



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

TESIS:

**EFFECTO DE LA POSICIÓN DE INYECCIÓN EN EL MEZCLADO QUÍMICO
EN OLLAS AGITADAS CON GAS ASISTIDO POR CFD**

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

PRESENTA

Rubén Gálvez de la Cruz



CDMX

2022



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: GONZÁLES RIVERA CARLOS
VOCAL: AMARO VILLEDA ADRIÁN MANUEL
SECRETARIO: RAMÍREZ ARGÁEZ MARCO AURELIO
1er. SUPLENTE: SALAS REYES ANTONIO ENRIQUE
2° SUPLENTE: GONZÁLEZ GONZÁLEZ DIEGO ENRIQUE

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

LABORATORIO 203, 1ER PISO, EDIFICIO D, FACULTAD DE QUÍMICA

ASESOR DEL TEMA:

DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ

SUSTENTANTE:

RUBÉN GÁLVEZ DE LA CRUZ

Contenido

Lista de símbolos y abreviaciones	I
Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Siderurgia	1
1.2 Refinado de cuchara	2
1.2.1 Homogenización	5
1.2.2 Interacción metal-escoria	6
1.2.3 Calentamiento	7
1.2.4 Escoria	7
1.2.5 Adiciones de aleación	8
1.2.6 Modificación de inclusiones	9
1.3 Fenomenología en el proceso	9
1.3.1 Descripción de los fenómenos en la cuchara de refinación	10
1.3.2 Dinámica de fluidos	11
1.3.3 Criterio de escala	13
1.3.4 Mezclado	14
1.3.5 Posición de las mediciones y del agregado del trazador	14
1.3.6 Transferencia de calor y masa	15
1.4 Estudios combinados de modelado físico y matemático	17
1.5 Modelos numéricos para el estudio de la zona de gas-líquido en el refinado de cuchara	18
1.5.1 Modelo cuasi-monofásico	18
1.5.2 Modelo de volumen de fluido VOF	19
1.5.3 Modelo de fuerza de superficie continua	20
1.5.4 Modelo multifásico Euleriano E – E	20
1.5.5 Modelo Euleriano-Lagrangiano E – L	21
1.6 Modelos de turbulencia aplicados en la refinación de cucharas	21
1.7 Comparación de sistemas de cálculo	22
1.8 Hipótesis	24
1.9 Objetivo	24
Capítulo 2. Metodología	25
2.1 Modelo matemático	25
2.1.1 Suposiciones	25
2.1.2 Ecuaciones gobernantes	26
2.1.3 Condiciones de frontera e iniciales	30

2.3 Validación del modelo.....	34
Capítulo 3. Resultados y discusión	37
Conclusiones	49
Bibliografía	51
Anexo A	54

Lista de símbolos y abreviaciones

ε	Potencia de agitación [W/ton]
V	Caudal de gas [Nm ³ /min]
T	Temperatura del baño [K]
M	Peso del baño [ton]
H	Profundidad de inyección de gas [m]
P_0	Presión de gas en la superficie del baño [atm]
$\vec{u}, \vec{u}_q, \vec{u}_{rel}, \vec{u}_{bi}, \vec{u}_p$	Componente de velocidad de la mezcla, componente de velocidad de la fase líquida, velocidad relativa entre el gas y líquido, velocidad de burbuja y velocidad del penacho [m/s]
β	Fracción sumergida de la lanza
d_b	Diámetro de burbuja [m]
H	Profundidad del líquido [m]
d	Diámetro de la boquilla interior [m]
R	Radio de la olla [m]
R_{av}	Radio equivalente de la pluma [m]
L_{model}	Tamaño del modelo físico de la olla [m]
$L_{prototype}$	Tamaño de la olla prototipo [m]
$\rho, \rho_l, \rho_g, \rho_b$	Densidad de la mezcla, densidad del líquido, densidad del gas y densidad de burbujas [kg/m ³]
α_l, α_g	Fracción volumen del líquido y fracción volumen del gas
Q	Flujo de gas [m ³ /s]
g	Aceleración de la gravedad [m/s ²]
P	Presión total [N/m ²]
μ, μ_t	Viscosidad del líquido y viscosidad turbulenta [kg/ms]
F_s	Fuerza de tensión superficial [N/m ³]
σ	Coefficiente de tensión superficial [N/m]
k	Curvatura [m ²]
$B_{ag,i}, B_{br,i}$	Término fuente debido a la agregación y término fuente debido a la rotura
F_{Di}	Fuerza de arrastre [N]
Q_{bi}	Caudal másico de inyección de burbujas [Kg/s]
Δt	Paso de tiempo [s]

Capítulo 1. Introducción

1.1 Siderurgia.

Generalmente, la producción de acero se puede dividir en cuatro pasos principales^[1]: fabricación de hierro, fabricación de acero primaria, fabricación de acero secundaria y fundición. En la actualidad existen dos procesos principales para la fabricación de acero: vía integrada alto horno BOF (Basic Oxygen Furnace) y reducción directa - horno eléctrico de arco, mostrados en la *Figura 1.1*. Ambos son procesos integrados partiendo de mineral de hierro, pero difieren tanto en la materia prima utilizada como en el proceso y tipo de horno empleado.

El primer paso, la fabricación de hierro, consiste en producir hierro líquido o sólido a partir del mineral de hierro. En un alto horno (BF), el mineral de hierro, coque y, a veces, la piedra caliza se agrega desde la parte superior, mientras que el oxígeno y, a veces, los combustibles agregados, como el gas natural, se agregan desde la parte inferior^[2]. El coque y el oxígeno reaccionan para formar CO, que a su vez reduce el óxido de hierro dentro del mineral de hierro a hierro^[1]. La piedra caliza es un agente fundente que aumenta la fluidez de la escoria metálica, por lo que las impurezas pueden eliminarse fácilmente^[3]. Debido al enfoque en la sostenibilidad ambiental en las últimas décadas, se ha observado un aumento en la producción de hierro de reducción directa (DRI)^[4]. Aquí, el mineral de hierro se reduce directamente mediante un reductor, lo que da como resultado un hierro de "esponja" poroso. Este proceso de producción es más limpio que el proceso de alto horno, ya que utiliza gas natural como reductor en lugar de carbono en forma de coque, lo que reduce las emisiones al medio ambiente^[4].

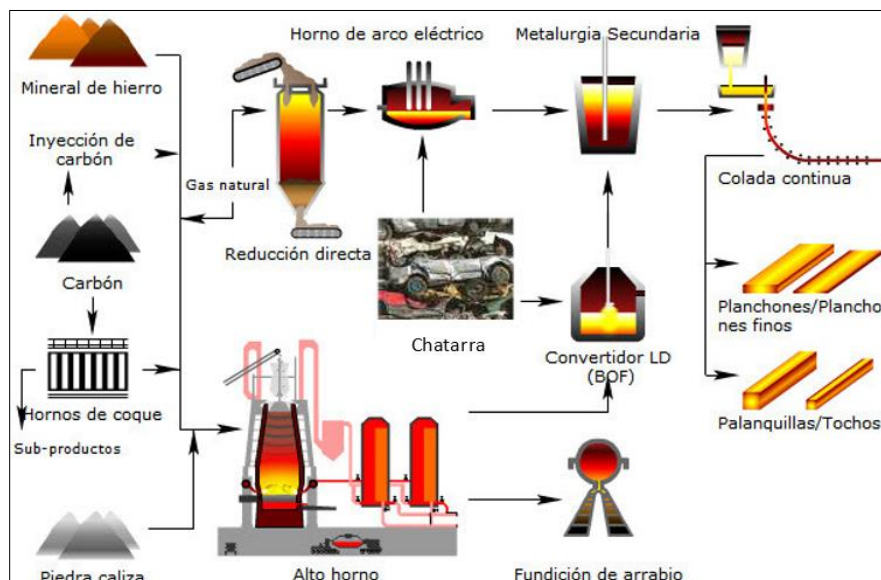


Figura 1.1. Esquema de la fabricación de acero.

Después de la extracción del mineral, el hierro todavía contiene muchas impurezas que son perjudiciales para las propiedades mecánicas del acero. Por lo tanto, durante el segundo paso, la fabricación primaria de acero, se eliminan la mayoría de estas impurezas. Como se muestra en la *Figura 1.1*, el arrabio del alto horno entra en un horno de oxígeno básico (BOF), mientras que el hierro esponja de la reducción directa entra en un horno de arco eléctrico (EAF). En el horno BOF, se inserta una lanza de oxígeno en el arrabio líquido. Aquí, el oxígeno reacciona con las impurezas dentro del metal para formar óxidos^[5]. Estas impurezas oxidadas son principalmente carbono, silicio, fósforo y manganeso^[6]. Debido a su naturaleza ácida, los óxidos reaccionan con una capa de escoria básica en la parte superior del baño metálico^[1]. Esto, a su vez, los precipita para que se eliminen fácilmente después. La oxidación de impurezas es un proceso exotérmico, por lo que BOF no necesita una fuente de energía adicional para calentar el metal líquido. Cuando las temperaturas son demasiado altas (> 1700 ° C), se agrega chatarra de acero reciclado para enfriar el BOF^[5].

Por otro lado, la fabricación de acero por arco eléctrico necesita una fuente de energía adicional, debido a que el hierro esponja de reducción directa tiene menos impurezas que el arrabio del BOF^[7]. Se agrega energía eléctrica usando electrodos de grafito para calentar el metal líquido. Se agrega un oxidante, como FeO, junto con un agente fundente^[6]. Si bien un horno de oxígeno básico solo puede usar una cierta cantidad de chatarra para regular la temperatura, los hornos de arco eléctrico se pueden usar completamente para chatarra de acero reciclada debido a su capacidad para agregar calor a través de energía eléctrica.

Durante la fabricación de acero primario, se disuelven cantidades significativas de oxígeno en el metal líquido. Además de esto, algunas impurezas con baja afinidad por el oxígeno no se eliminan correctamente durante el procesamiento de BOF o EAF. En el siguiente paso, la metalurgia secundaria de acero, estas sustancias generalmente se eliminan en una instalación de refinación de acero con el uso de una cuchara. El último paso en el proceso de fabricación de acero es la fundición. Lo más común es que la fundición se ejecute de forma continua^[6], seguida de un laminado en caliente del acero en varias formas deseadas.

1.2 Refinado de cuchara.

La *Figura 1.2* proporciona un esquema de la inyección de gas en un cucharón lleno. Allí, como se ve, se inyecta Ar o N₂ a través de un tapón poroso, ubicado en la base de la cuchara, en un baño de acero fundido contenido en un recipiente cilíndrico ligeramente cónico. El gas inyectado, dada su flotabilidad, sube a la superficie libre, induciendo así un flujo recirculatorio turbulento de líquido, bien conocido por mejorar la tasa de homogeneización química y térmica, así como acelerar la absorción de inclusiones no metálicas nocivas para el acero en la fase de escoria suprayacente.

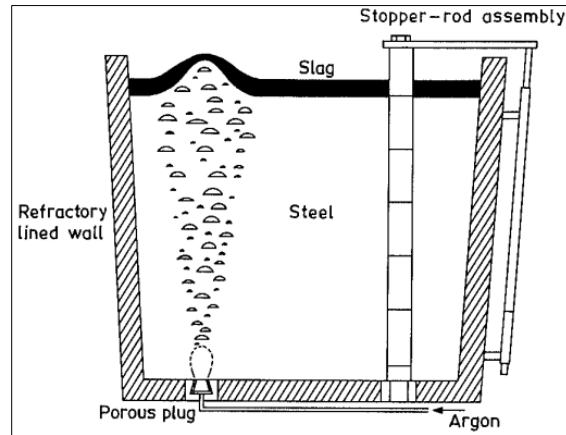


Figura 1.2. Esquema de la inyección de gas en un horno de cuchara.

La inyección de fundente granulado en el acero líquido, combinada con agitación de argón, comenzó a principios de la década de 1970. Estas innovaciones han tenido un efecto marcado en el proceso de fabricación de acero, particularmente con respecto al recipiente o al horno en el que se produce el acero. Además, el refinado y desgasificación en cuchara hacen posible que el fabricante de acero ejerza un control mucho más estricto sobre las propiedades del producto final a través de una mayor precisión en la composición del producto final, así como su limpieza y al poder controlar la morfología de la inclusión final.

Hoy en día los hornos de cuchara se encuentran entre los equipos más utilizados en la fabricación secundaria de acero, una cuchara es un recipiente cilíndrico para el refinamiento de metal líquido, se muestra un boceto simplificado en la *Figura 1.2*. La pared interior de la cuchara está cubierta con un revestimiento refractario que actúa como un recipiente para el acero líquido, para proteger el propio equipo de cuchara y limitar las pérdidas de calor durante la operación. El metal líquido se agita mediante la inyección de un gas inerte en la tobera inferior, a menudo argón. Las burbujas se elevan y se dispersan formando una estructura cónica llamada pluma. Debido a las fuerzas de arrastre entre las burbujas y el líquido, el líquido se eleva hacia arriba en esta región, formando un pico en parte superior (penacho) donde la dirección del flujo del fluido se convierte de vertical a radial hacia afuera. Esta cúpula y el flujo radial crean una abertura u "ojo" en la capa de escoria superpuesta. La cuchara tiene tres funciones principales: [8,9]

- A) La primera función es controlar la homogenización de la composición química en todo el baño metálico a través de la agitación de gas inerte.
- B) La segunda es limpiar la mezcla de impurezas acelerando su absorción en la fase escoria.
- C) La tercera función es controlar la temperatura del baño para su posterior tratamiento.

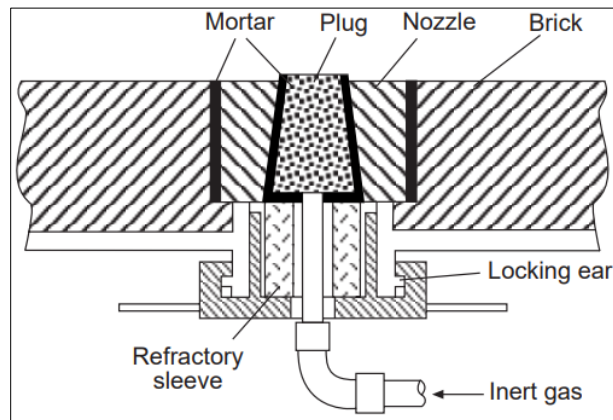


Figura 1.3. Conjunto de tapón poroso en el fondo de una cuchara.

Para lograr una temperatura y una composición del baño homogéneas, el acero en la cuchara se agita con mayor frecuencia mediante burbujeo de gas argón. Para velocidades de burbujeo de gas moderadas, por ejemplo, menos de $0.6 \text{ Nm}^3/\text{min}$ se utilizan tapones refractarios porosos, normalmente montados en el fondo de la cuchara. En la *Figura 1.3* se muestra una ilustración esquemática de un conjunto de tapón poroso en el fondo de la cuchara. Hoy en día, la mayoría de los cucharones están equipados con tapones inferiores para burbujear argón. Si la apertura inferior está fuera de servicio, puede ser necesario proporcionar la agitación requerida a través de una lanza superior.

Anagbo y Brimacombe^[10] discutieron algunos ejemplos típicos de varios tapones, que se muestran en la *Figura 1.4* como puede verse, los tapones porosos tienen forma cónica o rectangular. El tapón de forma cónica es más fácil de cambiar si el tapón se desgasta antes que el revestimiento, los tapones rectangulares son geoméricamente compatibles con los ladrillos circundantes y se pueden utilizar con ventaja en los casos en que la vida útil del tapón es comparable a la del revestimiento. La principal ventaja de la llamada porosidad direccional o tapón capilar, que se muestra en la *Figura 1.4* (e) y (f), es que el tapón puede estar hecho del mismo refractario denso que el ladrillo de revestimiento, o incluso más denso. Esto da como resultado una mayor resistencia a la compresión en caliente, mayor resistencia a la erosión y mayor vida útil. Las desventajas de los tapones capilares es que son más propensos a la infiltración de acero líquido tras la pérdida de presión del gas argón.

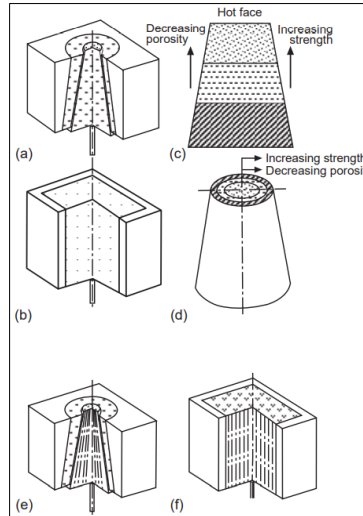


Figura 1.4. Formas estándar de tapones isotrópicos: (a) y (b). Tapones de componentes: rebanados (c), concéntricos (d). Tapones capilares: cónicos (e) rectangulares (f).

1.2.1 Homogeneización

La homogeneización de la temperatura y la composición del baño por burbujeo de gas es causada principalmente por la disipación de la energía de flotación del gas inyectado. Pluschkell derivó la relación termodinámica que describe el poder de agitación efectivo de un gas.^[11] La siguiente ecuación para el poder de agitación se deriva de la relación de Pluschkell:

$$\varepsilon = 14.23 \left(\frac{VT}{M} \right) \log \left(\frac{1+H}{1.48P_0} \right) \quad (1.1)$$

ε = Potencia de agitación [W/ton]

V = Caudal de gas [Nm³/min]

T = Temperatura del baño [K]

M = Peso del baño [ton]

H = Profundidad de inyección de gas [m]

P_0 = Presión de gas en la superficie del baño [atm]

El tiempo de agitación para lograr una homogeneización del 95% se define como el tiempo de mezcla τ . Se han realizado numerosos estudios experimentales y teóricos relacionados con los fenómenos de mezcla en sistemas agitados por gas. Mazumdar y Guthrie^[12] publicaron una revisión exhaustiva sobre el tema. La siguiente relación empírica que expresa el tiempo de mezcla, τ , en términos de variables como el poder de agitación, ε [W/tonelada], el diámetro de la cuchara, D [m] y la profundidad de inyección, H [m], se obtuvieron del trabajo de Mazumdar y Guthrie.^[13]

$$\tau = 116 (\varepsilon)^{-1/3} (D^{5/3} H^{-1}) \quad (1.2)$$

Los tiempos de mezcla calculados a partir de las ecuaciones 1 y 2 se muestran en la *Figura 1.5* para el caso simplificado de $D = H$. Los tiempos de mezcla que se muestran en la *Figura 1.5* concuerdan con los calculados a partir de otras correlaciones. En la *Figura 1.5* se puede ver que un horno de 200 toneladas se homogeneizará en un tiempo de 2 a 2.5 minutos después de iniciar a burbujear con argón a un caudal de $0.2 \text{ Nm}^3/\text{min}$.

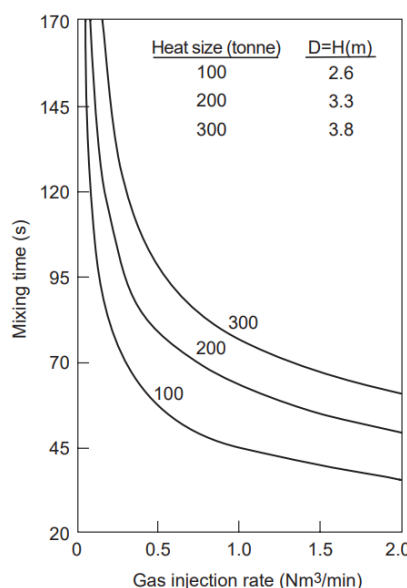


Figura 1.5. Tiempos de mezcla calculados para hornos de 100, 200 y 300 toneladas.

Varios autores estudiaron el efecto de la ubicación del tapón de agitación inferior en los tiempos de mezclado.^[14,15] El hallazgo general fue que el tiempo de mezclado disminuye al colocar el tapón en el fondo y fuera del centro, por ejemplo, en el radio medio.

Según Mietz y Oeters^[14], un tapón de agitación colocado en el centro del fondo de la cuchara genera un bucle toroidal de flujo de metal en la parte superior del baño mientras que se crea una zona muerta en la parte inferior, lo que se traduce en tiempos de mezcla más prolongados. Los tapones inferiores ubicados excéntricamente dan lugar a una amplia circulación de metal a lo largo de todo el baño, evitando zonas muertas y dando lugar a tiempos de mezcla más cortos.

1.2.2 Interacción metal-escoria

Se han realizado numerosos estudios experimentales para investigar las reacciones de los gases escoria-metal en sistemas de cucharones con agitación de gas en una variedad de condiciones experimentales. Mazumdar y Guthrie^[12], Emi^[16] y Asai et al.^[17] realizaron revisiones sobre este tema. Para la mayoría de las reacciones escoria-metal, las velocidades se controlan principalmente mediante la transferencia de masa de los reactivos y productos a través de la interfaz de escoria. En sistemas de agitación, como un baño de acero en un cucharón agitado por argón, el área interfacial escoria-metal se

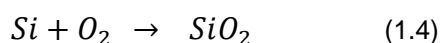
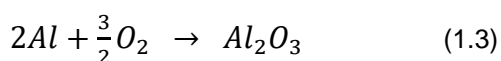
ve afectada por el grado de agitación en el baño que, a su vez, está determinado por el poder de agitación.

Es interesante notar que Kim y Fruehan^[18], así como Mietz et al.^[19], observaron que la transferencia de masa entre el metal y la escoria se impide cuando el tapón de agitación en el fondo de la cuchara está ubicado fuera del centro. Un tapón de agitación ubicado en el centro da como resultado un aumento de la emulsificación de escoria-metal al aumentar el caudal de gas. Los tapones de agitación ubicados excéntricamente crean una zona libre de escoria, el llamado ojo, cerca de la pared de la cuchara. Esto afecta el desprendimiento de partículas de la fase principal de escoria y da como resultado una disminución de la emulsificación.^[19] Por lo tanto, la elección final de la ubicación del tapón de agitación en el fondo de la cuchara parece estar determinada por qué aspecto de la agitación es más importante para una operación determinada: buenas características de mezcla, o la capacidad de lograr una rápida desulfuración y / o desfosforización.

1.2.3 Calentamiento

De ser necesario calentar el acero en una cuchara normalmente se utilizan dos métodos: 1) el recalentamiento eléctrico a través de electrodos que forman parte del horno cuchara y 2) el recalentamiento químico por inyección de oxígeno y aluminio (o silicio), que reaccionan exotérmicamente para generar calor. Para el caso de calentamiento por electrodos, en general, el consumo de electrodos en los hornos de cuchara aumenta al aumentar la densidad de corriente de la sección transversal y el tiempo de calentamiento. El consumo promedio de electrodos es de 0.2 kg/tonelada para tiempos de recalentamiento totales típicos de 20 minutos y densidades de corriente promedio de aproximadamente 35 A/cm².

El acero líquido se puede recalentar oxidando aluminio y / o silicio mediante inyección de oxígeno a través de una lanza. Los calores generados para las reacciones son:^[20] 27,000 kJ/kg Al para la reacción (1.3) y 28,500 kJ/kg Si en Fe – 75% Si para la reacción (1.4):



Las entalpías se calculan a partir de los datos termodinámicos, teniendo en cuenta que los reactivos, aluminio y oxígeno, deben calentarse desde la temperatura ambiente (TA) hasta la temperatura del baño (1630 °C). Sobre la base de una eficiencia térmica del 100%, la temperatura del baño se puede aumentar en 50 °C cuando se inyecta 1 Nm³ O₂/ton de acero junto con 1.46 kg Al/ton o mediante la inyección de 1.2 Nm³ O₂/ton junto con 1.85 kg Fe–75% Si/ton^[20].

1.2.4 Escoria

Hoy en día, el uso de escorias sintéticas en la fabricación secundaria de acero es una parte integral de la metalurgia de cuchara debido a los requisitos necesarios para

producir aceros ultralimpios, frecuentemente combinados con una demanda de contenidos de azufre muy bajos. El concepto de utilizar escorias sintéticas en cucharones se remonta a la década de 1930, cuando se desarrolló el proceso Perrin para la desoxidación mejorada de acero de solera abierta o acero Bessemer con ferromanganeso o ferrosilicio. En ciertos grados de acero, como los que se utilizan en aplicaciones de tuberías, se requiere un contenido de azufre muy bajo, por ejemplo, 20 ppm o menos. Estos bajos contenidos de azufre solo se pueden lograr mediante la desulfuración del acero en cuchara en presencia de una escoria de aluminato de calcio.

