



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

***“MODELADO MATEMÁTICO DE INTERCAMBIOS METAL-ESCORIA
EN OLLAS AGITADAS CON GAS UTILIZANDO LA TÉCNICA VOF-
DPM”***

TESIS

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

PRESENTA

MARIO ANTONIO BECERRA RUEDA



Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez

Ciudad Universitaria CD.MX.

2024



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: Profesor: DR. CARLOS GONZALEZ RIVERA
VOCAL: Profesor: DR. ADRIAN MANUEL AMARO VILLEDA
SECRETARIO: Profesor: MARCO AURELIO RAMIREZ ARGAEZ
1er. SUPLENTE: Profesor: AGUSTIN GERARDO RUIZ TAMAYO
2° SUPLENTE: Profesor: DIEGO ENRIQUE GONZALEZ GONZALEZ

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

LABORATORIO 203, P1, EDIFICIO D, FACULTAD DE QUÍMICA.

ASESOR DEL TEMA: DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ

(nombre y firma)

SUSTENTANTE: MARIO ANTONIO BECERRA RUEDA

(nombre y firma)

Índice

| | | |
|--------------|---|-----------|
| 1 | Introducción | 4 |
| 1.1 | Proceso de fabricación del acero | 4 |
| 1.1.1 | Siderurgia primaria | 4 |
| 1.1.2 | Siderurgia secundaria | 5 |
| 1.2 | Modelado matemático | 7 |
| 1.2.1 | Modelado multifase | 7 |
| 1.3 | Estado del arte | 8 |
| 2 | Hipótesis | 12 |
| 3 | Objetivos | 12 |
| 4 | Metas | 12 |
| 5 | Metodología | 12 |
| 5.1 | Suposiciones | 13 |
| 5.2 | Ecuaciones gobernantes | 13 |
| 5.2.1 | Fase continua | 14 |
| 5.2.2 | Modelo de turbulencia $k - \epsilon$ realizable | 15 |
| 5.2.3 | Fase discreta | 16 |
| 5.3 | Modelo cinético de transferencia de masa | 18 |
| 5.4 | Condiciones iniciales y de frontera | 20 |
| 5.4.1 | CFD | 20 |
| 5.4.2 | Desulfuración | 22 |
| 5.5 | Procedimiento de solución | 23 |
| 6 | Validación | 24 |
| 7 | Resultados | 25 |
| 7.1 | Fluidodinámica | 25 |
| 7.2 | Desulfuración | 25 |
| 8 | Discusión | 30 |
| 8.1 | Fluidodinámica | 30 |
| 8.2 | Desulfuración | 31 |
| 9 | Conclusiones | 32 |
| 10 | Referencias | 32 |

1 Introducción

1.1 Proceso de fabricación del acero

1.1.1 Siderurgia primaria

En el proceso general consta de producir una aleación $Fe - C$ con un contenido máximo de carbono de 2%. Es intrínseco del proceso la existencia de otros elementos a lo largo de toda la fabricación del material los cuales, dependiendo del grado de refinación de éste, son controlados en su contenido.

En la fabricación de acero existen dos rutas: la vía integrada, es decir, partir de mineral de hierro como materia prima inicial, y la vía **no** integrada o de horno de arco eléctrico (*Electric Arc Furnace, EAF*), es decir, a partir de, principalmente, chatarra de acero. Ambas rutas están en constante desarrollo, con el objetivo de mejorar en su eficiencia, control de composición química, reducir su gasto energético e, importante en los últimos años, reducir su huella de carbono. Las rutas se encuentran representadas en la figura 1.

