



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
QUÍMICA – METALÚRGICA

ESTUDIO DE LA FUSIÓN DE HIERRO ESPONJA EN BAÑOS DE HIERRO
LÍQUIDO

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

PRESENTA:
I.Q.M. DIEGO ENRIQUE GONZÁLEZ GONZÁLEZ

TUTOR PRINCIPAL
DR. RAMÍREZ ARGAEZ MARCO AURELIO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
QUÍMICA – METALÚRGICA

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD.MX.

.....

MARZO 2017



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.



Universidad Nacional Autónoma de México
Estudio de la fusión de hierro esponja en baños de hierro
Diego Enrique González González

JURADO ASIGNADO

<i>PRESIDENTE</i>	<i>DR. CAMPILLO ILLANES BERNARDO FABIÁN</i>
<i>VOCAL</i>	<i>DR. AMARO VILLEDA ADRIÁN MANUEL</i>
<i>SECRETARIO</i>	<i>M.I. RENDÓN GÓMEZ OSCAR JESÚS</i>
<i>1ER. SUPLENTE</i>	<i>DR. BETANCOURT REYES JOSÉ ISRAEL</i>
<i>2º SUPLENTE</i>	<i>DR. RAMÍREZ ARGÁEZ MARCO AURELIO</i>

ESTA TESIS FUE DESARROLLADA EN:

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

DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ
ASESOR DE TESIS

DIEGO ENRIQUE GONZÁLEZ GONZÁLEZ
SUSTENTANTE



Universidad Nacional Autónoma de México
Estudio de la fusión de hierro esponja en baños de hierro
Diego Enrique González González

*PARA MIS PADRES Y HERMANO,
MIS PROFESORES QUE ME HAN FORMADO,
LOS AMIGOS QUE HAN ESTADO A MI LADO,
Y MI FAMILIA LORENA Y AITANA*



Universidad Nacional Autónoma de México
Estudio de la fusión de hierro esponja en baños de hierro
Diego Enrique González González

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a CONACYT por el apoyo económico durante mis estudios de maestría y a mi tutor Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez por haberme proporcionado todo lo necesario para llevar a cabo el presente trabajo.



Contenido

1. Introducción	10
1.1. Importancia del acero en México	11
1.2. Revisión de la literatura	12
1.2.1. Modelos matemáticos relacionados con la fusión del DRI	12
1.2.2. Trabajos experimentales relacionados con la fusión del DRI.....	27
1.3. Variables del proceso	34
1.4. Hipótesis	36
1.5. Objetivos	37
2. Metodología.....	37
2.1. Modelos matemáticos.....	37
2.1.1. Suposiciones Generales.....	39
2.1.2. Suposiciones Modelo 1.....	40
2.1.3. Suposiciones Modelo 2.....	41
2.1.4. Suposiciones Modelo 3.....	41
2.1.5. Suposiciones Modelo 4.....	42
2.1.6. Ecuaciones gobernantes.....	43
2.1.7. Geometría.....	45
2.1.8. Condiciones a la frontera e iniciales.....	46
2.1.9. Metodología de solución.....	48
2.1.10. Discretización del dominio	48
2.1.11. Integración de las ecuaciones de conservación	50
2.1.12. Modelo 1	69
2.1.13. Modelo 2	75
2.1.14. Modelo 3	77
2.1.15. Modelo 4	79
2.2. Procedimiento experimental	85
2.2.1. Diseño experimental	85
2.2.2. Procedimiento experimental	86
3. Resultados.....	89



3.1.	Resultados experimentales.....	89
3.2.	Validación del modelo matemático.....	99
3.3.	Resultados y modelos matemáticos.....	112
3.3.1.	Resultados modelo 1	112
3.3.2.	Resultados modelo 2	115
3.3.3.	Resultados modelo 3	163
3.3.4.	Resultados modelo 4	174
4.	Conclusiones.....	188
5.	Trabajo futuro	191
6.	Bibliografía.....	192
7.	Apéndice 1.....	194



Tabla 1 Listado de símbolos

Símbolo	Unidades	Descripción
R_0	[m]	Radio inicial de la partícula
$R(t)$	[m]	Radio de la partícula en función del tiempo durante la fusión
t	[s]	Tiempo
E	$\left[\frac{J}{kg}\right]$	Energía específica
ρ	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	Densidad
q	$\left[\frac{W}{m^2}\right]$	Vector de densidad de flujo de energía
S_E	$\left[\frac{W}{m^3}\right]$	Generación de energía por unidad de volumen
k	$\left[\frac{W}{m K}\right]$	Conductividad térmica
T	[K]	Temperatura
ΔH_r	$\left[\frac{J}{kg}\right]$	Entalpía de reacción específica
ν_A	Adimensional	Coefficiente estequiométrico del reactivo A
[A]	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	Concentración del reactivo A
k_c	[Hz]	Constante cinética
k_0	[Hz]	Constante cinética pre exponencial para el modelo de Arrhenius
E_A	$\left[\frac{J}{mol}\right]$	Energía de activación para el modelo de Arrhenius
C	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	Concentración de la especie química
j	$\left[\frac{kg}{m^2 s}\right]$	Vector de densidad de flujo de la especie química
D	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$	Coefficiente de difusión



Tabla 1 Listado de símbolos (continuación)

Símbolo	Unidades	Descripción
r	$[m]$	Coordenada radial
ϕ	$[rad]$	Coordenada polar
V	$[m^3]$	Volumen
ΔH_m	$\left[\frac{J}{kg}\right]$	Entalpía específica de fusión
T_m	$[K]$	Temperatura de fusión
C_s	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	Concentración en la superficie
T_0	$[K]$	Temperatura inicial
C_0	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	Concentración inicial
r_e	$[m]$	Frontera este del elemento en la coordenada radial
r_w	$[m]$	Frontera oeste del elemento en la coordenada radial
ϕ_e	$[rad]$	Frontera este del elemento en coordenada polar
ϕ_w	$[rad]$	Frontera oeste del elemento en coordenada polar
θ_e	$[rad]$	Frontera este del elemento en coordenada azimutal
θ_w	$[rad]$	Frontera oeste del elemento en coordenada azimutal
D_0	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$	Coeficiente de difusión pre exponencial para el modelo de Arrhenius
Ω	No aplica	Dominio de cálculo
$\partial\Omega$	No aplica	Frontera del dominio de cálculo
$[P] = [i, j, k]$	No aplica	Índices para el elemento actual
$[rE] = [i + 1, j, k]$	No aplica	Índices para el elemento este en la coordenada radial
$[rW] = [i - 1, j, k]$	No aplica	Índices para el elemento oeste en la coordenada radial
$[\theta E] = [i, j + 1, k]$	No aplica	Índices para el elemento este en la coordenada azimutal



Tabla 1 Listado de símbolos (continuación)

Símbolo	Unidades	Descripción
$[\theta W] = [i, j - 1, k]$	No aplica	Índices para el elemento oeste en la coordenada azimutal
$[\phi E] = [i, j, k + 1]$	No aplica	Índices para el elemento este en la coordenada polar
$[\phi W] = [i, j, k - 1]$	No aplica	Índices para el elemento oeste en la coordenada polar
k_D	$\left[\frac{m}{s}\right]$	Coefficiente de transferencia de masa por convección
T_∞	$[K]$	Temperatura de fluido
H	$\left[\frac{J}{kg}\right]$	Entalpía específica
C_P	$\left[\frac{J}{kg K}\right]$	Capacidad calorífica específica a presión constante
h	$\left[\frac{W}{m^2 K}\right]$	Coefficiente de transferencia de energía por convección
ρ_b	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$	Densidad del baño
V_{sum}	$[m^3]$	Volumen sumergido
g	$\left[\frac{m}{s^2}\right]$	Aceleración de la gravedad
ϕ_b	$[rad]$	Ángulo polar donde comienza la zona sumergida en el baño
ΔH_{mb}	$\left[\frac{J}{kg}\right]$	Entalpía de fusión del baño
ΔH_m	$\left[\frac{J}{kg}\right]$	Entalpía de fusión de la partícula
α	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$	Difusividad térmica



1. Introducción

El hierro esponja o también conocido como DRI (Direct Reduced Iron) por sus siglas en inglés es producido en los reactores de reducción directa y es un importante suministro de hierro en la fabricación de acero.

La fusión del DRI se lleva a cabo en el horno eléctrico de arco conocido como EAF (Electric Arc Furnace) por sus siglas en inglés. Aunque la práctica de fundir DRI es conocida ampliamente, es de mucho interés entender cuantitativamente los fenómenos involucrados en la fusión de este material, ya que el consumo de energía por tonelada de acero producido se eleva casi al doble en comparación con la fusión de chatarra de acero en EAF. Entonces, estudios que determinen el efecto de todas las variables del pellet de DRI y de las condiciones de proceso que tiendan a reducir el consumo de energía, que por cierto es de los principales costos asociados a la operación del EAF, son muy importantes y pertinentes ante la escasa información encontrada en la literatura al respecto. La experimentación en condiciones reales para la fusión resulta poco práctica debido a la dificultad en realizar mediciones con altas temperaturas del metal y escoria. Como alternativa se usan modelos físicos y matemáticos que permiten recrear las condiciones del EAF y evaluar las principales variables de proceso que permitan proponer condiciones óptimas y solución a problemas en una planta industrial.

El presente trabajo busca recrear condiciones similares para la fusión del DRI en un sistema a escala que permita realizar mediciones experimentales donde se mida la fusión de DRI en baños de hierro. Se propondrá un modelo matemático



que permita recrear la fusión de los pellets de DRI y permita evaluar la influencia de cada variable de proceso.

1.1. Importancia del acero en México

De acuerdo al reporte presentado por CANACERO (1) en México la industria siderúrgica participa en un 2.2 % en el PIB nacional y se encuentra clasificada como parte de la industria manufacturera siendo el tercer sector más importante. México ocupa el treceavo lugar en la producción mundial de acero y es el segundo más importante en América Latina.

La producción nacional de acero se encuentra entre 15 y 20 millones de toneladas anuales. En cuestión de inversión en su mayoría se destina a la ampliación de la capacidad de producción de las acerías ya existentes y a la fabricación de productos con mayor valor agregado. La industria siderúrgica genera 120 mil empleos directos y 600 mil indirectos. En cuestión de sustentabilidad se busca reducir el consumo de energía por tonelada de acero producida el cual se encuentra alrededor de $300 \left[\frac{\text{kWh}}{\text{ton}} \right]$, se busca incluir más el uso de chatarra en el proceso para reducir el consumo energético, y en el caso de un horno con 100% de carga de DRI el consumo es de $500 \left[\frac{\text{kWh}}{\text{ton}} \right]$, por lo que en acerías donde escasea la chatarra y se carga DRI es muy necesario plantear mejoras concretas para reducir el consumo tan elevado de energía eléctrica.



1.2. Revisión de la literatura

1.2.1. Modelos matemáticos relacionados con la fusión del DRI

Dentro de las investigaciones que se han realizado con respecto a la fusión de esferas metálicas que involucran la formación inicial de una coraza solidificada se encuentra el trabajo desarrollado por Olaf Ehrich y colaboradores (2), en el cual se hace uso de funciones de Green para resolver de forma analítica la ecuación de conservación de energía, logrando acoplar la frontera móvil debida a la fusión. En este trabajo se logra acoplar la fusión de una esfera inmersa en un baño que inicialmente forma una coraza solidificada con distintas propiedades, el trabajo incluso aborda como ejemplo la fusión del DRI en baño de hierro. El sistema en general se divide en una esfera de DRI con un radio inicial R_0 y una coraza de hierro solidificado con radio $R(t)$ donde el perfil de temperatura varía de forma continua en el interior hasta alcanzar la temperatura de fusión en la superficie que está en contacto con el baño (ver **Figura 1**).

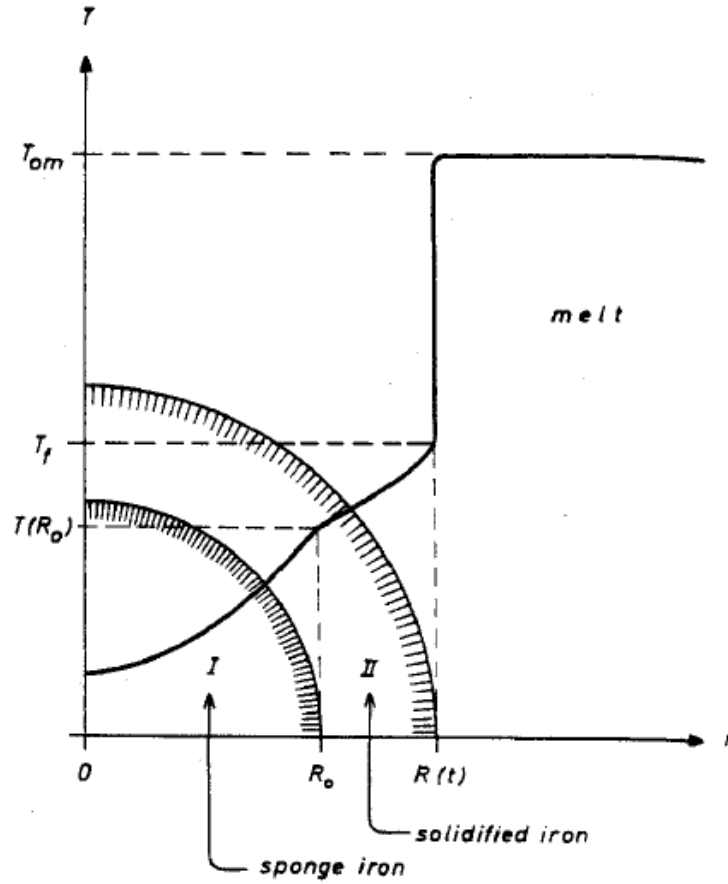


Figura 1 esquema de partícula y coraza con la distribución de temperatura
(Ehrich)

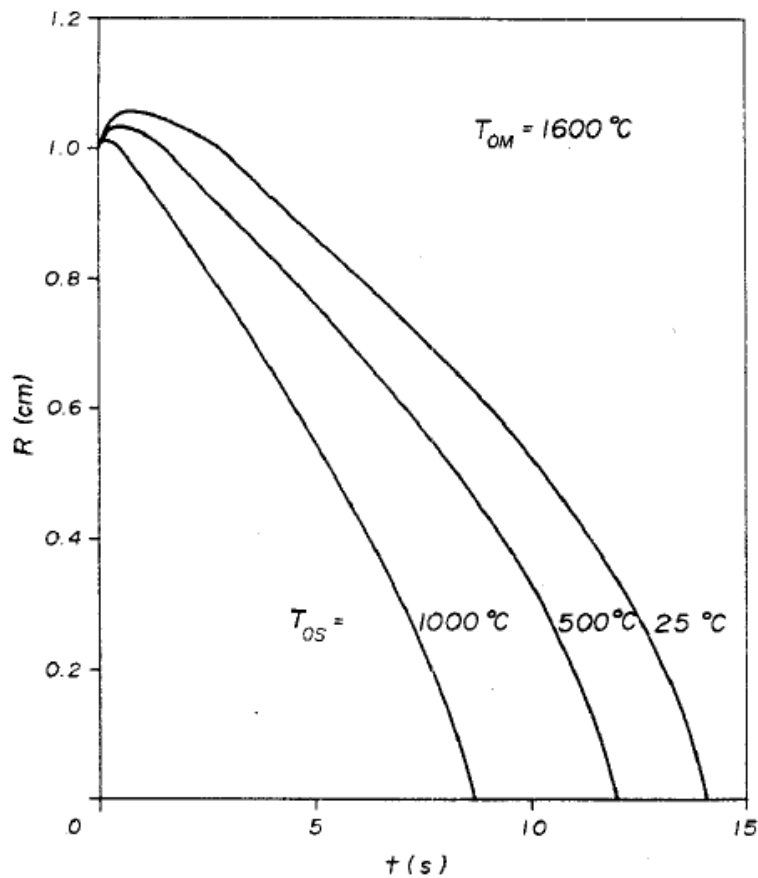


Figura 2 Curvas de radio vs tiempo a diferentes temperaturas iniciales para un baño a 1600 °C (Ehrich)

En otro trabajo presentado por Olaf Ehrich y colaboradores (3) se presentan algunos de los resultados obtenidos resolviendo la fusión utilizando funciones de Green y la comparación con datos experimentales. Por ejemplo en la **Figura 2**, se presenta la evolución del tamaño del pellet en un baño de acero a 1600°C con temperaturas iniciales del pellet de 25, 500 y 1000°C, donde se estima el tiempo de fusión. En la **Figura 3** se aprecia el efecto de la temperatura del baño en el tiempo de fusión de un pellet entrando a 25° y también se aprecia el efecto de la



conductividad térmica del pellet en el tiempo de fusión **Figura 4**. En la **Figura 5** se presentan perfiles de temperatura dentro del pellet a distintos tiempos de iniciada la fusión y finalmente la **Figura 6** muestra la evolución térmica del centro del pellet.

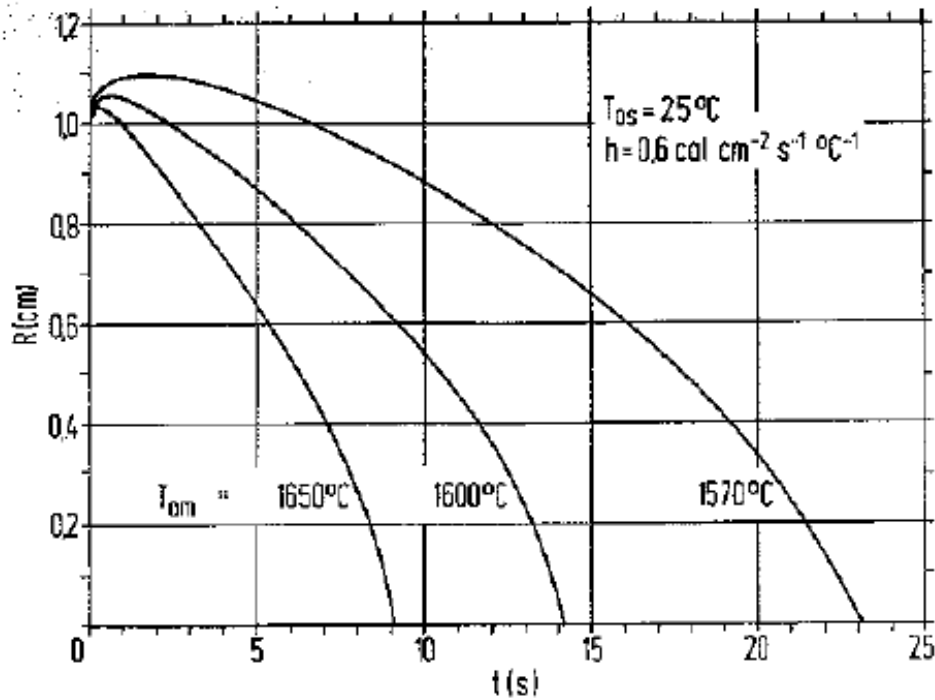


Figura 3 Curvas de radio vs tiempo con temperatura inicial de 25 °C a distintas temperaturas del baño 1650 °C, 1600 °C y 1570 °C (Ehrich)

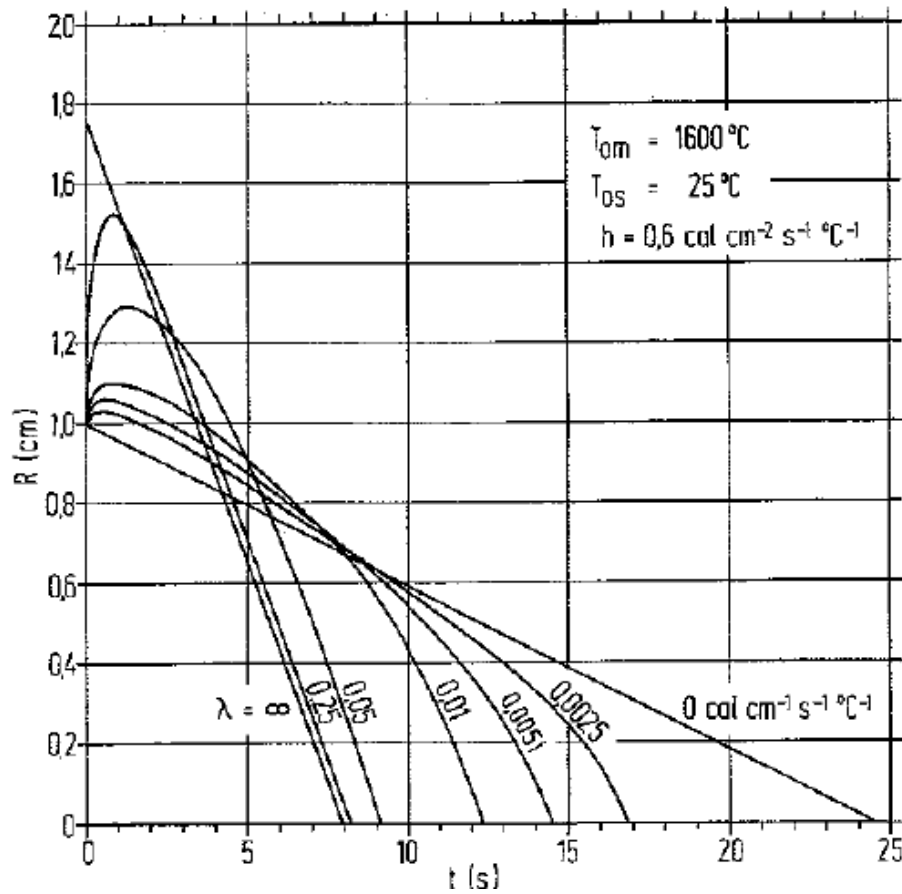


Figura 4 Curvas de radio vs tiempo con temperatura inicial de 25 °C, temperatura del baño de 1600 °C y a distintos valores de conductividad térmica (Ehrich)

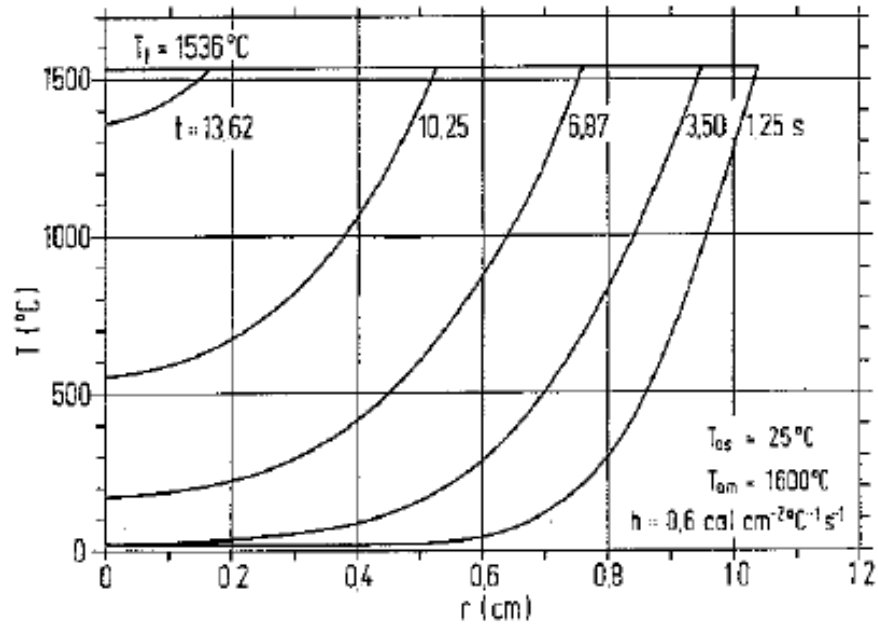


Figura 5 Perfiles de temperatura en el interior del pellet a distintos tiempos
(Ehrich)

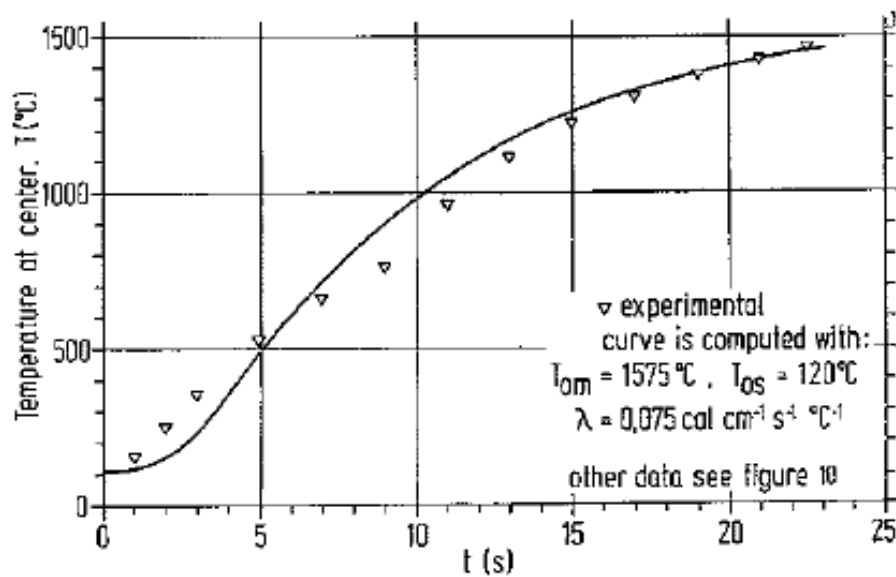


Figura 6 Perfil de temperatura en el centro de la partícula esférica (Ehrich)



Otros trabajos se han desarrollado para el estudio en la fusión de aluminio como el de Bo Zhou y colaboradores (4) donde se utilizan esquemas numéricos como diferencias finitas para resolver la ecuación de conservación de energía y se analizan algunas variables de proceso. Así, en las **Figuras 7 y 8** se aprecia el efecto de cambiar la temperatura del baño y de cambiar la temperatura de inmersión respectivamente sobre el tiempo de fusión.

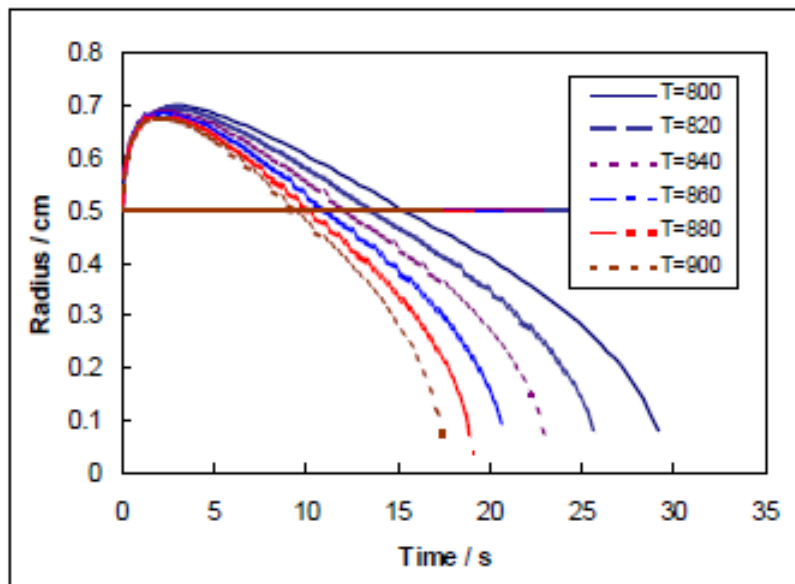


Figura 7 Curvas de radio vs tiempo a diferentes temperaturas del baño (Bo Zhou)

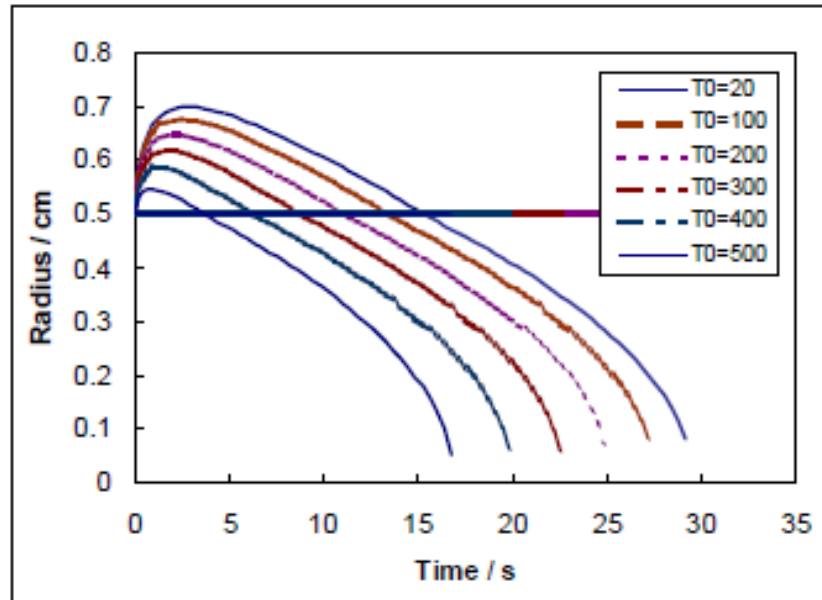


Figura 8 Curvas de radio vs tiempo a diferentes temperaturas de inmersión

(Bo Zhou)

Otros trabajos se enfocan en la fusión de chatarra como lo es el trabajo realizado por Robert D. Pehlke (5) donde analiza el proceso de crecimiento de la coraza utilizando un modelo en coordenadas cilíndricas y resultados experimentales (ver **Figura 9**).

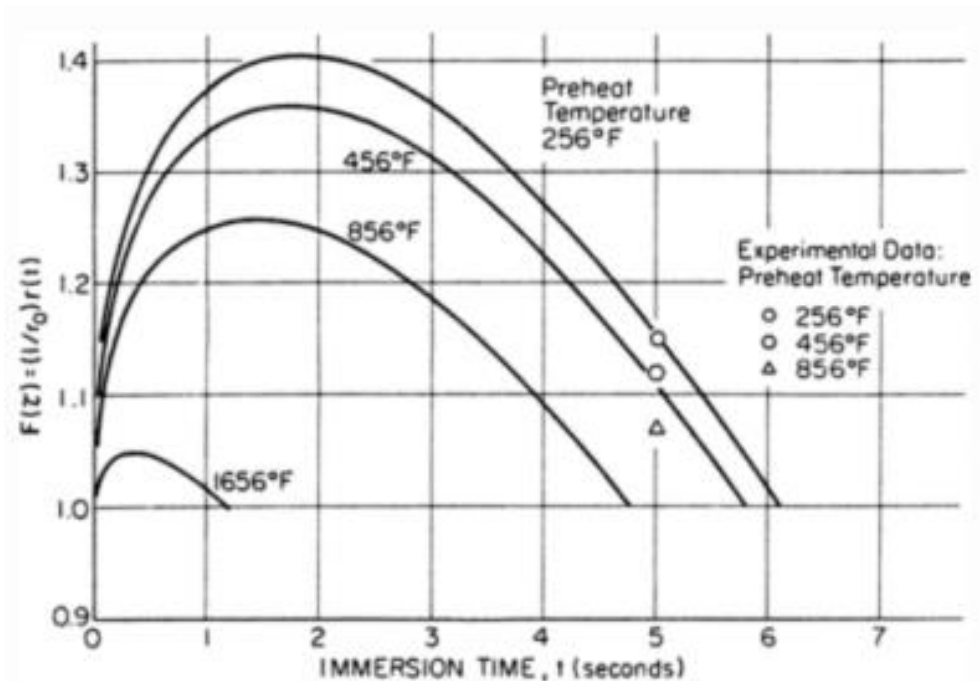


Figura 9 Curvas de radio adimensional vs tiempo a diferentes temperaturas de inmersión (Robert D. Pehlke)

Se realizó un modelo de fusión análogo utilizando una geometría cilíndrica y diferencias finitas en el trabajo presentado por Yeong-U Kim y Robert D. Pehlke (6) donde se muestran perfiles de temperatura a distintos tiempos (ver **Figura 10**).

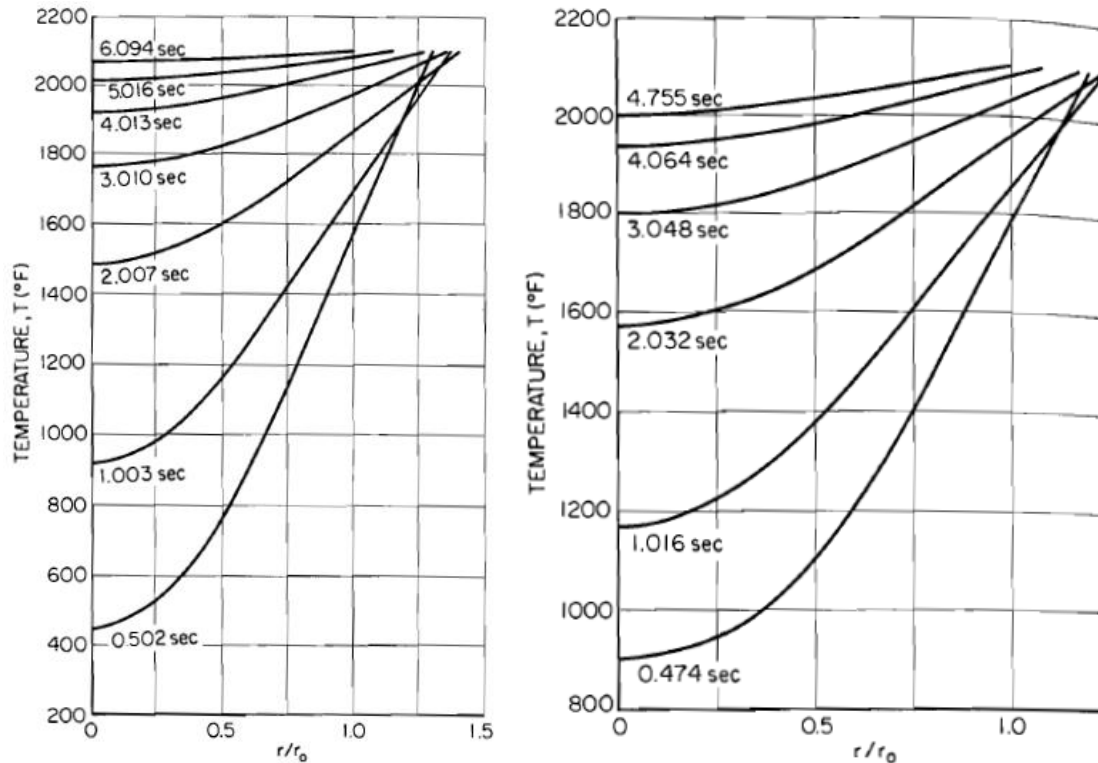


Figura 10 Perfiles de temperatura a distintos tiempos (Yeong-U Kim)

También utilizando geometría cilíndrica se evalúa la disolución de una aleación de niobio en baño de acero en el trabajo de Stavros Argyropoulos y colaboradores (7), donde además se mide el volumen de la muestra utilizando una celda de carga, el peso y la fuerza boyante (**Figura 11**).

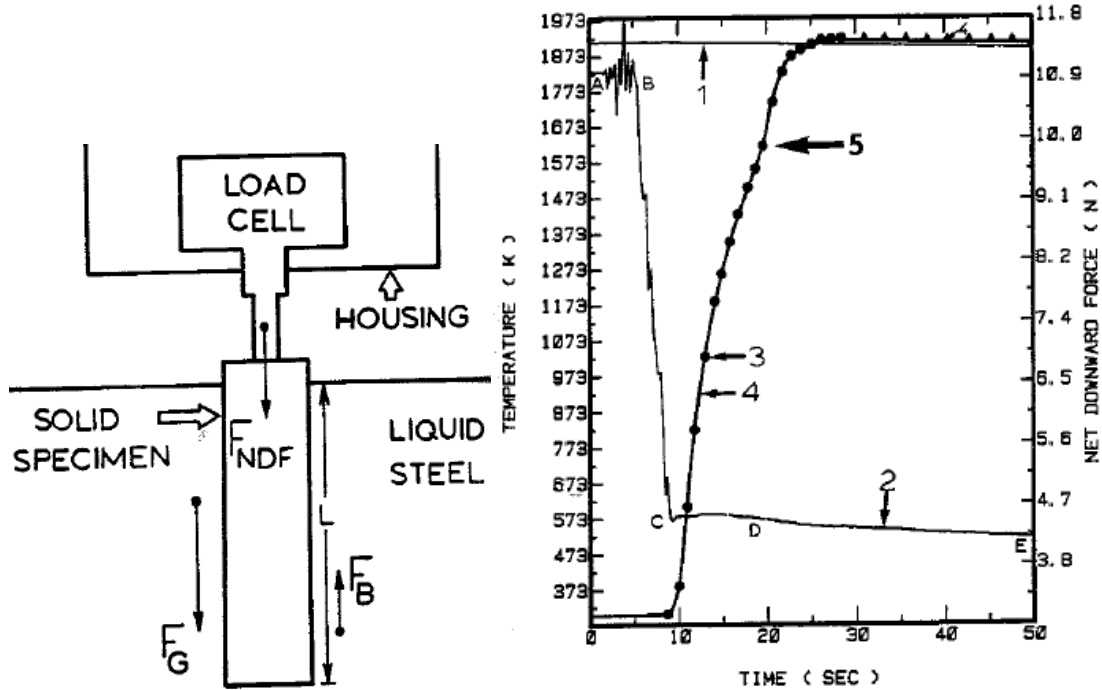


Figura 11 Esquema experimental, perfil de temperatura en el centro y fuerza debida al peso registrado (Stavros Argyropoulos)

El proceso por el cual se lleva a cabo la disolución para aleaciones ferrosas resulta distinto, ya que el baño y la pieza a fundir no tienen puntos de fusión como tal, si no que se basan en diagrama Fe-C con las líneas de liquidus y solidus para llegar al estado líquido. En este caso el transporte de masa resulta importante para abatir el punto de fusión en la línea de liquidus y lograr finalmente la disolución (ver **Figura 12**). El proceso requiere tanto el transporte de energía como de masa y se presenta su análisis en el trabajo de Eckehard Specht y colaboradores (8).

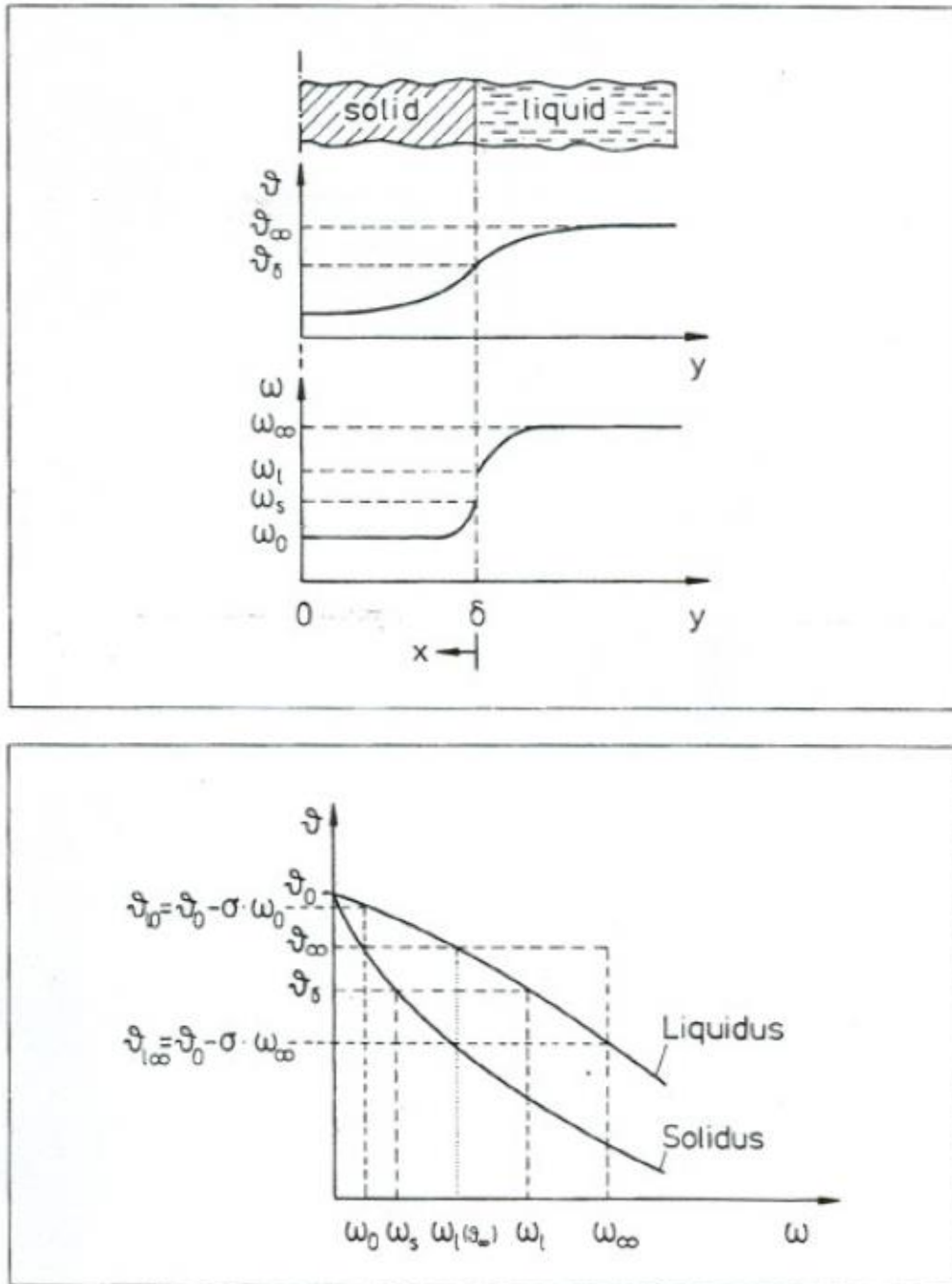


Figura 12 Esquema de composición en la disolución de aleaciones del diagrama Fe-C (Eckehard Specht)



Para la fusión de partículas esféricas de aluminio uno de los trabajos más importantes es el de Shigeji Taniguchi y colaboradores (9). El modelo que se propone utiliza la condición de Stefan que busca encontrar la cantidad de energía transferida a la partícula esférica y esta energía realiza el cambio de fase alrededor. En la **Figura 13** se presentan simulaciones y mediciones experimentales de la fusión de las partículas de aluminio en un baño de Al a una temperatura de 680°C variando el grado de agitación a través de burbujeo con gases.

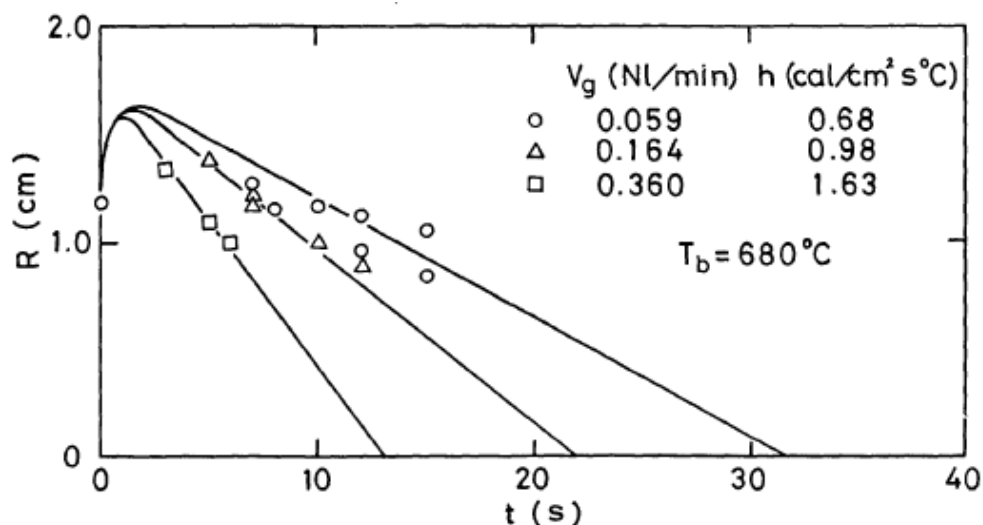


Figura 13 Radio vs tiempo para distintas condiciones hidrodinámicas para el baño (Shigeji Taniguchi)

B.Zhou y colaboradores (4) además realizaron un modelo similar en coordenadas esféricas para predecir la formación de coraza en esferas de aluminio en contacto con sales como escoria para baños de chatarra (**Figura 14**).

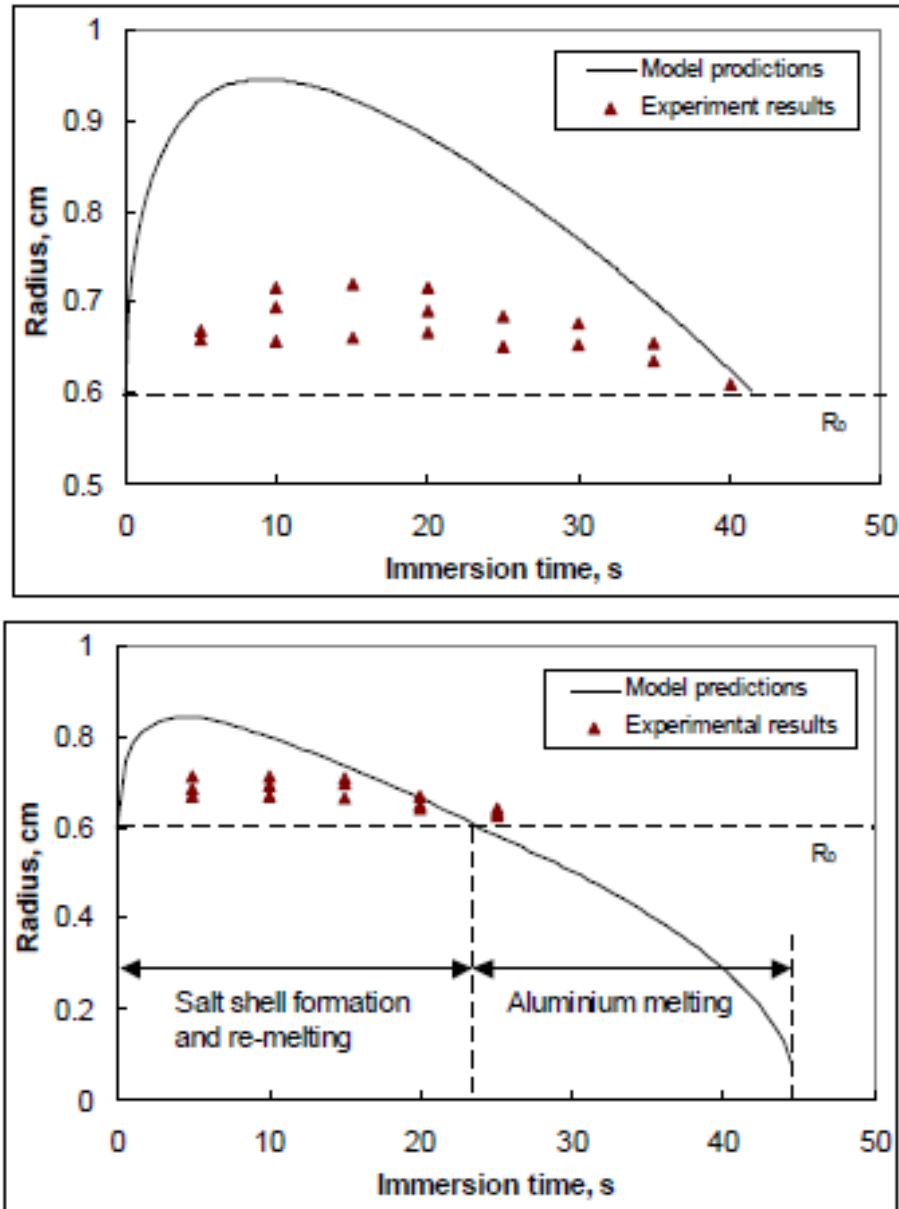


Figura 14 Radio vs tiempo experimentales y obtenidas con el modelo en coordenadas esféricas (B. Zhou)

En el trabajo de Marco Aurelio Ramírez Arguez y colaboradores (10) analizan la fusión del DRI dentro del Horno eléctrico de arco considerando a la partícula como



un sistema isotérmico y utilizando la conservación de energía para obtener la fracción solidificada o fundida en la frontera del pellet (ver **Figura 15**).

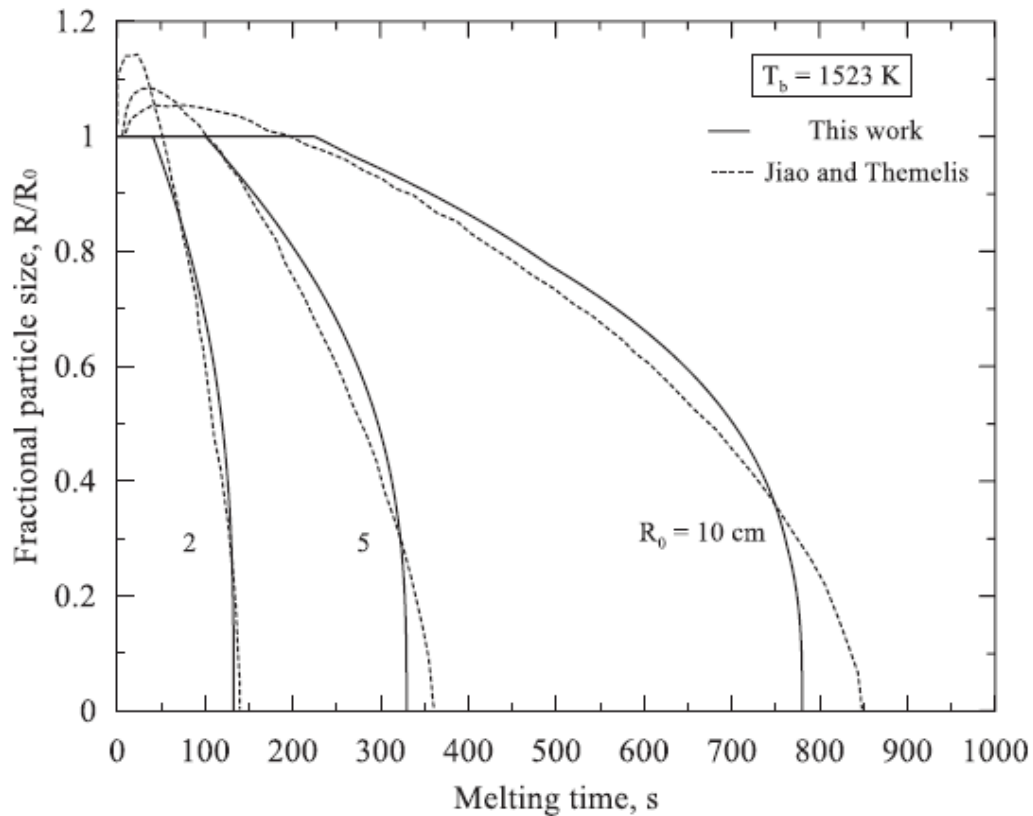


Figura 15 Radio adimensional vs tiempo para distintos diámetros (Marco A. Ramírez Argaez)

En general todos los modelos revisados intentan predecir el tiempo de fusión del pellet para distintos valores de radio inicial, temperatura de baño, temperatura de inmersión, propiedades físicas del pellet y agitación. Algunas de las variables que se muestran como resultados son el radio del pellet y la temperatura en el interior en función del tiempo. El presente trabajo busca reproducir un modelo matemático similar a los trabajos que se revisaron, se intentará realizar mejoras al modelo que



tomen en consideración más fenómenos buscando que el modelo tenga mayor similitud con la realidad.