Dependiendo de las condiciones operativas específicas, la gama de composiciones de las escorias de cuchara comúnmente utilizadas es: 20–40% Al_2O_3 , 35–55% CaO , 8–15% MgO y 10–15% SiO_2 junto con cantidades menores de FeO y MnO . En algunos casos, se agrega CaF_2 a la escoria.

1.2.5 Adiciones de aleación

Se pueden agregar metales y aleaciones al acero líquido en varias etapas del proceso de fabricación de acero, por ejemplo, dentro del horno, durante el vaciado del horno, en el horno cuchara, durante el tratamiento al vacío, etc. El momento de las adiciones depende de la ruta del proceso, el taller, logística y sobre determinadas características de la adición en cuestión, como su punto de fusión, volatilidad y su susceptibilidad a la oxidación. Por ejemplo, se puede añadir níquel al EAF (Electric Arc Furnace) en cualquier momento como óxido de níquel, que se reduce fácilmente. En la ruta del proceso de fabricación de acero con oxígeno, las adiciones de aleación como el ferrosilicio y el ferromanganeso se realizan durante el sangrado del horno, mientras que las otras aleaciones se añaden en las etapas posteriores de la refinación secundaria de acero.

Cuando se agrega una ferroaleación al acero líquido, se forma una capa de acero solidificado alrededor de la partícula de aleación como resultado del efecto de enfriamiento local. A medida que pasa el tiempo, la cáscara se derrite mientras la ferroaleación dentro de la cáscara se calienta hasta su punto de fusión. La disolución completa se rige por procesos de transferencia de calor por convección en el baño, así como por el tamaño de la ferroaleación añadida.

Se practican varios métodos de adición de aleaciones. Algunos ejemplos son: lanzamiento de bolsas llenas, adición con pala o por rampas mecanizadas, alimentación de alambre, inyección de pólvora, disparos de bala, etc. Un proceso especial para hacer adiciones de aleación es el llamado proceso CAS (Ajuste de la composición por burbujeo de argón sellado). En este proceso, un tubo con revestimiento refractario se sumerge parcialmente en el baño de acero de tal manera que envuelve la columna de gas ascendente creada por la inyección de argón a través del tapón poroso en el fondo de la cuchara. Las adiciones de aleación se realizan sobre la superficie de acero líquido dentro del área cubierta por el tubo. El ojo de la pluma dentro del tubo está lleno de argón, por lo que tiene una baja presión parcial de oxígeno que evita la oxidación de la adición de aleación. Las velocidades de fusión y distribución son altas como resultado de la

agitación provocada por las burbujas de gas ascendentes. Mazumdar y Guthrie^[21] han realizado estudios de modelos de agua para investigar el movimiento subsuperficial de las adiciones flotantes y hundidas en el proceso CAS.

1.2.6 Modificación de inclusiones

La práctica generalizada de adiciones de calcio a las fundiciones de acero no comenzó hasta la década de 1960 con el desarrollo de métodos de adición mejorados y aleaciones compuestas que contienen calcio. Hoy en día, el tratamiento con calcio del acero es una práctica común, con especial énfasis en la modificación de la alúmina. Como resultado del tratamiento con calcio, las inclusiones de alúmina y sílice se convierten en aluminatos de calcio o silicatos de calcio en estado líquido. Estas inclusiones líquidas tienen forma globular debido a efectos de tensión superficial. Este cambio en la composición y la forma de la inclusión se conoce comúnmente como inclusión de control o modificación de la morfología. Estos cambios de morfología junto con el flujo del baño ayudan a que las inclusiones suban a la superficie del líquido y por interacciones sean absorbidas por la fase escoria. Esto ayuda a tener un mayor control en la composición final del acero.

Ejemplos de otras ventajas metalúrgicas provocadas por la modificación de inclusiones de óxidos y sulfuros mediante el tratamiento con calcio del acero son: mejora de la moldeabilidad en operaciones de colada continua mediante la minimización o prevención de la obstrucción de las boquillas; disminución de inclusiones relacionadas con los defectos superficiales en piezas fundidas de palanquilla, flor y losa; mejorando la maquinabilidad del producto final a altas velocidades de corte; y minimización de la susceptibilidad de baja aleación de alta resistencia (HSLA).

1.3 Fenomenología en el proceso

En la fabricación de acero, la inyección de gas se aplica de forma rutinaria, en varias etapas del refinado de la masa fundida, para mejorar las velocidades de reacción, eliminar gradientes térmicos y / o de composición, eliminar inclusiones, etc. La producción de acero de alta calidad requiere un control estricto de impurezas y composición química, para eliminar las impurezas e inclusiones, el burbujeo de gas juega un papel importante en la metalurgia del acero. El burbujeo de gas puede aumentar la tasa de eliminación de inclusiones por adhesión o captura de flujo de estela. Además, la agitación de gas es un medio importante para ofrecer la dinámica de fluidos y la homogeneización del acero fundido con respecto a la temperatura y al contenido de aleación, así como para promover reacciones en la interfaz acero-escoria.

Dado que la metalurgia de inyección en cuchara se está convirtiendo en una parte tan intrínseca de las operaciones del procesamiento de acero, los aspectos teóricos e industriales de estos procesos se han considerado con cierto detenimiento en diferentes estudios, las altas temperaturas y la opacidad visual del acero líquido, así como el gran

tamaño de las cucharas industriales, hacen que estas unidades de procesamiento sean no adecuadas y hasta peligrosas para las mediciones y observaciones experimentales directas. Por lo tanto, se han llevado a cabo modelos matemáticos de flujo de fluidos multifásicos y modelos físicos que incorporan sistemas de gas y metal tanto acuosos como líquidos (el agua y el acero tienen viscosidades cinemáticas equivalentes) para investigar la dinámica del proceso subyacente.

1.3.1 Descripción de los fenómenos en la cuchara de refinación.

La *Figura 1.6* proporciona un esquema de la inyección de gas en un cucharón lleno. Allí, como se ve, se inyecta Ar o N₂ a través de un tapón poroso, ubicado en la base de la cuchara, en un baño de acero fundido contenido en un recipiente cilíndrico ligeramente ahusado. El gas inyectado, dada su flotabilidad, sube a la superficie libre, induciendo así un flujo recirculatorio turbulento de líquido, bien conocido por mejorar la tasa de homogeneización química y térmica, así como acelerando la absorción de inclusiones no metálicas nocivas en una fase de escoria suprayacente.

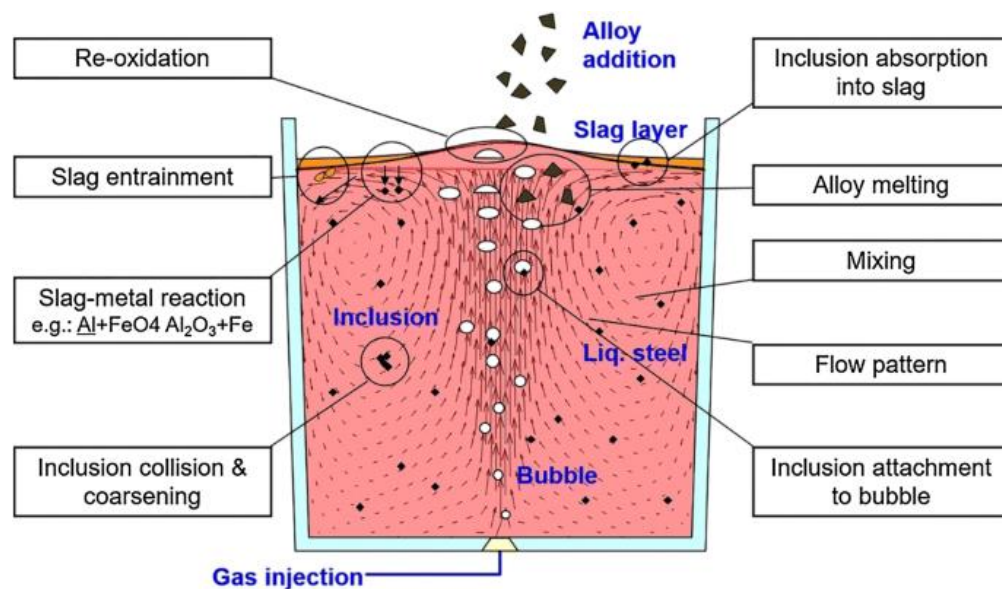


Figura 1.6. Esquema de purga de acero por inyección de gas en una cuchara de acero.

La mayoría de las partículas quedan atrapadas por la capa de escoria y una pequeña cantidad de partículas o inclusiones regresan al acero fundido. [22,23] El burbujeo de gas puede aumentar la tasa de eliminación de inclusiones debido a la adhesión de las inclusiones a las burbujas o porque las inclusiones siguen el flujo de estela de las burbujas. En este campo de investigación, muchos trabajos [24-29] han utilizado experimentos con agua para estudiar la distribución de velocidad media y fluctuante en las direcciones radial y axial, los perfiles de fracción de gas, la frecuencia de las burbujas, la longitud de penetración de las burbujas, la velocidad media de ascenso de las burbujas y el régimen de coalescencia de las burbujas discretas en la pluma.

La velocidad relativa entre el gas y el líquido, ^[30,31] la agitación de la superficie libre y la distribución de turbulencias ^[32] en la pluma también se han discutido. Se ha encontrado que la distribución de la velocidad está relacionada con varios caudales y la relación de aspecto de la profundidad del líquido y el diámetro del recipiente. Además, la distribución espacial del gas en la columna se puede describir completamente mediante la correlación de la fracción de gas axial y el número de Froude modificado: a medida que aumenta el caudal de gas, la velocidad axial central aumenta ligeramente y la velocidad radial también aumenta, haciendo que la pluma sea más ancha.

Como se ve en la *Figura 1.6*, los procesos involucrados en los sistemas de cuchara con agitación de gas son numerosos y complejos debido a la naturaleza multidimensional (bidimensional o tridimensional) y multifase (gas-metal y escoria) del sistema. Además, en la *Figura 1.6* se pueden identificar varios fenómenos distintos que incluyen interacciones gas-líquido, el desarrollo de un movimiento recirculatorio turbulento inducido por la pluma (mezcla gas líquido) en el seno del acero líquido, transferencia de masa entre la escoria y el metal en las proximidades de la superficie libre, etc.

1.3.2 Dinámica de fluidos

La *Figura 1.7* ilustra esquemáticamente los fenómenos físicos que se observarían durante el burbujeo de gas a través de una tobera ^[33] en un modelo acuoso de un sistema de cuchara con agitación de gas. Allí, la región de dos fases gas-líquido se ha subdividido en cuatro regiones físicamente distintas, burbuja primaria, burbuja libre, pluma y penacho, respectivamente. De éstos, la región de la pluma, caracterizada por burbujas de casquete esférico dispersas en una mezcla de aire y agua, es la más grande y ocupa la mayor parte de la profundidad del baño. En contraste, el pico ocupa típicamente aproximadamente del 3 al 4% de la profundidad del baño de equilibrio (en sistemas acuosos y de acero fundido).

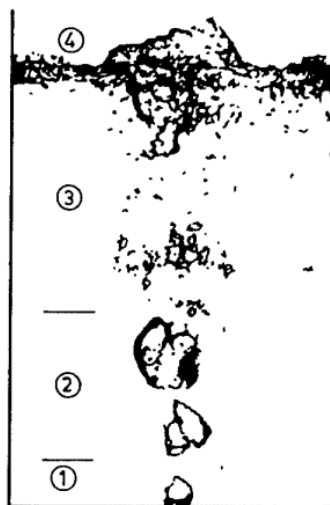


Fig. 1.7. Características de las columnas de dos fases (aire-agua) durante la inyección de gas a través de una tobera en un recipiente cilíndrico.

En la actualidad se acepta generalmente que, durante el refinado con cuchara de acero, en las inmediaciones de la boquilla, la energía cinética del gas de entrada, así como el modo de inyección del gas, son variables importantes, mientras que, en la región completamente desarrollada, estas variables prácticamente no influyen en el desarrollo general de la región de dos fases: gas-líquido (es decir, los tamaños de las burbujas, sus distribuciones espaciales y velocidades de subida son en gran medida independientes de las condiciones operativas de entrada) ya que las regiones "primaria" así como las de "burbuja libre" ocupan muy poco volumen del reactor.

Las consideraciones de continuidad de volumen sugirieron además que las fracciones de volumen de gas dentro de la columna ascendente son aproximadamente del 2 al 10% del volumen total de la columna de dos fases. Como consecuencia, se conceptualizó [34] que el fenómeno físico en cucharones agitados de Ar / N₂ puede aproximarse al de un chorro de líquido no confinado en el que se transfiere energía, en toda su longitud, mediante la acción de grandes burbujas que ascienden a la superficie de la masa fundida. Además, dichas columnas durante su ascenso se ensanchan progresivamente debido al arrastre del líquido circundante. Finalmente, los gases se descargan en la superficie libre hacia el medio ambiente superior mientras el líquido arrastrado fluye radialmente para crear un movimiento toroidal en el recipiente. La región donde las burbujas penetran en la fase superior (por ejemplo, aire) se conoce como el "ojo de la pluma".

La velocidad relativa de las burbujas en un penacho burbujeante puede estar razonablemente bien representada por la velocidad de subida terminal de una sola burbuja (del mismo tamaño). Se observó también experimentalmente que, a cualquier caudal de gas, la energía cinética de los movimientos medios y fluctuantes (es decir, la energía cinética específica total del movimiento en el sistema) se reduce considerablemente en presencia de la fase escoria o que flota en la parte superior.

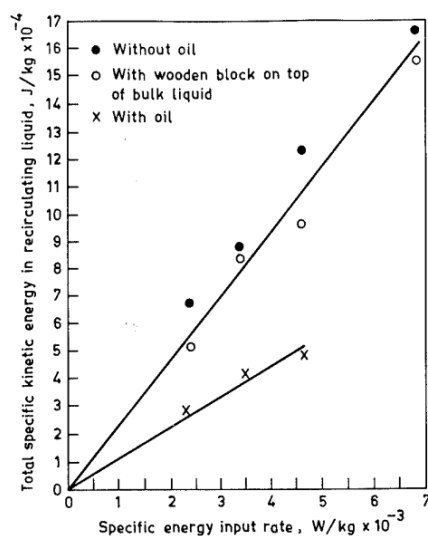


Fig. 1.8. Gráfico de la energía cinética total de recirculación contenida en la fase acuosa frente a la tasa de entrada de energía potencial específica bajo diversas condiciones de la fase superior (escoria rígida, fluida y sin escoria).

Esto se ilustra en la *Figura 1.8*, en la que la variación en la energía cinética total contenida en la fase acuosa recirculante, se representa frente a la tasa de entrada de energía específica, para varias condiciones de la fase escoria superior (es decir, condiciones rígidas, fluidas y sin escoria son mostradas). A partir de tales observaciones, queda claro que, en condiciones prácticas de refinado en cuchara, una fase superior de escoria puede disipar significativamente energía de agitación, y que esto será una función del espesor, la viscosidad y la densidad de la escoria, etc. Se necesita más trabajo experimental para cuantificar adecuadamente tales fenómenos.

En algunos experimentos y análisis, la energía cinética de los gases entrantes se ha incluido en la expresión de la tasa de entrada de energía específica a los sistemas, mientras que otros han ignorado tales contribuciones de energía cinética. Si bien la consideración de la energía cinética de entrada hace que el balance de energía sea más realista desde un punto de vista conceptual, es instructivo observar aquí que para las tasas de flujo de gas y las dimensiones del orificio que se aplican normalmente en la práctica real, la contribución de la energía cinética del gas (típicamente menos del 5% más o menos) en el balance de energía general es convertida en insignificante para todos los propósitos prácticos.

Sobre esta base, la energía cinética del gas entrante tiene poca relevancia en las operaciones de fabricación de acero de la metalurgia de cuchara y, por lo tanto, la energía potencial proporcionada por las burbujas de gas ascendentes puede considerarse convenientemente como el modo dominante de suministro de energía al sistema. También se ignoraron las contribuciones del trabajo de expansión debido a la presión, temperatura y la transferencia de energía cinética del gas al líquido cerca de la tobera, ya que no son de mucha relevancia para las operaciones de inyección de gas en la cuchara.

1.3.3 Criterio de escala

La conexión entre los experimentos de modelado físico y los ensayos industriales es el criterio de escala. [35,36] Utilizando la similitud geométrica $\left(\lambda = \frac{L_{\text{modelo}}}{L_{\text{prototipo}}}\right)$ y el número de Froude / número de Froude modificado, los parámetros se convierten primero en patrones adimensionales. Entonces, sus expresiones adimensionales se correlacionan matemáticamente. Es importante señalar aquí que, dado que los flujos en las cucharas de refinación industrial a gran escala son necesariamente turbulentos, la escala de un modelo debe elegirse para garantizar condiciones de flujo turbulentas. Esto, a su vez, implicaría relaciones similares de fuerzas viscosas de inercia a turbulencia entre el modelo y el sistema a escala completa. Como tal, la cuestión de la similitud de las fuerzas viscosas de turbulencia en modelos de escala reducida de tamaño razonable nunca ha sido motivo de preocupación.

1.3.4 Mezclado

Las eficiencias intrínsecas de muchas operaciones de procesamiento químico que se llevan a cabo en las cucharas de acero de hoy en día están íntimamente relacionadas con los fenómenos de mezcla. El mezclado mejora las reacciones químicas al poner en contacto íntimo a los reactivos y eliminar los productos de los sitios de reacción. También influye en el grado de falta de homogeneidad térmica y en la dinámica de las partículas dentro de la cuchara. Por lo tanto, es importante determinar el grado de mezclado para evaluar el rendimiento del proceso de cucharas agitadas con argón o nitrógeno.

Muy a menudo, el concepto de tiempo de mezcla, T_m , se ha aplicado para representar el estado de agitación (y por lo tanto, un índice de eficiencia del proceso) en el contenedor del reactor. El tiempo de mezcla se define como el tiempo en el que la concentración del aditivo trazador alcanza una concentración del 95%, por ejemplo, una mezcla se considera homogeneizada si todas las mediciones del trazador se encuentran arriba del 95% en todo el volumen de la fase líquida. Se han realizado esfuerzos para cuantificar, experimentalmente, el tiempo de mezcla en función de las variables operativas (p. Ej., L altura del líquido, D diámetro de la olla, Q flujo de gas, etc.), utilizando modelos acuosos debidamente escalados. Para ello, se han aplicado diferentes técnicas experimentales, aunque los métodos basados en mediciones de pH y conductividad eléctrica han sido relativamente más populares. En sistemas equivalentes de alta temperatura, se han llevado a cabo pruebas de dispersión de trazadores radioactivos para estimar las velocidades de mezcla de metales.

1.3.5 Posición de las mediciones y del agregado del trazador

Varios investigadores han informado que el estado de la mezcla en un baño de gas agitado bajo un conjunto dado de condiciones de operación es una función de la ubicación de los puntos de monitoreo y adición del trazador. Este fenómeno se observó a caudales de gas específicos relativamente bajos (por ejemplo, en el rango aplicado a las operaciones típicas de inyección de gas en cuchara), independientemente de los criterios aplicados para evaluar el grado de mezcla. Como se muestra en la *Figura 1.9*, en varios lugares del recipiente, se observaron diferentes relaciones funcionales para gobernar los fenómenos de mezcla. Allí, como se ve, la combinación de la ubicación de la sonda, así como el punto de adición del trazador, parecen tener una influencia significativa en los tiempos de mezcla medidos.

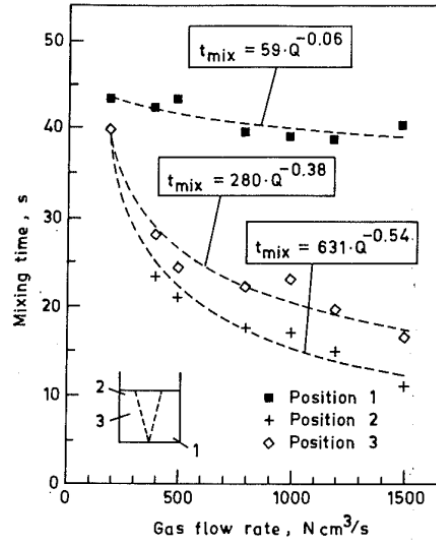


Fig. 1.9. Trabajo experimental de Mietz y Oeters que muestra la influencia de la ubicación del punto de monitoreo en el tiempo de mezcla medidos para la posición central de la boquilla y adición de trazador en la zona muerta.

La presencia de una fase de escoria se debe considerar en las operaciones industriales de agitación de argón. Así, Haida y colaboradores^[37] investigaron el papel de una capa superior de escoria (por ejemplo, aceite) en la mezcla de líquidos a granel con la ayuda de un modelo de agua. Estos autores encontraron que los tiempos de mezcla medidos con una fase "escoria" tendían a ser considerablemente diferentes a los de situaciones equivalentes "sin escoria". Tales observaciones se pueden racionalizar fácilmente, ya que se sabe que el estado hidrodinámico del recipiente, a cualquier caudal de gas, es diferente en presencia de un líquido de segunda fase superpuesto.

1.3.6 Transferencia de calor y masa

Las interacciones sólido - líquido y el transporte resultante de calor y / o masa son características de muchos procesos que se llevan a cabo en cucharas de refinación y son un tema de considerable interés e importancia para los ingenieros metalúrgicos. Por lo tanto, se han realizado y reportado numerosos estudios experimentales para investigar las interacciones escoria-metal-gas en sistemas de cucharones agitados con gas, incorporando condiciones experimentales muy variadas (a saber, geometría del recipiente, caudal de gas, dispositivos de inyección de gas, etc.). Las reacciones químicas entre burbujas de gas y el seno del líquido se han simulado comúnmente utilizando sistemas acuosos de reacción apropiados y sabiendo que las condiciones hidrodinámicas que prevalecen en los sistemas de cuchara con agitación de gas son de naturaleza turbulenta.

Se encontró que los dispositivos de inyección de gas (por ejemplo, tapones porosos, toberas, lanzas) tienen grandes efectos sobre las velocidades de absorción en sistemas acuosos. Por ejemplo, a cualquier caudal dado, los tapones porosos mejoran las velocidades de absorción de gas de manera significativa en comparación con la inyección con una tobera. Un tapón poroso produce burbujas relativamente más pequeñas, uniformemente distribuidas, lo que conduce a un aumento en el área interfacial efectiva y, por lo tanto, a una mayor tasa de transferencia de masa gas-líquido.

En estudios de visualización de flujo publicados hasta ahora en los sistemas de agua y aceite agitados con burbujas indican que la interfaz agua-aceite (es decir, interfaz escoria-metal) puede sufrir perturbaciones considerables y, por lo tanto, producir una serie de fenómenos físicos complejos, como deformación extensa de la interfaz, formación de emulsión de aceite, generación y arrastre de gotas, etc. Por lo tanto, a velocidades de flujo de gas relativamente bajas, la interfaz permanece razonablemente imperturbada, pero con velocidades de flujo crecientes. Las emulsiones tienden a formarse en la interfaz agua-aceite como se puede observar en la *Figura 1.10* que conduce a un aumento significativo en el área interfacial agua-aceite. A tasas de flujo específicas aún más altas, toda la capa de aceite se descompone en numerosas gotitas que conducen a la formación de una emulsión de aceite en agua.

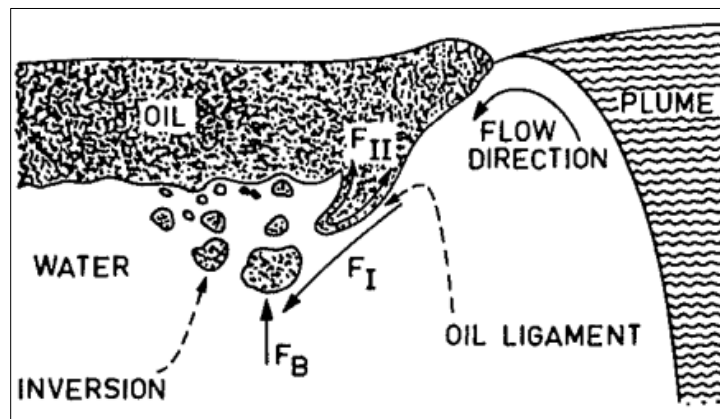


Fig. 1.10. Esquema de las interacciones entre la pluma y los líquidos de la fase superior e inferior.

