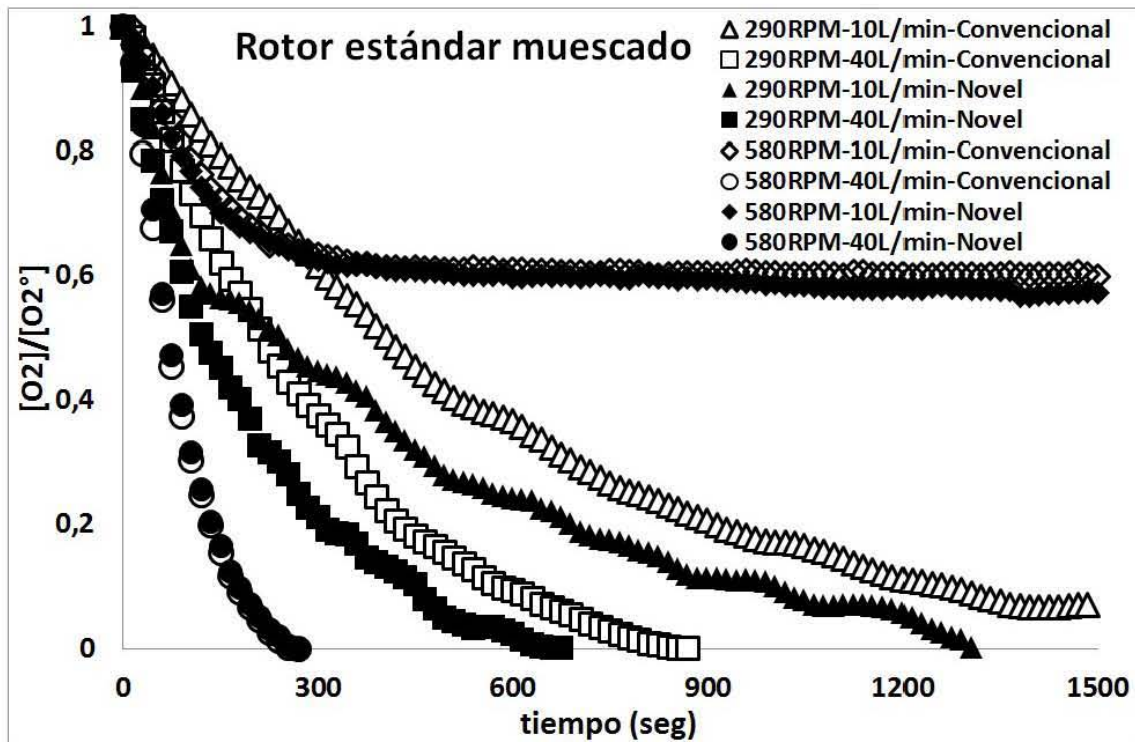


Figura 4. Curvas de desgasificación para el rotor estándar muescado.

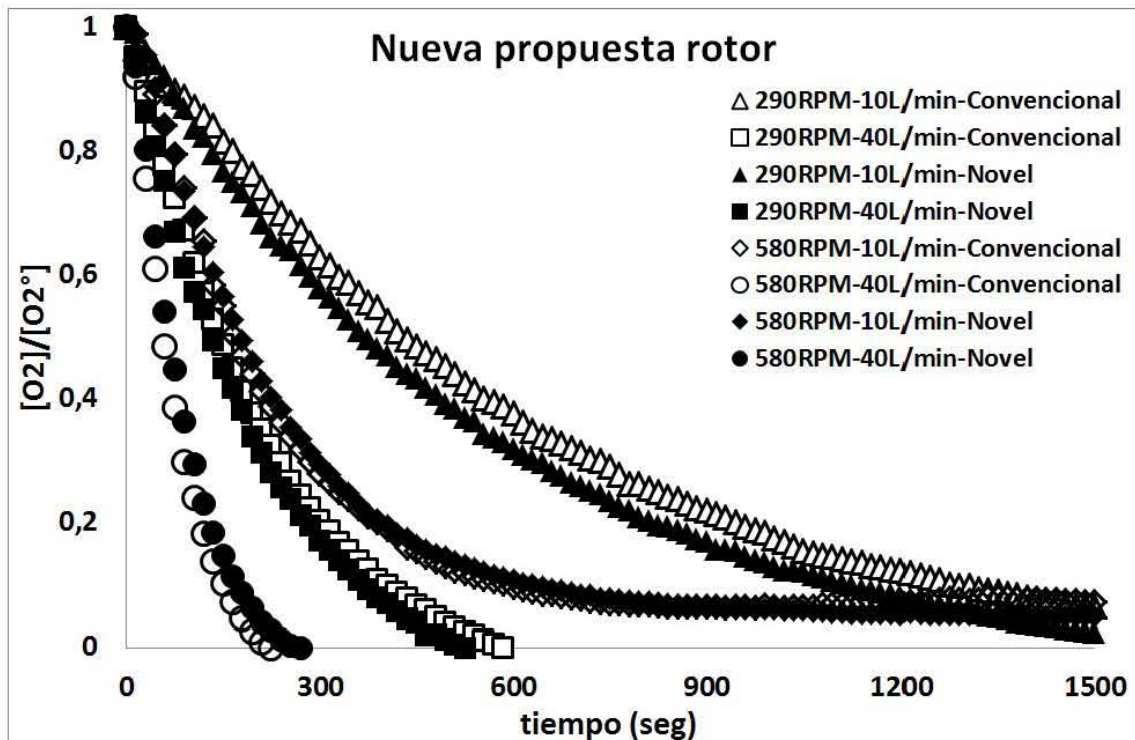


Figura 5. Curvas de desgasificación para la nueva propuesta de rotor.

3.1.1 Constante de Transferencia de masa experimental, $K_m A_b$

Para la obtención de la constante de transferencia de masa multiplicado por el área interfacial de cada una de las curvas de desoxidación experimentales presentadas en la sección anterior, se supuso que el comportamiento cinético de estas curvas de desgasificado se ajusta a la ecuación cinética de primer orden mostrada a continuación:

$$\frac{[O_2]}{[O_2^0]} = a \exp(-bt) \quad (3.1)$$

En donde b contiene los parámetros cinéticos $k_m A_b$. Como resultado del ajuste de las curvas experimentales a la ecuación cinética antes mencionada se obtienen los coeficientes de transferencia de masa multiplicados por el área interfacial presentados en la Tabla 1, donde dichos ajustes mostraron una correlación superior a 0.99 en todos los casos. En la Figura 6 se muestran la manera en que estos coeficientes de transporte de masa de la Tabla 1 varían para cada una de las condiciones específicas. Se confirma que el desgasificado más rápido se da con velocidades de rotación y flujos altos y que el desgasificado más lento son revoluciones de rotor y flujos bajos, mientras que el rotor nuevo es el mejor de los 3 rotores en cuanto a acelerar el desgasificado.

Tabla 1. Parámetros cinéticos obtenidos mediante el ajuste de los datos experimentales (Ecuación 3.1).

Exp.	Flujo de gas N ₂ , Q (l/min)	Velocidad Rotación, N (RPM)	Tipo de inyección	Parámetro cinético, $k_m A_b$		
				Rotor Estándar	Rotor Estándar Muescado	Rotor Nuevo Diseño
1	10	290	Convencional	0.001962039	0.001683546	0.00151058
2	40	290	Convencional	0.003200626	0.003024863	0.004430711
3	10	290	Novel	0.001895595	0.001615186	0.001407070
4	40	290	Novel	0.003170811	0.003289822	0.003404950
5	10	580	Convencional	0.004982258	0.008442724	0.005080006
6	40	580	Convencional	0.007507825	0.009575505	0.011056432
7	10	580	Novel	0.004294439	0.006694767	0.004172758
8	40	580	Novel	0.006527656	0.008795546	0.008342745

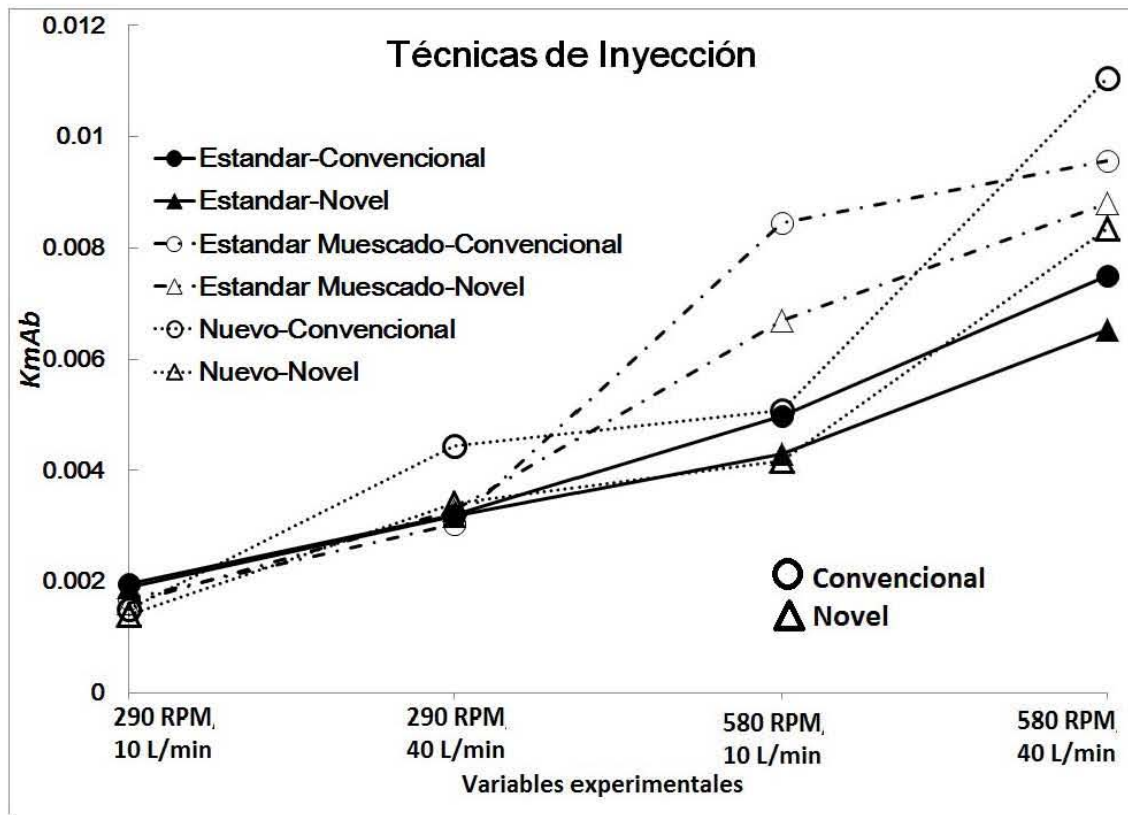


Figura 6. Coeficientes de transporte de masa, $k_m A_b$, para los tres diferentes tipos de rotores utilizados en función de las variables del proceso.

3.1.2 Eficiencia en el consumo de gas (ECG)

El consumo de gas de purga representa un importante costo operacional en el proceso de desgasificado en la fundición y en consecuencia es una variable de proceso que se desea optimizar para minimizar el consumo de gas, que junto con la rapidez de desgasificado impactarán en el costo de operación y en la productividad del proceso.

Se determinó la eficiencia en el consumo del gas de purga, e , para cada experimento y para cada rotor, definiéndola como el volumen total del gas de purga necesario para eliminar el 90% del oxígeno disuelto, como se describe en la siguiente ecuación:

$$e = \frac{([O_2]_0 - [O_2]_{0.1})}{V_{N_2}} \quad (3.2)$$

Donde $[O_2]_0$ es la concentración inicial de oxígeno y $[O_2]_{0.1}$ es el 10% del contenido inicial de oxígeno, ambos en ppm, mientras que V_{N_2} está en litros y es el volumen de nitrógeno requerido para reducir el 90% de oxígeno. Las unidades de e son ppm O_2 /L N_2 . El volumen de nitrógeno empleado para reducir el 90% de la concentración inicial de oxígeno, proveniente del modelo se puede calcular como:

$$V_{N_2} = -\frac{\ln(0.1) \cdot M \cdot P_T \cdot K}{100 \cdot f_{O_2} \cdot Z \cdot MW_{O_2}} \quad (3.3)$$

Donde V_{N_2} es el volumen de nitrógeno consumido en litros, 0.1 proviene de la relación entre la concentración de oxígeno final (90% de la concentración inicial de oxígeno

removida) dividido por la concentración inicial de oxígeno, M es la masa del agua en kg, P_T es la presión total en atmosferas, K es la constante de equilibrio para el equilibrio entre el oxígeno disuelto en el agua y el oxígeno gaseoso, f_{O_2} es el coeficiente de actividad henriano del oxígeno disuelto en agua, MW_{O_2} es la masa molecular del oxígeno en $\frac{kg}{kmol}$. También es fácil obtener las eficiencias en el consumo de gas experimentales. Los volúmenes de gas consumidos para alcanzar el 90% de desgasificado obtenidos experimentalmente requieren conocer el tiempo necesario en alcanzar ese 90% de desgasificado y multiplicar ese tiempo por el flujo de gas para obtener el volumen de nitrógeno consumido en desgasificar al 90% al baño. Las concentraciones iniciales con unidades en ppm de oxígeno disuelto se conocen para cada experimento midiendo la composición inicial de oxígeno en saturación antes de iniciar el purgado de nitrógeno, las cuales se reportan en la Tabla 2, y consecuentemente la concentración al 90% de desgasificado se obtiene multiplicando la concentración inicial de oxígeno por 0.1. En esta Tabla 2 también se muestran otros datos de interés práctico como el tiempo requerido para alcanzar un 90 % de desgasificado y el volumen de nitrógeno usado para alcanzar el citado nivel de desgasificado.

Tabla 2.- Concentraciones iniciales de oxígeno disuelto, al 90 % de desgasificado, y tiempo total para 90 % de desgasificado para cada uno de los 3 rotores empleados en este estudio y con todas las diferentes condiciones experimentales.

Variables	Rotor Estándar				Rotor Muescado				Rotor Nuevo Diseño			
	[O ₂] ₀	[O ₂] _{0.1}	Tiempo 90% (s)	Volum en N ₂ (L)	[O ₂] ₀	[O ₂] _{0.1}	Tiempo 90% (s)	Volum en N ₂ (L)	[O ₂] ₀	[O ₂] _{0.1}	Tiempo 90%(s)	Volum en N ₂ (L)
290 RPM 10 LPM Convencional	6.2	0.62	934.6	155.77	5.87	0.587	1005	167.5	5.95	0.595	1110	185
290 RPM 40 LPM Convencional	5.75	0.575	572	381.33	5.92	0.592	452.3	301.53	5.86	0.586	367.5	245
290 RPM 10 LPM Novel	6.1	0.61	885	147.5	6.14	0.614	1350	225	6.0	0.6	1395	232.5
290 RPM 40 LPM Novel	6.07	0.607	535.7	357.13	6.19	0.619	510	340	6.04	0.604	521.5	347.66
580 RPM 10 LPM Convencional	6.14	0.614	490.8	81.8	6.18	0.618	Inf	#¡VALOR!	6.18	0.618	630	105
580 RPM 40 LPPM Convencional	6.17	0.617	242.6	161.73	6.0	0.6	187.2	124.8	6.25	0.625	172.5	115
580 RPM 10 LPM Novel	6.21	0.621	473	78.83	6.14	0.614	Inf	#¡VALOR!	6.25	0.625	720	120
580 RPM 40 LPM Novel	6.16	0.616	212.2	141.47	6.18	0.618	201.9	134.6	6.25	0.625	179	119.33

En la Tabla 3 se muestran las eficiencias calculadas experimentalmente para cada uno de los rotores y las eficiencias teóricas, las que no se pueden obtener para cada rotor, ya que las correlaciones ya presentadas para obtener las constantes de transporte de masa no distinguen entre los diversos rotores. Dichas eficiencias en consumo de gas se reportan para todos y cada uno de los 8 experimentos realizados variando tipo de inyección, flujo de gas y velocidad del rotor.

Se puede observar que para el rotor estándar la máxima eficiencia es para el experimento E7, altas velocidades de rotación y bajo flujo de gas inyectado por el fondo, (580 RPM y 10 LPM) con $e=0.0709$ ppmO₂/L N₂ y la peor eficiencia fue obtenida utilizando bajas velocidades de rotación y altos flujos de gas inyectado convencionalmente (290 RPM y 40 LPM) con un valor de $e=0.0126$ ppm O₂/L N₂, es

decir, el gas consumido en E2 es de casi seis veces mayor que en E7 para reducir la misma cantidad de oxígeno en prácticamente el mismo tiempo (572 y 473 segundos, respectivamente).

En el caso de los rotores nuevo y estándar muescado la peor eficiencia en ambos rotores también coincide y es para el experimento E4 con $e=0.0156$ y $e=0.0164$, respectivamente. Las máximas eficiencias por su parte se logran con los experimentos E5 ($e=0.053$) y E6 ($e=0.0433$) respectivamente, es decir, para el rotor muescado se necesita más gas inyectado. En este caso, la diferencia entre eficiencias entre el mejor y el peor caso es sólo de casi tres veces aproximadamente en ambos rotores. Ahora, la máxima eficiencia para los rotores muescado y nuevo se obtiene nuevamente con altas revoluciones del rotor y se presenta a flujos altos (muescado) y bajos (nuevo) de gas y con la inyección convencional, mientras que la peor eficiencia se sigue dando con bajas revoluciones y altos flujos pero ahora es la inyección por el fondo la que presenta la peor eficiencia (E4).

Ya se mencionó que en el caso de este rotor muescado, se está generando una sobreexposición de agua al ambiente y la entrada de oxígeno desde la atmósfera es muy alta por lo que la desgasificación de las burbujas de nitrógeno se balancea con esta entrada de oxígeno, por lo cual el nivel de oxígeno se estabiliza en valores muy altos, no pudiéndose alcanzar la desoxidación en estas condiciones.

Del rotor estándar se puede aseverar que una combinación de alta velocidad del rotor y una inyección moderada de gas de purga por el fondo, es decir, suficiente gas de purga para recolectar el gas disuelto en el fundido, es la combinación óptima de éstas variables como se puede observar en la Tabla 3. Sin embargo, para los rotores con mayor poder de arrastre como el muescado y el nuevo diseño, la combinación óptima se produce con altas revoluciones del rotor con flujos de gas por definir dependiendo el rotor e inyectados por el rotor (inyección convencional).

Tabla 3. Eficiencia en el consumo de gas de purga.

Experimento	e Teórico [ppmO ₂ /L N ₂]	e Experimental ROTOR ESTÁNDAR [ppmO ₂ /L N ₂]	e Experimental ROTOR ESTÁNDAR MUESCADO [ppmO ₂ /L N ₂]	e Experimental ROTOR NUEVO [ppmO ₂ /L N ₂]
E1	0.0333	0.0358	0.0315	0.0289
E2	0.0126	0.0136	0.0177	0.0215
E3	0.0355	0.0372	0.0246	0.0232
E4	0.0142	0.0153	0.0164	0.0156
E5	0.0698	0.0676	0	0.053
E6	0.0384	0.0363	0.0433	0.0489
E7	0.0713	0.0709	0	0.0469
E8	0.0368	0.0392	0.0413	0.0471

3.1.3 Análisis estadístico

Para evaluar los principales efectos de la interacción entre dos y tres factores de las tres variables bajo estudio para cada rotor (velocidad de rotación, flujo de gas inyectado y tipo de inyección) se realizó un análisis estadístico de los datos experimentales mostrados anteriormente para cada uno de los 3 rotores explorados en este estudio y considerando tanto la cinética de desgasificado (tiempo de desgasificado, asociado a la productividad y al costo de operación al consumir menos energía de horno) como la eficiencia en el consumo de gas de purga (costo de operación).

En la Tabla 4 se observa para el rotor estándar que, nuevamente, el flujo de gas inyectado, la velocidad de rotación, así como su mutua interacción, son los factores que determinan en gran parte la eficiencia en el consumo de gas de purga inyectado. También se puede observar que una disminución en el flujo de gas inyectado y un aumento en la velocidad de rotación incrementa la eficiencia de consumo de gas inyectado, mientras que un incremento en ambos parámetros, bajo las condiciones experimentales presentadas en este trabajo, resulta en una disminución de la eficiencia de gas. En cuanto al tipo de inyección del gas de purga, los resultados muestran que la inyección novel produce ligeramente una mejor eficiencia en el consumo de gas.

En cuanto a la cinética de desgasificación, los efectos de la velocidad de rotación, flujo de gas, la mutua interacción entre flujo y velocidad del rotor, y posición de inyección, en ese orden, son los factores que más afectan la cinética. Un aumento en la velocidad de rotación y una disminución en el flujo de gas mejorarán la cinética de desgasificado, mientras que el efecto o interacción mutua entre ambas variables y la posición de inyección aunque significativas, su efecto se reduce en un orden de magnitud en comparación con las variables más significativas.

Tabla 4. Análisis estadístico mostrando el efecto de las principales variables y los errores estándar para el rotor estándar.

Promedio	Efecto sobre la eficiencia del gas de purga con error estándar	Efecto sobre la cinética con error estándar
Efectos principales		
Flujo de gas de purga (Q)	-0.028+/-0.0015	0.0023+/-0.0006
Velocidad de rotación (N)	+0.030+/-0.0015	0.0045+/-0.0006
Tipo de inyección (PI)	-0.003+/-0.0015	0.0002+/-0.0006
Interacciones de dos factores		
Q x N	-0.008+/-0.0015	0.0012+/-0.0006
Q x PI	0.001+/-0.0015	0.0004+/-0.0006
N x PI	0.0009+/-0.0015	0.0005+/-0.0006
Interacción de tres factores		
Q x NxPI	0.0016+/-0.0015	0.0004+/-0.0006

Tomando en consideración que, en lo que se refiere a la cinética de desgasificación, los resultados experimentales y teóricos muestran que estas dos variables son los factores claves, además considerando que ambas variables definen en su mayoría la relevancia de los principales efectos y las interacciones de las variables bajo estudio sobre la eficiencia en el consumo de gas, el resultado de este trabajo sugiere que la optimización de la operación de desgasificación con el rotor estándar depende principalmente de una elección balanceada de flujo de gas de purga inyectado y velocidad de rotación del impulsor. Obviamente, el efecto positivo de una alta velocidad de rotación es debido a la gran área interfacial creada por el rompimiento del gas en pequeñas burbujas, así como a su buena dispersión a través de todo el líquido y a su mayor tiempo de

residencia en conjunto con una buena agitación promoviendo un rápido transporte de masa por convección. El flujo de gas inyectado debe de ser moderado debido a que una operación del proceso ideal es aquella en donde cada burbuja de gas de purga inyectado alcanza la saturación de hidrógeno justo antes de llegar a la superficie libre, pero si el flujo de gas de purga inyectado es mayor, las burbujas que abandonan el sistema estarán lejos de tener una concentración de oxígeno en equilibrio con el oxígeno disuelto en el fundido, lo cual representa un desperdicio de gas de purga. Esta situación es aún más radical al final de la desgasificación cuando la concentración de oxígeno es baja y las burbujas sólo pueden recolectar una pequeña cantidad de oxígeno ya que el equilibrio termodinámico establece el límite de oxígeno a recolectar y en consecuencia la fuerza motriz también disminuye. Como resultado, al final de la desgasificación, cuando el equilibrio termodinámico controla la cinética de desgasificación, la inyección del gas de purga es muy poco eficiente requiriendo de grandes cantidades de gas de purga para eliminar mayor cantidad de oxígeno.

Tabla 5. Análisis estadístico mostrando el efecto de las principales variables y los errores estándar para el rotor muescado.

Promedio	Efecto sobre la eficiencia del gas de purga con error estándar	Efecto sobre la cinética con error estándar
Efectos principales		
Flujo de gas de purga (Q)	0.0015+/-0.0015	0.01565 +/-0.0006
Velocidad de rotación (N)	+0.0059 +/-0.0015	-0.0014+/-0.0006
Tipo de inyección (PI)	0.0004+/-0.0015	-0.00255+/-0.0006
Interacciones de dos factores		
Q x N	-0.00039+/-0.0015	0.02665 +/-0.0006
Q x PI	-0.0008+/-0.0015	0.0009+/-0.0006
N x PI	0.0003+/-0.0015	0.00155+/-0.0006
Interacción de tres factores		
Q x N x PI	-0.0003+/-0.0015	-0.0019

En la Tabla 5, que muestra el resumen del análisis estadístico de la influencia de las principales variables de proceso sobre la cinética de desgasificado y el consumo de gas para el rotor muescado, se aprecia que la cinética de desgasificado del rotor muescado únicamente depende significativamente de la velocidad del rotor, donde obviamente un aumento en esta variable mejora la cinética de desgasificación. El resto de variables no presenta un efecto sensible (mayor al error experimental) sobre dicha cinética de desgasificado. En cuanto al consumo de gas obviamente el flujo de gas es muy significativo, pero llama la atención que la interacción entre N y Q es muy importante, de hecho tiene el mayor efecto sobre la eficiencia en el consumo de gas. Esto significaría que por si sola, la velocidad de rotación no significa nada, sino que la óptima combinación entre N y Q es la que dicta en gran medida la eficiencia en el consumo de gas de purga y el signo positivo indica que aumentar los dos factores es positivo. En cuanto a la eficiencia en el consumo de gas, considerando que dos de los 8 experimentos no alcanzaron el nivel de desgasificado deseado del 90% y no existe un valor numérico aceptable para el consumo de gas de purga, el análisis estadístico resultó incoherente y ambiguo, por lo que se decidió no concluir nada respecto al efecto de las variables del proceso sobre la eficiencia de gas de purga usado.