1.2.2. Trabajos experimentales relacionados con la fusión del DRI

Se ha analizado como afectan las propiedades del DRI en el tiempo de fusión. De acuerdo con el proceso de reducción directa usualmente no se logra una metalización del 100 % en los pellets por lo que siempre hay presencia de FeO , Fe_3O_4 y Fe_2O_3 que modifican la conductividad térmica dentro de las partículas. En trabajos como los de Akira Sato y colaboradores (11) se analiza a detalle el efecto que tiene la presencia de óxidos de hierro y carbono en los tiempos de fusión de los pellets de DRI (ver **Figura 16**).

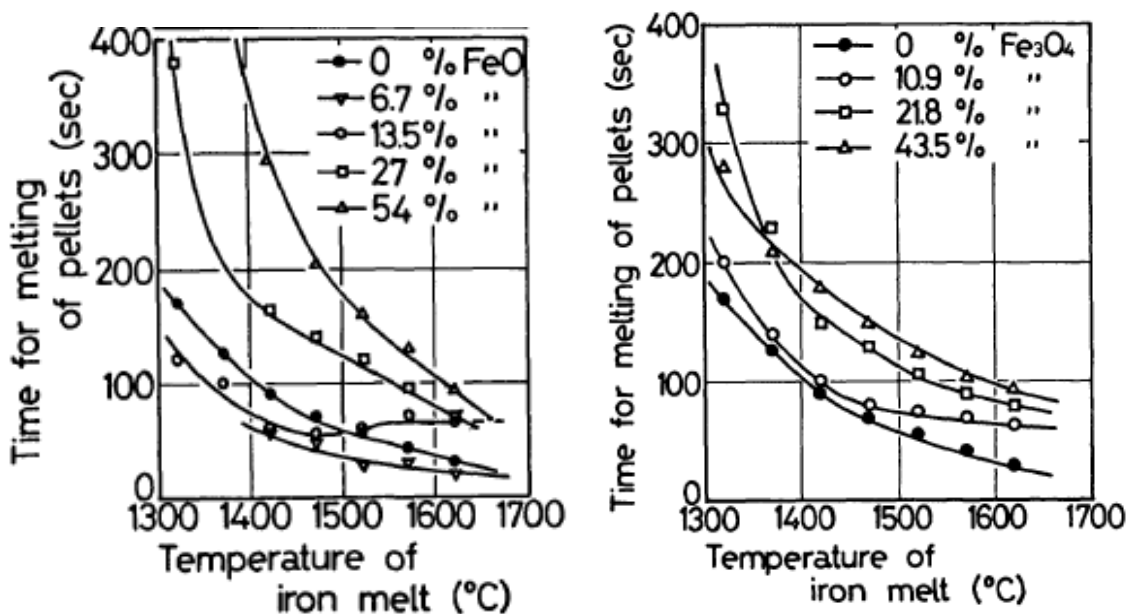
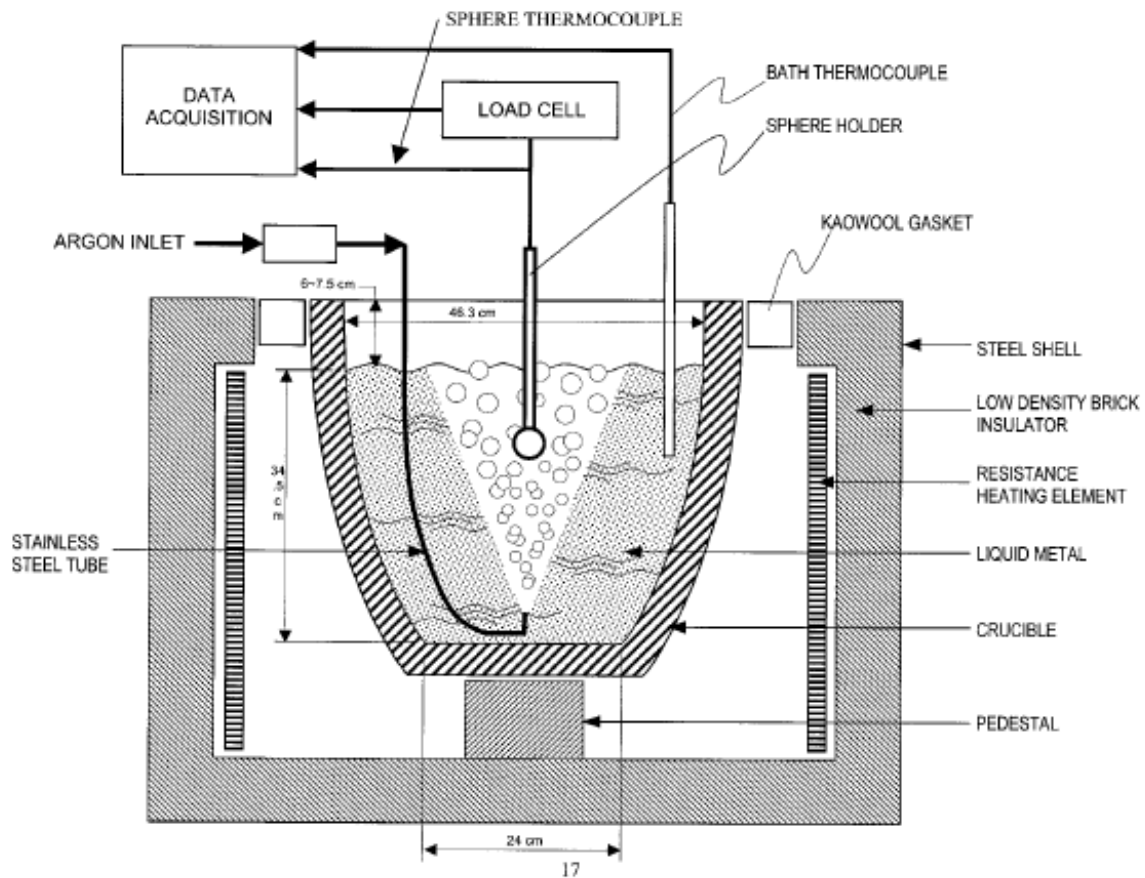


Figura 16 Curvas de tiempo de fusión a diferentes temperaturas del baño y contenidos de óxidos de Fe (Akira Sato)



Se han realizado algunos artículos para encontrar correlaciones entre la agitación y el coeficiente de transferencia de calor por convección como el trabajo realizado por Stravros A. Argyropoulos y colaboradores (12). En este trabajo se logra encontrar una correlación utilizando aluminio y agitación producida al burbujear argón (ver **Figura 17**).



$$\overline{Nu}_D = 2 + 10^{-4.817} \times Re_D^{1.556}$$
$$2797 \leq Re_D \leq 7148, Pr \approx 0.014$$

Figura 17 Esquema experimental y correlación obtenida (Stravros A. Argyropoulos)



Otros trabajos experimentales como el de Y. E. Lee y colaboradores (13) estudian la fusión de ferroaleaciones, que por lo general tienen una temperatura de fusión más baja, siendo la fusión de la coraza la etapa limitante (ver **Figura 18**).

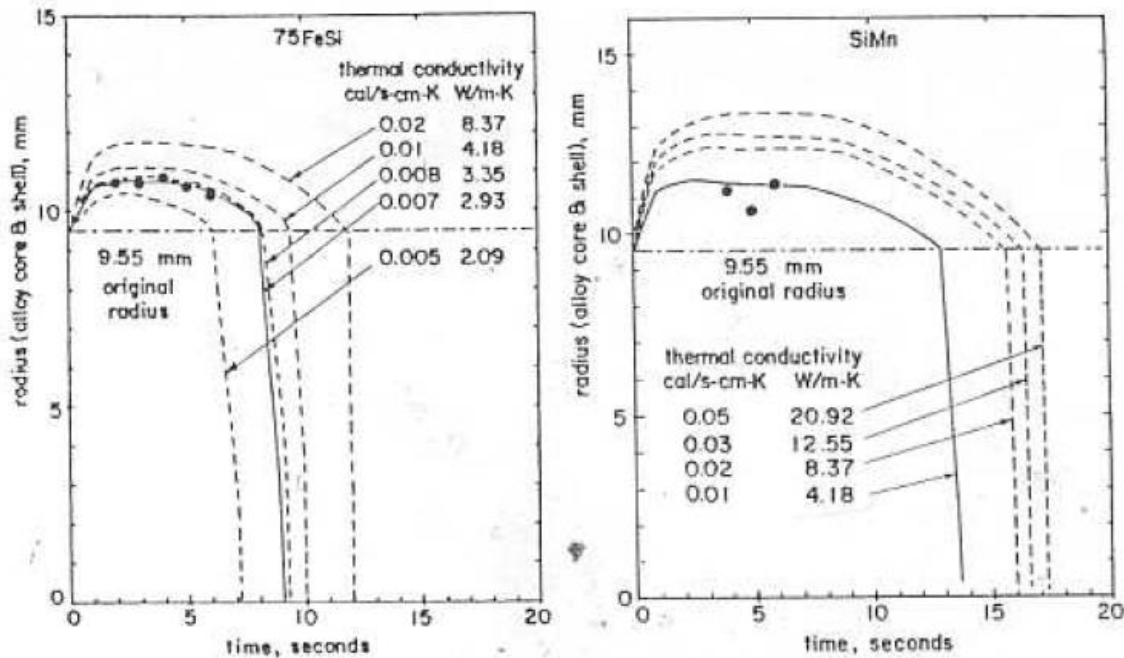


Figura 18 Evolución del radio vs tiempo para partículas de ferroaleaciones (Y. E. Lee)

En un caso extremo se estudia la disolución de Fe puro, con un alto punto de fusión, en un baño de hierro saturado en carbono, generalmente con un bajo punto de fusión eutéctico. En estos casos el proceso por lo general se da una disolución en vez de una fusión debido al transporte de carbono por difusión dentro de la pieza. Este caso fue estudiado por Yeong-U Kim y colaboradores (14) y en la **Figura 19** se aprecia el esquema experimental usado y en la **Figura 20** la evolución del diámetro obtenido.

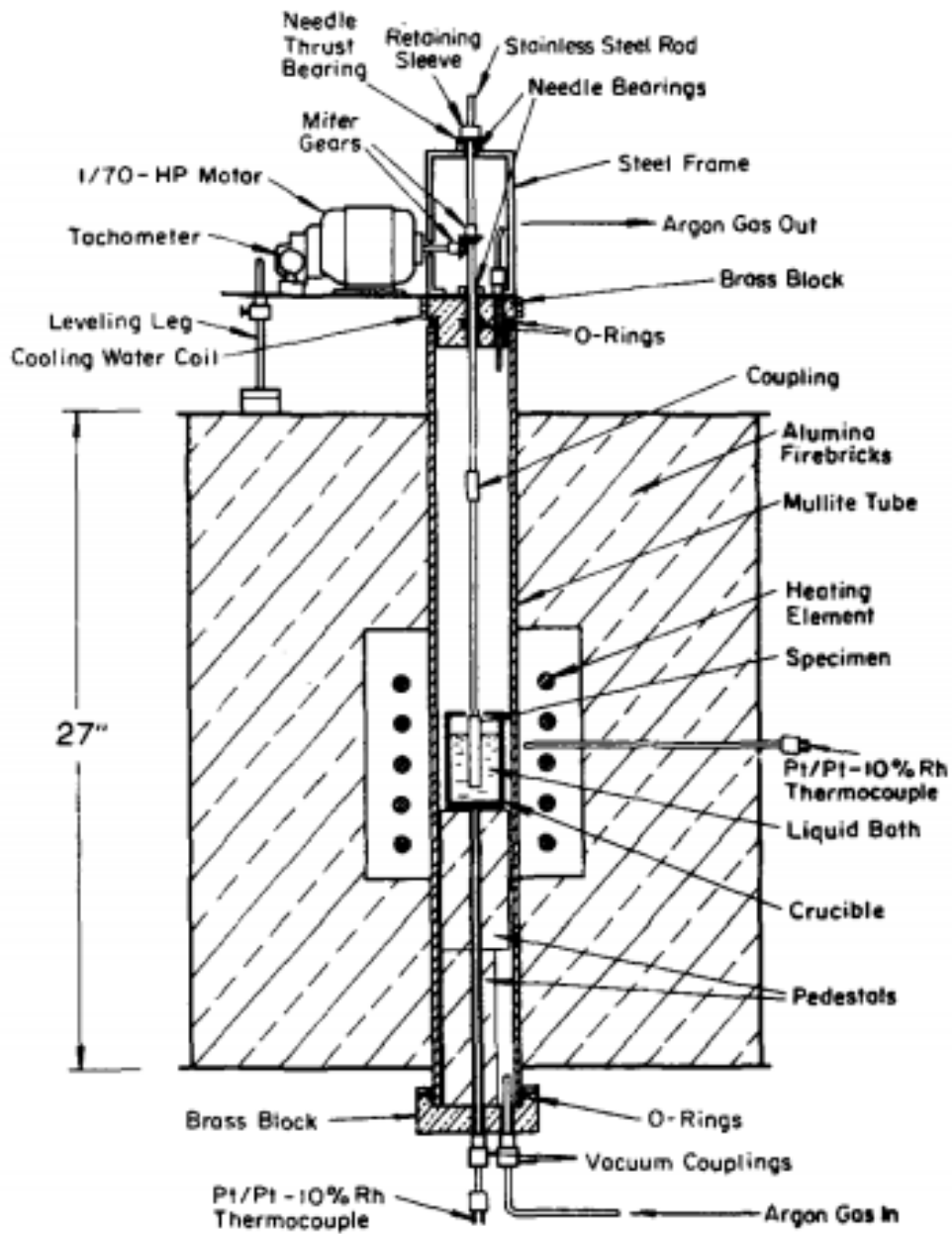


Figura 19 Esquema experimental para la disolución para probetas cilíndricas a diferentes temperaturas (Yeong-U Kim)

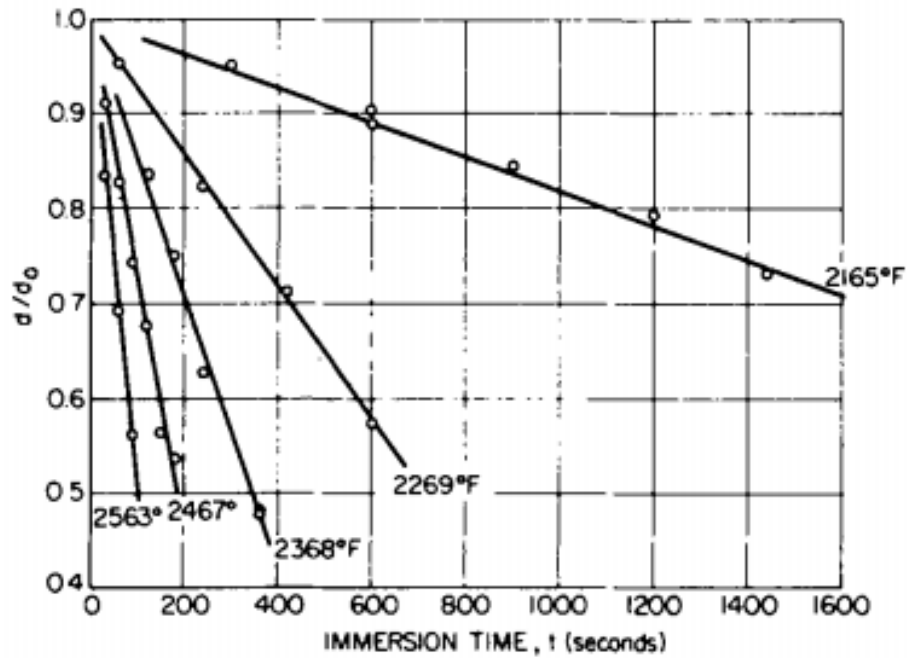


Figura 20 Evolución del diámetro adimensional para probetas cilíndricas a diferentes temperaturas (Yeong-U Kim)

Al fundir el DRI generalmente se tiene una proximidad entre un pellet y otro por lo que la influencia entre la distancia entre ellos puede ser importante. El trabajo realizado por Jianghua Li y colaboradores (15) evalúan la influencia de la distancia entre piezas de chatarra usando barras cilíndricas (ver **Figura 21 y 22**).

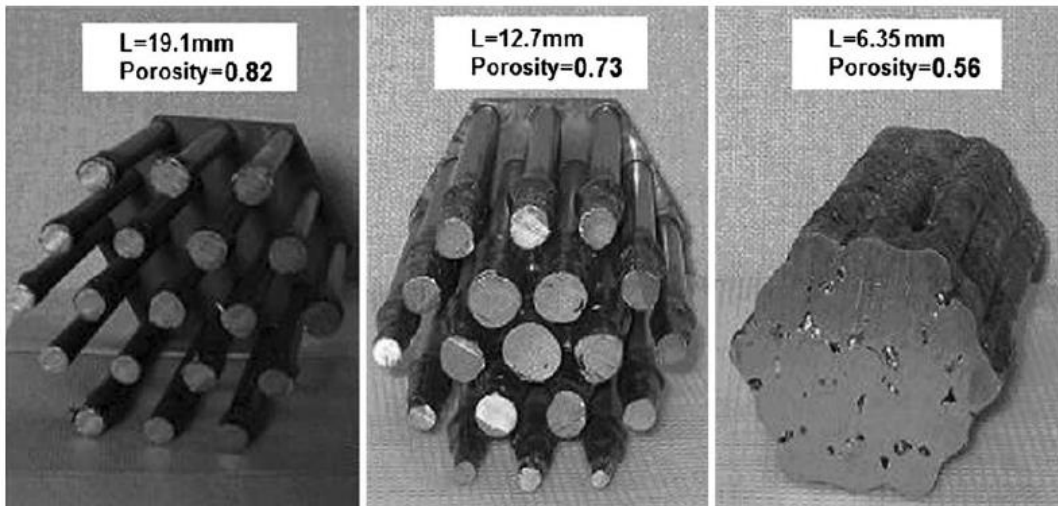


Figura 21 Piezas después de 10 s de inmersión con diferente distancia (porosidad) entre ellas (Jianghua Li)

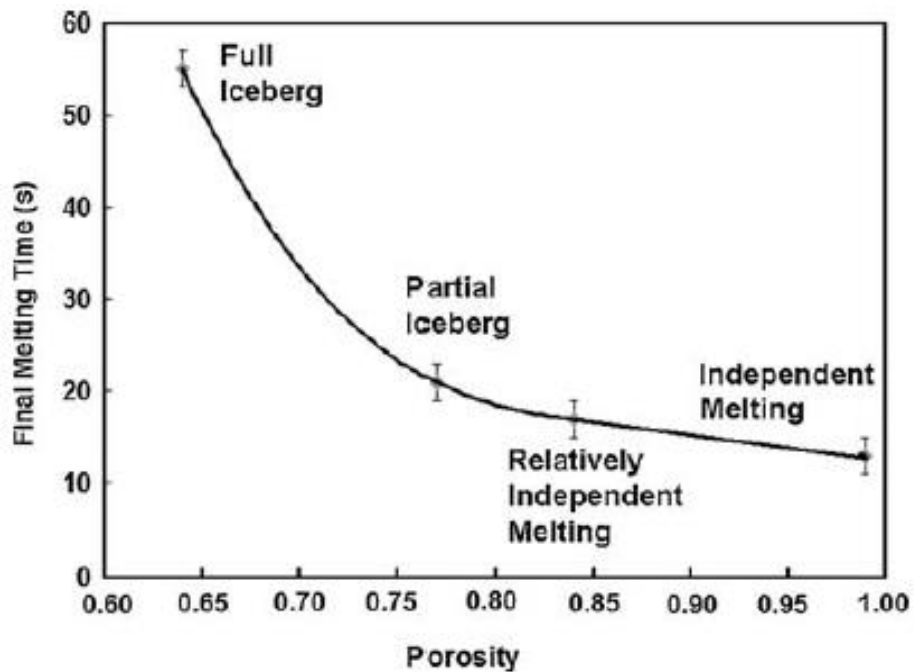


Figura 22 Influencia en la porosidad en el tiempo de fusión (Jianghua Li)



Otro esquema experimental fue llevado a cabo por Sang-Beom Lee y colaboradores (16) donde se utiliza una cámara de video para observar la fusión de Ferro-silicio en un baño de hierro con escoria hecha de óxido de cromo (ver **Figura 23**).

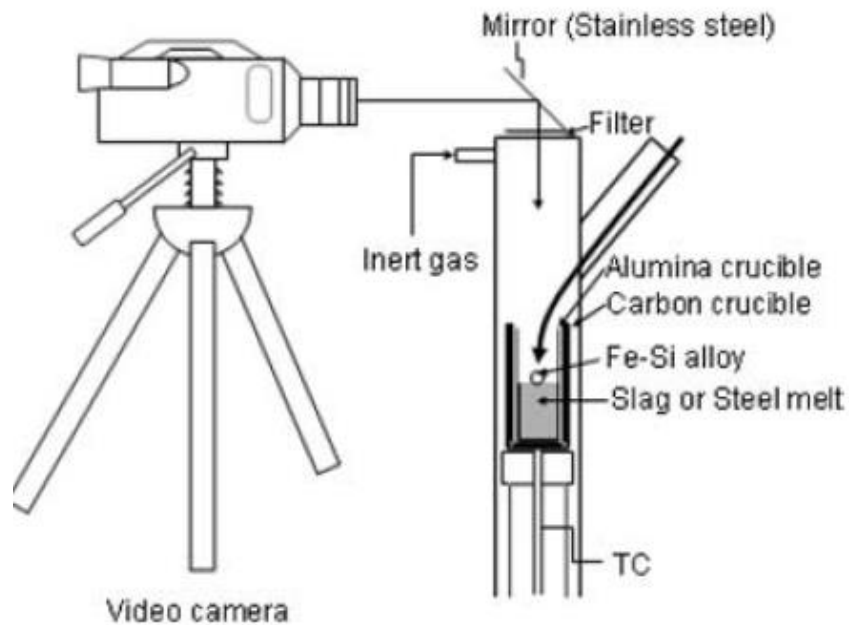


Figura 23 Esquema experimental utilizado para medir el progreso de la fusión (Sang-Beom Lee)

Otros trabajos se basan en las propiedades físicas en medios porosos como es el trabajo realizado por J. C. Y. Koh y Anthony Fortini (17) donde se busca encontrar una relación entre la conductividad térmica en medios porosos (ver **Figura 24**).

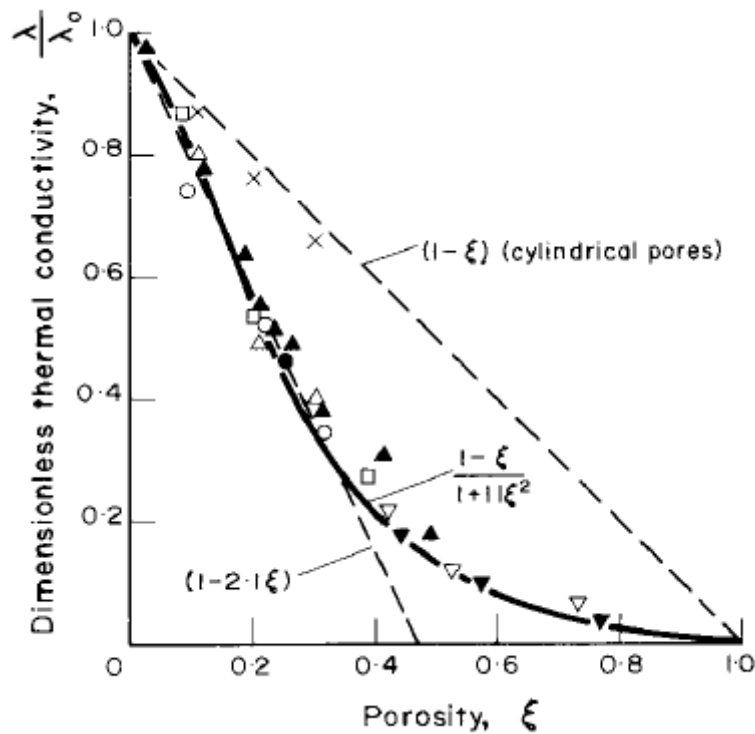


Figura 24 Relacion entre la conductividad térmica y la porosidad (J. C. Y. Koh y Anthony Fortini)

Los trabajos experimentales presentados fueron tomados en consideración para preparar un esquema experimental que permita validar el modelo matemático y realizar un análisis del proceso de fusión.

1.3. Variables del proceso

Mecanismos de transporte de momentum, masa y calor son los principales factores que controlan el proceso de fusión del DRI (10).

Los factores principales que intervienen en el proceso de fusión son los siguientes:

- Propiedades fisicoquímicas del DRI



- Propiedades fisicoquímicas del baño y escoria
- Tamaño y características del DRI
- Temperatura del baño y del DRI previo a la inmersión
- Hidrodinámica del baño y escoria

Haciendo un análisis más profundo de los factores que intervienen, y que salen a la luz después de la revisión de la literatura efectuada, se pueden encontrar las siguientes variables del proceso:

- Propiedades fisicoquímicas del DRI
 - Conductividad térmica (k)
 - Capacidad calorífica específica (C_p)
 - Densidad (ρ)
 - Entalpía específica de fusión (ΔH_m)
 - Composición química
 - Temperatura de liquidus
 - Temperatura de solidus
- Propiedades fisicoquímicas del baño (metal o escoria)
 - Conductividad térmica (k)
 - Capacidad calorífica específica (C_p)
 - Densidad (ρ)
 - Viscosidad (μ)
 - Composición química
 - Temperatura de liquidus



- Temperatura de solidus
- Tamaño y características del DRI
 - Radio (R)
 - Porosidad
 - Reacciones dentro de la partícula
- Temperatura del baño y del DRI previo a la inmersión
 - Temperatura del baño
 - Temperatura del DRI previo a la inmersión
- Hidrodinámica del baño (metal o escoria)
 - Coeficiente de transferencia de energía (h)
 - Agitación

El trabajo que se realizó busca tener un modelo matemático que simule la fusión de partículas esféricas con las condiciones del horno eléctrico de arco. Este modelo se validó utilizando experimentación y finalmente se realizó un análisis cuantitativo de proceso para evaluar la influencia de todas las variables involucradas.

1.4. Hipótesis

Se puede analizar cuantitativamente el proceso de fusión del DRI utilizando un modelo matemático. Este modelo se validará utilizando experimentación que intentará recrear las condiciones de horno eléctrico de arco. Finalmente el análisis realizado con el modelo permitirá entender mejor el proceso de fusión para poder realizar recomendaciones que permitan mejorar la eficiencia del proceso industrial.



1.5. Objetivos

- Estudiar de manera cuantitativa el proceso de fusión de DRI.
- Generar un modelo matemático validado que permita recrear la fusión del DRI en el horno eléctrico de arco.
- Recrear las condiciones del horno eléctrico de arco experimentalmente para estudiar el proceso de fusión.
- Estudiar la influencia de todas las variables del proceso sobre la fusión del DRI.

2. Metodología

2.1. Modelos matemáticos

Se realizaron 4 modelos matemáticos basados en los trabajos presentados en la revisión bibliográfica intentando construir un modelo cada vez más complejo y agregando elementos físicos que recrearan mejor la fusión del DRI. Los modelos que se evaluaron fueron los siguientes.

- Modelo 1 – Volumen finito radial con distintos esquemas transitorios

En este modelo se busca reproducir los modelos comunes reportados en la literatura evaluando por completo la fusión resolviendo la ecuación de conservación de energía con distintos esquemas transitorios.



- Modelo 2 – Volumen finito radial explícito con generación

En este modelo se busca mejorar los modelos comunes reportados en la literatura evaluando la mayor parte de la fusión resolviendo la ecuación de conservación de energía con generación debida a reacciones que se llevan a cabo dentro del DRI y con la posibilidad de evaluar propiedades como función de alguna otra variable.

- Modelo 3 – Volumen finito radial explícito para disolución con transporte de especies químicas

En este modelo se busca mejorar los modelos comunes reportados en la literatura evaluando la mayor parte de la fusión resolviendo la ecuación de conservación de energía con generación y la conservación de especies químicas que permite incluir la temperatura de solidus y liquidus para el sistema, además poder evaluar propiedades físicas como función de alguna otra variable¹.

- Modelo 4– Volumen finito radial y polar explícito con generación y flotabilidad

En este modelo se busca mejorar los modelos comunes reportados en la literatura evaluando la mayor parte de la fusión resolviendo la ecuación de conservación de energía en dirección radial y polar para poder incluir la flotabilidad del DRI debida a la fuerza boyante y la diferencia de densidades con el baño además poder evaluar propiedades físicas que no son constantes.



2.1.1. Suposiciones Generales

Para poder desarrollar los modelos matemáticos se requirió realizar suposiciones generales que buscan representar lo que ocurre en el proceso de fusión del DRI sin desviarse significativamente de la realidad.

- Medio continuo

La suposición de medio continuo hace énfasis en que todo el DRI está hecho de un solo material y difiere de la realidad ya que no se considera la porosidad como un medio distinto.

- Geometría esférica

La suposición de geometría esférica permite resolver de forma más sencilla la conservación de energía utilizando coordenadas esféricas y no difiere mucho de la realidad ya que el DRI en general tiene una forma esférica con algunas imperfecciones.

- Interfase sólido - líquido

Para la interfase sólido (DRI) – líquido (baño) se supone transporte de energía por convección usando un coeficiente de transferencia de energía.

- Formación de coraza

Esta suposición considera que el baño al entrar en contacto con el DRI se sub-enfría lo suficiente para solidificar alrededor, esto difiere de la realidad sobre todo cuando se tiene el baño muy por encima de su temperatura de



fusión o una fuerte agitación lo cual puede provocar que el fluido no forme una coraza alrededor del pellet.

- Baño isotérmico

Esta suposición considera que el baño se encuentra en general a la misma temperatura sin gradientes térmicos y esto involucra que no se afecta la temperatura del baño al realizar la inmersión de las partículas de DRI. En la realidad al aumentar la masa de DRI agregada si se puede afectar la temperatura del baño y generar gradientes térmicos en su interior.

2.1.2. Suposiciones Modelo 1

- Propiedades físicas constantes

La suposición de propiedades físicas constantes facilita el modelo matemático en la solución de la ecuación de conservación de energía y difiere de la realidad ya que normalmente las propiedades en general tienen dependencia con la temperatura.

- Temperatura de fusión

Esta suposición considera que tanto el DRI como el baño tienen una única temperatura de fusión permitiendo una solución más sencilla de la cinética de fusión. Esto difiere de la realidad donde por lo general se tiene un rango de fusión con una temperatura de solidus y una de liquidus que depende de la composición del DRI y del baño.



2.1.3. Suposiciones Modelo 2

- Propiedades físicas variables

La suposición de propiedades físicas variables permite incluir en el modelo matemático de la solución la interdependencia con otras variables, en ocasiones no lineal, de las propiedades físicas y otros parámetros durante la fusión del DRI.

- Temperatura de fusión

Esta suposición considera que tanto el DRI como el baño tienen una única temperatura de fusión permitiendo una solución más sencilla de la cinética de fusión. Esto difiere de la realidad donde por lo general se tiene un rango de fusión con una temperatura de solidus y una de liquidus que depende de la composición del DRI y del baño.

- Generación

Esta suposición considera que dentro del DRI ocurre al menos una reacción química que interviene en el proceso de fusión.

2.1.4. Suposiciones Modelo 3

- Disolución – fusión

Esta suposición incluye la composición química de alguna especie en el sistema baño y DRI la cual abate el punto de fusión para el sistema permitiendo incluir una temperatura de solidus y una de liquidus además poder evaluar el abatimiento de la temperatura de fusión.



- Propiedades físicas variables

La suposición de propiedades físicas variables permite incluir en el modelo matemático de la solución la interdependencia con otras variables, en ocasiones no lineal, de las propiedades físicas y otros parámetros durante la fusión del DRI.

- Generación

Esta suposición considera que dentro del DRI ocurre al menos una reacción química que interviene en el proceso de fusión.

2.1.5. Suposiciones Modelo 4

- Flotabilidad

Esta suposición establece que debido a la diferencia de densidades entre el baño y el DRI se tiene fuerza boyante que hace que la partícula flote durante la fusión por lo que se requiere resolver la conservación de energía en dirección radial y polar. Esto difiere de los demás modelos donde se supone tener a toda la partícula sumergida en el baño

- Propiedades físicas variables

La suposición de propiedades físicas variables permite incluir en el modelo matemático de la solución la interdependencia con otras variables, en ocasiones no lineal, de las propiedades físicas y otros parámetros durante la fusión del DRI.

- Temperatura de fusión



Esta suposición considera que tanto el DRI como el baño tienen una única temperatura de fusión permitiendo una solución más sencilla de la cinética de fusión. Esto difiere de la realidad donde por lo general se tiene un rango de fusión con una temperatura de solidus y una de liquidus que depende de la composición del DRI y del baño.

- Generación

Esta suposición considera que dentro del DRI ocurre al menos una reacción química que interviene en el proceso de fusión.

2.1.6. Ecuaciones gobernantes

Para la transferencia de energía dentro de la partícula se utilizó la ecuación de conservación energía para un sólido con generación.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) = -\nabla \cdot \mathbf{q} + S_E \quad (1)$$

Donde la densidad de flujo (Flux) difusivo debida a la conducción se obtiene utilizando la ley de Fourier

$$\mathbf{q} = -k\nabla T \quad (2)$$

Para la generación se utilizó un modelo convencional de cinética química para reacción homogénea de un reactivo, comúnmente carbono, dentro del DRI.

$$S_H = -\Delta H_r r \quad (3)$$



$$r = \frac{1}{\nu_A} \frac{d[A]}{dt} = k_c [A]^n \quad (4)$$

La constante cinética k_c se calculó utilizando el modelo de Arrhenius.

$$k_c = k_0 \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (5)$$

Para la transferencia de especies químicas dentro de la partícula se utilizó la ecuación de conservación para especies químicas, también conocida como segunda ley de Fick.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} \quad (6)$$

Donde la densidad de flujo (Flux) difusivo debida a la difusión se obtiene utilizando la primera ley de Fick.

$$\mathbf{j} = -D\nabla C \quad (7)$$

Donde D es el coeficiente de difusión y depende de la temperatura con un modelo tipo Arrhenius.

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_A}{RT}\right) \quad (8)$$



2.1.7. Geometría

La geometría que se consideró fue una partícula esférica de radio R que depende del tiempo ya que el tamaño se modifica durante la fusión.

- Dominio

$$\Omega(t) = \{r \mid 0 \leq r \leq R(t)\} \quad (9)$$

El dominio de cálculo $\Omega(t)$ resulta una esfera de radio $R(t)$ que involucra al DRI y la coraza que se forma.

- Frontera 1 (Centro)

$$\partial\Omega_1 = \{r \mid r = 0\} \quad (10)$$

Esta frontera $\partial\Omega_1$ resulta del planteamiento matemático de coordenadas esféricas y es utilizada para establecer la condición de simetría

- Frontera 2 (Frontera móvil)

$$\partial\Omega_2(t) = \{r \mid r = R(t)\} \quad (11)$$

Esta frontera $\partial\Omega_2(t)$ es la frontera del DRI en contacto con el baño la cual se desplaza durante la fusión.



2.1.8. Condiciones a la frontera e iniciales

Como condiciones a la frontera se tiene por un lado la condición de simetría en el centro y por otro lado la condición de Stefan con frontera móvil

- Condición de simetría

$$\nabla T = 0 \quad \text{en} \quad r = 0 \quad (12)$$

$$\nabla C = 0 \quad \text{en} \quad r = 0 \quad (13)$$

Esta condición involucra la simetría en la frontera $\partial\Omega_1$ debida al sistema coordenado e implica no tener densidad de flujo $\mathbf{q} = 0$ y $\mathbf{j} = 0$ en el centro de la geometría.

- Condición de Stefan energía

$$\rho\Delta H_m \frac{\partial V}{\partial t} = - \iint \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} \quad \text{en} \quad r = R(t) \quad (14)$$

$$T = T_m \quad \text{en} \quad r = R(t) \quad (15)$$

La condición de Stefan involucra a la conservación de energía dentro de la partícula así como el desplazamiento de la frontera $\partial\Omega_2(t)$ debido al flujo de energía mientras se mantiene a la temperatura de fusión T_m en la frontera.

- Condición de Stefan especies químicas

$$\Delta C \frac{\partial V}{\partial t} = - \iint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} \quad \text{en} \quad r = R(t) \quad (16)$$

$$C = C_s \quad \text{en} \quad r = R(t) \quad (17)$$



La condición de Stefan involucra a la conservación de la especie química dentro de la partícula así como la suposición de disolución debido a que la frontera $\partial\Omega_2(t)$ se mantiene a la concentración de fusión C_S .

Por otra parte se tiene que establecer la condición inicial que se tiene para todo el dominio.

- Condición de Inicial

$$T = T_0 \quad \text{para} \quad 0 \leq r \leq R(0) \quad (18)$$

$$C = C_0 \quad \text{para} \quad 0 \leq r \leq R(0) \quad (19)$$

La condición inicial involucra conocer la distribución de temperatura y concentración uniformes para todo el dominio antes de la inmersión.



2.1.9. Metodología de solución

Para la solución de las ecuaciones de conservación se utilizó el método de volumen finito el cual se resume en los siguientes pasos a continuación:

- Discretización del dominio en elementos de volumen finito.
- Integración de la ecuación de energía para cada volumen finito dentro del dominio
- Establecimiento de condiciones de frontera e iniciales
- Integración con el tiempo para casos transitorios
- Establecimiento de condición inicial
- Solución de ecuaciones algebraicas resultantes

2.1.10. Discretización del dominio

Para todos los problemas de fusión de DRI se puede aprovechar la geometría esférica y utilizar coordenadas esféricas con origen en el centro del pellet. Esto tiene la ventaja de poder adaptar mejor los elementos de volumen finito a la geometría y no tener velocidad relativa entre el sistema coordenado y el dominio de cálculo.

Se tienen diferentes formas de discretizar el dominio dependiendo de la complejidad del problema y las direcciones en las que se da el flujo de energía. A continuación se muestra la nomenclatura utilizada en la **Figura 25**.

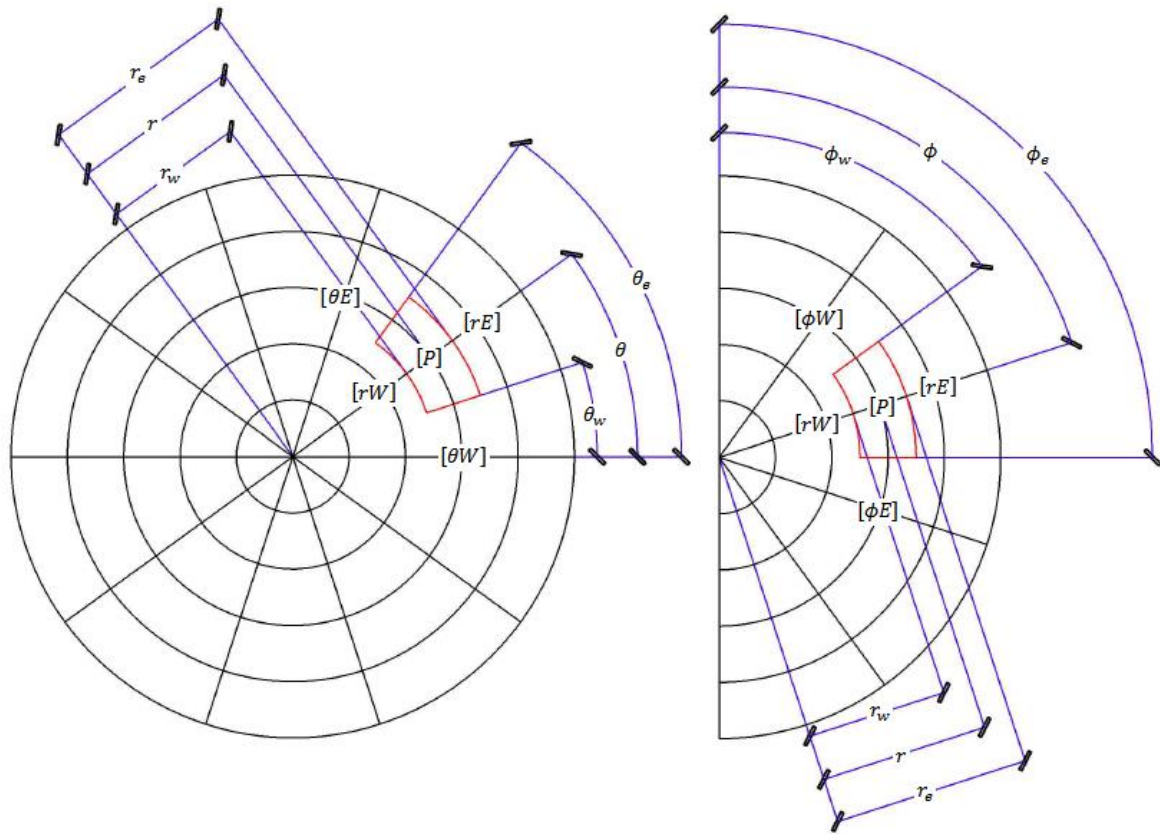


Figura 25 Nomenclatura utilizada para la discretización

Para la posición del centroide de cada volumen finito se utilizaron las coordenadas r , θ y ϕ . Para las fronteras se utilizaron letras minúsculas e (east) y w (west), por lo que por ejemplo A_{r_e} es el área de la frontera este de la coordenada radial r . Para denotar elementos vecinos se utilizaron letras mayúsculas P (Point), E (East) y W (West), por lo que rE representa al elemento vecino al este en la coordenada r para el elemento P .



2.1.11. Integración de las ecuaciones de conservación

Para este caso se tiene el sistema a presión constante por lo que la ecuación de energía del sistema se evaluará con la entalpía $E = H$

Se integra la ecuación de energía para cada volumen definido en la discretización y utilizando el teorema de la divergencia se elimina el gradiente sustituyendo la integral de volumen por una de superficie.

$$\iiint \frac{\partial}{\partial t} (\rho H) dV = - \iint \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} + \iiint S_H dV \quad (20)$$

Se realiza un procedimiento análogo para la conservación de especies químicas.

$$\iiint \frac{\partial c}{\partial t} dV = - \iint \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S} \quad (21)$$

A continuación se desarrollará cada término de la ecuación en forma integral.

- Acumulación

$$\iiint \frac{\partial}{\partial t} (\rho H) dV \quad (22)$$

La forma más sencilla para aproximar la integral se basa en pensar que el argumento es constante para todo el volumen y puede salir de la integral, esto necesariamente requiere que la entalpía para cada elemento finito de volumen solo dependa del tiempo y por último se considera la densidad del sólido como constante.



$$\iiint \frac{\partial}{\partial t} (\rho H) dV = \rho V \frac{\partial H}{\partial t} \quad (23)$$

La integral de volumen se resuelve a continuación en coordenadas esféricas para un elemento P de volumen finito

$$V = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} r^2 \sin \phi \, dr \, d\theta \, d\phi = -\frac{1}{3} (r_e^3 - r_w^3) (\theta_e - \theta_w) (\cos \phi_e - \cos \phi_w) \quad (24)$$

Una vez resuelta la integral de volumen se hace notar la dependencia de la entalpía con el tiempo como $H(T(t))$, utilizando la regla de la cadena y la definición de la capacidad calorífica $C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_p$ se reescribe la derivada.

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial t} = C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (25)$$

Finalmente se integra con el tiempo y se utiliza el teorema fundamental de cálculo sabiendo que ρ , C_p y V son constantes para el tiempo. El término de acumulación para cada elemento P quedaría expresado:

$$\rho C_p V \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial T}{\partial t} dt = \rho C_p V (T^{t+\Delta t} - T^t) \quad (26)$$

Para la conservación de especies químicas se realiza un procedimiento similar llegando a la siguiente ecuación:

$$V \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial C}{\partial t} dt = V (C^{t+\Delta t} - C^t) \quad (27)$$



- Entradas y salidas

$$- \iint \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} \quad (28)$$

Para las entradas o salidas se calcula primero las diferenciales de superficie para las distintas áreas

$$dS_r = \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \phi} \right\| d\theta d\phi = r^2 \sin \phi d\theta d\phi \quad (29)$$

$$dS_\theta = \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \phi} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r} \right\| d\phi dr = r d\phi dr \quad (30)$$

$$dS_\phi = \left\| \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial r} \times \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \theta} \right\| dr d\theta = r \sin \phi dr d\theta \quad (31)$$

Al momento de realizar el producto punto debe considerarse el signo a partir del ángulo formado entre la densidad de flujo y el vector de superficie

$$\mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} = \|\mathbf{q}\| \|d\mathbf{S}\| \cos \alpha \quad (32)$$

Dado que todas las superficies tienen un vector orientado hacia afuera del elemento de volumen todas las densidades de flujo que entran por las caras w forman un ángulo $\alpha = \pi$ por lo que llevan un signo negativo mientras que todas las caras e forman un ángulo $\alpha = 0$ por lo que van con signo positivo.

Por otra parte se sigue la convención termodinámica tomando a las entradas como positivas y a las salidas como negativas. Considerando todos los signos debidos a la orientación de las caras, entradas o salidas y el signo proveniente de la ecuación de energía se tiene que las entradas en las áreas w van con signo



positivo y las salidas con negativo, mientras que para las áreas e van con el signo contrario. Existen 6 diferentes tipos de caras posibles para cada elemento P y se pueden aproximar las integrales considerando a la densidad de flujo como constante para toda la superficie por lo que puede salir de la integral (ver **Tabla 2**).

Tabla 2 Flujo de energía

Frontera	Flujo de energía
rw	$\int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} q_{rw} r^2 \sin \phi d\theta d\phi = q_{rw} A_{rw}$
re	$\int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} q_{re} r^2 \sin \phi d\theta d\phi = q_{re} A_{re}$
θw	$\int_{r_w}^{r_e} \int_{\phi_w}^{\phi_e} q_{\theta w} r d\phi dr = q_{\theta w} A_{\theta w}$
θe	$\int_{r_w}^{r_e} \int_{\phi_w}^{\phi_e} q_{\theta e} r d\phi dr = q_{\theta e} A_{\theta e}$
ϕw	$\int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} q_{\phi w} r \sin \phi dr d\theta = q_{\phi w} A_{\phi w}$
ϕe	$\int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} q_{\phi e} r \sin \phi dr d\theta = q_{\phi e} A_{\phi e}$

Las áreas de cada superficie en las fronteras se pueden obtener realizando la integración de forma analítica (ver **Tabla 3**).



Tabla 3 Áreas en la frontera

Frontera	Áreas en la frontera
rw	$A_{rw} = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} r^2 \sin \phi \, d\theta \, d\phi = -r_w^2 (\cos \phi_e - \cos \phi_w) (\theta_e - \theta_w)$
re	$A_{re} = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} r^2 \sin \phi \, d\theta \, d\phi = -r_e^2 (\cos \phi_e - \cos \phi_w) (\theta_e - \theta_w)$
θw	$A_{\theta w} = \int_{r_w}^{r_e} \int_{\phi_w}^{\phi_e} r \, d\phi \, dr = \frac{(r_e^2 - r_w^2)}{2} (\phi_e - \phi_w)$
θe	$A_{\theta e} = \int_{r_w}^{r_e} \int_{\phi_w}^{\phi_e} r \, d\phi \, dr = \frac{(r_e^2 - r_w^2)}{2} (\phi_e - \phi_w)$
ϕw	$A_{\phi w} = \int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} r \sin \phi \, dr \, d\theta = \frac{(r_e^2 - r_w^2)}{2} (\theta_e - \theta_w) \sin \phi_w$
ϕe	$A_{\phi e} = \int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} r \sin \phi \, dr \, d\theta = \frac{(r_e^2 - r_w^2)}{2} (\theta_e - \theta_w) \sin \phi_e$

Para el caso de conducción de energía se tiene a la densidad de flujo definida con la ley de Fourier

$$\mathbf{q} = -k \nabla T = -k \begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial r} \\ \frac{1}{r \sin \phi} \frac{\partial T}{\partial \theta} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \phi} \end{bmatrix} \quad (33)$$

Donde las derivadas parciales se aproximan utilizando diferencias finitas considerando a P como el elemento en el que se está aplicando la ecuación de



energía, E y W como los nodos vecinos. Notar que se tienen letras mayúsculas E , W entre corchetes $[]$ para denotar elementos vecinos y letras minúsculas e , w para fronteras vecinas.

$$\frac{\partial T}{\partial r} \approx \frac{T[P]-T[rW]}{r[P]-r[rW]} \approx \frac{T[rE]-T[P]}{r[rE]-r[P]} \quad (34)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \theta} \approx \frac{T[P]-T[\theta W]}{\theta[P]-\theta[\theta W]} \approx \frac{T[\theta E]-T[P]}{\theta[\theta E]-\theta[P]} \quad (35)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \phi} \approx \frac{T[P]-T[\phi W]}{\phi[P]-\phi[\phi W]} \approx \frac{T[\phi E]-T[P]}{\phi[\phi E]-\phi[P]} \quad (36)$$

Por otra parte se tiene que se debe conocer la conductividad térmica k en la frontera de cada elemento. Esto se puede obtener utilizando la media aritmética, geométrica o armónica (ver **Tabla 4**).



Tabla 4 Aproximaciones de conductividad térmica en la frontera

Frontera	Conductividad térmica
<i>rw</i>	$k_{rw}[P] \approx \frac{1}{2}(k[P] + k[rW]) \approx \sqrt{k[P]k[rW]} \approx 2 \left(\frac{1}{k[P]} + \frac{1}{k[rW]} \right)^{-1}$
<i>re</i>	$k_{re}[P] \approx \frac{1}{2}(k[P] + k[rE]) \approx \sqrt{k[P]k[rE]} \approx 2 \left(\frac{1}{k[P]} + \frac{1}{k[rE]} \right)^{-1}$
<i>θw</i>	$k_{θw}[P] \approx \frac{1}{2}(k[P] + k[θW]) \approx \sqrt{k[P]k[θW]} \approx 2 \left(\frac{1}{k[P]} + \frac{1}{k[θW]} \right)^{-1}$
<i>θe</i>	$k_{θe}[P] \approx \frac{1}{2}(k[P] + k[θE]) \approx \sqrt{k[P]k[θE]} \approx 2 \left(\frac{1}{k[P]} + \frac{1}{k[θE]} \right)^{-1}$
<i>φw</i>	$k_{φw}[P] \approx \frac{1}{2}(k[P] + k[φW]) \approx \sqrt{k[P]k[φW]} \approx 2 \left(\frac{1}{k[P]} + \frac{1}{k[φW]} \right)^{-1}$
<i>φe</i>	$k_{φe}[P] \approx \frac{1}{2}(k[P] + k[φE]) \approx \sqrt{k[P]k[φE]} \approx 2 \left(\frac{1}{k[P]} + \frac{1}{k[φE]} \right)^{-1}$

Otra forma de aproximar la conductividad térmica en la frontera de cada elemento es tomar una interpolación lineal (ver **Tabla 5**), notar el uso de mayúsculas y minúsculas.