1.4 Estudios combinados de modelado físico y matemático

Las condiciones de funcionamiento (es decir, alta temperatura y opacidad visual del metal líquido, tamaño masivo de los reactores industriales, etc.) que prevalecen en las plantas de acero plantean serios problemas para cualquier investigación experimental directa o elaborada. En consecuencia, los modelos matemáticos, junto con los modelos físicos apropiadamente reducidos, han sido una alternativa razonable hacia un análisis de procesos efectivo. Hasta la fecha, se ha llevado a cabo y se ha informado sobre un gran número de investigaciones combinadas teóricas y experimentales sobre aspectos muy variables de los cucharones agitados con argón. En estos, se han realizado considerables esfuerzos para desarrollar un marco matemático confiable y predictivo que pueda extrapolarse convenientemente para investigar fenómenos relevantes en sistemas industriales.

Los estudios computacionales de los fenómenos de mezcla en cucharas de modelos de agua a escala y en el tamaño industrial confirman que el caudal de gas y la geometría del recipiente afectan la mezcla y que las velocidades de mezcla varían considerablemente de un lugar a otro en tales recipientes con agitación de gas. Joo y Guthrie^[38] informaron sobre fenómenos de mezcla en cucharas agitadas por gas diseñadas para operaciones de burbujeo de tapón simple y doble. Sus resultados computacionales y observación experimental confirmaron que a medida que los tapones se mueven fuera del centro, los momentos angulares aumentan, reduciendo considerablemente los tiempos de mezcla. Se encontró que una colocación en el radio medio de un tapón poroso representa una ubicación óptima para el burbujeo de un solo tapón, mientras que la colocación de los tapones en el radio medio diametralmente opuestos resultó ser la mejor para el burbujeo de un tapón doble.

Otro estudio de Sheng y Irons^[39] demuestra que los flujos dentro de la propia zona de dos fases son de hecho bastante sensibles a la elección de los modelos de turbulencia utilizados en el procedimiento de cálculo. Se demostró que las suposiciones de deslizamiento de burbujas (o sin deslizamiento), la aplicación de funciones de pared con una fórmula de viscosidad efectiva en masa (o ninguna función de pared), etc., pueden tener un efecto significativo en los resultados calculados y, por lo tanto, las conclusiones extraídas de los estudios de modelos matemáticos son una función de estas consideraciones. También es útil señalar que la intensidad de la turbulencia dentro de una cuchara con agitación de gas depende en gran medida del espacio. Además, los flujos a través de la base del cucharón y las regiones profundas dentro del cucharón se encuentran entre los más lentos. En consecuencia, las regiones en las que se hacen mediciones pueden afectar en gran medida las conclusiones extraídas.

1.5 Modelos numéricos para el estudio de la zona de gas-líquido en el refinado de cuchara

Para describir el flujo de dos fases gas-líquido, hay cuatro métodos matemáticos principales: (1) el modelo cuasi-monofásico, (2) el modelo de volumen de fluido (VOF), (3) el modelo multifásico Euleriano (E-E), y (4) el modelo Euleriano-Lagrangiano (E-L). En las primeras obras, la zona de la pluma mezclada con gas y líquido se trató como una fase cuasi monofásica. Con el aumento de las capacidades computacionales, los modelos VOF y E – E se han vuelto ampliamente utilizados para la simulación de las interacciones de interfase de las fases gas y líquida. En comparación con el modelo predictivo cuasi-monofásico, los modelos VOF y E – E son más costosos desde el punto de vista computacional. Recientemente, los códigos comerciales junto con las funciones definidas por el usuario (UDF) se han utilizado ampliamente para el estudio del burbujeo de gas en cucharas. En los últimos años, un nuevo enfoque se ha propuesto calcular la distribución del tamaño de las burbujas de gas dentro del modelo E – E basado en el modelo de balance de población (PBM). En el modelo E – L, el modelo VOF se usa para rastrear la superficie libre de la masa fundida acoplada en coordenadas Eulerianas, mientras que el modelo de fase discreta (DPM) se usa para describir la agitación generada por las burbujas bajo un marco de referencia Lagrangiano

1.5.1 Modelo cuasi-monofásico

El modelo cuasi-monofásico es el más simple de los cuatro modelos discutidos anteriormente. El modelo cuasi-monofásico evita la necesidad de calcular el movimiento de las burbujas. El principio clave de este modelo es que las características de la pluma, como la fracción de gas, el patrón de velocidad y el diámetro de la pluma, se establecen mediante ecuaciones empíricas. Por tanto, la ecuación de la fracción de volumen no está acoplada al grupo de ecuaciones que se va a resolver. Un término de flotabilidad generado por el burbujeo de gas se agrega a la ecuación de conservación del momento. En este modelo, la pluma se trata como una fase cuasi-monofásica en la que la fracción de volumen de gas en cada volumen de control se ve afectada por varios parámetros durante el cálculo. El modelo cuasi-monofásico se ha utilizado principalmente para predecir el patrón de flujo en la cuchara porque este modelo tiene un bajo gasto computacional. En el modelo cuasi-monofásico, las ecuaciones de continuidad y el impulso se escriben de la siguiente manera.

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.5)$$

Ecuación de momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \rho \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} = -\nabla p + \nabla \cdot [(\mu + \mu_t)(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)] + \rho_1 \vec{g} \alpha_g \quad (1.6)$$

Donde la densidad en la pluma es $\rho = \alpha_g \rho_g + \alpha_1 \rho_1$, y en la zona de recirculación se trata como una fase líquida $\rho = \rho_1$.

Además, Ganguly y Chakraborty^[40] acoplaron la ecuación de energía térmica con el modelo cuasi-monofásico para estudiar el flujo de fluido y la transferencia de calor en la cuchara con agitación de gas. El modelo combinado tenía como objetivo controlar la estratificación térmica en el acero fundido. El mismo grupo de investigación también estableció un modelo cuasi-monofásico basado en el deslizamiento y sin deslizamiento entre las burbujas ascendentes y el líquido circundante. ^[41] En comparación con las velocidades experimentales y los datos del tiempo de mezcla, el cálculo numérico con deslizamiento mostró una precisión mayor que el que no presenta deslizamiento para predecir el patrón de flujo.

1.5.2 Modelo de volumen de fluido VOF

El modelo VOF se usa ampliamente para rastrear las interfaces de diferentes fases y es un tipo de método Euleriano. Cuando el caudal es bajo, se generan burbujas separadas y las interfaces de las diferentes fases son nítidas. A medida que aumenta el caudal, la inyección de gas hace que la pluma pase de un régimen de burbujas a un régimen de chorro. En el modelo VOF, se calcula un conjunto de ecuaciones para la continuidad, el momento y la fracción de volumen de fase. Las fórmulas de conservación se muestran a continuación.

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (1.7)$$

Ecuación de momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{u}) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [(\mu + \mu_t)(\nabla \vec{u} + \nabla \vec{u}^T)] + \rho \vec{g} + F_s \quad (1.8)$$

Fracción volumen:

$$\frac{\partial \alpha_q}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \alpha_q = 0 \quad (1.9)$$

$$\sum \alpha_q = 1$$

(q es la fase fluida, por ejemplo, líquido y gas)

1.5.3 Modelo de fuerza de superficie continua

$$F_s = \sigma \frac{\rho k \nabla \alpha_1}{0.5(\rho_1 + \rho_g)} \quad k = \nabla \cdot \hat{n} \quad \hat{n} = \frac{\nabla \alpha_1}{|\nabla \alpha_1|} \quad \hat{n} = \nabla \alpha_g \quad (1.10)$$

Debido a la capacidad del modelo VOF para rastrear la interfaz nítida, este modelo se ha utilizado en tres puntos de análisis principales: para modelar la interfaz de las fases gas-líquido, acoplado con el DPM y acoplado con modelos termodinámicos. Xu y colaboradores [42,43] consideraron la fuerza de la superficie en el modelo VOF para investigar una sola burbuja que se eleva en el acero fundido y estalla en la interfaz. Además, el efecto de la humectabilidad en la formación de una sola burbuja se informó sobre la base de las predicciones del modelo VOF y los datos experimentales arrojados con modelos de agua. Por lo cual, el modelo VOF se utiliza principalmente para rastrear las interfaces nítidas de diferentes fases para el análisis de la separación de burbujas y la apertura del ojo de escoria.

También este modelo fue empleado para estudiar la influencia de varias disposiciones de inyección de gas en el tiempo de mezcla, el coeficiente de fricción de la superficie de la pared y el área abierta de los ojos. Al realizar una comparación con el número de toberas de inyección de argón que se utilizan para la homogenización térmica y química en una olla de mezclado, se observó que el uso de dos toberas de inyección de argón no mostró una reducción obvia en el tiempo de mezclado respecto a la inyección con una sola tobera. Sin embargo, la apertura de la capa de escoria y el valor del coeficiente de fricción de la pared aumentaron.

1.5.4 Modelo multifásico Euleriano E – E.

En el modelo E – E, se calculan múltiples conjuntos de ecuaciones para la continuidad, el momento, la energía turbulenta y la tasa de disipación para cada fase. Esta mayor complejidad afecta el comportamiento de convergencia. Los modelos E – E pueden usarse para incluir los efectos de fuerzas, como la fuerza de masa virtual, la fuerza de arrastre, la fuerza de elevación y la fuerza de disipación turbulenta, en el patrón de flujo.

Según este modelo, [44-48] Se ha desarrollado un acoplamiento con el PBM para simular el comportamiento de las burbujas de tamaño inferior generadas por un tapón poroso en la zona de la pluma. [49] En este modelo, se resuelven las ecuaciones de conservación.

Ecuación de continuidad:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) = S_q \quad (1.11)$$

($q = l$ es la ecuación para la fase líquida, $q = g$ es la ecuación para la fase gas, y $q = p$ es la ecuación para la partícula)

Ecuación de conservación de momentum:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q \vec{u}_q) = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \vec{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \vec{F}_{drag,q} + \vec{F}_{lift,q} + \vec{F}_{VM,q} + \vec{F}_{TD,q} \quad (1.12)$$

Descripción del comportamiento de las burbujas por PBM:

$$\frac{\partial}{\partial t}(n(V, t)) + \nabla \cdot (\vec{u}_i n(V, t)) = B_{ag,i} - D_{ag,i} + B_{br,i} - D_{br,i} \quad (1.13)$$

Basándose en el mismo código, ^[50-52] también se combinaron dinámica de fluidos y termodinámica para estudiar el patrón de flujo y las reacciones químicas alrededor de la interfaz acero-escoria.

1.5.5 Modelo Euleriano-Lagrangiano E – L.

En el DPM, las fuerzas, como la masa virtual, la flotabilidad, la fuerza de arrastre, la fuerza de elevación y el gradiente de presión, se agregan a cada partícula de burbuja. El término fuente de impulso se agrega a la ecuación de impulso de fase continua sumando las contribuciones locales de cada burbuja en el campo de flujo de fase continua:

$$F_{bi} = \sum_1^{N_b} (F_{Di}(\vec{u}_i - \vec{u}_{bi}) + \frac{\rho_b - \rho}{\rho_b} \vec{g} + \frac{1}{2} \frac{\rho}{\rho_b} \frac{d}{dt} (\vec{u}_i - \vec{u}_{bi}) + \frac{\rho}{\rho_b} \vec{u}_i \cdot \nabla \vec{u}_i) \rho_b Q_{bi} \Delta t \quad (1.14)$$

Inicialmente, se desarrolló un modelo E – L en el paquete comercial ANSYS FLUENT por parte de Aoki et al.^[53] quienes utilizaron este modelo para estudiar cómo la morfología de la burbuja afecta la probabilidad de apego por inclusión. En los cálculos se tuvieron en cuenta las fuerzas de interacción sobre la columna de líquido-gas. Además, Singh et al.^[54] usó un modelo similar y mejoró la resolución de la cuadrícula cerca de la pared para investigar la distribución del esfuerzo cortante de la pared en un recipiente con agitación de gas.

1.6 Modelos de turbulencia aplicados en la refinación de cucharas.

Con respecto a los modelos de turbulencia aplicados en el modelado matemático de la metalurgia de cuchara, se han utilizado ampliamente dos tipos de modelos de turbulencia, a saber, el modelo k-ε y el modelo LES. El modelo k-ε estándar se usa más comúnmente para el cálculo del patrón de flujo en cucharas industriales.

El modelo k-ε es una simulación numérica promediada de Reynolds (RANS), que promedia la información numérica de remolinos con varios tamaños. Sin embargo, en el modelo LES, los remolinos grandes y pequeños se tratan por separado en los cálculos. Los remolinos grandes se resuelven directamente y los remolinos pequeños se calculan mediante el modelo de subcuadrícula de Smagorinsky-Lilly. Aquí, el modelo LES puede

verse como un compromiso entre la simulación numérica directa y el modelo RANS en términos de precisión y costo computacional.

Con el desarrollo de las habilidades computacionales, el modelo LES^[55-57] se ha utilizado cada vez más para predecir el atrapamiento de escoria y la distribución de burbujas en el modelado de sistemas metalúrgicos.

1.7 Comparación de sistemas de cálculo

Para el análisis de las burbujas separadas y la apertura del ojo de escoria, se ha utilizado principalmente el modelo VOF, que permite rastrear las interfaces nítidas de las diferentes fases. Además, el modelo cuasi-monofásico, el modelo E-E y el modelo E-L se han utilizado ampliamente para calcular los patrones de flujo en cucharas metalúrgicas industriales. La principal diferencia entre estos tres modelos es cómo se tratan las interacciones gas-líquido. Las expresiones para las interacciones gas-líquido en los modelos numéricos son las fuerzas agregadas a la ecuación del momento. De estos, en términos de complejidad computacional, el procedimiento cuasi-monofásico es con mucho el más simple de los tres modelos. En este modelo, la forma de la zona de dos fases se predice de antemano, por lo que este modelo no puede describir con precisión el patrón de flujo de la circulación en la cuchara.

El modelo E-E es más consistente con los resultados experimentales, y el modelo E – L es la segunda mejor opción. Debido a la alta fracción de volumen en la zona primaria, el modelo E – E es más preciso para describir los fenómenos en esta zona. Con respecto a la distancia axial desde la salida de la boquilla y la transformación de las burbujas en la pluma, el DPM es más adecuado para la predicción del comportamiento de las burbujas en la zona de flotación de la burbuja y en la zona del penacho. La modificación del coeficiente de arrastre y la adición de fuerzas que no son de arrastre mejora considerablemente el modelo E – E. La velocidad del líquido axial predicha a lo largo de la dirección radial en $L / H = 0.5$ desde el fondo para las mismas condiciones en el modelo cuasi-monofásico, modelo E – E, y E – L modelo se comparan con datos medidos experimentalmen en la *Figura 1.11*.

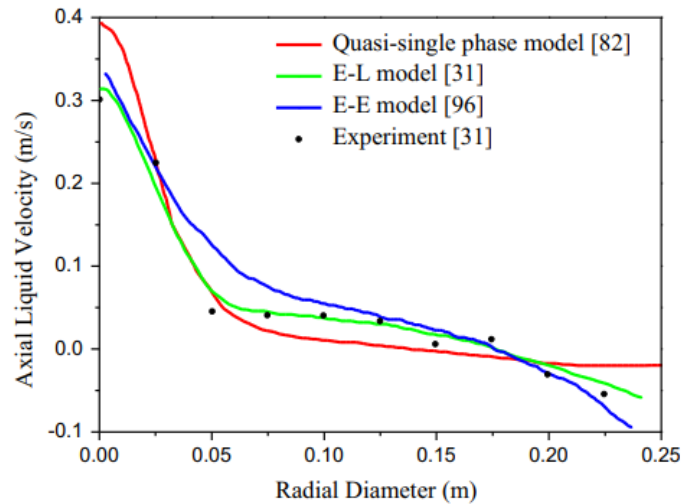


Fig. 1.11. Comparación de las velocidades axiales del líquido predichas y medidas a lo largo de la dirección radial en $L/H = 0.5$ desde el fondo en las mismas condiciones.

En estudios de metalurgia de cucharas, basados en el modelo E-E modificado en condiciones de agitación de gas, se han acoplado un gran número de modelos especiales, ya sea en paquetes comerciales o códigos de investigación, para describir los complejos fenómenos físicos y químicos en el cucharón. Esto incluye comportamiento de inclusión, desgasificación, erosión refractaria y reacciones termodinámicas. Con base en la evidencia presentada, se demuestra que, a pesar de la naturaleza compleja de los sistemas de agitación de gas, los modelos matemáticos, forman un razonable buen punto de partida para los cálculos que describen los procesos y fenómenos en el área de dinámica de fluidos, modelado físico, perfil y estructura de la pluma, tiempo de mezcla, transferencia de calor y masa, etc.

Esta larga revisión de la literatura da cuenta de la gran cantidad de trabajo experimental y teórico realizado para entender el funcionamiento de ollas de acero agitadas con gas en sus distintos aspectos, como flujo de fluidos, transferencia de calor y masa, fenómenos como la emulsión, dinámica de partículas y de burbujas, etc. La idea de la presentación de esta extensa revisión es que el lector sepa que la investigación en la olla ha sido muy recurrente y común, pero que hay aspectos o detalles de la física que gobierna la olla que aún requieren atención porque sigue existiendo controversia, tal como es el caso de la posición de inyección del trazado en la determinación del tiempo de mezclado.

En el presente estudio se pretende evaluar uno de los aspectos más importantes en la productividad y calidad del acero en la metalurgia secundaria que es el mezclado químico, cuya eficacia se cuantifica a través del tiempo de mezclado. Específicamente se pretende resolver la duda del efecto de la posición inicial de inyección del trazador sobre el tiempo de mezclado, pregunta que aún permanece abierta en la literatura

moderna del área. Esta pregunta la vamos a contestar haciendo uso de modelos matemáticos previamente desarrollados que son el estado del arte actual.

1.8 Hipótesis

El tiempo de mezclado no solo depende del flujo de gas, posición de la tobera, sino también de la posición de inyección del soluto. Se sugiere que la posición de inyección del trazador puede definir con alta significancia (al igual que el flujo de gas) el tiempo de mezclado.

1.9 Objetivo

Determinar cuantitativamente el efecto que tiene la posición de inyección del soluto sobre el tiempo de mezclado.

Objetivos Particulares:

- Encontrar el efecto de variar la posición de inyección de soluto en una grid definida de puntos sobre el tiempo de mezclado en inyección de gas por el centro.
- Establecer como varía el mezclado en diferentes zonas del sistema.
- Establecer el mejor y el peor punto de inyección de soluto para minimizar el tiempo de mezclado y explicar las razones de este comportamiento.
- Evaluar el empleo de software CFD como una herramienta en el modelado del sistema bajo estudio.
- Verificar si la hipótesis de aximetría del sistema es válida en este caso.

Capítulo 2. Metodología

Introducción

La olla de acero simulada es en realidad una olla a escala 1/17 de un modelo físico que usa agua en vez de acero y aire en vez de argón. La metodología consistió en describir el modelo matemático incluyendo suposiciones, ecuaciones gobernantes y condiciones iniciales y a la frontera. Después se presenta el método de solución en el software Fluent Ansys haciendo énfasis en el mallado y finalmente la validación del modelo matemático es presentada.

2.1 Modelo matemático

2.1.1 Suposiciones

Las suposiciones simplificativas tienen el propósito de hacer posible la simulación eliminando complejidades que haría inviable la simulación, pero siempre tomando en cuenta que el realismo de la simulación es lo que garantiza una buena representación de la realidad, es decir, un buen modelo. Las suposiciones que se tomaron en cuenta para este caso son las siguientes:

1. Modelo en tres dimensiones de olla completa.
2. Se considera el sistema como isotérmico, por lo que la ecuación de transporte de energía no aplica.
3. Las propiedades de las tres fases (agua, aceite y aire) son constantes, es decir, se trata de fluidos Newtonianos e incompresibles.
4. Se asume un estado estable donde las variables y ecuaciones de transporte no dependen del tiempo.
5. Se asume que la fase gas (aire) tiene una forma esférica y radio constante igual a 1×10^{-2} m.
6. El coeficiente de arrastre describe la interacción principal entre la fase agua y aire, la fuerza de arrastre.
7. Se asume el marco de referencia Euleriano y se asume el modelo multifásico Euler-Euler.

2.1.2 Ecuaciones gobernantes

De acuerdo al modelado matemático del caso estudiado se precisa definir las ecuaciones gobernantes de los fenómenos estudiados y modelados en la olla de mezclado. Se trata de un problema de flujo de fluidos trifásico y con transporte de masa para tomar en cuenta el mezclado químico. Las ecuaciones gobernantes que se necesita resolver son:

- a) Ecuación de fracción de volumen para cada fase.
- b) Ecuación de continuidad para cada fase.
- c) Ecuación de transporte de momentum o cantidad de movimiento para cada fase.
- d) Ecuaciones del modelo de turbulencia *k-ε Realizable*.
- e) Ecuaciones de fuerzas de interfase o intercambios de momentum entre fases.
- f) Ecuación de conservación de especies químicas.

a) Ecuación de fracción de volumen

El volumen de la fase q, V_q está dado por la integral de volumen:

$$V_q = \int_V \alpha_q dV \quad (2.1)$$

α_q es la fracción de volumen de la fase q, por tanto, la suma de la fracción de volumen de todas las fases debe ser 1:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (2.2)$$

b) Ecuación de continuidad para cada fase

La ecuación de continuidad para cada fase q, asumiendo fluidos incompresibles, es:

$$\nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = 0 \quad (2.3)$$

Donde ρ_q , \vec{v}_q son la densidad y el vector velocidad de la q-ésima fase respectivamente.

c) Ecuación de transporte de momentum para cada fase

La ecuación de transporte de momentum para cada fase es:

$$\nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla P + \nabla \cdot (\alpha_q \mu_{ef,q} (\nabla \vec{v}_q + (\nabla \vec{v}_q)^T)) + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \vec{F}_T \quad (2.4)$$

Para la fase agua:

$$\mu_{ef,l} = \mu_{i,l} + \mu_{t,l} \quad (2.5)$$

Para otras fases:

$$\mu_{ef,q} = \mu_{l,q} \quad (2.6)$$

Donde P , $\mu_{ef,q}$, \vec{g} son la presión, la viscosidad efectiva de la fase q, la aceleración de la gravedad respectivamente. La viscosidad efectiva para la fase agua es la suma de la viscosidad molecular del líquido ($\mu_{l,l}$) y la viscosidad turbulenta del líquido ($\mu_{t,l}$) definida por el modelo de turbulencia utilizado.

Para las otras fases solamente se usa la viscosidad molecular del líquido ($\mu_{l,q}$). \vec{F}_T es la suma de fuerzas interfaciales.

d) Ecuaciones del modelo de turbulencia k-ε Realizable

El modelo k-ε estándar se ha utilizado tradicionalmente para resolver una sola fase turbulenta. En los últimos años se han desarrollado modelos alternativos de turbulencia tomando como base el modelo k-ε estándar. Dichos modelos son el RNG k-ε y el k-ε Realizable, los cuales modifican algunos términos de las ecuaciones de turbulencia o se consideran algunos términos extras en las mismas. Al tratarse de un sistema trifásico, se tiene que tomar en cuenta las contribuciones de la turbulencia inducida por las burbujas y la interacción turbulenta entre las fases. Las ecuaciones de k, la energía cinética turbulenta, y ε, la disipación de la energía cinética turbulenta son resueltas principalmente para la fase primaria, en éste caso el agua. Las ecuaciones a resolver son:

Viscosidad turbulenta:

$$\mu_{t,l} = C_\mu \rho_l \frac{k_l^2}{\varepsilon_l} \quad (2.7)$$

La principal diferencia del modelo k-ε Realizable con los demás modelos k-ε es que C_μ ya no es constante y es función de parámetros adicionales, por lo tanto se tiene:

$$C_\mu = \frac{1}{\frac{A_0 + A_S}{k_l U^*} \varepsilon_l} \quad (2.8)$$

Donde A_0 , A_S y U^* son parámetros del modelo que involucran tasas de rotación y velocidades angulares del fluido.