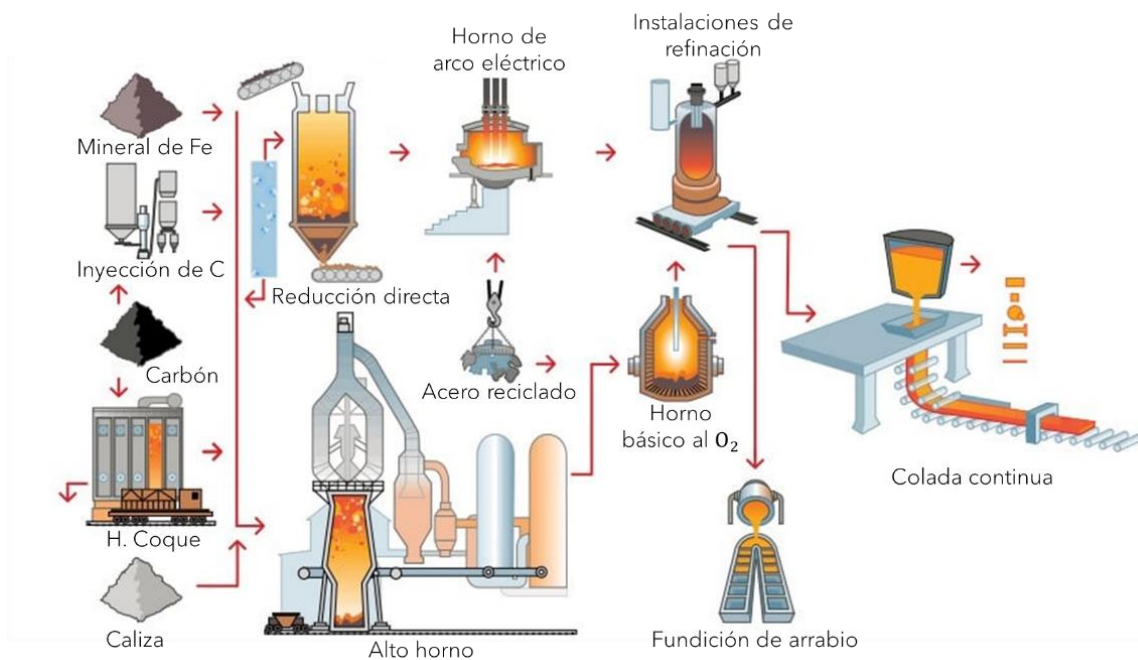


Figura 1. Esquema del proceso de obtención de acero [28].

Vía integrada

La reducción del mineral de hierro (hematita, Fe_2O_3 , principalmente) se lleva a cabo en forma de *pellet* sinterizados de dos principales maneras: Alto Horno (*Blast Furnace*) y posterior eliminación de exceso de carbono en un Horno Básico de Oxígeno (*Basic Oxygen Furnace, BOF*); Reducción Directa y posterior paso al EAF.

La primera produce el llamado *arrabio* el cual, al tener un alto contenido de carbono (4.3 % aproximadamente) e impurezas, es virtualmente inservible, por lo cual dichas

impurezas se eliminan en el BOF, el cual es un convertidor donde se inyecta oxígeno a manera de jet supersónico por medio de una lanza, oxidando el carbono excedente y a otros aleantes como Si, Mn o P, convirtiendo el arrabio en acero líquido.

La segunda ruta integrada produce el llamado *hierro esponja* mediante la reducción de los pellets de óxido de hierro con H_2 y CO como gases reductores a altas temperatura, sin alcanzar el punto de fusión del hierro. El *hierro esponja* obtenido es de alta porosidad, el cual se funde en el EAF que como su nombre indica, genera calor a través de arcos eléctricos formados entre los electrodos de grafito presentes en la parte superior, a través de los cuales fluye corriente alterna o directa, produciendo el calor necesario para la fusión del hierro. Se puede añadir hierro en forma de chatarra como materia prima de igual forma, ayudando en la distribución de energía térmica y para controlar la composición.