Tabla 6. Análisis estadístico mostrando el efecto de las principales variables y los errores estándar para el rotor nuevo.

Promedio	Efecto sobre la eficiencia del gas de purga con error estándar	Efecto sobre la cinética con error estándar
Efectos principales		
Flujo de gas de purga (Q)	0.004+/-0.0015	-0.0047+/-0.0006
Velocidad de rotación (N)	0.005+/-0.0015	0.0267+/-0.0006
Tipo de inyección (PI)	-0.0002+/-0.0015	-0.0048+/-0.0006
Interacciones de dos factores		
Q x N	0.0014+/-0.0015	0.0028+/-0.0006
Q x PI	-0.0005+/-0.0015	0.0009+/-0.0006
N x PI	-0.0001+/-0.0015	0.001+/-0.0006
Interacción de tres factores		
Q x NxPI	0.0002+/-0.0015	0.001+/-0.0006

Finalmente, en la Tabla 6, en donde también se presenta el resumen del análisis estadístico del efecto de las principales variables de operación sobre la cinética de desgasificado y sobre el consumo de gas de purga para el rotor nuevo, se aprecia que sólo los efectos simples de flujo de gas y velocidad de rotación son las variables significativas, y en este caso los aumentos de ambas variables promueven una cinética de desgasificado más rápida. El resto de variables, así como sus interacciones no son significativas en cuanto a la cinética de desgasificado. Finalmente, el consumo de gas se ve afectado por los efectos simples de todas las variables, siendo la posición de inyección y el flujo de gas los factores más determinantes, en los cuales un incremento en el flujo de gas y la inyección por el fondo provocan una menor eficiencia en el consumo de gas, siendo en este caso benéficos una inyección convencional y un flujo moderado de gas. También un aumento en la velocidad del rotor mejora la eficiencia de gas. Asimismo, hay dos interacciones significativas, las cuales son el efecto de flujo y la velocidad de rotor (QXN), en donde se aprecia que un incremento de ambas variables combinadas resulta en una significativa mejora en el consumo de gas y el efecto de la velocidad de rotación con la posición de inyección en donde se ve una ligera mejora en el consumo de gas al inyectar gas por el fondo pero en combinación con altas velocidades de rotor.

3.1.4 Constante de transferencia de masa teórica (sólo para el rotor estándar)

Las constantes de transferencia de masa teóricas se obtuvieron a través del uso de las ecuaciones desarrolladas por Lemoine [85] y mostradas en la Tabla 7. El diámetro de burbuja promedio también se estimó a través de las correlaciones de Lemoine. En su estudio Lemoine reportó correlaciones para A_b y K_m , las cuales fueron obtenidas a través del ajuste de diversos conjuntos independientes de datos experimentales obtenidos de diferentes estudios de reactores con diferentes tipos de fluidos de diferentes propiedades físicas y diferentes diseños geométricos de rotores para la inyección a través de éstos denominada GIR, por sus siglas en inglés (Gas-induced reactor) y la inyección por debajo del rotor, denominada GSR (Gas-sparging reactor). El tipo de rotores usados fue diverso, pero aún con el excelente detalle que provee Lemoine, no es posible separar y distinguir diferencias con estas correlaciones para los 3 rotores utilizados en este trabajo, por lo que se presume que el rotor estándar, el cual es el rotor más universalmente utilizado, es el que mejor se puede describir teóricamente, tal y como lo muestra la buena concordancia entre las eficiencias de gas calculadas con el modelo (que usa las correlaciones de Lemoine) y las eficiencias en

consumo de gas experimentales medidas con este rotor estándar, a diferencia de los otros dos rotores que no presentaron buena concordancia entre las eficiencias teóricas y experimentales. Es decir, sólo se aplicó el tratamiento teórico al rotor estándar mientras que a los otros dos rotores no se les aplicó dicho análisis. En la Tabla 7 se presentan las correlaciones completas de Lemoine para el cálculo de las constantes cinéticas.

Tabla 7. Correlaciones utilizadas del artículo de Lemoine [85] para el cálculo de $k_m A_b$ para las inyecciones tipo GIR y GSR.

Tipo de Inyección	Ecuaciones
<p>GIR (Gas Induced reactor) Inyección convencional</p>	$k_m A_b = 1.383 \times 10^5 \cdot \frac{D_{H_2O-O_2}^{0.500} \cdot \varepsilon^{0.155} \cdot d_S^{0.414}}{\rho_{N_2}^{0.0600}} \cdot \left(\frac{P_{GIR}^*}{V_l} \right)^{\delta_{GIR}} \cdot U_G^{\eta_{GIR}} \cdot \exp(-2.011 \cdot Xw)$ <p>Donde:</p> $\varepsilon = 0.614 * N^3 * \left(-\exp\left(-0.486 - \frac{0.802}{0.09623 * N} - 5.1E - 7 * 2341. * N\right) \right)^{4.511E-4 * N^{0.005}} * \left[\frac{\dot{Q}}{0.212372} \right]^{0.8546 * N^{-0.854}}$ $d_S^{GIR} = 2.61E - 3 * \left[\frac{Q}{0.212372} \right]^{0.005629 * N^{0.419}} * \varepsilon_{GIR}^{0.1373}$ $\left(\frac{P_{GIR}^*}{V_l} \right) = 8.539863 * N^3 * \left(1 - \exp\left(-0.486 - \frac{0.802}{0.09623 * N} - 5.1E - 7 * 32341.8 * N\right) \right)$ $U_G^{GIR} = \frac{\dot{Q}}{0.212373}$ $\delta_{GIR} = 1.9063E - 7 * N^{2.237}$ $\eta_{GIR} = 8.8633 * N^{-3.238}$
<p>GSR (Gas Sparging reactor) Inyección novel</p>	$k_m A_b = 2.564 \times 10^3 \cdot \frac{D_{H_2O-O_2}^{0.500} \cdot \varepsilon^{0.575}}{\rho_{N_2}^{0.060} \cdot d_S^{0.402}} \cdot \left(\frac{P_{GSR}^*}{V_l} \right)^{\delta_{GSR}} \cdot U_G^{\eta_{GSR}} \cdot \exp(-2.402 \cdot Xw)$ <p>Donde:</p> $\varepsilon = 9.62E - 3 * \left[0.615 * \left(\frac{N^4}{Q^{0.56}} \right)^{0.45} \right]^{0.519 * N^{0.043}} * \left[\frac{Q}{0.212372} \right]^{0.2975 * N^{0.063}} * \exp(-0.216)$ $d_S^{GSR} = 9.38E - 3 * \left[\frac{Q}{0.212372} \right]^{0.0408 * N^{0.563}} * \left(9.62E - 3 * \left[0.615 * \left(\frac{N^4}{Q^{0.56}} \right)^{0.45} \right]^{0.519 * N^{0.043}} * \left[\frac{Q}{0.212372} \right]^{0.063 * N^{-0.063}} * \exp(-0.216) \right)^{0.14386}$ $\left(\frac{P_{GSR}^*}{V_l} \right) = 0.615 * \left[\frac{N^4}{Q^{0.56}} \right]^{0.45}$ $U_G^{GSR} = \frac{\dot{Q}}{0.212373}$ $\delta_{GSR} = 8.72E - 2 * N^{0.593}$ $\eta_{GSR} = 3.9E - 3 * N^{0.967}$

3.1.5 Validación del modelo matemático de la desgasificación con el modelo físico de agua (exclusivamente para el rotor estándar)

En la validación del modelo matemático simple de balance de masa descrito en la sección 2.2.1, que describe la evolución del contenido de oxígeno en agua en función del tiempo (ecuación 2.2.16), se reprodujeron los resultados obtenidos de la experimentación en el modelo físico del rotor estándar para cada una de las condiciones experimentales que se corrieron en este estudio. La comparación entre la cinética de desgasificado teórica predicha por el modelo (líneas) y la cinética de desgasificado experimental (símbolos), se muestran en la Figura 7 donde además se varía el flujo de gas y la velocidad del rotor, se separan los resultados de la inyección convencional (Figura 7a) y la inyección novel (Figura 7b).

Es posible observar que existe una excelente concordancia entre las cinéticas de desgasificado que se predicen teóricamente con el modelo y las cinéticas experimentales tanto en comportamiento y en valores, lo que en las gráficas de la Figura 7 se aprecia en el empalme que hay entre las predicciones y las mediciones. Las pequeñas desviaciones mostradas en la inyección convencional para los casos de 580 RPM y 40 l/min y 290 RPM y 40 l/min se atribuyen a la presencia de un gran vórtice, el cual incrementa el área superficial del baño y provoca como consecuencia un incremento en el transporte de masa de aire hacia el baño a través de dicha superficie libre, mecanismo de absorción de oxígeno que nuestro modelo no consideró o despreció. Los mecanismos convectivos y difusivos, el área interfacial de las burbujas y su distribución en el baño son los principales mecanismos que influyen en la cinética de desgasificado. La velocidad de agitación es la variable que más influye en la cinética de desgasificación al romper las burbujas en un menor tamaño y generar en consecuencia mayor área interfacial, así como aumentar la turbulencia dentro del baño lo cual incrementa el transporte de masa, homogeniza el baño y dispersa las burbujas dentro del mismo. El incremento en el flujo de gas inyectado aumenta la turbulencia del baño, así como el contenido de gas dentro del mismo, sin embargo, también provoca el incremento del tamaño de las burbujas de gas y en consecuencia, la disminución del área interfacial.

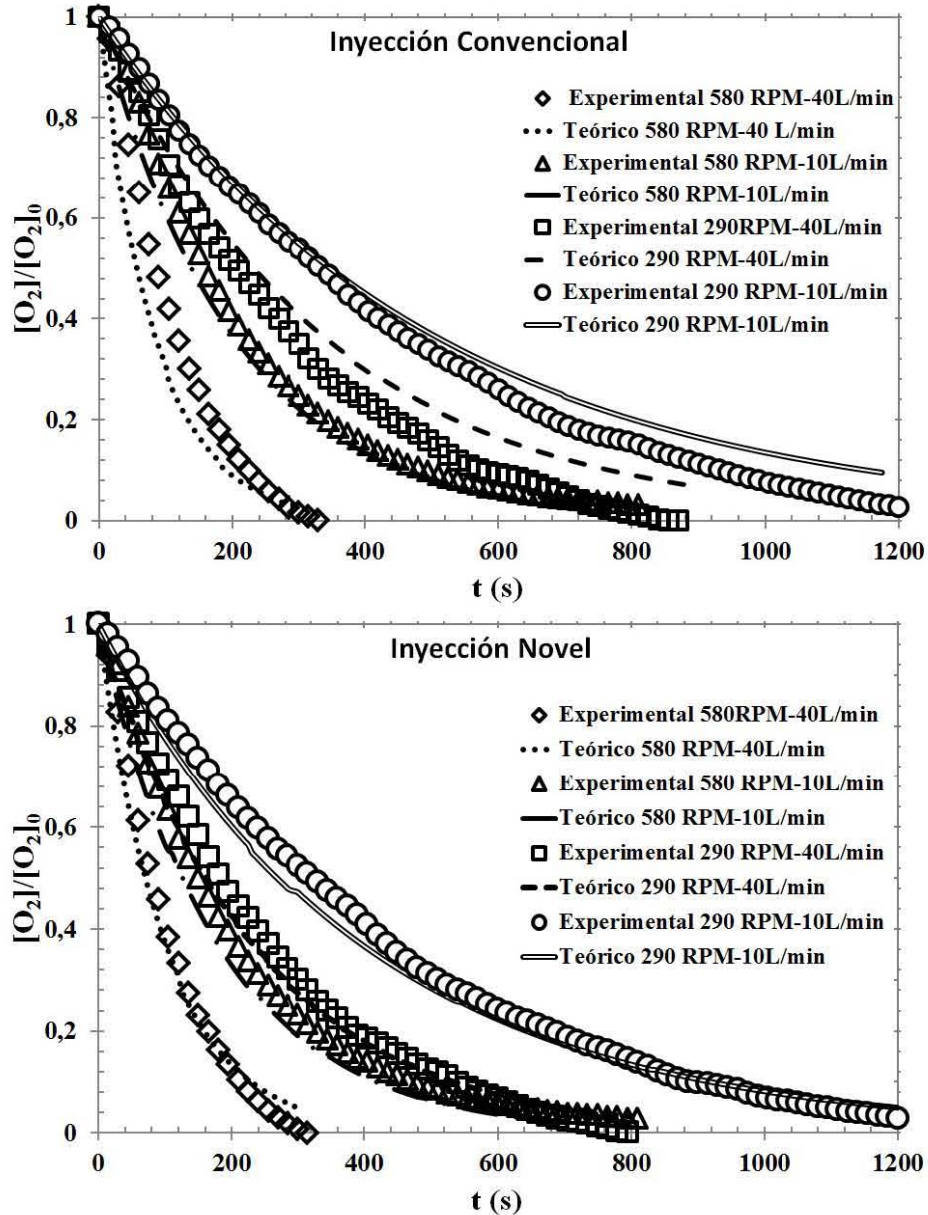


Figura 7. Validación del modelo matemático de balance de masa que predice las cinéticas de desgasificado teóricas comparándolas con las cinética medidas experimentalmente; a) Inyección de gas convencional, b) Inyección de gas novel.

3.1.6 Optimización de $k_m A_b$ y ECG

Con el objetivo de maximizar la cinética de desoxidación ($k_m A_b$) y simultáneamente minimizar el consumo de gas de purga inyectado (ECG), se empleó una rutina de optimización llamada “fminimax” utilizando el software MATLAB®. Fue posible el uso de esta rutina gracias a que se dispone de un modelo teórico que describe las constantes cinéticas $k_m A_b$ en función del flujo de gas y de la velocidad de rotación tanto para la inyección convencional (GIR) como para la inyección por el fondo (GSR) y las cuales se detallan en la Tabla 7. El volumen de nitrógeno, V_{N_2} , se calculó directamente del modelo matemático con la ecuación 3.3, anteriormente descrita en este capítulo. Los problemas de optimización se detallan a continuación para cada objetivo a minimizar.

a) Minimizar $\frac{1}{k_m A_b} (GIR) = \frac{1}{k_m A_b} (N, Q)$
 Minimizar $V_{N_2} = V_{N_2} (N, Q)$

Con los límites que se pusieron en la matriz de experimentos, para acotar los rangos de las variables, para la velocidad de rotación en Hz van de 4.33333(290rpm) ≤ N ≤ 9.66666(580rpm) y para el flujo de gas en m³/s van de 0.0001666(10L/min) ≤ Q ≤ 0.00066666(40L/min). Es decir, el problema de optimización de dos funciones o multifunción pero por separado es:

b) Minimizar $\frac{1}{k_m A_b} (GSR) = \frac{1}{k_m A_b} (N, Q)$
 minimizar $V_{N_2} = V_{N_2} (N, Q)$
 con los límites 4.33333 ≤ N ≤ 9.66666 y 0.0001666 ≤ Q ≤ 0.00066666

De acuerdo a esta optimización, las condiciones de operación óptimas son N=580 RPM y Q=10LPM para ambos tipos de inyección (Figura 8). Finalmente, se utilizó una rutina disponible en MATLAB® llamada “gamultiobj” utilizada con el fin de minimizar al mismo tiempo ambas funciones objetivo de optimización (minimizar el consumo de gas y maximizar la cinética de desoxidación, k_mA_b) e indicar si existe un conflicto entre ambos objetivos. Los resultados confirmaron que los valores de N=9.666 Hz (580 RPM) y Q=0.0001666 m³/s (10 LPM) minimizan el consumo de gas y maximizan la cinética de desgasificación pero sólo para la inyección novel (GSR). Para la inyección convencional (GIR) se obtuvo una solución múltiple (denominada solución “Pareto” en MATLAB®), en la cual existe un conflicto entre ambos objetivos, es decir, los resultados para optimizar la cinética son N=9.666 Hz (580 RPM) y Q=0.000666 m³/s (40 LPM), mientras que para optimizar el consumo de gas las variables son la misma velocidad de rotación con un Q=0.0001666 m³/s (10 LPM). Como es posible observar la única variable de operación que se encuentra en conflicto es la inyección del gas de purga, la cual maximiza la cinética pero no se muestran diferencias sustanciales entre las velocidades de la cinética de desgasificación con altos y bajos flujos de inyección de gas (Q), más sin embargo si existen grandes diferencias entre ambos flujos de inyección de gas en cuanto al consumo de gas (Figura 9). Consecuentemente, la conclusión de utilizar altas velocidades de rotación (N) y bajos flujos de inyección de gas (Q) es válido para ambos tipos de inyección con el rotor estándar.

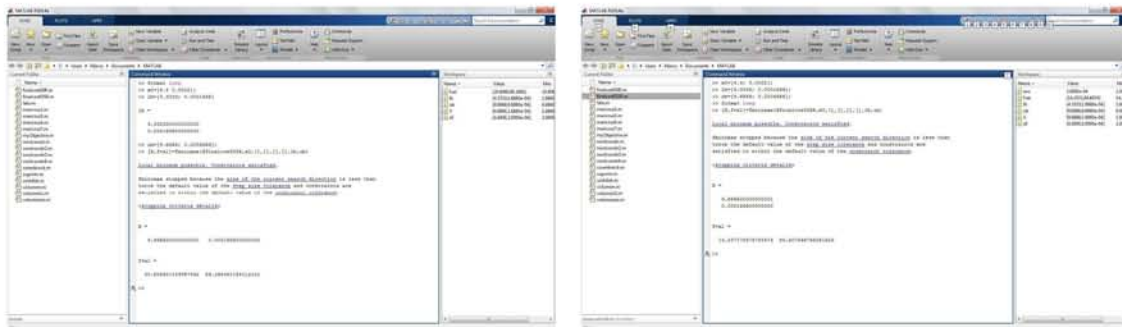


Figura 8. Optimización para la inyección convencional (GIR, izquierda) y novel (GSR, derecha) en MATLAB®.

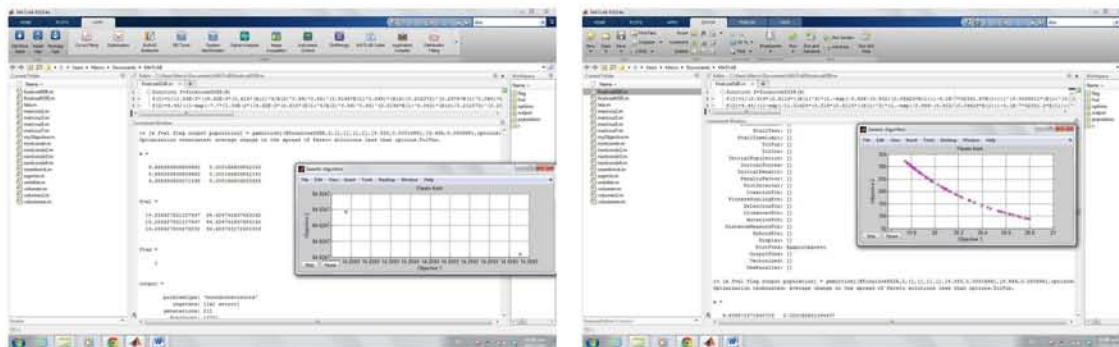


Figura 9. Ambiente MATLAB® mostrando la línea del comando con los resultados de optimización obtenidos a través del algoritmo “gamultiobj” para los dos tipos de inyección (GSR y GIR).

3.2 Resultados de modelación matemática del flujo de fluidos CFD

En la presente sección se muestran los resultados obtenidos a través de la simulación numérica del proceso de desgasificación, sin embargo, como se ha mencionado anteriormente, dicha modelación está enfocada en el estudio de la dinámica de fluidos del proceso. Lo anterior se debe a que aún se encuentra en desarrollo el uso de la herramienta de dinámica de fluidos computacional mediante el software FLUENT en el grupo de investigación, y en consecuencia los resultados mostrados son un estudio preliminar que seguirá en curso para eventualmente calcular la cinética de desgasificación a través de CFD. Sin embargo, se decidió incluir estos resultados ya que estos ayudan a entender la dinámica de fluidos gobernante de dicho proceso. Los resultados se dividieron en agitación sin inyección y agitación con inyección de los tres tipos de rotores utilizados para una correcta apreciación de la influencia del diseño geométrico del rotor sobre la dinámica de fluidos del sistema. En el sistema sin inyección se simuló ambas velocidades de rotación (290 y 580 RPM). En los resultados con inyección se simuló sólo la velocidad de rotación de 580 RPM con las dos técnicas de inyección de gas, convencional y novel, así como los dos flujos de inyección de gas para cada técnica (10 y 40 L/min). En los casos de agitación e inyección con ambas técnicas se simuló únicamente la velocidad de rotación mayor debido a cuestiones de costo computacional y por ser la velocidad que más impacto tiene sobre los patrones de flujo del sistema.

3.2.1 Agitación sin inyección

Las Figuras 10 y 14 muestran los contornos de fases y de presión para los tres diseños geométricos de rotores, sin inyección de gas y con velocidades de rotación de 290 (Figura 10) y 580 RPM (Figura 14). En estas Figuras se puede observar el vórtice formado por cada rotor. En las figuras para contornos de fases el color rojo representa el fluido y el azul el gas. Se observa que para la velocidad de rotación baja el vórtice formado para los tres rotores es ligeramente diferente, siendo mayor para el rotor de nuevo diseño, así como también la difusión numérica. A mayores velocidades de rotación, Figura 14, el vórtice de mayor profundidad lo muestra el rotor estándar muescado.

Las Figuras 10 y 14 también muestran los contornos de presión en Pascales en un corte vertical en todo el reactor para los tres tipos de rotores utilizados y con velocidades de rotación de 290 y 580 RPM, respectivamente. Los contornos de presión son resultado

de la presión hidrostática generada por la masa del líquido y las fuerzas gravitatorias. Adicionalmente, el movimiento angular del rotor origina fuerzas centrífugas radiales, las cuales proyectan al líquido hacia las paredes del reactor. Los contornos de presión pierden su forma horizontal conforme la velocidad de rotación aumenta debido a que la fuerza centrífuga se balancea con un gradiente de presión en dirección radial, lo que origina una disminución de la presión en el centro del reactor y un aumento de la presión en las paredes del mismo. Es decir, existe un incremento en las fuerzas centrífugas paralelo al aumento en la velocidad de rotación. Los diseños geométricos de los tres rotores presentados muestran una presión negativa en forma de concavidad en el fondo de los mismos, para los diseños del rotor estándar y estándar muescado dicha sinuosidad es idéntica, sin embargo para el rotor de nuevo diseño es más profundo y de forma muy diferente. Lo anterior se debe a una caída de presión justo debajo del rotor al girar, lo que succiona y eyecta el líquido de forma radial a través de las toberas y aspas presentes en los rotores, generando el efecto de bombeo, el cual se observa claramente es mayor para el rotor de nuevo diseño a ambas velocidades de rotación. También se ve que este efecto de bombeo aumenta con el aumento en la velocidad de rotación.

Otro resultado obtenido fue la determinación del perfil de vectores de velocidades a través de un corte vertical al centro del reactor. En las Figuras 11 y 15 se muestra la velocidad promedio obtenida para cada nodo en forma de vector, de tal forma que es posible visualizar de forma global los patrones de flujo dentro del reactor. En dichas Figuras se muestran los vectores de velocidad para los tres rotores simulados con velocidades de rotación de 290 (Figura 11) y 580 RPM (Figura 15), respectivamente. Los resultados exhiben la descarga radial del rotor, mostrando la zona de separación entre el flujo descendente y ascendente y el retorno axial del fluido en el fondo y en la parte superior del fluido. También se observa que a mayor velocidad de rotación se incrementa la transferencia de cantidad de movimiento. En ambas Figuras es posible distinguir dos zonas de recirculación, justo por encima y debajo de los rotores entre la pared del reactor y la flecha, así como zonas de muy baja velocidad en el fondo del reactor y cercano a las paredes del mismo. La zona de recirculación por debajo del rotor presenta sentido positivo con respecto a las manecillas del reloj, mientras que la recirculación superior indica sentido negativo con respecto a las mismas. Respecto a los rotores, se observa que el ángulo de descarga aumenta del rotor estándar al rotor estándar muescado y el rotor de nuevo diseño, pasando de un ángulo de descarga ligeramente debajo de la horizontal a un ángulo de descarga casi de 90 grados con respecto a la horizontal, lo que muestra el efecto de bombeo consistente en succionar el líquido localizado debajo del rotor y expulsarlo a través de las toberas laterales en dirección radial con dichos ángulos de descarga. El efecto de bombeo mejora la convección y agitación dentro del reactor, sobre todo en la zona baja del sistema, obteniéndose los vectores de mayor velocidad de todo el reactor, como es posible observar en la Figura 15 para el rotor de nuevo diseño.