Ecuación de conservación de k energía cinética turbulenta “k”:

$$\nabla \cdot (\alpha_l \rho_l k_l \vec{v}_l) = \nabla \cdot \left(\alpha_l \left(\mu_l + \frac{\mu_{t,l}}{\sigma_k} \right) \nabla k_l \right) + \alpha_l G_{k,l} + \alpha_l G_b - \alpha_l \rho_l \varepsilon_l \quad (2.9)$$

Ecuación de conservación de ε disipación de la energía cinética turbulenta “ ε ”:

$$\nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \varepsilon_l \vec{v}_l) = \nabla \cdot \left(\alpha_l \left(\mu_l + \frac{\mu_{t,l}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_l \right) + \alpha_l C_1 \left(\frac{\varepsilon_l}{k_l} G_b C_3 + \rho_l \Pi_{\varepsilon,l} \right) - \alpha_l \rho_l C_2 \frac{\varepsilon_l^2}{k_l + \sqrt{\frac{\varepsilon_l \mu_l}{\rho_l}}} + \alpha_l \rho_l \Pi_{\varepsilon,l} \quad (2.10)$$

Donde k_l , ε_l son la energía cinética turbulenta y la disipación de dicha energía de la fase líquida (agua (l)) respectivamente. C_1 , C_2 , C_3 , σ_k y σ_ε son constantes del modelo, cuyos valores son 1.44, 1.92, 1.3, 1.0 y 1.2 respectivamente. $G_{k,l}$ es la producción de energía cinética turbulenta debida a los gradientes de velocidad promedio de la fase líquida agua. G_b es la energía cinética turbulenta adicional inducida por las burbujas (interacción turbulenta). $\Pi_{k,l}$ y $\Pi_{\varepsilon,l}$ representan la influencia de la fase dispersa (aire) en la turbulencia de la fase continua (agua) y se definen como:

$$\Pi_{k,l} = K_{gl} \frac{\rho_g}{\rho_l + \rho_l C_A} (-2k_l + k_{gl} + \vec{v}_{rel} \cdot \vec{v}_d) g \alpha_g \quad (2.11)$$

$$\Pi_{\varepsilon,l} = C_3 \frac{\varepsilon_l}{k_l} \Pi_{k,l} \quad (2.12)$$

K_{gl} , C_A , k_{gl} , \vec{v}_{rel} y \vec{v}_d están definidas por las fuerzas de interfase descritas a continuación.

e) Ecuaciones de fuerzas de interfase

Como se mostró en la ecuación de transporte de momentum para cada fase, se agrega un término extra que representa las contribuciones por las interacciones entre las fases presentes. El término fuente \vec{F}_T se define:

$$\vec{F}_T = F_A + F_{MV} + F_E + F_{DT} \quad (2.13)$$

Donde F_A , F_{MV} , F_E , F_{DT} son la fuerza de arrastre, la masa virtual, la fuerza de empuje y la fuerza de dispersión turbulenta respectivamente. La fuerza de arrastre es la fuerza dominante y las más importantes en el fenómeno estudiado. La masa virtual no tiene gran contribución, así como la fuerza de empuje y pueden ser ignoradas. La fuerza de dispersión por el contrario puede llegar a tener cierta importancia y debe de tomarse en cuenta.

Fuerza de arrastre

La fuerza de arrastre es de gran importancia en el fenómeno estudiado y es una interacción entre la fase líquida (l) y la fase gas (g), tiene la siguiente definición:

$$F_A = \frac{3\alpha_g \alpha_l \rho_l C_A}{4\bar{d}_g} (\vec{v}_g - \vec{v}_l) \quad (2.14)$$

Donde C_A es el coeficiente de arrastre y tiene distintas definiciones dependiendo el modelo (por ejemplo: Schiller-Naumann, Tomiyama, Kolev, etc.). \bar{d}_g es el diámetro promedio de las burbujas.

El modelo de arrastre que modela mejor la burbuja es el modelo symmetric y define C_A como:

$$C_A = \begin{cases} \frac{24(1 + 0.15Re^{0.687})}{Re} & Re \leq 1000 \\ 0.44 & Re > 1000 \end{cases}$$

Donde Re es el número de Reynolds

Fuerza de empuje

La fuerza de empuje está definida por:

$$F_E = -\alpha_g C_E \rho_l (\vec{v}_g - \vec{v}_l) \times (\nabla \times \vec{v}_l) \quad (2.15)$$

Donde C_E es el coeficiente de empuje y puede tener valores de 0.02, 0.1 y 0.5 (se utilizó el valor de 0.5).

Fuerza de dispersión turbulenta:

$$F_{DT} = K_{gl} \vec{v}_d \quad (2.16)$$

Donde K_{gl} es el coeficiente de intercambio de momentum en la interfase, el cual depende del modelo utilizado y \vec{v}_d es la velocidad a la deriva que es la relación entre la velocidad fluctuante y la distribución espacial de las partículas definida como:

$$\vec{v}_d = \frac{D_{gl}^t}{\omega_{gl}} \left(\frac{1}{\alpha_l} \nabla \alpha_l - \frac{1}{\alpha_g} \nabla \alpha_g \right) \quad (2.17)$$

$$D_{gl}^t = \frac{1}{3} k_{gl} \tau_{gl}^t \quad (2.18)$$

Donde D_{gl}^t , ω_{gl} son el coeficiente de dispersión turbulenta y el número de Prandtl de dispersión respectivamente, que usualmente toma el valor de 0.75. El coeficiente de dispersión turbulenta está definido por K_{gl} el cual representa el coeficiente de correlación entre las fluctuaciones de velocidad de las fases l y g y también es utilizado para modelar la interacción turbulenta. El modelo más adecuado para calcular dicho coeficiente fue el modelo de Troshko-Hassan. Asimismo τ_{gl}^t representa el tiempo turbulento característico de las burbujas. Se trató de modelar la dispersión turbulenta pero no se tuvo éxito.

f) Ecuación de conservación de especies químicas

La ecuación de conservación de especies químicas en la fase agua es:

$$\frac{d}{dt}(\alpha_l \rho_l w_{i,l}) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \vec{V}_l w_{i,l}) = \nabla \cdot \alpha_l \left(\rho_l D_{i,l} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla w_{i,l} \quad (2.19)$$

Donde $w_{i,l}$ y $D_{i,l}$ son la fracción masa y coeficiente de difusión molecular de la especie i respectivamente para la fase agua. Sc_t es el número de Schmidt turbulento ($Sc_t = \mu_t / D_t$), que tiene un valor constante de 1.35.

2.1.3 Condiciones de frontera e iniciales.

El problema de flujo de fluidos se resuelve en estado estable por esta razón solo son necesarias condiciones a la frontera, para el mezclado se tiene un estado transitorio, por lo que en este caso además de condiciones frontera es necesario definir condiciones iniciales, a continuación, se definen para ambos casos:

Condiciones de frontera para el caso de flujo de fluidos:

1. Entrada de gas: solamente se permite la entrada de la fase gas (aire) en dirección perpendicular a la entrada. Los parámetros de turbulencia se determinan con el método de intensidad turbulenta (IT) y diámetro hidráulico (DH). La entrada tiene un diámetro de 1 cm.
2. Paredes: las paredes que rodean al líquido y las circundantes a la entrada de gas son impermeables con condición de no deslizamiento, donde las velocidades valen cero y se presenta una región laminar. La región entre las paredes y el seno del fluido turbulento se describe con la función pared estándar.
3. Salida de gas: se toma como una superficie libre abierta a la atmosfera y solamente la fase gas (aire) tiene permitido abandonar el sistema. La presión en ésta zona es de 1 atm o 101325 Pa.

Condiciones iniciales para el caso de mezclado:

1. En Punto de inyección: Se define un sitio de inyección en el plano X-Y que pasa de forma longitudinal por el centro del diámetro de la olla con una esfera de radio 0.008947 m la cual representa una gota de 3 mL de la solución de rodamina.
2. Concentración inicial: Al tiempo cero todo el dominio del líquido tiene una concentración de agua igual a 1 en fracción volumen, mientras que a la gota que se va agregar se le da una concentración igual a 0.1 en fracción volumen de rodamina.

2.2 Método de Solución

Se utilizó el CFD Fluent ANSYS versión 2020R2 para realizar los cálculos del modelado matemático resolviendo todas las ecuaciones descritas anteriormente. Se generó la geometría del modelo físico en el software *Design-Modeler* y posteriormente se generó una malla en el software *Meshing* ambos forman parte de ANSYS. La malla se muestra en la *Figura 2.1*, de aproximadamente 300,000 nodos con parámetros de calidad reportados en la Tabla 1. Se refinó la malla en las zonas de inyección de gas y en la zona de la interfase líquido acero- escoria mediante el método de sizing en el cual se puede establecer el tamaño de los nodos según el requerimiento de la zona. En la Tabla 2 se presentan las propiedades físicas necesarias de los fluidos (agua, aceite y aire), y en el esquema de la *Figura 2.1* las características geométricas del modelo físico a escala 1/17th de una olla industrial de 200 ton.

Posteriormente se utilizó ANSYS Fluent para realizar la simulación de dinámica de fluidos, como primera etapa el caso se inició con una condición de estado pseudotransitorio seguido de un estado transitorio con el fin de ahorro del costo computacional y por tanto del tiempo necesario para la convergencia de la solución del problema. Para dar inicio a la fase de inyección de soluto en diferentes zonas del modelo (Tabla 3) se verificó la afinidad del estado de mezclado químico resultante de la simulación en las condiciones aplicadas respecto a datos experimentales de modelos reales, se compararon tiempos de mezclado a una concentración 1 ± 0.05 fracción volumen de rodamina de manera que se buscaba que los valores de tiempo estuvieran en un rango aceptable. Una vez validada la dinámica de fluidos, y el tiempo de mezclado en la simulación se llevó a cabo la inyección de rodamina en diferentes posiciones de la fase líquida (Tabla 3), por simplificación se tomó el plano X-Y para la inyección de rodamina con una nomenclatura dada en la *Figura 2.2*.

El arreglo de puntos de inyección se realizó únicamente en la mitad del plano con un total de 20 posiciones distribuidas de manera simétrica entre cada uno de los puntos en esta área con el objetivo de conseguir un mapa completo de tiempos de mezclado en la olla. Adicionalmente a estos sitios se tomaron dos puntos más para verificar la axisimetría del modelo y comprobar si los tiempos de mezclado son equivalentes sin importar el plano en el que se inyecta la rodamina, a estos puntos les denominé posiciones complementarias de inyección y se definen sus posiciones en la Tabla 4 (En la *Figura 2.3* se presenta su nomenclatura). La forma en que se hizo la inyección del soluto en modelo computacional fue situando en cada una de las posiciones una esfera con un tamaño tal que su volumen fuera igual a 3 ml (aproximadamente una gota de rodamina real), a esta esfera se le dio una concentración de 0.1 fracción volumen de rodamina y finalmente se efectuó la simulación de mezclado durante 25 segundos, tiempo suficiente para llegar a una estabilidad en la concentración absoluta de rodamina de 1 ± 0.05 imprescindible para validar el tiempo de mezclado en la simulación. Para mayor detalle en la creación del modelo en Fluent Ansys, el lector es referido al Anexo A.

Tabla 1. Características de la malla utilizada.

	Aspect ratio (Relación de dimensiones)	Ortogonalidad	Skweness (Oblicuidad)
Mínimo	1.014	0.573	1.41e-2
Máximo	6.069	0.999	0.608
Promedio	1.847	0.964	0.156
Desviación estándar	0.917	6.49e-2	0.148

Tabla 2. Propiedades de las fases empleadas.

Propiedades	Agua	Aceite	Aire
Densidad [Kg/m ³]	1000	890	1.23
Viscosidad [Kg/ms]	0.001	0.19	1.79e-5

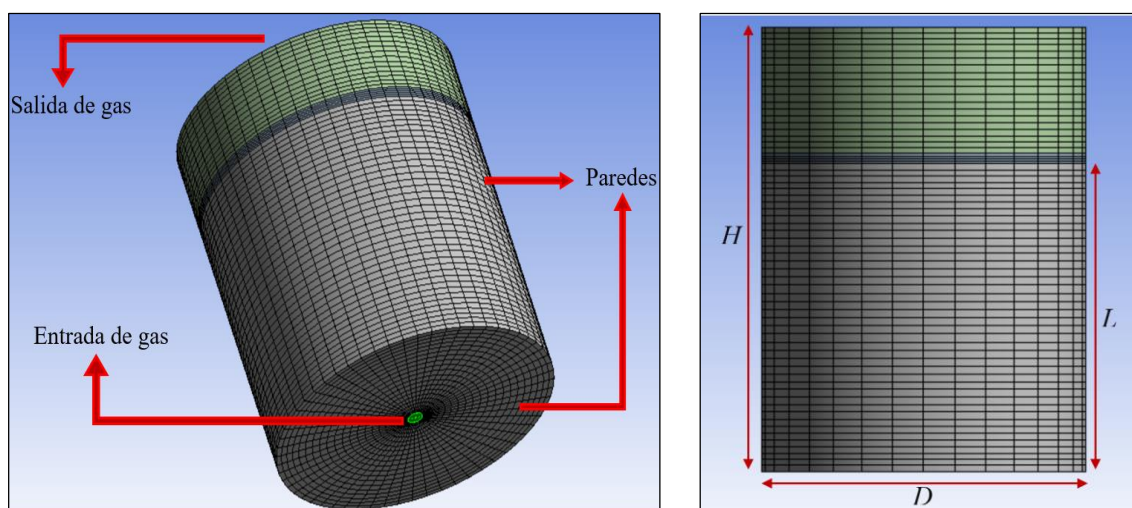


Figura 2.1. Esquema del modelo y la malla realizada en CFD, las dimensiones utilizadas fueron las siguientes: 18.9 cm en D, 21.9 cm en H, 16.48 cm en L y 1 cm en d.

Tabla 3. Coordenadas de los puntos de inyección de rodamina sobre el plano X-Y, en las filas se presentan los valores de la altura (eje x) desde la parte inferior del modelo y en las columnas las posiciones de radio (eje Y).

Posición	0 cm	2.8167 cm	5.6334 cm	8.4501 cm
15 cm	A1	B1	C1	D1
12.2 cm	A2	B2	C2	D2
9.4 cm	A3	B3	C3	D3
6.6 cm	A4	B4	C4	D4
3.8 cm	A5	B5	C5	D5
1 cm	A6	B6	C6	D6

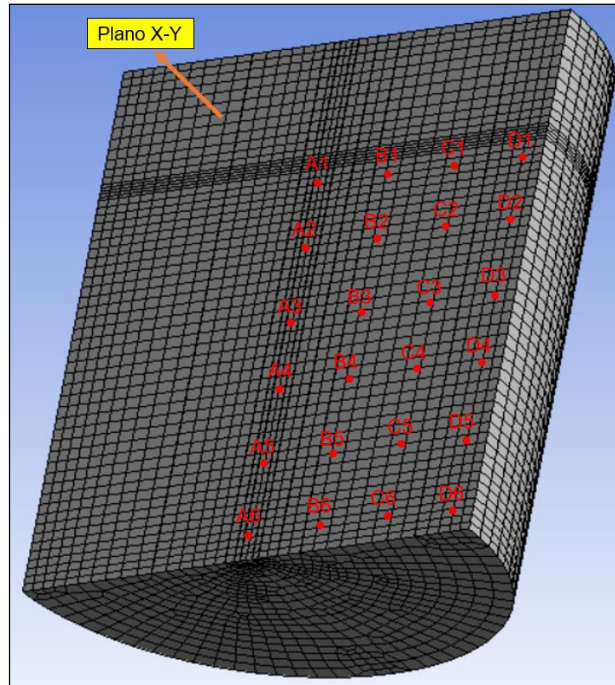


Figura 2.2. Nomenclatura de las posiciones de inyección utilizadas.

Tabla 4. Posiciones complementarias de inyección.

Posiciones de inyección complementarias (X, Y, Z) [cm]		
(9.4, 2.8167, 0)	(9.4, -2.8167, 0)	(9.4, 0, 2.8167)

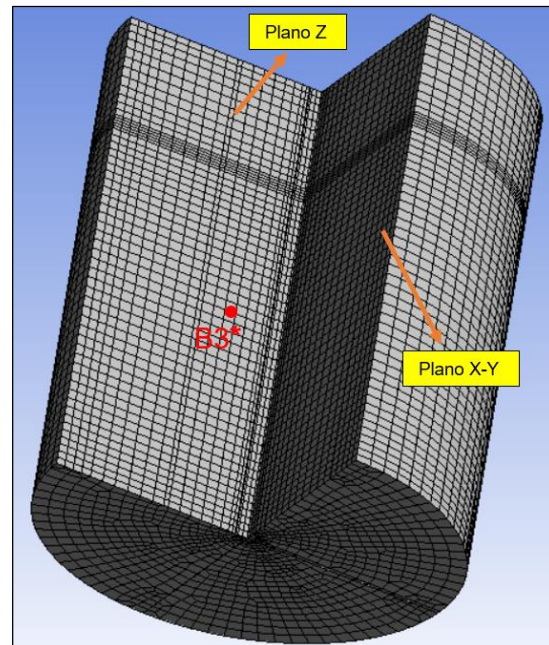
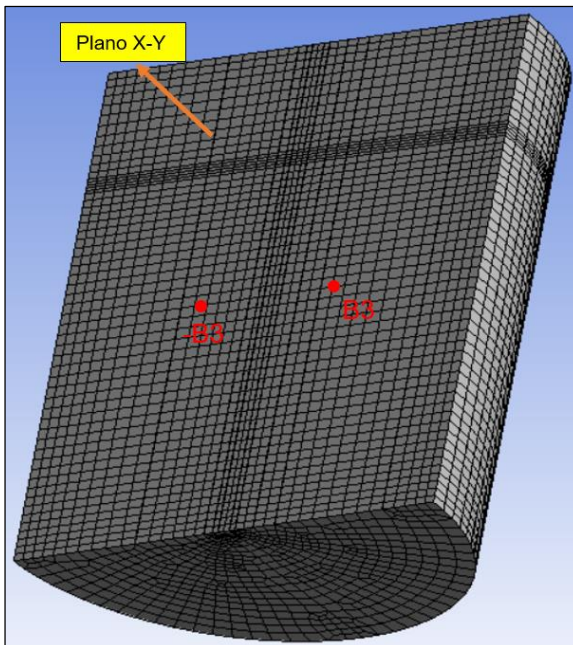
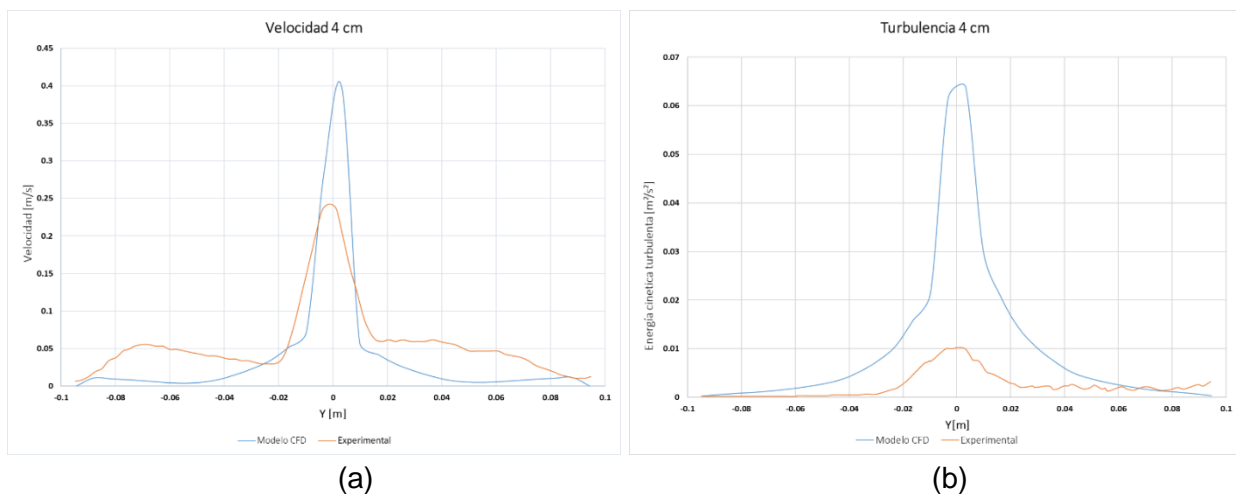


Figura 2.3. Nomenclatura de posiciones complementarias de inyección.

2.3 Validación del modelo

Para verificar que el modelo realizado de CFD en el software ANSYS Fluent representa correctamente los fenómenos reales en el modelo físico a escala de laboratorio se realiza una validación de la información arrojada por la simulación del software comparada con mediciones experimentales previamente publicadas. Esta validación es muy importante y un paso fundamental del proceso ya que a partir de la información obtenida se evaluará si el modelo es adecuado y representa de manera cualitativa pero también cuantitativamente los fenómenos ocurridos en una cuchara metalúrgica real. Si la concordancia es aceptable a partir de esto seguirá simular la inyección de un soluto para el estudio del mezclado químico variando los puntos de inyección con la seguridad que los datos arrojados son predictivos de lo que ocurriría en la realidad.

La dificultad de modelar un fenómeno tan complejo como lo es un horno cuchara se debe al gran número de ecuaciones, variables, número de nodos (en este caso fueron aproximadamente 300000 nodos en la malla), equipos de cómputo de gran capacidad y consideraciones como condiciones de frontera o parámetros iniciales para realizar la inicialización de la simulación, además, los cálculos al ser complejos hacen que la convergencia de una “corrida” sea aproximadamente de dos a tres días, y que solo se pueda alcanzar resultados aproximados en muchos casos. Estas inconveniencias hacen que la obtención de resultados y por ende su análisis sea más lento que otro tipo de investigaciones.



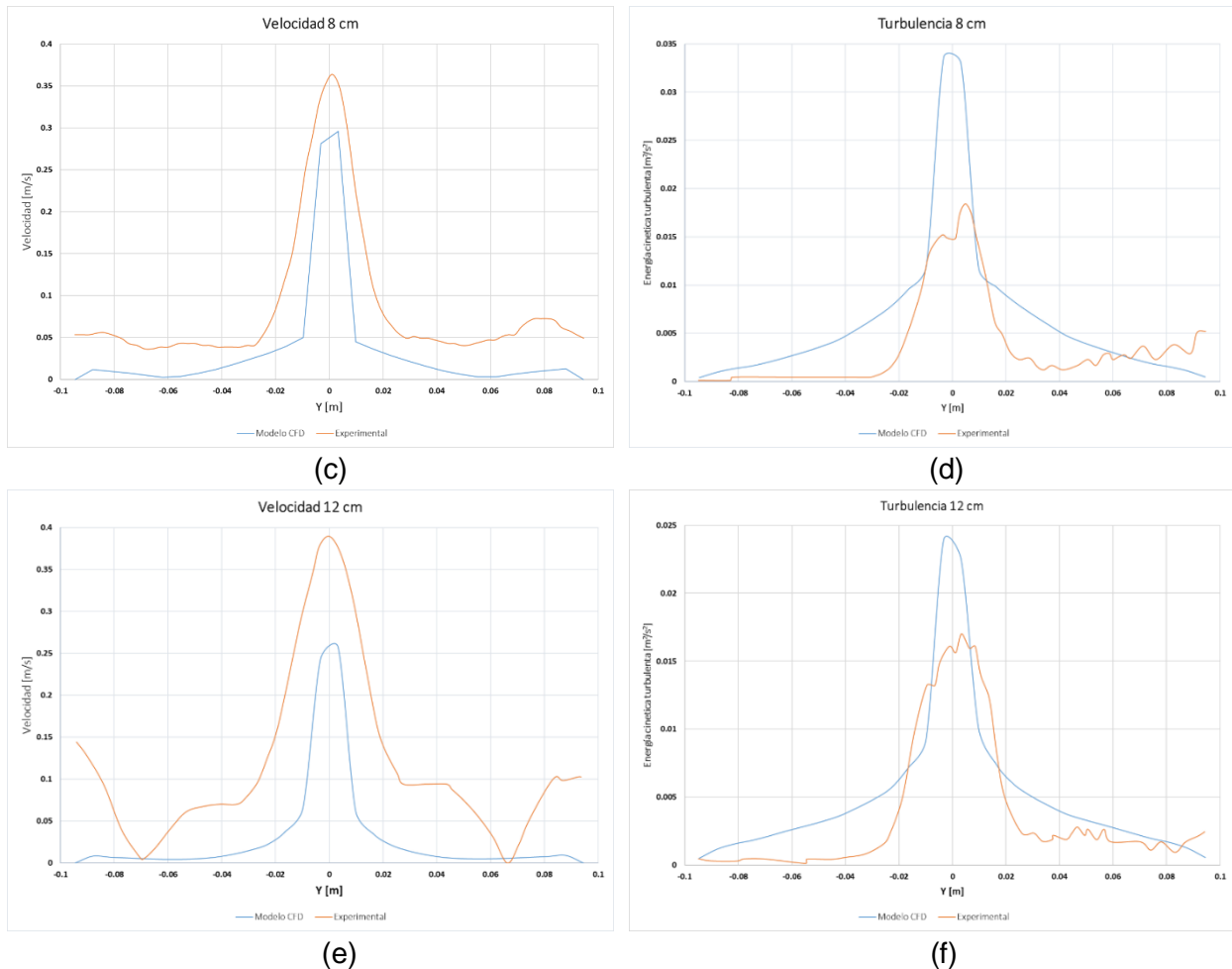


Figura 2.4 Curvas de validación que comparan la Velocidad de la fase líquida y la energía cinética turbulenta a diferentes zonas del modelo con datos experimentales y obtenidos por simulación CFD. Perfiles radiales de velocidad a 4cm (a), 8 cm (c) y 12 cm (e), y perfiles radiales de k a 4cm (b), 8cm (d) y 12 cm (f). Línea roja experimental por PIV[58] y línea azul predicciones en este trabajo.