Tabla 5 Aproximaciones de conductividad térmica en la frontera con interpolación lineal

Frontera	Conductividad térmica
rw	$k_{rw}[P] = \left(\frac{r[rW] - r_w[P]}{r[rW] - r[P]} \right) (k[rW] - k[P]) + k[P]$
re	$k_{re}[P] = \left(\frac{r_E[rE] - r_e[P]}{r_E[rE] - r[P]} \right) (k[rE] - k[P]) + k[P]$
θw	$k_{\theta w}[P] = \left(\frac{\theta_w[\theta W] - \theta_w[P]}{\theta_w[\theta W] - \theta_P[P]} \right) (k[\theta W] - k[P]) + k[P]$
θe	$k_{\theta e}[P] = \left(\frac{\theta_E[\theta E] - \theta_e[P]}{\theta_E[\theta E] - \theta_P[P]} \right) (k[\theta E] - k[P]) + k[P]$
ϕw	$k_{\phi w}[P] = \left(\frac{\phi[\phi W] - \phi_w[P]}{\phi[\phi W] - \phi_P[P]} \right) (k[\phi W] - k[P]) + k[P]$
ϕe	$k_{\phi e}[P] = \left(\frac{\phi[\phi E] - \phi_e[P]}{\phi[\phi E] - \phi_P[P]} \right) (k[\phi E] - k[P]) + k[P]$

Se puede realizar un procedimiento análogo para el coeficiente de difusión D .

Una vez aproximando la densidad de flujo por conducción se procede a integrar con el tiempo, notando que se considera que solo la temperatura depende del tiempo.

Se pueden aproximar las integrales pensando que la temperatura permanece con un valor constante T^t para todo el intervalo de tiempo, a esto se le conoce como método explícito. Otra forma sería considerar que permanece constante la



temperatura pero con un valor de $T^{t+\Delta t}$ a este metodo se le conoce como implicito.

Se puede usar la regla del trapecio para aproximar la integración con el tiempo y este método se conoce como Crank-Nicholson.

$$\int_t^{t+\Delta t} T dt = T^t \int_t^{t+\Delta t} dt = T^t \Delta t \quad (37)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} T dt = T^{t+\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt = T^{t+\Delta t} \Delta t \quad (38)$$

$$\int_t^{t+\Delta t} T dt = \frac{1}{2} (T^{t+\Delta t} + T^t) \Delta t \quad (39)$$

Se puede notar que para el método de Crank-Nicholson se tiene una ponderación entre la temperatura $T^{t+\Delta t}$ y T^t por lo que se pueden generalizar los métodos de integración considerando la ponderación con el factor f , si $f = 1$ se tiene el metodo explicito, si $f = 0$ se tiene el metodo implicito y si $f = 1/2$ se tiene el metodo de Crank-Nicholson.

$$\int_t^{t+\Delta t} T dt = \left((1-f)T^{t+\Delta t} + fT^t \right) \Delta t \quad (40)$$

Considerando esto se integran con el tiempo los flujos $Q = qA$ para las 6 diferentes áreas (ver **Tabla 6**).



Tabla 6 Flujo de energía por conducción en cada frontera

Frontera	Flujo de energía por conducción
<i>rw</i>	$\int_t^{t+\Delta t} q_{rw} A_{rw} dt =$ $-\frac{k_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{r[P] - r[rW]} \left(((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P]) - ((1-f)T^{t+\Delta t}[rW] + fT^t[rW]) \right)$
<i>re</i>	$\int_t^{t+\Delta t} q_{re} A_{re} dt =$ $-\frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{r[rE] - r[P]} \left(((1-f)T^{t+\Delta t}[rE] + fT^t[rE]) - ((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P]) \right)$
<i>θw</i>	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\theta w} A_{\theta w} dt =$ $-\frac{k_{\theta w}[P]A_{\theta w}[P]\Delta t}{r[P] \sin \phi[P] (\theta[P] - \theta[\theta W])} \left(((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P]) \right.$ $\left. - ((1-f)T^{t+\Delta t}[\theta W] + fT^t[\theta W]) \right)$
<i>θe</i>	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\theta e} A_{\theta e} dt =$ $-\frac{k_{\theta e}[P]A_{\theta e}[P]\Delta t}{r[P] \sin \phi[P] (\theta[\theta E] - \theta[P])} \left(((1-f)T^{t+\Delta t}[\theta E] + fT^t[\theta E]) \right.$ $\left. - ((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P]) \right)$
<i>φw</i>	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\phi w} A_{\phi w} dt =$ $-\frac{k_{\phi w}[P]A_{\phi w}[P]\Delta t}{r[P] (\phi[P] - \phi[\phi W])} \left(((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P]) \right.$ $\left. - ((1-f)T^{t+\Delta t}[\phi W] + fT^t[\phi W]) \right)$
<i>φe</i>	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\phi e} A_{\phi e} dt =$ $-\frac{k_{\phi e}[P]A_{\phi e}[P]\Delta t}{r[P] (\phi[\phi E] - \phi[P])} \left(((1-f)T^{t+\Delta t}[\phi E] + fT^t[\phi E]) - ((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P]) \right)$



Para la condición de frontera en contacto con el baño se tiene transporte de energía por convección siguiendo la ley de enfriamiento de Newton y de igual forma se consideraría constante para toda la superficie y se integrará con el tiempo (ver **Tabla 7**).

Tabla 7 Flujo de energía por convección en cada frontera

Frontera	Flujo de energía por convección
rw	$\int_t^{t+\Delta t} q_{rw} A_{rw} dt = h A_{rw} [P] \Delta t \left(\left((1-f) T^{t+\Delta t} [P] + f T^t [P] \right) - T_{\infty} \right)$
re	$\int_t^{t+\Delta t} q_{re} A_{re} dt = h A_{re} [P] \Delta t \left(\left((1-f) T^{t+\Delta t} [P] + f T^t [P] \right) - T_{\infty} \right)$
θw	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\theta w} A_{\theta w} dt = h A_{\theta w} [P] \Delta t \left(\left((1-f) T^{t+\Delta t} [P] + f T^t [P] \right) - T_{\infty} \right)$
θe	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\theta e} A_{\theta e} dt = h A_{\theta e} [P] \Delta t \left(\left((1-f) T^{t+\Delta t} [P] + f T^t [P] \right) - T_{\infty} \right)$
ϕw	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\phi w} A_{\phi w} dt = h A_{\phi w} [P] \Delta t \left(\left((1-f) T^{t+\Delta t} [P] + f T^t [P] \right) - T_{\infty} \right)$
ϕe	$\int_t^{t+\Delta t} q_{\phi e} A_{\phi e} dt = h A_{\phi e} [P] \Delta t \left(\left((1-f) T^{t+\Delta t} [P] + f T^t [P] \right) - T_{\infty} \right)$

Se realiza un procedimiento similar para el transporte de especies químicas (ver **Tabla 8**).



Tabla 8 Flujo de especies químicas por difusión en cada frontera

Frontera	Flujo de especies químicas por difusión
<i>rw</i>	$\int_t^{t+\Delta t} j_{rw} A_{rw} dt =$ $-\frac{D_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{r[P] - r[rW]} \left(((1-f)C^{t+\Delta t}[P] + fC^t[P]) - ((1-f)C^{t+\Delta t}[rW] + fC^t[rW]) \right)$
<i>re</i>	$\int_t^{t+\Delta t} j_{re} A_{re} dt =$ $-\frac{D_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{r[rE] - r[P]} \left(((1-f)C^{t+\Delta t}[rE] + fC^t[rE]) - ((1-f)C^{t+\Delta t}[P] + fC^t[P]) \right)$
<i>\theta w</i>	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\theta w} A_{\theta w} dt =$ $-\frac{D_{\theta w}[P]A_{\theta w}[P]\Delta t}{r[P] \sin \phi[P] (\theta[P] - \theta[\theta W])} \left(((1-f)C^{t+\Delta t}[P] + fC^t[P]) \right.$ $\left. - ((1-f)C^{t+\Delta t}[\theta W] + fC^t[\theta W]) \right)$
<i>\theta e</i>	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\theta e} A_{\theta e} dt =$ $-\frac{D_{\theta e}[P]A_{\theta e}[P]\Delta t}{r[P] \sin \phi[P] (\theta[\theta E] - \theta[P])} \left(((1-f)C^{t+\Delta t}[\theta E] + fC^t[\theta E]) \right.$ $\left. - ((1-f)C^{t+\Delta t}[P] + fC^t[P]) \right)$
<i>\phi w</i>	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\phi w} A_{\phi w} dt =$ $-\frac{D_{\phi w}[P]A_{\phi w}[P]\Delta t}{r[P] (\phi[P] - \phi[\phi W])} \left(((1-f)C^{t+\Delta t}[P] + fC^t[P]) \right.$ $\left. - ((1-f)C^{t+\Delta t}[\phi W] + fC^t[\phi W]) \right)$
<i>\phi e</i>	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\phi e} A_{\phi e} dt =$ $-\frac{D_{\phi e}[P]A_{\phi e}[P]\Delta t}{r[P] (\phi[\phi E] - \phi[P])} \left(((1-f)C^{t+\Delta t}[\phi E] + fC^t[\phi E]) - ((1-f)C^{t+\Delta t}[P] + fC^t[P]) \right)$



Para la condición de frontera en contacto con el baño se tiene transporte de especies químicas por convección con un coeficiente de transferencia k_D y de igual forma se consideraría constante para toda la superficie y se integrará con el tiempo (ver **Tabla 9**).

Tabla 9 Flujo de especies químicas por convección en cada frontera

Frontera	Flujo de especies químicas por convección
rw	$\int_t^{t+\Delta t} j_{rw} A_{rw} dt = k_D A_{rw} [P] \Delta t \left(\left((1-f) C^{t+\Delta t} [P] + f C^t [P] \right) - C_\infty \right)$
re	$\int_t^{t+\Delta t} j_{re} A_{re} dt = k_D A_{re} [P] \Delta t \left(\left((1-f) C^{t+\Delta t} [P] + f C^t [P] \right) - C_\infty \right)$
θw	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\theta w} A_{\theta w} dt = k_D A_{\theta w} [P] \Delta t \left(\left((1-f) C^{t+\Delta t} [P] + f C^t [P] \right) - C_\infty \right)$
θe	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\theta e} A_{\theta e} dt = k_D A_{\theta e} [P] \Delta t \left(\left((1-f) C^{t+\Delta t} [P] + f C^t [P] \right) - C_\infty \right)$
ϕw	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\phi w} A_{\phi w} dt = k_D A_{\phi w} [P] \Delta t \left(\left((1-f) C^{t+\Delta t} [P] + f C^t [P] \right) - C_\infty \right)$
ϕe	$\int_t^{t+\Delta t} j_{\phi e} A_{\phi e} dt = k_D A_{\phi e} [P] \Delta t \left(\left((1-f) C^{t+\Delta t} [P] + f C^t [P] \right) - C_\infty \right)$

- Generación

$$\iiint S_H dV = S_H V \quad (41)$$



Para el término de generación se supone de igual forma que se tiene una generación homogénea para cada volumen finito por lo que puede salir de la integral.

El término S_H se calcula a partir de la entalpía de reacción ΔH_r y la rapidez r con respecto a un reactivo A con coeficiente estequiométrico ν_A y concentración $[A]$.

$$S_H = -\Delta H_r r = -\frac{\Delta H_r}{\nu_A} \frac{d[A]}{dt} \quad (42)$$

$$r = \frac{1}{\nu_A} \frac{d[A]}{dt} \quad (43)$$

El signo negativo de S_H es para seguir la convención de signos para la reacción ya que si es exotérmica la reacción genera energía $\Delta H_r < 0$ pero aumenta la entalpía del elemento. Observando que $\frac{d[A]}{dt} \leq 0$ y $\nu_A < 0$ para un reactivo por lo que para una reacción exotérmica $S_H > 0$ y para una reacción endotérmica $S_H < 0$. La rapidez de reacción a su vez está definida en términos de la concentración de A , la constante cinética k_c y el orden de la reacción n . Esto implica que para conocer la concentración del reactivo A se debe resolver la ecuación diferencial ordinaria correspondiente.

$$r = \frac{1}{\nu_A} \frac{d[A]}{dt} = k_c [A]^n \quad (44)$$

La solución analítica para la ecuación diferencial de cinética química es la siguiente



$$[A] = \left((1-n)v_A k_c t + [A]_0^{1-n} \right)^{\frac{1}{1-n}} \quad n \neq 1 \quad (45)$$

$$[A] = [A]_0 \exp(v_A k_c t) \quad n = 1 \quad (46)$$

Por otra parte se debe observar que k_c tiene dependencia con la temperatura de acuerdo con la ecuación de Arrhenius.

$$k_c = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (47)$$

Para evaluar el efecto que tiene la reacción se tomó la dependencia de ΔH_r con la temperatura.

$$\Delta H_r = \Delta H_r^\circ + \int_{T^\circ}^T \Delta C_p dT \quad (48)$$

Finalmente se integra el término de generación con el tiempo y para los términos no lineales, como la ecuación de Arrhenius, que dependen de la temperatura se utilizará el método explícito es decir se tomará $T = T^t$

$$\int_t^{t+\Delta t} S_H V dt = \int_t^{t+\Delta t} -\frac{\Delta H_r}{v_A} \frac{d[A]}{dt} V dt = -V \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t) \quad (49)$$

La diferencia $([A]^{t+\Delta t} - [A]^t)$ se obtiene de la ecuación de cinética química y para el caso de los elementos con frontera móvil se tomara la dependencia del volumen con el tiempo.

- Sistema de ecuaciones

Finalmente se resume el problema matemático que resulta del método de volumen finito, se tiene N número de elementos y para cada elemento se tomará la



ecuación de energía o especies químicas para obtener una ecuación que permitirá conocer la temperatura o la composición para ese elemento. Para todos los esquemas se pueden escribir las ecuaciones como

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (50)$$

Donde \mathbf{A} es una matriz de dimension $(N \times N)$ con elementos a_{ij} , \mathbf{x} con elementos x_i y \mathbf{b} con elementos b_i son vectores de $(N \times 1)$. El vector \mathbf{x} son las temperaturas o concentraciones de cada nodo dentro del dominio. Para un esquema explícito solo habrá elementos en la diagonal de la matriz \mathbf{A} y todos los términos estarán en el vector \mathbf{b} , mientras que para otro esquema habrá que resolver el sistema de ecuaciones resultante. Para resolver la ecuación $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ se utilizará convenientemente el método iterativo de Gauss-Siedel para cada x_i .

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{l \geq 0}^{l \leq i-1} a_{il} x_l^k - \sum_{l \geq i+1}^{l \leq N} a_{il} x_l^k \right) \quad (51)$$

Se aprovecha el método iterativo y después de cada iteración k se puede calcular ρ , C_p , k , k_c , $[A]$ y ΔH_r . Cada iteración se llenó de nuevo la matriz \mathbf{A} y el vector \mathbf{b} y se medió la convergencia utilizando la magnitud del error al resolver el sistema

$$\text{error} = \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\| \quad (52)$$

- Frontera móvil

En el caso de tener frontera móvil debida a la fusión o solidificación se tiene un problema de Stefan donde la frontera que está en contacto con el fluido se



encuentra a la temperatura de fusión $T = T_m$ pero se va modificando su volumen ya que se acumula material al solidificar o se desprende material al fundirse.

Para resolver este problema se utilizó la ecuación de conservación de energía pero ya que la incógnita es dV se utilizó el teorema de transporte de Reynolds que permite resolver problemas con frontera móvil o velocidad relativa con el sistema coordenado.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\iiint f dV) = \iiint \left(\frac{\partial}{\partial t} f + \nabla \cdot (f \mathbf{v}_{rel}) \right) dV = \iiint \frac{\partial}{\partial t} f dV + \iint f \mathbf{v}_{rel} \cdot d\mathbf{S} \quad (53)$$

En nuestro caso se tiene $\mathbf{v}_{rel} = \mathbf{0}$ ya que sistema de coordenadas esta sobre la partícula y por consiguiente el teorema permite cambiar el orden entre derivada e integral.

Se tiene que la energía acumulada en la zona al fundir o solidificar es la entalpia de fusión $H = \Delta H_m$ y se puede considerar como una constante por lo que sale junto con la densidad de la integral y también de la derivada, solo el volumen depende del tiempo.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint (\rho \Delta H_m) dV = \rho \Delta H_m \frac{\partial V}{\partial t} \quad (54)$$

La condición de Stefan para frontera móvil debida a la fusión se puede expresar como

$$\rho \Delta H_m \frac{\partial V}{\partial t} = - \iint \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} \quad (55)$$

$$T = T_m \quad (56)$$



La siguiente parte es analizar la dependencia del volumen finito en cada una de las fronteras ya que todas las pueden ser móviles y depender del tiempo así pues se utiliza la regla de la cadena para derivar con el tiempo

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial r_e} \frac{\partial r_e}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial \theta_e} \frac{\partial \theta_e}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial \phi_e} \frac{\partial \phi_e}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial r_w} \frac{\partial r_w}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial \theta_w} \frac{\partial \theta_w}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial \phi_w} \frac{\partial \phi_w}{\partial t} \quad (57)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} =$$

$$\begin{aligned} & -r_e^2(\theta_e - \theta_w)(\cos \phi_e - \cos \phi_w) \frac{\partial r_e}{\partial t} \\ & -\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\cos \phi_e - \cos \phi_w) \frac{\partial \theta_e}{\partial t} \\ & +\frac{1}{3} \sin \phi_e (r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w) \frac{\partial \phi_e}{\partial t} \\ & +r_w^2(\theta_e - \theta_w)(\cos \phi_e - \cos \phi_w) \frac{\partial r_w}{\partial t} \\ & +\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\cos \phi_e - \cos \phi_w) \frac{\partial \theta_w}{\partial t} \\ & -\frac{1}{3} \sin \phi_w (r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w) \frac{\partial \phi_w}{\partial t} \end{aligned}$$

Finalmente la condición para la frontera móvil también conocida como condición de Stefan resulta de utilizar la ecuación de energía en cada frontera pensando que el resto permanece constante con el tiempo.

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint (\rho \Delta H_m) dV = \rho \Delta H_m \frac{\partial V}{\partial t} = \iint \mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} \quad (58)$$



Notar que el término $\mathbf{q} \cdot d\mathbf{S} = \mathbf{q} \cdot \mathbf{n} dS$ por lo que el movimiento de las fronteras se dará en dirección normal a cada superficie es decir en direcciones r , θ y ϕ . Aproximando las integrales pensando que \mathbf{q} es constante para toda la superficie y suponiendo que existe transporte de energía por convección $q = h(T - T_\infty)$ y conducción $\mathbf{q} = -k\nabla T$ en la frontera se obtienen las siguientes ecuaciones diferenciales para cada frontera móvil del elemento (ver **Tabla 10**).

Tabla 10 Condición de Stefan para cada frontera con transporte de energía

Frontera	Condición de Stefan
rw	$-r_e^2(\theta_e - \theta_w)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\rho\Delta H_m \frac{\partial r_e}{\partial t} = -\left(-k \frac{\partial T}{\partial r} - h(T - T_\infty)\right)A_{re}$
re	$-\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\rho\Delta H_m \frac{\partial \theta_e}{\partial t} = -\left(-k \frac{1}{r \sin \phi} \frac{\partial T}{\partial \theta} - h(T - T_\infty)\right)A_{\theta e}$
θw	$\frac{1}{3} \sin \phi_e (r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w)\rho\Delta H_m \frac{\partial \phi_e}{\partial t} = -\left(-k \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \phi} - h(T - T_\infty)\right)A_{\phi e}$
θe	$r_w^2(\theta_e - \theta_w)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\rho\Delta H_m \frac{\partial r_w}{\partial t} = -\left(-k \frac{\partial T}{\partial r} - h(T - T_\infty)\right)A_{r w}$
ϕw	$\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\rho\Delta H_m \frac{\partial \theta_w}{\partial t} = -\left(-k \frac{1}{r \sin \phi} \frac{\partial T}{\partial \theta} - h(T - T_\infty)\right)A_{\theta w}$
ϕe	$-\frac{1}{3} \sin \phi_w (r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w)\rho\Delta H_m \frac{\partial \phi_w}{\partial t} = -\left(-k \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial \phi} - h(T - T_\infty)\right)A_{\phi w}$

Para la disolución debida al transporte de especies químicas se pueden definir expresiones similares (ver **Tabla 11**).



Tabla 11 Condición de Stefan para cada frontera con transporte de especie química

Frontera	Condición de Stefan
rw	$-r_e^2(\theta_e - \theta_w)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\Delta C \frac{\partial r_e}{\partial t} = -\left(-D \frac{\partial C}{\partial r} - k_D(C - C_\infty)\right)A_{r_e}$
re	$-\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\Delta C \frac{\partial \theta_e}{\partial t} = -\left(-D \frac{1}{r \sin \phi} \frac{\partial C}{\partial \theta} - k_D(C - C_\infty)\right)A_{\theta_e}$
θw	$\frac{1}{3} \sin \phi_e (r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w)\Delta C \frac{\partial \phi_e}{\partial t} = -\left(-D \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial \phi} - k_D(C - C_\infty)\right)A_{\phi_e}$
θe	$r_w^2(\theta_e - \theta_w)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\Delta C \frac{\partial r_w}{\partial t} = -\left(-D \frac{\partial C}{\partial r} - k_D(C - C_\infty)\right)A_{r_w}$
ϕw	$\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)\Delta C \frac{\partial \theta_w}{\partial t} = -\left(-D \frac{1}{r \sin \phi} \frac{\partial C}{\partial \theta} - k_D(C - C_\infty)\right)A_{\theta_w}$
ϕe	$-\frac{1}{3} \sin \phi_w (r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w)\Delta C \frac{\partial \phi_w}{\partial t} = -\left(-D \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial \phi} - k_D(C - C_\infty)\right)A_{\phi_w}$

$$\Delta C = C_l - C_s \quad (59)$$

Donde C_l es la concentración del liquidus y C_s la concentración de solidus que se encuentran en la frontera a la temperatura de fusión T_m .

2.1.12. Modelo 1

Este caso se puede suponer cuando se tiene a la partícula completamente rodeada por un solo fluido como escoria o metal. En este caso se supone que solo hay flujo de energía en dirección radial y por consiguiente la temperatura solo



depende de la coordenada radial y del tiempo $T(r, t)$. Para la solución de este modelo se requiere resolver un sistema de ecuaciones y se utilizó programación orientada a objetos (OOP).

- Discretización del dominio

En este caso se discretizó el dominio inicial $\Omega_0 = [0, R(0)]$ que es la partícula de radio inicial $R(0)$ solo en dirección radial y se obtienen N_0 capas esféricas concéntricas, se utilizó una malla uniforme con una distancia entre elementos Δr . Se utiliza el índice $i = 0, 1, 2, \dots, N_0 - 1$ para denotar cada elemento de volumen finito.

$$\Delta r = \frac{R(0)}{N_0 - 1} \quad (60)$$

La posición de cada elemento estará denotada por $r[i]$ al igual que sus fronteras $r_e[i]$ y $r_w[i]$.

$$r[i] = i\Delta r \quad (61)$$

$$r_w[i] = \begin{cases} i\Delta r & i = 0 \\ \left(i - \frac{1}{2}\right)\Delta r & i > 0 \end{cases} \quad (62)$$

$$r_e[i] = \begin{cases} \left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta r & i < N_0 - 1 \\ i\Delta r & i = N_0 - 1 \end{cases} \quad (63)$$

Para hacer uso de la notación P , rW y rE se tiene que considerar lo siguiente

$$P = i \quad (64)$$



$$rW = i - 1 \quad (65)$$

$$rE = i + 1 \quad (66)$$

El volumen de cada elemento P se obtiene teniendo en cuenta que $\phi_w = \theta_w = 0$,
 $\theta_e = 2\pi$ y $\phi_e = \pi$.

$$V = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} r^2 \sin \phi \, dr \, d\theta \, d\phi = -\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w)(\cos \phi_e - \cos \phi_w)$$

$$V = \frac{4}{3}\pi(r_e^3 - r_w^3) \quad (67)$$

Hay dos posibles superficies A_{r_w} y A_{r_e} por las que puede ocurrir el flujo de energía.

$$A_{r_w} = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} r^2 \sin \phi \, d\theta \, d\phi = -r_w^2(\cos \phi_e - \cos \phi_w)(\theta_e - \theta_w) = 4\pi r_w^2 \quad (68)$$

$$A_{r_e} = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} r^2 \sin \phi \, d\theta \, d\phi = -r_e^2(\cos \phi_e - \cos \phi_w)(\theta_e - \theta_w) = 4\pi r_e^2 \quad (69)$$

- Solución de la ecuación de energía

Para la ecuación de energía la primera parte será establecer la condición inicial para cada elemento de la malla habiendo previamente calculado i , r , r_w , r_e , A_{r_e} , A_{r_w} y V .

$$T(r, 0) = T_0 \quad 0 \leq r \leq R(0) \quad (70)$$

Con esto se termina el estado inicial en el tiempo $t = 0$ por lo que se guardan los resultados.



Iteración con el tiempo

- Ecuaciones conservación de energía

Utilizando las ecuaciones descritas con anterioridad se puede escribir una ecuación para cada volumen finito ya sea del DRI o de la coraza. Donde si $f = 0$ se tiene el método explícito, si $f = 1$ se tiene el método implícito y si $f = \frac{1}{2}$ se tiene el método de Crank-Nicholson.

- $i = 0$ (elemento central)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (71)$$

$$\frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} \left(\left((1-f)T^{t+\Delta t}[rE] + fT^t[rE] \right) - \left((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P] \right) \right)$$

- $0 < i < N - 1$ (elemento interno)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (72)$$

$$\frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} \left(\left((1-f)T^{t+\Delta t}[rE] + fT^t[rE] \right) - \left((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P] \right) \right)$$

$$- \frac{k_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{(r[P] - r[rW])V[P]} \left(\left((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P] \right) \right)$$

$$- \left((1-f)T^{t+\Delta t}[rW] + fT^t[rW] \right)$$

- $i = N - 1$ (frontera de Stefan)

$$T^{t+\Delta t}[P] = T_m[P] \quad (73)$$



$$\rho[P]\Delta H_m[P](R^{t+\Delta t} - R^t) = \quad (74)$$

$$\frac{k_{rw}[P]\Delta t}{r[P] - r[rW]} \left(\left((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P] \right) - \left((1-f)T^{t+\Delta t}[rW] + fT^t[rW] \right) \right) \\ + h\Delta t \left(\left((1-f)T^{t+\Delta t}[P] + fT^t[P] \right) - T_\infty \right)$$

- $i = N_0 - 1$ (interfase DRI y coraza)

Para el caso en que $N > N_0 + 1$ utilizando la ecuación de energía considerando como volumen de control a ambos elementos en la interfase obteniendo una ecuación para la temperatura del elemento $N_0 - 1$ que es la interfase entre el DRI y la escoria.

$$\rho \approx \left(\frac{V_1}{V} \right) \rho_1 + \left(\frac{V_2}{V} \right) \rho_2 \quad (75)$$

$$C_p \approx \left(\frac{V_1}{V} \right) C_{p1} + \left(\frac{V_2}{V} \right) C_{p2} \quad (76)$$

$$V = V_1 + V_2 \quad (77)$$

Notar que la conductividad térmica k_{rw} corresponde a la del DRI mientras que k_{re} corresponde a la de la coraza tomando interpolación lineal. Además las propiedades ρ y C_p se aproximan usando la fracción de volumen.

Con las ecuaciones anteriores se procede a llenar la ecuación $Ax = b$ y resolver utilizando el método de Gauss-Seidel. Cabe mencionar que la solución de la ecuación de energía para la coraza implica un problema con condiciones tipo



Dirichlet por separado donde las condiciones de frontera son la temperatura en la intercara y la temperatura de fusión del fluido.

Sin embargo el cálculo de la temperatura en la intercara implica acoplar con el dominio del DRI con el de la coraza para darle continuidad al perfil de temperaturas.

Para cada paso de tiempo se debe calcular el desplazamiento ΔR de la frontera del DRI.

$$\Delta R = R^{t+\Delta t} - R^t \quad (78)$$

Durante la mayor parte la fusión del DRI se considera la ecuación diferencial de la condición de Stefan hasta que la malla solo queda con un elemento $N = 1$ en este caso la ecuación de energía para determinar la temperatura en el centro sería.

$$\rho[P]C_P[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = -\frac{hA_{re}[P]\Delta t}{V[P]}(T_m[P] - T_\infty) - \frac{\Delta H_r}{v_A}([A]^{t+\Delta t} - [A]^t) \quad (79)$$

Y la condición de Stefan sería

$$\rho[P]\Delta H_m[P](R^{t+\Delta t} - R^t) = h\Delta t(T_m[P] - T_\infty) \quad (80)$$

Una vez calculado ΔR se modifica el valor de r_e y r para el elemento $i = N - 1$ en la frontera en contacto con el baño $r[i] = r_e[i] = R^{t+\Delta t}$.

Al modificarse las dimensiones del elemento $i = N - 1$ se debe cuidar que el elemento no sea muy grande o muy pequeño con respecto al resto de los elementos. Para esto se consideran dos longitudes l_{max} y l_{min} . Estas longitudes



permiten definir criterios para cuando un elemento ya es demasiado grande o demasiado pequeño.

$$r_e - r_w > l_{max} \quad (81)$$

$$r_e - r_w < l_{min} \quad (82)$$

Si $r_e - r_w > l_{max}$ el elemento con frontera móvil $i = N - 1$ es demasiado grande por lo que debe dividirse para formar 2 elementos y se requiere la interpolación lineal de la temperatura para el elemento creado.

$$T[P] = \left(\frac{r[P] - r[rW]}{r[rE] - r[rW]} \right) (T[rE] - T[rW]) + T[rW] \quad (83)$$

Si $r_e - r_w < l_{min}$ el elemento con frontera móvil $i = N - 1$ es demasiado pequeño por lo que debe unirse al nodo anterior.

Para terminar el cálculo y determinar el tiempo de fusión total se revisará $R^{t+\Delta t} \leq 0$ o $N = 0$.

2.1.13. Modelo 2

En este modelo se realizó el mismo procedimiento que en el modelo 1 sin embargo se agregó la generación y se utilizó solo un esquema explícito. La diferencia en este modelo es el método de solución ya que no hay que resolver ningún sistema de ecuaciones para cada iteración y no se utilizó programación orientada a objetos (OOP).

- Generación



Una vez habiendo establecido T para cada elemento como condición inicial se procede a establecer la concentración del reactivo $[A]$ para cada elemento dentro del DRI.

$$[A](r, 0) = [A]_0 \quad 0 \leq r \leq R(0) \quad (84)$$

Al comenzar cada iteración con el tiempo la primera parte será realizar el cálculo de las reacciones que ocurren dentro del DRI utilizando las expresiones de cinética química para cada elemento.

$$[A] = \left((1 - n)v_A k_c t + [A]_0^{1-n} \right)^{\frac{1}{1-n}} \quad n \neq 1 \quad (85)$$

$$[A] = [A]_0 \exp(v_A k_c t) \quad n = 1 \quad (86)$$

Una vez calculado el consumo del reactivo $[A]$ para cada iteración se puede evaluar el término $([A]^{t+\Delta t} - [A]^t)$ de la generación de forma explícita.

Iteración con el tiempo

- Ecuaciones conservación de energía

Utilizando las ecuaciones descritas con anterioridad se puede escribir una ecuación para cada volumen finito ya sea del DRI o de la coraza utilizando el método explícito.

- $i = 0$ (elemento central)

$$\rho[P]C_P[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (87)$$



$$\frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (T^t[rE] - T^t[P]) - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t)$$

- $0 < i < N - 1$ (elemento interno)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (88)$$

$$\frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (T^t[rE] - T^t[P]) - \frac{k_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{(r[P] - r[rW])V[P]} (T^t[P] - T^t[rW]) - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t)$$

- $i = N - 1$ (frontera de Stefan)

$$T^{t+\Delta t}[P] = T_m[P] \quad (89)$$

$$\rho[P]\Delta H_m[P](R^{t+\Delta t} - R^t) = \quad (90)$$

$$\frac{k_{rw}[P]\Delta t}{r[P] - r[rW]} (T^t[P] - T^t[rW]) + h\Delta t(T^t[P] - T_\infty)$$

Por otra parte se implementó a las propiedades físicas como función permitiendo así realizar un mejor modelo.

2.1.14. Modelo 3

En este modelo se realizó incluyó el transporte de especies químicas al modelo 2.

- Ecuaciones conservación de especies químicas



Utilizando las ecuaciones descritas con anterioridad se puede escribir una ecuación para cada volumen finito ya sea del DRI o de la coraza utilizando el método explícito.

- $i = 0$ (elemento central)

$$(C^{t+\Delta t}[P] - C^t[P]) = \frac{D_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (C^t[rE] - C^t[P]) \quad (91)$$

- $0 < i < N - 1$ (elemento interno)

$$(C^{t+\Delta t}[P] - C^t[P]) = \quad (92)$$

$$\frac{D_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (C^t[rE] - C^t[P]) - \frac{D_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{(r[P] - r[rW])V[P]} (C^t[P] - C^t[rW])$$

- $i = N - 1$ (frontera de Stefan)

$$C^{t+\Delta t}[P] = C_s \quad (93)$$

$$\Delta C(R^{t+\Delta t} - R^t) = \frac{D_{rw}[P]\Delta t}{r[P] - r[rW]} (C^t[P] - C^t[rW]) + k_D \Delta t (C^t[P] - C_\infty) \quad (94)$$

$$\Delta C = C_l - C_s \quad (95)$$

Para obtener T_m se toma la concentración del baño C_b y se traza una isopleta a esa concentración hasta alcanzar la línea de solidus del sistema. Una vez obtenida T_m se traza una isoterma para obtener C_l en la línea de liquidus y C_s en la de solidus.



Se tienen dos condiciones de Stefan una debido a la conservación de la energía y otra debida a la conservación de especies químicas. Se toma el menor de los desplazamientos en la frontera móvil ya que se trata de un proceso limitante, ya sea que no se tenga la concentración suficiente para disolver o la energía suficiente para la fusión. Existe un error tomando esta consideración si el transporte de energía controla la fusión se tiene una concentración ligeramente mayor a C_s en la superficie. Por otra parte si el transporte de la especie química controla la disolución se tiene una temperatura ligeramente mayor a T_m en la superficie.

2.1.15. Modelo 4

En este modelo se incluyó el efecto de la flotabilidad de la partícula esférica dentro del baño debido a la fuerza boyante proveniente de la diferencia de densidades. Este modelo requirió el cálculo de la temperatura en coordenadas radial r y polar ϕ .

- Flotabilidad

Para el cálculo de flotabilidad se consideró el balance de fuerzas utilizando la gravedad y la fuerza boyante debida al casquete esférico sumergido en el baño.

$$\sum \mathbf{F} = -mg + \rho_b V_{sum} g = 0 \quad (96)$$

$$V_{sum} = \frac{\pi}{3} R(\cos(\pi - \phi) + 2)(\cos(\pi - \phi) - 1)^2 \quad (97)$$



Usando el balance de fuerzas se utilizó el método de la bisección en un intervalo de $[0, \pi]$ donde se encuentra el ángulo ϕ_b con el que se tiene $\phi > \phi_b$ como la zona sumergida en el baño y $\phi < \phi_b$ como la zona fuera del baño.

- Discretización

Del dominio inicial $\Omega_0 = [0 \leq r \leq R(0), 0 \leq \phi \leq \pi]$ que es la partícula de radio inicial $R(0)$ en dirección radial y polar se obtienen N_0 capas en forma radial con una distancia entre elementos Δr . Se utiliza el índice $i = 0, 1, 2, \dots, N_0 - 1$ para denotar la discretización en dirección radial. Se divide en M segmentos esféricos de forma polar con una distancia $\Delta \phi$ entre cada segmento y se utiliza el índice $j = 0, 1, 2, \dots, M - 1$.

$$\Delta r = \frac{R(0)}{N_0 - 1} \quad (98)$$

$$\Delta \phi = \frac{\pi}{M - 1} \quad (99)$$

Para hacer uso de la notación P , rW , rE , ϕW y ϕE se tiene que considerar lo siguiente

$$P = (i, j) \quad (100)$$

$$rW = (i - 1, j) \quad (101)$$

$$rE = (i + 1, j) \quad (102)$$

$$\phi W = (i, j - 1) \quad (103)$$



$$\phi E = (i, j + 1) \quad (104)$$

La posición de cada elemento estará denotada por $r[P]$ y $\phi[P]$ al igual que sus fronteras $r_e[P]$, $r_w[P]$, $\phi_e[P]$ y $\phi_w[P]$.

$$r[P] = i\Delta r \quad (105)$$

$$\phi[P] = j\Delta\phi \quad (106)$$

$$r_w[P] = \begin{cases} i\Delta r & i = 0 \\ \left(i - \frac{1}{2}\right)\Delta r & i > 0 \end{cases} \quad (107)$$

$$r_e[P] = \begin{cases} \left(i + \frac{1}{2}\right)\Delta r & i < N_0 - 1 \\ i\Delta r & i = N_0 - 1 \end{cases} \quad (108)$$

$$\phi_w[P] = \begin{cases} j\Delta\phi & j = 0 \\ \left(j - \frac{1}{2}\right)\Delta\phi & j > 0 \end{cases} \quad (109)$$

$$\phi_e[P] = \begin{cases} \left(j + \frac{1}{2}\right)\Delta\phi & j < M - 1 \\ j\Delta\phi & j = M - 1 \end{cases} \quad (110)$$

El volumen de cada elemento P se obtiene teniendo en cuenta que $\theta_w = 0$ y

$$\theta_e = 2\pi.$$

$$V = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} r^2 \sin\phi \, dr \, d\theta \, d\phi = -\frac{1}{3}(r_e^3 - r_w^3)(\theta_e - \theta_w)(\cos\phi_e - \cos\phi_w) \quad (111)$$

$$V = -\frac{2}{3}\pi(r_e^3 - r_w^3)(\cos\phi_e - \cos\phi_w)$$

Hay cuatro posibles superficies por las que puede ocurrir el flujo de energía.



$$A_{rw} = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} r^2 \sin \phi \, d\theta \, d\phi = -2\pi r_w^2 (\cos \phi_e - \cos \phi_w) \quad (112)$$

$$A_{re} = \int_{\phi_w}^{\phi_e} \int_{\theta_w}^{\theta_e} r^2 \sin \phi \, d\theta \, d\phi = -2\pi r_e^2 (\cos \phi_e - \cos \phi_w) \quad (113)$$

$$A_{\phi_w} = \int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} r \sin \phi \, dr \, d\theta = \pi (r_e^2 - r_w^2) \sin \phi_w \quad (114)$$

$$A_{\phi_e} = \int_{\theta_w}^{\theta_e} \int_{r_w}^{r_e} r \sin \phi \, dr \, d\theta = \pi (r_e^2 - r_w^2) \sin \phi_e \quad (115)$$

- Ecuaciones de conservación de energía

Utilizando las ecuaciones descritas con anterioridad se puede escribir una ecuación para cada volumen finito ya sea del DRI o de la coraza utilizando el método explícito.

Para la notación se utiliza lo siguiente

- $i = 0; 0 \leq j \leq M$ (elemento central condición de simetría radial)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (116)$$

$$\sum_{j=0}^{M-1} \frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (T^t[rE] - T^t[P]) - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t)$$

- $0 < i < N - 1; j = 0$ (frontera polar condición de simetría polar)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (117)$$



$$\begin{aligned} & \frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (T^t[rE] - T^t[P]) - \frac{k_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{(r[P] - r[rW])V[P]} (T^t[P] - T^t[rW]) \\ & + \frac{k_{\phi e}[P]A_{\phi e}[P]\Delta t}{r[P](\phi[\phi E] - \phi[P])V[P]} (T^t[\phi E] - T^t[P]) - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t) \end{aligned}$$

- $0 < i < N - 1; j = M - 1$ (frontera polar condición de simetría polar)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (118)$$

$$\begin{aligned} & \frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (T^t[rE] - T^t[P]) - \frac{k_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{(r[P] - r[rW])V[P]} (T^t[P] - T^t[rW]) \\ & - \frac{k_{\phi w}[P]A_{\phi w}[P]\Delta t}{r[P](\phi[P] - \phi[\phi W])V[P]} (T^t[P] - T^t[\phi W]) \\ & - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t) \end{aligned}$$

- $0 < i < N - 1; 0 < j < M - 1$ (Elemento interno)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (119)$$

$$\begin{aligned} & \frac{k_{re}[P]A_{re}[P]\Delta t}{(r[rE] - r[P])V[P]} (T^t[rE] - T^t[P]) - \frac{k_{rw}[P]A_{rw}[P]\Delta t}{(r[P] - r[rW])V[P]} (T^t[P] - T^t[rW]) \\ & + \frac{k_{\phi e}[P]A_{\phi e}[P]\Delta t}{r[P](\phi[\phi E] - \phi[P])V[P]} (T^t[\phi E] - T^t[P]) \\ & - \frac{k_{\phi w}[P]A_{\phi w}[P]\Delta t}{r[P](\phi[P] - \phi[\phi W])V[P]} (T^t[P] - T^t[\phi W]) \\ & - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t) \end{aligned}$$



- $i = N - 1; 0 < j < M - 1; \phi[P] < \phi_b$ (Frontera fuera del baño)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (120)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{h_m A_{re}[P] \Delta t}{V[P]} (T^t[P] - T_\infty) - \frac{k_{rw}[P] A_{rw}[P] \Delta t}{(r[P] - r[rW]) V[P]} (T^t[P] - T^t[rW]) \\ & + \frac{k_{\phi e}[P] A_{\phi e}[P] \Delta t}{r[P] (\phi[\phi E] - \phi[P]) V[P]} (T^t[\phi E] - T^t[P]) \\ & - \frac{k_{\phi w}[P] A_{\phi w}[P] \Delta t}{r[P] (\phi[P] - \phi[\phi W]) V[P]} (T^t[P] - T^t[\phi W]) \\ & - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t) \end{aligned}$$

- $i = N - 1; j = 0; \phi[P] < \phi_b$ (Frontera fuera del baño simetría polar)

$$\rho[P]C_p[P](T^{t+\Delta t}[P] - T^t[P]) = \quad (121)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{h_m A_{re}[P] \Delta t}{V[P]} (T^t[P] - T_\infty) - \frac{k_{rw}[P] A_{rw}[P] \Delta t}{(r[P] - r[rW]) V[P]} (T^t[P] - T^t[rW]) \\ & + \frac{k_{\phi e}[P] A_{\phi e}[P] \Delta t}{r[P] (\phi[\phi E] - \phi[P]) V[P]} (T^t[\phi E] - T^t[P]) \\ & - \frac{\Delta H_r}{v_A} ([A]^{t+\Delta t} - [A]^t) \end{aligned}$$

- $i = N - 1; \phi[P] \geq \phi_b$ (frontera de Stefan dentro del baño)

$$T^{t+\Delta t}[P] = T_m[P] \quad (122)$$

$$\rho[P] \Delta H_m[P] (R^{t+\Delta t} - R^t) = \quad (123)$$



$$\frac{k_{rw}[P]\Delta t}{(r[P] - r[rW])} (T^t[P] - T^t[rW]) + h_b \Delta t (T^t[P] - T_\infty)$$

- Suposiciones para la temperatura de la superficie 1D y 2 D

Durante la fusión la temperatura en la superficie se puede considerar la temperatura de fusión del baño o la partícula, ya que la partícula está en constante rotación, se reduce el problema a solo una dirección en el flujo de energía (1D radial). El decrecimiento del radio ocurre solo debido a la parte sumergida en el baño.

Por otra parte si se considera que la temperatura de la superficie es la de fusión solo para la parte sumergida mientras que la parte superior comienza a llegar al equilibrio térmico con el medio por convención el flujo de energía se da en dos direcciones radial y polar (2D radial y polar).

2.2. Procedimiento experimental

De acuerdo con las variables del proceso se procedió a realizar un diseño experimental. Se utilizaron pellets de hierro esponja que se funden en la planta de ArcelorMittal ubicada en Lázaro Cárdenas Michoacán y se utilizó un baño de hierro gris en un horno de inducción.

2.2.1. Diseño experimental

Los factores a evaluar que se eligieron fueron: 1) la agitación (con inducción o sin inducción); 2) la temperatura del DRI previo a la inmersión y 3) la temperatura del baño. Se utilizó un diseño factorial completo 2^3 midiendo como variable de



respuesta el tiempo de fusión. Las variables de respuesta que se pueden monitorear son el tamaño máximo de radio alcanzado y el tiempo total de fusión, pero además se pueden obtener curvas de tamaño de partícula vs tiempo de fusión para cada experimento (ver **Tabla 12**).

Tabla 12 Diseño experimental

Experimento	Agitación	Temperatura del baño [°C]	Precalentamiento 400 [°C]
1	Sin agitación	1420	Precalentamiento
2	Con agitación	1440	Precalentamiento
3	Con agitación	1420	Sin Precalentamiento
4	Con agitación	1440	Sin Precalentamiento
5	Sin agitación	1420	Sin Precalentamiento
6	Sin agitación	1440	Precalentamiento
7	Con agitación	1420	Precalentamiento
8	Sin agitación	1440	Sin Precalentamiento

2.2.2. Procedimiento experimental

Para el procedimiento experimental se grabó en video la fusión del DRI en el baño utilizando una cámara de video en la parte superior pudiendo seguir la evolución del radio a lo largo de la fusión, esto fue posible gracias a flotabilidad de los pellets en el baño. En la **Figura 26** se presenta un esquema del experimento con componentes.

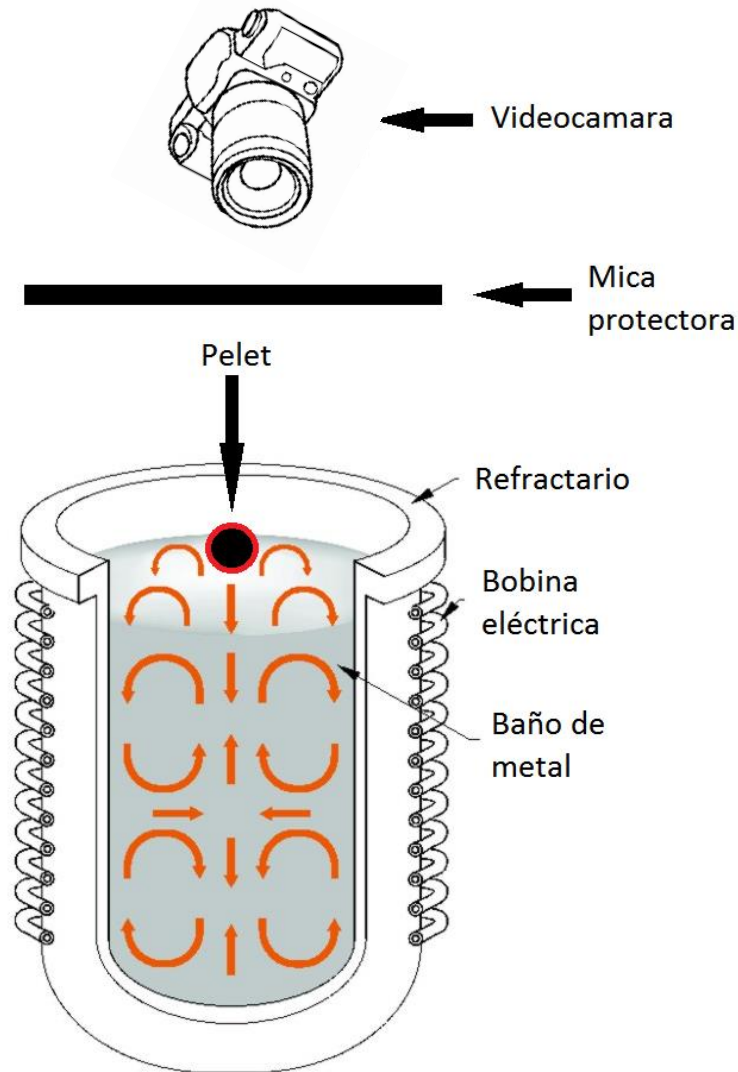


Figura 26 Esquema experimental para monitorear la evolución del radio durante la fusión del DRI

Una vez grabada la fusión se introdujo un reloj en la grabación que permitiera hacer mediciones del radio durante la fusión. Se calibró la medición usando como medida conocida el diámetro del horno y posteriormente se realizaron mediciones del radio (ver **Figuras 27 y 28**).

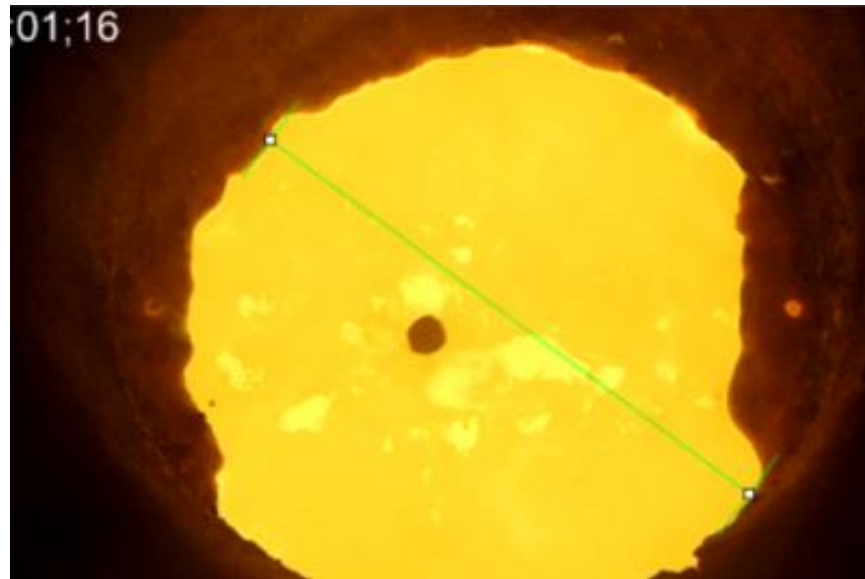


Figura 27 Medición del radio del horno para calibrar la medición del DRI e inclusión del tiempo de fusión en la esquina superior izquierda



Figura 28 Medición del radio del DRI durante la fusión

Debido a que el DRI se encontraba en constante movimiento se realizaron varias mediciones con una diferencia de un par de centésimas de segundo, con esto se pudo evaluar la dispersión en la medición. Cada experimento y medición se realizó



al menos tres veces para tener certeza estadística. Lo que se buscó es validar el modelo matemático utilizando mediciones experimentales para ver si se seguía la misma tendencia.

3. Resultados

3.1. Resultados experimentales

Los resultados experimentales que se obtuvieron fueron los videos para la fusión de los pellets de DRI, con lo cual se obtuvieron tiempos de fusión así como curvas de donde se lleva un seguimiento de la evolución del radio durante la fusión. En la **Tabla 13** se presentan los resultados obtenidos.



Tabla 13 Tiempos de fusión obtenidos como variable de respuesta para el diseño experimental

Experimento	Agitación	Temperatura del baño [°C]	Pre calentamiento 400 [°C]	Tiempo total de fusión t [s]
1	Sin agitación	1420	Pre calentamiento	11.08
2	Con agitación	1440	Pre calentamiento	6.07
3	Con agitación	1420	Sin Pre calentamiento	10.29
4	Con agitación	1440	Sin Pre calentamiento	6.11
5	Sin agitación	1420	Sin Pre calentamiento	14.03
6	Sin agitación	1440	Pre calentamiento	8.15
7	Con agitación	1420	Pre calentamiento	9.26
8	Sin agitación	1440	Sin Pre calentamiento	9.19

A continuación se muestran las curvas de R vs t para cada experimento con las mediciones realizadas experimentalmente (de la **Figura 29** a la **36**) Se ven varios puntos por cada experimento debido a las distintas mediciones realizadas.