La viscosidad cinemática turbulenta, de remolino o viscosidad de Eddy no es una propiedad del fluido como ocurre con la viscosidad laminar, sino que depende principalmente del estado de turbulencia del flujo, ya que se relaciona directamente con la energía cinética turbulenta y su velocidad de disipación y puede ser utilizada como un indicador en la distribución de la turbulencia e intensidad de la misma. En las Figuras 12 y 16 se muestran los contornos de la viscosidad de Eddy (Pa·s) para ambas velocidades de rotación. Es posible observar que para bajas velocidades de rotación (290 RPM), sólo existe una zona de alta turbulencia, mientras que para altas velocidades de rotación (580 RPM), existen dos zonas de alta turbulencia situadas por debajo del ángulo de descarga del rotor y por encima del mismo. La turbulencia cerca de las

paredes, del reactor es mínima y se debe a las condiciones de no deslizamiento (laminares) impuestas como parte del planteamiento del problema. El rotor de nuevo diseño muestra los contornos de mayor turbulencia como se puede observar en las Figuras 13 y 17, donde se muestran los contornos de energía cinética turbulenta (J/kg), los cuales coinciden con la viscosidad cinemática turbulenta, mostrando los mayores valores en las partes bajas del reactor, que coinciden con las zonas de bombeo anteriormente mencionadas. Además de caracterizar el estado de la turbulencia en un sistema, la energía cinética turbulenta indica cuanta energía contienen los eddys o remolinos turbulentos, mientras que la velocidad de disipación de la energía cinética turbulenta indica que tan rápido la energía contenida en estos remolinos se disipa microscópicamente por fuerzas viscosas.

En la Figura 18 se muestra los vórtices para los tres tipos de rotores a 580 RPM obtenidos a través de la helicidad, la cual proporciona una indicación de qué tan bien se alinea la rotación local de un elemento de fluido con la velocidad del mismo. Como es posible observar dicha propiedad es útil para ilustrar los vórtices, el centro de los mismos y el movimiento en hélice. Esta propiedad se obtuvo mediante el post procesamiento de los resultados a través del modulo de CFD-Post y nos proporciona una isosuperficie que muestra el vórtice formado, en este caso se aplicó a todo el reactor para también poder visualizar el volumen de descarga de fluido de cada uno de los rotores.

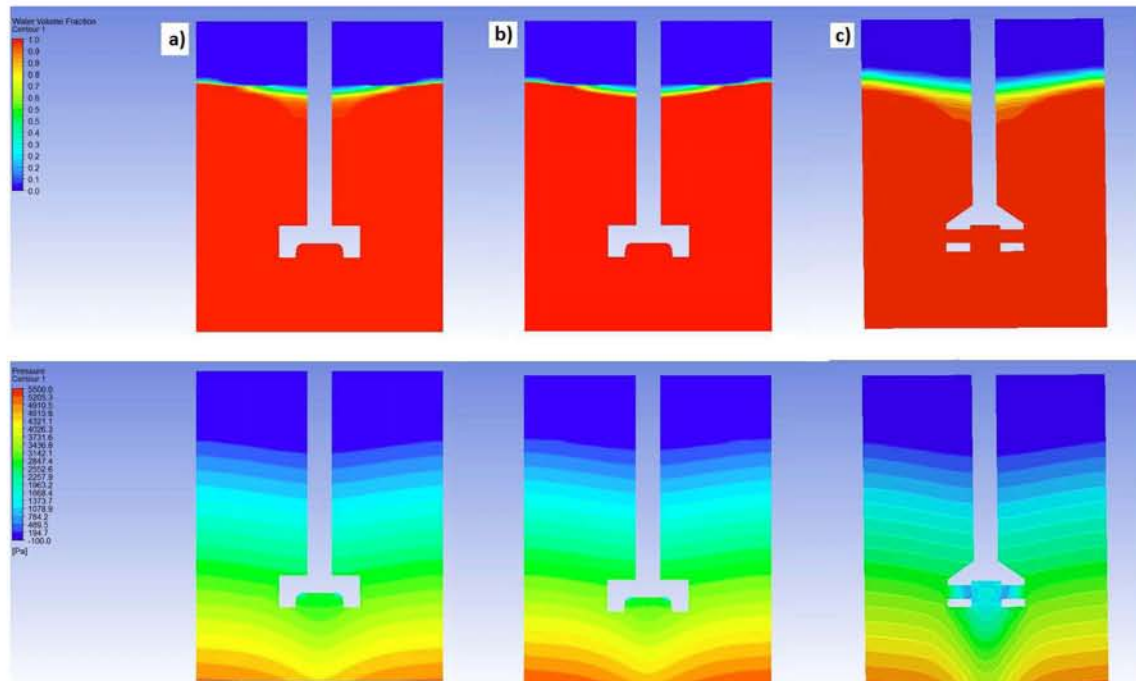


Figura 10. Contornos de fases y presión (Pa) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 290 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).

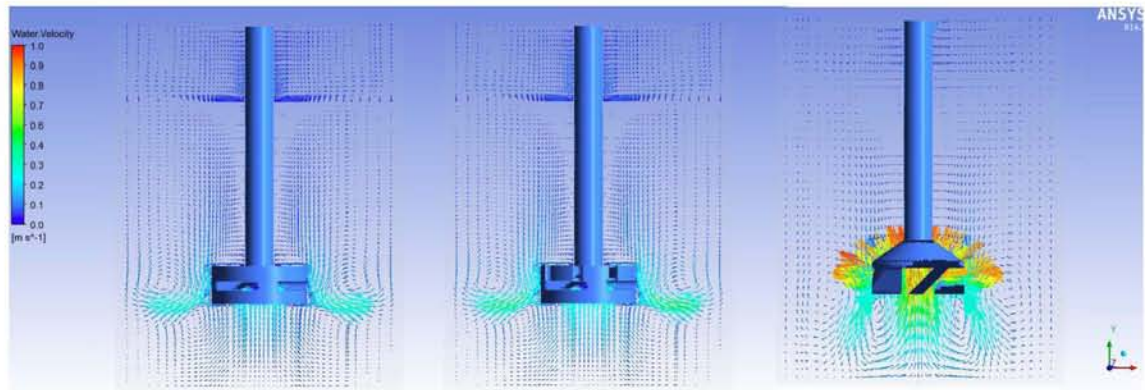


Figura 11. Vectores de velocidad ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) de los tres diseños geométricos de rotores sin inyección de gas de purga y 290 RPM.

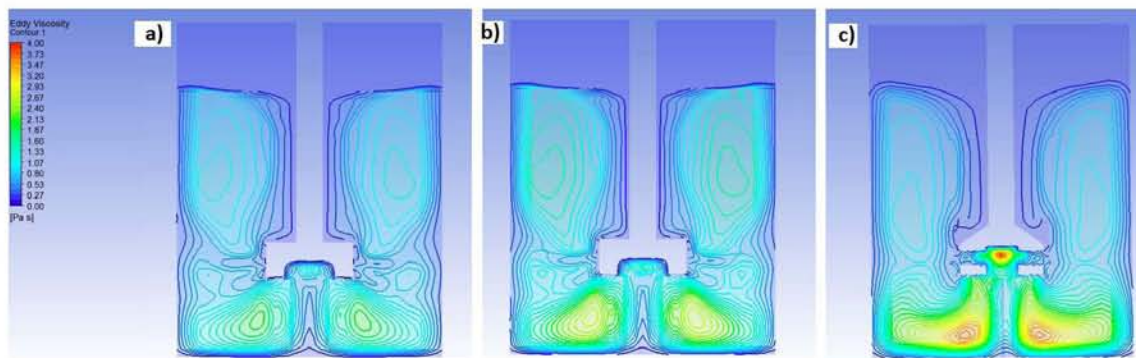


Figura 12. Contornos de viscosidad de Eddy ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 290 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).

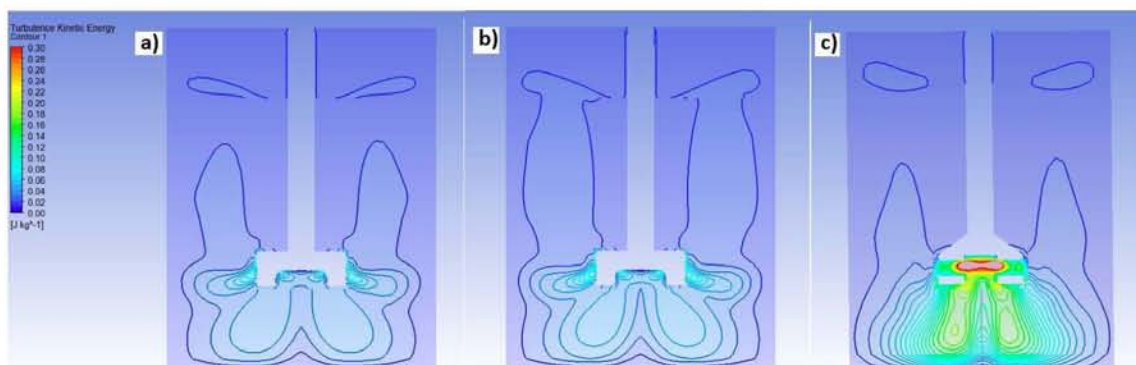


Figura 13. Contornos de energía cinética turbulenta ($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 290 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).

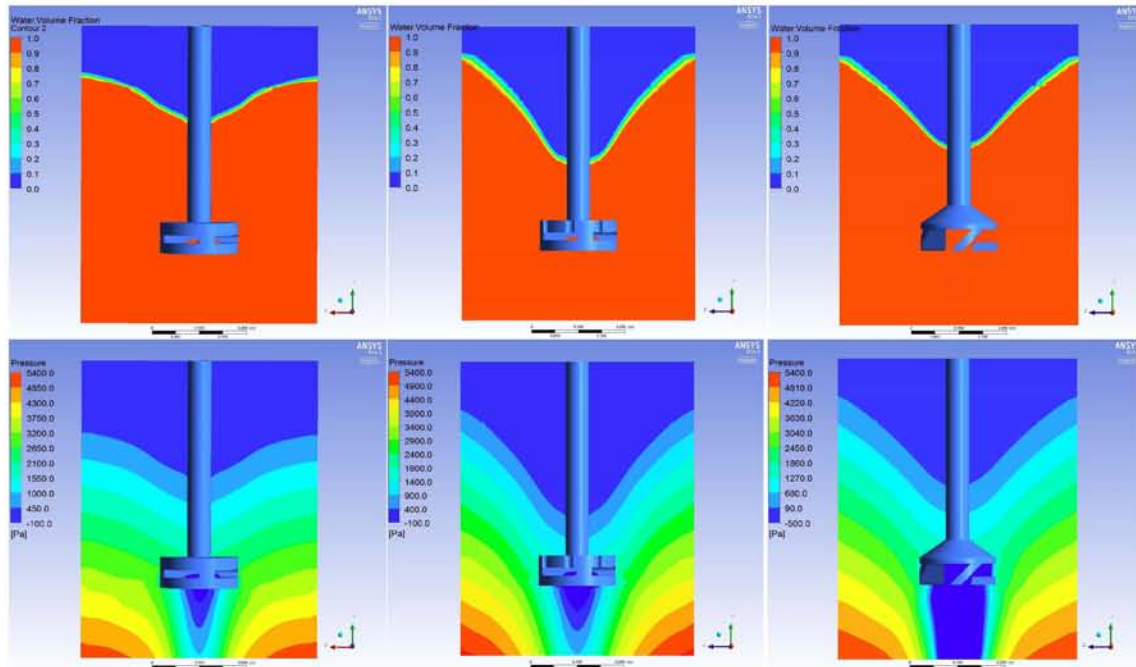


Figura 14. Contornos de fases y presión (Pa) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y sin inyección de gas, rotor estándar (izquierda), rotor estándar muescado (centro) y rotor nuevo diseño (derecha).

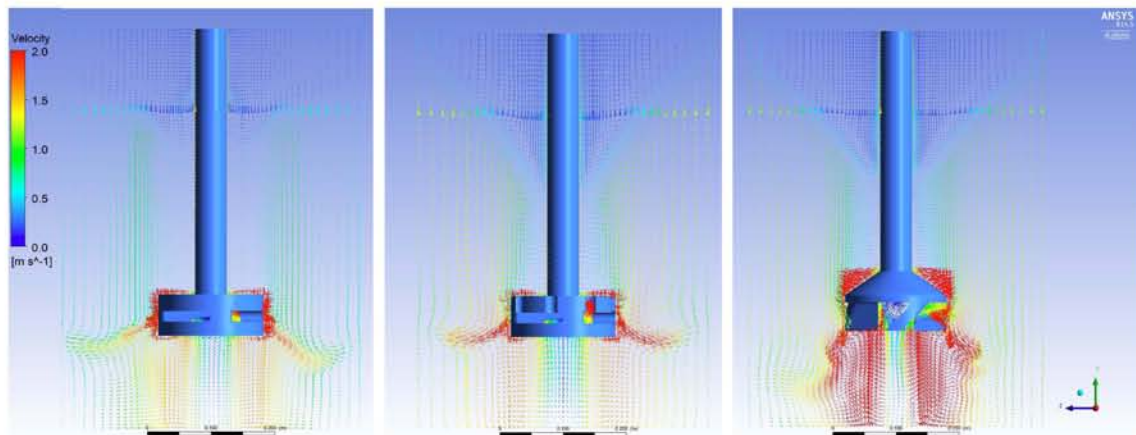


Figura 15. Vectores de velocidad ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) de los tres diseños geométricos de rotores sin inyección de gas de purga y 580 RPM.

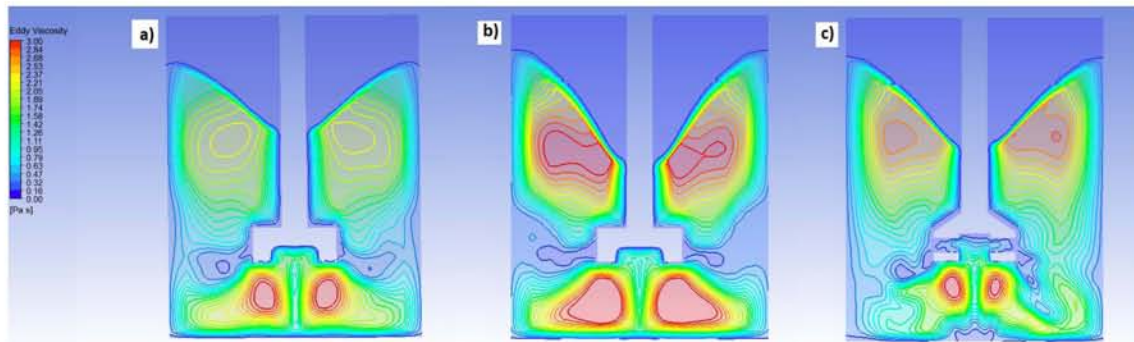


Figura 16. Contornos de viscosidad de Eddy ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM sin inyección de gas; a) rotor estándar, b) rotor estándar muescado y c) rotor nuevo diseño.

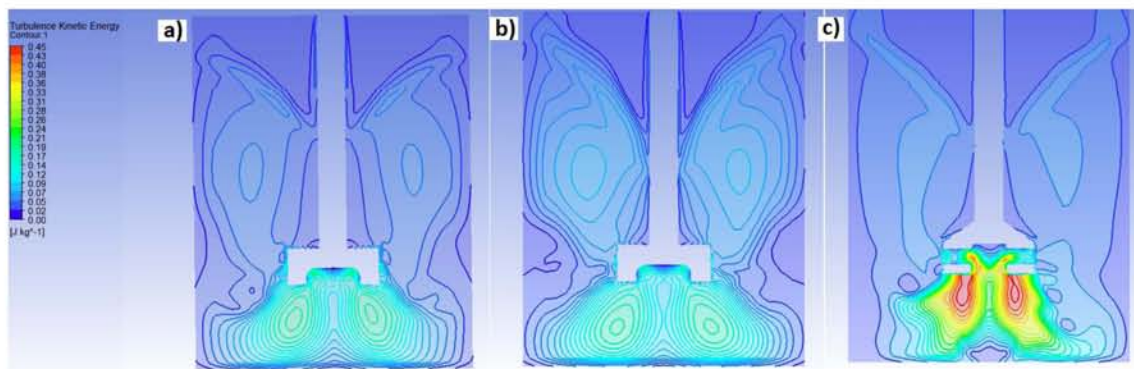


Figura 17. Contornos de energía cinética turbulenta ($\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y sin inyección de gas; rotor estándar (a), rotor estándar muescado (b) y rotor nuevo diseño (c).

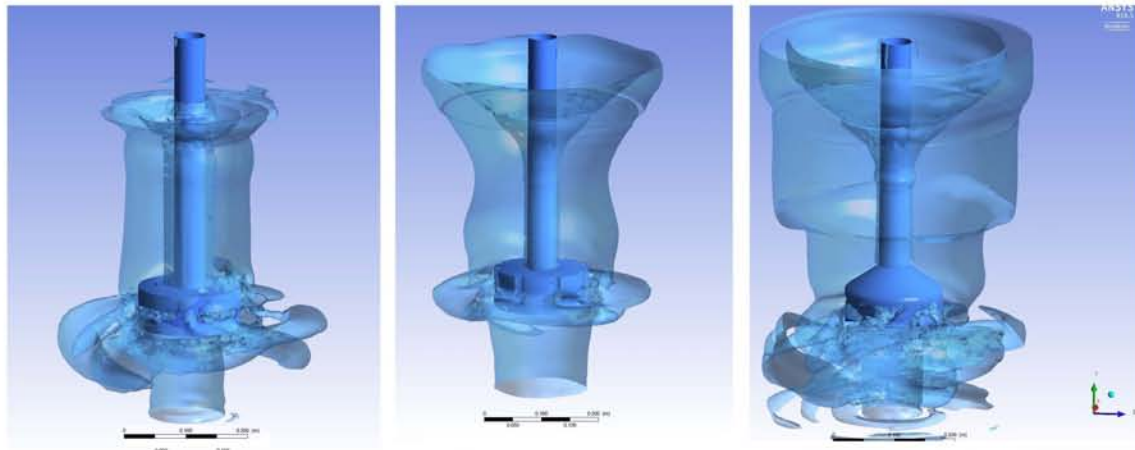


Figura 18. Contornos de la formación del vórtice y el patrón de caudal de líquido expulsado por los tres diferentes diseños geométricos de rotores utilizados.

3.2.2 Agitación e inyección

Inyección Convencional

En la presente sección se muestran los resultados obtenidos de la simulación para los casos con inyección de gas a través de la técnica convencional para los tres tipos de

rotores a altas velocidades de rotación (580 RPM) y con dos flujos de gas (10 y 40 L/min).

En la Figura 19 se muestran los contornos de presión para los tres tipos de rotores y con las variables descritas en el párrafo anterior. Se observa que la formación de los vórtices es muy similar para los tres tipos de rotores a bajo flujo de gas inyectado (10 L/min), sin embargo, a altos flujos de gas (40 L/min) la altura del líquido aumenta y los vórtices para los tres rotores disminuye ligeramente su profundidad, esto se debe a que a mayores flujos de gas inyectado existe un incremento en la fracción de gas retenida dentro del reactor. También es posible observar que la presión negativa situada justo debajo del rotor disminuye conforme el flujo de gas inyectado se incrementa, esto se debe a que existe una disminución en la componente angular de la velocidad debido al aumento en el flujo de gas inyectado.

En la Figura 20 se muestran los patrones de flujo a través de los vectores de velocidad para los tres rotores a 580 RPM y dos flujos de gas (10 y 40 L/min) con la técnica convencional. En estas imágenes se puede observar la influencia de la inyección de gas sobre los patrones de flujo debido que al incrementar el flujo de gas los vectores de velocidad disminuyen, es decir, la transferencia de movimiento del rotor al líquido disminuye por la presencia de gas rodeando al rotor y que inhibe o disminuye la transferencia de momento o el arrastre del rotor al líquido. También es posible observar que los ángulos de descarga disminuyen para los tres rotores debido al arrastre de las burbujas ejercido sobre el líquido.

En la Figura 21 se muestran los contornos de gas para las condiciones indicadas y para los tres diseños geométricos de rotores. De acuerdo a la escala utilizada, el color rojo indica que la fracción de gas es igual a uno y el color azul que la fracción de gas es igual a cero. En los contornos es posible observar como el gas inyectado emerge de los orificios laterales de los rotores para posteriormente distribuirse en el reactor para los rotores estándar y estándar muescado. Sin embargo, para el rotor de nuevo diseño se observa como el gas sale de la parte inferior del rotor, lo que distribuye ligeramente mejor el gas inyectado en la parte baja del reactor, la cual es una de las zonas más difíciles para presentar fracciones remanentes de gas. En dichas figuras es posible observar un aumento en la cantidad de gas remanente dentro del reactor conforme se incrementa la cantidad de gas de purga inyectado. Los contornos para el rotor estándar y el rotor estándar muescado son muy parecidos tanto para flujos bajos de inyección como para flujos altos, sin embargo el rotor de nuevo diseño presenta contornos muy diferentes a los ya mencionados. El rotor de nuevo diseño presenta mayor distribución de gas en la parte baja y alta del reactor, mientras que los rotores estándar y estándar muescado muestran ligeramente mayor distribución de gas en la parte baja del reactor para bajos flujos de gas inyectado, mientras que para altos flujos de gas los tres rotores muestran una mejor distribución de gas en todo el cuerpo del reactor, sin embargo, el rotor de nuevo diseño exhibe ligeramente una mejor distribución de gas así como fracciones mayores del mismo. Las fracciones de gas dentro del reactor siempre son menores a 10 % y es muy notorio que para los rotores muescado y nuevo se forma una columna de gas cerca de la flecha y arriba del rotor, misma columna que no aparece en el rotor estándar con alto flujo de gas.

La Figura 22 muestra los contornos de viscosidad de Eddy para los tres rotores con los dos flujos de inyección convencional de 10 y 40 L/min. En estas figuras se observan dos zonas delimitadas de turbulencia, debajo del ángulo de descarga del rotor y por encima del rotor, en donde la zona que se localiza debajo del rotor muestra mayor turbulencia. Con el incremento del flujo de gas inyectado de 10 a 40 L/min, dichas zonas de turbulencia disminuyen de intensidad para los tres rotores, es decir, al incrementar el

flujo de gas la turbulencia se reduce debido a que disminuye la fricción y el arrastre que promueve el rotor al líquido, lo cual es ocasionado por las burbujas que al salir del rotor cubren al mismo, reduciendo el contacto entre la superficie del rotor y el líquido. Los contornos de energía cinética turbulenta se observan en la Figura 23. Es posible observar que para bajos flujos de gas inyectado los contornos son mayores en la parte baja del rotor, sin embargo al aumentar el flujo de gas, la energía cinética turbulenta disminuye en la parte baja de manera importante y se presenta un ligero aumento en la parte superior del reactor. El rotor de nuevo diseño es el que presenta mayor energía cinética turbulenta en la parte baja del mismo y con una disminución importante cuando se incrementa la cantidad de gas inyectado, para los rotores estándar y estándar muescado los patrones de turbulencia son muy similares con un cambio poco notorio al incrementar el flujo de gas.

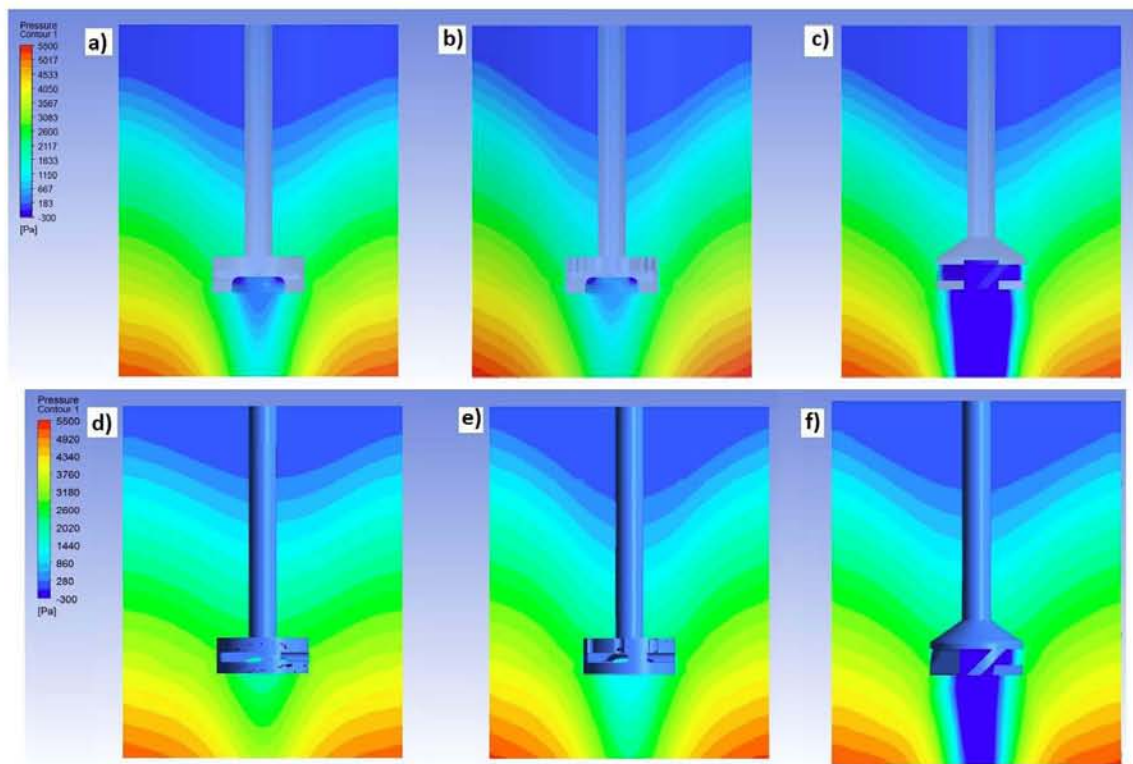


Figura 19. Contornos de presión (Pa) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).