La comparativa de validación se realiza frente a los datos experimentales reportados por un exalumno de maestría de este grupo^[58] y se representa en las gráficas de la Figura 2.4, donde se compararon parámetros importantes en el desarrollo del flujo, es decir, perfiles radiales de las velocidades y la energía cinética turbulenta dentro de la fase agua a alturas de 4, 8, y 12 cm desde el fondo con el fin de comparar el comportamiento del flujo dentro del líquido. Es de notar que las magnitudes de los valores obtenidos no fueron del todo semejantes pero el comportamiento de las tendencias demuestran que el modelo computacional arroja resultados que coinciden con los resultados experimentales y en algunas zonas es mayor la concordancia en los datos que en otras regiones, por ejemplo, en la Figura 2.4 c) a la altura de 8 cm en la fase líquida (agua) se observa que

la velocidad de dicha fase es muy similar a la curva experimental en esta zona, mientras que, al analizar la altura de 4 cm (zona de inyección de aire) la concordancia de la energía cinética turbulenta entre simulaciones y mediciones es la más concordante de las tres zonas analizadas (*Figura 2.4 .f*).

Tabla 4. Tiempos de mezcla para la validación del modelo, los cuales fueron medidos en la posición A1, la cual corresponde al sitio de inyección típico en las operaciones metalúrgicas.

Tiempo de mezclado [s]	
Experimental	8.65
Modelo	8.69

Otro parámetro definitivo para la validación del modelo computacional en la etapa de mezclado químico es el tiempo de mezcla. Se realiza una comparativa del tiempo obtenido bajo las condiciones de simulación computacional en el software frente a los tiempos de mezclado medidos experimentalmente de investigaciones anteriores en un modelo físico con las mismas dimensiones, condiciones de flujo de aire, volumen de agua, etc^[58]. La posición en la cual se tomó el tiempo de mezclado para la comparación de los modelos fue en el punto A1 de la *Figura 2.2* la cual corresponde al sitio habitual donde se hacen las adiciones de aleantes en las cucharas metalúrgicas reales. Al realizar la comparativa de los resultados se alcanzó una gran coincidencia, de tal manera que prácticamente no hay diferencia en los valores (Tabla 4), este resultado junto con los ya presentados para la validación conduce a declarar que a pesar que en unos aspectos el modelo computacional no se asemeja del todo a el real los resultados que arroja son comparables y representativos del fenómeno real, así, podemos verificar que el trabajo presentado reproduce de forma puntual la fenomenología que influye en la dinámica de flujo y mezclado, y por consiguiente, al tiempo de mezcla el cual es el principal objetivo de investigación.

Capítulo 3. Resultados y discusión

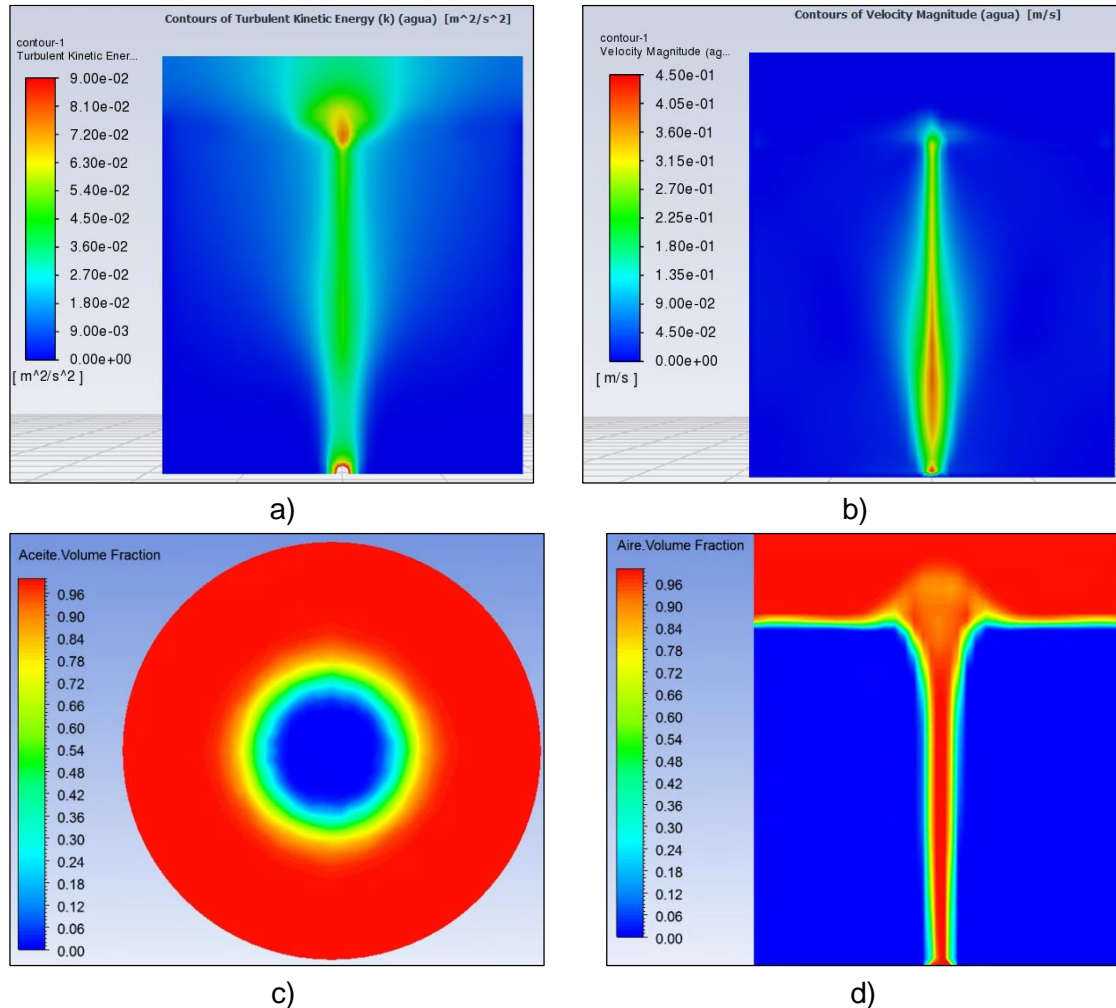


Figura 3.1. Contornos de a) Energía cinética turbulenta, b) Velocidad en fase agua, c) Fracción volumen de aceite en la zona de escoria (aceite) y d) Fracción volumen de aire.

Al modelar diferentes contornos de algunas propiedades de interés en el modelo es notable que los resultados son los esperados en una olla agitada con gas. En la *Figura 3.1 a) y b)* se muestra la energía cinética turbulenta y la velocidad en la fase agua, respectivamente. La tendencia de estas variables resulta ser de mayor intensidad en la entrada de la fase gaseosa y se van disipando conforme se alejan de la zona de inyección. Este comportamiento es característico en las ollas industriales, así como en los modelos a escala reales y conforman lo que se conoce como la pluma de gas, que también se representa con la fracción de gas en la *Figura 3.1 d)*. Finalmente, a la altura de la escoria, la *Figura 3.1 c)* representa la región donde las burbujas de aire que viajan

a lo largo de la columna de gas o la pluma penetran en la fase superior (aceite) formando lo que se conoce como el "ojo de la escoria". Ambas geometrías, pluma de gas y ojo de escoria, son típicas y comparables a las formadas en condiciones reales y reproducen de manera adecuada la dinámica de fluidos que se buscaba predecir.

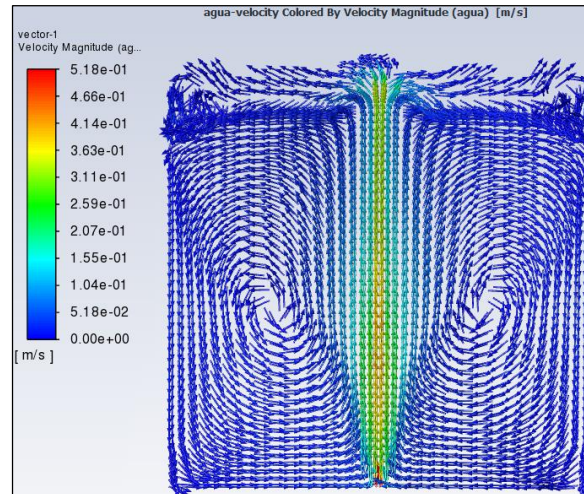


Figura 3.2. Perfil de velocidad de agua [m/s].

Complementariamente, otro resultado que muestra que el modelo cumple debidamente con los propósitos establecidos para la investigación es el mapa de vectores de velocidad presentado en la *Figura 3.2*. Este mapa se tomó desde el plano X-Y del modelo y evidencia el desplazamiento del líquido dentro de la olla de mezclador queda claro que el movimiento del líquido es de forma recirculatoria, de manera que el aire que entra por debajo de la cuchara es el que genera el patrón de flujo recirculatorio turbulento del líquido ya que conforme la columna de burbujas asciende el líquido en contacto con ella es arrastrado hasta llegar a la superficie y posteriormente se mueve hacia los bordes de la olla, cuando llega a la pared choca y se genera un torrente divergente que empuja las capas del líquido hacia distintas direcciones aunque la mayoría se direccionan hacia la parte inferior del recipiente, una vez llega al fondo es redireccionado hacia el centro de manera análoga a la superficie. Finalmente, las capas del fluido llegan a la parte central donde está la entrada de la fase gas de modo que se repite el patrón de flujo.

Se logra distinguir con claridad que el movimiento del líquido se asemeja a un remolino en el cual dependiendo de la zona tiene diferentes velocidades y energía turbulenta, por ejemplo, el área del centro con colores anaranjados nos indica que las magnitudes de velocidad son las más altas mientras que por el contrario las que se muestran en color azul son los sitios con valores más pequeños de velocidad de la fase líquida. Al mismo tiempo en las regiones en las que la densidad de vectores es mayor se traduce en áreas con alto movimiento de líquido, de este tipo de sitios se distingue la parte de la superficie que está en contacto con las paredes ya que ahí es donde las capas de fluido redireccionan su desplazamiento lo cual genera una zona con alto grado de movimiento caótico. En contraste, en la parte de abajo del recipiente es notable que las capas de

Resultados y discusión

fluido son más ordenadas ya que es esta zona donde hay menos velocidad y turbulencia en el líquido. Este patrón de flujo es típico en operaciones metalúrgicas reales y nos brinda una visión clara y completa que complementa el entendimiento del desplazamiento que se genera dentro de la fase líquida.

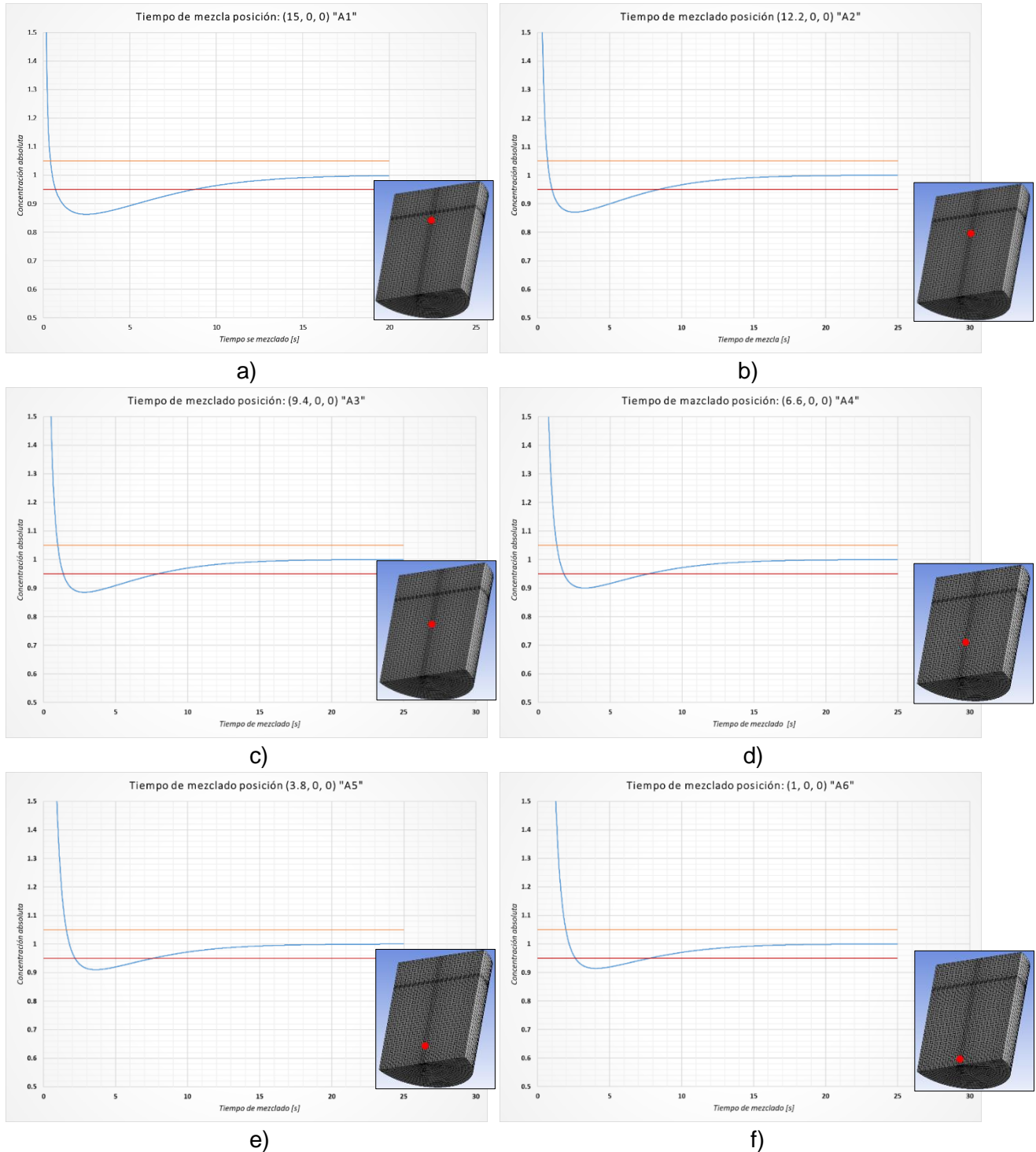


Figura 3.3. Tiempos de mezcla para diferentes posiciones de inyección en el modelo de olla. a) posición: (15, 0, 0), b) posición: (12.2, 0, 0), c) posición: (9.4, 0, 0), d) posición: (6.6, 0, 0), e) posición: (3.8, 0, 0) y f) posición: (1, 0, 0).

Resultados y discusión

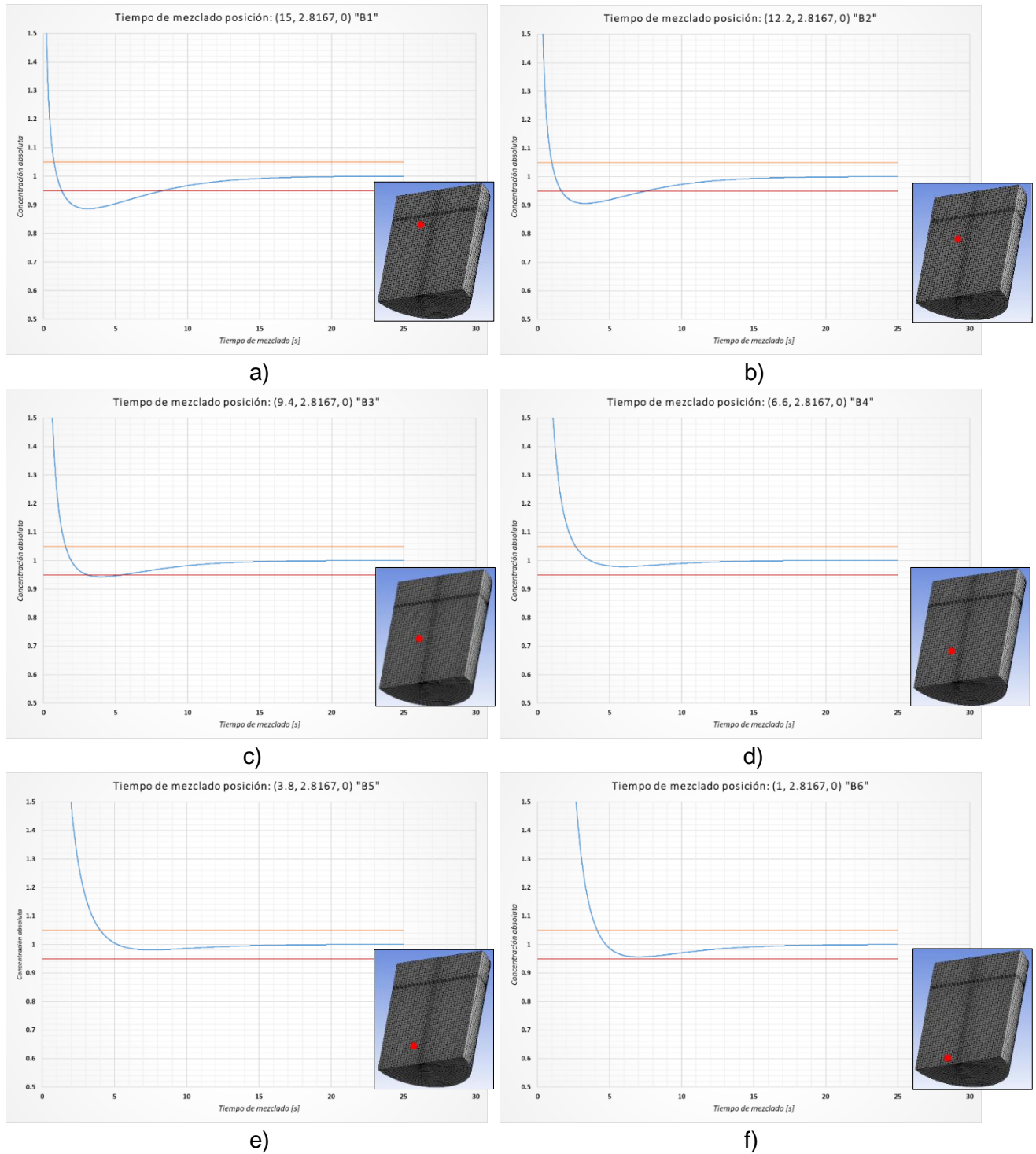


Figura 3.4. Tiempos de mezcla para diferentes posiciones de inyección en el modelo de olla. a) posición: (15, 2.8167, 0), b) posición: (12.2, 2.8167, 0), c) posición: (9.4, 2.8167, 0), d) posición: (6.6, 2.8167, 0), e) posición: (3.8, 2.8167, 0) y f) posición: (1, 2.8167, 0).

Resultados y discusión

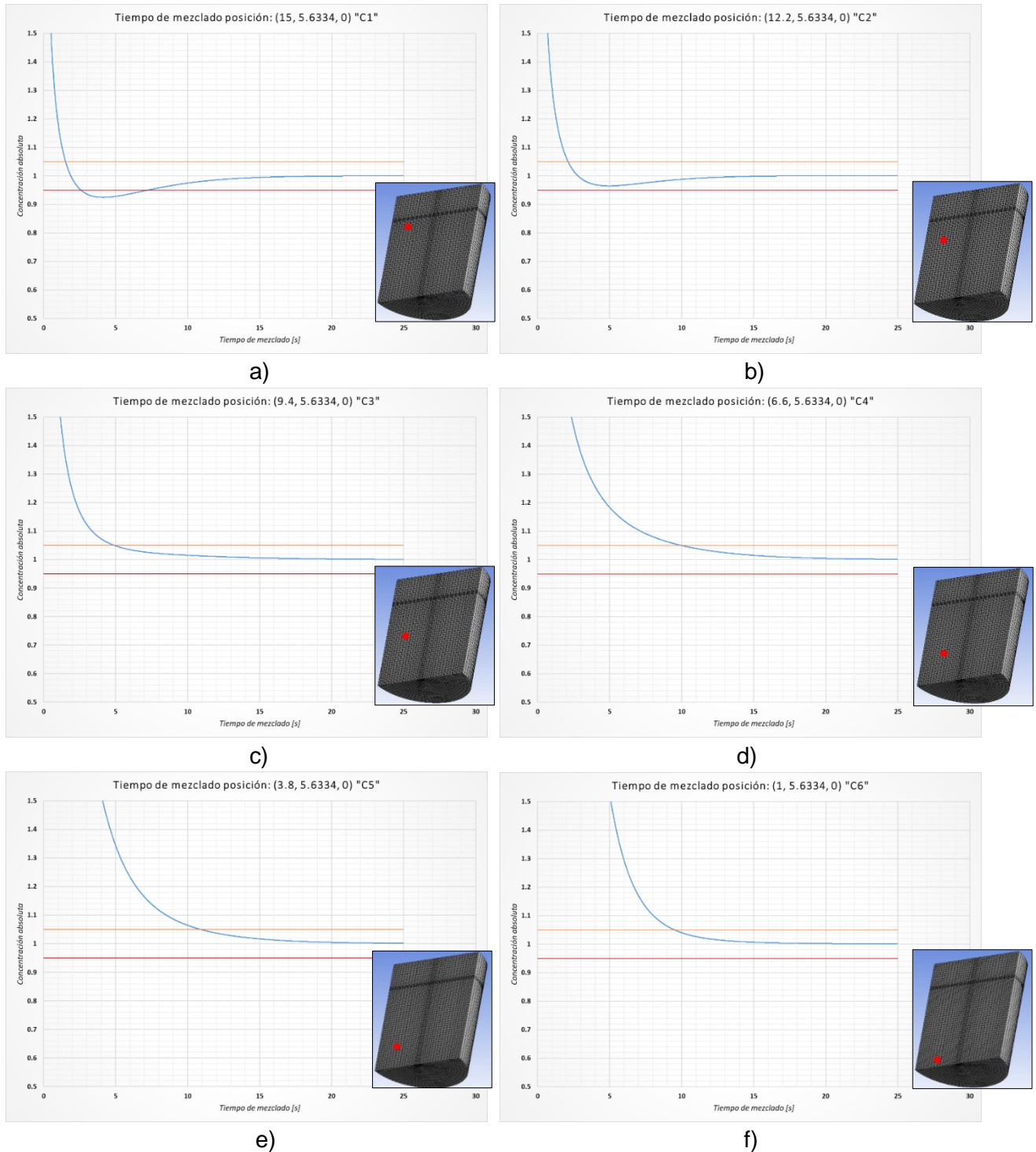


Figura 3.5. Tiempos de mezcla para diferentes posiciones de inyección en el modelo de olla. a) posición: (15, 5.6334, 0), b) posición: (12.2, 5.6334, 0), c) posición: (9.4, 5.6334, 0), d) posición: (6.6, 5.6334, 0), e) posición: (3.8, 5.6334, 0) y f) posición: (1, 5.6334, 0).