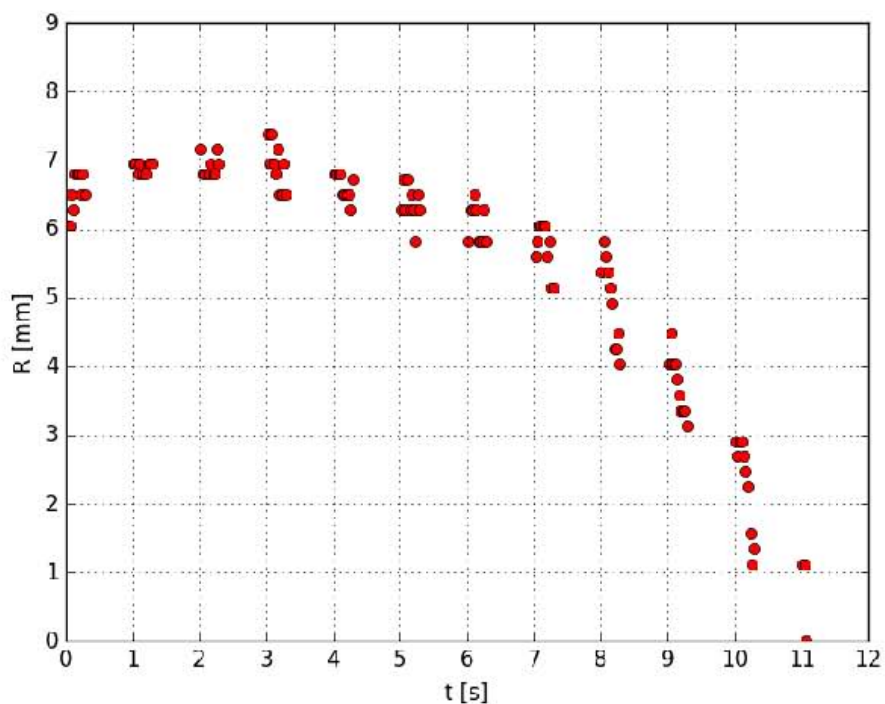
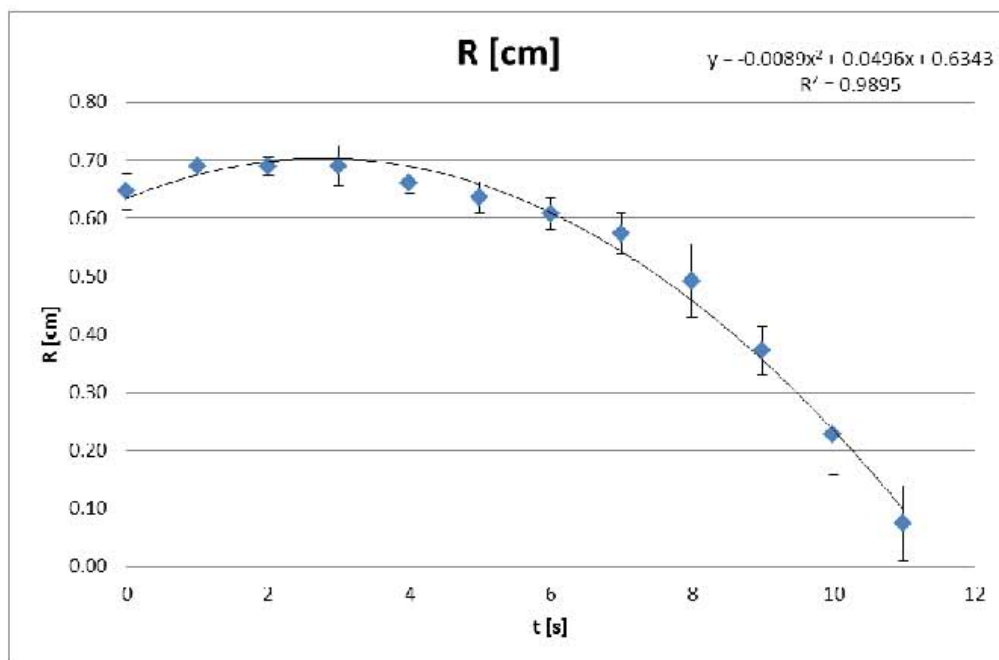


Figura 29 Evolución del radio para el Experimento 1, sin agitación, temperatura del baño 1420 °C y precalentamiento de 400 °C

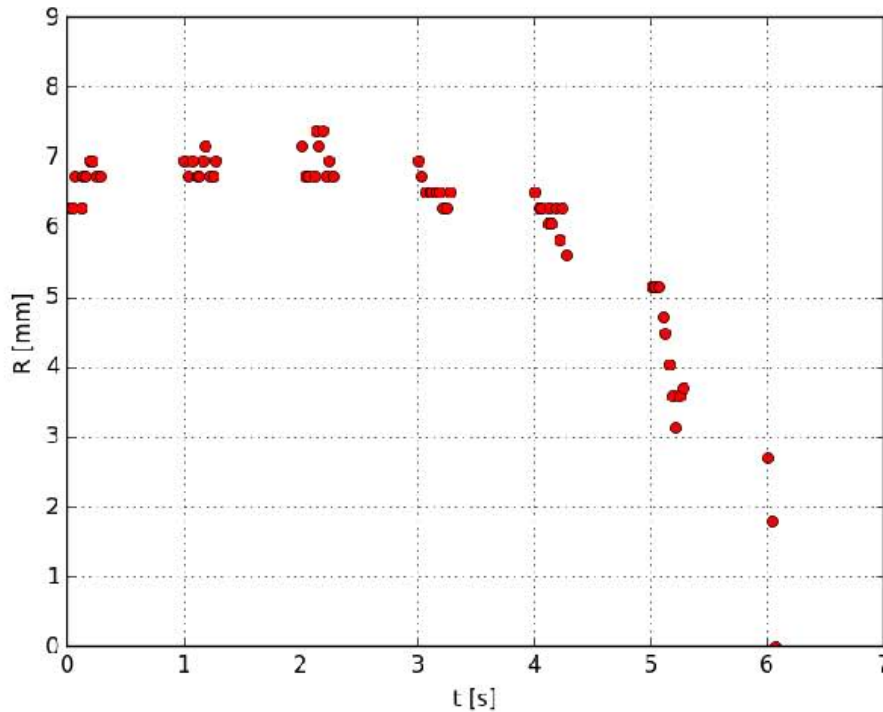
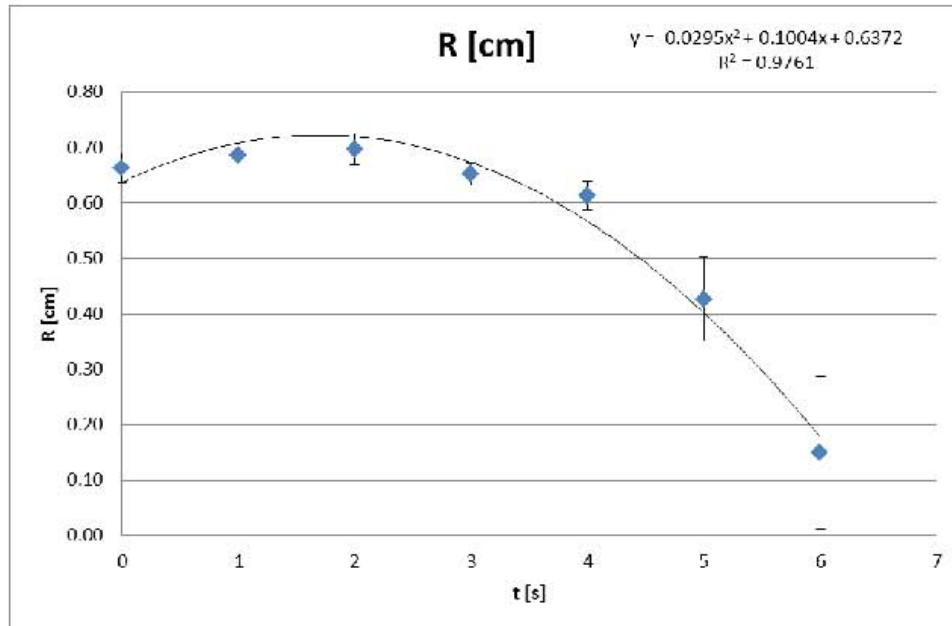


Figura 30 Evolución del radio para el Experimento 2, con agitación, temperatura del baño 1440 °C y precalentamiento de 400 °C

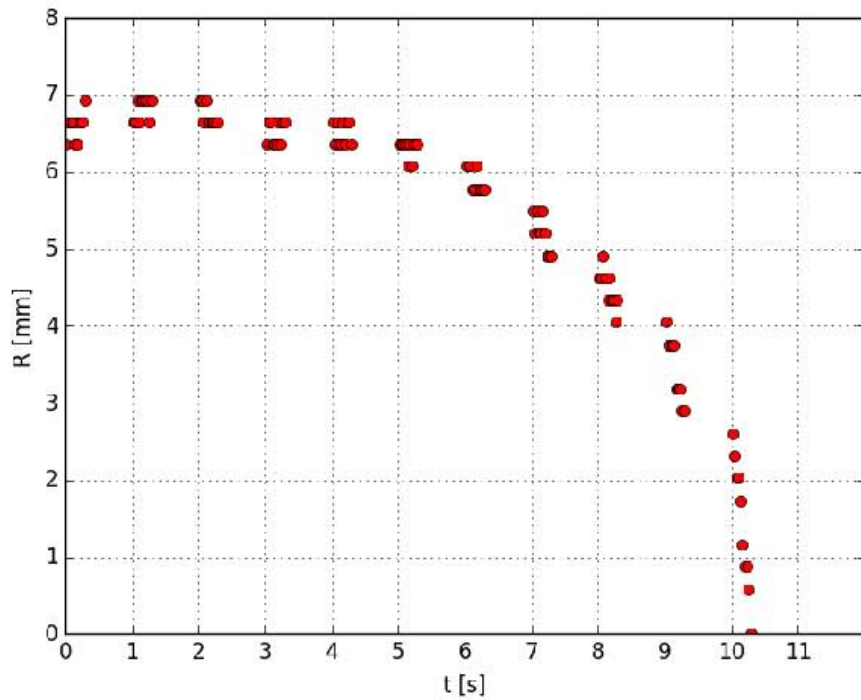
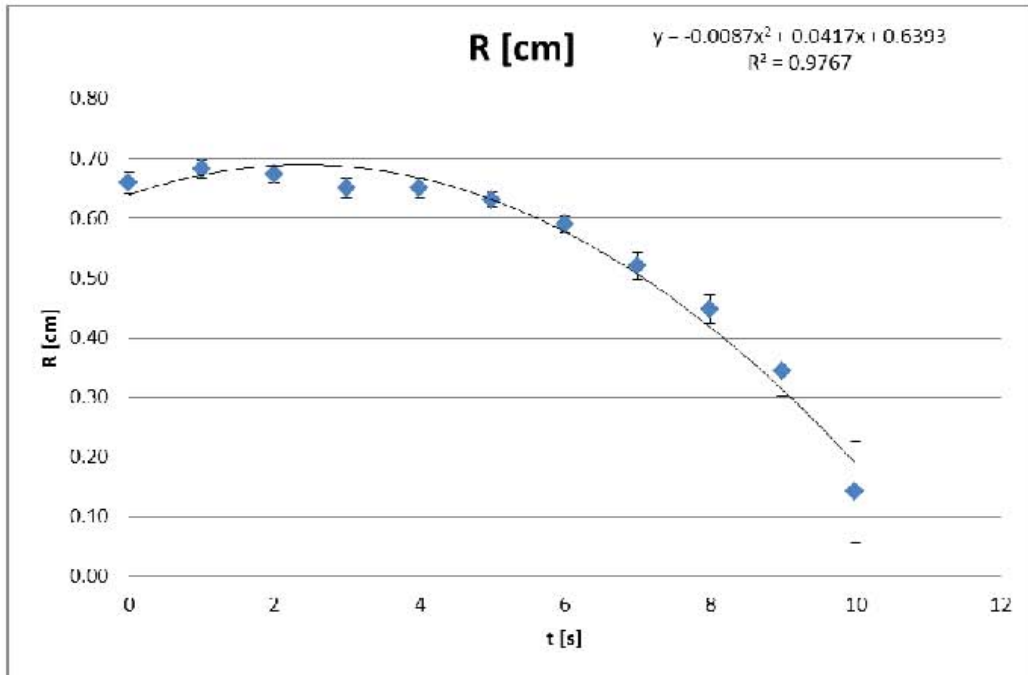


Figura 31 Evolución del radio para el Experimento 3, con agitación, temperatura del baño 1420 °C y sin precalentamiento de 400 °C

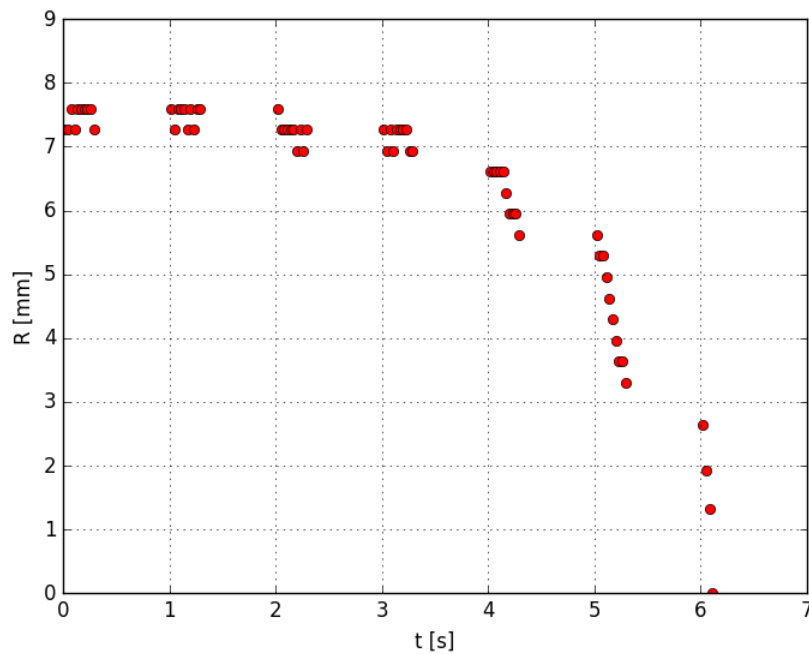
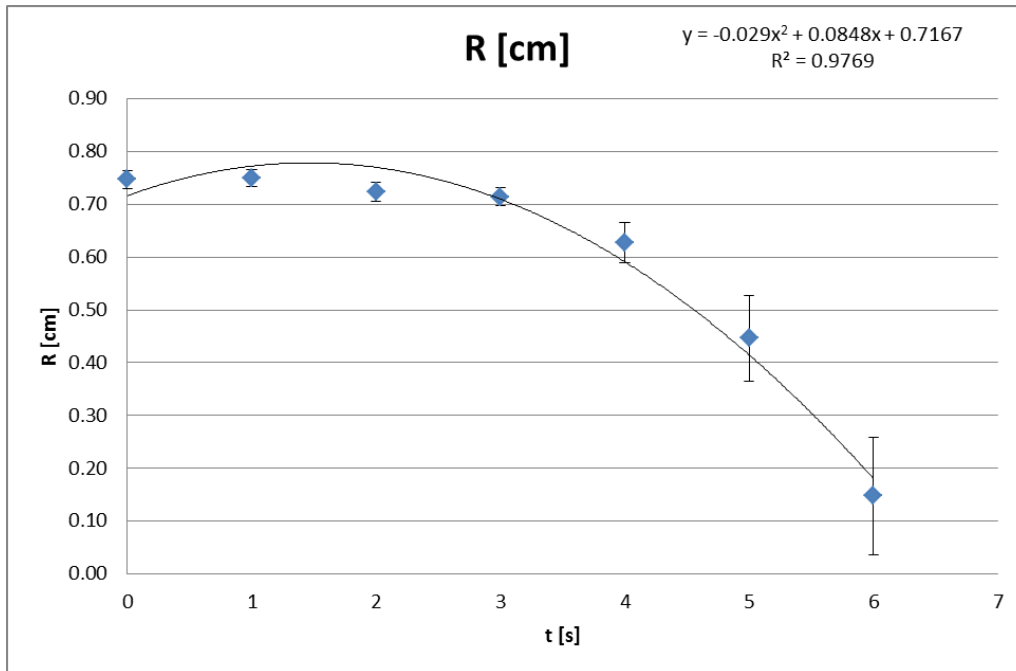


Figura 32 Evolución del radio para el Experimento 4, con agitación, temperatura del baño 1440 °C y sin precalentamiento de 400 °C

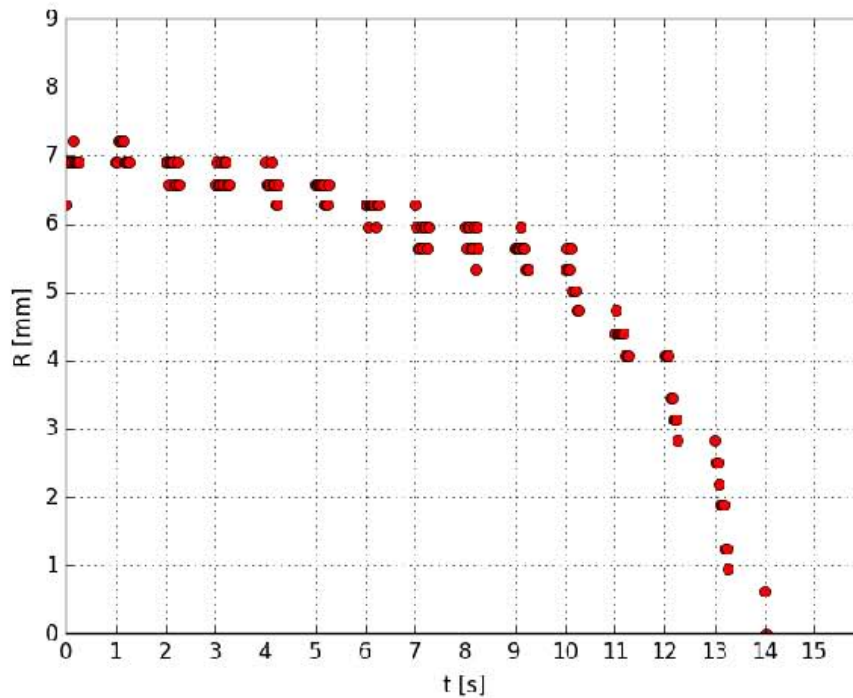
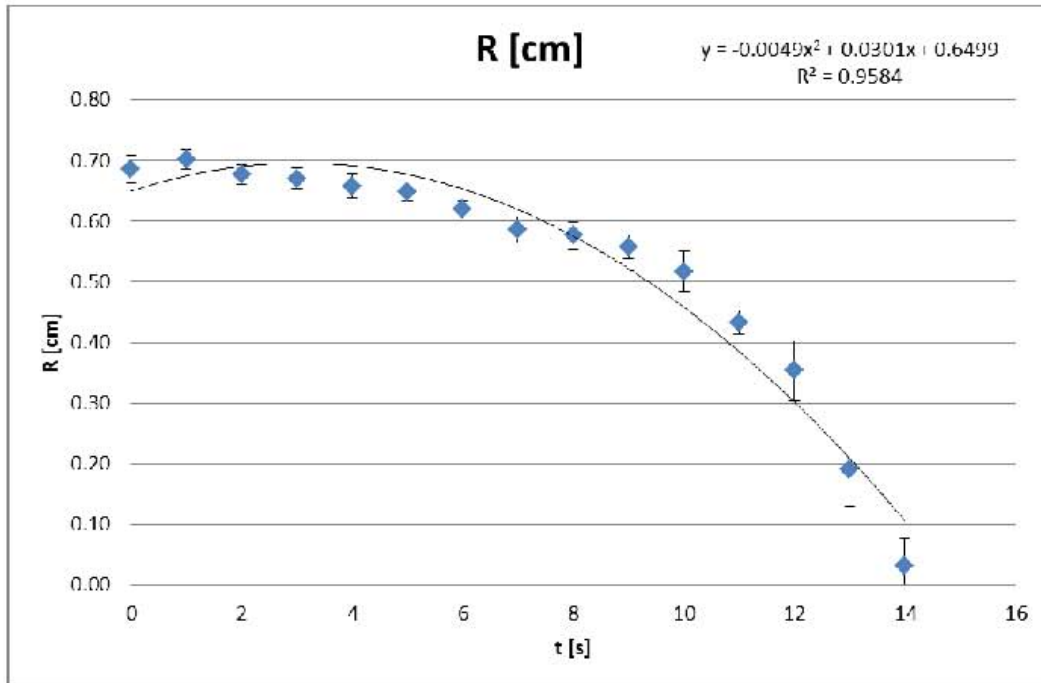


Figura 33 Evolución del radio para el Experimento 5, sin agitación, temperatura del baño 1420 °C y sin precalentamiento de 400 °C

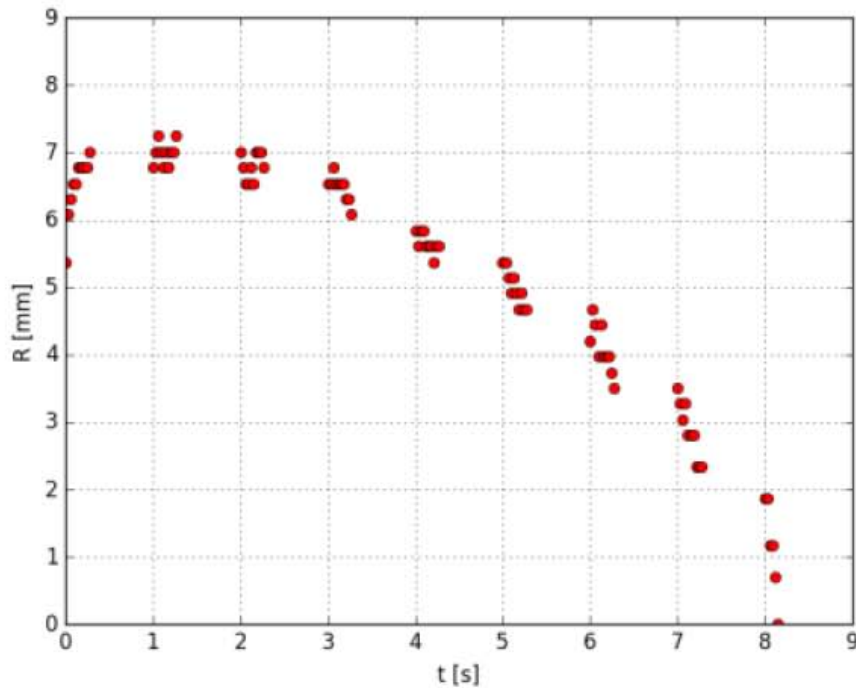
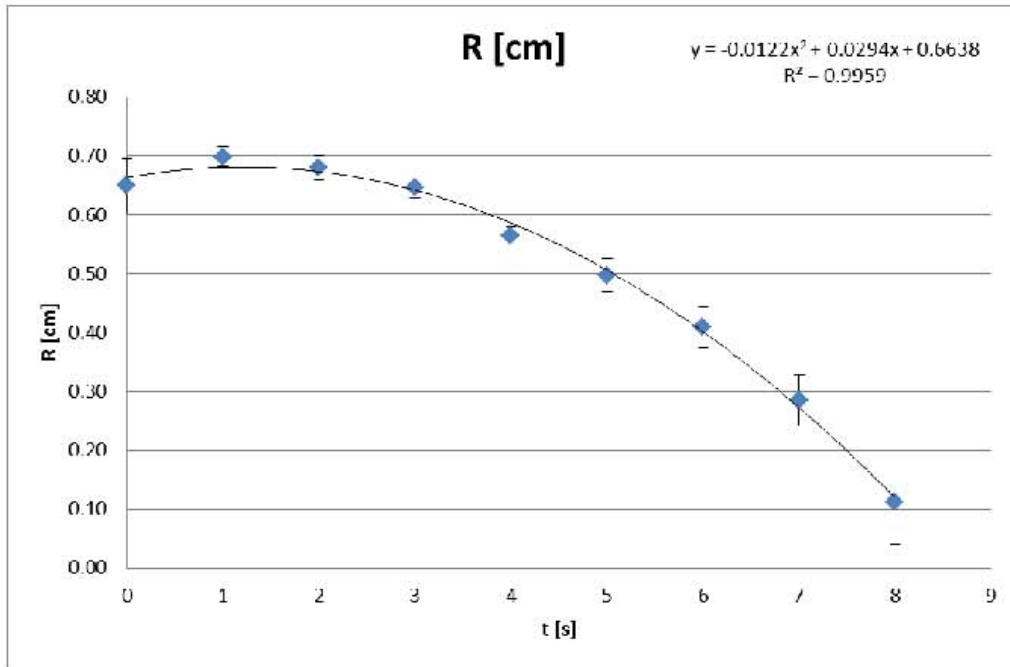


Figura 34 Evolución del radio para el Experimento 6, sin agitación, temperatura del baño 1440 °C y precalentamiento de 400 °C

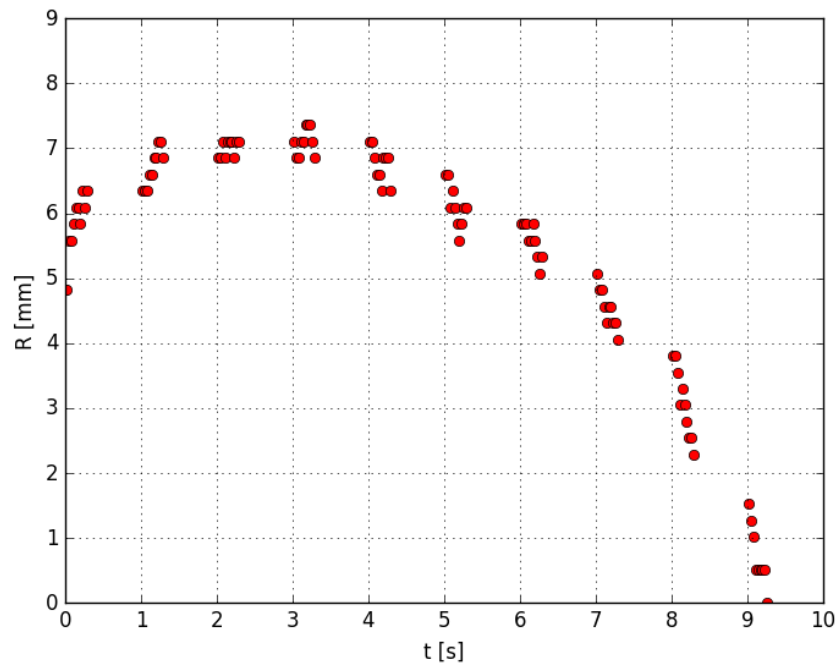
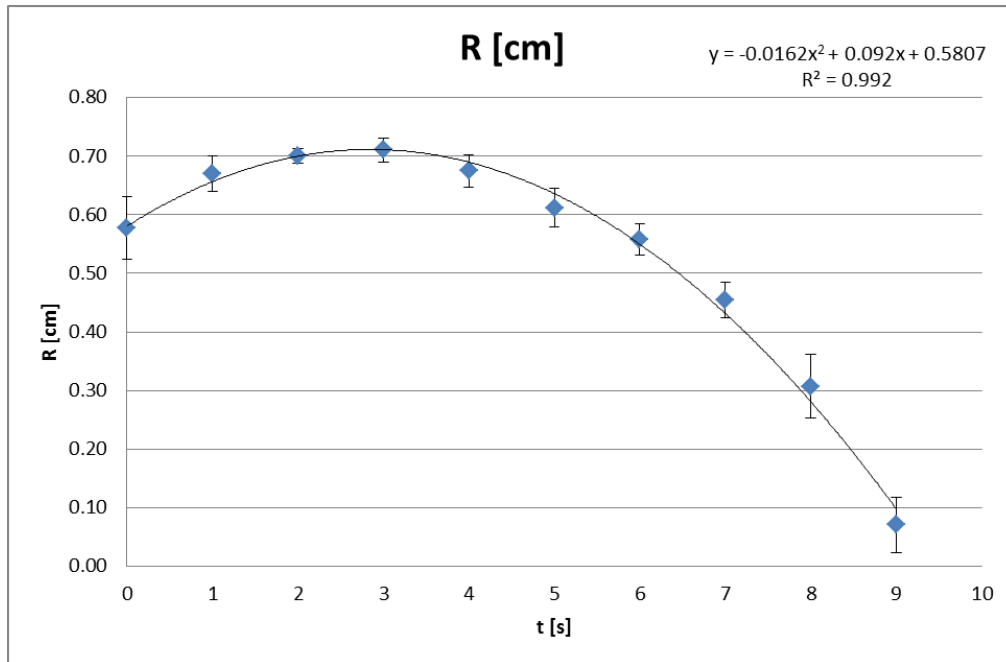


Figura 35 Evolución del radio para el Experimento 7, con agitación, temperatura del baño 1420 °C y precalentamiento de 400 °C

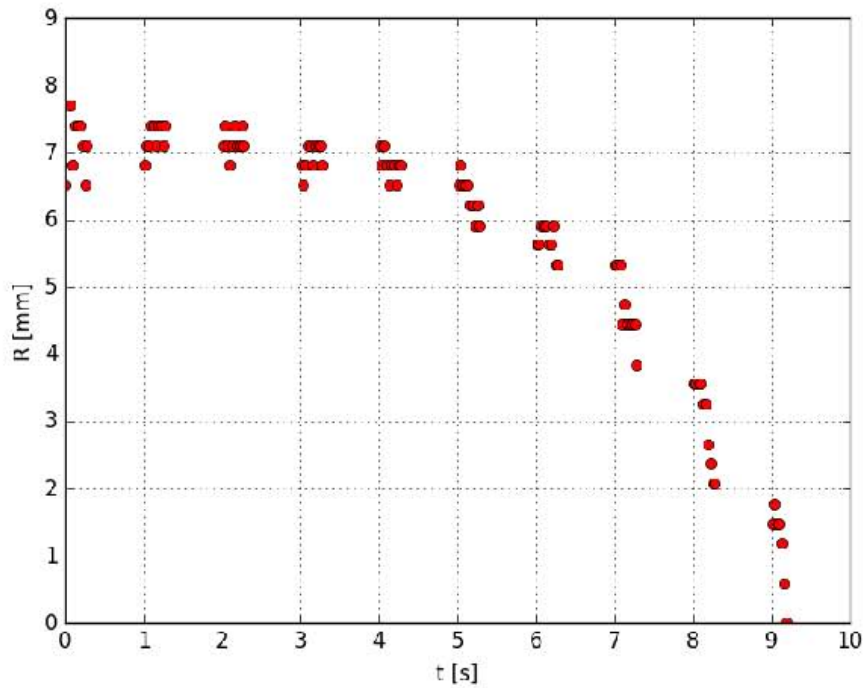
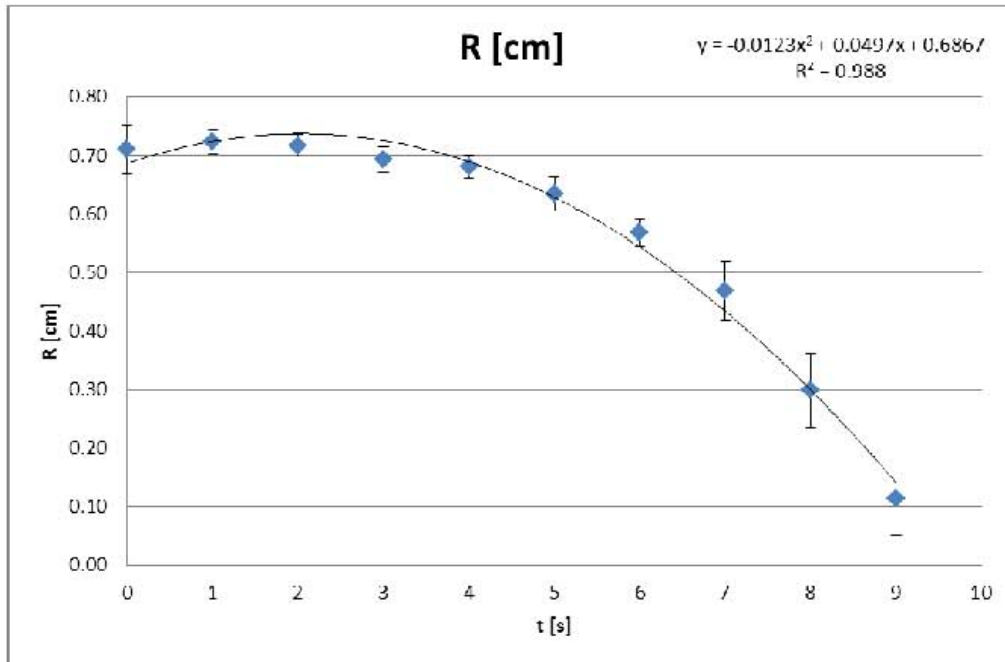


Figura 36 Evolución del radio para el Experimento 8, sin agitación, temperatura del baño 1440 °C y sin precalentamiento de 400 °C

En general todas las curvas muestran una tendencia parabólica en la disminución del radio durante la fusión. Se hicieron alrededor 1000 mediciones para poder obtener las correspondientes curvas.

3.2. Validación del modelo matemático

Es necesario validar el modelo matemático utilizando experimentación y este debe mostrar una tendencia similar en los factores evaluados experimentalmente. Otro factor importante que se requiere para validar el modelo matemático es que se tenga una predicción adecuada del tamaño de la partícula durante su fusión y su comportamiento térmico, para esto se deben realizar experimentos donde se grafique el tamaño de partícula contra el tiempo o temperatura contra el tiempo. En nuestro caso se validó utilizando gráficas de tamaño de partícula contra el tiempo, no se deseaba modificar el radio inicial para cada experimento por lo que se tomó el radio inicial promedio $\bar{R}_0 = 6.12 [mm]$ para el modelo matemático. Se utilizaron propiedades comunes para todos los modelos. En la **Tabla 14** se presentan los valores de estas propiedades físicas utilizadas, mientras que en la **Tabla 15** se presentan los niveles altos y bajos de las temperaturas del pellet y del baño usadas en las simulaciones.



Tabla 14 Propiedades físicas comunes utilizadas para validar los modelos matemáticos

Propiedad	Hierro	DRI
$\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	7650	2020
$C_p \left[\frac{J}{kg K} \right]$	447	820
$k \left[\frac{W}{m K} \right]$	37.65	1.8828
$T_m [K]$	1673	1673
$\Delta H_m \left[\frac{J}{kg} \right]$	277400	251040

Tabla 15 Condiciones comunes utilizadas en los modelos para validar el diseño experimental

Propiedad	Baja (-)	Alta (+)
$T_0 [K]$ DRI	298	673
$T_\infty [K]$ Hierro	1693	1713

De los parámetros más difíciles de establecer son los coeficientes de transferencia de energía h (ver **Tabla 16**) y de especies químicas k_D por lo que se estimaron estos valores, ya que la medición implicaría un diseño experimental complejo.



Tabla 16 Condiciones utilizadas para el modelo 1

Propiedad	Baja (-)	Alta (+)
$h \left[\frac{W}{m^2 K} \right]$ Agitación	17000	25000

Para la reacción química que ocurre dentro del DRI se tienen registros de la composición química del pellet en planta (ver **Apéndice 1**) con contenidos de hasta 1 % en peso de C por lo que se utilizaron valores para la combustión de este reactivo, tomando en cuenta que los parámetros cinéticos varían muchos ordenes de magnitud dependiendo de la cantidad de área superficial y oxígeno disponible para la reacción (ver **Tabla 17**).

Tabla 17 Propiedades utilizadas para la reacción química modelo 2

Propiedad	Valor
n Orden de reacción	2
k_0 [Hz]	50.3884
E_a [kJ]	74.09
$[A]_0$ [% w]	1 %
$\Delta H_r \left[\frac{kJ}{kg} \right]$	$-7.129 \times 10^3 + 0.252 T - 0.305 \times 10^{-3} T^2$ $+9.635 \times 10^3 \frac{1}{T} + 0.104 \times 10^{-6} T^3$



Para la agitación del modelo 2 se utilizaron correlaciones para evaluar al coeficiente de transferencia de energía h en función del radio R y otros parámetros del fluido y los resultados de esas estimaciones y las correlaciones empleadas se reportan en la **Tabla 18**.

Tabla 18 Coeficientes de calor por convección utilizados para el modelo 2

Propiedad	Correlación
$h \left[\frac{W}{m^2K} \right]$ Convección natural	$Nu = 2 + 0.6Gr^{1/4}Pr^{1/3}$
$h \left[\frac{W}{m^2K} \right]$ Convección forzada	$Nu = 2 + (0.4 Re^{1/2} + 0.06 Re^{2/3})Pr^{0.4} \left(\frac{\mu}{\mu_s} \right)^{1/4}$

Para el transporte de especies químicas se consideró el coeficiente de difusión D para el C en Fe tanto para el baño como para el DRI sabiendo por supuesto que los pellets tienen más porosidad y tienen una energía de activación mucho menor (ver **Tabla 19**).



Tabla 19 Propiedades utilizadas para el transporte de especies químicas modelo 3

Propiedad	Hierro	DRI
$D_0 \left[\frac{m^2}{s} \right]$	2.3×10^{-5}	2.3×10^{-5}
$E_A [kJ]$	148	148

Para el coeficiente de transferencia de especies químicas se utilizó la analogía entre transporte de energía y masa para estimar un orden de magnitud para k_D (ver **Tabla 20**).

Tabla 20 Condiciones utilizadas para el modelo 3

Propiedad	Baja (-)	Alta (+)
$h \left[\frac{W}{m^2K} \right]$ Agitación	4000	8000
$k_D \left[\frac{m}{s} \right]$ Agitación	1.2×10^{-3}	2.4×10^{-3}

Para el modelo 4 se utilizó un coeficiente de transferencia de energía mucho mayor ya que el desplazamiento de la frontera se debe solo a una porción de la geometría que está sumergida (ver **Tabla 21**).



Tabla 21 Propiedades utilizadas para el modelo 4

Propiedad	Baja (-)	Alta (+)
$h \left[\frac{W}{m^2K} \right]$ agitación 1D	40000	50000
$h \left[\frac{W}{m^2K} \right]$ agitación 2D	25000	30000

Para poder comparar mejor el ajuste de los modelos matemáticos utilizados se utilizó un coeficiente de determinación R^2 que busca cuantificar la correlación entre los resultados experimentales y los resultados de los modelos.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(\hat{y}_i - y_i)^2}{\sum(\bar{y} - y_i)^2} \quad (124)$$

Donde y_i son los resultados experimentales, \bar{y} es la media de los datos experimentales y \hat{y}_i son los datos obtenidos por el modelo matemático. Cabe mencionar que el coeficiente de determinación puede resultar negativo cuando la varianza entre el modelo y los datos experimentales $(\hat{y}_i - y_i)^2$ es más grande con respecto a la varianza de los datos experimentales $(y_i - \bar{y})^2$.

A continuación se muestra una comparación de los datos obtenidos experimentalmente y utilizando los modelos matemáticos para todos los experimentos de la **Figura 37** a la **Figura 44**.

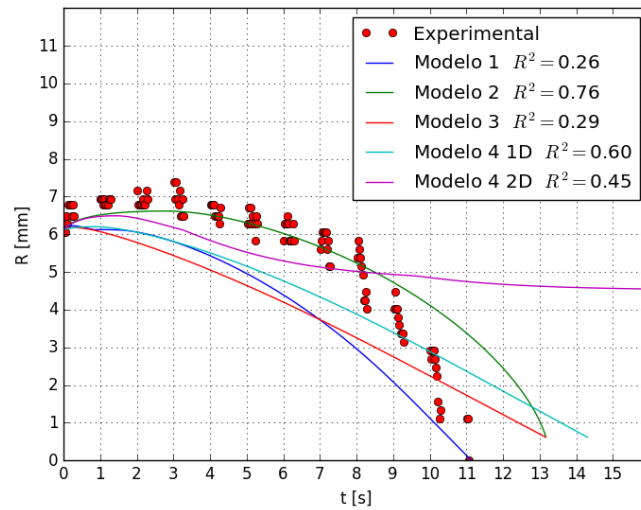


Figura 37 Experimento 1, sin agitación, temperatura del baño 1420 °C y precalentamiento de 400 °C

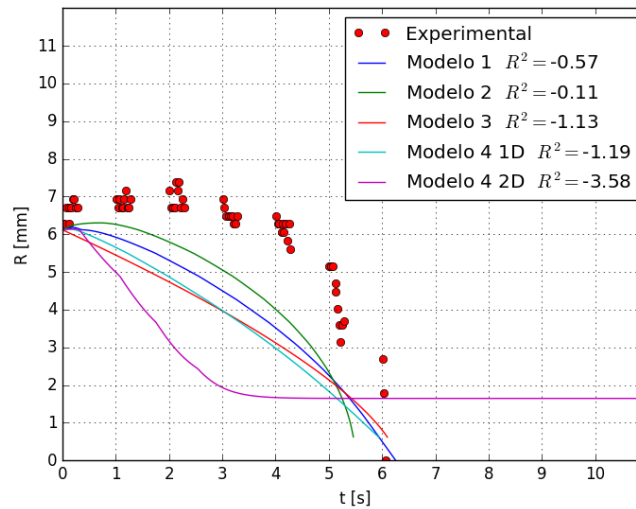


Figura 38 Experimento 2, con agitación, temperatura del baño 1440 °C y precalentamiento de 400 °C

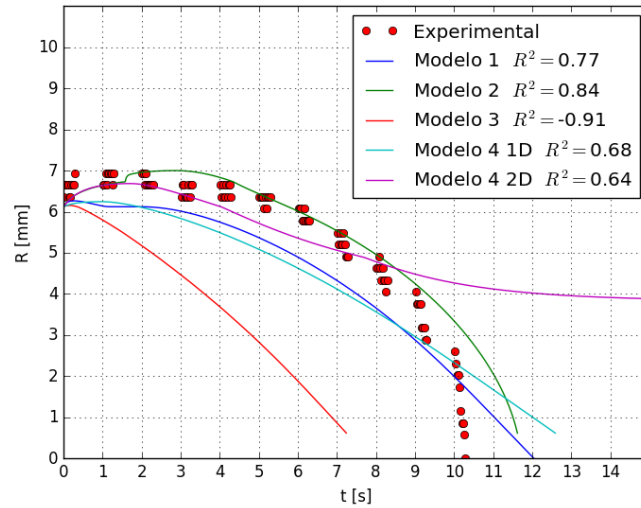


Figura 39 Experimento 3, con agitación, temperatura del baño 1420 °C y sin precalentamiento de 400 °C

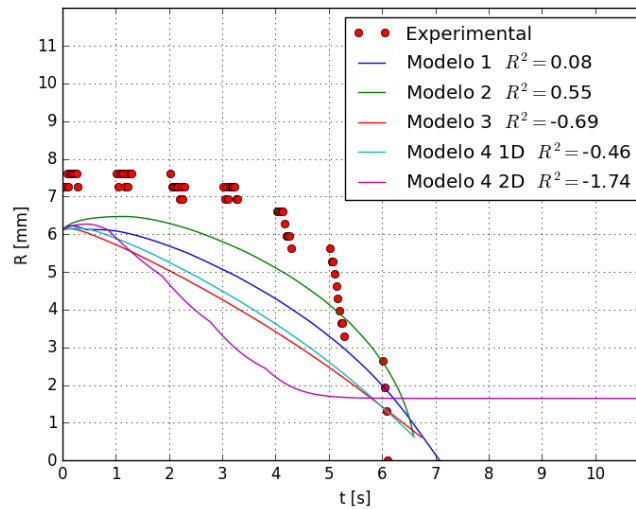


Figura 40 Experimento 4, con agitación, temperatura del baño 1440 °C y sin precalentamiento de 400 °C

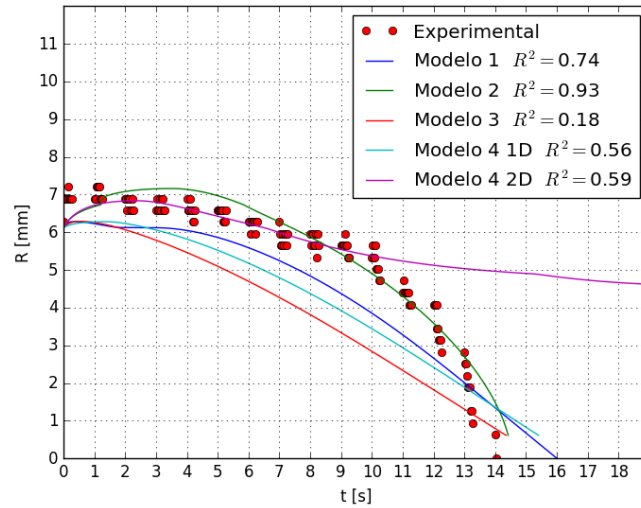


Figura 41 Experimento 5, sin agitación, temperatura del baño 1420 °C y sin precalentamiento de 400 °C

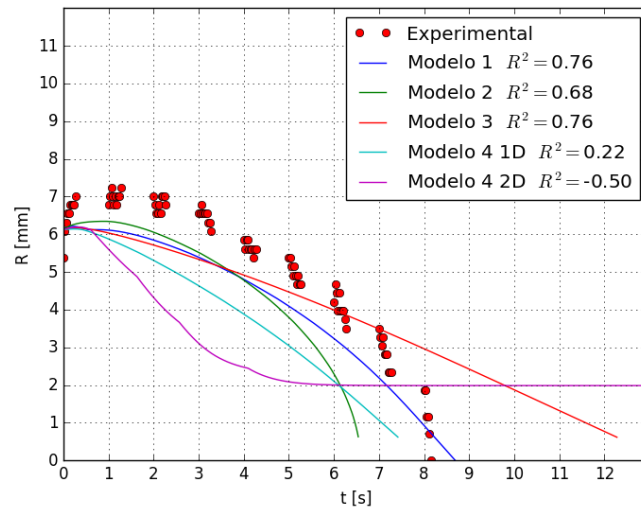


Figura 42 Experimento 6, sin agitación, temperatura del baño 1440 °C y precalentamiento de 400 °C

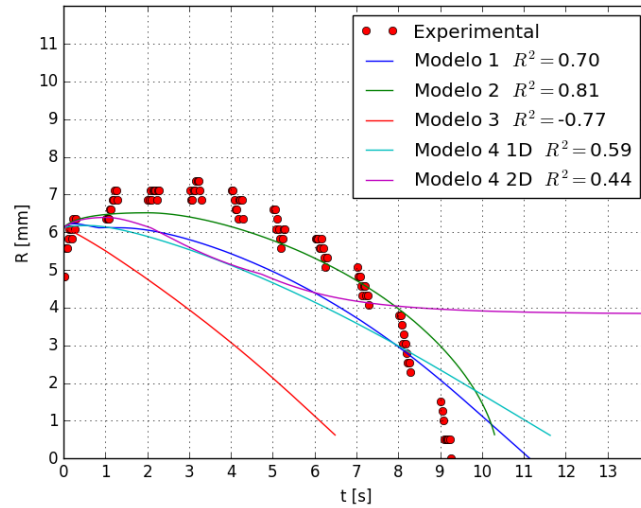


Figura 43 Experimento 7, con agitación, temperatura del baño 1420 °C y precalentamiento de 400 °C

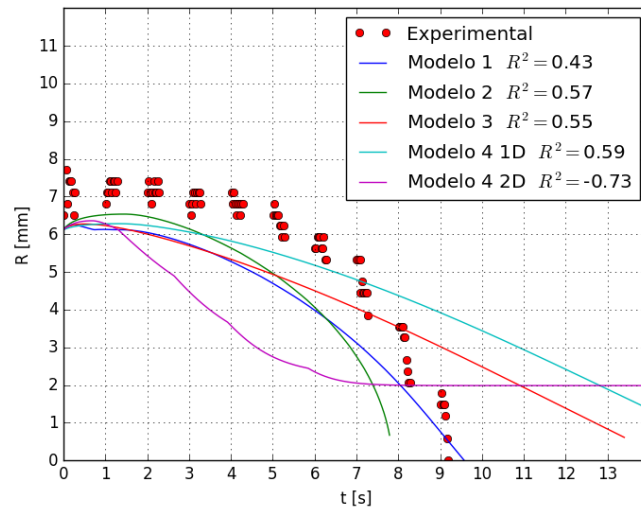


Figura 44 Experimento 8, sin agitación, temperatura del baño 1440 °C y sin precalentamiento de 400 °C

A continuación, en la **Tabla 22**, se muestra un resumen de la correlación obtenida por los modelos, considerando que se está usando un radio promedio.



Tabla 22 Coeficiente de determinación

R^2					
	Modelo 1	Modelo 2	Modelo 3	Modelo 4 1D	Modelo 4 2D
Experimento 1	0.26	0.76	0.29	0.6	0.45
Experimento 2	-0.57	-0.11	-1.13	-1.19	-3.58
Experimento 3	0.77	0.84	-0.91	0.68	0.64
Experimento 4	0.08	0.55	-0.69	-0.46	-1.74
Experimento 5	0.74	0.93	0.18	0.56	0.59
Experimento 6	0.76	0.68	0.76	0.22	-0.5
Experimento 7	0.7	0.81	-0.77	0.59	0.44
Experimento 8	0.43	0.57	0.55	0.59	-0.73
Promedio	0.40	0.63	-0.22	0.20	-0.55

Se puede observar en la validación que el coeficiente de determinación que los modelos en 1D son los que más correlación tienen con los resultados experimentales y por otra parte la transferencia de masa resulta en un modelo con otra tendencia distinta a la obtenida experimentalmente.

A continuación se realizó el análisis factorial para el diseño experimental donde se busca obtener la misma tendencia en los resultados obtenidos por el experimento y el modelo 2 que fue el que mejor correlación obtuvo. Se obtienen los efectos y los coeficientes para un modelo multilíneal. En la **Tabla 23** y **24** se ve el efecto de cada variable sobre el tiempo de fusión así como el efecto combinado entre dos variables y la interacción de 3 variables. Se puede observar también que en general se tiene la misma tendencia donde la temperatura del baño resulta el factor más importante en la disminución del tiempo de fusión (20 grados de sobrecalentamiento disminuyen casi 4 segundos el tiempo de fusión) seguido de la agitación (la agitación reduce casi 3 segundos la fusión) y por último el



precalentamiento (que disminuye solo 1.2 segundos la fusión). Se eligieron estas tres variables ya que se tiene fácilmente control sobre ellas en el experimento. En las **Figuras 45 y 46** se presentan gráficamente los efectos de las variables y la superficie multilínea de respuesta obtenida.