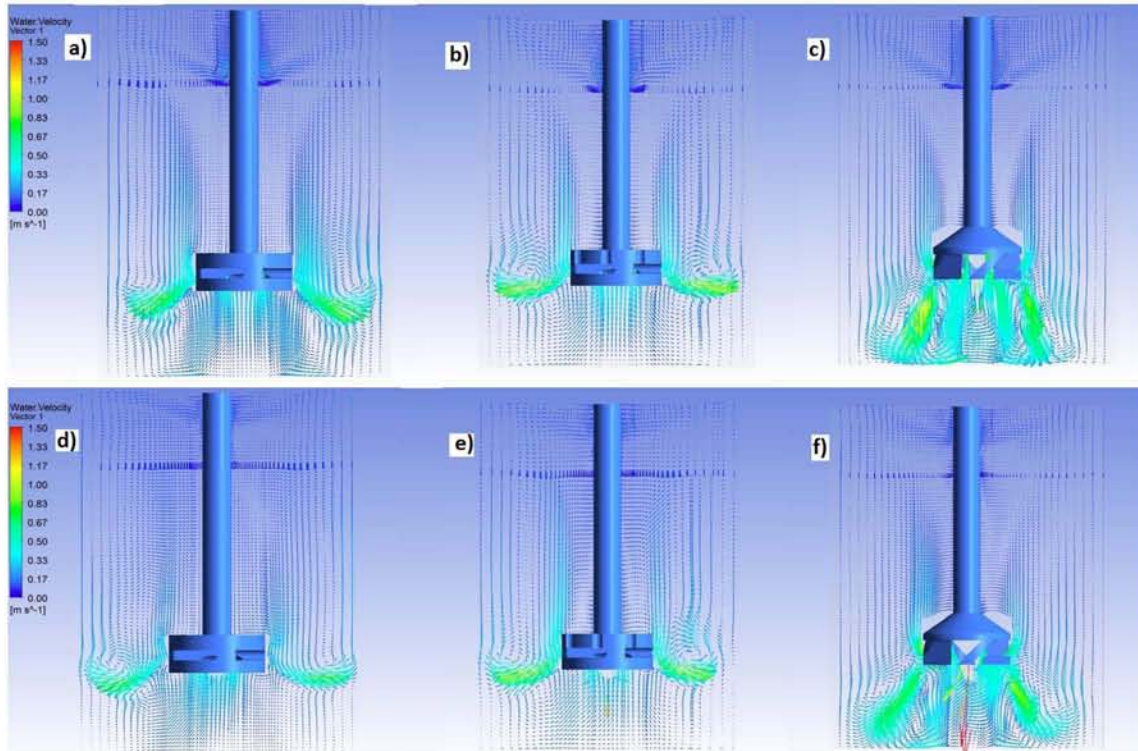


Figura 20. Vectores de velocidad ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).

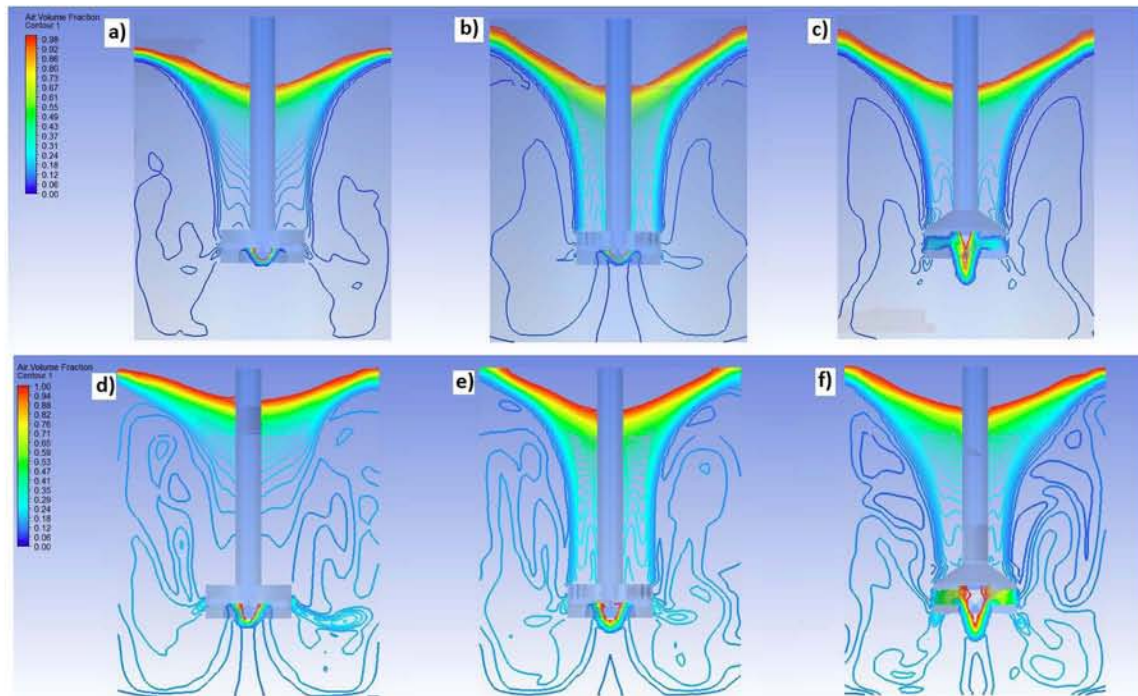


Figura 21. Contornos de fracción de gas para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).

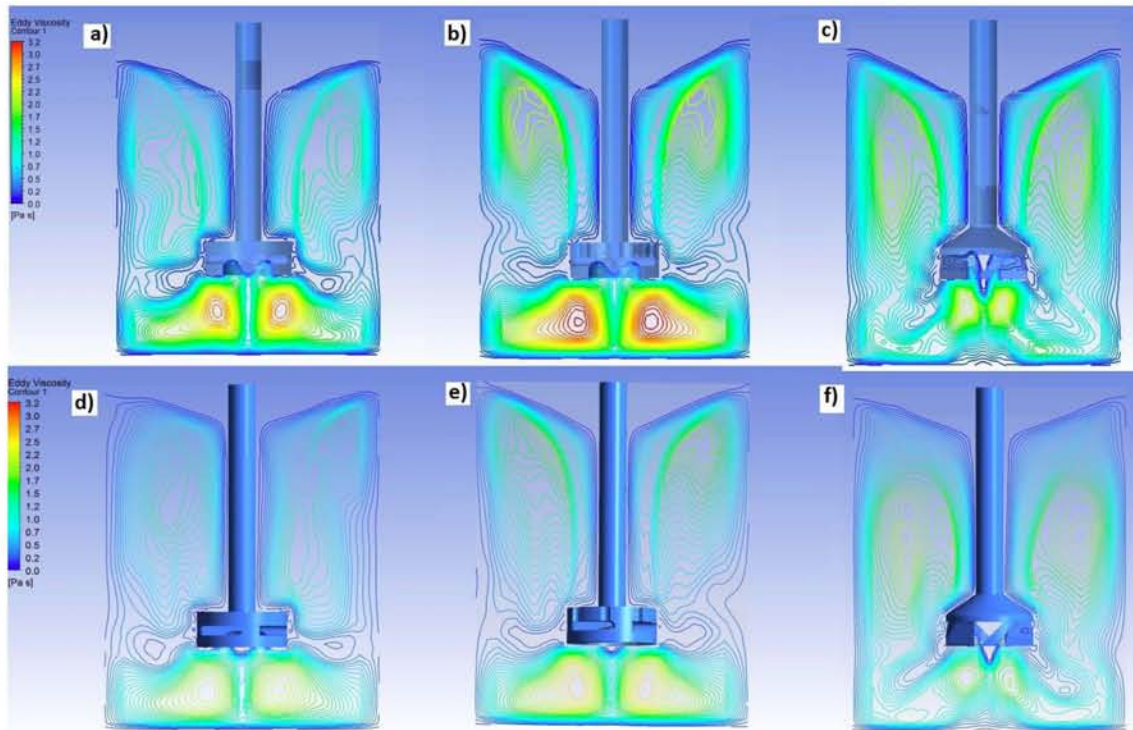


Figura 22. Contornos de viscosidad de Eddy (Pa·s) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).

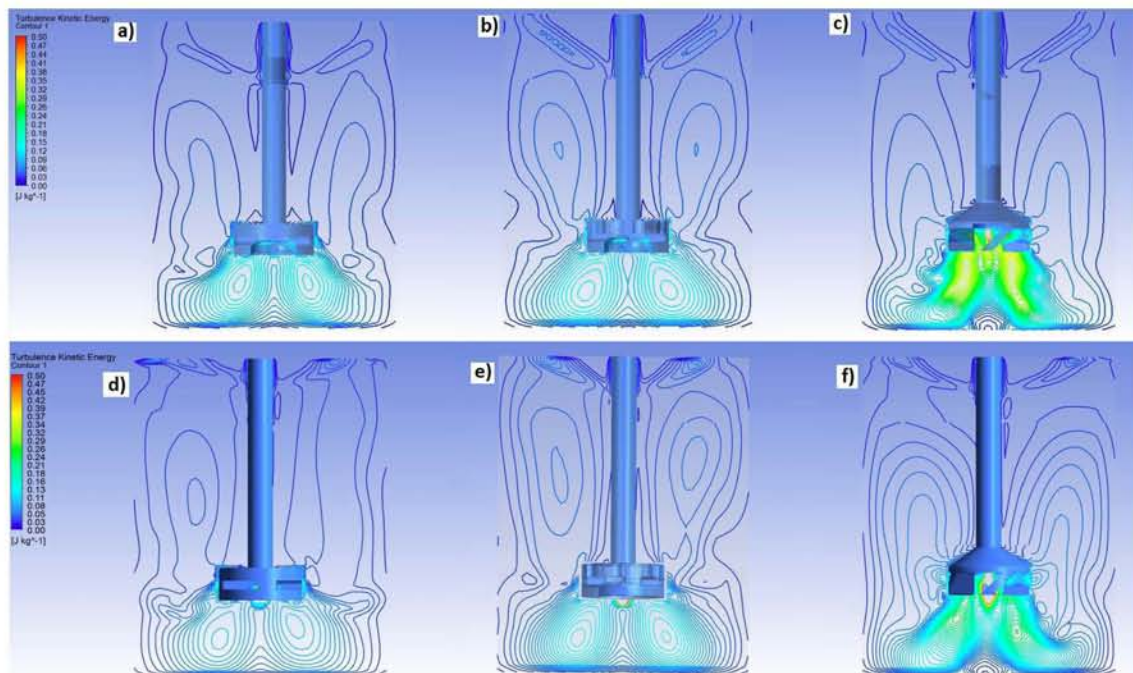


Figura 23. Contornos de energía cinética turbulenta ($J \cdot kg^{-1}$) para los tres diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección de gas convencional; a), b) y c) con 10 LPM y d), e) y f) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (d), rotor estándar muescado (b) y (e) y rotor nuevo diseño (c) y (f).

Inyección novel

Finalmente, se muestran los resultados obtenidos de la simulación del rotor estándar y el rotor nuevo diseño para la inyección de gas con la técnica novel para 580 RPM y con dos flujos de gas inyectado, 10 y 40 L/min.

En la Figura 24 se observan los contornos de presión para ambos rotores y ambos flujos de inyección. A bajos flujos de gas inyectado se observa una evidente diferencia entre los vórtices formados, presentado una mayor profundidad el vórtice desarrollado para el rotor de nuevo diseño. Respecto al efecto de bombeo, el rotor de nuevo diseño también presenta una gran diferencia en éste, mostrando un efecto de succión que abarca hasta el fondo del reactor. Sin embargo, a altos flujos de gas inyectado (40 L/min), el vórtice del nuevo diseño de rotor disminuye su tamaño, así como el efecto de bombeo que se veía a bajos flujos de gas inyectado, obviamente como consecuencia del flujo de gas inyectado por el fondo, el cual contrarresta este efecto por la presión generada al ingresar al reactor por el fondo del mismo. También para el rotor estándar es evidente el cambio tanto del vórtice como de la presión negativa desarrollada debajo del rotor al incrementar el flujo de gas, sin embargo, ésta es mucho menor.

En la Figura 25 se exhiben los vectores de velocidad para el rotor estándar y el rotor nuevo diseño para 580 RPM y dos flujos de gas. A diferencia de la inyección convencional, con la técnica novel se observa un decremento mayor en los vectores de velocidad conforme se incrementa el flujo de gas para ambos rotores. En el fondo del reactor es posible distinguir los vectores de velocidad para la fase gaseosa inyectada y como éstos aumentan al incrementar el flujo de gas. Aquí también es posible distinguir una disminución en la transferencia de movimiento del rotor al líquido conforme el flujo de gas inyectado aumenta. Cabe mencionar que en la Figura 25 de los vectores de velocidad para el rotor de nuevo diseño se observa una variación en el tamaño de los mismos a la altura del rotor debido a dos tipos de malla utilizados en este rotor como consecuencia de la geometría del mismo y del punto de inyección del gas situado en el fondo del reactor. Para la parte del reactor por debajo del rotor se utilizó una malla tetragonal y para la parte restante del reactor se utilizó una malla hexagonal.

En la Figura 26 se presentan los contornos de fracción de gas para ambos rotores. En las Figuras se muestra el punto de inyección por el fondo, el cual cambia a mayor intensidad conforme se incrementa el flujo de gas inyectado. La diferencia en la distribución del gas inyectado es contundente entre el rotor estándar y el rotor nuevo diseño; mientras que el rotor estándar distribuye el gas que llega del fondo a través de las aperturas laterales de su geometría, el rotor de nuevo diseño arroja con mayor fuerza el gas a través de sus aspas, lo que se traduce en una mayor fracción de gas remanente en todo el reactor y con menos zonas carentes de gas de purga. El hecho de que el ángulo de descarga sea tan alto (muy vertical) con respecto a la horizontal para el rotor de nuevo diseño propicia una mejor distribución del gas de purga en la parte baja del reactor. Es posible observar un claro incremento en la fracción de gas retenida para ambos rotores respecto a la inyección convencional.

En la Figura 27 se muestran los contornos de viscosidad de Eddy para el rotor estándar y el rotor nuevo diseño para 580 RPM y 10 y 40 L/min con la inyección novel. Como en el caso con inyección convencional, también se puede apreciar dos zonas de turbulencia y la disminución de ésta al incrementar el flujo de gas inyectado, sin embargo, la escala de viscosidad turbulenta mostrada es casi del doble de valor que para el otro tipo de inyección, lo que indica que en este tipo de inyección se genera mayor turbulencia y por ende mayor agitación y mezclado. También es posible indicar que en este tipo de inyección la disminución en la zona superior de turbulencia no es tan

marcado como en los casos con inyección convencional, lo que se traduce en una mejor distribución de la agitación en todo el cuerpo del reactor. A diferencia de la inyección convencional, con la técnica de inyección novel el rotor de nuevo diseño presenta una diferencia mayor en los contornos de viscosidad turbulenta, dejando claro el mejor desempeño de agitación con el uso de esta técnica de inyección. Lo anterior se confirma con los contornos de energía cinética turbulenta mostrados en la figura 28 para ambos rotores. En estas imágenes es posible apreciar una clara diferencia entre ambos rotores en la cantidad y distribución de la energía cinética turbulenta. Ambos rotores muestran una zona con mayor energía en la parte baja, la cual disminuye al incrementar el flujo de gas inyectado. El rotor de nuevo diseño confirma con estos contornos una mayor y mejor distribución de la turbulencia en todo el reactor.

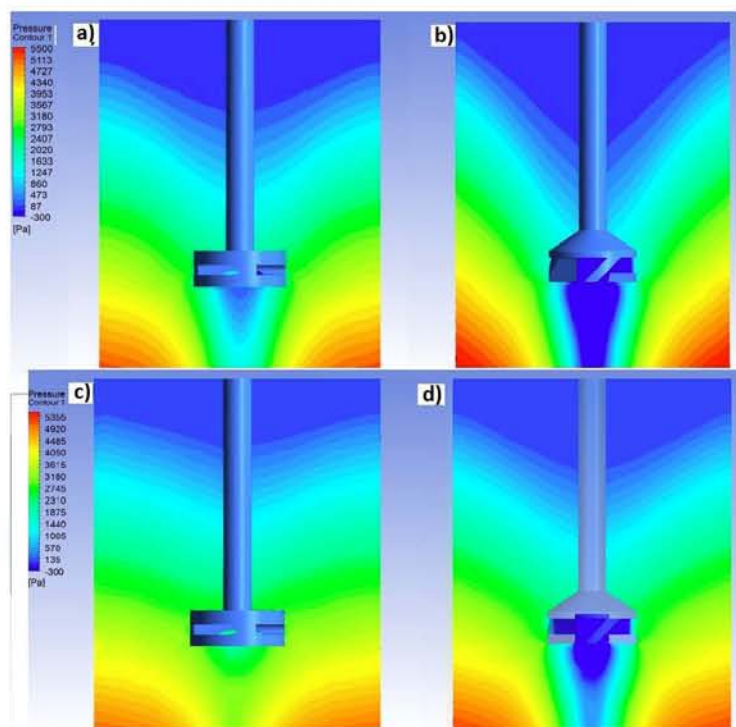


Figura 24. Contornos de presión (Pa) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).

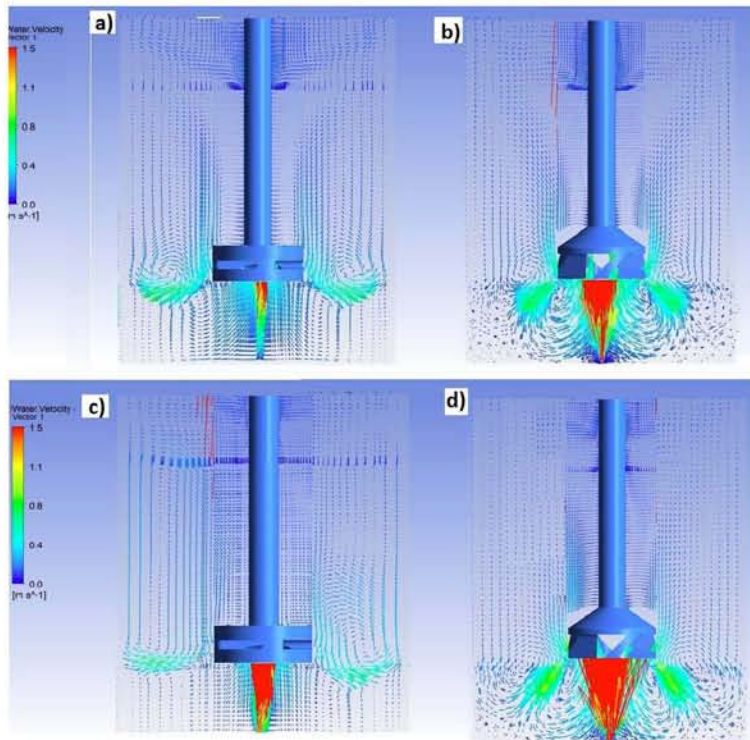


Figura 25. Vectores de velocidad ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).

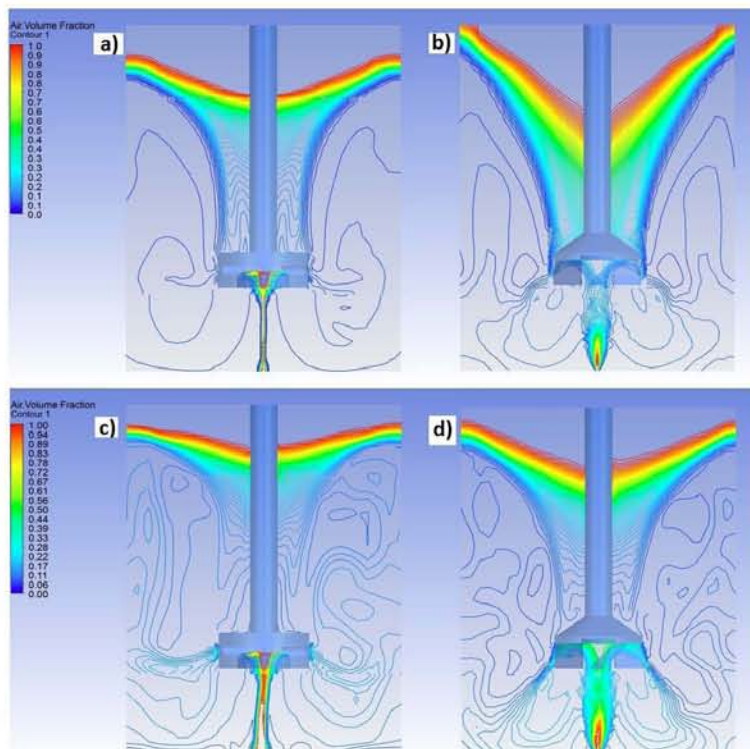


Figura 26. Contornos de fracción de gas para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).

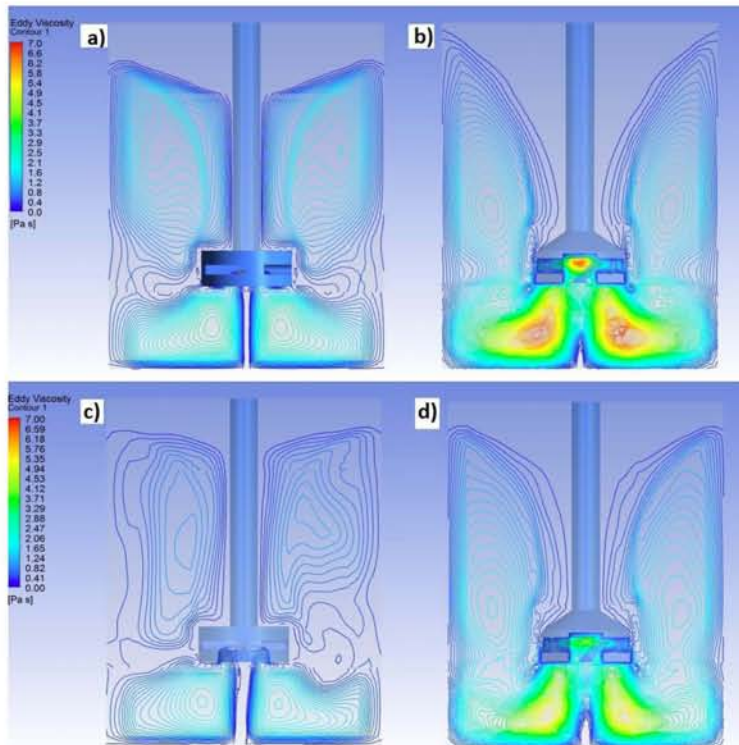


Figura 27. Contornos de viscosidad de Eddy (Pa·s) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).

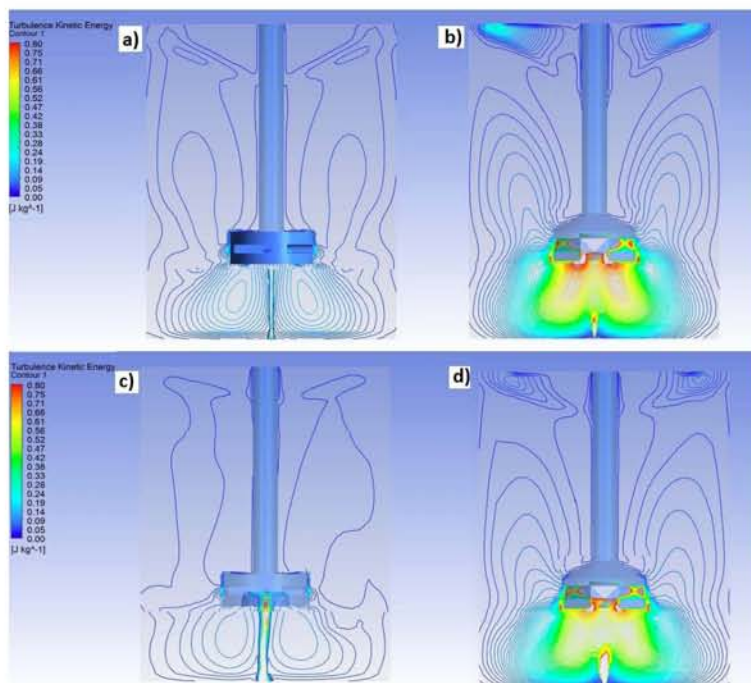


Figura 28. Contornos de energía cinética turbulenta ($J \cdot kg^{-1}$) para dos diferentes diseños geométricos de rotores con agitación de 580 RPM y con inyección novel de gas; a) y b) con 10 LPM y c) y d) con 40 LPM; rotor estándar (a) y (c) y rotor nuevo diseño (b) y (d).