Resultados y discusión

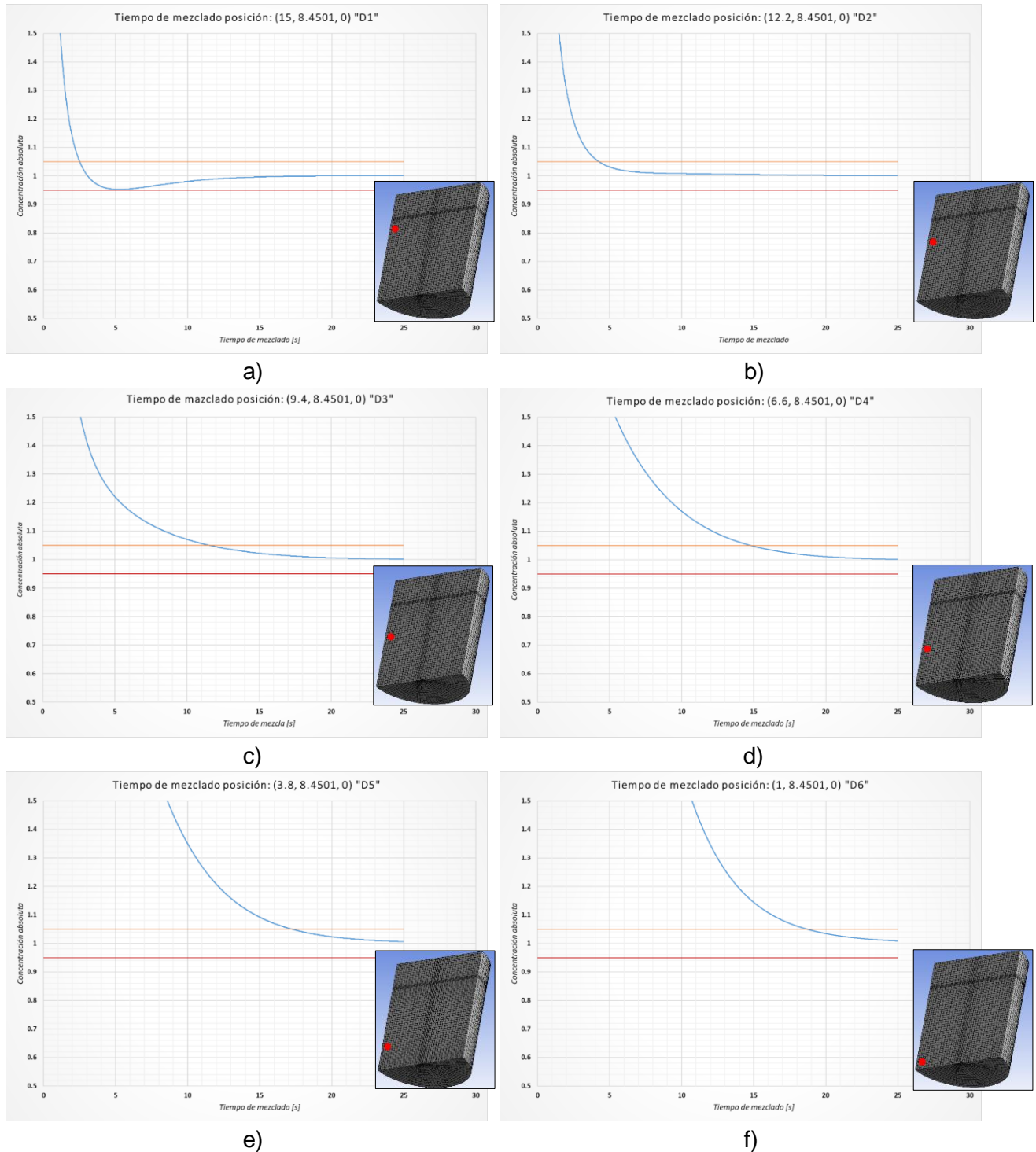


Figura 3.6.. Tiempos de mezcla para diferentes posiciones de inyección en el modelo de olla. a) posición: (15, 8.4501, 0), b) posición: (12.2, 8.4501, 0), c) posición: (9.4, 8.4501, 0), d) posición: (6.6, 8.4501, 0), e) posición: (3.8, 8.4501, 0) y f) posición: (1, 8.4501, 0).

Resultados y discusión

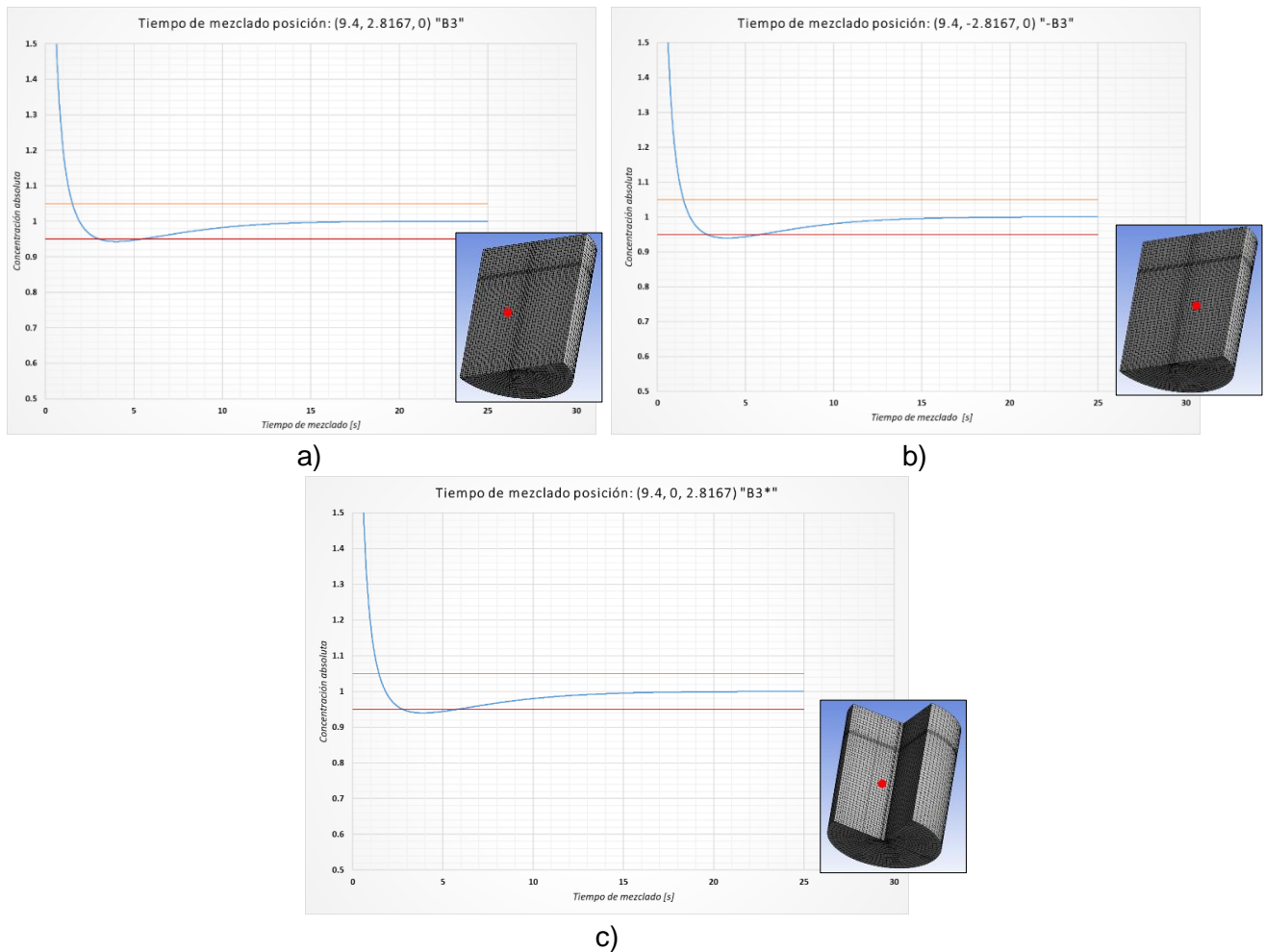


Figura 3.7. Tiempos de mezcla para diferentes posiciones de inyección en el modelo de olla. a) posición: (9.4, 2.8167, 0), b) posición: (9.4, -2.8167, 0), c) posición: (9.4, 0, 2.8167).

En las Figuras 3.3 a 3.7 se presentan las curvas de concentración promedio de soluto en el plano de interés en función del tiempo medido desde que se inyectó el soluto. Las líneas horizontales naranja y roja representan el 5% más y el 5% menos de la composición de equilibrio (mezclado completo) para determinar la ventana del mezclado usando el criterio de 95% de uniformidad. La Figura 3.3 muestra los mezclados en el centro de la olla (eje axisimétrico), la Figura 3.4 los mezclados en una línea vertical a 2.8167 cm del centro, la Figura 3.5 en otra línea vertical a 5.6334cm desde el centro, la Figura 3.6 en una línea vertical a 8.45cm desde el centro y finalmente la Figura 3.7 en posiciones localizadas en cuadrantes diferentes al plano axisimétrico de medición para probar que a pesar de que la geometría y el cálculo es en 3D, el problema es en esencia axisimétrico. Las curvas de concentración absoluta contra tiempo de mezclado exponen como decrece la concentración inicial del trazador hasta llegar a un estado de equilibrio en el cual en toda la fase líquida se tiene una homogeneidad química de los componentes adicionados. A pesar que las inyecciones de soluto se hicieron en diferentes puntos de

la olla, las tendencias son semejantes entre sí, pero con ligeras diferencias, por ejemplo, al analizar los gráficos en la posición de radio cero *Figura 3.3* y tomando cualquiera de las alturas de la adición de rodamina se observa que inicialmente la concentración decrece de manera rápida formando una pendiente precipitada para posteriormente entrar en un mínimo con forma cóncava y alargada, esta parte de la curva queda por debajo de la línea que marca el 0.95 de concentración de equilibrio, después, entra por debajo de esta línea a la zona de concentración mínima que es necesaria para validar tiempo de mezclado y al final la curva se vuelve constante en el valor igual a 1 en concentración absoluta. En cambio, los gráficos que pertenecen a la inyección de rodamina a diferentes alturas en el radio igual a 8.4501 cm (*Figura 3.6*) tienen una disminución en la concentración de trazador mucho más lenta e uniforme con lo que las curvas tienen un aspecto más “suave” en la caída de la concentración, estas curvas entran a la zona de validación de tiempo de mezclado por la parte superior (1.05 en concentración absoluta) y sin pasar por la transición de la forma cóncava que se forma en otras posiciones del radio antes de llegar al estado de equilibrio en la composición química.

Los resultados generados por la simulación en el software revelan la crucial influencia que el punto de inyección tiene en los tiempos de mezclado dentro de un reactor metalúrgico. Es esencial hacer hincapié en que todos los casos de mezclado se llevaron a cabo bajo las mismas condiciones de dinámica de fluidos, es decir, el mismo volumen de líquido y mismo flujo de gas, y que, además, en las simulaciones individuales se usaron las mismas condiciones iniciales y condiciones de frontera, lo que implica que la dinámica de fluidos en la olla fue idéntica en cada simulación y la única variable que cambió fue el sitio de inyección de rodamina.

Además, para un mayor entendimiento del fenómeno de mezclado hay que considerar como se desarrolla el movimiento dentro del fluido. En la *Figura 3.2* se aprecia con claridad que el fluido se mueve en forma de dos toroides superiores, aunque las imágenes presentadas para el análisis solo muestran el movimiento en dos dimensiones (sobre el plano X-Y) en realidad representan una parte de un flujo en tres dimensiones. Pero para este caso con axisimetría la *Figura 3.2* debe ser representativa de todo el movimiento del sistema con un tapón en el centro. Por lo anterior, es preciso pensar en un movimiento de flujo toroidal y debe ser considerado por el lector para una visión más amplia de lo que se desarrolla dentro del modelo. En la Tabla 5 se presentan los resultados numéricos de los tiempos de mezclado para cada punto de inyección de soluto que se había presentado de manera gráfica a través de las Figuras 3.3 a 3.7.

Tabla 5. Tiempos de mezcla para diferentes configuraciones en un plano X-Y. En las filas se presentan los valores de la altura (eje x) desde la parte inferior del modelo y en las columnas las posiciones de radio (eje Y).

Posición	0 cm	2.8167 cm	5.6334 cm	8.4501 cm
15 cm	8.69	8.24	7.178	2.47
12.2 cm	8.35	7.46	2.08	4.12
9.4 cm	7.89	5.39	4.66	11.15
6.6 cm	7.57	2.59	9.56	14.42
3.8 cm	7.53	3.95	10.57	16.88
1 cm	7.74	4.1	9.3	18.35

En la totalidad del recipiente hay zonas con diversas condiciones de dinámica de flujo, por ejemplo, en algunas la velocidad y energía cinética turbulenta es mayor como en las zonas “A” y zona “1” (ver *Figura 3.1 a)* y b) y la *Figura 2.2)*, y en otras donde disminuyen drásticamente haciendo que el flujo se vuelva más ordenado como las zonas “3”, “4” y “5”. A pesar de que resultaría intuitivo pensar que en las zonas con mayor flujo como la zona “A” que corresponde a la columna de la pluma se obtendrían tiempos de mezcla más cortos no fue así, de hecho, no hubo una mejora notable en el tiempo de mezclado respecto a el tiempo reportado de 8.65 segundos en investigaciones previas. Estos valores se mantienen en un rango similar debido a las condiciones de dinámica de fluidos y de los mecanismos de transporte de masa que predominan en esta zona del líquido se mantienen casi constantes. Además, el recorrido que sigue el soluto adicionado en estos sitios es prácticamente igual al de la inyección tradicional la cual se realiza sobre el eje axisimétrico justo por debajo de la superficie del líquido (punto “A1”), también la velocidad de esta área se mantiene sin cambios significativos, esto genera que el soluto siga una trayectoria en el torrente central de manera análoga para cada punto.

Por otro lado, se tiene una zona muerta de área “C4-D4” a “C6-D6” (ver *Figura 2.2)* en la que el movimiento de las capas de líquido se vuelve pausado, cuando se inyecta el soluto en esta área el transporte de especies químicas es el más lento de todo el plano debido al bajo flujo que se crea. Esta área corresponde a la esquina inferior del plano donde la pared lateral se une con la pared inferior del recipiente, esto ocasiona que el líquido no circule convenientemente en esta área, lo que produce una condición de volumen muerto con líquido estático sin turbulencia y en consecuencia la transferencia de masa de la rodamina a otras zonas solo puede realizarse por el mecanismo de difusión molecular, el cual es mucho más lento en comparación con la difusión por convección y la dispersión turbulenta, por consiguiente, la homogenización en todo el dominio del líquido es más tardada cuando se adiciona el soluto en estos sitios.

Por el contrario los mejores tiempos de mezclado corresponden a dos puntos en particular, el punto “B4” y “C2”, los cuales son simétricos entre sí respecto al centro del vórtice formado por el torrente recirculatorio, es decir, que están casi a la misma distancia desde el centro del vórtice del toroide del fluido pero de lados contrarios, lo que nos señala que los sitios de mayor preferencia para que el mezclado se lleve a cabo en el menor tiempo posible es a una distancia cercana del centro del flujo recirculatorio (ver *Figura 3.2*). Estos puntos están en sitios apartados de la pared lateral y también del eje axisimétrico donde se genera la pluma bifásica por inyección de gas, estas áreas corresponden a la de alta dispersión turbulenta (zona D) y la de mayor velocidad de flujo o convección (zona “A”) respectivamente. Es decir, la cooperación entre los mecanismos de transporte de masa convectiva y de dispersión turbulenta se suman y complementan con lo que se acelera el proceso de mezclado químico.

Es factible considerar que otra condición que interviene en la homogenización química es la geometría del flujo, esto debido a que el periodo y en consecuencia el tiempo en que tardaría en dar una vuelta una partícula de rodamina en la trayectoria toroidal es menor entre más cerca se este del centro del vórtice (ver *Figura 3.2*) ya que el diámetro de cada giro disminuye, este movimiento más cercano al centro del remolino hace que el arrastre y transporte de especies sea más veloz y pase de las capas centrales del líquido a las externas más uniforme y rápidamente.

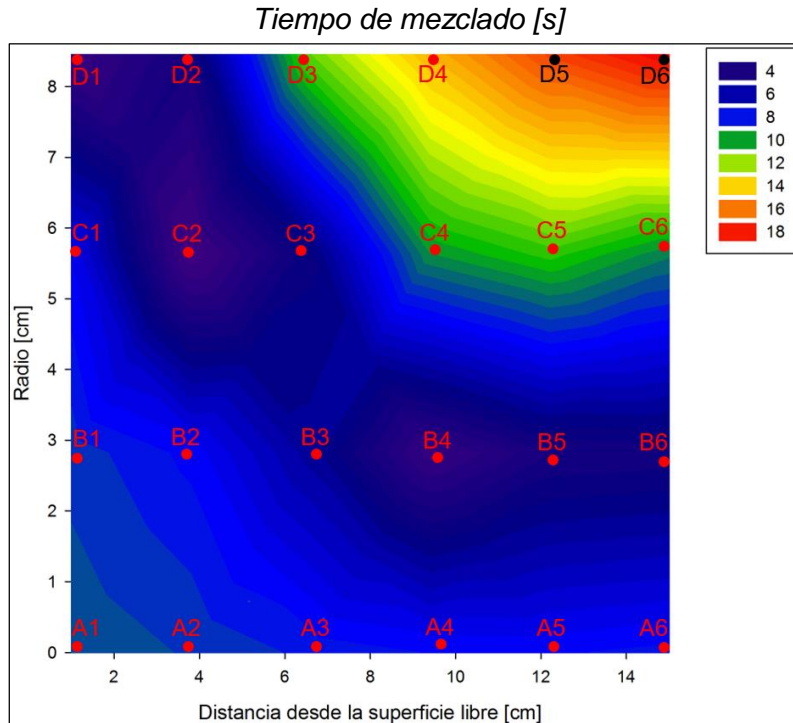


Figura 3.8. Contorno de tiempo de mezclado en el plano de simetría X-Y con posiciones de inyección.

El mapa de tiempos de mezclado presentado en la *Figura 3.8* hace referencia a las tasas de mezclado que se tienen en las distintas zonas del plano, señala esquemáticamente en diferentes tonalidades los sitios según su rapidez de mezclado, por ejemplo, las áreas con diferentes tonalidades de azul son las que representan los tiempos más cortos de mezclado químico, mientras que de color rojo a verde las zonas que tienen tiempos de mezclado más prolongados. El diagrama representa únicamente el área donde se realizaron las adiciones del trazador la cual corresponde a la mitad del plano longitudinal X-Y que pasa por el centro del diámetro del modelo de la olla y va desde el eje axisimétrico hacia la pared derecha del modelo (ver *Figura 2.2*). Es notable que en el área inferior derecha del modelo (zona de color rojo) existe una diferencia obvia respecto a las demás zonas que permite apreciar intrínsecamente las diferencias en la dinámica de fluidos y la difusión del trazador que se consigue en consecuencia. Nuevamente, la zona en color rojo se trata de una zona muerta sin convección ni turbulencia y que por consiguiente deja a la difusión molecular como mecanismo único de transporte de masa y que explica los tiempos prolongados de mezclado casi 4 veces mayor al tiempo de mezclado mínimo que ocurre en una zona que se asocia a la presencia del toroide donde existe alta dispersión turbulenta y la circulación de fluido se da en mayor medida.

Tabla 6. Tiempos de mezcla para tres puntos diferentes en el modelo de la olla de mezclado.

Posición (X, Y, Z) [cm]	(9.4, 2.8167, 0)	(9.4, -2.8167, 0)	(9.4, 0, 2.8167)
Tiempo [s]	5.39	5.78	5.73

Como se mencionó con anterioridad el movimiento del flujo tiene fluctuaciones, turbulencia y velocidades puntuales, pero al ser un modelo con axisimetría el flujo formado en el interior del líquido tiene zonas equivalentes, es decir, zonas en las que su movimiento tiene las mismas condiciones respecto a otro sitio dentro de la olla, esto se verificó con los puntos complementarios de la Tabla 6 ya que estos tienen posiciones análogas entre sí en el interior del modelo con una altura y un radio de inyección de 9.4 y 2.8167 cm respectivamente pero ubicados en diferentes cuadrantes de la olla, se compararon los valores de tiempo de mezclado obtenidos para cada sitio resultando muy parejos y para fines prácticos iguales entre sí. Las pequeñas diferencias que se presentan son consecuencia de las condiciones locales de velocidad y turbulencia y al error numérico asociado a la solución, pero aun con esto puede afirmarse que la axisimetría es válida en términos prácticos.

El punto de inyección es una variable crucial que modifica el tiempo de la homogeneidad química dentro del modelo de la olla, esto se debe a la dinámica de fluidos que se genera en todo el dominio del líquido y que a su vez impacta en mecanismos de transferencia de masa como la dispersión turbulenta, dispersión convectiva y difusión molecular.

Aspectos como la geometría del reactor, flujo del gas inyectado, zona de inyección de gas, etc. son variables que definen en gran parte el estado de flujo dentro de la olla y de acuerdo con el punto inicial en el que se coloca la gota de rodamina las fluctuaciones, la velocidad y turbulencia en el líquido serán específicas para cada sitio dentro del reactor, por esto, la forma en que se desarrolla la dispersión del trazador no es idéntica para cada zona. Además como ya se mencionó, otro factor fundamental que interviene en la homogeneidad química es la transferencia de masa por diferentes mecanismos como la dispersión por convección y la difusión molecular los cuales tienen un régimen definido e influenciado por la dinámica del flujo dentro de la olla, es decir, de acuerdo con la zona en que se encuentra el trazador se va encontrar con condiciones diversas de velocidad y turbulencia y cuando son lo suficientemente favorables la difusión por convección es la que predomina (a valores altos de turbulencia y velocidad) y por el contrario cuando las condiciones son poco turbulentas y el gradiente de velocidad es pequeño las moléculas tienden a un movimiento de difusión molecular por lo que la dispersión del trazador se hace mucho más lenta y pausada por esto se obtienen tiempos de mezclado más prolongados en estos sitios de poco movimiento caótico.

Conclusiones

Por medio del análisis CFD en el software ANSYS se logró determinar cuantitativamente el efecto del punto de inyección de soluto sobre el tiempo de mezclado en un modelo a escala de una olla metalúrgica y se llegó a lo siguiente:

- La homogeneidad química dentro de una olla de mezclado es un proceso en el cual intervienen diversos factores ya bien conocidos, que van desde la dinámica de fluidos, mecanismos de transporte de masa, aspectos físicos y ahora con la presente investigación se verifica la crucial influencia del punto de inyección de soluto para modificar el tiempo de mezclado químico así sumándose a las variables clave de este proceso.
- A los tiempos de mezcla que corresponden a los puntos sobre el largo de la pluma de gas a cualquier altura de inyección no se les encontró un cambio significativo respecto a los valores reportados en investigaciones previas.

Al establecer como varía el mezclado en diferentes zonas se llegó a lo siguiente:

- La mayor variación en los tiempos de mezclado se obtuvo en sitios excéntricos de inyección del soluto existiendo dos zonas en las que en su dominio se obtuvo las mejores tasas de mezclado químico. La primera está ubicada en las proximidades del centro del vórtice del flujo recirculatorio toroidal y la segunda es próxima a la superficie del líquido junto a las paredes laterales.
- En la “zona muerta” ubicada en la parte inferior y adyacente a las paredes laterales se debe evitar la adición de solutos ya que la dinámica de fluidos y los mecanismos de transporte de masa en esta área solo permiten obtener los tiempos de mezclado más prolongados de todo el dominio del líquido.

Al establecer el mejor y el peor punto de inyección de soluto para minimizar el tiempo de mezclado se llegó a lo siguiente:

- El punto específico donde se obtuvo la mejor respuesta en el tiempo de mezclado es a 5.63 cm del radio y a una altura desde el fondo del recipiente de 12.4 cm con un tiempo de 2.08 segundos lo que representa un 75% más rapidez en el tiempo de mezclado respecto a el punto de inyección convencional.

Conclusiones

- El punto en el cual se obtuvo el peor rendimiento en el tiempo de mezclado es a 8.4501 cm del radio y a una altura desde el fondo del recipiente de 1 cm (zona muerta del reactor) con un tiempo de 18.35 segundos lo que representa un 200% de más lentitud en el tiempo de mezclado respecto al punto convencional.

Al evaluar el empleo del software CFD como una herramienta en el modelado del sistema en estudio se obtiene lo siguiente:

- El análisis CFD es una herramienta con un gran potencial para modelar, estudiar y predecir el comportamiento de un problema si este es simplificado con las características convenientes e indispensables además de establecer un modelo matemático apropiado y un criterio adecuado de los valores de variables iniciales y de frontera.

Para evaluar si el punto de inyección es relevante en el mezclado de ollas agitadas por gas se llegó a lo siguiente:

- El punto de inyección es un factor crucial que afecta el tiempo de homogeneidad química en una olla de mezclado, por lo que debe tomarse en cuenta para un mayor control y optimización de los procesos metalúrgicos relacionados.

Finalmente, al verificar la aximetría del sistema se llegó a lo siguiente:

- La axisimetría del modelo computacional se confirmó válida, con ello los estudios y datos obtenidos son suficientes para generalizar a todo el dominio de la olla lo cual permite el ahorro del tiempo de investigación y de costos computacionales.