Tabla 23 Resultados del diseño experimental para los experimentos

Termino	Efecto	Coeficiente
Constante		9.272
Agitación	-2.68	-1.34
Temperatura del baño	-3.785	-1.892
Precalentamiento	-1.265	-0.632
Agitación*Temperatura del baño	0.1	0.05
Agitación*Precalentamiento	0.73	0.365
Temperatura del baño*Precalentamiento	0.725	0.362
Agitación*Temperatura del baño*Precalentamiento	-0.23	-0.115

Tabla 24 Resultados del diseño experimental para el modelo

Termino	Efecto	Coeficiente
Constante		3.775
Agitación	-2.05	-1.025
Temperatura del baño	-3.65	-1.825
Precalentamiento	-0.55	-0.275
Agitación*Temperatura del baño	1.05	0.525
Agitación*Precalentamiento	0.25	0.125
Temperatura del baño*Precalentamiento	0.35	0.175
Agitación*Temperatura del baño*Precalentamiento	-0.15	-0.075

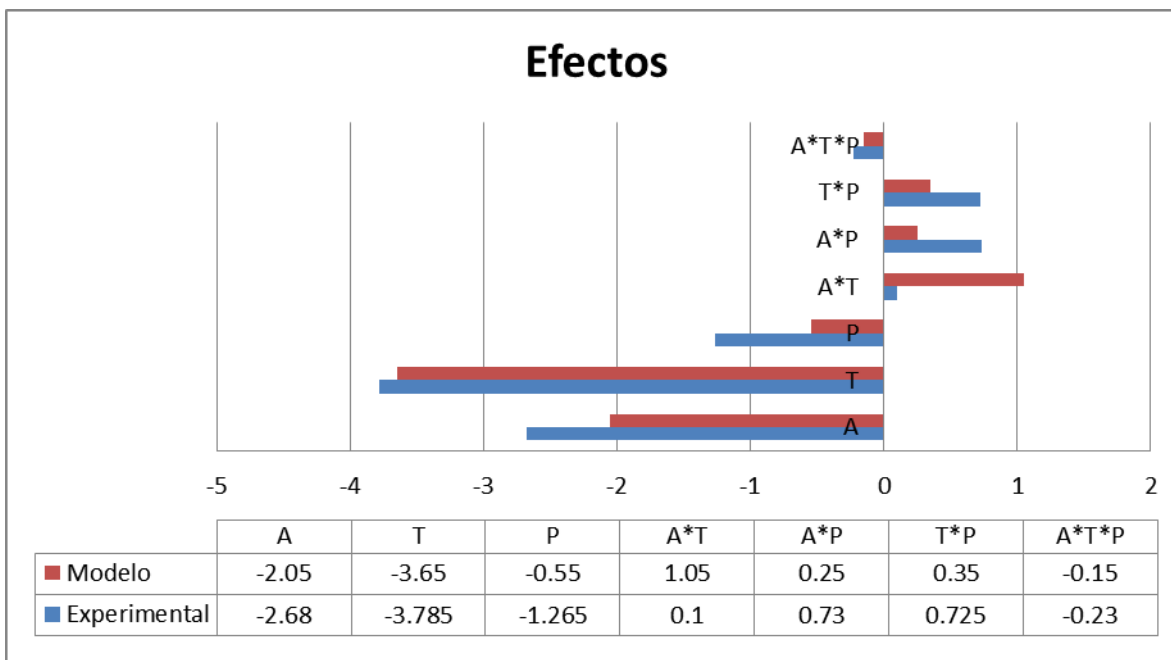


Figura 45 Resultado de los factores que influyen en el tiempo de fusión para el diseño experimental

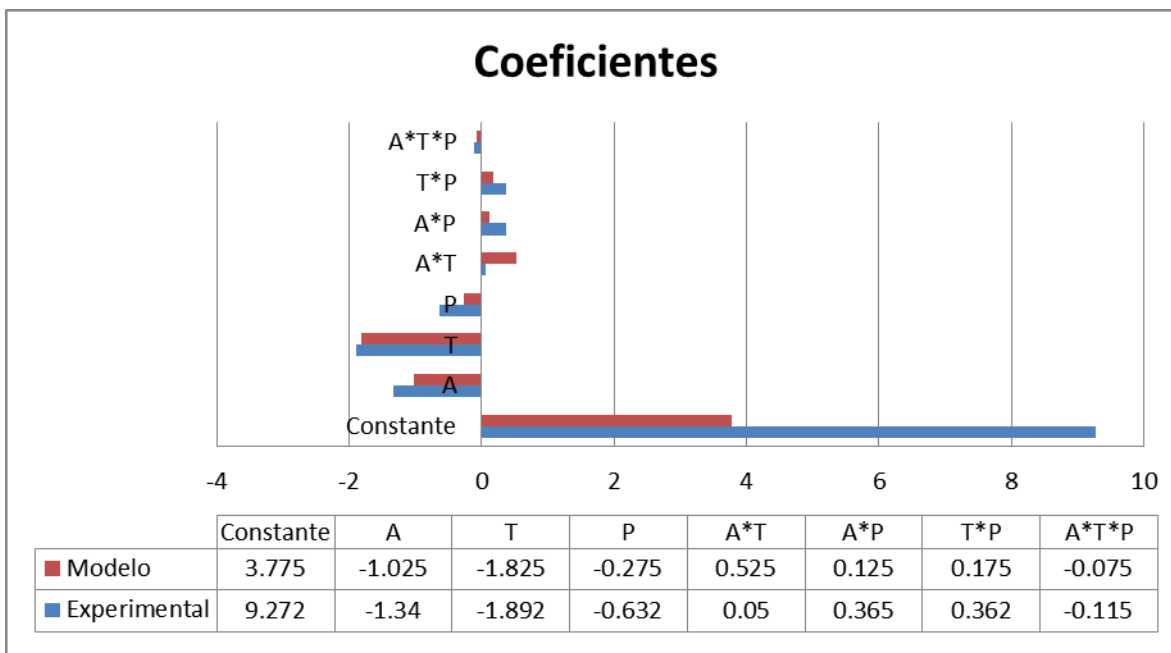


Figura 46 Resultado de los coeficientes para el modelo multilinear del tiempo de fusión para el diseño experimental



3.3. Resultados y modelos matemáticos

Se pueden obtener resultados importantes sobre los distintos modelos matemáticos a pesar de tener que elegir a uno como el mejor. A continuación se analizarán algunos resultados importantes obtenidos de cada modelo. Usualmente el DRI puede estar inmerso en escoria en vez del baño de acero en el proceso industrial por lo que se tomarán en cuenta otras propiedades físicas (ver **Tabla 25**) para el baño para el análisis de los resultados.

3.3.1. Resultados modelo 1

Tabla 25 Caso ejemplo

Propiedad	DRI	Escoria
$\rho \left[\frac{kg}{m^3} \right]$	2600	2900
$C_p \left[\frac{J}{kg K} \right]$	820	1171
$k \left[\frac{W}{m K} \right]$	2.13	1.3589
$T_m [K]$	1809	1809
$\Delta H_m \left[\frac{J}{kg} \right]$	277400	426768

Para el número de nodos se utilizó $N_0 = 10$, $R = 7.5 [mm]$, se utilizó un esquema explícito, $T_0 = 298 [K]$ como temperatura inicial del DRI, $T_\infty = 1843 [K]$ como la temperatura del baño de escoria y para la agitación se utilizó un coeficiente de transferencia de energía $h = 27104 \left[\frac{W}{m^2} \right]$.



En el modelo 1 se puede realizar un buen análisis de resultados sobre los distintos esquemas numéricos y sensibilidad de la malla.

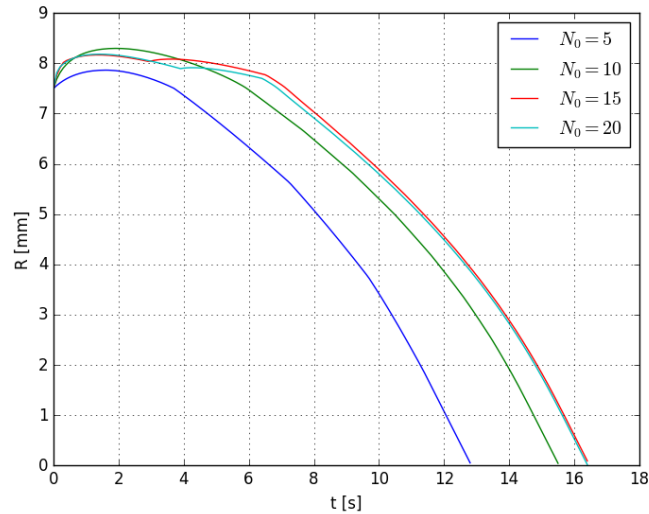


Figura 47 Resultados esquema explícito

En el caso del esquema explícito se puede observar en la **Figura 47** que se obtiene un mayor tiempo de fusión y una menor coraza al aumentar el número inicial de elementos, sin embargo después de cierta cantidad de estos elementos (15 elementos) prácticamente ya no se ve modificado el cálculo. Esto indica que no es necesario incluir más elementos ya que no se verá modificado el cálculo significativamente.

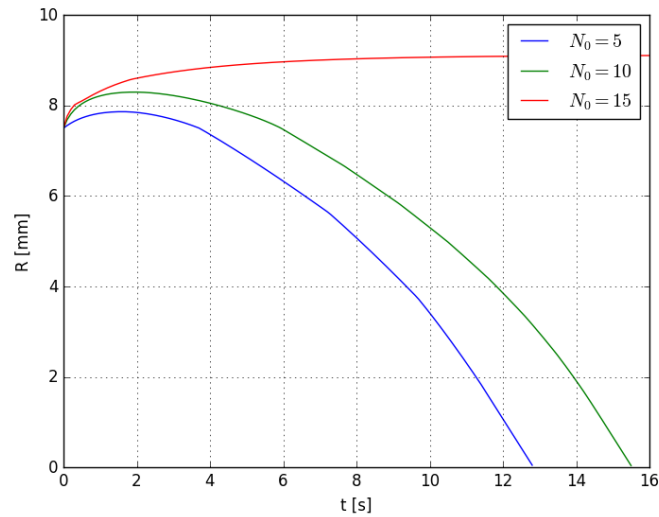


Figura 48 Resultados esquema implícito

Se puede observar en la **Figura 48** para el esquema implícito una dependencia muy fuerte con el número inicial de elementos ya que al tener un término $1/\Delta r$ que se modifica en cada iteración se tiene un sistema no lineal de ecuaciones y el método de Gauss-Seidel no logra converger a la solución al aumentar el número inicial de elementos. Esto sugiere que el esquema implícito no es adecuado para estos cálculos, ya que no presenta divergencia al aumentar el número de nodos.

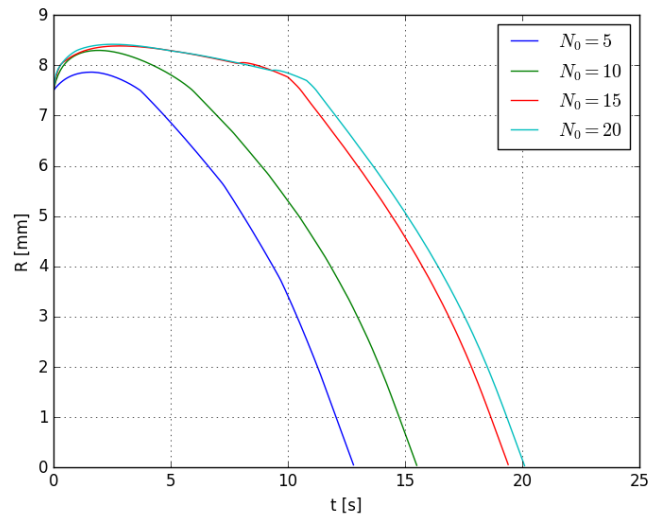


Figura 49 Resultados esquema Crank-Nicholson

Se puede observar una gran dependencia en el número inicial de elementos en el esquema Crank-Nicholson (ver **Figura 49**) y a pesar de converger resulta poco confiable por la parte no lineal del sistema de ecuaciones, por lo que tampoco es confiable para este problema de Stefan.

3.3.2. Resultados modelo 2

El segundo modelo es el que mostró el comportamiento más similar a los datos experimentales por lo que se realizará un análisis de resultados y de cada variable detallado usando el caso ejemplo. Se mostrarán algunos de los resultados evaluando el radio máximo alcanzado R_{max} , el tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y el tiempo de fusión total t_{Melt} .

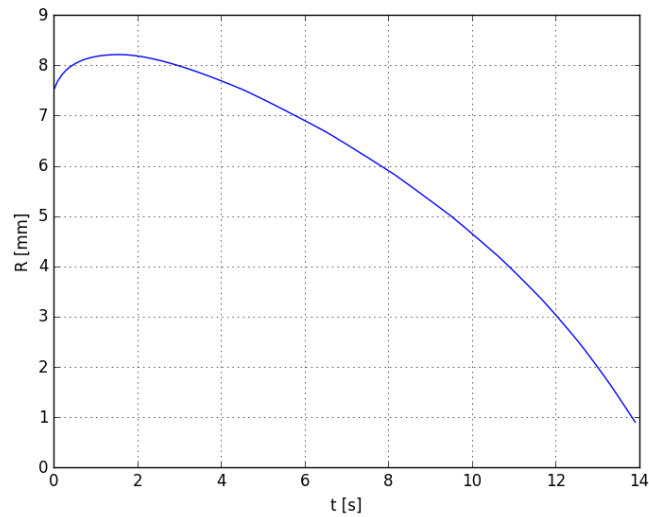


Figura 50 Radio vs t modelo 2

Se puede observar en la curva de R vs t para la fusión de la **Figura 50** (con las condiciones del caso ejemplo) que se tiene una forma parabólica muy similar a lo obtenido en el modelo 1 sin embargo el cálculo se llevó a cabo utilizando propiedades constantes a pesar de haber incluido la opción de establecer funciones para la interdependencia de las propiedades físicas.

A continuación, en la **Figura 51**, se muestra la evolución segundo a segundo del comportamiento de la malla y los elementos durante el caso ejemplo, con lo cual se puede observar el desplazamiento de R junto con la modificación, inclusión y eliminación de los elementos.

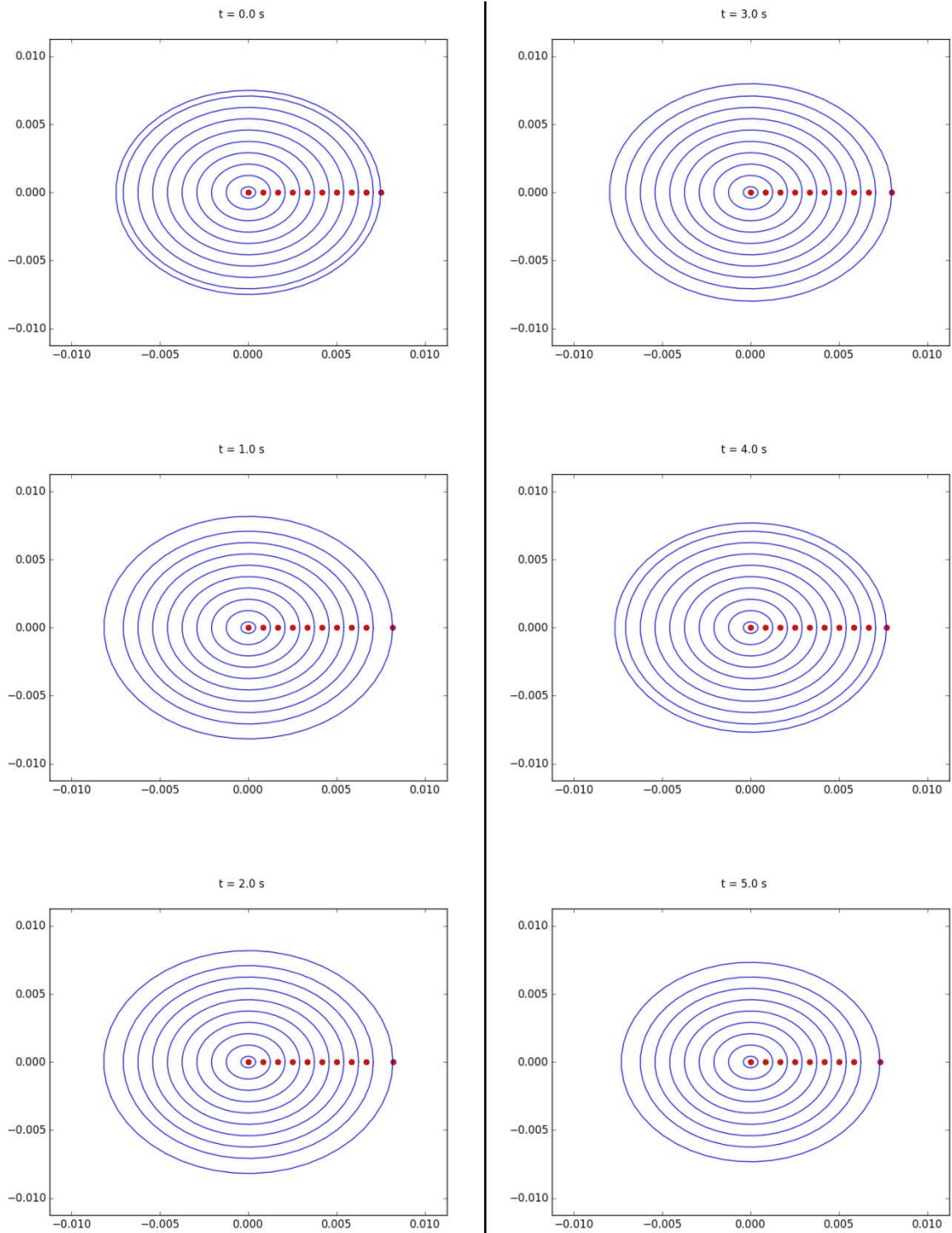


Figura 51 Malla durante el cálculo

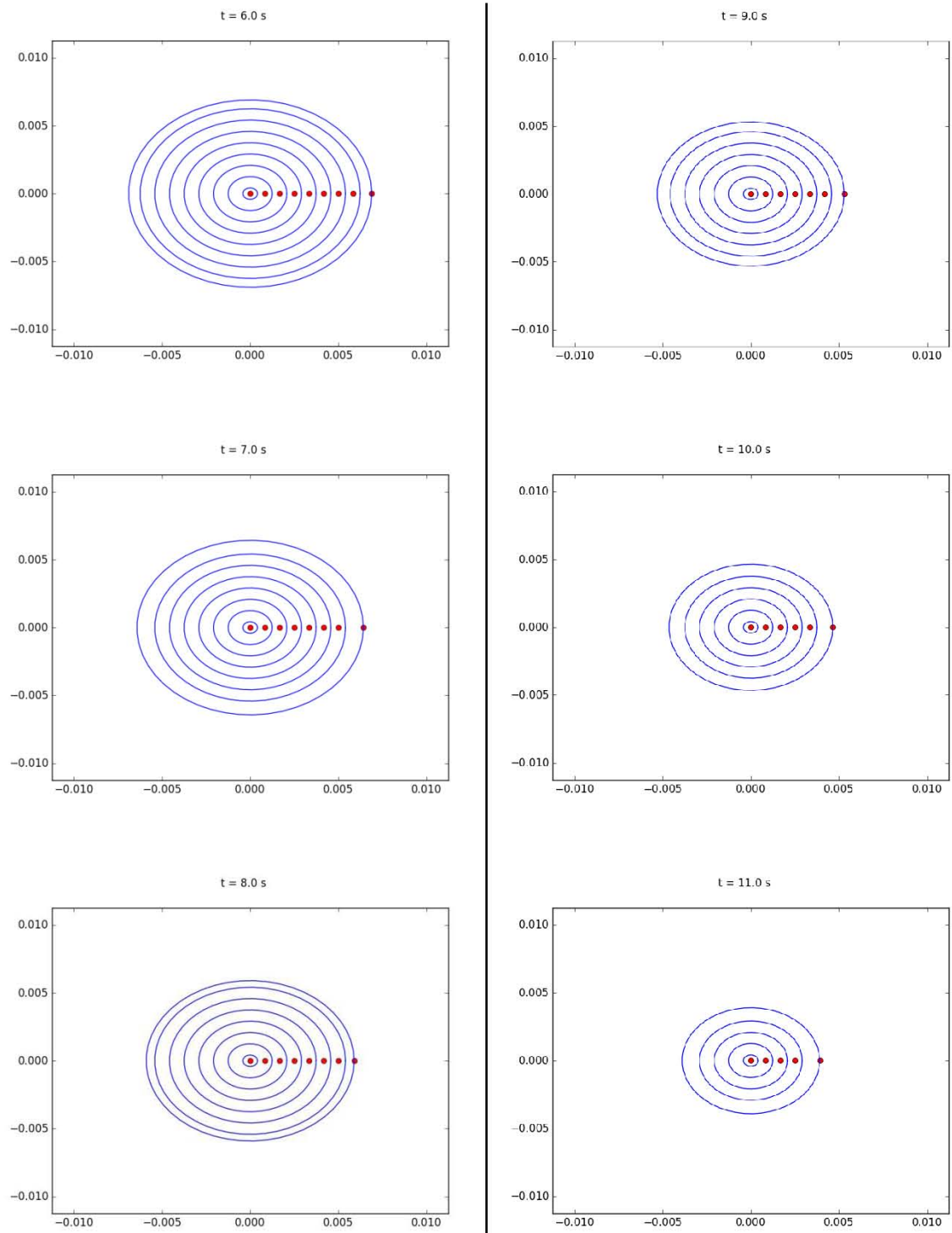


Figura 51 Malla durante el cálculo (continuación)

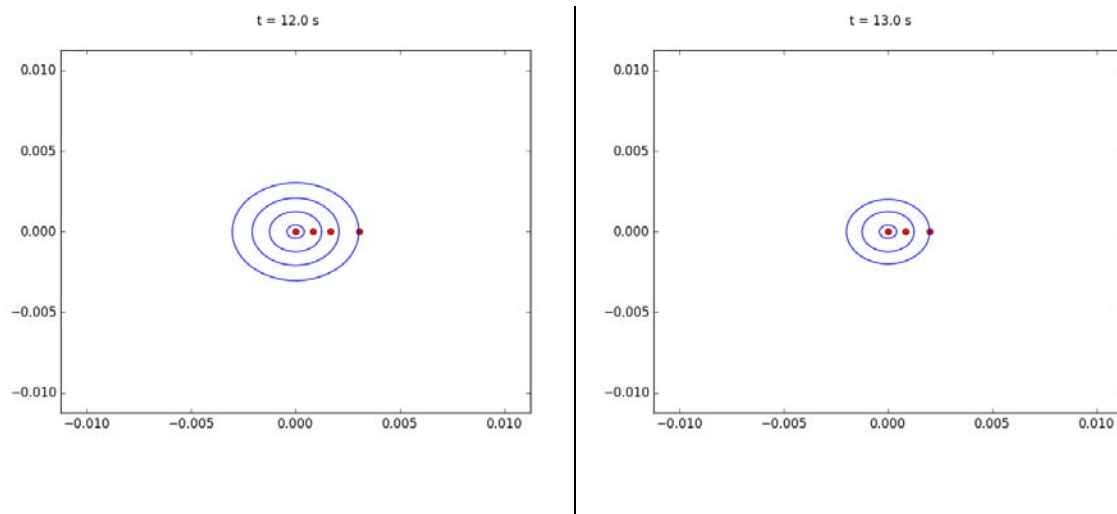


Figura 51 Malla durante el cálculo (continuación)

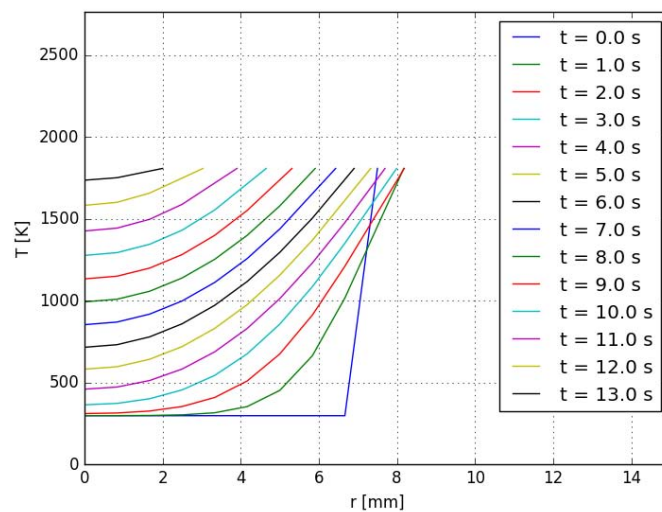


Figura 52 Perfiles de temperatura dentro de la partícula a distintos tiempos

Se puede observar en la **Figura 52**, que presenta perfiles de temperatura dentro de la esfera a diferentes tiempos para el mismo cálculo de la **Figura 47**, que los perfiles de temperatura dentro de la partícula son en general parabólicos. Todas las posiciones inferiores a $R_0 = 7.5 \text{ mm}$ se calientan al transcurrir el tiempo por lo que en la parte inferior se muestran los primeros instantes de la fusión y en la parte superior los últimos instantes de la fusión. Por otra parte las posiciones por



encima de R_0 que corresponden a la coraza por lo general se enfrían rápidamente al principio y después se van calentando hasta alcanzar la temperatura de fusión. En todos los casos se puede ver que la temperatura en la superficie (el extremo de la curva) se encuentra a la temperatura de fusión ya sea del baño o el pellet, que en este ejemplo es la misma temperatura.

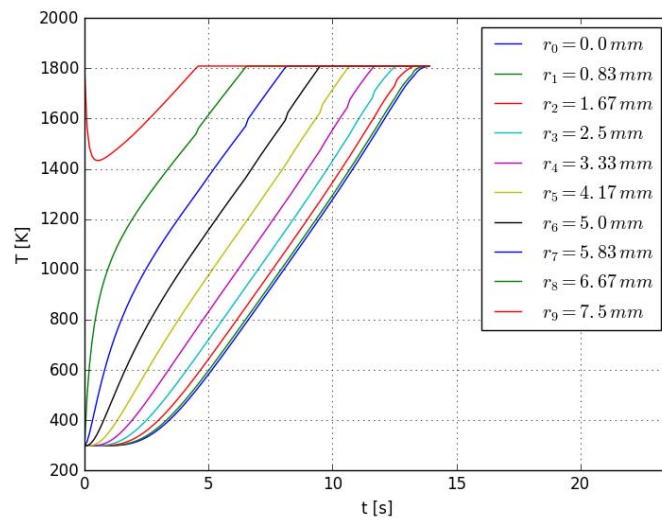


Figura 53 T vs t a distintas posiciones de r

Se puede observar en la **Figura 53**, que muestra la evolución de temperatura en distintos puntos de la esfera de DRI para el caso ejemplo, que en general en el centro de la esfera r_0 la temperatura no se ve modificada por un intervalo de tiempo y posteriormente crece prácticamente de forma lineal hasta alcanzar la temperatura de fusión.



Por otra parte las posiciones más cercanas a la superficie caliente en contacto con el baño su temperatura crece rápidamente al principio y después lo hacen de forma lineal hasta alcanzar la temperatura de fusión.

Este comportamiento está totalmente relacionado con el flujo de energía por conducción dentro del pellet por lo que si se disminuye el radio de la partícula, se aumenta la conductividad o existe una diferencia de temperaturas mayor entre el centro y la superficie las curvas tendrán un aumento rápido de la temperatura al principio y después un zona lineal como en r_8 .

Por el contrario si se aumenta el radio, se disminuye la conductividad o se precalienta la partícula se tendrá una etapa isotérmica seguida de un aumento lineal de la temperatura como en r_0 .

Todas las posiciones mayores o iguales a R_0 que corresponden a la coraza tienen un comportamiento térmico distinto. La coraza al solidificar comienza a la temperatura de fusión del baño y desciende rápidamente al formarse ya que la magnitud un gradiente de temperatura es muy grande en esa zona y el flujo de energía hace que se enfríe. Posteriormente aumenta su temperatura de forma lineal hasta volver a alcanzar la temperatura de fusión.

En la **Figura 54**, se muestran segundo a segundo la evolución térmica del pellet, para el caso ejemplo, durante la fusión donde también se aprecia el desplazamiento de R .

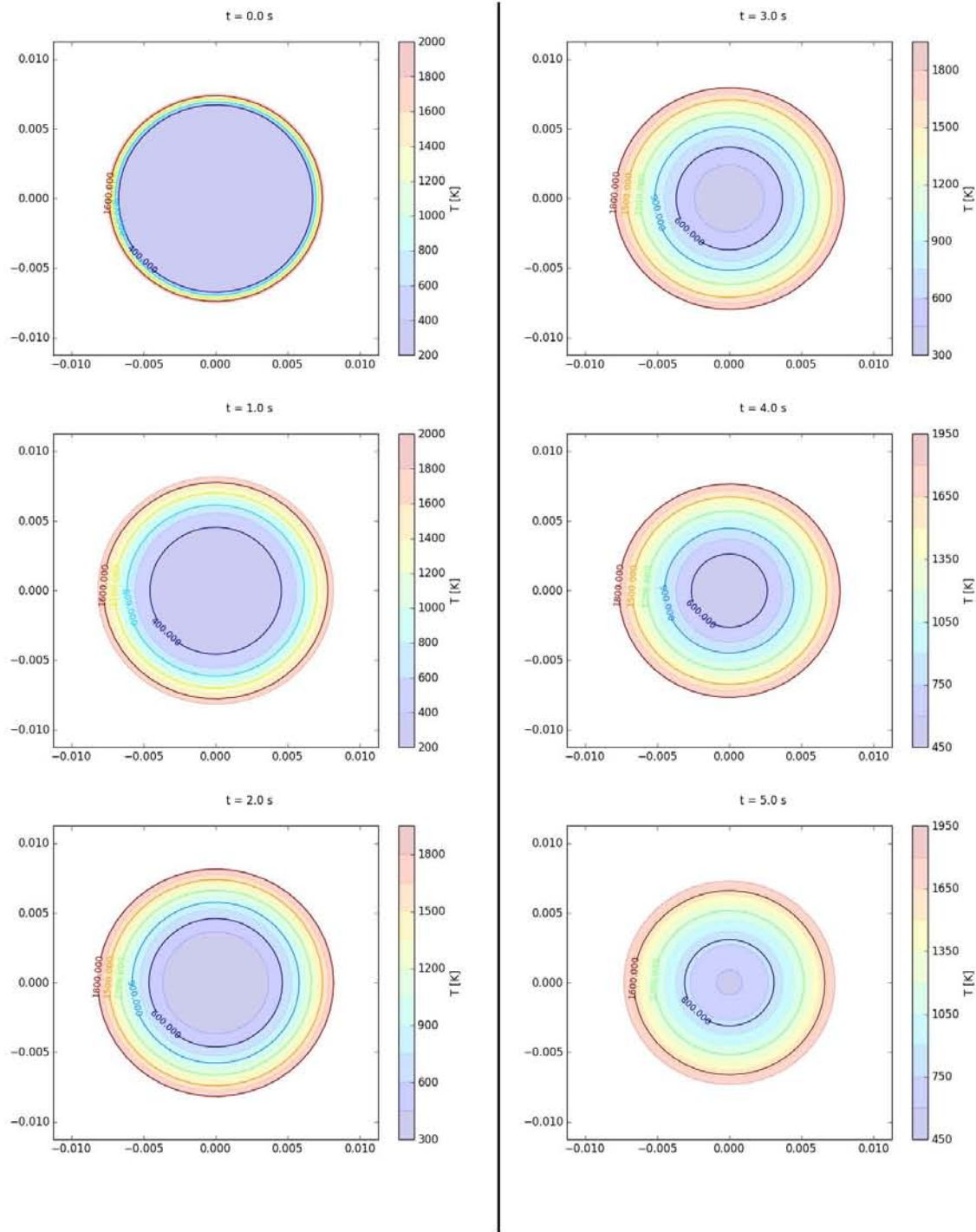


Figura 54 Contornos de Temperatura durante la fusión

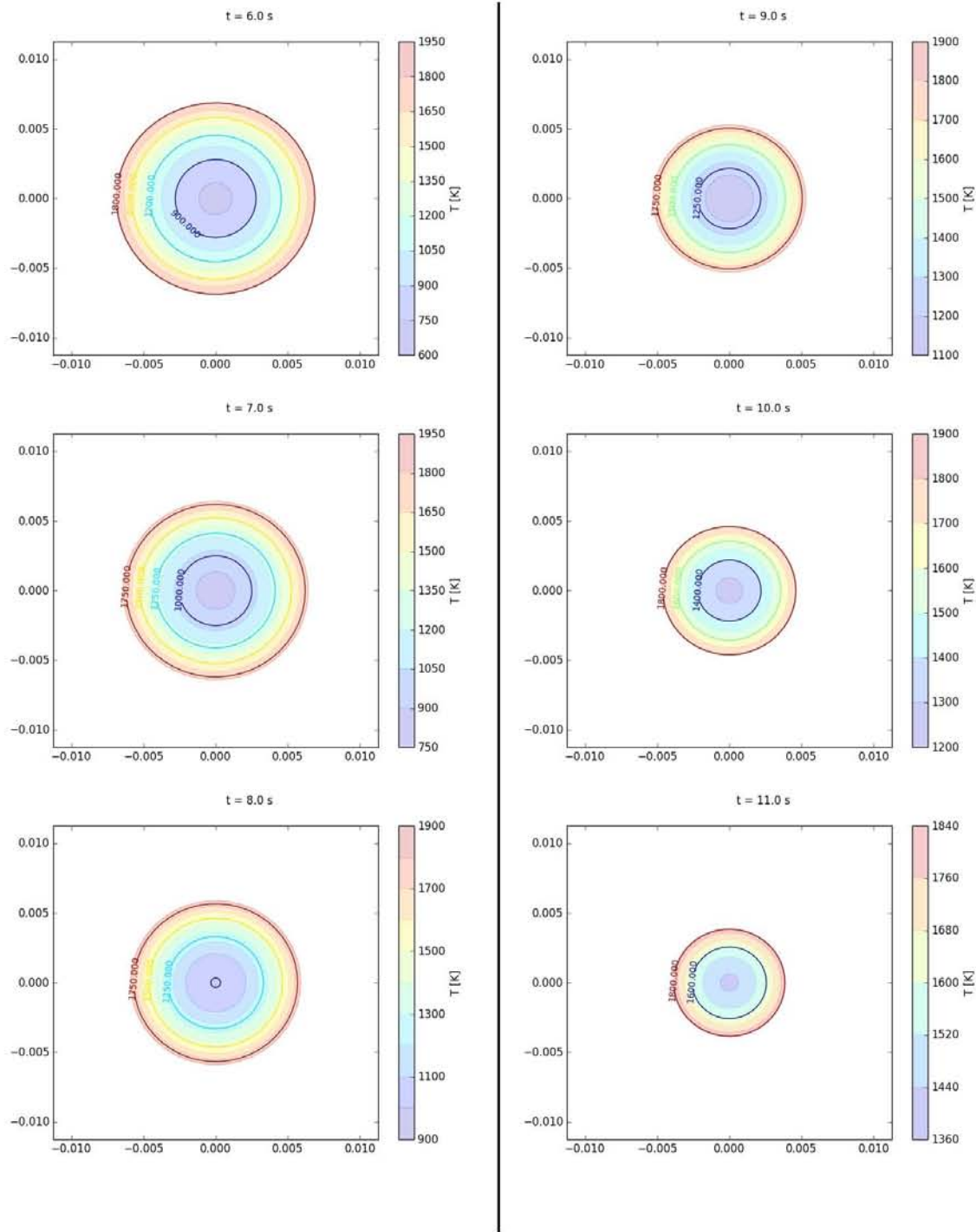


Figura 54 Contornos de Temperatura durante la fusión (continuación)

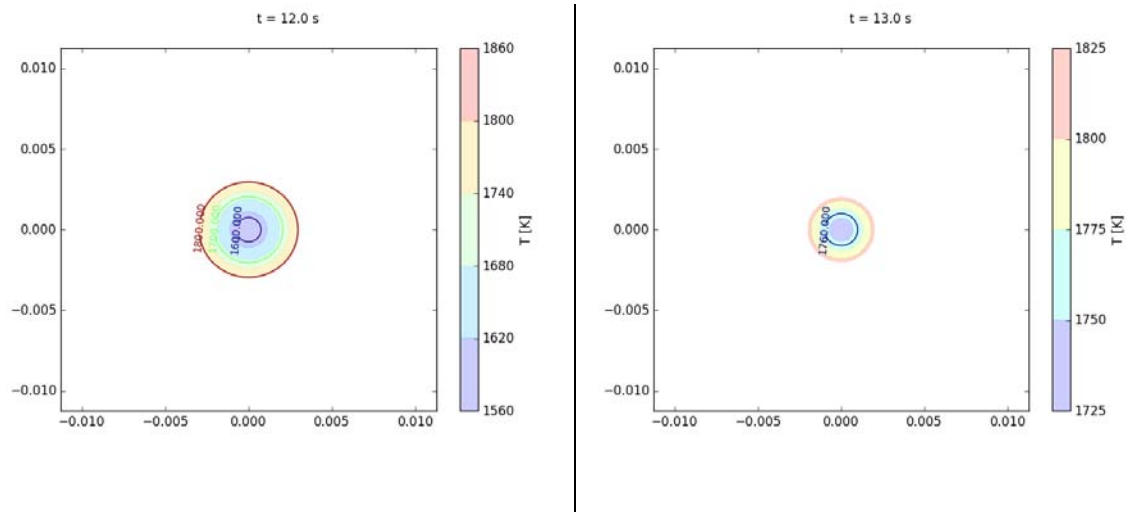


Figura 54 Contornos de Temperatura durante la fusión (continuación)

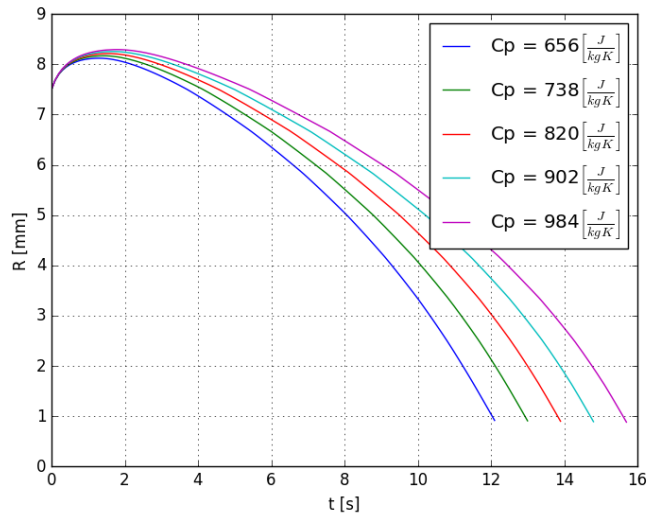


Figura 55 Curvas de R vs t para distintos valores de Cp de la partícula

En las curvas de la **Figura 55** para distintos valores de **Cp** del pellet, para el caso ejemplo, se puede observar claramente que la formación de la coraza durante los primeros instantes permanece igual para posteriormente alcanzar distintos valores de radio máximo así como tiempos de fusión.



La tendencia en general es a mayor C_p se tiene mayor tiempo de fusión, lo cual es de esperarse de acuerdo a la definición de C_p la cual implica mayor energía para modificar la temperatura o entalpía de la sustancia.

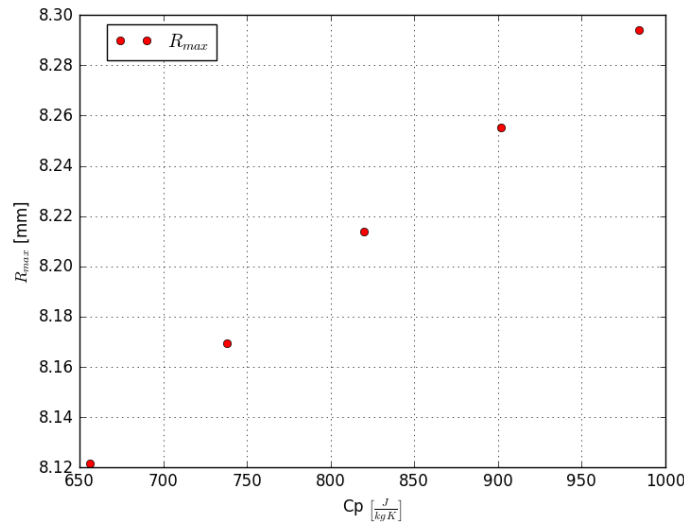


Figura 56 R máximo para distintos valores de C_p de la partícula

Se puede observar claramente de la **Figura 56**, un aumento lineal del radio máximo alcanzado durante la formación de la coraza al aumentar el valor del C_p de la partícula esto se debe a que se requiere más energía por conducción hacia el interior de la partícula al aumentar el C_p , es decir se requiere más energía para lograr aumento en la temperatura.

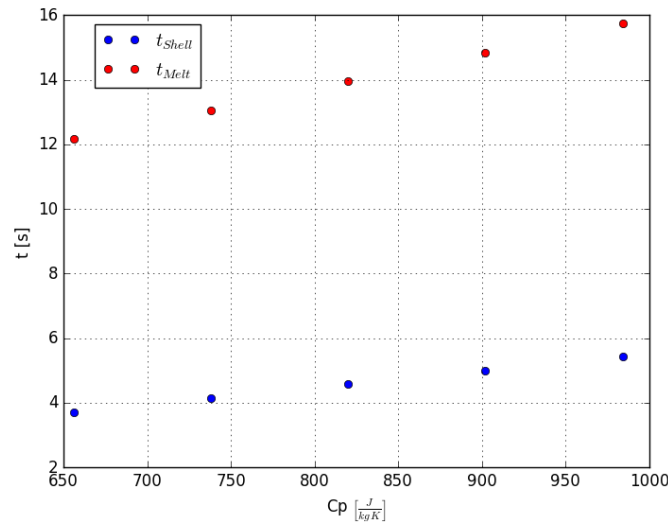


Figura 57 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de C_p de la partícula

El tiempo de fusión de la coraza aumenta de forma lineal al aumentar el valor del C_p de la partícula y esto está totalmente relacionado al aumento en el tamaño de la coraza formada (ver **Figura 57**). A mayores valores de C_p se forma más coraza y por consiguiente tarda más en fundirse.

Por otra parte el tiempo de fusión total aumenta de forma lineal al aumentar el valor del C_p de la partícula y esto resulta de acuerdo a lo esperado ya que se requiere más energía para llevar a la partícula desde la temperatura inicial hasta la temperatura de fusión.

Se puede observar que existe una diferencia en las pendientes entre el tiempo de fusión de la coraza y el tiempo de fusión total. El tiempo de fusión total es más sensible al cambio del C_p de la partícula, es decir tiene una mayor pendiente que el tiempo de fusión de la coraza.

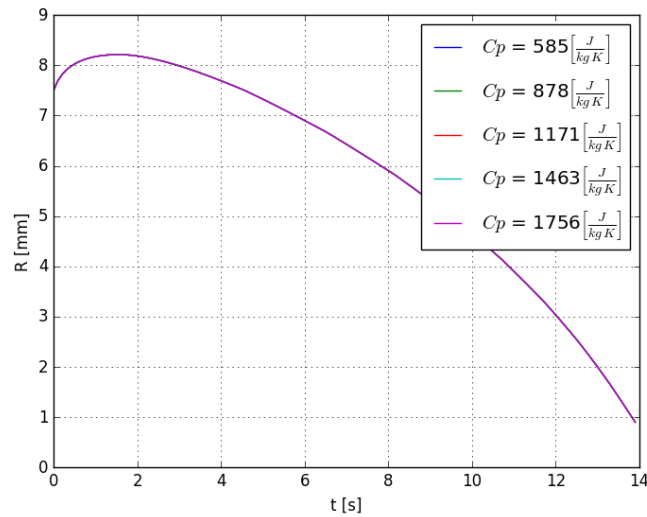


Figura 58 Curvas de R vs t para distintos valores de C_p del baño solidificado en la coraza

Se puede observar de la **Figura 58**, para el caso ejemplo, que no existe influencia del C_p de la coraza en este caso, esto es debido a que el tamaño de la coraza es muy pequeño y la temperatura de la coraza se modifica en menor medida. La influencia del C_p de la coraza comienza a ser importante sobre todo cuando se tiene un tamaño considerable ya que se requiere volver a calentar la coraza que solidificó y se enfrió durante su formación.

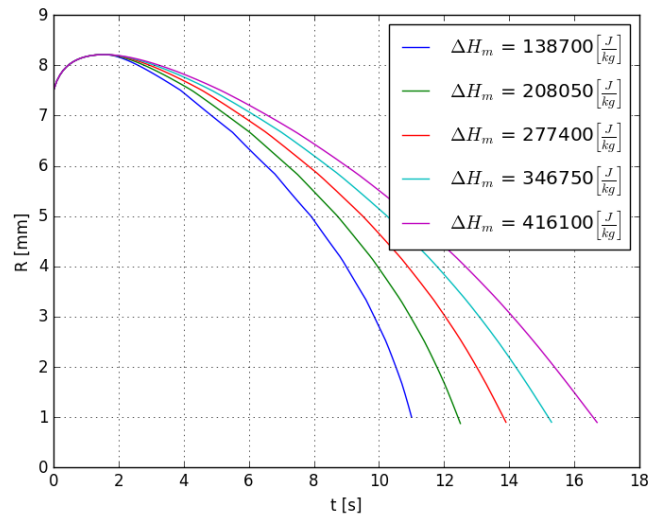


Figura 59 Curvas de R vs t para distintos valores de entalpía de fusión ΔH_m de la partícula

Al modificar la entalpía de fusión de la partícula no se tiene diferencias en la formación de la coraza ni en el radio máximo alcanzado (ver **Figura 59** para el caso ejemplo). La diferencia ocurre después de alcanzar la formación de la coraza cuando comienza a reducirse el tamaño de la partícula con la coraza ya formada. En general a mayor entalpía de fusión de la partícula se tiene mayor tiempo de fusión tanto de la coraza como del tiempo total. Esto resulta de acuerdo a lo esperado ya que a mayor entalpía de fusión menor será el desplazamiento de la frontera que se está fundiendo, el requerimiento energético es mayor para fundir el pellet.

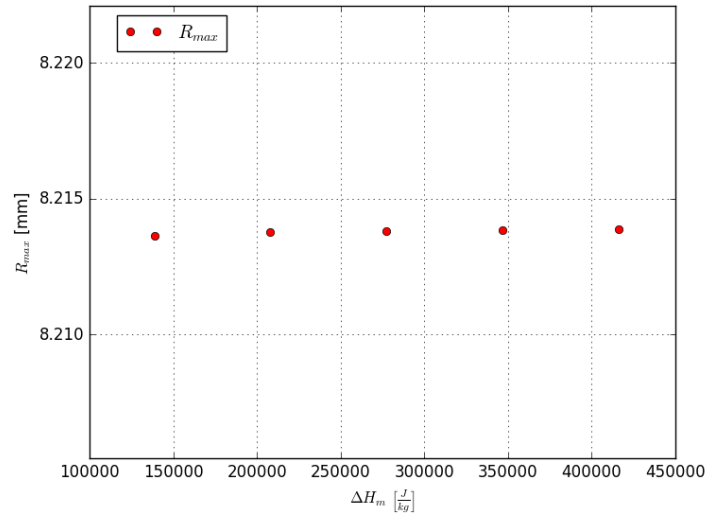


Figura 60 R máximo para distintos valores de entalpía de fusión ΔH_m de la partícula

Se puede ver de la **Figura 60** que no existe influencia en la formación de la coraza y el R máximo al modificar la entalpía de fusión de la partícula. Esto debido a que el desplazamiento de R se debe al flujo de energía exclusivamente.

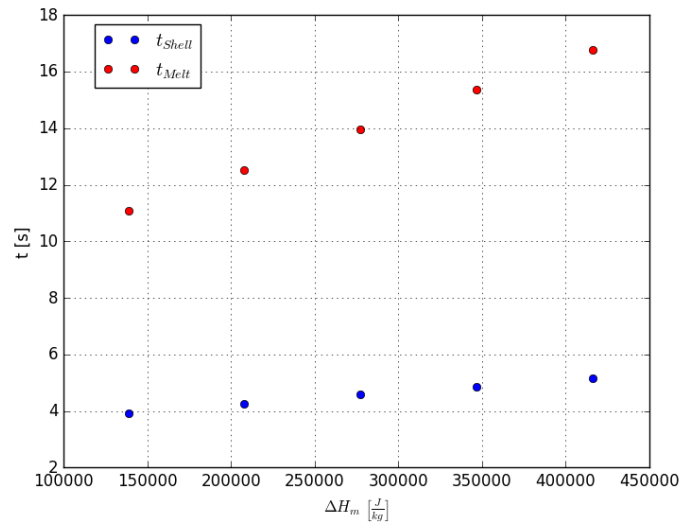


Figura 61 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de entalpía de fusión ΔH_m de la partícula

El tiempo de fusión de la coraza aumenta de forma lineal al aumentar el valor de la entalpía de fusión de la partícula y por otra parte el tiempo de fusión total también aumenta de forma lineal (Ver **Figura 61**). Esto resulta de acuerdo a lo esperado ya que se requiere más energía para fundir a la partícula una vez alcanzada la temperatura de fusión.

Se puede observar que existe una diferencia en las pendientes entre el tiempo de fusión de la coraza y el tiempo de fusión total. El tiempo de fusión total es más sensible al cambio en el valor de la entalpía de fusión de la partícula, es decir tiene una mayor pendiente que el tiempo de fusión de la coraza.

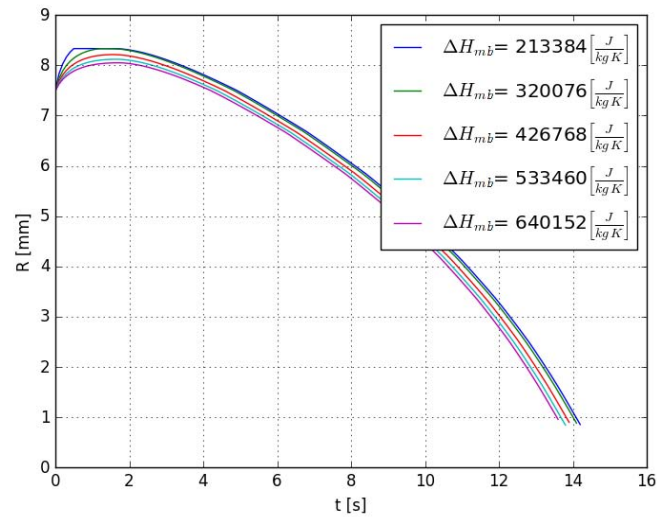


Figura 62 Curvas de R vs t para distintos valores de entalpía de fusión ΔH_m de baño

En las curvas de la **Figura 62** para el caso ejemplo, se puede observar poca influencia de la entalpía de fusión del baño sobre el tiempo de fusión, siendo que en general aumenta el tiempo de fusión al disminuir la entalpía de fusión.

El comportamiento que se observa durante la formación de la coraza es el aumento de la rapidez de formación al disminuir la entalpía de fusión y esto es debido a que se requiere menos energía para desplazar la frontera de solidificación.

Por otra parte si se forma la coraza a mayor velocidad esta no tiene el tiempo para enfriarse lo suficiente por lo que el radio máximo que se alcanza sí aumenta al disminuir la entalpía de fusión del baño, pero llega un punto en el cual no se



pueden alcanzar mayores tamaños de coraza por más que se disminuya la entalpía de fusión (ver **Figura 63**).

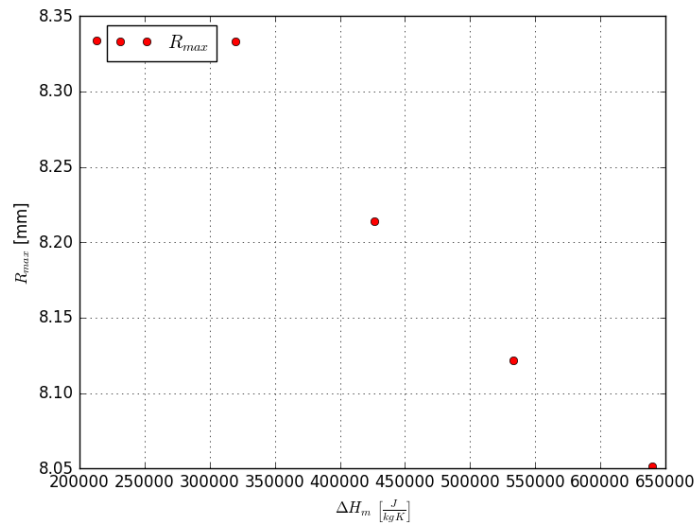


Figura 63 R máximo para distintos valores de entalpía de fusión ΔH_m del baño

En el comportamiento del radio máximo se puede apreciar que a menor entalpía de fusión del baño se alcanzan mayores tamaños de coraza de forma lineal sin embargo se llega a un valor en el cual ya no aumenta el radio máximo debido a que la coraza al formarse tan rápido no tiene tiempo para enfriarse y seguir creciendo.