3.2.3 Validación de los resultados de modelado numérico de flujo de fluidos CFD

La validación del modelado matemático tiene como principal objetivo el proporcionar credibilidad a las predicciones obtenidas a través de la simulación. Existen diversas maneras de validar este tipo de resultados, entre las que se encuentran la validación analítica, experimental o con algún estudio anteriormente publicado adecuadamente validado y ajustado a la modelación matemática a validar. En el caso concreto de este trabajo, los resultados obtenidos para el rotor estándar fueron los únicos datos a validar, ya que en un trabajo desarrollado anteriormente por un alumno perteneciente a este equipo de trabajo [128] se obtuvieron datos experimentales a través de la técnica de PIV (Velocimetría por imágenes de partículas) para el rotor estándar.

En la Figura 29 se muestran los perfiles radiales de velocidad para diferentes alturas del reactor (9 y 18 cm desde el fondo del reactor) tanto para el caso sin inyección como para el caso con inyección novel de 10 L/min, ambos a 580 RPM, donde V^* es la velocidad adimensional graficada contra la posición adimensional. El plano de 9 cm queda debajo del rotor, el cual se encuentra a una altura de 15 cm con respecto al fondo del reactor, y el plano de 18 cm queda justo en el cuerpo del rotor.

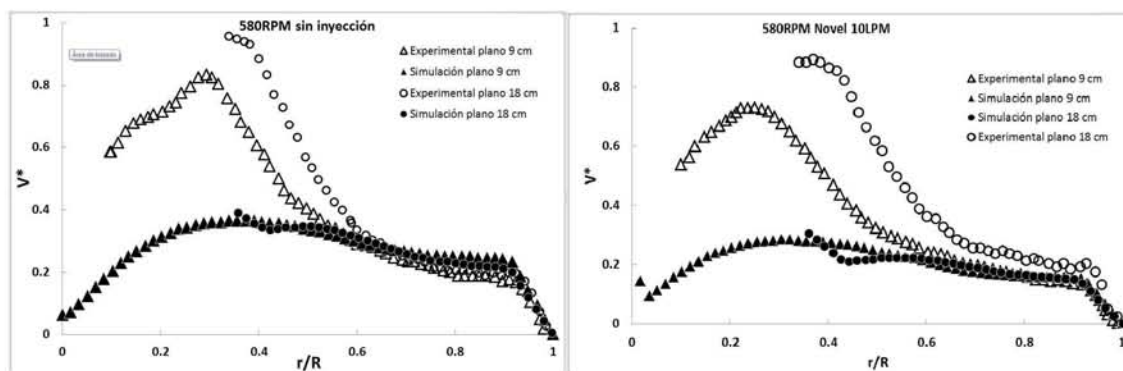


Figura 29. Perfiles radiales de velocidad (V^*) experimentales [96, 128] y simulados para dos diferentes planos en el rotor estándar, 9 y 18 cm.

Como es posible observar en ambas gráficas de la Figura 29, las velocidades obtenidas por la modelación son menores a las velocidades experimentales, sin embargo la tendencia de ambos datos mantienen una relación estrecha en toda la distancia radial. Las velocidades simuladas no varían entre planos, mientras que las experimentales sí muestran una ligera variación entre sí. Sin embargo, la profundidad del vórtice formado coincide en ambas mediciones para el plano de 18 cm, donde los datos inician en una relación de r/R de 0.4. Finalmente, la mayor variación entre los datos simulados y experimentales se muestra en el centro del reactor, obteniéndose velocidades más afines entre más cercano se encuentra de la pared del reactor. La máxima velocidad obtenida para ambos conjuntos de experimentos es la cercana al centro del reactor, o cercana a la superficie del rotor y flecha, mientras que conforme se acerca a la pared del reactor ésta decrece hasta cero. Otra tendencia marcada para ambos conjuntos de datos es la disminución de la velocidad en la gráfica con inyección de gas, lo que concuerda con la disminución en la transferencia de cantidad de movimiento debido a la fase gaseosa que cubre al rotor y disminuye el arrastre que éste le ejerce al líquido.

En las Figuras 30-34 se muestran las comparaciones gráficas entre fotografías experimentales del modelo de agua y contornos de fracción de gas, donde es posible observar la formación del vórtice, obtenidas a través del pos procesamiento de los resultados de simulación. Es posible observar una clara similitud entre los vórtices

experimentales y los simulados para la mayoría de los rotores. Sin embargo, con respecto a la cantidad y distribución del gas de purga retenido en el reactor, la concordancia entre ambos resultados muestran diferencias sobre todo en la distribución del gas retenido, siendo los resultados para el rotor de nuevo diseño los que presentan una mejor concordancia entre los datos obtenidos por simulación y los datos experimentales. Hay incluso algunas fotos que presentan una semejanza significativa con las simulaciones, tales como las comparaciones mostradas en las Figuras 33 y 34 para los rotores estándar y nuevo diseño a 580 RPM y ambos flujos de gas, lo que nos da la certeza de que el modelo describe de manera adecuada las características anatómicas más importantes de la fluido dinámica.

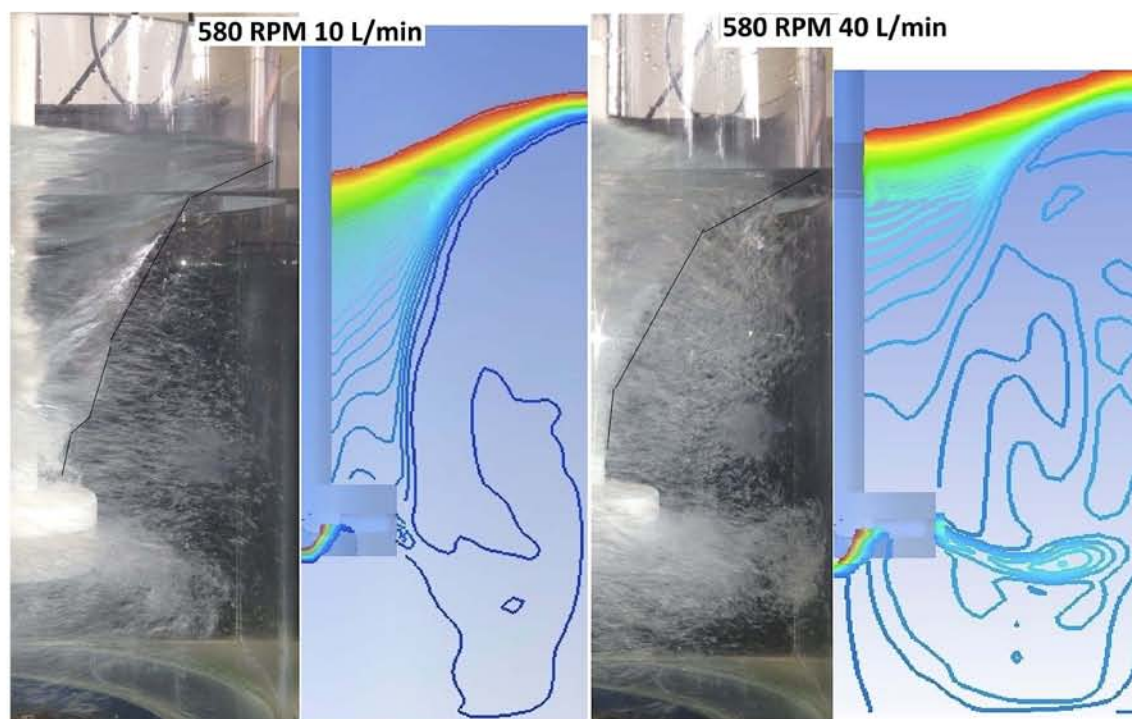


Figura 30. Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor estándar con inyección convencional a 580 RPM con dos flujos de gas.

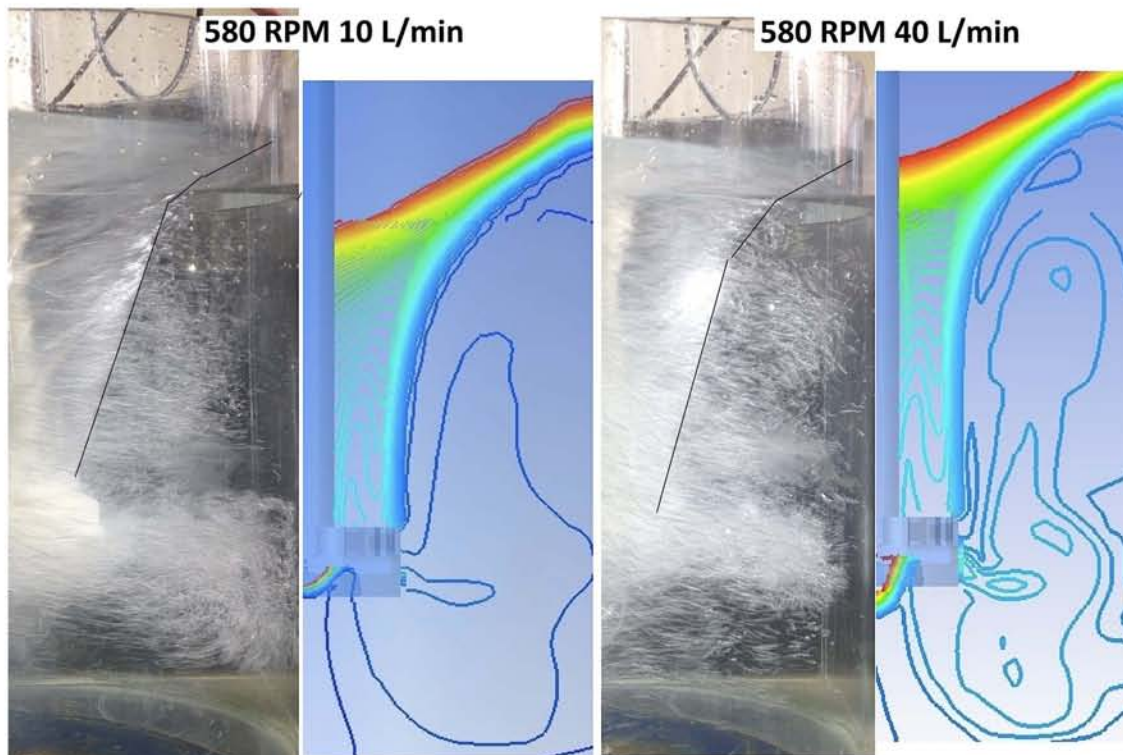


Figura 31. Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor estándar muescado con inyección convencional a 580 RPM con dos flujos de gas.

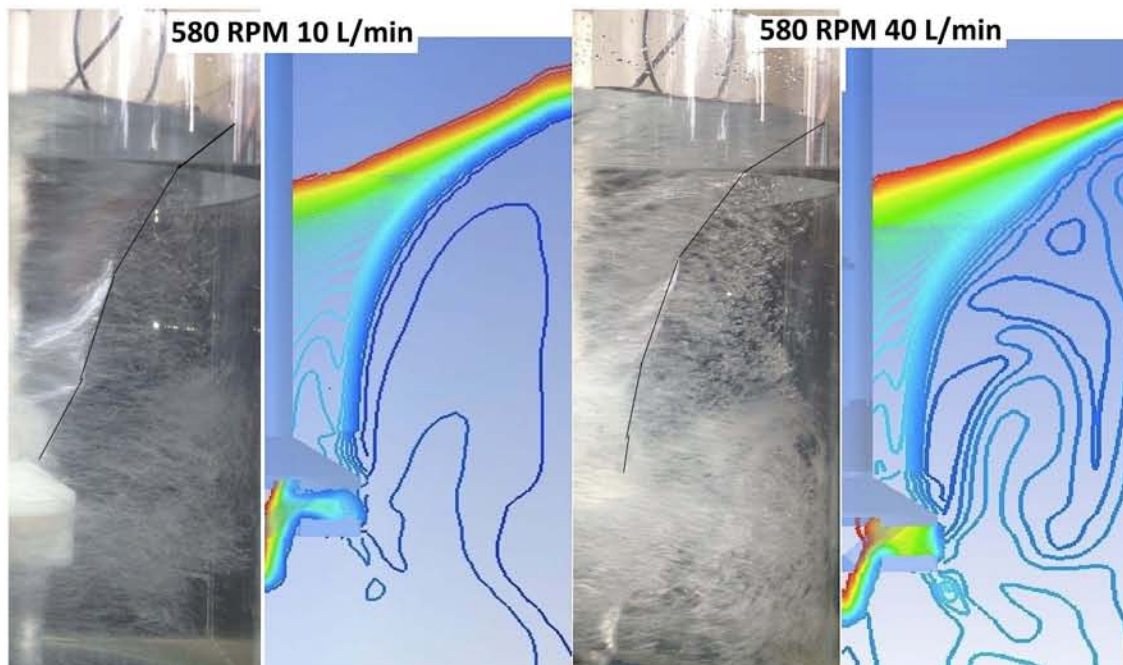


Figura 32. Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor nuevo diseño con inyección convencional a 580 RPM con dos flujos de gas.

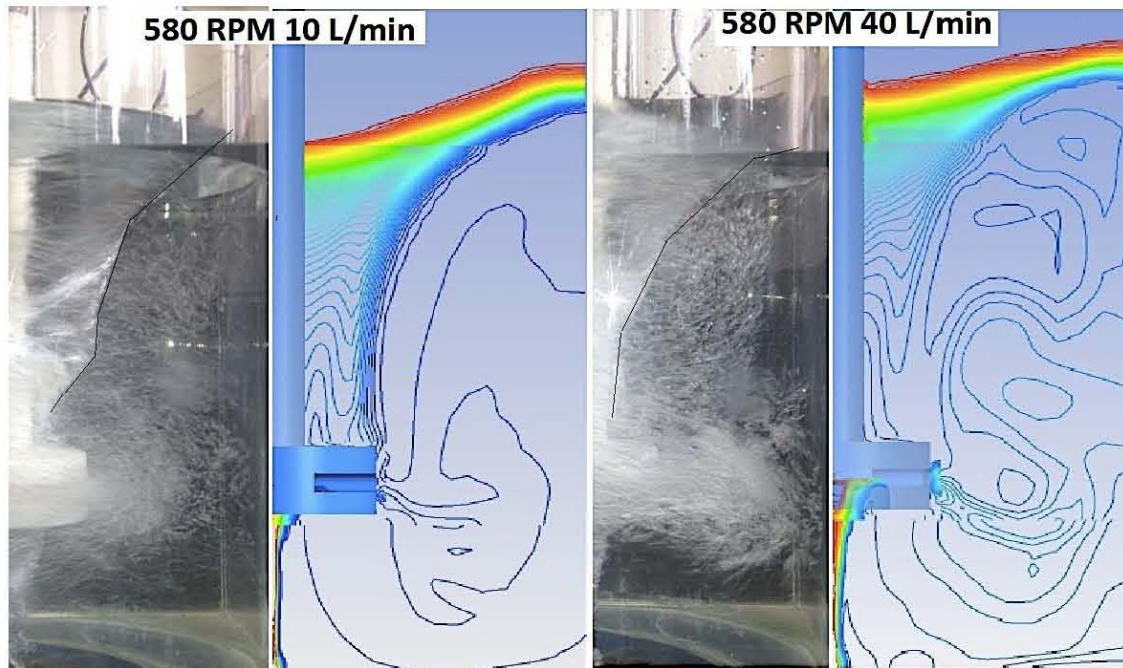


Figura 33. Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor estándar con inyección novel a 580 RPM con dos flujos de gas.

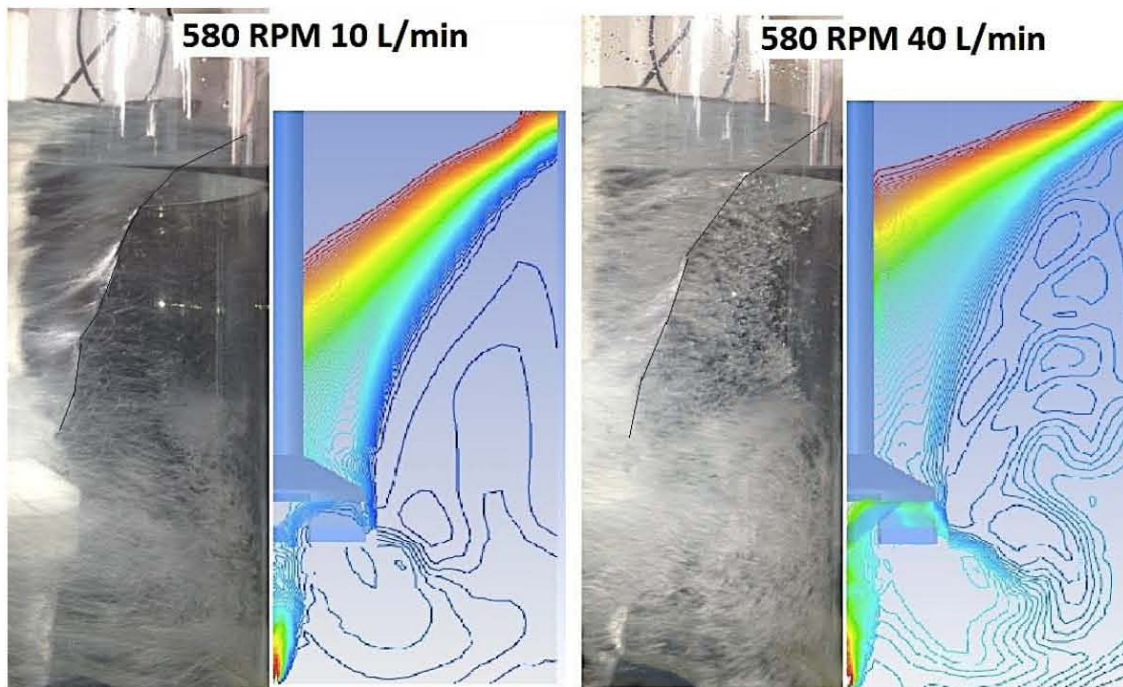


Figura 34. Comparación del vórtice y la fracción de gas del modelo físico y la simulación numérica para el rotor nuevo diseño con inyección novel a 580 RPM con dos flujos de gas.

3.2.4 Números de potencia y bombeo

Para presentar una mejor descripción del desempeño de los tres rotores bajo estudio, se realizaron cálculos de parámetros como son el número de potencia y de bombeo, los cuales complementan la caracterización de la dinámica de flujos en tanques agitados y procesos de mezclado. Estos parámetros fueron calculados a través de los resultados obtenidos de la simulación numérica en el post procesamiento con CFD-post y FLUENT.

Número de potencia

El consumo de potencia de un fluido durante el proceso de agitación es igual a la disipación de la energía mecánica debida a la fricción y el arrastre que provoca el rotor a dicho fluido. En el estado estacionario del proceso, la potencia suministrada por el impulsor es igual a la potencia consumida por el fluido. El consumo de potencia de un impulsor en un tanque agitado con un líquido newtoniano se puede predecir con cierta exactitud a partir del número de potencia, este número adimensional forma parte de las correlaciones que caracterizan la hidrodinámica de un sistema de agitación con rotores. El número de potencia es un parámetro adimensional el cual mide los requerimientos de potencia para la operación de un impulsor y representa la relación entre las fuerzas que se imponen y las fuerzas inerciales de acuerdo a la siguiente definición:

$$N_P = \frac{P}{\rho N^3 D^5} \quad (3.4)$$

Donde P es la potencia utilizada en watts aplicada al impulsor de diámetro D en metros, ρ es la densidad del fluido en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ y N es la velocidad de rotación en Hz. La potencia aportada al fluido a través del rotor es equivalente a la pérdida o disipación en el fluido y se define como el producto de la velocidad del rotor en radianes/s y el torque, τ , el cual fue obtenido a través de la integración de la presión sobre las aspas del impeler (Ecuación 3.5). La integración de la disipación viscosa y turbulenta a través del volumen del fluido del reactor debiera de ser una forma aceptable de calcular la potencia, sin embargo la velocidad de disipación de la energía cinética turbulenta predicha por varios modelos de turbulencia puede variar significativamente y por lo tanto no es garantía que el modelo de turbulencia que provea la mejor predicción del patrón de flujo también proporcione la mejor predicción de la velocidad de disipación.

$$P = 2\pi N\tau \quad (3.5)$$

En FLUENT, existe la posibilidad de obtener la potencia extraída del rotor mediante el computo del torque sobre las superficies de las aspas, o en el caso particular de los rotores utilizados en este estudio, se utilizó la superficie de los mismos para integrar la potencia extraída de cada rotor que va a ser transferida al fluido. En la Figura 35 se presentan los patrones de flujo de fluido en contacto con los rotores que muestran de manera gráfica las zonas de mayor torque y potencia extraída de los rotores y que tan uniformemente se extrae la potencia de cada rotor. Se aprecia que en el rotor estándar las toberas del rotor concentran la transferencia de cantidad de movimiento al líquido, mientras que en el rotor muescado, las muescas y luego las toberas dominan la transferencia de cantidad de movimiento, finalmente en el diseño de nuevo rotor, el diseño de las aspas transfiere considerable movimiento al líquido pero lo hace mucho

más uniformemente a través de toda el aspa a diferencia de los otros dos rotores que muestran zonas más focalizadas de transferencia de cantidad de movimiento.

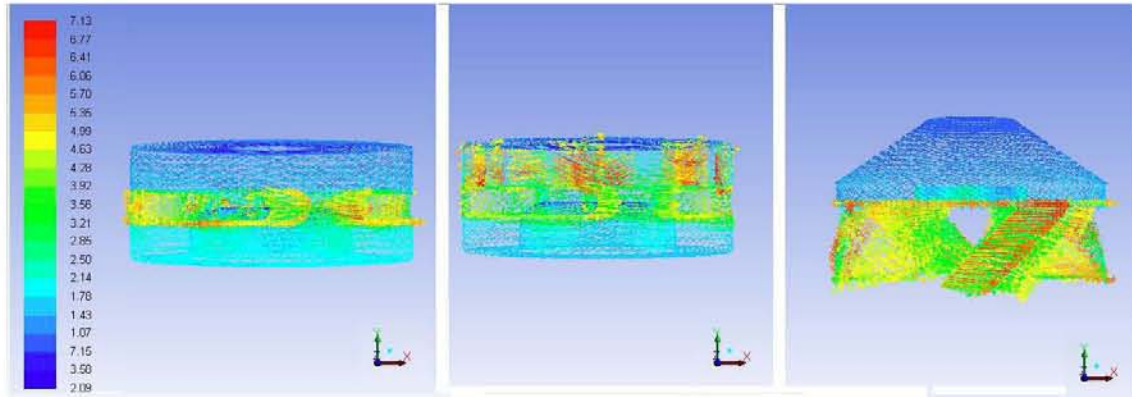


Figura 35. Vectores de velocidad en FLUENT para los tres diferentes diseños geométricos de rotores a 580 RPM y sin inyección de gas.

En la Tabla 8 se muestra el torque (momento), la potencia y el número de potencia para los tres rotores utilizados. El rotor muescado proporciona mayor potencia y torque, seguido del nuevo rotor y por último el rotor estándar. Es muy ligera la diferencia entre la potencia de los rotores estándar y muescado, y aunque es mayor la potencia, el número de potencia y el torque del muescado, se observa de la Figura 35 una mayor uniformidad en el despliegue del torque y por ende de la potencia que entrega el rotor estándar, por lo que su desgaste será menor y más uniforme que en el caso del diseño del rotor con muescas.

Tabla 8. Número de potencia para los tres diferentes diseños geométricos de rotores.