Referencias

1. D. Mazumdar, A First Course in Iron and Steelmaking. University Press (India) Private Ltd., 2015.
2. M. Geerdes, H. Toxopeus, C. van der Vliet, R. Chaigneau, T. Vander, and J. Wise, Modern Blast Furnace Ironmaking: An Introduction. IOS Press, 2009.
3. M. Barati, "Chapter 3.3 - application of slag engineering fundamentals to continuous steelmaking," in Treatise on Process Metallurgy (S. Seetharaman, ed.), pp. 305 – 357, Boston: Elsevier, 2014.
4. T. P. Battle, "Sustainability in ironmaking: The rise of direct reduction," in Celebrating the Megascale (P. J. Mackey, E. J. Grimsey, R. T. Jones, and G. A. Brooks, eds.), (Cham), pp. 277– 288, Springer International Publishing, 2016.
5. H. Jalkanen and L. Holappa, "Chapter 1.4 - converter steelmaking," in Treatise on Process Metallurgy (S. Seetharaman, ed.), pp. 223 – 270, Boston: Elsevier, 2014.
6. D. Mazumdar and J. W. Evans, Modeling of Steelmaking Processes. CRC Press, 1 ed., 2009.
7. J. Madias, "Chapter 1.5 - electric furnace steelmaking," in Treatise on Process Metallurgy (S. Seetharaman, ed.), pp. 271 – 300, Boston: Elsevier, 2014.
8. R. Engel, R. Marr, and E. Pretorius, Keeping Current series, Iron and Steelmaker, 23–24 (1996–97).
9. J. Szekely, G. Carlsson, and L. Helle, in Ladle Metallurgy, Materials Research and Engineering Series, B. IIschner and N. J. Grant, eds. (New York: Springer-Verlag, 1988).
10. P. E. Anagbo and J. K. Brimacombe, Iron and Steelmaker 15, 10 (1988): 38.
11. W. Pluschkell, Stahl und Eisen 101 (1981): 97.
12. D. Mazumdar and R. I. L. Guthrie, ISIJ Int., 35 (1995): 1.
13. D. Mazumdar and R. I. L. Guthrie, Met Trans. B, 17B (1986): 725.
14. J. Mietz and F. Oeters, Steel Research, 60 (1989): 387
15. S. Joo and R. I. L. Guthrie, Met. Trans. B, 23B (1992): 765
16. T. Emi, Proceedings, Scaninject VII, part I (1995): 225.
17. S. Asai, M. Kawachi, and I. Muchi, Proceedings, Scaninject III, part I (1983): 12:1.
18. S. Kim and R. J. Fruehan, Met. Trans. B, Vol. 18B (1987): 381.
19. J. Mietz, S. Schneider, and F. Oeters, Steel Research 62 (1991): 10.
20. E. T. Turkdogan, Fundamentals of Steelmaking, (London: The Institute of Materials, 1996), Chapter 9.
21. D. Mazumdar and R. I. L. Guthrie, Met. Trans. B 24B (1993): 649.
22. Y.J. Kang, L. Yu, and D. Sichen: Ironmak. Steelmak., 2007, vol. 34, pp. 253–61.
23. K. Malmberg, M. Nzotta, A. Karasev, and P.G. Jo"nsson: Ironmak. Steelmak., 2013, vol. 40, pp. 231–37.

24. Y. Sahai and R.I.L. Guthrie: *Metall. Trans. B*, 1982, vol. 13B, pp. 193–202.
25. A.H. Castillejos and J.K. Brimacombe: *Metall. Trans. B*, 1987, vol. 18B, pp. 649–58. }
26. A.H. Castillejos and J.K. Brimacombe: *Metall. Trans. B*, 1987, vol. 18B, pp. 659–71.
27. S.T. Johansen, D.G.C. Robertson, K. Woje, and T.A. Engh: *Metall. Trans. B*, 1988, vol. 19B, pp. 745–54. 2
28. S. Taniguchi, S. Kawaguchi, and A. Kikuchi: *Appl. Math. Modell.*, 2002, vol. 26, pp. 249–62.
29. P.E. Anagbo and J.K. Brimacombe: *Metall. Trans. B*, 1990, vol. 21B, pp. 637–48.
30. Y.Y. Sheng and G.A. Irons: *Int. J. Multiphase Flow*, 1991, vol. 17, pp. 585–98.
31. Y.Y. Sheng and G.A. Irons: *Metall. Mater. Trans. B*, 1995, vol. 26B, pp. 625–35
32. Y. Kishimoto, Y.Y. Sheng, G.A. Irons, and J.S. Chang: *ISIJ Int.*, 1999, vol. 39, p 33. p. 113–22
34. P. E. Anagbo. J. K. Brimacombe and A. H. Castillejos: *Can. Metall. Q.*, 28 (1989), 323
35. Y. Sahai and R. I. L. Guthrie: *Metall. Trans.*, 13B (1982), 193.
36. K. Krishnapisharody and G.A. Irons: *Metall. Mater. Trans. B*, 2013, vol. 44B, pp. 1486–98.
37. K. Krishnapisharody and G.A. Irons: *ISIJ Int.*, 2010, vol. 50, pp. 1413–21.
38. O. Haida, T. Emi. S. Yamada and F. Sudo: *Proc.. Scaninject II*, (1980), 20.1.
39. S. Joo and R. I. L. Guthrie: *Metall. Trans.*, 23B(1992), 765.
40. Y. Sheng and G. A. Irons: *Metall. Trans.*, 24B(1993), 695.
41. S. Ganguly and S. Chakraborty: *ISIJ Int.*, 2004, vol. 44, pp. 537–46.
42. S. Ganguly and S. Chakraborty: *Ironmak. Steelmak.*, 2008, vol. 35, pp. 524–30.
43. Y.G. Xu, M. Ersson, and P.G. Jonsson: *Metall. Mater. Trans. B*, 2015, vol. 46B, pp. 2628–38
44. Y.G. Xu, M. Ersson, and P. Jonsson: *Steel Res. Int.*, 2015, vol. 86, pp. 1289–97.
45. W.T. Lou and M.Y. Zhu: *Metall. Mater. Trans. B*, 2013, vol. 44B, pp. 762–82.
46. W.T. Lou and M.Y. Zhu: *ISIJ Int.*, 2014, vol. 54, pp. 9–18.
47. L.F. Zhang: *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2000, vol. 8, pp. 463–76.
48. V. De Felice, I.L.A. Daoud, B. Dussoubs, A. Jardy, and J.P. Bellot: *ISIJ Int.*, 2012, vol. 52, pp. 1273–80.
49. J.P. Bellot, V. De Felice, B. Dussoubs, A. Jardy, and S. Hans: *Metall. Mater. Trans. B*, 2014, vol. 45B, pp. 13–21.
50. L.M. Li, Z.Q. Liu, B.K. Li, H. Matsuura, and F. Tsukihashi: *ISIJ Int.*, 2015, vol. 55, pp. 1337–46.
51. A. Huang, H. Harmuth, M. Doletschek, S. Vollmann, and X.Z. Feng: *Steel Res. Int.*, 2015, vol. 86, pp. 1447–54.
52. L.M. Li, B.K. Li, and Z.Q. Liu: *ISIJ Int.*, 2017, vol. 57, pp. 1–10.
53. T. Kulju, S. Ollila, R.L. Keiski, and E. Muurinen: *IFAC-PapersOnLine*, 2015, vol. 48, pp. 1–5.

54. L. Jonsson and P. Joˆnsson: ISIJ Int., 1996, vol. 36, pp. 1127–34.
55. P.G. Joˆnsson, L. Jonsson, and D. Sichen: ISIJ Int., 1997, vol. 37, pp. 484–91. 1
56. L. Jonsson, D. Sichen, and P. Joˆnsson: ISIJ Int., 1998, vol. 38, pp. 260–67.
57. J. Aoki, L. Zhang, and B.G. Thomas: 3rd Int. Congr. on Science & Technology of Steelmaking, Warrendale, PA, 2005, pp. 319– 32.
58. R. Singh, D. Mazumdar, and A.K. Ray: ISIJ Int., 2008, vol. 48, pp. 1033–35.
59. L.Jardon, C. gonzalez, G Trápaga, A. Amaro and M. Ramı́rez: Experimental Study of Mass Transfer Mechanisms for Solute Mixing in a Gas-Stirred Ladle Using the Particle Image Velocimetry and Planar Laser-Induced Fluorescence Techniques, CDMX, 2021.

Anexo A

En este anexo se presenta de manera detallada la puesta del problema en el software CFD Fluent Ansys, a lo que se le llama setup con un paso a paso de la programación y que ayude a futuros trabajos a realizarlo sin mayores complicaciones.

A. Setup

El proposito del setup es definir la naturaleza del sistema, las condiciones iniciales y de frontera, las ecuaciones de transporte a resolver y los materiales que se van a utilizar junto con sus propiedades. La secuencia de pasos se da directamente a través de las figuras y sus pies de figuras.

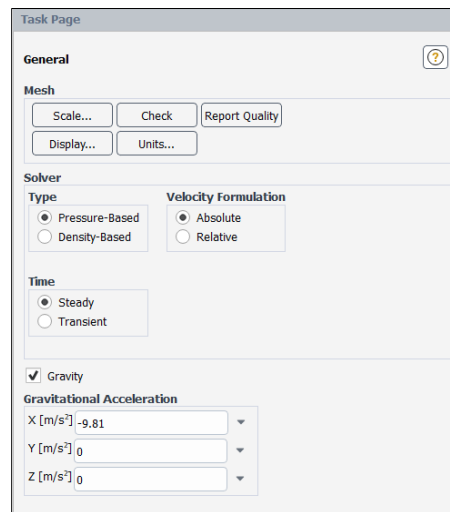


Figura A1. Activar la condición de estado estacionario y activar la gravedad en la dirección correcta según las coordenadas en que se haya realizado el modelo.

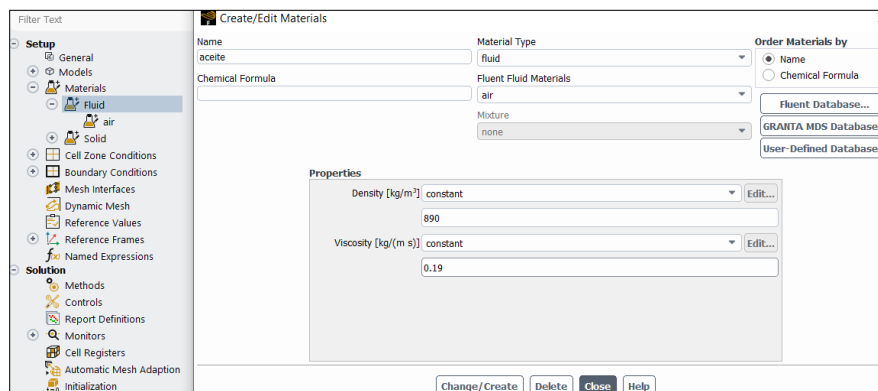


Figura A2. Se definen los materiales que se utilizan en el modelo, para este caso son: agua, aire y aceite, los dos primeros ya están definidos en el programa, el aceite es necesario crearlo. Se abre la ventana "Creat/Edit" y se especifican propiedades físicas y químicas (de ser necesarias).

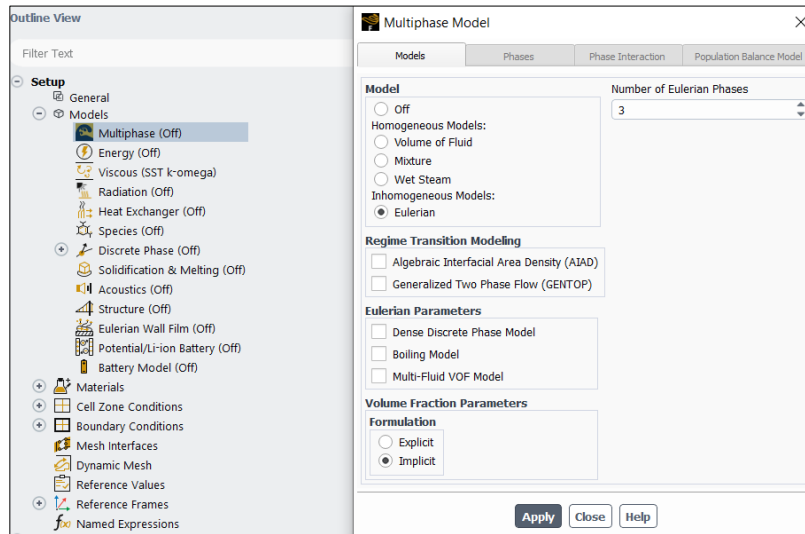


Figura A3. Se selecciona “Multiphase” y se abre la ventana “Multiphase model”, se activa el modelo que se va resolver para este caso es el Euleriano con tres fases y con formulación implícita.

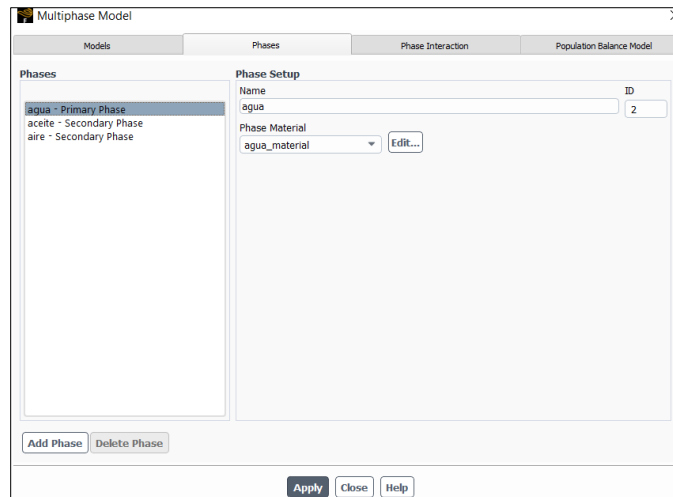


Figura A4. En el recuadro derecho “phases” de la ventana “Multiphase model” se nombra las fases del modelo con sus respectivos materiales, para la fase primaria se agrega agua y para la fase secundaria aceite y aire, para el aire también se define un diámetro de entrada que corresponde al diámetro de inyección del modelo físico 0.01m.

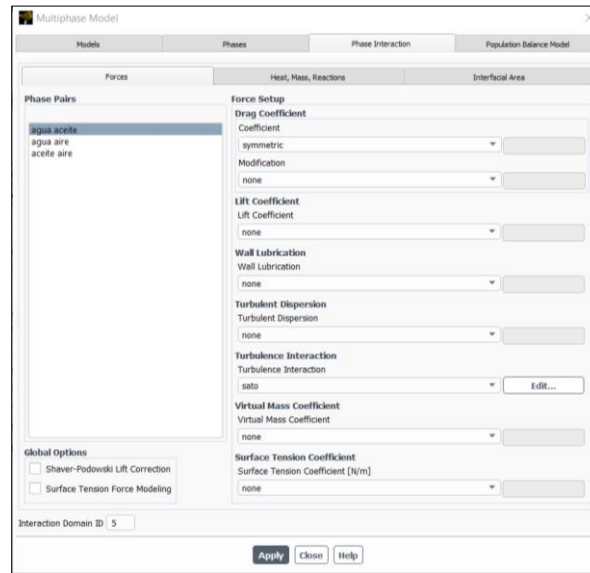


Figura A5. En la siguiente sección “phase interaction” de la ventana “Multiphase model” se definen las interacciones entre las fases (Fuerza de arrastre: drag, masa virtual: virtual mass e interaccion turbulenta: turbulence interaction) para el caso de la interacción agua-aceite solo se cambian el “drag coefficient” a Symetric y la “turbulence interaction” a Sato.

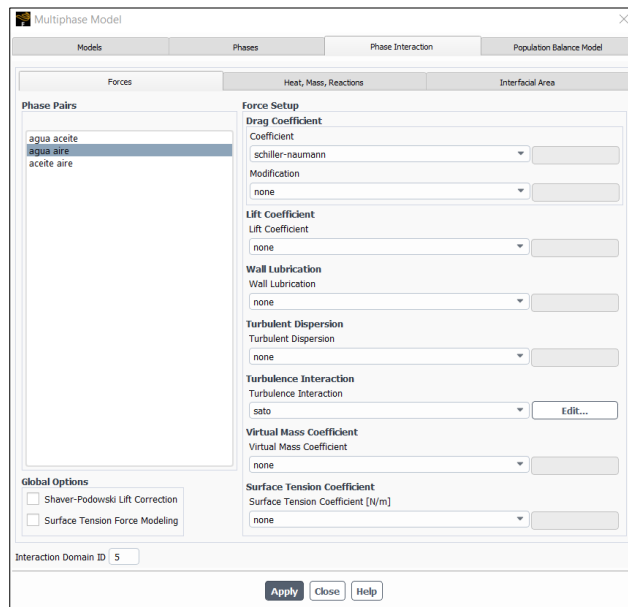


Figura A6. Para el caso de la interacciona de las fases agua-aire solo se cambia la “turbulence interaction” a Sato.

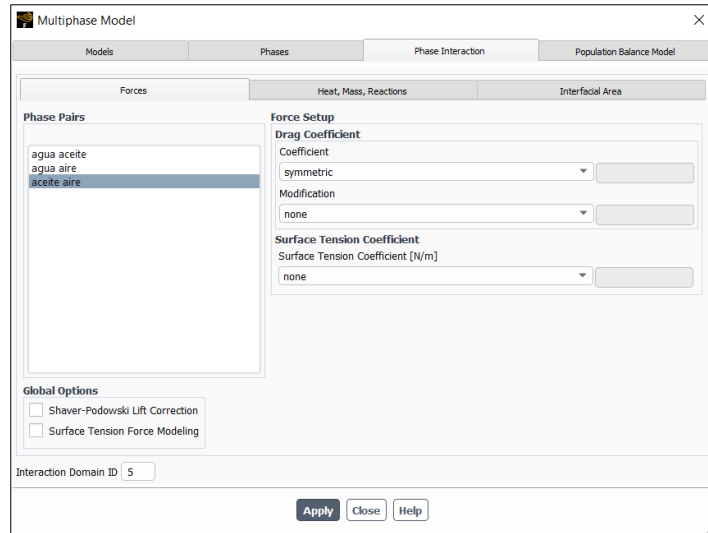


Figura A7. Para el caso de la interacción de las fases aceite-aire solo se cambia “drag coefficient” a Symetric.

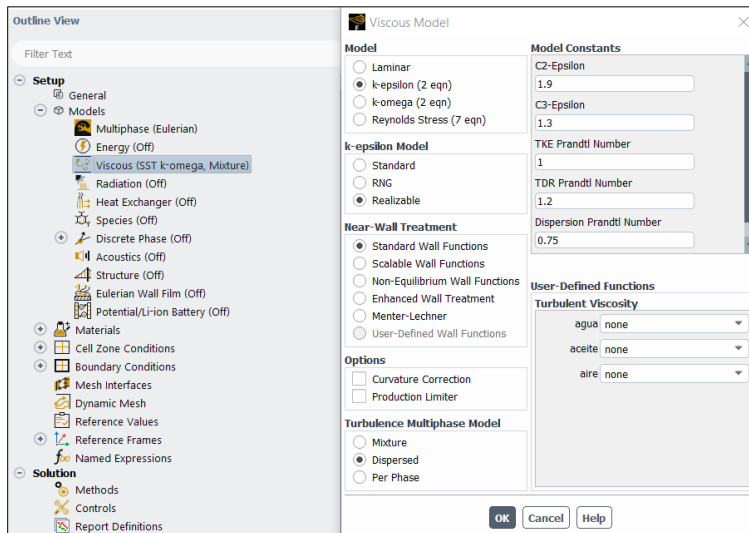


Figura A8. Seleccionar la pestaña “viscous” se activa el modelo k-epsilon-realizable y el modelo dispersión multifásica de turbulencia (turbulence multiphase model) en estado “dispersed”, consecutivamente en la parte superior derecha “model constants” se define el número de Schmidt con un valor de 1.35 ya que fue con el que se obtuvieron los mejores resultados en las simulaciones de prueba.

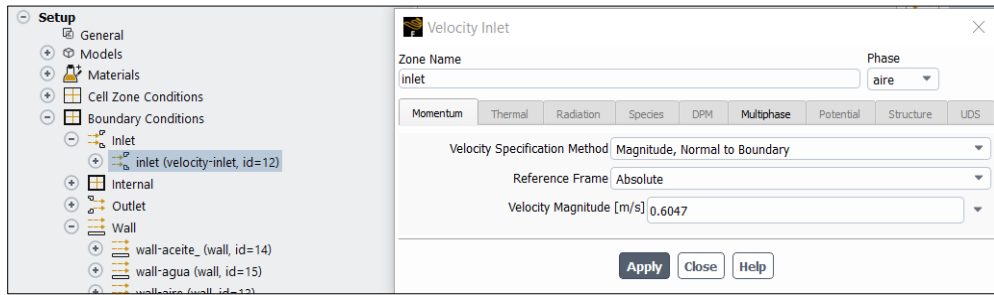


Figura A9. Se selecciona la pestaña “boundary conditions” (condiciones frontera) para la entrada: “inlet”, se define el valor de la velocidad con la que entra el aire (0.6047 m/s).

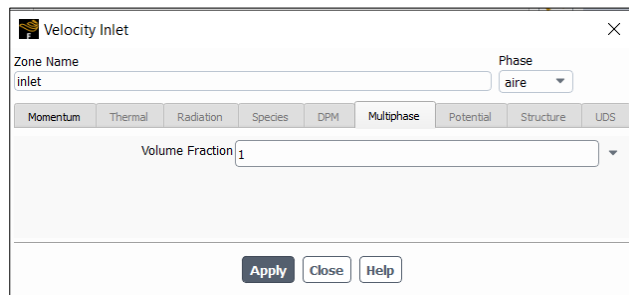


Figura A10. Se define la fracción volumen en la entrada igual a uno ya que solo entra aire.

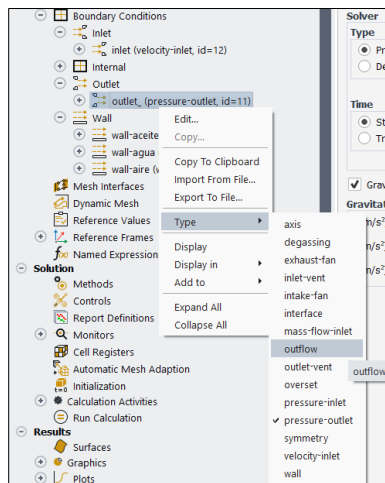


Figura A11. Posteriormente se elige la salida: “outlet” y se coloca una condición de flujo: “outflow”.

2. Solution

En esta sección se definen los métodos de resolución, reportes de residuales y la definición de criterios de convergencia entre otras actividades.

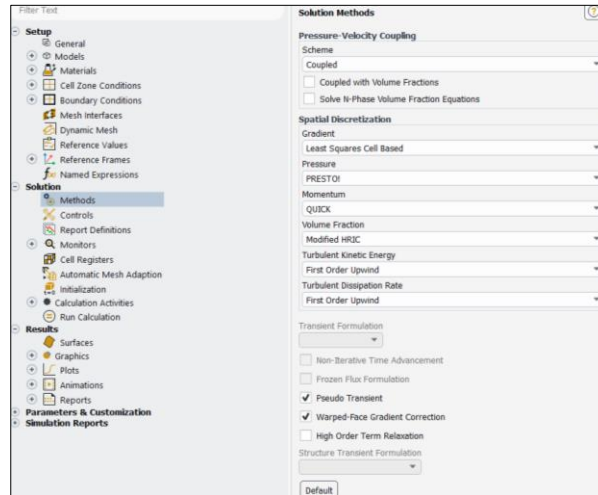


Figura A12. En la pestaña “Methods” se definen los métodos de resolución y discretización espacial adecuados, es importante elegir el estado pseudotransitorio: “pseudo transient” junto con todas las demás opciones que se muestran en la ventana y que ayudan a converger más rápidamente la solución.

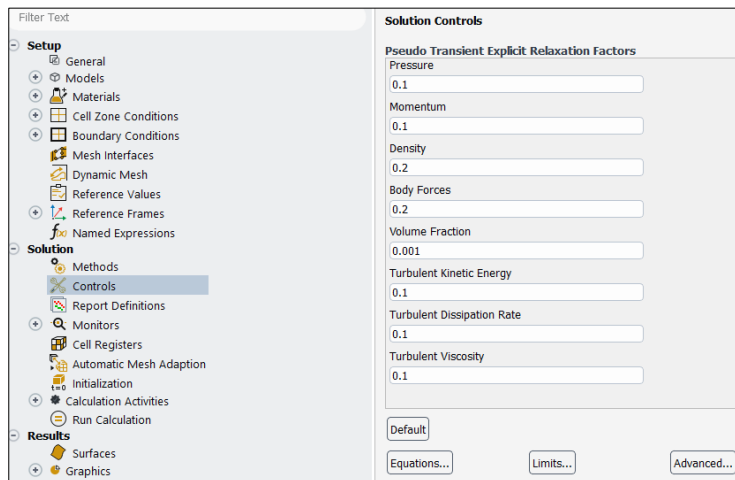


Figura A13. Se selecciona la pestaña “controls” para adecuar los parámetros de controles, en este caso se ajustan los valores de cada una de las variables. Estos valores se obtuvieron de forma empírica con investigaciones anteriores.