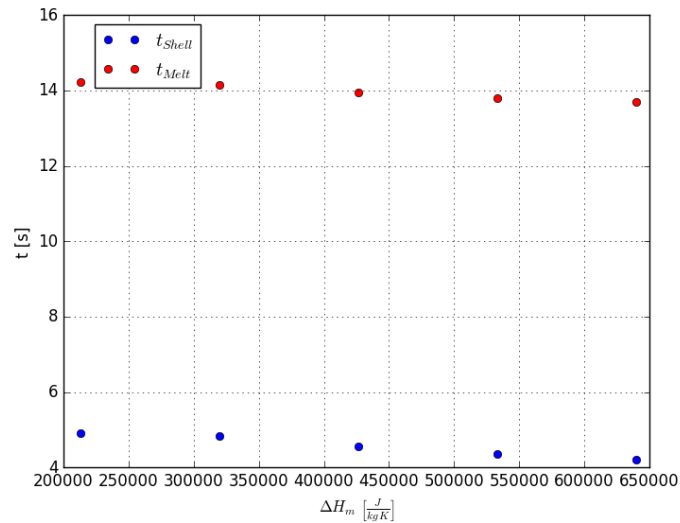


Figura 64 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de entalpía de fusión ΔH_m de la partícula

Se puede observar el comportamiento del tiempo de fusión de la coraza y tiempo total de fusión que ambos disminuyen al aumentar la entalpía de fusión del baño, sin embargo, ambos son poco sensibles ya que su pendiente negativa es de muy baja magnitud (ver **Figura 64**).

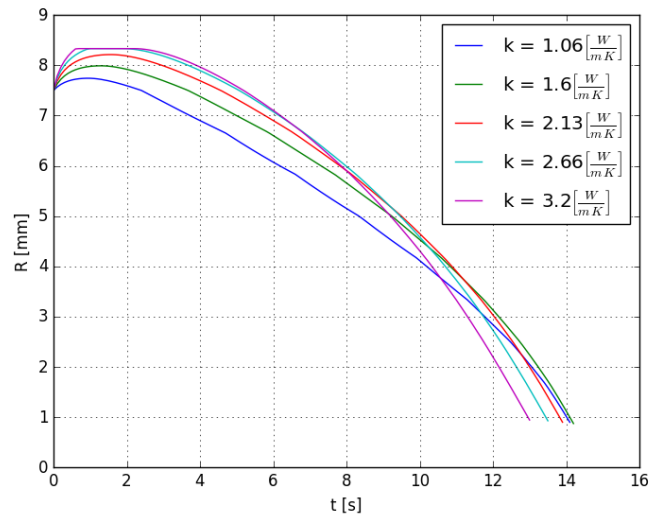


Figura 65 Curvas de R vs t para distintos valores de conductividad k de la partícula

Se puede observar en la rapidez con la que crece la coraza aumenta a mayor conductividad de la partícula (ver **Figura 65** para el cálculo ejemplo). Esto se debe al aumento en el flujo de calor por conducción que ocurre dentro de la partícula y que modifica el balance de calor en la intercara que a su vez aumenta la rapidez de crecimiento de la coraza. El tamaño de la coraza aumenta al aumentar la conductividad por el mismo motivo, sin embargo, se puede ver que si se aumenta demasiado la conductividad ya no aumenta el radio máximo y surge una meseta en vez de un solo máximo (ver **Figura 66**).

Al aumentar la conductividad térmica en general disminuye el tiempo de fusión tanto de la coraza como el total, sin embargo, existe un doble efecto ya que menor conductividad implica menor tamaño en la coraza formada por lo que si se



disminuye lo suficiente la conductividad se tiene menor tiempo de fusión total (ver

Figura 67).

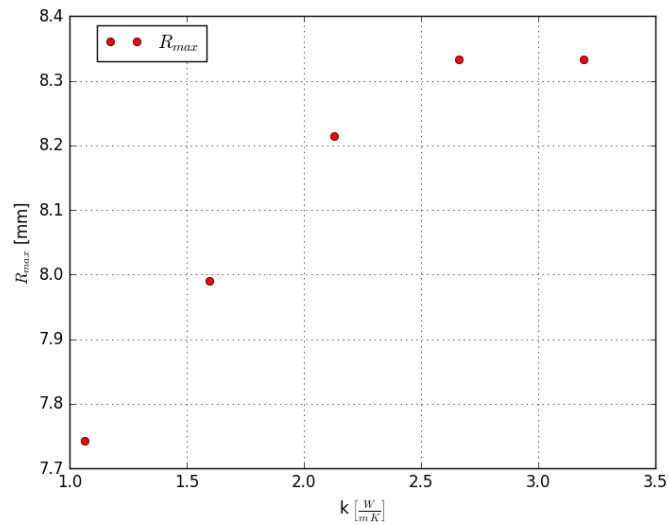


Figura 66 R máximo para distintos valores de conductividad k de la partícula

Se puede ver en el comportamiento del radio máximo que el tamaño de la coraza aumenta al aumentar la conductividad de la partícula hasta alcanzar un máximo.

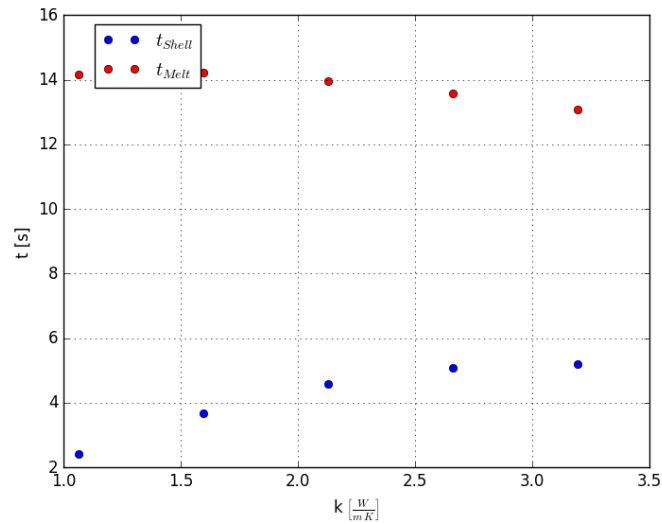


Figura 67 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de conductividad

Se puede ver de la **Figura 67** el aumento lineal en el tiempo de fusión de la coraza al aumentar la conductividad hasta alcanzar un valor máximo. Por otra parte el tiempo de fusión total disminuye al aumentar la conductividad viendo este doble efecto donde un aumento en la conductividad térmica del pellet disminuye el tiempo total de fusión, sin embargo, la formación de la coraza puede llegar a ser relevante ya que el aumento en la conductividad también promueve su formación.

Dentro de este efecto doble se encuentra un máximo en el tiempo de fusión total para un valor de $k = 1.6 \left[\frac{W}{mK} \right]$ donde se tiene mucha formación de coraza y un flujo de energía por conducción muy bajo lo cual hace que tarde mucho la partícula en fundirse. Si se modifica la conductividad se disminuye el tiempo total



de fusión ya sea por formar menos coraza o por el flujo alto de energía por conducción.

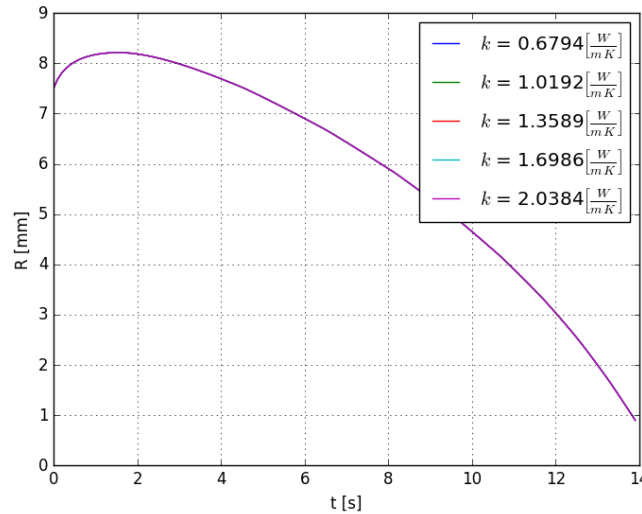


Figura 68 Curvas de R vs t para distintos valores de conductividad k del baño

Se puede observar de la **Figura 68** para el caso ejemplo, que la conductividad del baño no influye significativamente durante la fusión. Esto se debe a que la convección domina el intercambio de calor entre el baño y el pellet, siendo mucho menor la contribución por conducción.

Se puede observar en general que las variables ρ , k y C_p tienen un efecto similar debido a que afectan la difusividad térmica α dentro del material.

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} \tag{125}$$

En general la difusividad térmica limita el transporte de energía por conducción. En general al aumentar α se disminuye el tiempo de fusión ya que el flujo de calor por



conducción aumenta y la partícula se calienta más rápido pero también aumenta la rapidez a la que se forma la coraza y el radio máximo.

Se tiene en general un doble efecto: por una parte sí aumenta el flujo de energía por conducción dentro de la partícula esta se calienta más rápido pero por otra parte se forma más rápido la coraza y alcanza un mayor tamaño. La coraza en caso de crecer demasiado rápido no se enfría lo suficiente y ya no crece más.

La difusividad térmica de la coraza resulta importante cuando ya se tiene un tamaño de coraza importante cuando su tamaño es menor no limita el flujo de calor por conducción ya que el gradiente de temperatura dentro de la coraza es mayor.

Se puede observar que existe un máximo en el tiempo de fusión para distintos valores de α ya que se modifica el tamaño de la coraza, en general es difícil modificar la difusividad de la partícula o del baño sin embargo uno debe saber de este máximo debido al doble efecto.

A continuación se mostrarán otros resultados en los cuales se modifica la difusividad utilizando las variables ρ , k y C_p (ver **Figuras 69** a la **74**).

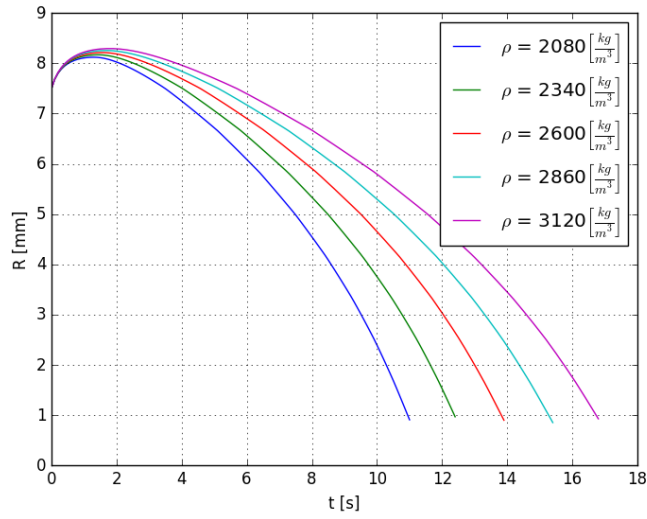


Figura 69 Curvas de R vs t para distintos valores de ρ de la partícula

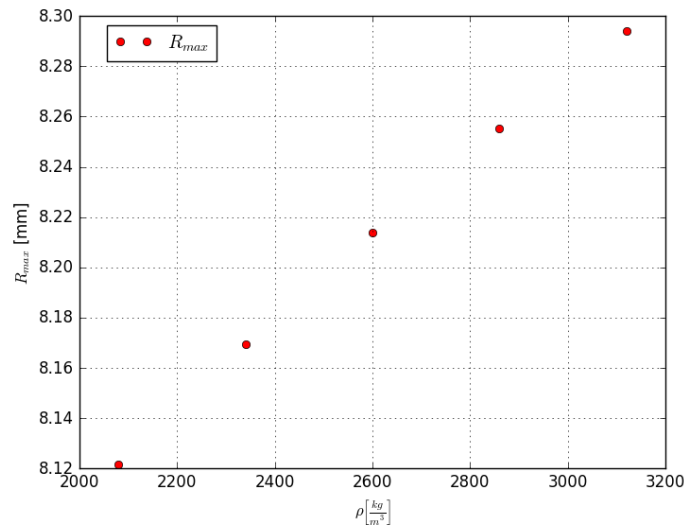


Figura 70 R máximo para distintos valores de ρ de la partícula

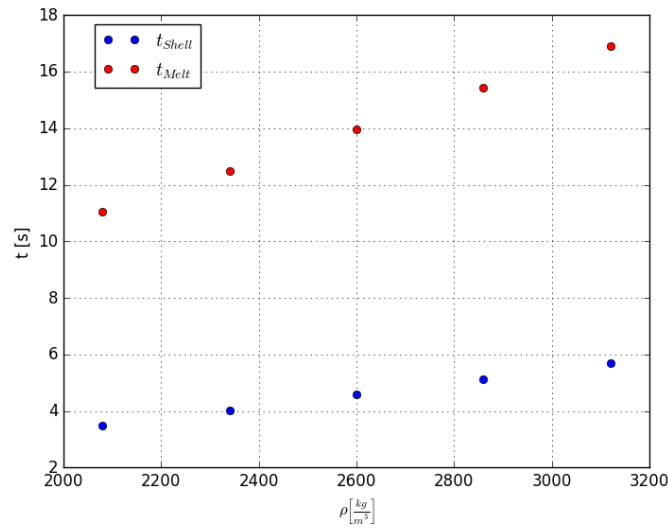


Figura 71 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de ρ de la partícula

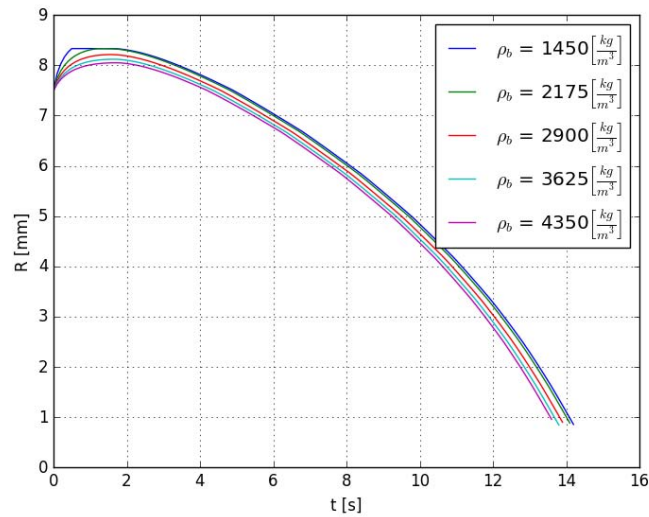


Figura 72 Curvas de R vs t para distintos valores de ρ del baño

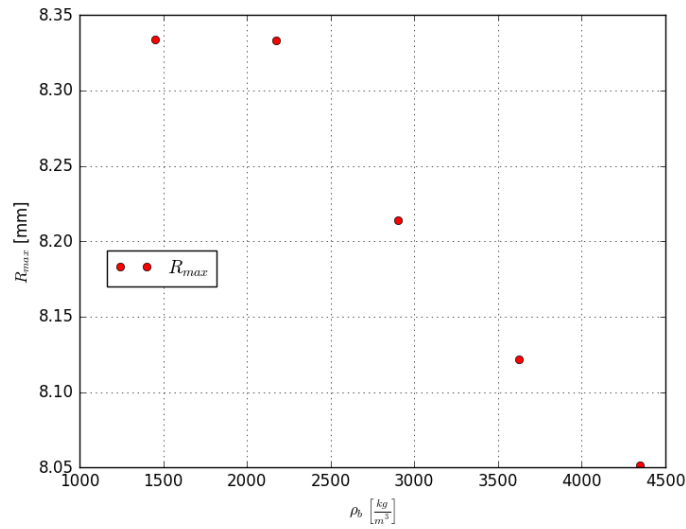


Figura 73 R máximo para distintos valores de ρ del baño

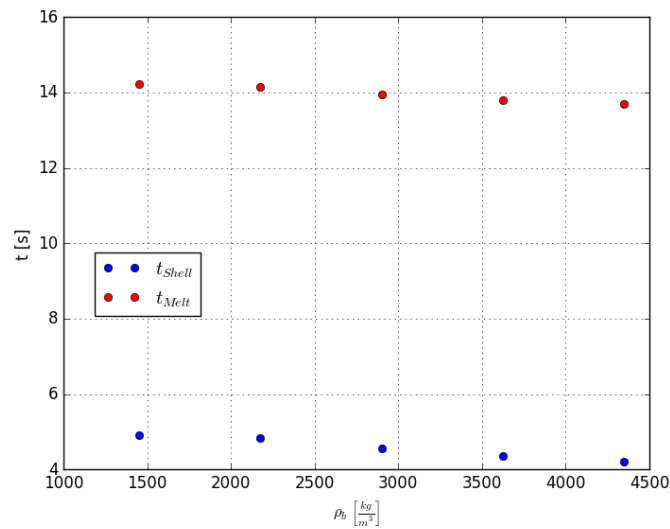


Figura 74 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de ρ del baño



A continuación se evaluarán variables de proceso para las cuales se tiene más control como la temperatura de inmersión T_0 , la temperatura del baño T_∞ y la agitación a través del coeficiente de transferencia de calor por convección h . Esto permitirá encontrar las mejores condiciones para un menor tiempo de fusión.

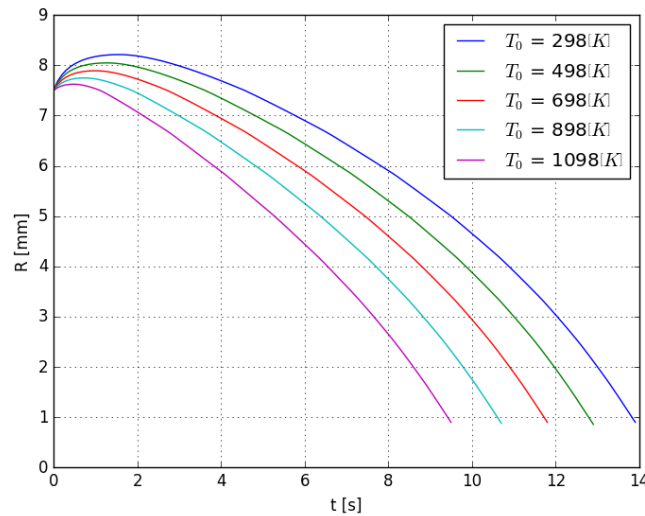


Figura 75 Curvas de R vs t para distintos valores de T_0

Se puede observar en la **Figura 75** para el cálculo con las condiciones del caso ejemplo pero variando la temperatura de inmersión de la partícula, que en general se obtiene mayor coraza al tener una temperatura de inmersión más baja esto debido al aumento en el flujo de calor por conducción que se requiere para calentar la partícula. Se tiene un mayor tiempo de fusión debido a la mayor formación de coraza, pero además debido al requerimiento energético para aumentar la temperatura de la partícula.

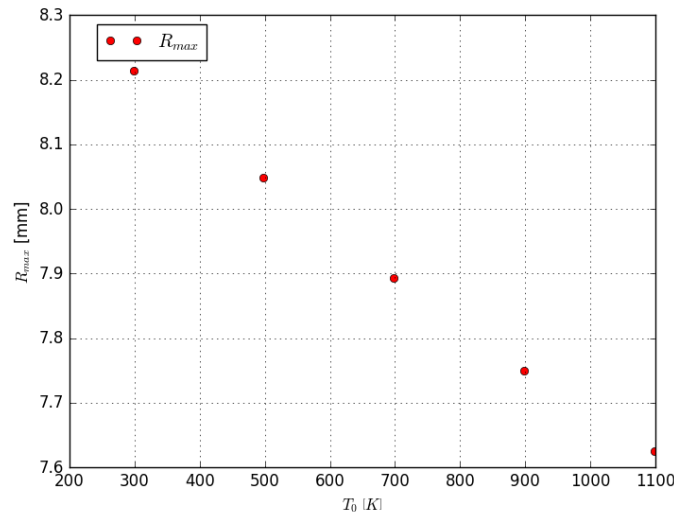


Figura 76 R máximo para distintos valores de T_0

La tendencia en el tamaño de la coraza es totalmente lineal donde al aumentar la temperatura inmersión T_0 se obtiene un valor más bajo en R_{max} (ver **Figura 76**).

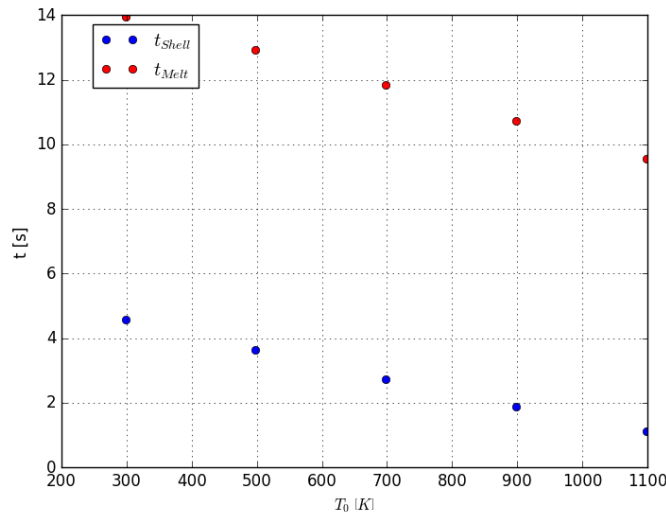


Figura 77 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de T_0



Se puede observar de la **Figura 77**, de igual forma una disminución lineal del tiempo de fusión al aumentar la temperatura de inmersión. Se puede ver que el tiempo de fusión de la coraza y el tiempo de fusión total tienen la misma sensibilidad a la temperatura de inmersión, esto se observa en la pendiente similar de ambas curvas.

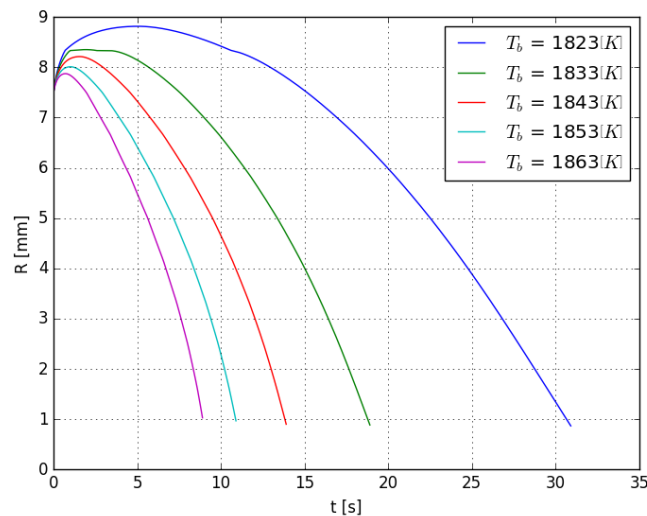


Figura 78 Curvas de R vs t para distintos valores de temperatura del baño T_b

Se puede observar claramente el aumento en la formación de coraza al disminuir la temperatura del baño (ver **Figura 78** para el caso ejemplo), y esto es debido a la diferencia con la temperatura de la superficie, la cual se supone está a la temperatura de fusión.

Al disminuir la temperatura del baño esta se acerca a la temperatura de fusión a la cual se encuentra la superficie por lo que el flujo de energía por convección disminuye y es este flujo el responsable de la rapidez de fusión.

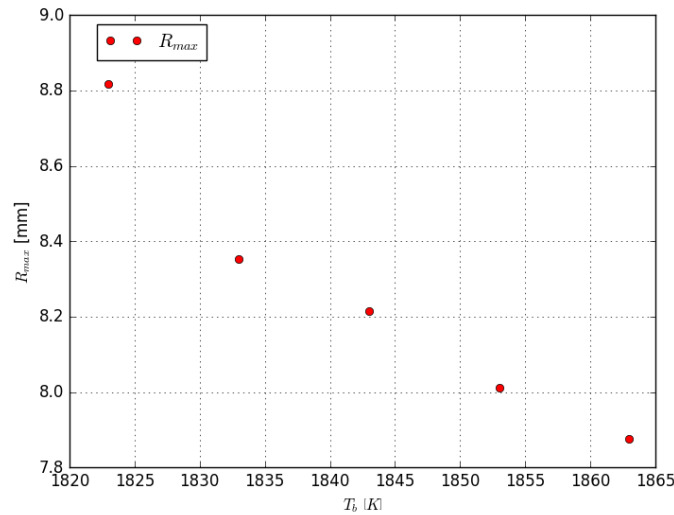


Figura 79 R máximo para distintos valores de temperatura del baño T_b

Se puede observar de la **Figura 79** que el aumento en la formación de coraza al disminuir la temperatura del baño y se puede ver que la tendencia es crecer exponencialmente cuando se aproxima la temperatura del baño a la temperatura de fusión del sólido.

De nuevo esto se debe a la disminución del flujo de calor por convección al reducir la diferencia de temperatura entre el baño y la superficie de la partícula.

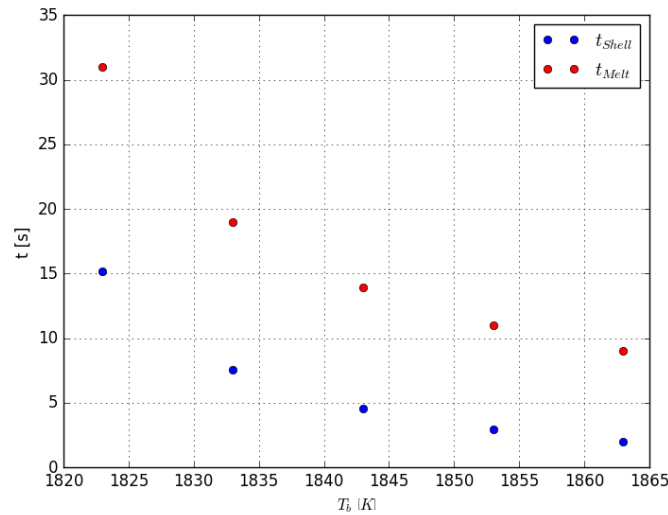


Figura 80 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de temperatura del baño T_b

En el comportamiento del tiempo de fusión tanto de la coraza como total es la disminución al aumentar la temperatura del baño (ver **Figura 80**).

Se puede ver que el tiempo de fusión aumenta exponencialmente al acercarse a la temperatura de fusión a la cual se encuentra la superficie. En general al sobre-calentar el baño por encima de la temperatura de fusión se logra abatir de forma exponencial el tiempo de fusión.

Por último, este abatimiento del tiempo de fusión que se logra al sobre-calentar el baño se vuelve menos importante ya que el tiempo de fusión tiende asintóticamente a un valor mínimo. Este mínimo en el tiempo de fusión ocurre al tener un flujo de calor por conducción dentro de la partícula despreciable con respecto al flujo de calor por convección por parte del baño.

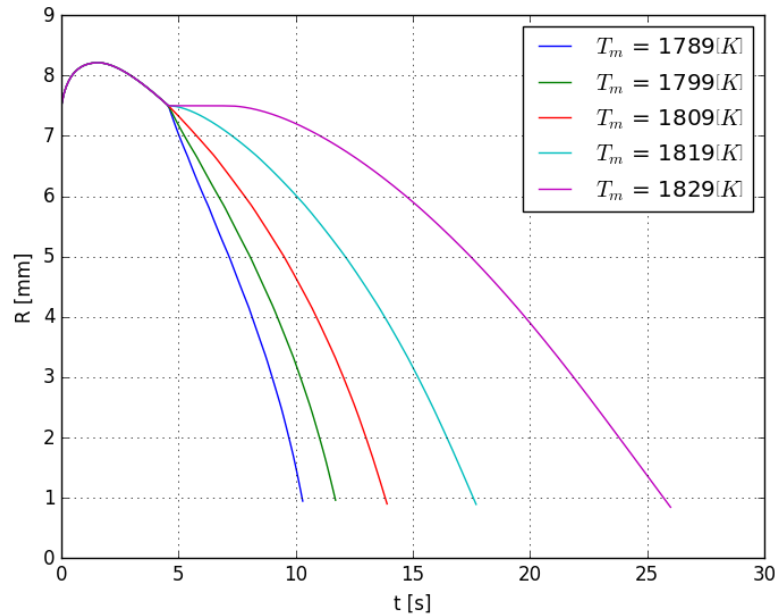


Figura 81 Curvas de R vs t para distintos valores de temperatura de fusión de la partícula

Se puede observar claramente de la **Figura 81**, que al variar la temperatura de fusión de la partícula, no hay influencia en la formación y tamaño de la coraza. Este mismo efecto se puede ver en la **Figura 82** donde se ve que no cambia el radio máximo de la coraza con la temperatura de fusión del baño.

Al aumentar la temperatura de fusión se puede observar que el tiempo de fusión aumenta considerablemente incluso una vez fundida la coraza el radio permanece constante por un tiempo hasta que el flujo de energía es suficiente y la temperatura cerca de la superficie ha aumentado lo suficiente para comenzar a decrecer el radio.



Este resultado en general se puede explicar argumentando que se requiere mayor cantidad de energía suministrada al pellet para aumentar la temperatura en caso de tener un punto de fusión más alto.

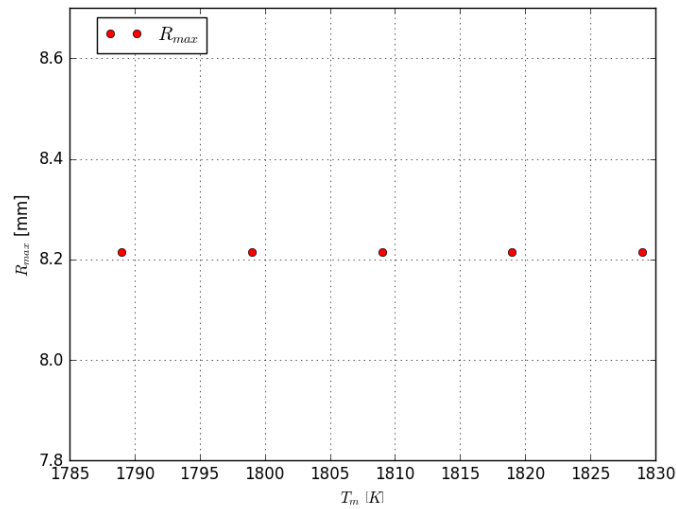


Figura 82 R máximo para distintos valores de temperatura de fusión de la partícula

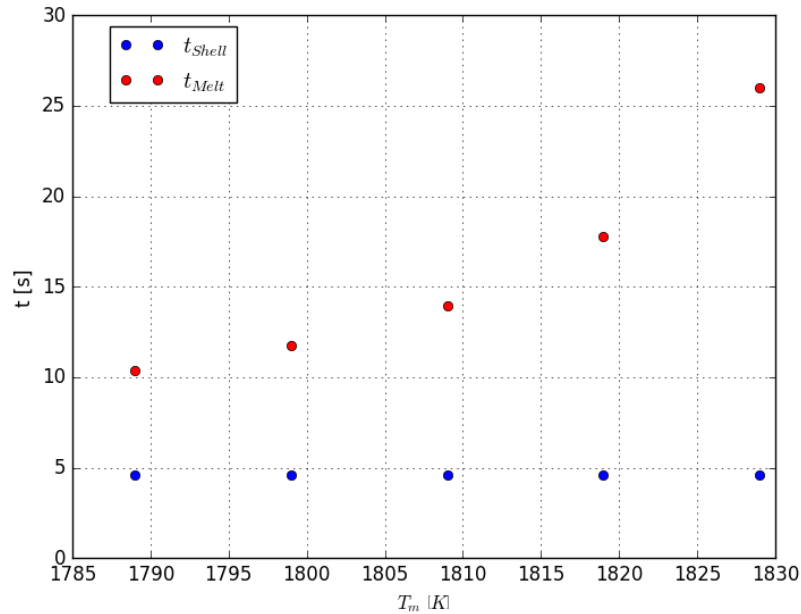


Figura 83 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de temperatura de fusión de la partícula

El tiempo de fusión de la coraza y el tamaño de esta no se ven modificados al tener distintas temperaturas de fusión pero el tiempo de fusión aumenta de manera exponencial.

Por otra parte el tiempo de fusión total crece exponencialmente conforme la temperatura de fusión de la partícula se acerca a la temperatura del baño, esto debido a que si se tiene una temperatura del baño cercana a la temperatura de fusión será difícil llevar a cabo la transformación de fase de sólido a líquido ya que esto requiere un flujo de energía extra (ver **Figuras 83 y 84**).

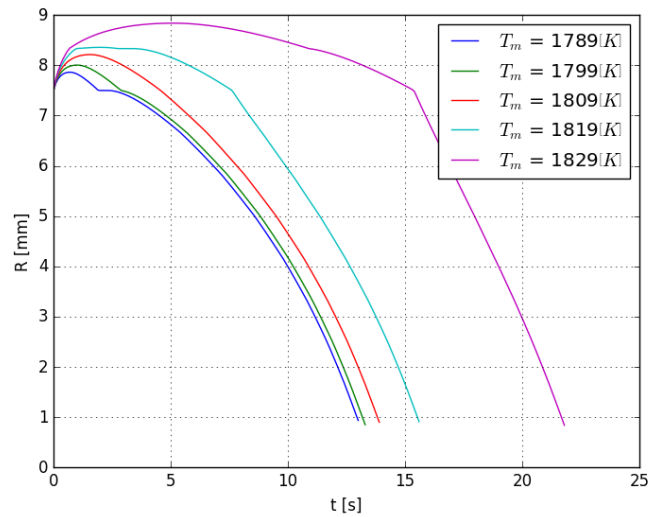


Figura 84 Curvas de R vs t para distintos valores de temperatura de fusión del baño

Se puede observar claramente que el tamaño y la rapidez con la que se forma la coraza aumenta al aumentar la temperatura de fusión del baño (ver **Figura 84** para el caso ejemplo). Cuando la temperatura de fusión del baño es mucho menor a la de la partícula se puede incluso terminar de fundir la coraza y tener un intervalo en el que no se funde la partícula solo se calienta.

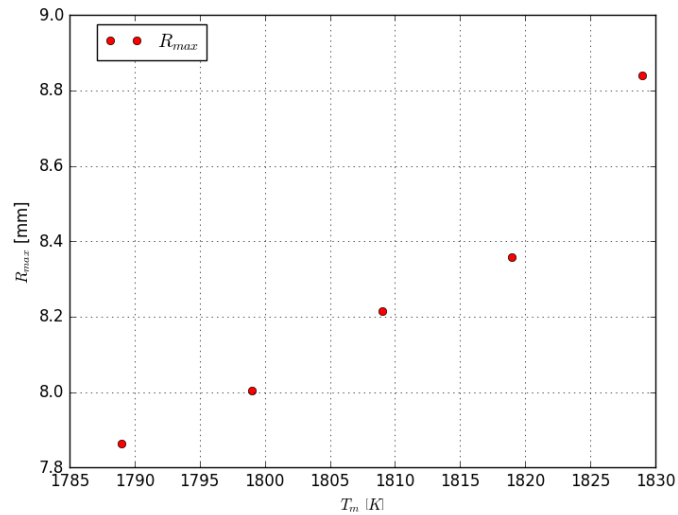


Figura 85 R máximo para distintos valores de temperatura de fusión del baño

Se puede observar el aumento en el tamaño de la coraza prácticamente lineal o ligeramente parabólico con el aumento de la temperatura de fusión del baño (ver **Figura 85**). Esto se debe a que el flujo de energía por convección está determinado por la diferencia de temperatura entre el baño y la superficie que está a la temperatura de fusión. Al disminuir esta diferencia de temperatura el flujo de energía por conducción hacia el interior de la coraza y partícula promueve la solidificación del baño.

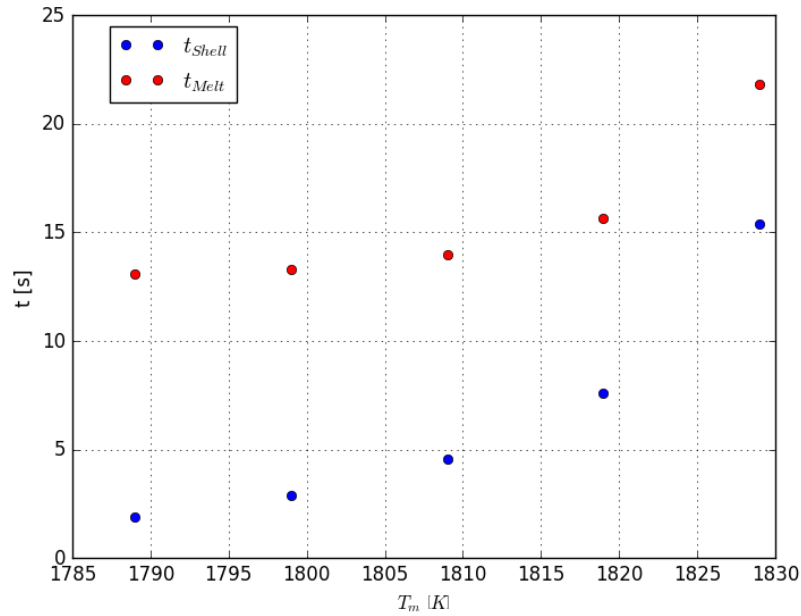


Figura 86 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de temperatura de fusión del baño

El tiempo de fusión de la coraza y el total crecen de forma exponencial al acercarse a la temperatura del baño esto se debe a que al estar el baño y la superficie en contacto casi a la misma temperatura no existe el flujo de energía necesario para llevar a cabo la fusión (ver **Figura 86**).

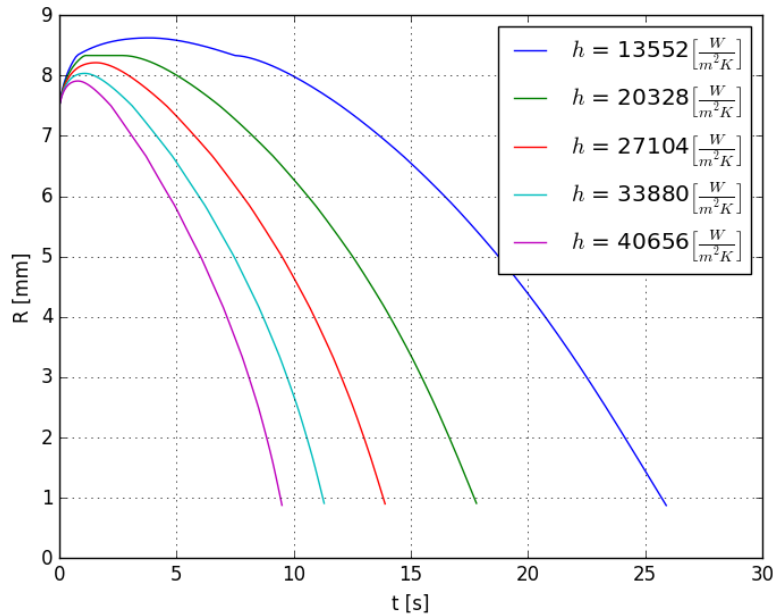


Figura 87 Curvas de R vs t para distintos valores de coeficiente de transferencia de energía h (agitación)

Se puede observar claramente que el tamaño y la rapidez con la que se forma la coraza aumenta al aumentar la agitación (ver **Figura 87** con las condiciones del caso ejemplo). Esto se debe a que el flujo de energía por convección es el responsable de hacer decrecer el radio de la partícula por lo que si se tiene poca agitación la coraza aumentará en tamaño y la fusión en general se llevará a cabo con menor rapidez.

Este efecto de la agitación también resulta evidente al pensar que el baño se enfría al estar en contacto con la partícula por lo que si hay mayor agitación la partícula estará en contacto con fluido que aún no se ha enfriado promoviendo la fusión.

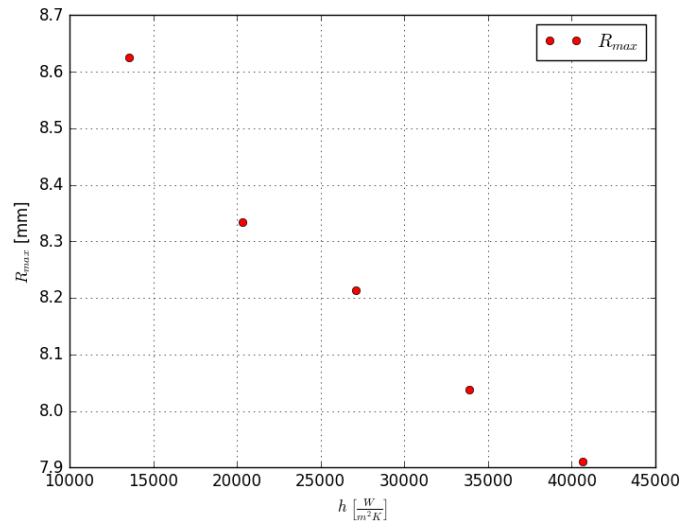


Figura 88 R máximo para distintos valores de coeficiente de transferencia de energía h (agitación)

Se puede observar la disminución en el tamaño de la coraza prácticamente lineal o ligeramente parabólico con el aumento de la agitación (ver **Figura 88**). Esto se debe a que el flujo de energía por convección está determinado el coeficiente de transferencia de energía. Al aumentar el flujo de energía por convección esto evita la formación de coraza.

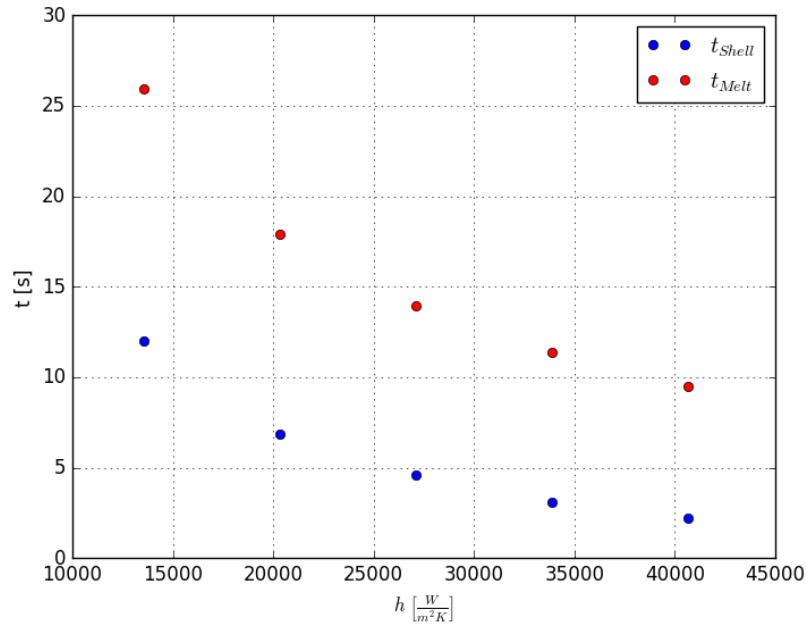


Figura 89 Tiempo de fusión de la coraza t_{shell} y tiempo de fusión total t_{Melt} para distintos valores de coeficiente de transferencia de energía h (agitación)

El tiempo de fusión de la coraza y el total aumentan de forma exponencial al disminuir el coeficiente de energía o la agitación. Esto se debe a que en ausencia de agitación el flujo de energía por conducción hacia el interior de la partícula formaría una coraza cada vez más grande (ver **Figura 89**).

Usualmente el coeficiente de transferencia de energía h tiene una dependencia con el radio de la partícula esférica. Esto se puede observar en correlaciones para h ya sean de convección natural o forzada.



A continuación se mostrará esta dependencia de coeficiente de transferencia de energía con el radio de la partícula para convección forzada (Ec. 126 y **Figura 90**).

$$Nu = 2 + (0.4 Re^{1/2} + 0.06 Re^{2/3}) Pr^{0.4} \left(\frac{\mu}{\mu_s} \right)^{1/4} \quad (126)$$

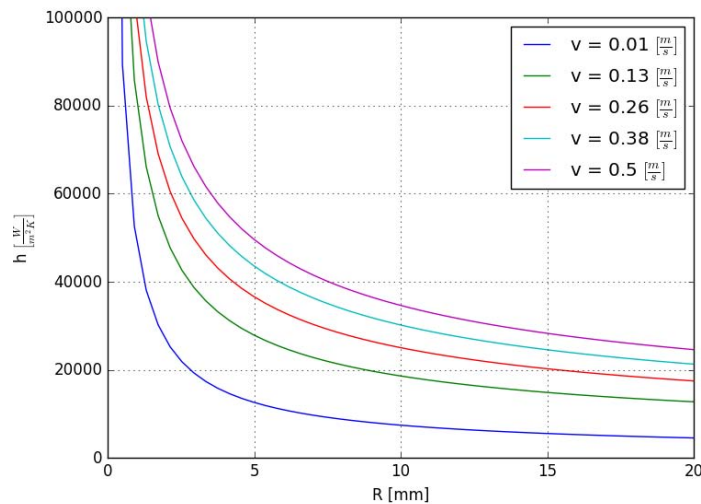


Figura 90 Dependencia de h con R para distintas velocidades en correlaciones de convección forzada.

A continuación se mostrará esta dependencia de coeficiente de transferencia de energía con el radio de la partícula para convección natural (Ec. 127 y **Figura 91**).

$$Nu = 2 + 0.6 Gr^{1/4} Pr^{1/3} \quad (127)$$

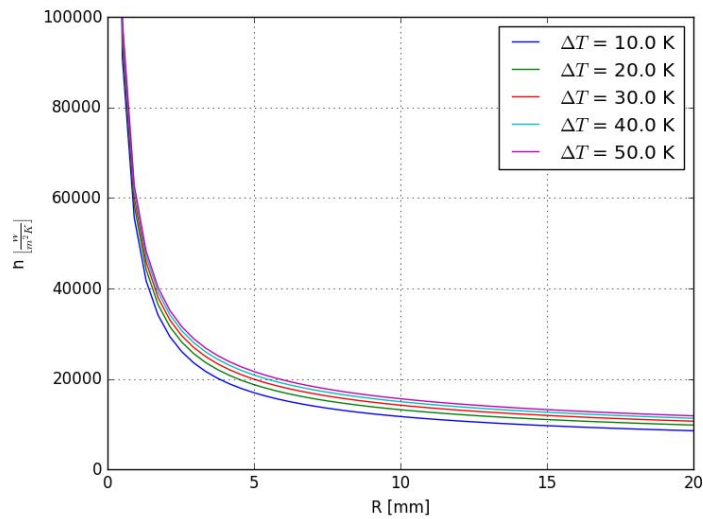


Figura 91 Dependencia de h con R para distintos valores de ΔT entre el baño y la superficie para convección natural

En ambos casos, ya sea convección natural o forzada, el coeficiente de transferencia de energía tiende a ∞ cuando R tiende a 0 por lo que al disminuir el tamaño de la partícula y coraza durante su fusión se espera que la transferencia de energía por convección aumente, al igual que la rapidez de fusión.

Se realizaron cálculos considerando esta dependencia de h con R se integraron numéricamente para obtener un valor promedio durante la fusión. Posteriormente se evaluó la diferencia en el resultado del modelo y el resultado se graficó en la **Figura 92**.

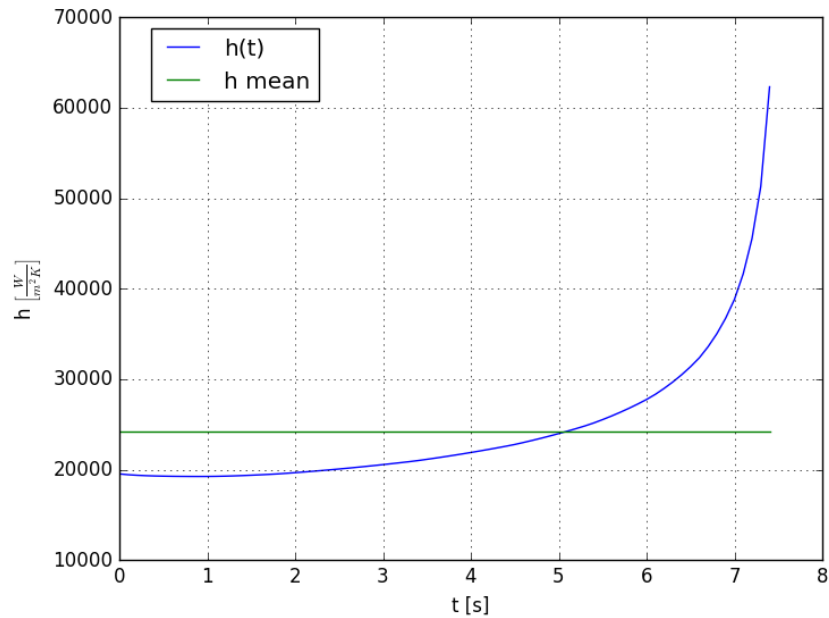


Figura 92 Comportamiento del valor de h durante la fusión y valor promedio

Se puede ver que para aproximadamente el 80 % de la fusión el valor promedio no difiere mucho del valor obtenido utilizando la correlación. Sin embargo, al disminuir el radio drásticamente se puede observar que el valor de h aumenta drásticamente.

En la **Figura 93** se muestra la diferencia en la curva R vs t usando una correlación y usando un valor constante de h , donde claramente se observa que se modifica la forma de la curva sobre todo en la forma y durante el último 20 % del lapso de la fusión.

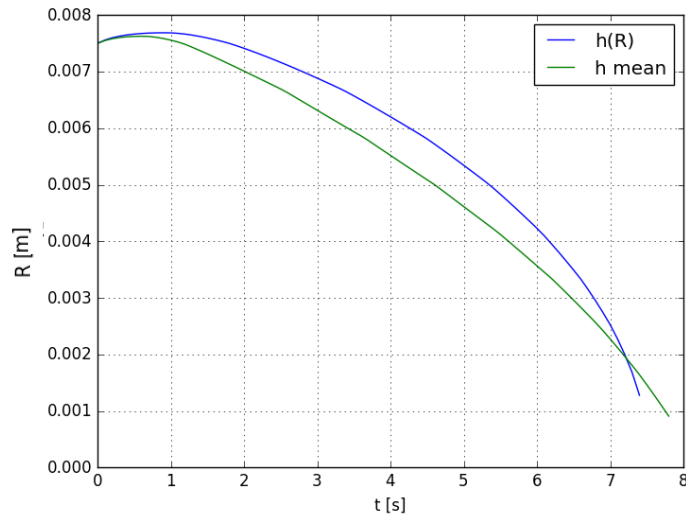


Figura 93 Curvas de R vs t para distintos coeficiente de transferencia de energía h usando correlación o valor promedio

Para evaluar la reacción química que ocurre dentro de la partícula se tomó una constante cinética y una entalpía de reacción con dependencia con la temperatura (ver **Figura 94** y **95** respectivamente) ya que esta cambia significativamente durante la fusión.

Como reacción química se piensa que se tiene carbón dentro de la partícula o pellet de DRI, el cual al estar en contacto con el baño y al ser porosa, reacciona con el oxígeno del aire o disuelto en el acero provocando una reacción de combustión. El valor de la constante cinética puede variar varios órdenes de magnitud dependiendo del área superficial o morfología del carbón y la disponibilidad de oxígeno.