Tipo de rotor	Momento (N·m)	Potencia (W)	Número potencia
Rotor estándar	1.037	62.98	0.666
Rotor estándar muescado	1.381	83.87	0.887
Rotor nuevo diseño	1.215	73.8	0.781

Número de bombeo

La hidrodinámica en un tanque agitado también puede ser caracterizada con el número de bombeo, el cual es una medida de la capacidad de bombeo de un impulsor. El flujo de circulación (Q_l) es el caudal de líquido expulsado por el impulsor de volumen de revolución de dicho impulsor. Los principales parámetros que pueden afectar el flujo de circulación son la velocidad de agitación, el diámetro del impulsor, el diámetro del tanque y la presencia de deflectores. Con el fin de comparar el desempeño de diferentes rotores y establecer reglas de extrapolación, se ha determinado el número característico a partir del análisis adimensional, de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$N_Q = \frac{Q_l}{ND_i^3} \quad (3.6)$$

Donde Q_l es la capacidad de bombeo y el subíndice utilizado es para mostrar que la velocidad de flujo utilizada en el cálculo es únicamente la de la fase líquida, N es la velocidad de rotación (s^{-1}) y D_i es el diámetro del impulsor (m). Para un reactor sin deflectores, como son los casos de estudio de este trabajo, el número adimensional de Froude empieza a cobrar importancia debido a la formación del vórtice, el cual genera

el reingreso de aire de la atmósfera circundante o aeración superficial, como se puede observar en la Ecuación 3.6. En la Tabla 9 se indican los principales parámetros para el cálculo del número de bombeo de los tres rotores utilizados.

Tabla 9. Capacidad y número de bombeo para los tres rotores utilizados.

	Q_1 ($m^3 \cdot s^{-1}$)	N_Q
Rotor Estándar	0.00715	0.180
Rotor Estándar muescado	0.00987	0.249
Rotor nuevo diseño	0.019378	0.489

El número de bombeo fue calculado para los rotores para la velocidad rotacional de 580 RPM y sin inyección de gas de purga. Para aplicar la definición del número de bombeo (Ecuación 3.6) a las simulaciones se creó una superficie de una revolución alrededor de los rotores para poder calcular el flujo másico de descarga de cada uno de ellos. La superficie creada se colocó en los tres casos a 1 cm de distancia de los rotores con la altura de cada uno de ellos.

Es posible observar que de acuerdo a los datos presentados en la Tablas 8, los números de potencia de los tres rotores utilizados son similares, quedando el rotor de nuevo diseño entre los dos rotores con patentes. Sin embargo, los datos presentados en la Tabla 9 de los números de bombeo de los tres rotores demuestra que el rotor de nuevo diseño presenta un alto número de bombeo, lo que finalmente se traduce en un mejor desempeño de este rotor en el mezclado sin un requerimiento extra de energía.

3.3 Planta piloto

En las Figuras 28, 29 y 30 se muestran los resultados de la evolución del hidrógeno en forma adimensional (concentración de hidrógeno instantánea, $[H]$, dividida entre la concentración de hidrógeno inicial, $[H^0]$) en función del tiempo para el rotor estándar, estándar muescado y nueva propuesta de rotor, respectivamente, esta vez con mediciones de contenido de hidrógeno en aluminio puro fundido inyectando argón de manera convencional, es decir, a través de los rotores. Ya se mencionó en el capítulo donde se explica la metodología, que los experimentos con metal líquido requirieron de una gran cantidad de ajuste de detalles experimentales, haciéndola una experimentación compleja, lenta y peligrosa, por lo que se decidió dejar de lado el estudio de las variables de operación (ni flujo de gas, ni velocidad de rotación, ni posición de inyección fueron analizados con la planta piloto), dejando como única variable el diseño del rotor. Precisamente, con estos experimentos en aluminio líquido se pretendió cerrar la propuesta de nuevo diseño de rotor y ratificar su superior desempeño evidenciado previamente con las pruebas de modelado físico en agua, y con modelado CFD, pero esta vez desgasificando realmente aluminio.

Las Figuras 36, 37 y 38 muestran los resultados obtenidos para 1, 3 y 10 minutos de desgasificación. Estas figuras representan la cinética de eliminación del hidrógeno del aluminio líquido utilizando argón industrial como gas de purga. En el eje secundario de las abscisas (a la derecha de la gráfica) se puede observar la evolución de la temperatura durante cada experimento, misma que varía por la misma inyección del argón y por la imposibilidad de obtener un aislamiento perfecto del horno, por lo que las pérdidas por radiación, convección y las inercias térmicas del mismo horno hicieron sumamente difícil el control de la temperatura en una ventana cerrada de valores (ver líneas punteadas con símbolos blancos).

Las curvas que muestran el contenido de hidrógeno (líneas sólidas y símbolos negros) son típicas de las mediciones de hidrógeno en aluminio líquido usando el sistema AISCAN, ya que la medición se logra después de un tiempo en el que se logra un equilibrio termodinámico, mismo que es difícil establecer si la temperatura presenta grandes variaciones. No obstante esta inestabilidad térmica del sistema, se puede afirmar que se alcanzan medidas confiables del contenido de hidrógeno después de los 3 minutos (casi 200 segundos) y a veces hasta los 5 minutos (casi 300 segundos) que corresponden a tiempos en los que la lectura del contenido de hidrógeno ya casi no cambia con el tiempo o dicho de otra forma, cuando las curvas alcanzan un valor constante en el contenido de hidrógeno (horizontales). En la Tabla 10 se muestran las cantidades de hidrógeno iniciales y finales en ml/100g para los tres rotores, como una referencia de las cantidades finales de hidrógeno obtenidas. En estos datos se puede observar que para el rotor de nuevo diseño el contenido final de hidrógeno después de 10 minutos de desgasificado obtiene un contenido de requerimiento industrial aceptable.

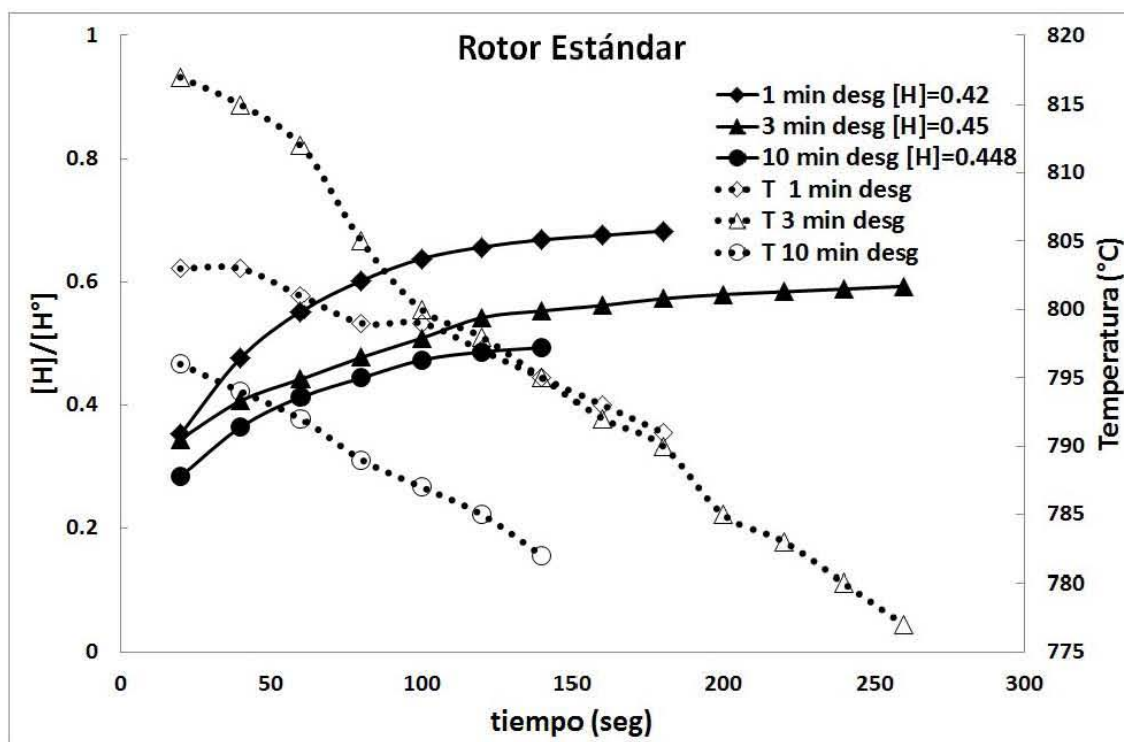


Figura 36. Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando las condiciones de temperatura y concentración inicial de hidrógeno en el fundido para el rotor estándar donde las figuras oscuras indican la evolución del contenido de hidrógeno y las figuras blancas la evolución de la temperatura.

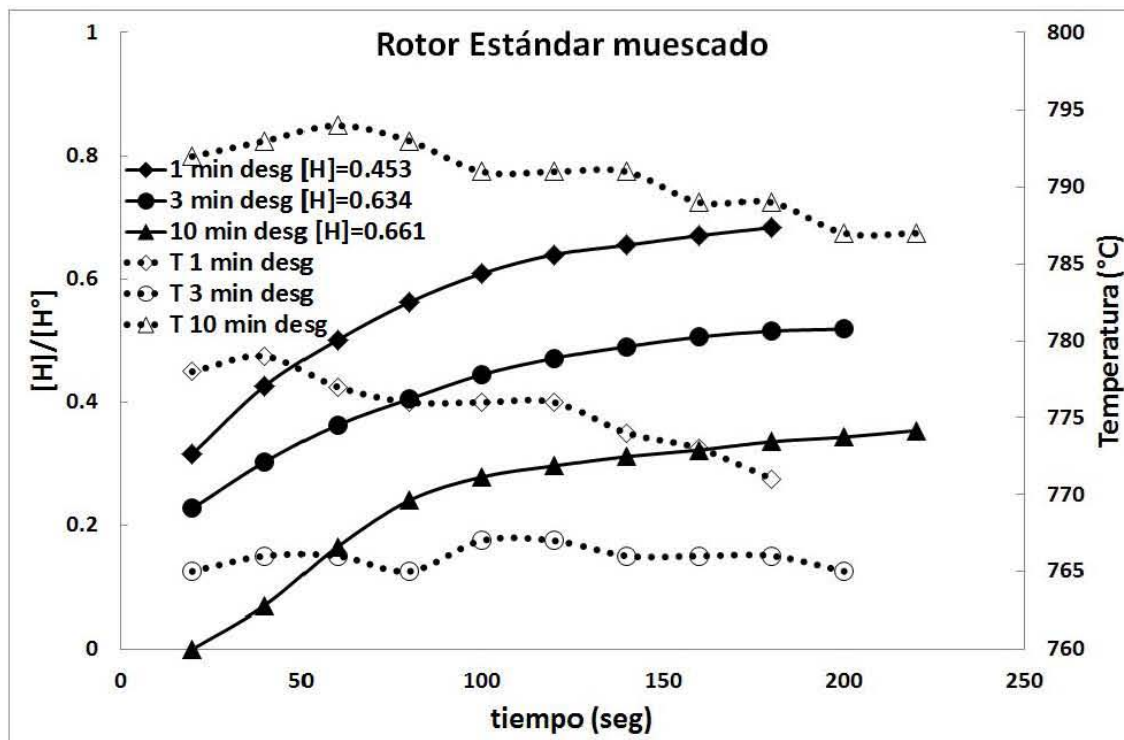


Figura 37. Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando las condiciones de temperatura y concentración inicial de hidrógeno en el fundido el rotor estándar muescado donde las figuras oscuras indican la evolución del contenido de hidrógeno y las figuras blancas la evolución de la temperatura.

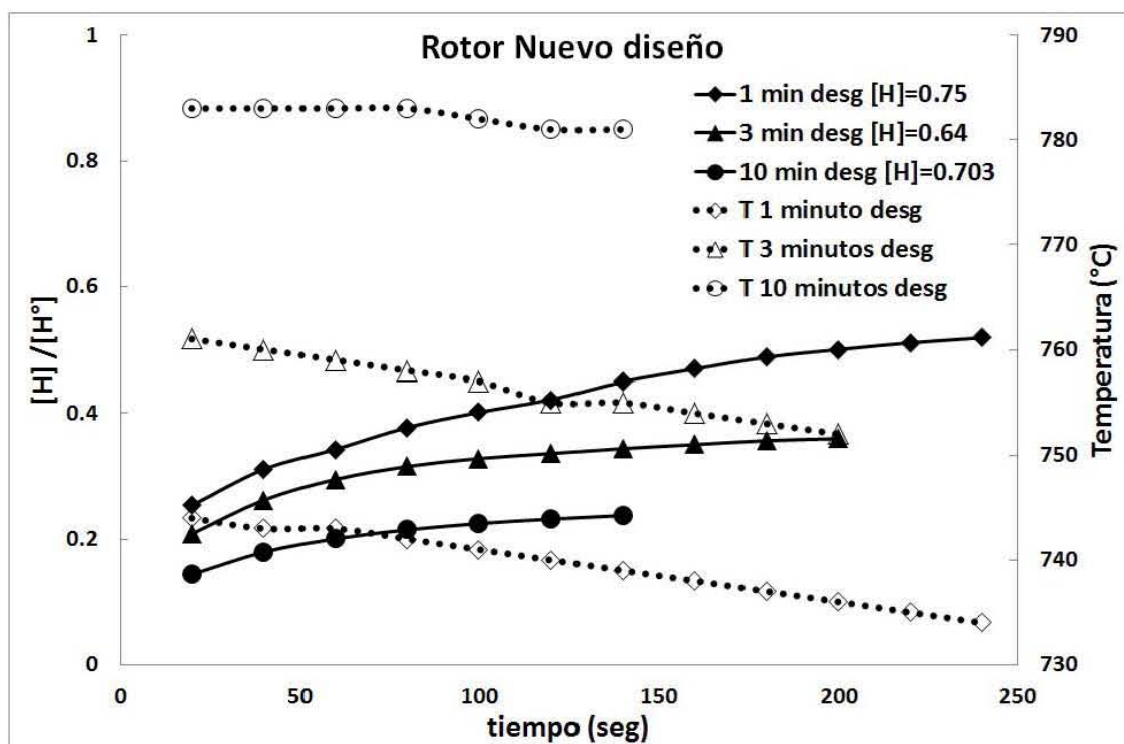


Figura 38. Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando las condiciones de temperatura y concentración inicial de hidrógeno en el fundido para el rotor nuevo diseño donde las figuras oscuras indican la evolución del contenido de hidrógeno y las figuras blancas la evolución de la temperatura.

Tabla 10. Concentración inicial y final de hidrógeno (ml/100g) para los tres rotores utilizados obtenidos en la planta piloto con aluminio líquido.

Tiempo desgasificado (segundos)	Rotor Estándar		Rotor Estándar muescado		Rotor Nuevo diseño	
	[H°]	[H _{final}]	[H°]	[H _{final}]	[H°]	[H _{final}]
60	0.42	0.287	0.453	0.31	0.75	0.389
180	0.45	0.267	0.634	0.329	0.634	0.228
600	0.448	0.221	0.661	0.234	0.703	0.167

Se aprecia para los tres rotores que al aumentar el tiempo de desgasificado, se obtiene menor contenido de hidrógeno. A pesar de que no todos los experimentos de desgasificado partieron del mismo contenido inicial de hidrógeno, si es muy claro como va disminuyendo el contenido de hidrógeno con el tiempo de tratamiento. En cuanto al tipo de rotor se nota que el diseño nuevo, desgasifica en 1 minuto casi la mitad del hidrógeno y con 10 minutos casi el 80% del hidrógeno inicialmente presente en el fundido, mientras que los rotores muescados y estándar logran desgasificaciones en un minuto sólo el 40% en ambos casos y a los 10 minutos el rotor estándar solo logró desgasificar el 50% del hidrógeno inicial, mientras que el rotor muescado desgasificó casi el 70% de hidrógeno, por lo que se puede afirmar que el rotor nuevo mostró un mejor desempeño con las mismas condiciones de operación que los otros dos rotores.

En la Figura 39 se muestran los resultados de contenido de hidrógeno final en función del tiempo para los tres tipos de rotores utilizados, donde se aprecia que el rotor nuevo siempre muestra un contenido de hidrógeno menor al resto de los rotores (relativo al contenido inicial de hidrógeno en el baño). El rotor muescado muestra un desempeño intermedio, mientras que el rotor estándar mostró el peor desempeño.

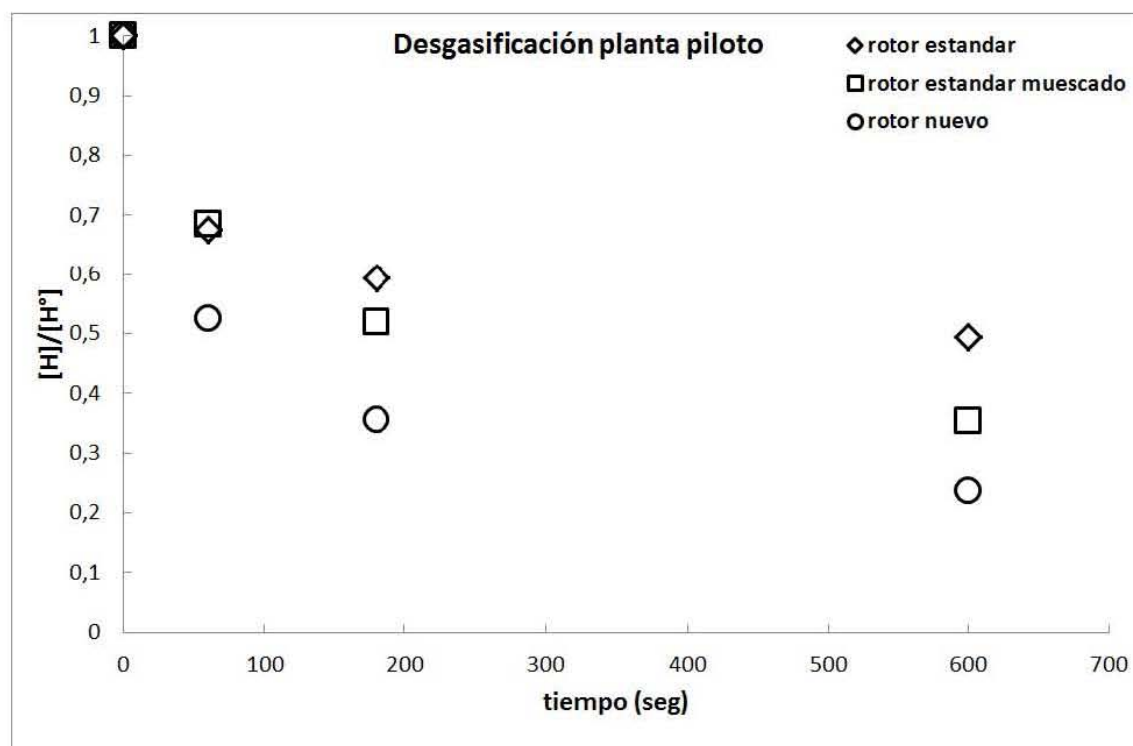


Figura 39. Resultados experimentales de la desgasificación en la planta piloto, mostrando la cinética de desoxidación adimensional para los tres tipos de rotores utilizados.

Capítulo IV

Conclusiones

- El modelo matemático de la desoxidación de agua fue validado exitosamente al coincidir las predicciones con las mediciones experimentales de la cinética de desgasificado hechas en este trabajo. Esta validación se realizó únicamente con el rotor estándar, ya que las cinéticas obtenidas con este rotor coinciden con las correlaciones de Lemoine y que son base del modelo. Sólo se encontraron pequeñas desviaciones entre el modelo y las predicciones para la inyección convencional para ambas velocidades de rotación y flujos de gas altos, donde dichas desviaciones son atribuidas a la presencia de un vórtice, el cual incrementa el área superficial del baño y provoca como consecuencia el transporte de masa de aire hacia el baño a través de dicha superficie libre, mecanismo de absorción de oxígeno que el modelo no consideró o despreció.

En general, del análisis del proceso hecho con modelado físico, se encontró que:

- Los menores tiempos de desgasificado se alcanzaron con altas velocidades de rotación y altos flujos de inyección de gas de purga en ambas técnicas de inyección para los tres diseños geométricos de rotores utilizados. Así mismo, los tiempos más largos de desgasificación suceden para las condiciones contrarias, es decir, bajas velocidades de rotación y bajos flujos de inyección de gas. Respecto a la técnica de inyección se observó una ligera mejoría para el rotor estándar y el rotor de nuevo diseño con la inyección novel.
- Las mejores eficiencias en el consumo de gas (ECG) experimentales se alcanzaron para altas velocidades de rotación y bajos flujos de gas, 580 RPM y 10 LPM, utilizando la técnica de inyección novel para el rotor estándar y con altas velocidades de rotación pero altos flujos de gas, 580 RPM y 40 LPM, y la técnica de inyección convencional para los rotores estándar muescado y de nuevo diseño. Mientras que las peores eficiencias se alcanzaron para bajas velocidades de rotación y altos flujos de gas; para el rotor estándar con la técnica convencional y para el rotor estándar muescado y el rotor de nuevo diseño con la técnica novel. Es importante mencionar que las diferencias entre las mejores y peores ECG para los rotores estándar muescado y nuevo diseño son menores que para el caso del rotor estándar, en el cual es significativa la diferencia entre ambas ECG
- Altos flujos de gas aumentan la fracción de gas en el reactor lo que incrementa el área interfacial disponible para capturar gases disueltos. Adicionalmente, y también de manera general, las altas velocidades del rotor provocan tamaños de burbuja menores, más turbulencia, y una fuerte agitación y circulación del líquido, lo que resulta en baños mejor mezclados y en un incremento del área interfacial burbuja-líquido. Ambos efectos (flujo de gas y velocidad de rotación del rotor) mejoran la cinética de desgasificado.

Del análisis estadístico para evaluar el efecto de las variables sobre el consumo de gas para eliminar 90% de gas y sobre la constante cinética, la cual se calculó suponiendo que tanto la cinética de desoxidación del agua como la eliminación de hidrógeno del aluminio líquido son los mecanismos controlantes y sus cinéticas son de primer orden, se encontró que:

- Para el rotor estándar, respecto a la cinética de desoxidación, el flujo de gas (Q) y la velocidad del rotor (N), así como su mutua interacción son los efectos más significativos. Un incremento en Q mejora la cinética en 0.0023 unidades de $k_m A_b$ (50–70%), mientras que un aumento en N acelera la cinética en 0.0045 unidades de $k_m A_b$ (130–200%). El punto de inyección no tiene un efecto significativo para este rotor. El flujo de gas, la velocidad del rotor y su mutua interacción determinan por mucho la eficiencia en el consumo de gas, que se reduce en 0.028 unidades de e (volumen total del gas de purga necesario para eliminar el 90% del oxígeno disuelto) al aumentar Q (100–160% of reducción), mientras que se presenta un aumento de 0.03 unidades de e al incrementar N (100–160%). El mejor desempeño en cuanto al consumo de gas se alcanzó con la inyección de gas por el fondo del reactor.
- Para el rotor estándar muescado, la cinética de desgasificado depende de forma significativa de la velocidad del rotor y del flujo de gas inyectado, así como de la interacción entre estas dos variables. Un incremento en el flujo de gas incrementa la cinética hasta en un 120% (0.0015 unidades de $k_m A_b$), mientras que un aumento en la velocidad del impulsor incrementa la misma más del 200% (0.0059 unidades de $k_m A_b$). La interacción del flujo con la velocidad del rotor ejerce un claro impacto en la eficiencia en el consumo de gas (0.0266 unidades de e), seguido obviamente por el efecto de N (0.015 unidades de e). Hubo dos experimentos que no alcanzaron el nivel de desgasificado del 90% y en consecuencia no existe un valor numérico aceptable, por lo que análisis resultó incompleto, sin embargo se confirma que la combinación adecuada (interacción) de N y Q es vital para este rotor.
- Para el rotor de nuevo diseño, el análisis estadístico mostró que sólo los efectos simples de flujo de gas y velocidad de rotación son las variables más significativas, y en este caso los aumentos de ambas variables promueven una cinética de desgasificado más rápida, en donde un incremento en la velocidad del rotor aumenta $k_m A_b$ de 110-250% (0.005 unidades N y 0.004 unidades Q). En cuanto al consumo de gas, éste se ve afectado por los efectos simples de todas las variables, siendo la posición de inyección y el flujo de gas los factores más determinantes, en los cuales un incremento en el flujo de gas y la inyección por el fondo provocan una menor eficiencia en el consumo de gas, siendo en este caso benéficos una inyección convencional y un flujo moderado de gas. Un incremento en la combinación de la velocidad de rotación y el flujo de gas resulta en una significativa mejora en el consumo de gas y el efecto de la velocidad de rotación con la posición de inyección presenta una ligera mejora en el consumo de gas al utilizar la inyección novel pero en combinación con altas velocidades de rotor.
- Como recapitulación del análisis estadístico realizado para la eficiencia en el consumo de gas (ECG) y la cinética de desgasificado para los tres rotores se observa que la variable más significativa fue siempre la velocidad de rotación seguida por el flujo de gas y la interacción entre ambas variables. El tipo de inyección no resultó ser una variable significativa.
- Se realizó la optimización mediante el uso del software MATLAB® para minimizar el consumo de gas de purga inyectado y maximizar la cinética de desgasificación a través del uso del modelo matemático, es decir, sólo válida para el rotor estándar, constatando que para el rotor estándar las condiciones de alta velocidad de rotación

y un flujo moderado (580 RPM y 10 L/min) son las óptimas para ambas técnicas de inyección.