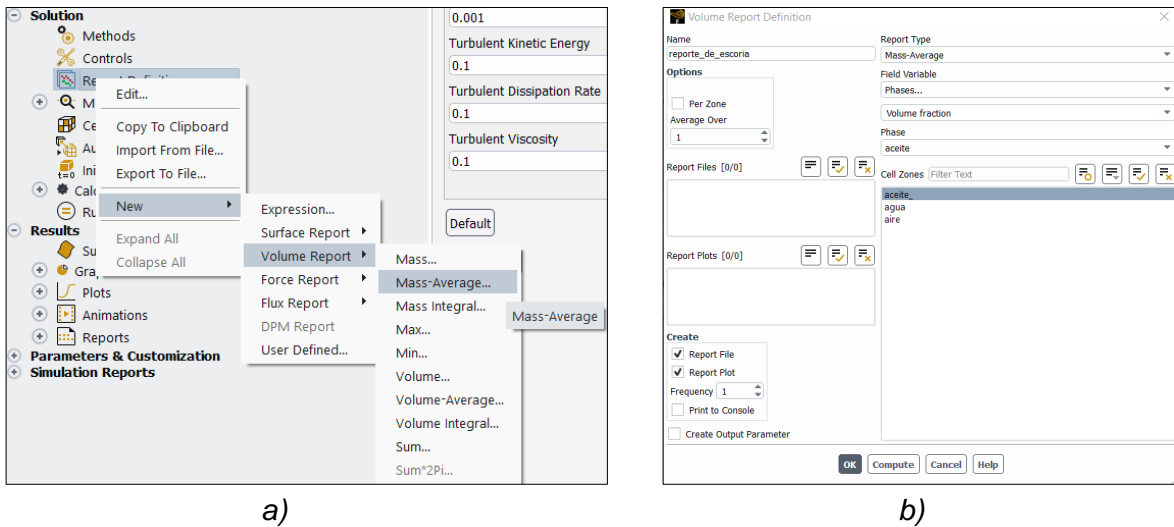


Figura A14. Se crea un reporte para monitorear la fracción volumen de escoria a) con ello se pueden detectar anomalías en la simulación, por ejemplo, si se pierde una cantidad significativa de escoria, en este caso solo se define en la fase aceite b) ya que es la fase que simula la escoria y por lo cual es la única fase que se va tener este material (aceite).

Initialization

En esta sección se inicializa la solución numérica, los valores iniciales se definen en cero a excepción del valor de fracción volumen de aire que se le da el valor de 1.

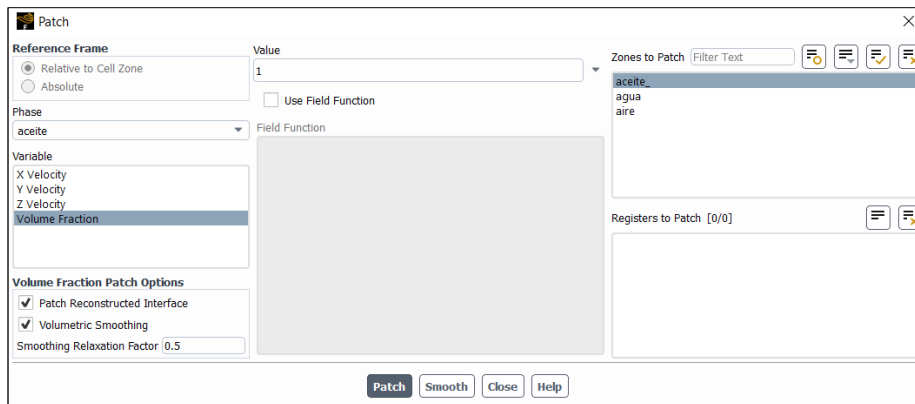


Figura A15. Seleccionando la pestaña “initialization” se escoge la opción “patch”, donde se definen las regiones de las fases y sus dominios dentro del modelo.

Run calculation

Finalmente, en la sección “Run calculation” se da comienzo a la simulación del caso.

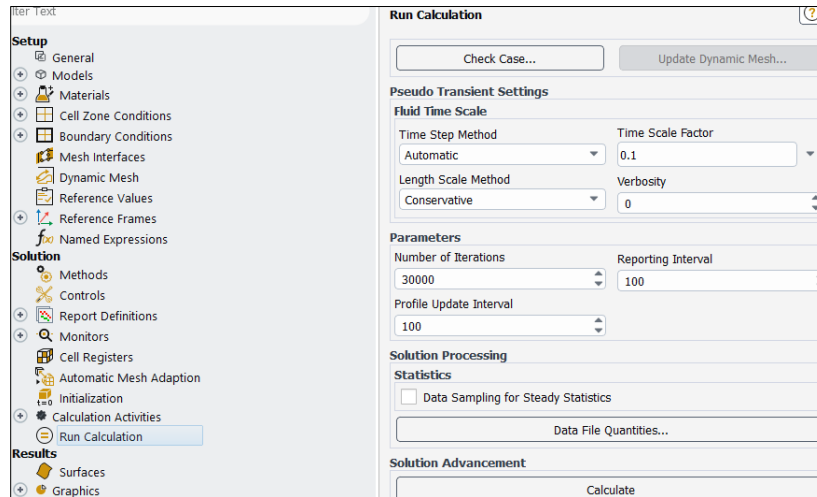


Figura A16. En la ventana “Run calculation” se define el factor de escala de tiempo como 0.1 y el número de iteraciones a 30000. Al llegar a la convergencia se vuelve a correr cambiando únicamente la condición de estado pseudotransitorio a transitorio.

Mezclado

Se guardan los resultados del setup de dinámica de fluidos y posteriormente en ese mismo documento se realizan los siguientes pasos.

```

Console

> (rpsetvar 'time-step 0)
time-step

> (rpsetvar 'flow-time 0)
flow-time

>
    
```

Figura A17. En la consola se colocan los comandos: (rpsetvar ‘time-step 0) y (rpsetvar ‘flow-time 0) para inicializar el tiempo a 0, pero los datos anteriores sigan fijos y sin ningún cambio.

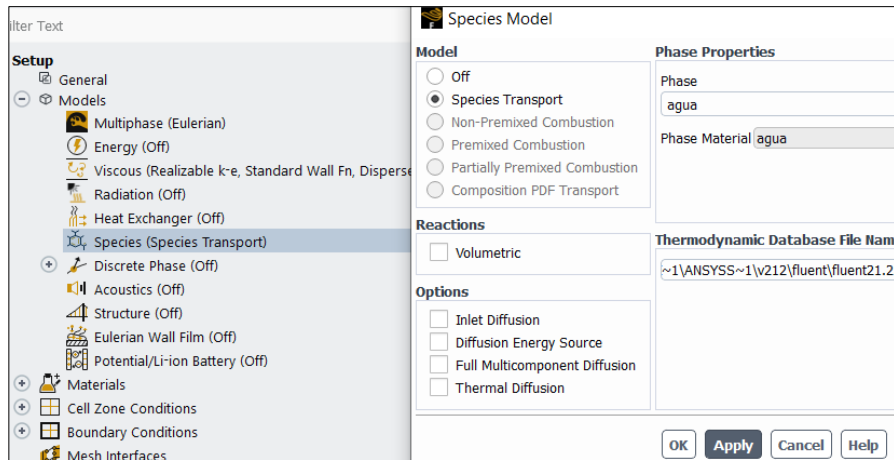


Figura A18. En la pestaña “models” se activa el modelo de difusión de especies, con esto se asegura que la ecuación de transporte de masa se active en el modelo.

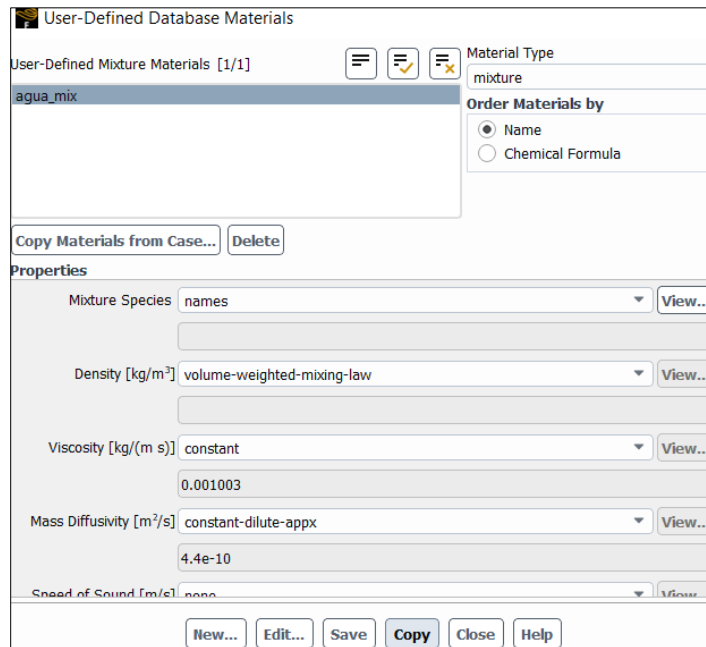


Figura A19. Se agregan los materiales que se van a mezclar en la fase primaria (agua), en este caso se importaron de una base de datos realizada específicamente para el caso de mezclado que contiene los datos fisicoquímicos del agua y rodamina 6G.

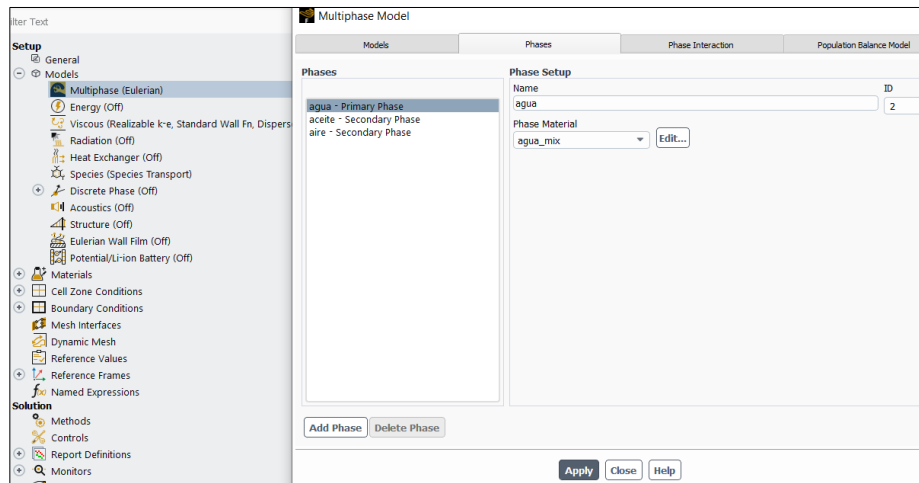
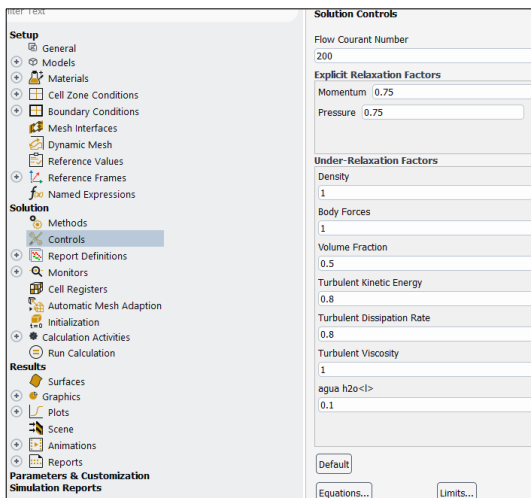
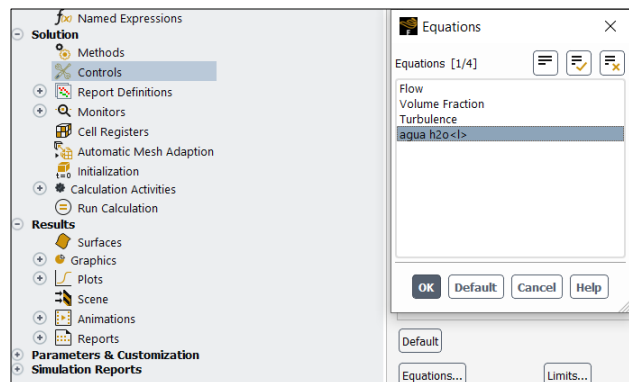


Figura A20. En la pestaña “models” se elige la opción “multiphase” para incorporar el nuevo material a la fase primaria (agua), en la ventana “phase material” se agrega la mezcla que contiene agua y rodamina 6G (en dicha mezcla no vienen especificadas las proporciones de cada componente), para este caso se le puso el nombre a la mezcla “agua_mix”.

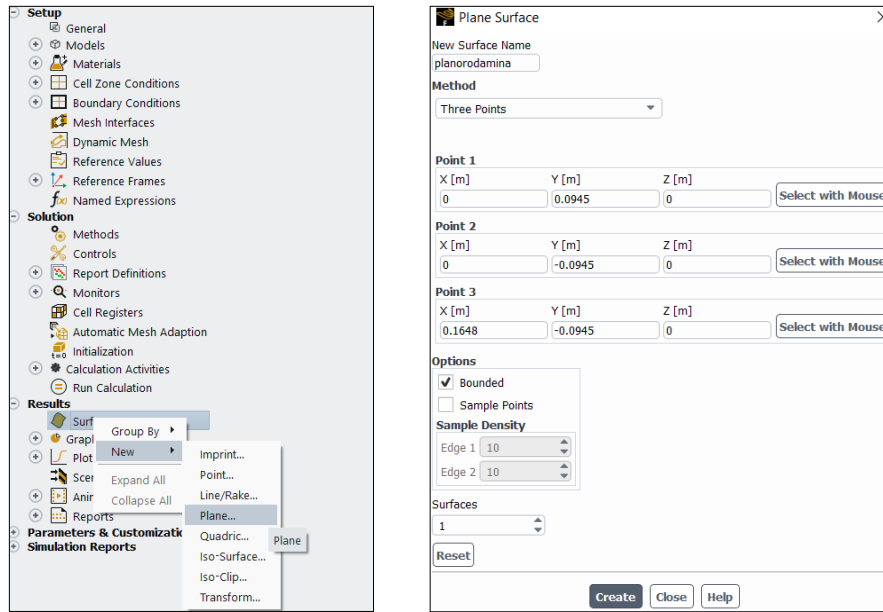


a)



b)

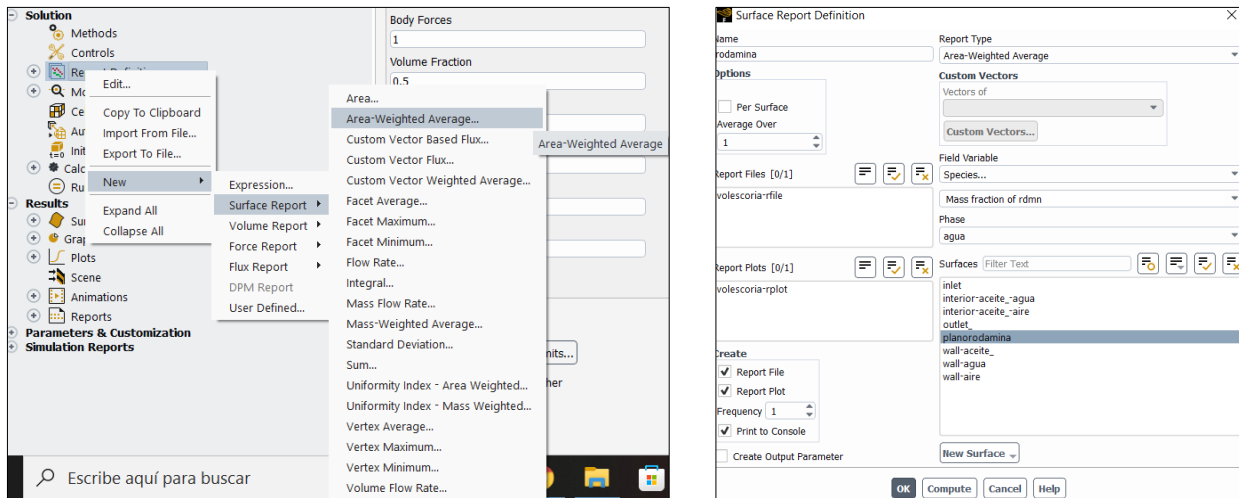
Figura A21. En la ventana de “controls” se asignan los valores mostrados en la figura a), en esta misma ventana se abre la pestaña “equations” y se desactivan todas las ecuaciones excepto la ecuación de transporte de masa figura b), ya que las demás en el setup anterior fueron resueltas.



a)

b)

Figura A22. En la pestaña “surfaces” se da click derecho a) para poder crear un plano X-Y con las medidas para abarcar únicamente la parte de la fase agua de forma longitudinal por el centro del diámetro del modelo de la olla b).



a)

b)

Figura A23. Se crea un reporte para monitorear el cambio de concentración de rodamina en la fase primaria a). El reporte se hace en base al área del plano creado en la zona del agua para ponderar la concentración total b).

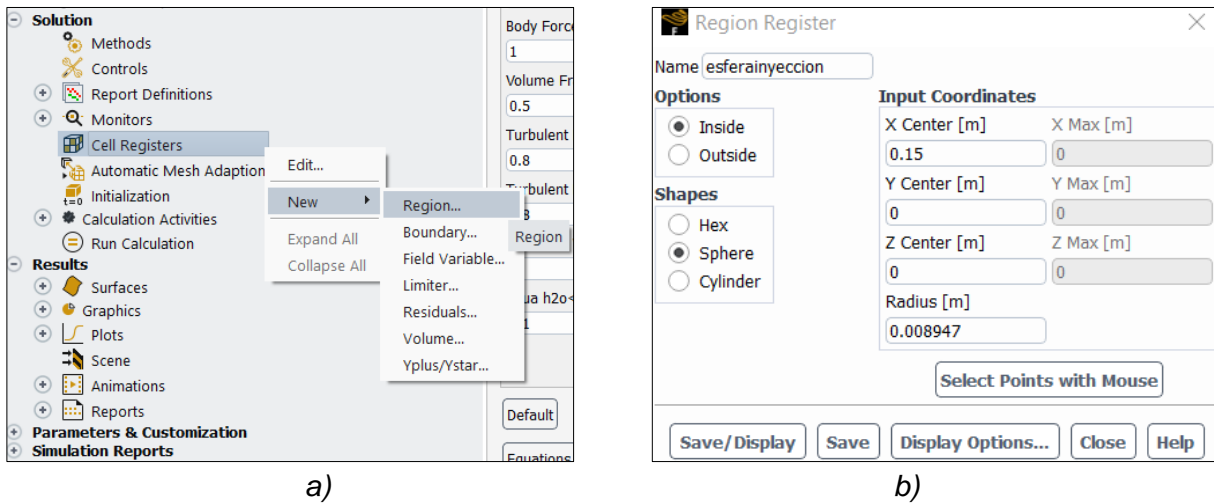


Figura A24. Seleccionando la opción “Cell registers” a) se crea una esfera, la cual es la representación del punto de inyección de rodamina, la cual tiene un radio para que su volumen contenga 3 ml de la solución de rodamina, también, se le da la posición del punto donde se quiere inyectar b).

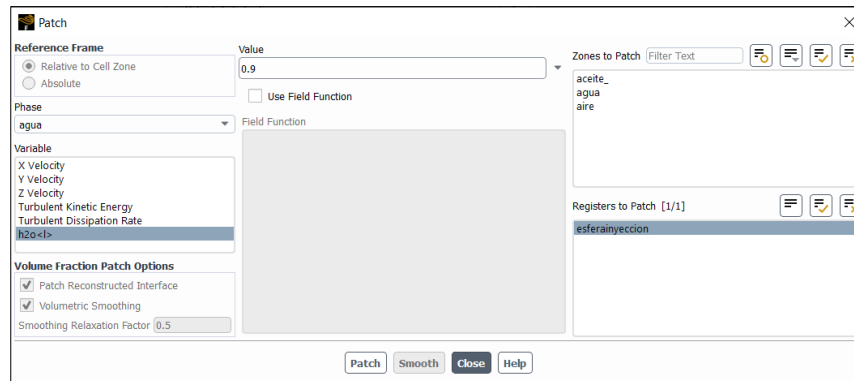


Figura A25. Se realiza el patch de las zonas donde va estar presente la rodamina, como la esfera representa una gota de rodamina se requiere poner la concentración complementaria de la solución de rodamina en la geometría esférica.

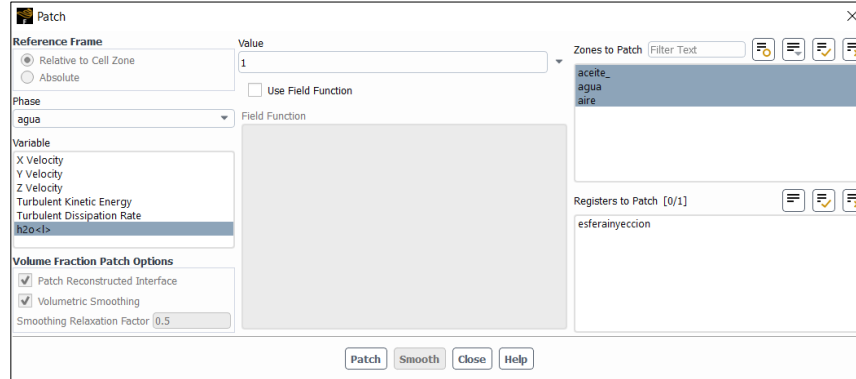
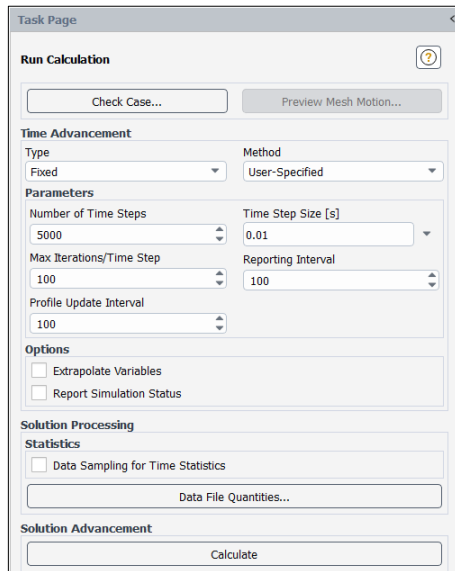
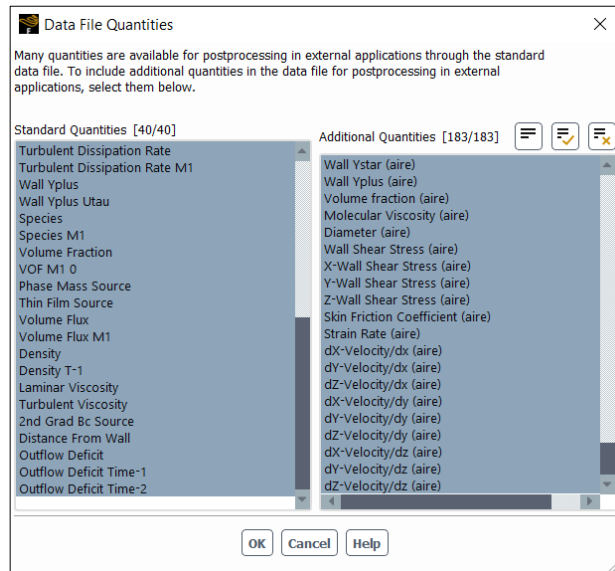


Figura A26. En todas las demás zonas se le indica al software que no hay rodamina por lo que se pone una concentración de 1 en fracción volumen de agua.



a)



b)

Figura A27. Se corre el programa especificando el paso de tiempo deseado y el número de pasos que se requieren para llegar a la homogenización de la concentración de rodamina a).

Es necesario obtener toda la información arrojada en la solución por eso es importante seleccionar todos los parámetros para guardar estos valores y poder utilizarlos para el análisis posterior b).