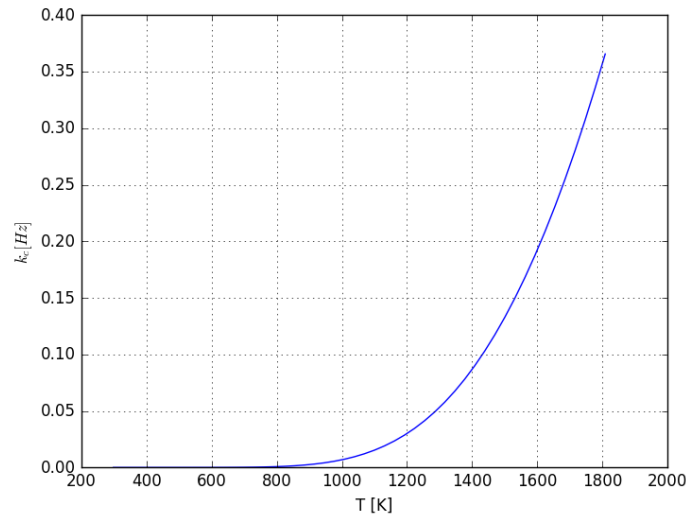


Figura 94 Dependencia de la constante cinética con la temperatura

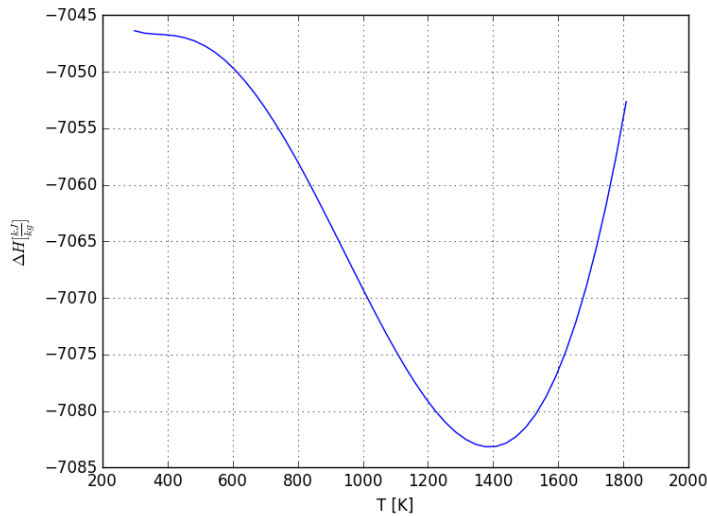


Figura 95 Dependencia de la entalpía de la reacción con la temperatura

La entalpía de la reacción claramente es exotérmica (negativa) y tiene un mínimo cerca de 1400 K donde se libera la mayor cantidad de energía al reaccionar (ver **Figura 95**).



La concentración de carbón que se utilizó fue de 1% en peso de acuerdo a datos experimentales proporcionados por la planta de DRI (ver **Apéndice 1**).

En la **Figura 96** se muestra una gráfica para los perfiles de concentración de este reactivo *A* dentro del pellet para distintos tiempos. Se puede observar en la escala que no se modifica considerablemente la concentración del reactivo ni dentro del pellet ni con el tiempo debido a una cinética demasiado lenta. Esto provocaría que la mayor parte del reactivo reaccionara en el baño aumentando su temperatura y agitación.

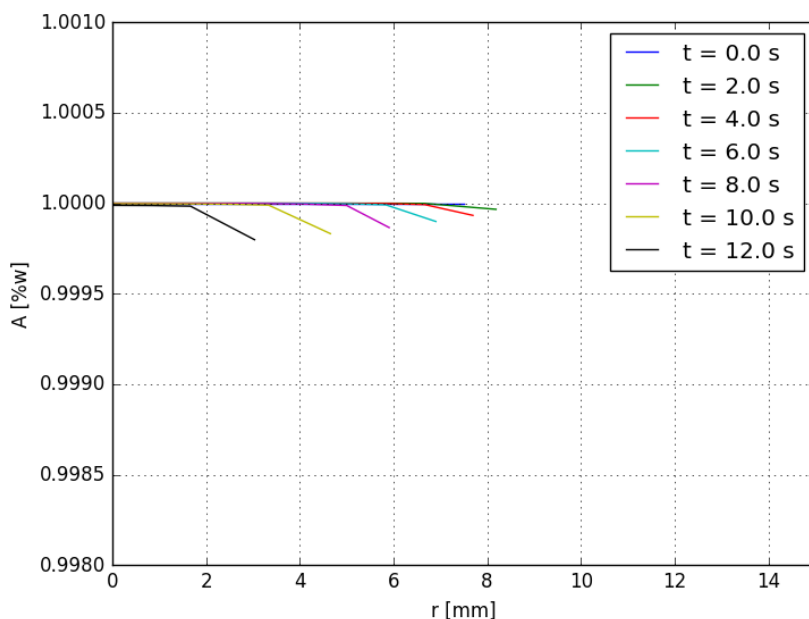


Figura 96 Perfiles de concentración del reactivo A para distintos tiempos

Si se aumenta la cinética de reacción 100 veces y la energía de activación se toma como la décima parte se obtienen los siguientes resultados reportados en la **Figura 97** y **98** respectivamente.

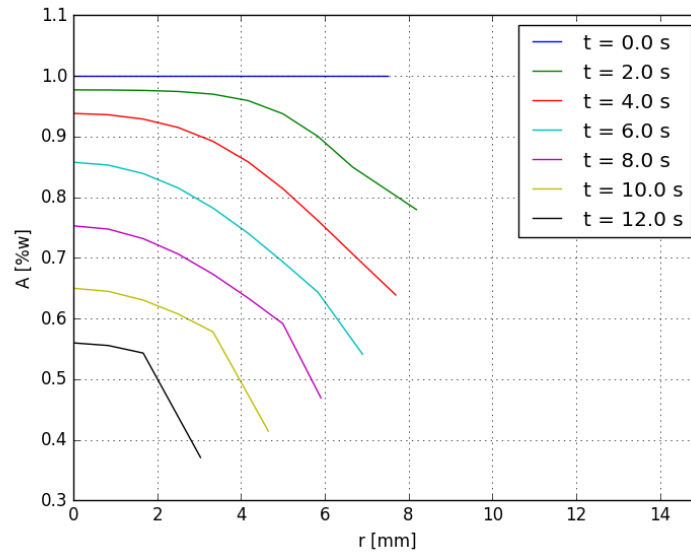


Figura 97 Perfiles de concentración del reactivo A para distintos tiempos aumentando 100 veces la constante cinética respecto al caso ejemplo

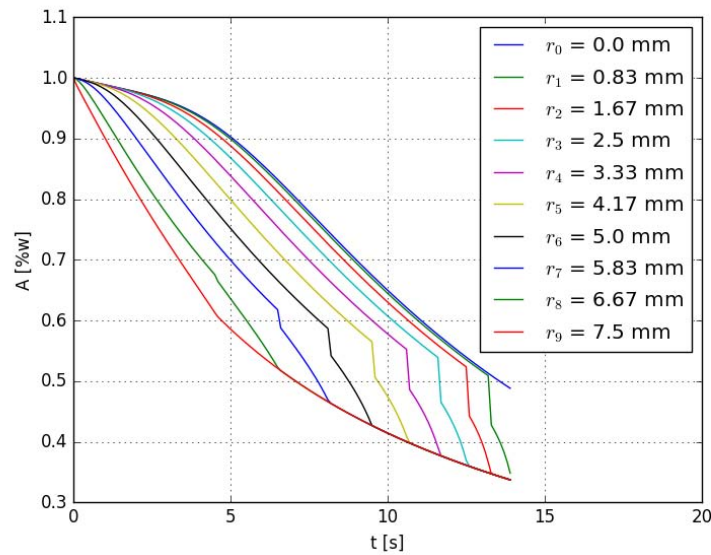


Figura 98 Perfiles de concentración del reactivo A para distintas posiciones de r disminuyendo la energía de activación a la décima parte respecto al caso ejemplo



Claramente se observan los perfiles parabólicos en la concentración de forma invertida con respecto a la temperatura. A pesar de tener una buena cinética no se obtuvo una diferencia significativa en el tiempo de fusión ya que se tiene una muy baja cantidad de reactivo y por lo tanto no se modifica el balance energético con la reacción exotérmica.

Otra parte más importante es la cantidad de reactivo que no reacciona dentro de la partícula sino en el baño donde aumenta su temperatura pero más importante promueve la agitación. Agitación extra se producirá al liberarse gas CO como producto de la reacción de combustión de carbono y que modificaría el valor del coeficiente de calor por convección.

3.3.3. Resultados modelo 3

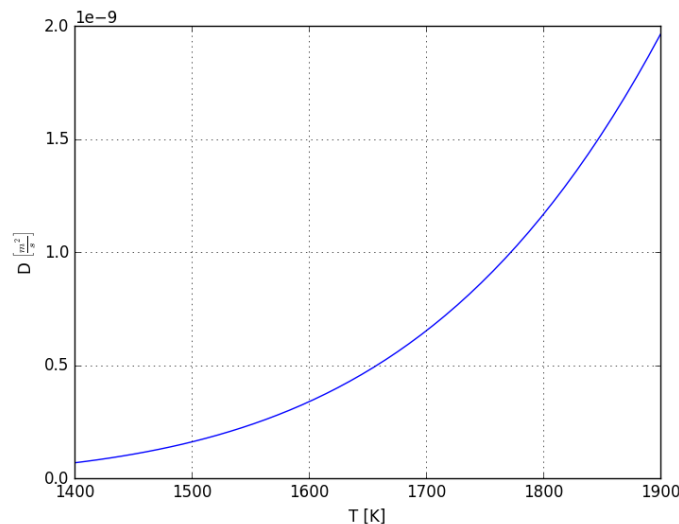


Figura 99 Dependencia del coeficiente de difusión D con la temperatura



El coeficiente de difusión de carbono en hierro puro muestra claramente una dependencia exponencial con la temperatura como se aprecia en la **Figura 99**.

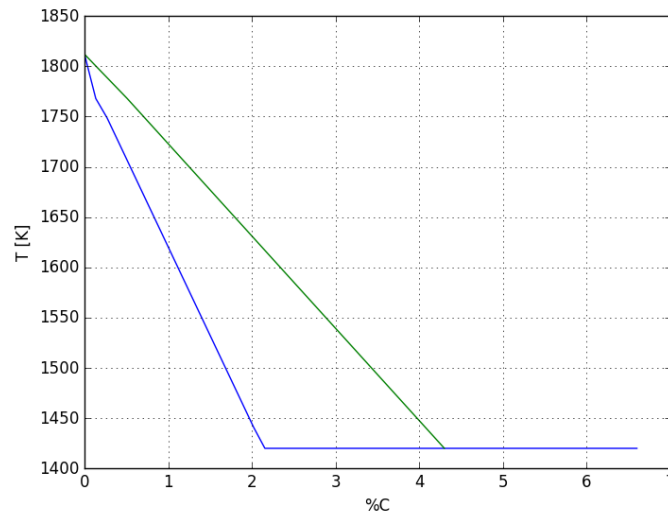


Figura 100 línea de liquidus (verde) y solidus (azul) para el diagrama de fases Fe-C usando interpolación lineal

Para obtener la temperatura de fusión del sistema se utilizaron las líneas de liquidus y solidus el diagrama de fases Fe-C graficadas en la **Figura 100**. Se realizó interpolación lineal entre puntos críticos conocidos como el punto eutéctico.

La concentración de carbono para el sistema es la responsable de abatir el punto de fusión de la partícula ya que este al tener una menor concentración tiene un rango de fusión más elevado.

En la **Figura 101** se muestran resultados de la difusión de carbón dentro de la partícula en caso de ser de hierro puro, a través de presentar segundo a segundo durante la fusión los perfiles de concentración de carbono en el pellet.

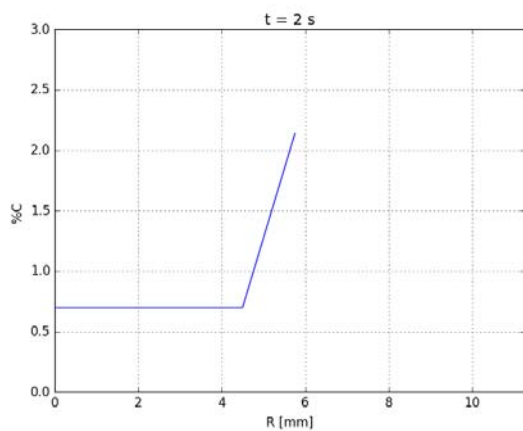
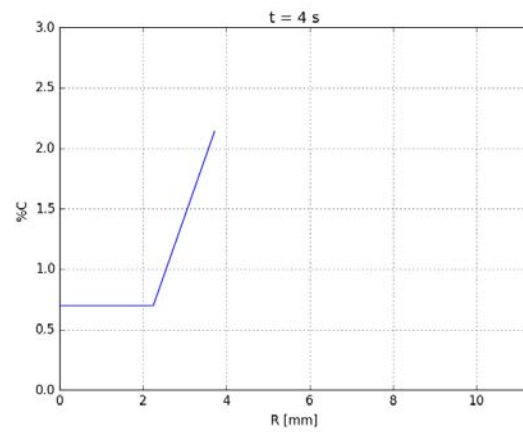
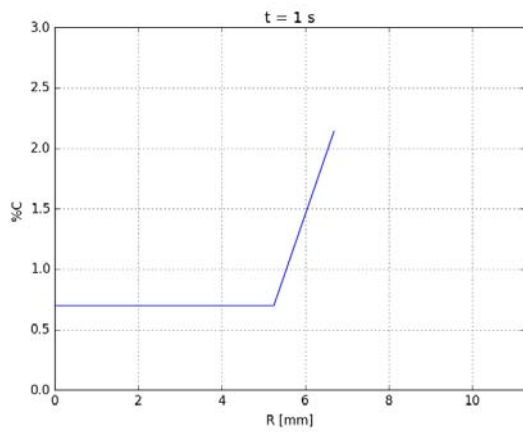
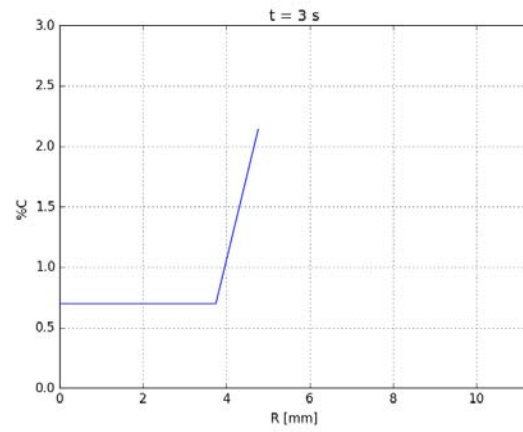
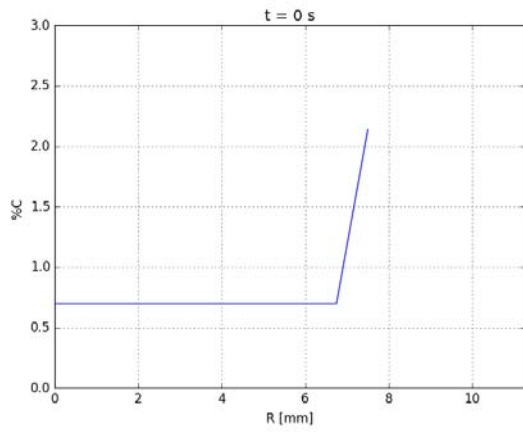


Figura 101 Perfiles de concentración de carbono para distintos tiempos dentro de la partícula

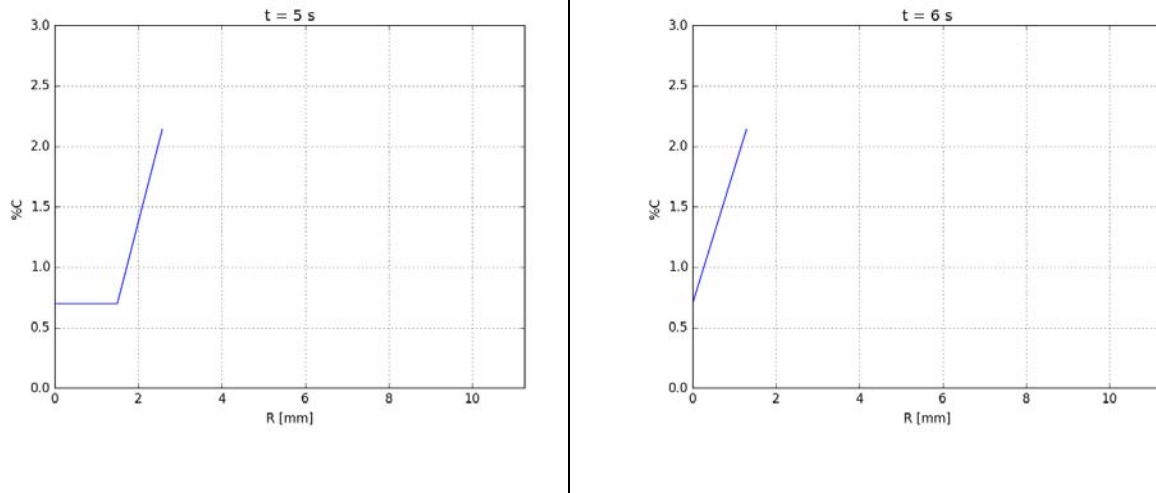


Figura 101 Perfiles de concentración de carbono para distintos tiempos dentro de la partícula (continuación)

Se puede observar que la concentración no se modifica en el interior de la partícula durante los pocos segundos que dura la fusión lo que ocurre es que debido a la convección el coeficiente de transferencia de masa k_D concentra carbono en la superficie abatiendo el punto de fusión.

En la **Figura 102** se muestra el comportamiento de la temperatura de fusión dentro de la partícula segundo a segundo durante la fusión en función del contenido de carbono (línea verde) junto con el perfil de temperaturas dentro del pellet (línea azul), en donde se puede observar que la temperatura de fusión solo se abate para la zona cercana a la superficie en contacto con el baño.

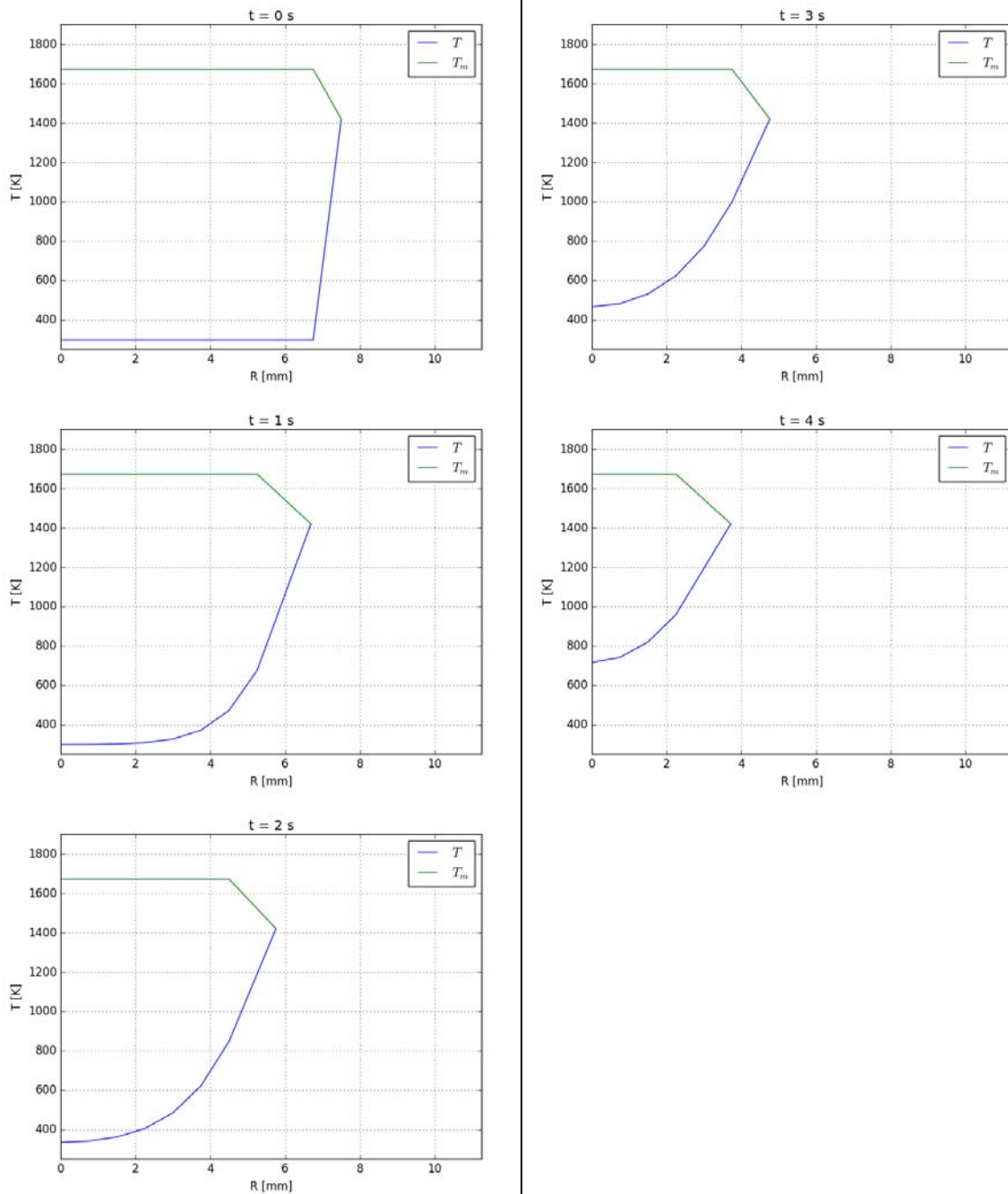


Figura 102 Perfiles de temperatura de fusión en verde y temperatura dentro de la partícula en azul

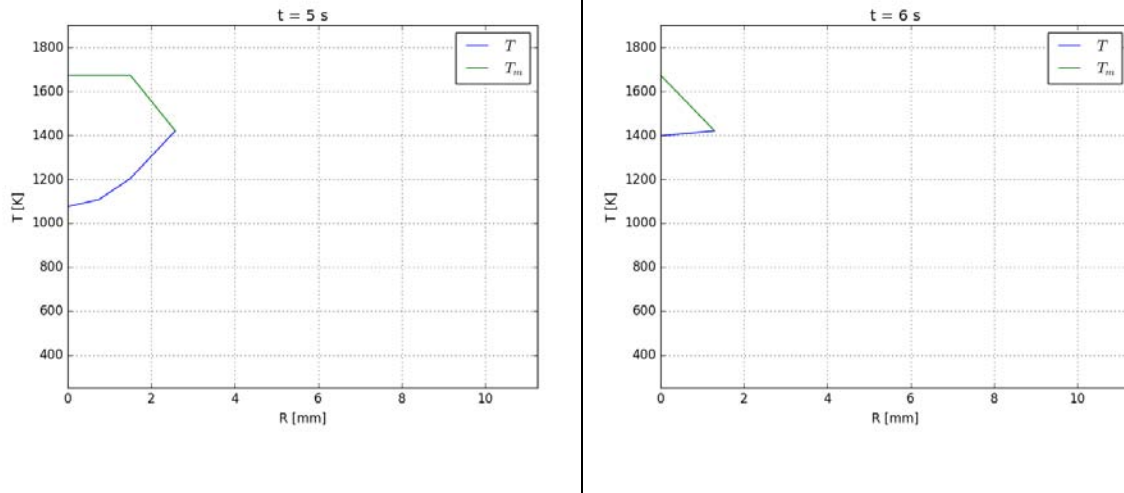


Figura 102 Perfiles de temperatura de fusión en verde y temperatura dentro de la partícula en azul (continuación)

En los cálculos que se presentan a continuación en la **Figura 103**, donde se presentan los perfiles de concentración de carbono en el pellet segundo a segundo durante la fusión, se disminuyó la energía de activación a una décima parte ya que la porosidad promueve la difusión, con esto se espera obtener un abatimiento de la temperatura de fusión debido a la difusión de carbono hacia el interior de la partícula.

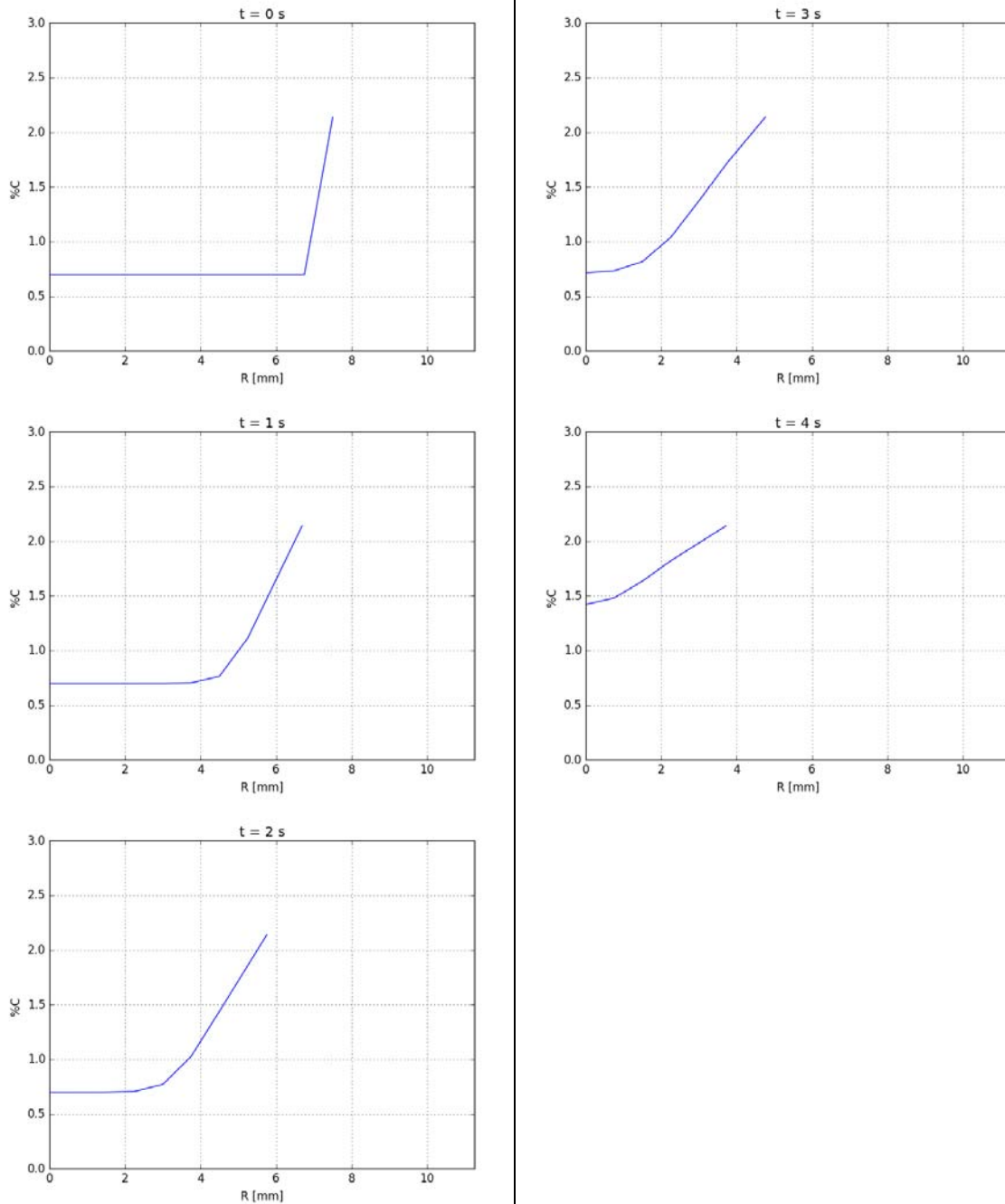


Figura 103 Perfiles de concentración de carbono para distintos tiempos dentro de la partícula con alto coeficiente de difusión

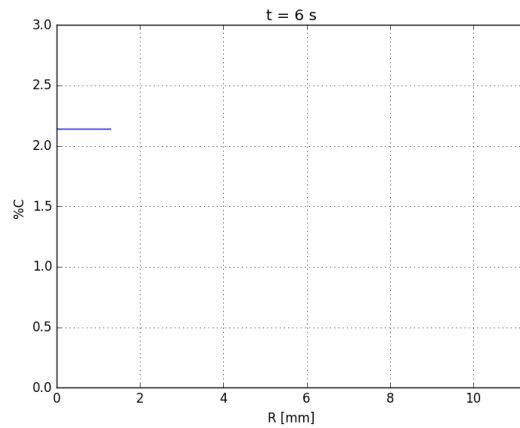
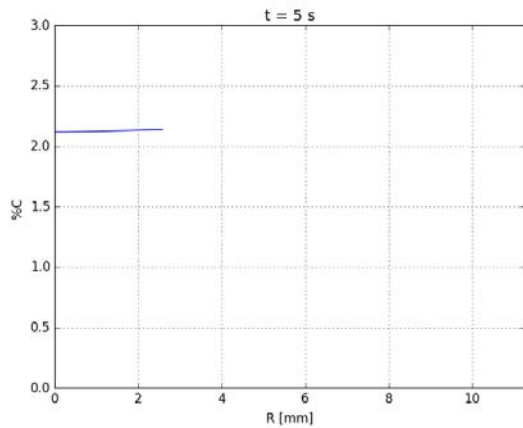


Figura 103 Perfiles de concentración de carbono para distintos tiempos dentro de la partícula con alto coeficiente de difusión (continuación)

Se puede observar que durante los primeros 3 segundos la difusión de carbono hacia el interior se va dando hasta llegar al centro de la partícula, sin embargo, debido a que aún no se ha calentado lo suficiente la partícula la difusión se lleva a cabo lentamente.

Una vez calentada la partícula la difusión aumenta significativamente e incluso se logra llegar hasta el interior de la partícula y a un estado prácticamente estacionario.

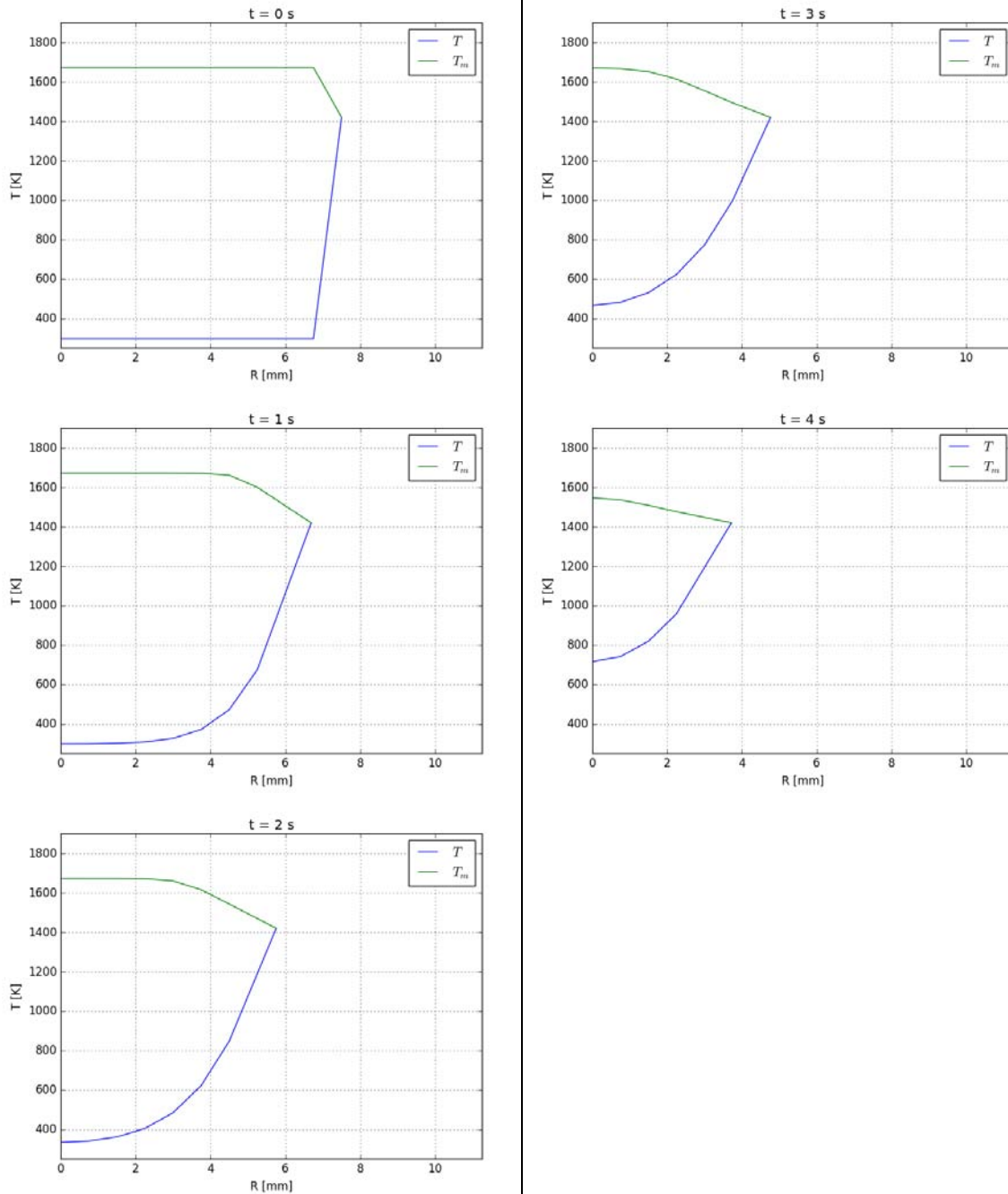


Figura 104 Perfiles de temperatura de fusión en verde y temperatura dentro de la partícula en azul con alto coeficiente de difusión

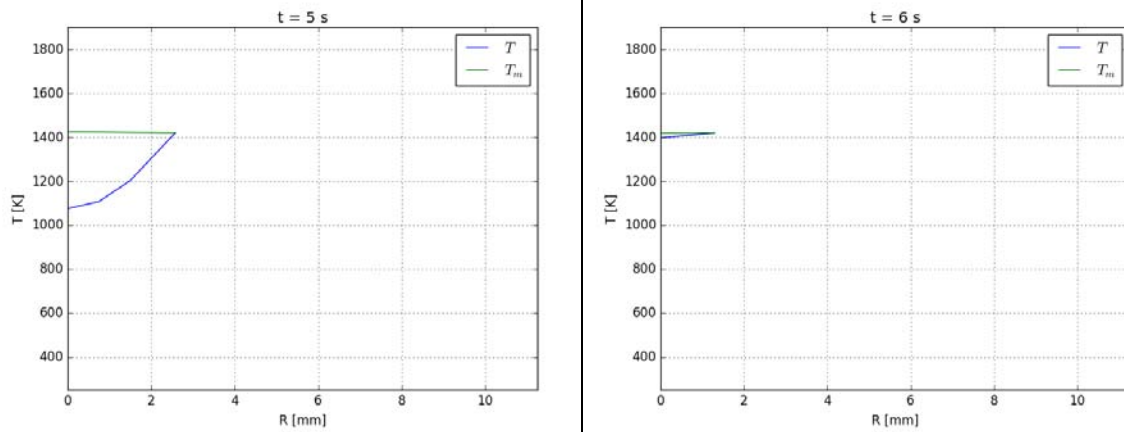


Figura 104 Perfiles de temperatura de fusión en verde y temperatura dentro de la partícula en azul con alto coeficiente de difusión (continuación)

Con este nuevo cálculo con mayor coeficiente de difusión de carbono en el pellet, se determinaron segundo a segundo durante la fusión, los perfiles de temperatura de fusión del pellet (línea verde) y de temperatura del pellet (línea azul) en la **Figura 104**.

De nuevo el abatimiento de la temperatura de fusión está ligada a la difusión de carbono hacia el interior de la partícula por lo que en los primeros segundos se tiene abatimiento solo en la zona cercana a la superficie y durante los últimos segundos ya se abatió por completo la temperatura de fusión en toda la partícula.

Cuando se reduce el radio en un sistema con disolución - fusión donde se necesita abatir el punto de fusión de la partícula normalmente la transferencia de energía controla el proceso. Esto se puede ver en el comportamiento del radio durante la fusión que tiene una forma parabólica. La forma parabólica de la curva R vs t se debe a la condición de Stefan donde el flujo de energía por conducción hacia el



interior de la partícula promueve la formación de coraza y el flujo por convección promueve la fusión (ver línea verde de la **Figura 105**).

Al tener un orden de magnitud similar los flujos de energía se observa este comportamiento parabólico con un máximo. En una etapa el flujo de energía por conducción tiene mayor magnitud y la coraza crece para después ser superado por el flujo por convección para lograr hacer decrecer el radio durante la fusión.

Cuando existe flujo de masa debido al transporte de especies químicas normalmente el flujo por difusión nunca es mayor al de convección por lo que no se forma coraza debido al transporte de especies químicas. El flujo por convección al ser mucho mayor hace decrecer el radio a una rapidez constante formando un perfil lineal de reducción del radio.

El flujo de masa concentra inmediatamente la superficie de la partícula y el transporte de energía controla totalmente el proceso de fusión generalmente.

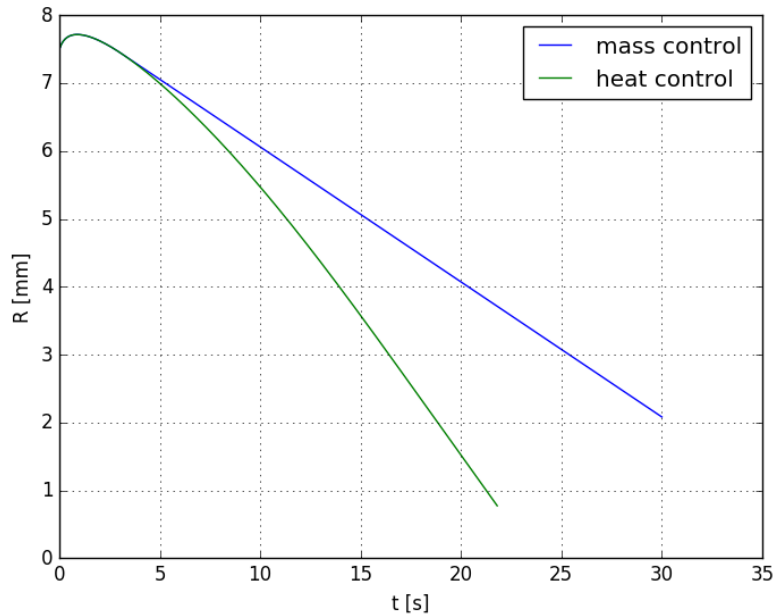


Figura 105 R vs t para control de la fusión por transporte de energía o de especies químicas.

3.3.4. Resultados modelo 4

Para la primera parte del modelo se supone que la temperatura de la superficie es la temperatura de fusión pero el desplazamiento del radio se da solo por el flujo de energía de la superficie sumergida, la superficie no sumergida no está caliente y está en contacto con aire. Esto desde luego es una simplificación, ya que la esfera videograbada en los experimentos en realidad está flotando pero al mismo tiempo presenta movimientos de traslación y rotación que obviamente dificultarían el cálculo por lo que aquí solo se asume una parte de la esfera sumergida en el baño y la otra expuesta al aire.



Esta suposición reduce el flujo de energía a solo la dirección radial. En general, de acuerdo a la **Figura 106**, se observa un menor tamaño de coraza y una fusión con menor rapidez. Se puede observar que la forma de la curva R vs t tiene una forma también muy similar a los datos obtenidos experimentalmente.

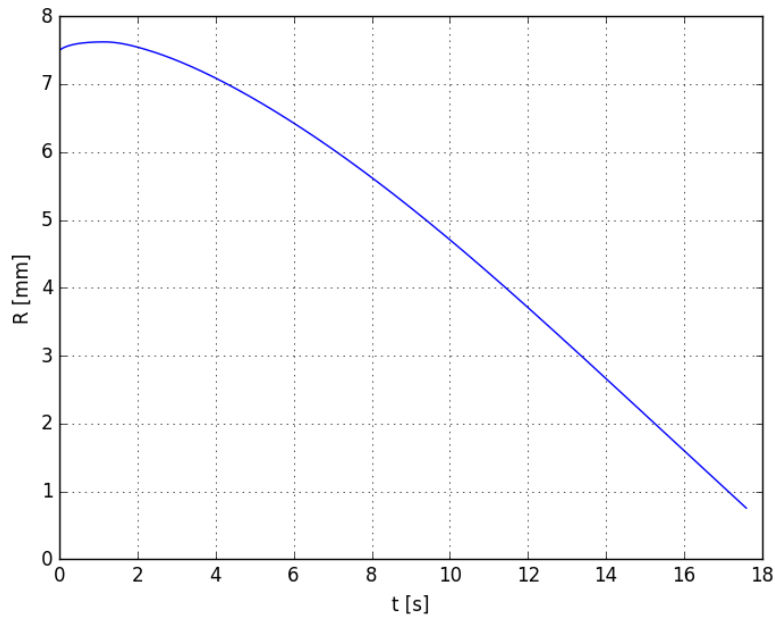


Figura 106 R vs t para la fusión incluyendo la flotabilidad y suponiendo temperatura de fusión en toda la superficie

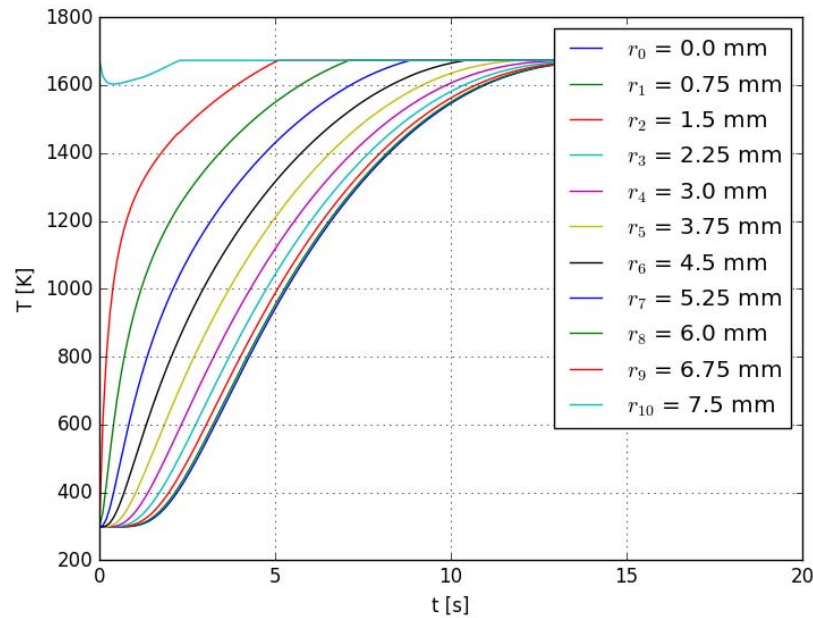


Figura 107 Perfiles de temperatura para distintas posiciones en r incluyendo la flotabilidad y suponiendo temperatura de fusión en toda la superficie

En las historias térmicas en distintos puntos del pellet presentadas en la **Figura 107**, se puede observar que al desplazarse el radio con menor rapidez la partícula se calienta rápidamente hasta alcanzar la temperatura de fusión y posteriormente se va fundiendo.

La diferencia con el modelo 2 es la rapidez con la que se desplaza el radio durante la fusión y esto a su vez modifica la forma en que se calienta la partícula. En el modelo 2 la partícula se va calentando y fundiendo simultáneamente, mientras que al incluir la flotabilidad se calienta la partícula y posteriormente se va fundiendo lentamente.

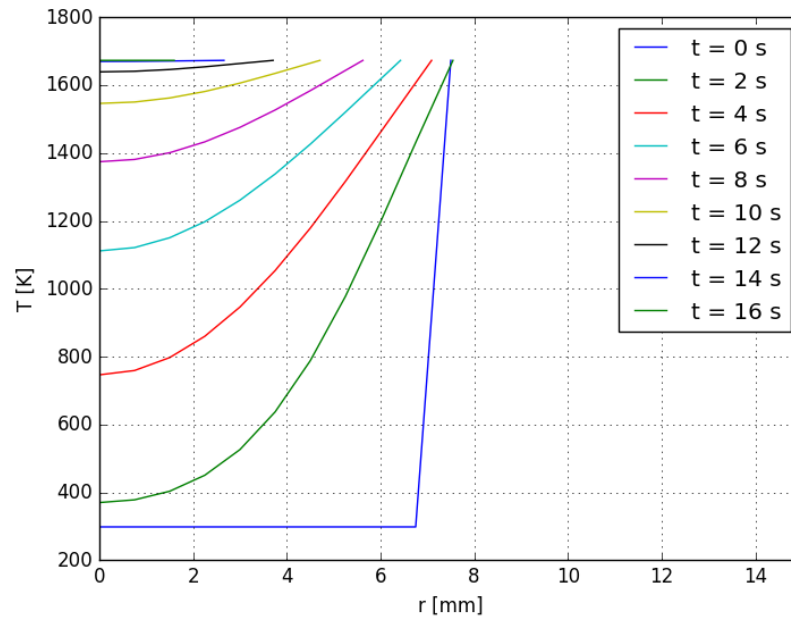


Figura 108 Perfiles de temperatura para distintos tiempos incluyendo la flotabilidad y suponiendo temperatura de fusión en toda la superficie

Se puede observar en los perfiles radiales de temperatura a distintos tiempos que se ven en la **Figura 108**, que durante los últimos segundos prácticamente toda la partícula ya se encuentra a la temperatura de fusión, sin embargo, aún continúa fundiéndose. Esto es debido a que la frontera se desplaza lentamente al sólo estar sumergida una parte en el baño.

En la **Figura 109** se muestran los contornos de temperatura segundo a segundo a lo largo de la fusión donde se observa la superficie entre baño y atmósfera representada por una línea azul y donde se ha asumido que toda la superficie del pellet está caliente a su temperatura de fusión.

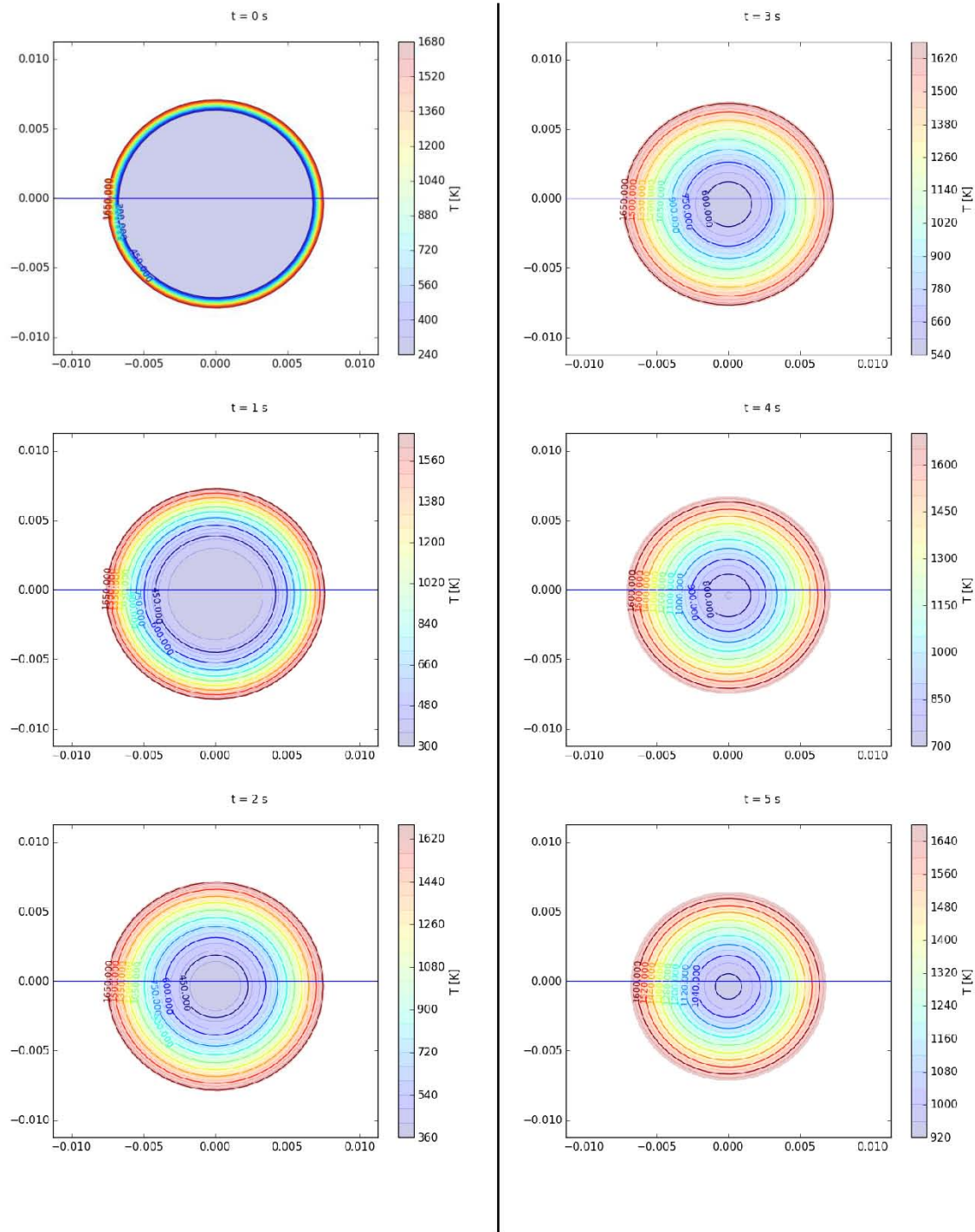


Figura 109 Contornos de temperatura para distintos tiempos incluyendo la flotabilidad y suponiendo temperatura de fusión en toda la superficie

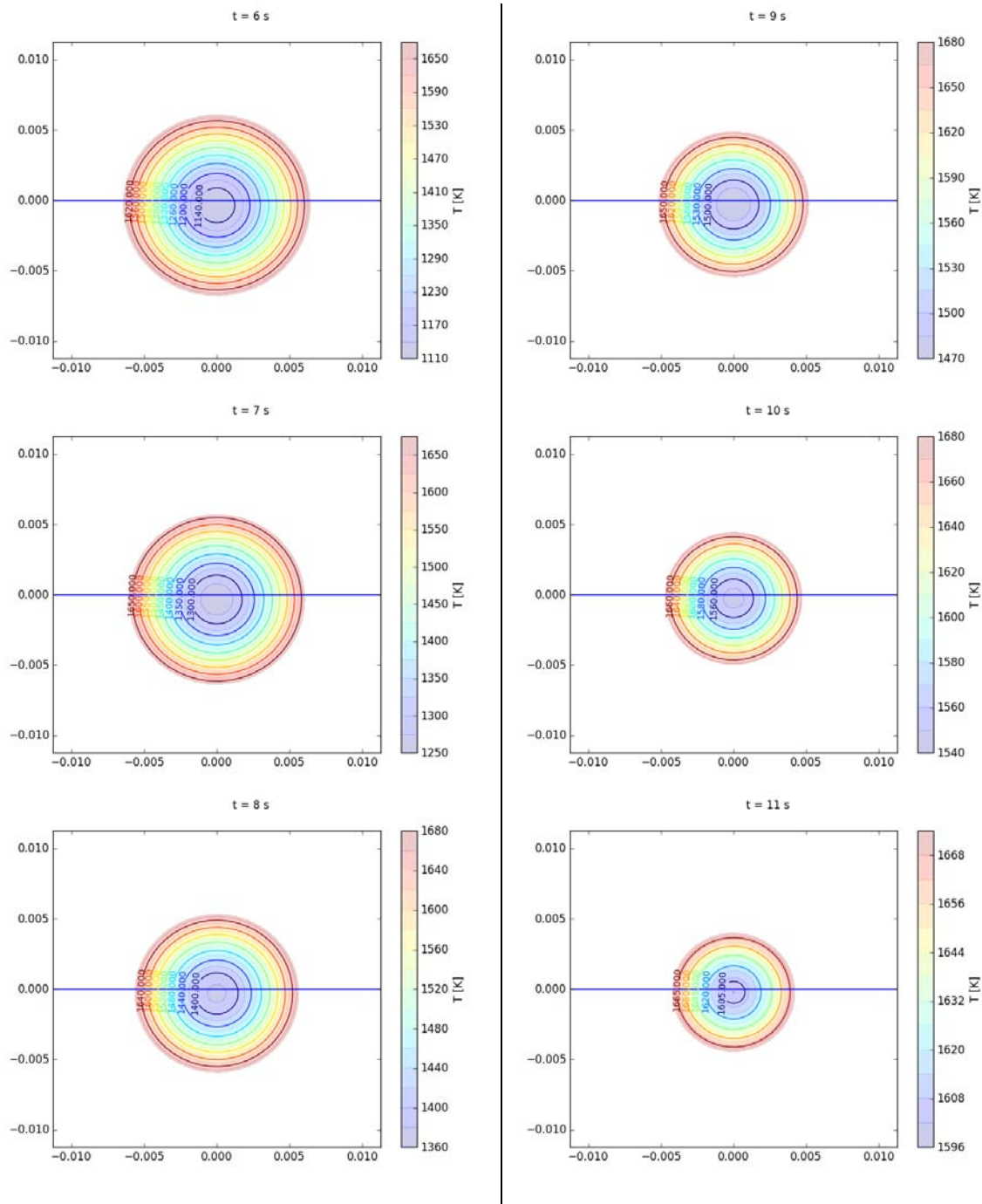


Figura 109 Contornos de temperatura para distintos tiempos incluyendo la flotabilidad y suponiendo temperatura de fusión en toda la superficie (continuación)

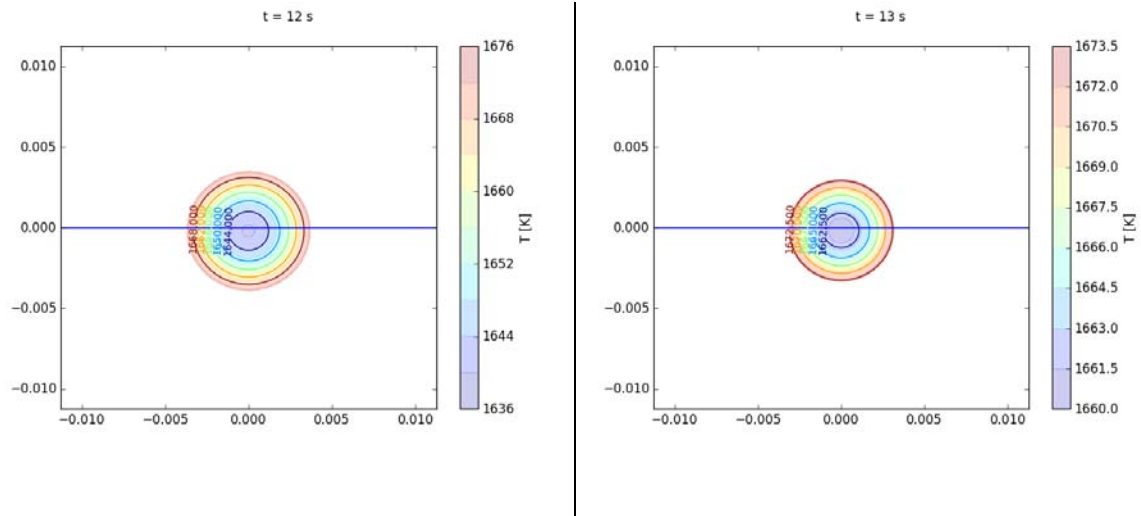


Figura 109 Contornos de temperatura para distintos tiempos incluyendo la flotabilidad y suponiendo temperatura de fusión en toda la superficie (continuación)

En este modelo se puede realizar la suposición de tener condición de Stefan solo en la parte en contacto con el baño mientras que en la parte superior se tiene flujo de energía por convección hacia el aire. Considerar este simple aspecto realista en la simulación implica realizar el cálculo en 2 direcciones radial y polar.