En los resultados de simulación numérica del proceso de desgasificación se pudo observar y constatar de los resultados del modelo físico que:

- El modelo fue validado parcialmente, ya que no pudo predecir exactamente los patrones de flujo medidos, aunque sí se predijo correctamente su tendencia y además se presentó una exitosa validación de los vórtices predichos por el modelo respecto a los tamaños y formas de los vórtices medidos experimentalmente en el modelo físico de agua.
- Se tiene una ventaja con la inyección novel con respecto a la convencional al mostrar la misma mayores fracciones de gas de purga remanentes dentro del reactor, así como mayor turbulencia y mejor distribución de la misma en todo el reactor, generando en consecuencia mayor y mejor agitación y mezclado.
- Se ratificó que el diseño geométrico del rotor utilizado es una de las principales variables que influyen en la dinámica de fluidos gobernante en el reactor.
- El rotor de nuevo diseño confirma su predominio sobre los otros dos rotores comerciales mostrando una mejor agitación dentro de todo el reactor, así como un mayor vórtice, un incremento en el ángulo de descarga del líquido y aumento en la turbulencia dentro del reactor. Lo anterior se corroboró con el número de potencia y de bombeo, en donde el rotor nuevo obtuvo el mayor número de bombeo y un número de potencia mediano, lo que finalmente se traduce en un mejor desempeño de este rotor en el mezclado sin un requerimiento extra de energía.

En los experimentos en planta piloto con metal líquido se fijaron las variables de operación para exclusivamente analizar el efecto del diseño del rotor sobre la cinética de eliminación del hidrógeno del aluminio líquido a través de la inyección de argón, obteniendo que:

- En cuanto al tipo de rotor, se observó que el rotor de nuevo diseño, desgasifica en 1 minuto casi la mitad del hidrógeno y con 10 minutos casi el 80% del hidrógeno inicialmente presente en el fundido, mientras que los rotores estándar y muescado logran desgasificaciones de sólo el 40% en un minuto en ambos casos y a los 10 minutos el rotor estándar únicamente logró desgasificar el 50% del hidrógeno inicial, mientras que el rotor muescado desgasificó casi el 70% de hidrógeno, por lo que se puede afirmar que el rotor nuevo tiene un mejor desempeño que los otros dos rotores bajo las mismas condiciones de operación; lo que es congruente con los resultados del modelado físico y del modelado matemático CFD y se confirma a través de los experimentos de desgasificado de aluminio líquido real.

Respecto a la geometría de los rotores, se concluye que como resultado de las aspas del rotor de nuevo diseño maximiza el esfuerzo cortante al gas inyectado, creando burbujas más pequeñas y con una mejor distribución en el reactor.

Bibliografía

1. Cruz Méndez, W.F., *Modelo Cinético y Termodinámico de la Desoxidación Aplicado a un Modelo Físico del proceso de Desgasificación con Rotor-Inyector*, in *Facultad de Química* 2013, UNAM: México, D. F.
2. Industry, I.A. *International Aluminum Industry's Perfluorocarbon Gas Emissions Reduction Programme* 2011.
3. F., G.J., et al., *Mathematical and Physical Modelling of Melt Treatment Process*. *Light Metals*, 1990: p. 737-746.
4. Neff, D.V., *Understanding Aluminum Degassing*. *Modern Casting*, 2002. **95**(5): p. 24-26.
5. Sieverts, A.Z., *Absorption of Gases by Metals*. *Zeitschrift für Metallkunde*, 1929. **21**: p. 37-46.
6. Ransley, C.E. and H. Neufeld, *Solubility of Hydrogen in Liquid and solid Aluminum*. *J. Inst. Metals*, 1947. **74**: p. 559-620.
7. Opie, W.R. and W.J. Grant, *Hydrogen Solubility in Aluminum and Some Aluminum Alloys*. *Transactions AIME, Journal of Metals*, 1950. **188**: p. 1237-1241.
8. Wood, G.C., P.N. Anyalebechi, and D.E.J. Talbot. *A New Technique for Determining the Hydrogen Content of Aluminum and its Alloys by Vacuum Hot Extraction*. in *International Seminar of Refining and Alloying of Liquid Aluminum and Ferro-Alloys*. 1985. Trondheim, Norway.
9. Degreve, F. and C. Jardin, *New Methods for the Determination of Hydrogen Content of Aluminium and its Alloys, Part II Rapid Determination of Hydrogen Nitrogen Carrier Gas Fusion Method*. *Met. Trans. B.*, 1975. **6B**: p. 545-570.
10. Sloman, H.A., *Vacuum-Fusion Method for Determine Gases in Non-Ferrous Metals*. *Engineering*, 1945. **160**: p. 405-420.
11. Hess, P.D., *An Empirical Equation for Calculating the Solubility of Hydrogen in Molten Aluminum Alloys*. *Light Metals*, 1974: p. 591-596.
12. Painchaud, F. and J.P. Martin, *The New AlSCAN Analyzer: Easy to use, Reliable, On Line Measurement of Hydrogen in Liquid Aluminum Alloys*, in *International Conference on Molten Aluminum Processing* 1989: Orlando, FL.
13. Zou, J., et al. *Microporosity Formation in A356.2 Castings*. in *Proceeding of the International Symposium on Production, Refining, Fabrication and Recycling of Light Metals*. 1990. Hamilton, Ontario, Canada Canadian Institute of Metallurgist.
14. Zou, J., S. Shivkumar, and D. Apelian. *Modeling of Porosity Formation in Grain Refined Aluminum Castings*. in *Proceeding of the Symposium of Process Modeling*. 1991. Warrandale, PA.
15. Jay, R. and A. Cibula, *Influence of Magnesium Content on Layer Porosity and Tensile Properties of Sand-cast Aluminum/Magnesium Alloys, B.S. 1490-LM10 and B.S. (Aircraft) L.53*. *Foundry Trade Journal*, 1956. **131**: p. 131-147.
16. Fang, Q.T. and D.A. Gragner, *Porosity Formation in modified and unmodified A356 Alloy Casting*. *AFS Transactions*, 1989. **97**: p. 989-1000.
17. E., G.J. and C.B. M., *The treatment of liquid aluminum-silicon alloys*, ed. I. American Foundrymen's society. 1990, USA.
18. Steward, C., *Improved Hearth for Working and Refining Iron*, 1859: USA.

19. Tullis, D.R., *Note on the Treatment of Aluminum and Aluminum Alloys with Chlorine*. Journal Inst. Of Metals 1928: p. 40-55.
20. Tullis, D.R., *Cindal-A New Aluminum Alloy*. The Metal Industry, 1928. **31**: p. 487-499.
21. Koch, W., *Zeitschrift für Metallkunde*, 1931. **34**: p. 95-100.
22. Dautzenberg, W., *Metall*, 1950. **4**: p. 125-150.
23. Alfredo, F., et al., *Kinetic study of the magnesium removal from molten aluminum using Ar-SF₆-O₂ gaseous mixtures*. Light Metals, 2007: p. 639-644.
24. C., C. and D. Doure, *Theoretical and Experimental Investigation of Furnace Chlorine Fluxing*. Light Metals, 1988: p. 793-800.
25. Guttery, J. and W. Evans, *A New Generation of Fluxing in Aluminum Melting and Holding Furnaces*. Light Metals, 1994: p. 921-927.
26. Guttery, J., *A Two Year User's Experience with Porous Plugs Fluxing in a Modern Casting Facility*. Light Metals, 1993: p. 899-905.
27. Szekely, A.G., *Process for refining molten aluminum*, 1975: USA.
28. Szekely, A.G., *Degassing Molten Melt*, 1966: USA.
29. Marshal, B., et al., *Treatment of molten aluminum with an impeller*, 1973: USA.
30. Sigworh, G.K. and T.A. Engh, *A Scientific Bases for Degassing Aluminium*. AF Transactions 1982. **87**: p. 73-78.
31. Engh, T.A. and T. Pederson, *Removal Hydrogen from Molten Aluminum by Purging*. Light Metals, 1984: p. 1329-1343.
32. Zhang, L., et al., *Removal of Impurity Elements from Molten Aluminum: A Review*. Mineral Processing & Extractive Metallurgy Review, 2011. **32**: p. 150-228.
33. Gariepy, B. and G. Dube, *TAC: new process for molten aluminum refining*. Institute of Metals 1986: p. 111-116.
34. Saternus, M. and J. Botor, *The hydrodynamic of the system: Liquid aluminium alloy refining gas*. Archives of Metallurgy and Materials, 2005. **50**(4): p. 879-892.
35. Saternus, M. and J. Botor, *Aluminium refining process – methods and mathematical models*. Aluminum, 2005. **81**(3): p. 209-216.
36. Taylor, M.B., *Molten metal fluxing/treatment: How best to achieve the desired quality requirements*. Aluminum, 2003. **79**(2): p. 44-50.
37. Hampton, D.T., A. Moores, and J.L. Tessandori, *Review of operation and performance of the rapid degassing*. Light Metals, 1991: p. 1159-1163.
38. Mirgaux, A., et al., *Mathematical modeling and computer simulation of molten aluminum purification by flotation in stirred reactor*. Materials Transaction B, 2009. **40B**(3): p. 363-375.
39. Chen, J.J. and J.C. Zhao, *Bubble distribution in a melt treatment water model*. Light Metals, 1995: p. 1227-1231.
40. Strand, P.G., *Hycast RAM refining of potroom metal*. Aluminum Today, 2000. **12**(4): p. 30-32.
41. Rash, B., E. Myrbostad, and K. Hatsas, *Refining of potroom metal using the hydrogen RAM crucible fluxing process*. Light Metals, 1998: p. 851-854.
42. Petho, S., *Experience of Alcoa-Kofem with MHD induction stirrer*. Light Metals, 1996: p. 857-860.

43. Stevens, J.G. and H. Yu, *A computer model investigation of the effects of operation parameters on the hydrogen removal rate in the Alcoa 622*. Light Metals, 1992: p. 1023-1029.
44. Szekely, A.G. *Alternative to Cl₂ fluxing of Al-SNIF process*. in *Proceedings of Second International Aluminum Extrusion Technology Seminar*. 1977. Atlanta, GA.
45. Bildstein, J. and J.M. Hicter, *The development of the Alpur systems for the in-line treatment of molten aluminum and aluminum Alloys*. Light Metals, 1985: p. 1209-1224.
46. Clumpner, J.A., *Method for the Degassing and Filtration of Molten Metal*, S.A. Ltd., Editor 1979: USA.
47. Saternus, M. and J. Botor, *Physical model of aluminum refining process in URC-7000*. *Metabk*, 2009. **48**(3): p. 175-179.
48. Boop, J.T., D.V. Neff, and E.P. Stankiewicz, *Degassing multicast filtration system – new technology for producing high quality molten metal*. Light Metals, 1987. **729-736**.
49. Chin, E.J., et al., *GIFS – a novel approach to in-line treatment of aluminum*. Light Metals, 1994: p. 929-936.
50. Waite, P.D., *Treatment of molten light metals and apparatus*, 1989: USA.
51. Waite, P. and R. Thiffault, *The Alcan compact degasser: A trough-based aluminum treatment process. Part I: metallurgical principles and performance*. Light Metals, 1996: p. 1001-1005.
52. Saha, D., J.S. Becker, and L. Gluns, *A new in-line aluminum treatment system using nontoxic gases and a gas-permeable vessel bottom*. *Productivity and Technology in the Metallurgical Industries*, 1989: p. 855-877.
53. Maeland, G., E. Myrbostad, and K. Venus, *Hycasti-60 SIR – a new generation in-line melt refining system*. Light Metals, 2002: p. 855-859.
54. Zhang, L., et al., *Mathematical Modeling on the Removal of Impurity Elements from Molten Aluminum*. *Mineral Processing & Extractive Metall. Rev.*, 2012. **33**: p. 1-54.
55. Fu, Q. and J.W. Evans, *Chlorine fluxing for removal of magnesium from molten aluminum: Part II. Mathematical model*. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1998. **29B**: p. 979-986.
56. Johansen, S.T., et al., *Can rotor-based refining units be developed and optimized based on water model experiments*. Light Metals, 1998: p. 805-810.
57. 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.
58. Johansen, S.T., et al., *Experimental determination of bubble sizes in melt refining reactors*. Light Metals, 1996: p. 1027-1031.
59. Nilmani, M. and P.K. Thay, *Gas Fluxing Operation in Aluminium Melt Refining Laboratory and Plant Investigations, in 119th TMS Annual Meeting*, L. Metals, Editor 1990, The Minerals, Metals & Materials Society. p. 747-754.
60. Han, J.W.e.a., *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.
61. 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**: p. 119-126.
62. Sano, M. and K. Mori, *Rate Determining Mechanism of Degassing by Inert Gas Flushing in Molten Metal.* Transactions of The Japan Institute of Metals, 1982. **23**(8): p. 440-450.
 63. Wang, L., et al., *Rotary Impeller Refinement of 7075Al Alloy.* Rare Metals, 2009. **28**(3): p. 309-312.
 64. Rasch, B., E. Myrbostad, and K. Hatsas, *Refining of potroom metal using the hydrogen RAM crucible fluxing process.* Light Metals, 1998: p. 851-854.
 65. Dantzig, J.A., J.A. Clumpner, and D.E. Tyler, *Degassing of static melts by insoluble purge gases.* Metallurgical and Materials Transactions B, 1980. **11B**: p. 433-438.
 66. Botor, J., *Activation energy of mass transfer of hydrogen from molten aluminum into the N₂, Ar and Cl₂ bubbles.* Bulletin of Academy of Political Science 1979. **27**: p. 817-824.
 67. Botor, J., *Kinetic of hydrogen-degassing of molten aluminium by purge.* Aluminium, 1980. **56**(8): p. 519-522.
 68. Botor, J., *Kinetic of liquid aluminum with desgassing N₂ and Cl₂.* Metalurgia Iodlewnictwo, 1980. **6**(1): p. 21-27.
 69. Sigworth, G.K., *A Scientific Basis for Degassing Aluminum.* AFS Transactions 1987. **95**: p. 73-78.
 70. Sigworth, G.K. and T.A. Engh, *Chemical and kinetic factors related to hydrogen removal from aluminum.* Metallurgical and Materials Transactions B, 1982. **13B**: p. 447-460.
 71. Engh, T.A., *Principles of Metal Refining.* 1992, New York: Oxford University Press Inc.
 72. Sigworth, G.K., *Gas fluxing of molten aluminum—Part 1: Hydrogen Removal.* Light Metals, 1999: p. 641-648.
 73. Simensen, C.J. and M. Nilman, *A computer model for alkali removal from molten aluminium.* Light Metals, 1996: p. 995-1000.
 74. Mazumdar, D. and R.I.L. Guthrie, *The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems.* ISIJ International, 1995. **35**(1): p. 1-20.
 75. Mazumdar, D. and J.W. Evans, *Macroscopic models for gas stirred ladles.* ISIJ International, 2004. **44**(3): p. 447-461.
 76. Iguchi, M., et al., *Measurement of Bubble Characteristics in a Molten Iron Bath at 1600°C using an Electroresistivity Probe.* Metallurgical and Materials Transactions B, 1995. **26B**: p. 67-74.
 77. Diaz, M.C., S.V. Komarov, and M. Sano, *Bubble Behavior and Absorption Rate in Gas Injection through Rotary Lances.* ISIJ International, 1997. **37**(1): p. 1-8.
 78. Fu, Q., D. Xu, and J.W. Evans, *Chlorine fluxing for removal of magnesium from molten aluminum: Part I. Laboratory-scale measurements of reaction rates and bubble behavior.* Metallurgical and Materials Transactions B, 1998. **29B**: p. 971-978.
 79. Chen, J., et al. *Flow Pattern Detection in a Melt Treatment Water Model Based on Shaft Power Measurements.* in *TMS Annual Meeting.* 2001. Wattendale.
 80. Tovio, D.O., et al., *Formation and size of bubbles in degassing system of aluminum alloys.* AFS Transactions 2000. **108**: p. 457-462.

81. Chen, J.J. and J.C. Zhao, *Bubble distribution in a melt treatment water model*. Light Metals, 1995: p. 1227–1231.
82. Oldshue, J.Y., *Suspending Solids and Dispersing Gases in Mixing Vessel*. Industrial and Engineering Chemistry, 1969. **61**(9): p. 79-89.
83. Saternus, M., *Influence of Impeller Shape on the Gas Bubbles Dispersion in Aluminium Refining Process*. J. of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering, 2012. **55**(2): p. 285-290.
84. Chiti, F., A. Paglianti, and W. Bujalshi, *A mechanistic model to estimate powder consumption and mixing time in aluminum industries*. Chemical Engineering Research and Design, 2004. **82**(9A): p. 1105–1111.
85. Lemoine, R. and B.I. Morsi, *An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in agitated reactors*. Chemical Engineering Journal, 2005. **114**: p. 9-31.
86. Pehlke, R.D., J. Arden, and L. Bement, *Mass Transfer of Hydrogen between Liquid Aluminum and Bubbles of Argon Gas*. Transactions of TMS-AIME 1962. **224**(1237-1242).
87. Hop, B., et al., *The fluid mechanics in the H110 Hycast reactor*. Light Metals, 1997: p. 837–841.
88. 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**: p. 581-591.
89. Saternus, M. and J. Botor, *The Physical and Mathematical Model of Aluminum Refining Process in Reactor URO-200*. Advanced Processing of Metals and Materials, 2006. **1**: p. 697-710.
90. Camacho-Martinez, J.L., et al., *Novel Degasification Design for Aluminum Using an Impeller Degasification Water Physical Model*. Materials and Manufacturing Processes, 2012. **27**: p. 556-560.
91. Nilmani, M. and P.K. Thay, in *119th TMS Annual Meeting*, L. Metals, Editor Gas Fluxing Operation in Aluminium Melt Refining Laboratory and Plant Investigations, The Minerals, Metals & Materials Society. p. 747-754.
92. Mi, G., et al., *Analyses of the Influencing Factors of Rotating Impeller Degassing Process and Water Simulation Experiment*. Materials Science Forum, 2008. **575 – 578** p. 1258-1265.
93. Boeuf, F., M. Rey, and E. Wuilloud, *Metal Batch Treatment Optimization of Rotor Running Conditions*, in *Proc. of the 122nd Annual Meeting* 1993, The Minerals, Metals & Materials Society p. 927-932.
94. Bujalski, W., et al., *Mixing studies Related to the Cleaning of Molten Aluminum*. Chem. Eng. Technol., 2004. **27**(3): p. 310-314.
95. Warke, V.S., G. Tryggvason, and M.M. Makhlof, *Mathematical Modeling And Computer Simulation Of Molten Metal Cleansing By The Rotating Impeller Degasser Part I. Fluid Flow*. Journal Of Materials Processing Technology 2005. **168**: p. 112-118.
96. Ramos-Gomez, E., et al., *Mathematical Modeling of Fluid Flow in a Water Physical Model of an Aluminum Degassing Ladle Equipped with Impeller-Injector*. Metallurgical and Materials Transactions B, 2013. **44B**: p. 423-435.
97. Dong, L., S.T. Johansen, and T.A. Engh, *Flow induced by an impeller in an unbaffled tank—II. Numerical Modeling*. Chemical Engineering Science 1994. **49**(20): p. 3511-3518.

98. Johansen, S.T. and F. Boysan, *Fluid Dynamics in Bubbled Stirred Ladles. Part II: Mathematical Modeling*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1988. **19B**(755-764).
99. Ilegbusi, O.J. and J. Szekely, *The Modeling of Gas-Bubble Driven Circulations Systems*. ISIJ International, 1990. **30**(9): p. 731-739.
100. Johansen, S.T., A. Fredriksen, and B. Rasch, *Particle Flotation to Bubbles in Rotor-Stirred reactors for Melt Treatment*. Light Metals, 1995: p. 1203-1206.
101. Hop, B., S.T. Johansen, and B. Rasch, *A 3D Numerical Model for Removal of Inclusions to Gas Bubbles*, in *EPD Congress1996*. p. 647-656.
102. Waz, E., et al., *Physical Modeling of the Aluminum Degassing Process: Experimental and Mathematical Approaches*. Light Metals, 2003: p. 901-907.
103. Maniruzamman, M. and M. Makhoulf, *Mathematical Modeling and Computer Simulation of the Rotating Impeller Particle Flotation Process: Part II. Particle Agglomeration and Flotation*. Metallurgical and Materials Transactions B, 2002. **33B**: p. 305-314.
104. Maniruzamman, M. and M. Makhoulf, *Mathematical Modeling and Computer Simulation of the Rotating Impeller Particle Flotation Process: Part I. Fluid Flow* Metallurgical and Materials Transactions B, 2002. **33B**: p. 297-303.
105. Cooper, P.V., *Molten Metal Pump with Monolithic Rotor*, 2000: USA.
106. FOSECO, *The Technology of Batch Degassing for Hydrogen Removal from Aluminium Melts Utilising Different Rotor Designs*, 2010. p. 11-17.
107. Nilmani, M., P.K. Thay, and C.J. Simensen, *A Comparative Study of Impeller Performance*. 1992: p. 939-946.
108. Sideman, S., O. Hortascu, and J.W. Fulton, *Mass Transfer in Gas-Liquid Contacting Systems*. Ind. & Engng. Chem., 1996. **58**: p. 32-47.
109. Sweeney, V.D., *Pump for Molten Metal*, 1962: USA.
110. Koch, C.F., *Molten Metal Pumps*, 1974: USA.
111. Van Linden, J.H.L., *Aluminum Scrap Reclamation*, 1976: USA.
112. Van Linden, J.H.L., *Aluminum Scrap Reclamation*, 1978: USA.
113. Grenole, J.G., *Rotary Gas Dispersion Device for the Treatment of a Bath of Liquid Metal*, 1984: USA.
114. Gilbert, R.E., *Molten Metal Pump with Vaned Impeller*, 1996: USA.
115. Vild, C.T., *Molten Metal Impeller*, 2001: USA.
116. Schmeisser, D., *Rotor*, 2010, FOSECO International Limited: USA.
117. Chen, J.J. and M. Nilmani, *An Analysis of Impeller Performance Based on an Air-Water Model*. Light Metals, 2005: p. 911-914.
118. Szekely, J., *Fenómenos de Flujo de Fluidos en Procesamientos de Metales*. 1988, México, D.F.: Limusa. 494.
119. Wang, D. and R.A. Overfelt, *Oscillating Cup Viscosity Measurements of Aluminum Alloys: A201, A319 adn A356*. International Journal of Thermophysics, 2002. **23**(4): p. 1063-1076.
120. Saha, D., *Gas Interactions in Nonferrous Metals Processing*. The Minerals, Metals & Materials Society, 1996: p. 127-143.
121. Robles-Flores, I., *Modelado Físico de la Fluidinámica durante la desgasificación de Al por la técnica del rotor-inyector*, in *Facultad de Química2009*, UNAM: México, D.F.
122. Torres-Patino, I., *Estudio de una Nuevo Técnica de Desgasificación con rotor-inyector asistido por Modelado Físico y Matemático*, in *Facultad de Química2010*, UNAM: México, D.F.

123. Inc., A., *ANSYS FLUENT: Theory Guide*. Vol. 14. 2013.
124. Marden Marshall, E. and A. Bakker, *Computational Fluid Mixing*. 2003, Lebanon, New Hampshire, USA.: Fluent Inc.
125. Tu, J., G. Heng, and C. Liu, *Computational Fluid Dynamics, A Practical Approach*. 2008: Elsevier.
126. Launder, B.E. and Spalding, *The Numerical Computation of Turbulent Flows*. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1974. **3**(2): p. 269-289.
127. Mamoru, I. and Z. Novak, *Drag Coefficient and Relative Velocity in Bubbly, Droplet or Particulate Flows*. AIChE J., 1979. **25**(5): p. 834-855.
128. Ramos-Gomez, E., *Modelado Físico y Matemático del Desgasificado de Aluminio Líquido equipado con Rotor-Inyector*, in *Posgrado en Ciencia e Ingeniería de Materiales 2011*, UNAM: México, D.F.
129. Schiller, L. and Z. Naumann, *Deutsch. Ing.*, 1935. **77**: p. 318.
130. Morsi, S.A. and A.J. Alexander, *An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems*. J. Fluid Mech., 1972. **55**(2): p. 193-208.

Effect of Process Variables on Kinetics and Gas Consumption in Rotor-Degassing Assisted by Physical and Mathematical Modeling

M. HERNÁNDEZ-HERNÁNDEZ, W. CRUZ-MÉNDEZ, C. GONZÁLEZ-RIVERA, AND M. A. RAMÍREZ-ARGÜEZ

Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Facultad de Química, UNAM, México D.F., México

Mathematical and physical models of water deoxidation in a batch aluminum degassing reactor using the rotor-injector technique were developed. The mathematical model was successfully validated against measured degassing kinetics. The physical model was employed to perform a process analysis using a two-level factorial experimental design to determine the influence of gas flow rate, impeller angular velocity, and gas injection points on gas consumption efficiency and degassing kinetics. A combination of higher rotor speeds and gas flow rates results in fast degassing kinetics. However, moderate gas flow rates are recommended to save gas.

Keywords: Aluminum; Batch; Degassing; Deoxidation; Experimental; Foundry; Impeller; Kinetics; Model; Processes; Simulations.

INTRODUCTION

The quality of aluminum castings highly depends on effectively removing hydrogen (among other impurities) from the melt by fluxing gases through a rotating impeller that disperses fine bubbles in the entire ladle. Although this technology is mature, there is still room for optimizing the process on the basis of a deep knowledge of the phenomena that governs it. The thermodynamics of hydrogen solubility is well understood [1]; the kinetics of the degasification has also been studied through mathematical and physical models, given that plant trials are difficult to achieve because of the aggressive industrial conditions. According to Zhang [2, 3], there are several types of models based on simple mass balances of hydrogen to predict hydrogen removal kinetics for batch and continuous reactors. These models assume a process controlled by mass transfer of the hydrogen on the liquid side of the liquid–bubble interface, where the key parameters are the interfacial area, A_b , and the global mass transport coefficient, k_m , both of which depend on the stirring conditions in the melt (stirring power, flow patterns, and turbulence). The so-called “experimental regression model” is the most popular one, where A_b and k_m are obtained by fitting experimental data to the kinetic equation. These models, however, do not generate fundamental and universal knowledge. Engh’s model [4] is by far the best of all models. He defined a dimensionless hydrogen concentration, which is the ratio of the ability of hydrogen to diffuse to bubbles during their ascent divided by the

capacity of the purge gas to remove hydrogen. When this parameter is less than 0.3 (at the beginning of the degassing process), the diffusion of hydrogen through the liquid in a boundary layer near the interphase controls degassing kinetics, but when it is more than 2.0 (large times), the degassing rate is controlled by thermodynamic equilibrium setting a low value of the partial pressure of H_2 in the bubble in equilibrium with a low concentration of H (low driving force for degassing). The model still requires empirical kinetic parameters A_b and k_m .

Lemoine [5] reported correlations of A_b and k_m , which were fitted from many independent sets of experimental data from different reactors with several fluids of different physical properties and different impeller designs for gas injection through (gas-induced, GIR) and injection below (gas-sparging, GSR) the impeller. In addition to the models based on mass balances, in the last decade, computational fluid dynamics simulations have become an important means to describe these two fluid systems, predicting flow patterns, turbulence structure, and gas holdup by solving mass and turbulent momentum conservation equations in either an Euler–Euler or Euler–Lagrange frame of references [6]. As for physical modeling, water transparent models have been used to measure flow patterns [7], deoxidation kinetics [8, 9], performance of different impeller designs [7, 9, 10], and bubble size and gas distribution [11].

In this work a full-scale water physical model of a batch degassing unit was built and employed as a tool to validate a mathematical model, which is a reformulated version of Engh’s model. Both physical and mathematical models describe water deoxidation rates. Universal correlations given by Lemoine were used to account for A_b and k_m for gas injected through and below the impeller. The model was properly validated with the physical model. Additionally, a two-level factorial experimental design was used to determine the

Received March 11, 2014; Accepted August 2, 2014
Address correspondence to M. A. Ramírez-Argüez, Departamento de Ingeniería Metalúrgica, Facultad de Química, UNAM, Edificio “D” Circuito de los Institutos s/n, Cd. Universitaria, C.P. 04510 México D.F., México; E-mail: marco.ramirez@unam.mx
Color versions of one or more of the figures in this article can be found online at www.tandfonline.com/issue.

influence of gas flow rate, impeller speed, and points of gas injection on degassing kinetics and gas consumption. Optimum process conditions are recommended.

MATERIALS AND METHODS

A full-scale physical model of a real batch degassing furnace (with a radius of 0.26 m and a height of 0.63 m) was built on acrylic glass and equipped with the impeller-injector technique. This physical model satisfies geometrical, dynamic, and kinematic similarity criteria, and consequently results obtained with the model can be used in aluminum degassing batch units [7]. The cylindrical vessel was immersed in a water-filled rectangular tank to avoid optical distortions due to curved surfaces. The shaft and the impeller were made of Nylamid[®], the latter being commercially designed (Fig. 1(a)). Tap water (playing the role of aluminum) was saturated with oxygen (playing the role of hydrogen) by injecting air through a compressor to reach oxygen saturation (6 ppm of O₂). Next, degassing was carried out by injecting nitrogen with a purity of 99.9% at two different flow rates of 10 and 40 L/min, with two impeller speed values of 240 and 580 rpm, and by two injection points: (a) conventional gas injection through the nozzles of the impeller, and (b) gas injection at the bottom, which avoids complex injection systems through the shaft and nozzle and replacement of the graphite parts when they show cracks [7, 9]. Oxygen concentration was measured every 15 s using a commercial oxymeter Hanna[®] HI9146, and

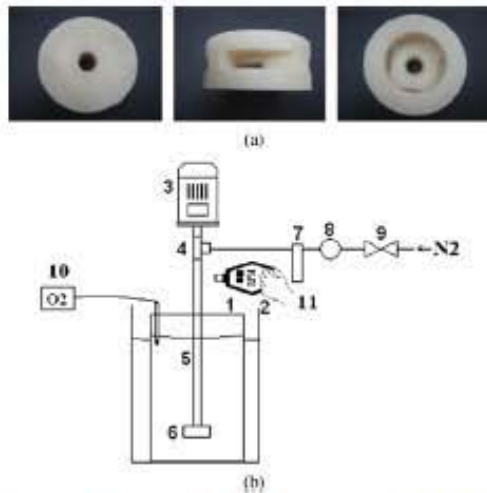


FIGURE 1.—(a) Commercially designed impeller. (b) Scheme of the physical model including all the components: 1 acrylic vessel, 2 acrylic container, 3 motor, 4 rotary joint, 5 shaft, 6 impeller, 7 flowmeter, 8 pressure regulator, 9 valve, 10 oxymeter, and 11 tachometer.

the initial oxygen content, $[O_2]_0$, was always maintained at 6 ± 0.16 ppm.

Experimentation was performed using a two-level factorial experimental design in order to measure the main effects and the interactions of the three variables under study on the degassing kinetics and the efficiency in gas consumption. Each experiment was conducted twice to observe reproducibility. Eight experiments are shown in Table 1. A schematic view of the physical model including all the components to measure deoxidation kinetics is displayed in Fig. 1(b).

The mathematical model developed in this work is based on the model reported by Engh and Sigworth, which is a global mass balance model of dissolved hydrogen in liquid aluminum [4]. In this reformulated model, dissolved oxygen $[%O_2]$ was used instead of hydrogen. Evolution of $[%O_2]$ with time can be determined from Eq. (1).

$$\frac{[%O_2]}{[%O_2]_0} = \exp\left(-\frac{100f_{O_2}ZMW_{O_2}G}{MP_{tot}K}t\right) \quad (1)$$

where $[%O_2]$ and $[%O_2]_0$ are the current and initial oxygen concentrations in water, in ppm; f_{O_2} is the Henrian activity coefficient of dissolved oxygen in water; P_{tot} is the total pressure within the bubble, in atm; G is the molar gas flow rate, in kmol/s; MW_{O_2} is the molecular mass of oxygen in kg/kmol; t is the time in s; M is the mass of water, in kg; and K is the equilibrium constant for the equilibrium between oxygen dissolved in water and oxygen gas. Also, a dimensionless parameter Z appears in Eq. (1) ($Z = 1 - \exp(-\psi)$), which depends on the kinetic parameter ψ ($\psi = \frac{k_m A_b P_{tot} K}{100 MW_{O_2} G_{in}}$), which in turn contains the kinetic parameter k_m and A_b . Z represents the ability of gas bubbles to remove dissolved oxygen when they leave the bath through the top surface. Z can be seen as the capacity of the purge gas to remove oxygen or the thermodynamic efficiency. This parameter measures how close (or far) the bubbles (leaving the melt) are from equilibrium according to the ratio of oxygen partial pressure in the bubble to that of oxygen content dissolved in the melt. Correlations used in our model for $k_m A_b$, in both the conventional and the bottom gas injection techniques can be found in [5]. A

TABLE 1.—Experiments performed in the water physical model.

Experiment no.	Gas flow rate (Q) (L/min)	Impeller speed (n) (RPM)	Injection type (PI)
E1	40 (+)	580 (+)	Conventional (+)
E2	10 (-)	580 (+)	Conventional (+)
E3	40 (+)	290 (-)	Conventional (+)
E4	10 (-)	290 (-)	Conventional (+)
E5	40 (+)	580 (+)	Bottom (-)
E6	10 (-)	580 (+)	Bottom (-)
E7	40 (+)	290 (-)	Bottom (-)
E8	10 (-)	290 (-)	Bottom (-)

computer code written in Fortran was developed and run with the program Intel[®] Visual Fortran Compiler v11.0.

RESULTS AND DISCUSSION

Figure 2 shows photographs of the physical model degassing system in quasi-steady fluid dynamic conditions for the eight experimental conditions presented in Table 1. It can be observed in Figure 2 that at higher rotor speeds the vortex increases; bubbles are smaller and better dispersed than in those instances where rotor speed is lower. It can also be seen that an increment in the gas flow rate increases gas holdup in the liquid, whereas the effect of the gas injection point is less significant for gas holdup, the bubble size, and the vortex size, although the injection at the bottom of the ladle seems to slightly decrease the vortex size and improves the bubble distribution in the entire ladle.

A comparison between experimental and theoretical dissolved oxygen evolution with time is shown in Fig. 3(a) for conventional degasification and in Fig. 3(b) for bottom degasification. In both figures, lines stand for model predictions and symbols stand for the two independent sets of measurements done in this work for each experiment. In general, model predictions greatly agree with the experimental measurements in the case of bottom gas injection (see Fig. 3(b)). However, there was only a reasonable agreement between predictions and measurement results in the case of conventional gas injection through the nozzle, especially at a rotor speed of 580 rpm (see Fig. 3(a)). This could be the result of a better performance, under the experimental conditions presented in this work, of the correlations used for water deoxidation by injection at bottom as compared to those used for the same process by conventional injection

through the shaft and nozzle. Also, the deviation of the model predictions from measurements at higher rotor speeds could have occurred because the model does not consider the mass transfer of oxygen at the free surface (extra oxygen being picked up at the free surface), which increases with the formation of the vortex.

Experimental and simulated results show that degassing kinetics increases with rotor speed and gas flow rate. The fastest deoxidation was accomplished in 300 s (5 min) by operating at 580 rpm and 40 L/min, whereas the slowest took over 1200 s (20 min) at 290 rpm and 10 L/min. An increment in the impeller rotation speed increases convection in the melt and turbulence, and promotes smaller bubbles by breaking the gas flow at the impeller nozzle; an increment of the gas flow rate promotes more bubbles and more turbulence associated with the bubbles rising through the liquid. All these features improve degassing kinetics because mass transfer by convection and turbulent diffusion are enhanced, and interfacial area increases as well (more and smaller bubbles). However, such increments of gas flow rate and rotor speed must be handled carefully, as an uncontrolled increment in rotor speed may produce a big vortex, thus exposing metal to the atmosphere and allowing the pickup of gases. Moreover, an excessive gas flow rate is not efficient in terms of gas consumption, given that the gas bubbles leaving the melt are far from being at thermodynamic equilibrium. Table 2 shows the experimental values of $k_{L,a}A_0$ obtained by fitting measured data to a simple first-order kinetic equation with correlation coefficients above 0.99 in all cases. The fastest degassing rate was achieved in experiments E1 and E5 (high N , high Q for both PI); the slowest in experiments E4 and E8 (low N , low Q for both PI). Table 3 presents results of the statistical analysis of Table 2 from the factorial design of the variables' effect on degassing kinetics.

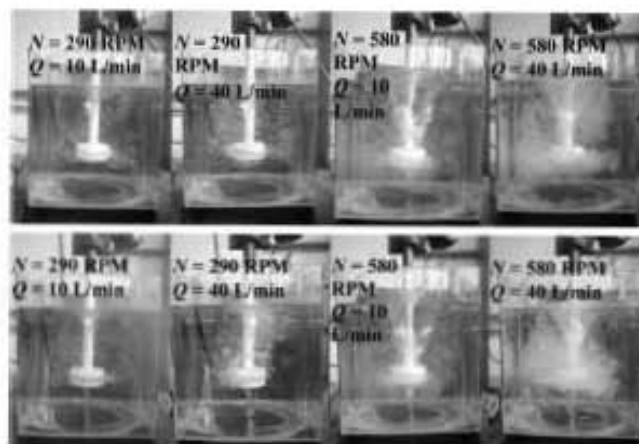


FIGURE 2.—Water physical model pictures of the degassing system with different process conditions (above: conventional gas injection; below: bottom gas injection).

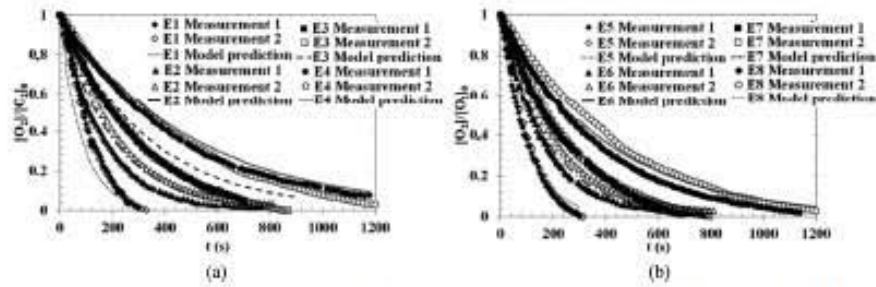


FIGURE 3.—Comparison between experimental and predicted results for deoxidation kinetics by conventional gas injection through the nozzle (a) and gas injection at the bottom (b).

With respect to deoxidation kinetics, gas flow rate (Q) and rotor speed (N) are the most significant variables, and an increase in both parameters enhance this process as can be inferred from the values of their main effects compared with the standard error reported in Table 3. The main effect of Q on the degassing kinetics, i.e., +0.0023, is the average value of the observed increase in $k_m A_b$ caused by an increase in flow rate from 10 to 40 L/min with the remaining factors held fixed (i.e., E1 vs. E2, E3 vs. E4, E5 vs. E6, and finally E7 vs. E8; see the experimental matrix in Table 1). For instance, it can be seen in Table 2 that, comparing the $k_m A_b$ values listed in measurement 1 for E1 and E2, the increase in Q from 10 L/min (E2) to 40 L/min (E1) rises the coefficient from 0.0061 to 0.076, i.e., an increase of 0.0015 units. The injection point has no apparent effect in this regard because its main effect is lower than the standard error, which is a measure of experimental noise and only the two-factor interactions associated with flow rate and impeller speed appear to be relevant. The two-factor interaction analysis concerning deoxidation kinetics shows that the increase in $k_m A_b$ values resulting from a rise in gas flow rate is larger at higher rotor speeds, N , as can be seen in Table 2, measurement 1. The former statement can be appreciated in detail by comparing the increase in $k_m A_b$ associated with the increase in Q in experiments E5 and E6 (0.0025 units, high N), compared to the observed changes in experiments E7 and E8 (0.0009 units, low

IN). A similar interpretation can be made to analyze the effect of these variables on the gas consumption efficiency reported in Table 3.

In this regard, and given that gas consumption represents an important operational cost in most of the industrial foundry shops, the efficiency in gas consumption, e in ppmO₂/L N₂, was computed for each experiment and defined as the total volume of purge gas needed to eliminate 90% of the dissolved O₂ (Eq. (2)).

$$e = \frac{([O_2]_0 - [O]_{0.1})}{V_{N_2}} \quad (2)$$

where $[O_2]_0$ is the initial oxygen content and $[O]_{0.1}$ is the 10% of the initial oxygen content, both in ppm, whereas V_{N_2} is the volume of nitrogen required to reduce 90% of oxygen in liters. Table 4 shows the experimental and theoretical efficiency, e , for each experiment. It can be observed that the maximum efficiency was reached in experiments E2 and E6 (higher rotor speeds and lower gas flow rates) and the worst was obtained in experiments E3 and E7 (lower rotor speeds and higher gas flow rates). For instance, the amount of gas consumed in E3 is six times greater than that consumed in E2 in order to reduce the same amount of oxygen in practically the same time (700 and 800s respectively). The results of

TABLE 2.—Mass transport coefficients, $k_m A_b$.

Experiment	Measurement 1	Measurement 2
E1	0.007617095	0.012035519
E2	0.006100088	0.004982258
E3	0.003210987	0.003200626
E4	0.002232919	0.003962039
E5	0.008658325	0.007973753
E6	0.006171238	0.005140587
E7	0.003534679	0.003596191
E8	0.00268045	0.002074351

TABLE 3.—Statistical analysis showing the effect of the main variables and the standard errors.

Average	Effect on gas efficiency with standard error	Effect on kinetics with standard error
Main effects		
Gas flow rate (Q)	-0.028 ± 0.0015	0.0023 ± 0.0006
Impeller speed (N)	+0.030 ± 0.0015	0.0045 ± 0.0006
Injection type (PI)	-0.003 ± 0.0015	0.0002 ± 0.0006
Two factor interactions		
$Q \times N$	-0.008 ± 0.0015	0.0012 ± 0.0006
$Q \times PI$	0.001 ± 0.0015	0.0004 ± 0.0006
$N \times PI$	0.0009 ± 0.0015	0.0005 ± 0.0006
Three factor interactions		
$Q \times N \times PI$	0.0016 ± 0.0015	0.0004 ± 0.0006

TABLE 4.—Efficiency of gas consumption.

Experiment	Practical ϵ [ppmO ₂ /L N ₂]	ϵ [ppmO ₂ /L N ₂] Measurement 1	ϵ [ppmO ₂ /L N ₂] Measurement 2
E1	0.0333	0.0321	0.0372
E2	0.073	0.0774	0.0671
E3	0.0113	0.0122	0.0139
E4	0.0273	0.0283	0.0312
E5	0.0344	0.0363	0.0378
E6	0.0744	0.0764	0.0694
E7	0.0141	0.0143	0.0142
E8	0.0356	0.0375	0.0366

the statistical processing of experimental data, shown on Table 4, to obtain the main effects and the interactions between two and three factors of the three variables under study are shown on Table 3. As seen there, gas flow rate, impeller speed, and also their mutual interaction are the factors that determine, largely, the efficiency in gas consumption. The results depicted in Table 3 show that the relevant variables affecting degassing efficiency are gas flow rate and impeller speed, and efficiency rises due to an increase in N and decrease in Q . The results also suggest that the interaction between these two variables can be relevant. A more detailed analysis of the experimental results shows that, regarding efficiency, a higher loss results from the increase in flow rate at higher rotor speeds.

From Table 3 it can be noted that a decrease in gas flow rate and an increase in impeller speed raise the gas consumption efficiency, whereas an increase of both parameters, under the experimental conditions presented in this work, leads to a decrease of that efficiency. Regarding injection point, the results show that bottom gas injection is slightly better.

Again, the positive effect of the higher impeller speeds is due to the expanded interfacial area created by breaking the gas into small bubbles well dispersed through the liquid, thus having a larger residence time, together with a good stirring that promotes faster mass transport by convection. The gas flow rate has to be moderate, because ideally, the operation is that every gas bubble should reach the saturation of hydrogen just at the free surface. However, if the gas flow rate is large, the bubbles leaving the system are far from having an O₂ concentration in equilibrium with the O₂ dissolved in the melt. This represents a waste of gas, especially at the end of the degassing, when the O₂ concentration is low and bubbles can only pick up a small amount of O₂, as the thermodynamic equilibrium sets the limit of O₂ pick up. Consequently, at the end of degassing, when the thermodynamic equilibrium controls the degassing kinetics, the purging gas is very inefficient, requiring lots of gas to eliminate more O₂.

A MATLAB® optimization routine called "gamultiobj" was employed to maximize the kinetics of deoxidation $k_m A_b$ and simultaneously to minimize

the gas consumption. This optimization routine would indicate if there is a conflict between the two objectives. The volume of nitrogen, V_{N_2} , was computed directly from the mathematical model and $k_m A_b$ for each gas injection technique with the correlations from Lemoine [5]. The optimum operational conditions are $N=580$ rpm and $Q=10$ L/min for the bottom gas injection technique, while for the conventional gas injection technique there are several Pareto solutions: with $N=580$ rpm and $Q=40$ L/min maximizes kinetics, and with $N=580$ rpm and $Q=10$ L/min minimizes gas consumption. However, since the difference in degassing kinetic rates obtained with these two solutions is small, but the gas consumption difference is large, we recommend using low Q values as the optimum condition in the case of conventional gas injection.

CONCLUSIONS

- The mathematical model proposed in this work was successfully validated against experimental measurements performed in our physical model.
- Increasing the gas flow rate increases the gas holdup in the liquid and decreases the bubble radius by increasing the total surface area available to capture dissolved gases. Additionally, higher impeller speeds yield smaller bubble sizes, more turbulence, and stronger liquid circulation, which results in better mixed baths and an increment of the bubble-liquid interfacial area. Both effects improve degassing kinetics.
- As for deoxidation kinetics, gas flow rate (Q) and rotor speed (N), and their mutual interaction, are the most significant variables. An increment in Q enhances kinetics in 0.0023 units of $k_m A_b$ (50–70%), while an N increment improves kinetics in 0.0045 units of $k_m A_b$ (130–200%). The injection point has no apparent effect in this regard.
- Gas flow rate, impeller speed, and their mutual interaction largely determine gas consumption efficiency, which is reduced in 0.028 units of ϵ by increasing Q (100–160% of reduction), while it is increased in 0.03 units of ϵ by increasing N (100–160%).
- Both injection points tested in our work presented similar degassing kinetics, but the best performance in terms of gas consumption was achieved with gas injection through the bottom of the ladle.
- A combination of high speed of the impeller and moderate gas flow rate is the optimum combination of these variables in terms of degassing kinetics and gas consumption.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors would like to thank A. Amaro, C. Atlenco, A. Sánchez, and A. Ruiz for their technical assistance.

FUNDING

M. Hernández-Hernández wants to thank CONACYT for financial support through a doctoral scholarship.

REFERENCES

1. Engh, T.A. *Principles of Metal Refining*; Oxford University Press: New York, NY, 1992; 322pp.
2. Zhang, L.; Lv, X.; Damouh, L.; Bai, C. Mathematical modeling on the removal of impurity elements from molten aluminum. *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review* **2012**, *33* (1), 1–54.
3. Zhang, L.; Lv, X.; Torgerson, A.; Long, M. Removal of impurity elements from molten aluminum: A review. *Mineral Processing and Extractive Metallurgy Review* **2011**, *32* (3), 150–228.
4. Sigworth, G.K.; Engh, T.A. Chemical and kinetic factors related to hydrogen removal from aluminum. *Metallurgical Transactions B* **1982**, *13B* (3), 447–460.
5. Lemoine, R.; Morsi, B.I. An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in agitated reactors. *Chemical Engineering Journal* **2005**, *114* (1–3), 9–31.
6. Ramos-Gómez, E.; Zenit, R.; González Rivera, C.; Trápaga, G.; Ramírez-Argüez, M.A. Mathematical modeling of fluid flow in a water physical model of an aluminum degassing ladle equipped with an impeller-injector. *Metallurgical and Materials Transactions B: Process Metallurgy and Materials Processing Science* **2013**, *44 B* (2), 423–435.
7. Camacho-Martínez, J.L.; Ramírez-Argüez, M.A.; Zenit-Camacho, R.; Juárez-Hernández, A.; Barceñas-Sánchez, J.D.; Trápaga, G. Physical modelling of an aluminum degassing operation with rotating impellers: a comparative hydrodynamic analysis. *Materials and Manufacturing Processes* **2010**, *25* (7), 581–591.
8. Satermus, M.; Botor, J. The physical and mathematical model of aluminum refining process in reactor URO-200; In *2006 TMS Fall Extraction and Processing Division: Sohn International Symposium*, San Diego, CA; United States; August 27–31, 2006; Kongoli, F., Reddy, R.G. Eds.; TMS: Warrendale, PA, USA, 2006; 697–710.
9. Camacho-Martínez, J.L.; Ramírez-Argüez, M.A.; Juárez-Hernández, A.; González-Rivera, C.; Trápaga-Martínez, G. Novel degasification design for aluminum using an impeller degasification water physical model. *Materials and Manufacturing Processes* **2012**, *27* (5), 556–560.
10. Mi, G.; Liu, X.; Wang, K.; Qi, S.; Wang, H.; Niu, J. Analysis of the influencing factors of rotating impeller degassing process and water simulation experiment. *Materials Science Forum* **2008**, *575–578*, 1258–1265.
11. Tovia, D.O.; Mugica, G.W.; Gonzalez, A.C.; Cuyas, J.C. Formation and size of bubbles in degassing system of aluminum alloys. In *Transactions of the American Foundry Society and the One Hundred Fourth Annual Meeting*, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, April 8–11, 2000; Lesiter, M.J., Eds.; American Foundry Society: Des Plaines, IL, USA, 2000; 457–462.