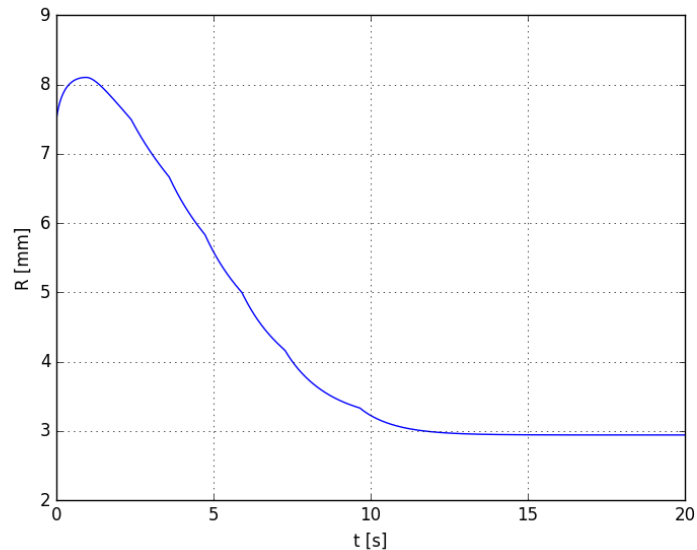


Figura 110 R vs t para flotabilidad con flujo de energía en direcciones radial y polar

Se puede observar claramente en la curva de radio contra tiempo de la **Figura 110**, que existe una formación y fusión de coraza seguida de una fusión de la partícula. Sin embargo, llega un momento donde la partícula ya no modifica su radio significativamente.

Este fenómeno se podría interpretar como un estado de “Iceberg” donde a pesar de tener una mayor temperatura en la parte inferior y convección en la parte superior no se modifica significativamente su tamaño debido a que el flujo de energía por conducción dentro de la partícula es prácticamente de la misma magnitud que el flujo de convección producido por el baño.



Ahora en la **Figura 111** se muestran los contornos de temperatura segundo a segundo durante la fusión donde se supone que la atmósfera que se encuentra cercana al baño tiene una temperatura de 800 K.

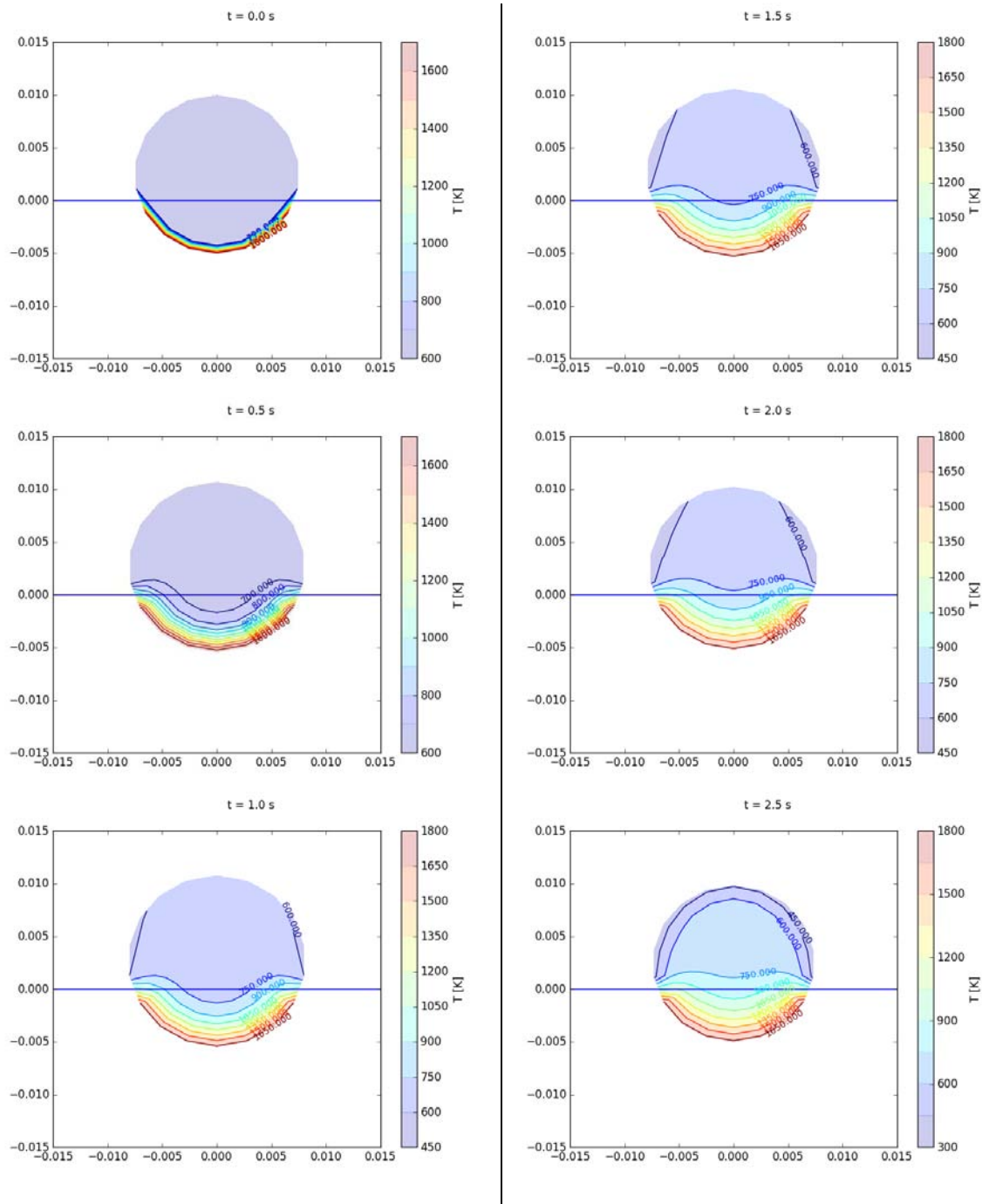


Figura 111 Contornos de temperatura para distintos tiempos con flujo de energía en direcciones radial y polar

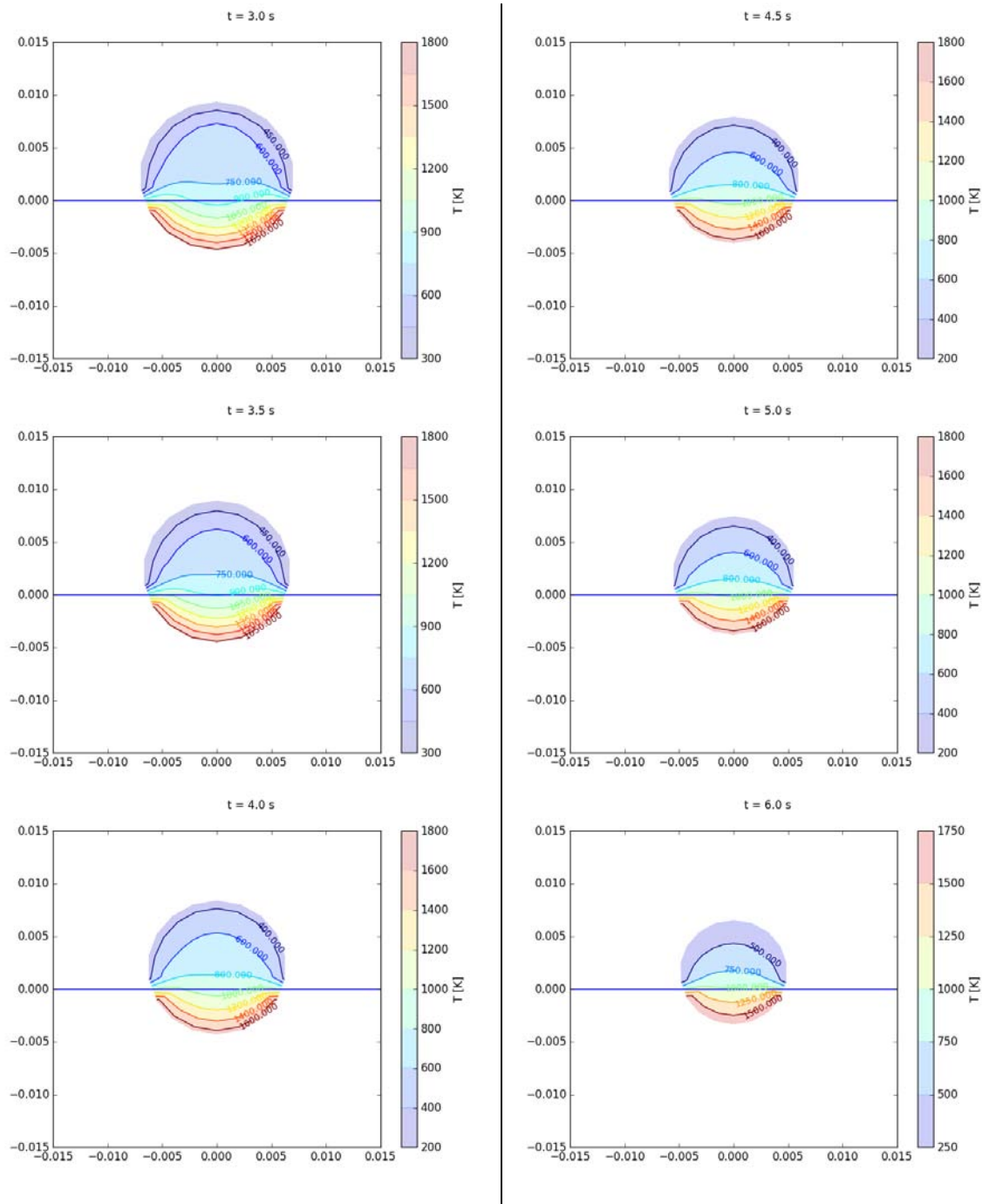


Figura 111 Contornos de temperatura para distintos tiempos con flujo de energía en direcciones radial y polar (continuación)

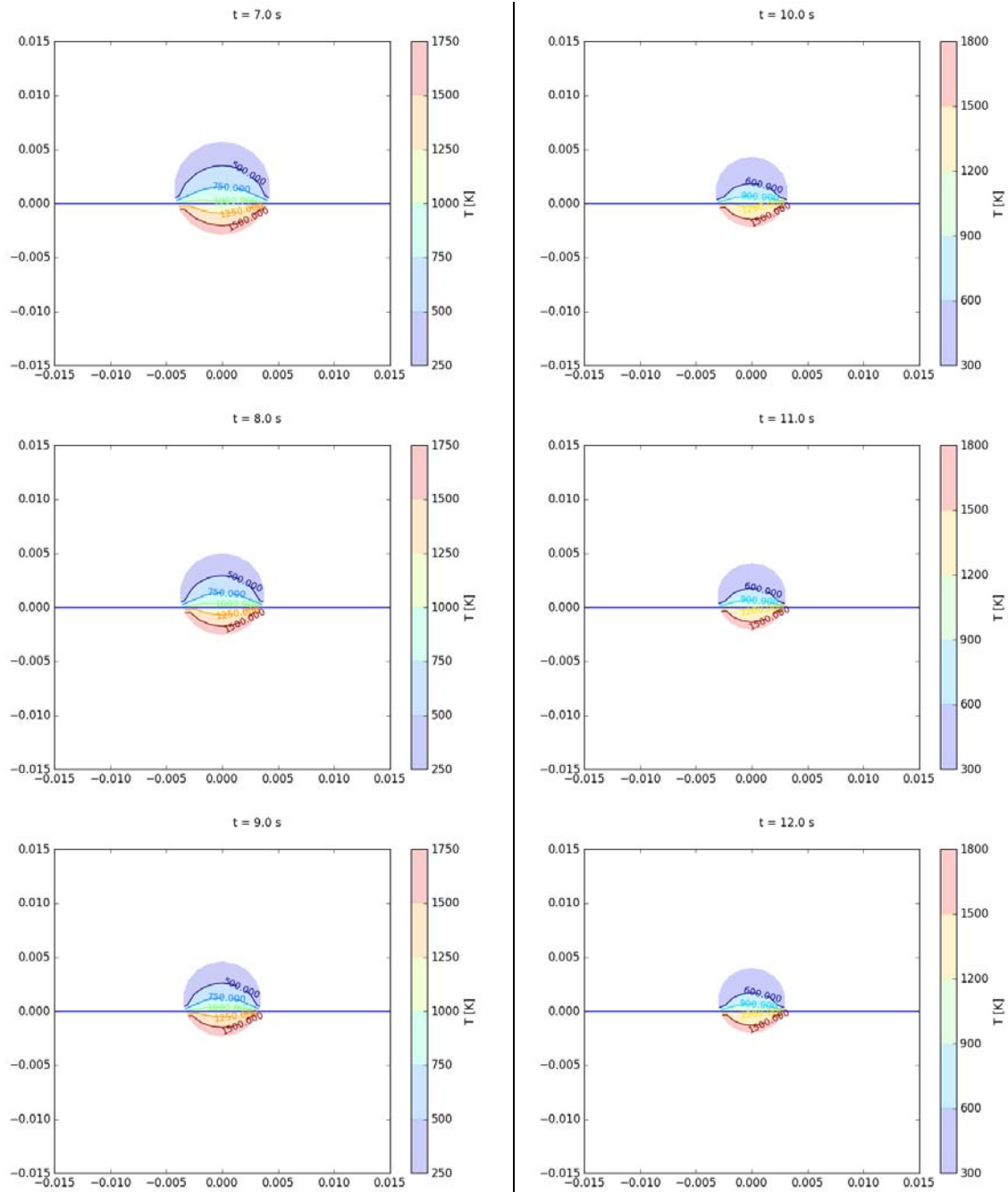


Figura 111 Contornos de temperatura para distintos tiempos con flujo de energía en direcciones radial y polar (continuación)

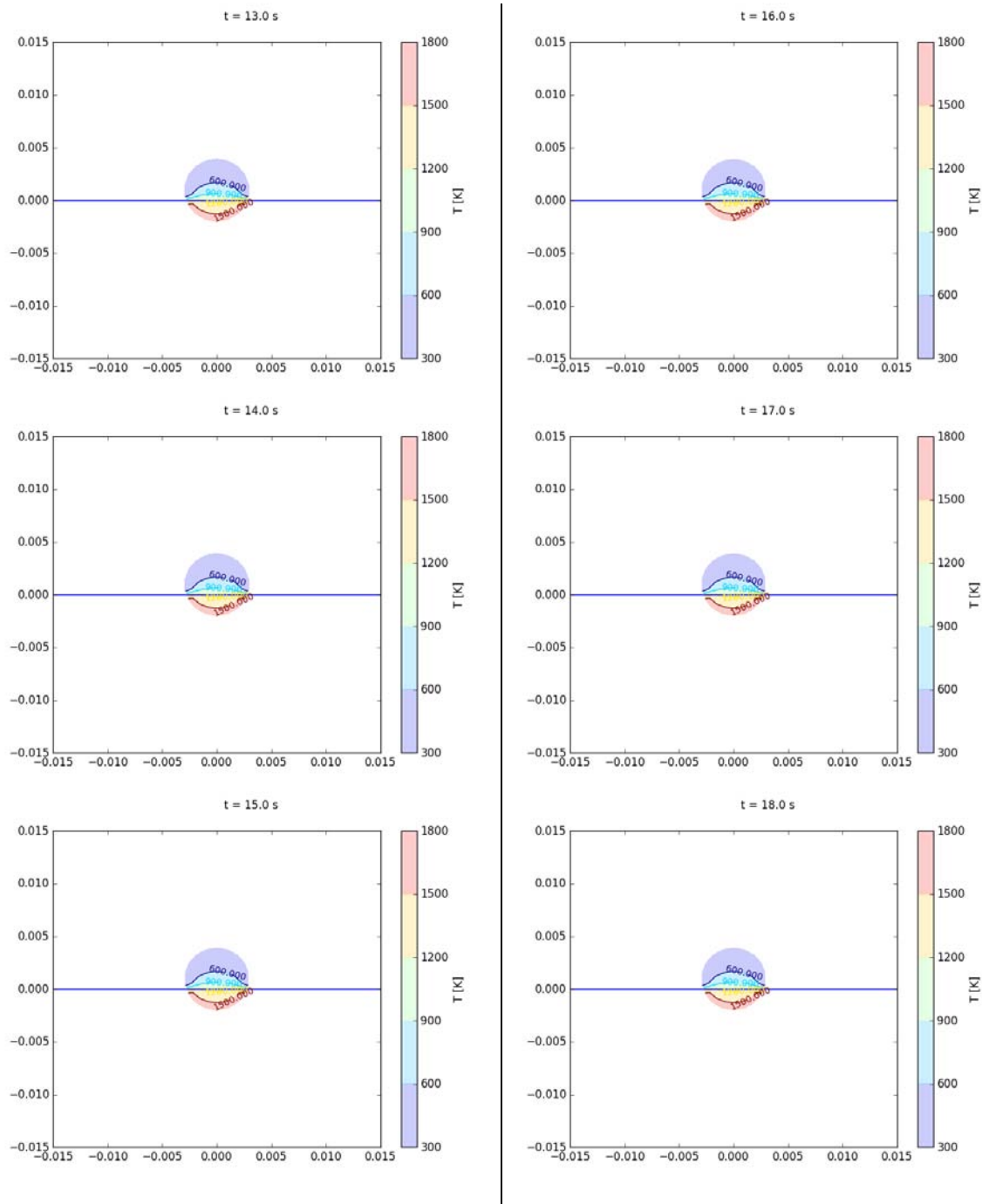


Figura 111 Contornos de temperatura para distintos tiempos con flujo de energía en direcciones radial y polar (continuación)

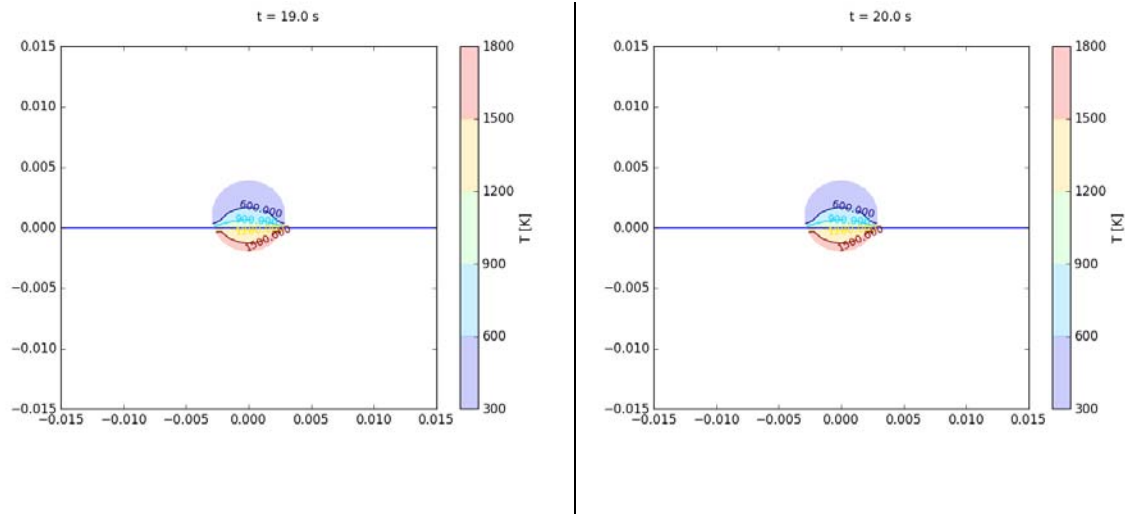


Figura 111 Contornos de temperatura para distintos tiempos con flujo de energía en direcciones radial y polar (continuación)

Se puede observar como al comenzar la fusión la partícula se calienta por conducción de energía desde el baño hacia arriba incluso debido a la alta conductividad de la coraza formada se calienta rápidamente la zona en la superficie cercana al baño pero que no se encuentra sumergida.

En los siguientes instantes el interior de la partícula se calienta debido a la conducción de energía en su interior para posteriormente debido a la convección del medio la parte que no está sumergida se enfría lentamente.

Durante una etapa la parte superior que no se encuentra sumergida pasa de haberse calentado a enfriarse lentamente hasta alcanzar prácticamente una temperatura homogénea.

Finalmente se llega prácticamente a un estado estacionario de temperaturas en su interior donde la zona sumergida se encuentra a una temperatura y la no



sumergida a otra con un gradiente de temperaturas entre ellas. El radio de la partícula sigue disminuyendo hasta llegar a un estado donde el flujo de calor dentro de la partícula debido al gradiente de temperatura y el flujo debido al baño se igualan para prácticamente detener la fusión. Con esto se comprueba que la partícula rota durante la fusión y por lo tanto se puede suponer una temperatura homogénea en toda la superficie. Esta rotación fue videograbada durante la experimentación.

4. Conclusiones

Existen varias conclusiones que se pueden obtener del presente trabajo ya sea de la parte experimental así como la elaboración de modelos matemáticos para la fusión de los pellets de hierro esponja en baños de hierro.

En la parte experimental una de las conclusiones importantes es la posibilidad de monitorear el radio de los pellets durante la fusión grabando con video en la parte superior y aprovechando la flotabilidad del DRI.

Durante la experimentación se evaluaron las variables de proceso más comunes que se evalúan en la industria como son temperatura del baño, agitación y precalentamiento.

De estas variables la que mostró mayor influencia en disminuir el tiempo de fusión fue la temperatura del baño seguida de la agitación. Tanto la agitación como la temperatura del baño aumentan el flujo de energía por convección hacia el interior



de la partícula por lo que es de suponerse que lo que ocurre en el baño en términos de convección es la variable más importante del proceso de fusión

En cuanto a los modelos matemáticos se tienen varias conclusiones. La primera conclusión es sobre los esquemas numéricos evaluados para el estado transitorio que se exploraron para resolver modelos con condición de Stefan los cuales presentan divergencia en caso de involucrar sistemas de ecuaciones como son el caso del esquema implícito y Crank-Nicholson. Por otra parte el esquema explícito utilizado en otros trabajos resulta el óptimo.

El introducir la dependencia del coeficiente de transferencia de energía h con el radio mejora drásticamente la forma de la curva para acercarse a lo obtenido en la parte experimental. Se podría evaluar introducir propiedades físicas como función de otras variables para evaluar el comportamiento del resultado.

La suposición de tener toda la superficie de la partícula a la temperatura de fusión resulta ser acertada ya que se incluya o no la flotabilidad la partícula se encuentra en constante rotación debido al movimiento del baño. Esto también se puede observar en la correlación obtenida en los modelos que utilizan esta suposición.

De las variables de proceso que se pueden modificar fácilmente como son temperatura inicial, temperatura del baño, agitación y radio resulta la temperatura del baño la que tiene mayor influencia en el tiempo de fusión disminuyendo de forma exponencial al alejarse de la temperatura de fusión esto concuerda con lo obtenido experimentalmente.



Las demás variables que están involucradas en el flujo de energía por convección como son la temperatura en la superficie de la partícula, la agitación y la temperatura del baño son las que más influyen en la rapidez de fusión.

Las reacciones químicas que puedan ocurrir en el interior de la partícula generalmente involucran a una pequeña cantidad de materia y energía pero además por su termodinámica o cinética difícilmente modifican el tiempo de fusión de las partículas.

Los flujos de energía entre el baño y la partícula son mucho mayores que la generación que pueda ocurrir debida a las reacciones químicas en el interior. La mayor parte de los reactivos reaccionan en el baño promoviendo la agitación y de esta forma contribuyen a disminuir los tiempos de fusión.

Debido a la forma parabólica de las curvas de R vs t se puede suponer que es el transporte de energía la etapa controlante ya que si no fuera así no existiría la formación de coraza y el decrecimiento del radio se daría en forma lineal.

El transporte de especies químicas entre el baño y la partícula por lo general logra abatir inmediatamente la temperatura de fusión en la superficie de la partícula dejando como etapa controlante al transporte de energía.

El tener una partícula esférica estática en el baño involucrará un tiempo de fusión muy alto debido al transporte de energía que ocurrirá del baño a través de la partícula hacia la superficie. Por lo general las partículas rotan debido a la fusión y esto la favorece, sin embargo una partícula que se encuentre en contacto con una



pared del horno puede dejar de rotar y aumentar su tiempo de fusión por lo que se recomienda evitar esta situación.

Las recomendaciones para la industria serían reducir el tamaño del pellet en la medida en que aún sea manejable. Se debe promover la agitación del baño y evitar que los pellets sean introducidos en las orillas del baño donde pueden dejar de rotar y aumentarán el tiempo de fusión. La recomendación más importante es mantener una temperatura alta en el baño para acelerar el proceso de fusión, a mayor diferencia de temperatura del baño con respecto a la temperatura de fusión del baño se disminuirá el tiempo de fusión.

5. Trabajo futuro

Como trabajo futuro se puede instrumentar con termopares los pellets de DRI para monitorear la temperatura en su interior y poder validar el modelo en cuanto a su comportamiento térmico.

Se puede evaluar la presencia de más de una partícula en el baño así como monitorear simultáneamente la fusión.

En cuanto a los modelos matemáticos se puede modelar la hidrodinámica y el transporte de energía en el baño con lo cual se conocerá más a fondo la fusión.

Por otra parte se puede abandonar la suposición de geometría esférica para poder obtener una formación de la coraza más realista.



6. Bibliografía

1. *Perfil de la Industria Siderúrgica en México 2004-2013*. **CANACERO**. s.l. : Camara Nacional de la Industria del Hierro y del Acero, 2014.
2. *The Melting of Metal Spheres Involving the Initially Frozen Shells with Different Material Properties*. **Olaf Ehrich, Yun-Ken Chuang, Klaus Schwerdtfeger**. Great Britain : Journal Heat Mass Transfer, 1978, Vol. 21.
3. *The Melting Of Sponge Iron Spheres in their Own Melt*. **Ehrich, Olaf, Chuang, Yun Ken y Schwerdtfeger, Klaus**. Düsseldorf : Eisenhüttenwes, 1979, Vol. 50.
4. *Modelling of Melting Behaviour of Aluminium Metal in Molten Salt and Metal Bath*. **Bo Zhou, Yongxiang Yang, Markus A. Raeuter**. Delf Holanda : The Minerals, Metals & Materials Society, 2003, Vol. 1.
5. *Transient Heat Transfer During Initial Stages os Steel Scrap Melting*. **Yeong-U Kim, Robert D Pehlke**. s.l. : Metallurgical Transactions, 1975, Vol. 6B.
6. *Transient Heat Transfer During Initial Stages of Steel Scrap Melting*. **Kim, Yeong-U y D.Pehlke, Robert**. s.l. : Metallurgical Transactions B, 1975, Vol. 6B.
7. *The Mass Transfer Kinetics of Niobium Solution into Liquid Steel*. **Argyropoulus, Stavros y Sismanis, Panagiotis**. s.l. : Metallurgical Transactions B, 1991, Vol. 22 B.
8. *Kinetics of steel melting in carbon steel alloys*. **Eckehard Spech, Rudorl Jeshar**. 1, s.l. : Steel reserch, 1993, Vol. 64.
9. *A Hot Model Study on the Effect of Gas Injection uponthe Melting Rate of Solid Sphere in a Liquid Bath*. **Shigajei Taniguchi, Munekazu Ohmi, Shinji Ishiura**. s.l. : ISIJ, 1983, Vol. 23.
10. *Mathematical Modeling of the Melting Rate of Metallic Particles in the EAF under Multiphase Flow*. **Marco Aurelio Ramirez Argaez, Alberto N. Conejo, Monserat Sofia López Cornejo**. 1, s.l. : ISIJ, 2015, ISIJ International Vol. 55, Vol. 55, págs. 117–125.
11. *Effect of the Kind of Iron Oxide in Reduced Iron Pellets on the Melting Rate into Iron Melt*. **Akira Sato, Ryuichi Nakagawa, Shiro Yoshimatsu, Akira Fukuzawa, Tsuyoshi Ozaki**. 67, s.l. : The Iron and Steel Institute of Japan, 1981, Vol. 21.
12. *Dimensionless Correletions for Forced Convection in Liquid Metals*. **Stavros A. Argyropoulos, Dipak Mazumdar, Anthony C. Mikrovas, Don A. Doutre**. s.l. : Metallurgical and Materials Transactions, 2001, Vol. 32B.



13. *Dissolution Kinetics of Ferroalloys in Steelmaking Process*. **Y. E. Lee, H. Berg, B. Jensen**. s.l. : Ironmaking and Steelmaking, 1995, Vol. 22.
14. *Mass Transfer During Dissolution of a Solid into Liquid in the Iron-Carbon System*. **Yeong-U Kim, Rober D. Pehlke**. s.l. : Metallurgical Transactions, 1974, Vol. 5.
15. *Kinetics of Scrap Melting in Liquid Steel: Multipiece Scrap Melting*. **Jianghua Li, Nikolas Provatas**. s.l. : The Minerals, Metals & Materials Society and ASM International, 2008, Vol. 39B.
16. *Effects of ferrosilicon particle size on reduction rate of chromium oxide in slag*. **Sang-Beom Lee, Hyoseok Song, Ho-Yong Hwang, Peter Chang-Hee Rhee, Ole-Svein Klevan**. s.l. : Scandinavian Journal of Metallurgy, 2003, Vol. 32.
17. *Prediction of Thermal Conductivity and Electrical Resistivity in Porous Metallic Materials*. **Koh, J. C. Y. y Fortini, Anthony**. Washington : Heat Mass Transfer, 1973, Vol. 16.
18. **O. Kubaschewski, C.V. Alcock**. *Metallurgical Thermochemistry*. Berlin : Springer, 1991.
19. **Douglas C. Montgomery, George C. Runger**. *Applied Statistics and Probability for Engineers*. Arizona : Wiley, 2014.
20. *Study of Melting Behaviour of Aluminium Scraps in Molten Melts*. **B. Zhou, Y. Yang, M.A. Reuter**. Lulea Suecia : TMS, 202.
21. **Alexiades, Vasilios**. *Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes*. Philadelphia : Taylor & Francis, 1993.



7. Apéndice 1

En este apéndice se mostrarán los datos experimentales reportados en la planta industrial ArcelorMittal ubicada en Lázaro Cárdenas Michoacán.

November 2007

HYLIII

Date	Fet	Fe ^o	Met HylIII	C Hyl	S	SiO ₂	CaO	MgO	Al ₂ O ₃	Sizes							Pellet
										3/4"	5/8"	1/2"	7/16"	3/8"	1/4"	-1/4"	
1	90.0	84.6	94.1	2.31	0.006	3.14	1.27	0.64	1.20	0.1	5.4	47.6	16.1	16.3	10.9	3.7	PEÑA COLORADA NO 25 + 20 botazos
2	89.8	84.7	94.3	2.48	0.005	3.13	1.30	0.62	1.20	0.4	2.5	35.8	14.2	24.5	17.5	5.1	PEÑA COLORADA 100%
3	89.9	84.4	93.9	2.42	0.005	3.14	1.25	0.64	1.19	0.1	4.2	46.2	11.7	18.8	15.0	4.1	PEÑA COLORADA 100%
4	89.9	84.7	94.2	2.49	0.006	3.14	1.23	0.60	1.18	0.2	5.1	34.6	13.4	22.3	19.1	5.3	PEÑA COLORADA 100%
5	89.7	84.2	93.8	2.44	0.005	3.15	1.26	0.58	1.13	0.0	4.3	41.0	16.2	23.7	11.5	3.3	PEÑA COLORADA 100%
6	89.7	84.6	94.2	2.46	0.005	3.19	1.21	0.61	1.17	0.0	2.6	28.0	12.7	26.1	24.1	6.6	PEÑA26 ARCELOT/PEÑA + 10 botazos d
7	89.7	84.8	94.5	2.55	0.004	3.29	1.27	0.61	1.27	0.0	4.7	38.4	13.3	24.3	14.0	5.3	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 10 botazos d
8	89.7	85.0	94.8	2.65	0.005	3.27	1.27	0.65	1.25	0.0	4.1	39.8	19.8	23.4	8.3	4.5	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 10 botazos d
9	89.1	84.4	94.7	2.51	0.004	3.28	1.26	0.60	1.25	0.5	5.1	59.3	12.3	12.8	7.7	2.4	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 10 botazos d
10	89.5	84.6	94.6	2.38	0.004	3.27	1.27	0.60	1.25	0.2	4.7	48.9	13.9	17.9	11.9	2.6	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 30 botazos d
11	89.5	83.7	93.5	2.17	0.005	3.27	1.26	0.60	1.24	0.2	7.1	45.9	13.7	17.2	12.7	3.2	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 30 botazos d
12	89.5	84.7	94.6	2.38	0.005	3.26	1.26	0.59	1.24	0.1	3.0	45.5	11.0	19.2	16.9	4.2	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 30 botazos d
13	89.5	84.6	94.5	2.38	0.005	3.25	1.25	0.60	1.25	0.1	3.3	40.7	14.9	22.5	14.8	3.7	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 30 botazos d
14	89.3	84.1	94.1	2.45	0.005	3.23	1.27	0.59	1.19	0.8	7.8	44.3	13.7	19.2	10.6	3.6	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 30 botazos d
15	89.4	84.1	94.1	2.43	0.005	3.23	1.27	0.56	1.24	0.0	4.4	31.0	13.5	24.4	21.1	5.6	PEÑA27 ARCELOT/PEÑA + 30 botazos d
16	89.4	83.5	93.4	2.27	0.005	3.29	1.15	0.56	1.27	0.1	5.0	37.7	17.3	19.6	14.4	5.9	PEÑA No26 PEÑA MITTAL 50/50
17	89.5	84.2	94.1	2.36	0.005	3.26	1.26	0.55	1.18	0.0	6.5	39.4	13.6	22.4	13.2	4.9	PEÑA No26 PEÑA MITTAL 50/50
18	89.4	83.9	93.9	2.37	0.005	3.26	1.25	0.57	1.18	0.0	5.3	40.0	13.7	22.3	14.6	4.1	PEÑA No26 PEÑA MITTAL 50/50
19																	
20																	
21																	
22																	
MAX	90.0	85.0	94.8	2.65	0.006	3.3	1.3	0.6	1.3	0.8	7.8	59.3	19.8	26.1	24.1	6.6	
MIN	89.1	83.5	93.4	2.17	0.004	3.13	1.1	0.6	1.1	0.0	2.5	28.0	11.0	12.8	7.7	2.4	
PROM	89.6	84.4	94.2	2.42	0.005	3.22	1.25	0.60	1.21	0.2	4.7	41.3	14.2	20.9	14.3	4.4	

Figura 112 Análisis químico para la planta industrial de ArcelorMittal



QUALITY DRI FULLFILMENT 2007
 November 2007
 MIDREX



Fet	Fe ^v	Metz Midrex	C Midrex	S	SiO ₂	CaO	MgO	Al ₂ O ₃	Sizes								Pellet	HYLIII	MIDREX
									3/4"	5/8"	1/2"	7/16"	3/8"	1/4"	- 1/4"				
90.4	84.9	94.0	2.27	0.0022	3.08	0.89	0.53	0.94	0.1	10.6	54.6	11.8	13.5	7.4	1.9	FER/PER 70/30-MBR/TS	7,816	4,959	
90.4	85.1	94.2	2.33	0.0017	3.10	0.92	0.54	0.89	0.1	6.9	51.3	15.0	17.5	5.9	3.2	FERTECO /PERU	7,904	4,967	
90.4	85.1	94.1	2.21	0.0020	3.11	0.90	0.55	0.92	1.3	10.1	51.4	14.5	15.4	5.5	2.2	FERTECO /PERU	8,127	4,971	
90.3	84.7	93.8	2.24	0.0022	3.22	0.86	0.49	0.78	0.1	8.3	51.9	14.6	16.8	6.3	2.0	FERTECO /PERU	7,983	4,963	
90.2	84.7	93.9	2.35	0.0020	3.16	0.88	0.52	0.80	0.2	11.8	60.0	11.0	11.8	3.8	1.5	FERTECO /PERU +30 bc	7,931	4,987	
90.3	85.2	94.3	2.37	0.0018	3.19	0.92	0.56	0.62	0.3	11.9	61.5	11.1	11.0	3.0	1.2	FERTECO /PERU +30 bc	8,037	5,021	
90.3	85.3	94.4	2.31	0.0018	3.21	0.92	0.68	0.86	0.4	7.0	53.6	11.6	17.4	7.9	2.2	FERTECO /PERU +30 bc	8,058	5,040	
90.4	85.5	94.6	2.30	0.0018	3.20	0.96	0.66	0.90	0.2	11.5	58.8	11.4	12.6	3.5	1.9	FERTECO /PERU +30 bc	7,857	5,038	
90.3	85.3	94.5	2.34	0.0019	3.24	0.84	0.49	0.68	0.5	8.6	52.6	12.1	17.7	6.2	2.4	FERTECO /PERU +30 bc	7,997	4,964	
90.5	85.3	94.3	2.16	0.0019	3.24	0.92	0.46	0.62	0.3	6.2	48.9	15.4	19.7	7.4	2.2	FERTECO /PERU +30 bc	7,712	5,087	
90.2	84.9	94.1	2.26	0.0022	3.22	0.94	0.48	0.66	0.1	9.5	55.6	12.7	14.8	4.9	2.3	FERTECO /PERU +30 bc	7,840	5,084	
90.2	84.9	94.1	2.27	0.0020	3.23	0.93	0.47	0.64	0.1	9.9	61.4	12.7	9.0	5.1	1.8	FERTECO /PERU +30 bc	8,083	5,086	
90.3	85.3	94.4	2.34	0.0021	3.22	0.92	0.46	0.62	0.0	9.8	57.7	12.6	16.0	2.0	2.0	FERTECO /PERU +30 bc	7,948	5,093	
90.1	84.3	93.6	2.28	0.0023	3.20	0.98	0.54	0.64	0.2	11.6	59.4	10.9	11.1	4.9	1.9	FERTECO /PERU +30 bc	7,756	5,109	
90.2	84.4	93.6	2.31	0.0023	3.18	0.96	0.52	0.66	0.7	14.6	54.1	11.2	12.5	5.4	1.6	FERTECO /PERU +30 bc	6,470	5,066	
90.3	85.1	94.2	2.33	0.0021	3.12	1.02	0.54	0.72	0.3	12.1	53.8	15.6	12.3	3.9	2.0	FERTECO /PERU	8,006	5,056	
90.2	84.5	93.7	2.25	0.0022	3.14	1.08	0.52	0.68	0.2	9.4	54.7	14.3	15.1	5.0	1.4	FERTECO /PERU	7,865	5,061	
90.1	84.8	94.1	2.42	0.0021	3.16	1.10	0.54	0.70	0.4	15.2	58.1	12.2	8.7	3.7	1.7	FERTECO /PERU	8,085	4,985	
90.5	85.5	94.6	2.42	0.0023	3.24	1.10	0.68	0.94	1.3	15.2	61.5	15.6	19.7	7.9	3.2				
90.1	84.3	93.6	2.16	0.0017	3.08	0.84	0.46	0.62	0.0	6.2	48.9	10.9	8.7	2.0	1.2				
90.3	85.0	94.1	2.30	0.0020	3.18	0.94	0.53	0.74	0.30	10.27	55.5	12.82	14.0	5.1	1.97		141,474	90,537	

Figura 113 Análisis químico para la planta industrial de ArcelorMittal

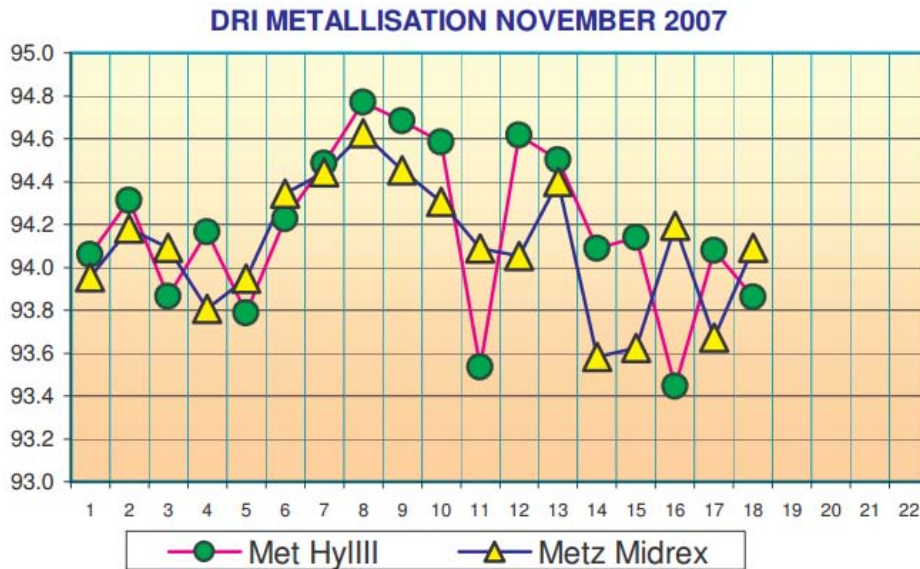


Figura 114 Metalización para la planta industrial de ArcelorMittal

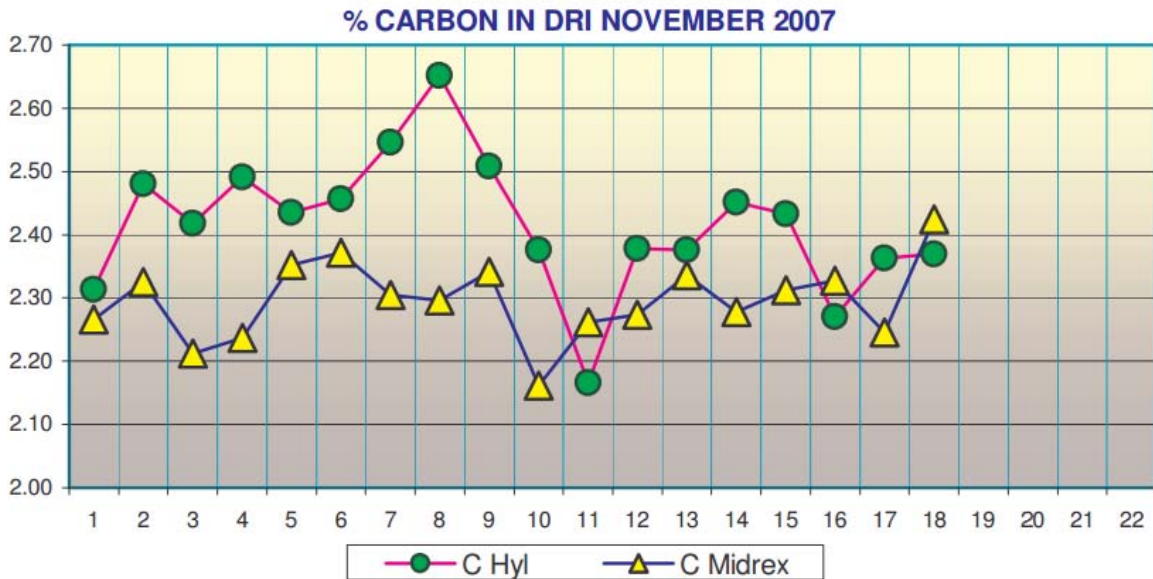


Figura 115 Contenido de carbón en pellets para la planta industrial de ArcelorMittal

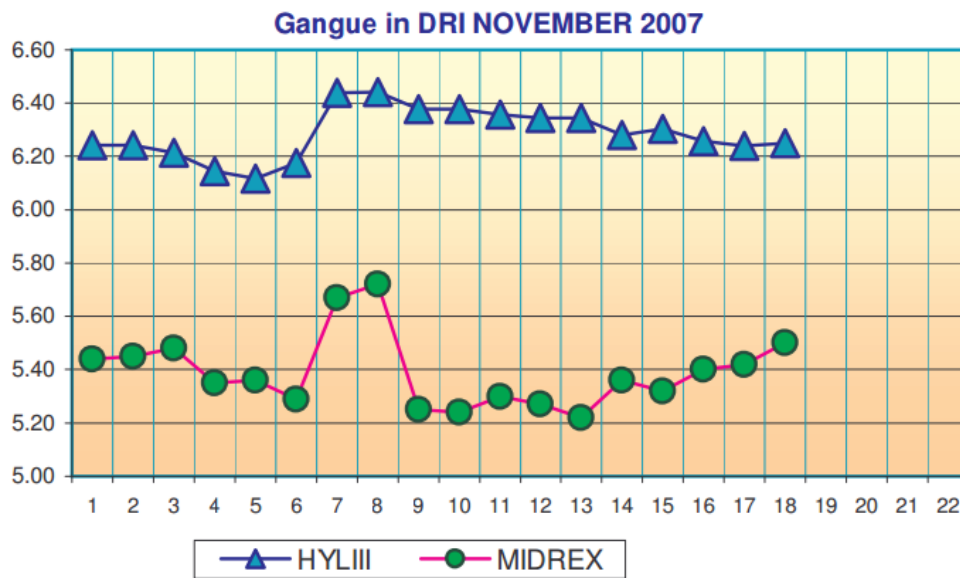


Figura 116 Contenido de ganga en pellets para la planta industrial de ArcelorMittal

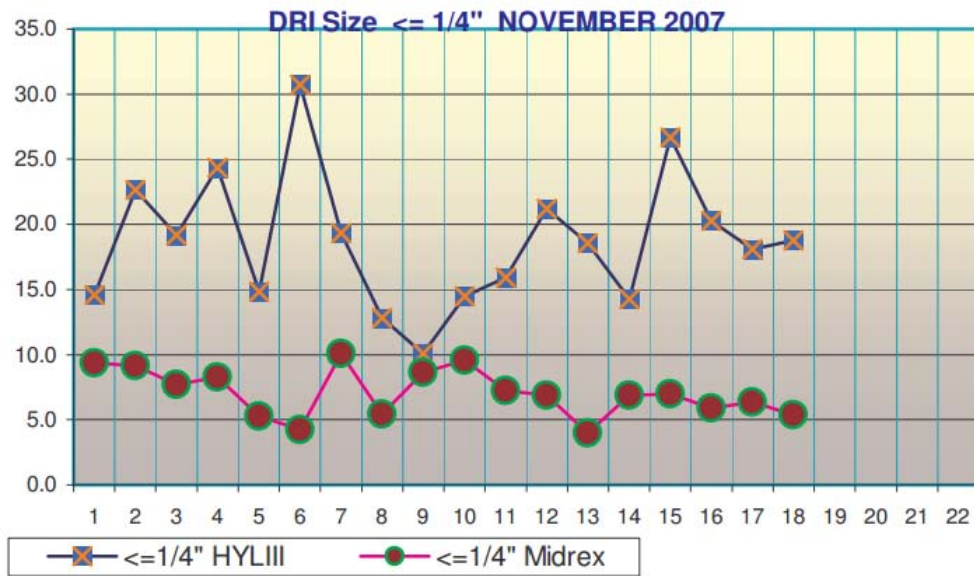


Figura 117 Tamaño de pellets para la planta industrial de ArcelorMittal