Vía no integrada

Es similar a la segunda manera descrita anteriormente, con la diferencia de que no se utiliza hierro esponja proveniente de la reducción del mineral de hierro: se funde 100% chatarra de hierro en el EAF. La ventaja de esta vía es la completa utilización de chatarra de hierro, presente en grandes cantidades en países industrializados, siendo una alternativa amigable con el medio ambiente.

Así, durante la siderurgia primaria se obtiene acero líquido con contenidos de carbono dentro de los límites aceptables, sin embargo, importantes cantidades de oxígeno se encuentran todavía disueltas en el metal líquido, así como impurezas que no son removidas satisfactoriamente durante el proceso de BOF o de EAF. Por ello, para obtener un material con los requisitos y la calidad óptima, estas impurezas se remueven en el Horno Olla (Ladle Furnace, *LF*), en el proceso de siderurgia o refinación secundaria.

1.1.2 Siderurgia secundaria

En el LF se llevan a cabo distintos subprocesos, tales como:

- Ajuste de composición química.
- Eliminación de impurezas.
- Homogeneización térmica y química.
- Eliminación de inclusiones.

El horno de olla, representado en la figura 2, es un horno cilíndrico con un recubrimiento interior de refractario, con un sistema de calentamiento de electrodos de grafito encontrados en la parte superior, cuyo objetivo es el de mantener la temperatura del baño de metal fundido.

En la parte inferior se encuentra un tapón poroso, cuya posición y tamaño son variables importantes en el diseño del proceso, a través del cual se inyecta un gas inerte con el objetivo de agitar el baño de acero líquido, favoreciendo el proceso

cinético de limpieza del material. La misma inyección y agitación favorece distintos procesos durante la siderurgia secundaria, como la reducción de gradientes térmicos y químicos, así como la flotación de impurezas en el seno del baño.

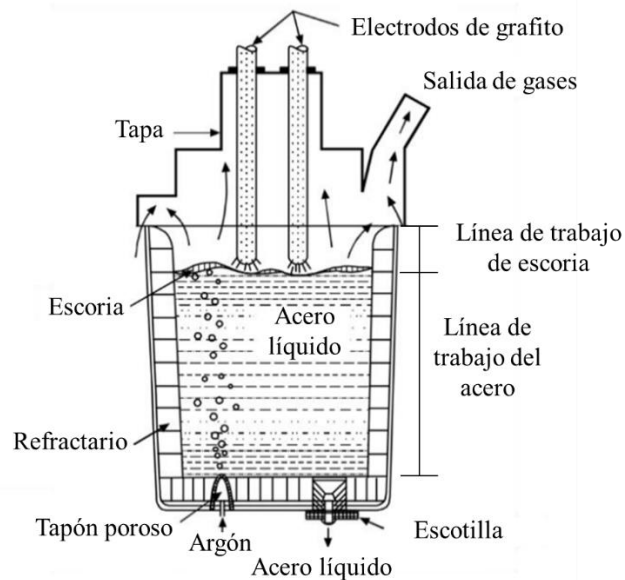


Figura 2. Esquema de los componentes del LF.

En la superficie superior del acero líquido se encuentra una capa de escoria cuya composición juega un rol importante en los procesos presentes en el LF, principalmente en los procesos de limpieza y eliminación de impurezas. Se podría considerar como la variable más importante a la *basicidad* de la escoria, directamente relacionada a las composiciones de óxido de calcio y de magnesio presentes. La basicidad de la escoria es responsable de la selección de materiales para la construcción del recubrimiento interior de refractario del horno, teniendo, de igual manera, un papel más importante en la cinética de desulfuración, como se discute en la sección 5.3.

En la figura 3 se representa esquemáticamente los distintos fenómenos que se desarrollan en el horno de olla el cual, por naturaleza, se considera un sistema multifásico, específicamente, trifásico: metal-escoria-atmósfera. Este trabajo se enfoca en el estudio de los fenómenos presentes en la interfase metal-escoria, es decir, la desulfuración y el atrapamiento de escoria, fenómeno conocido como emulsión.

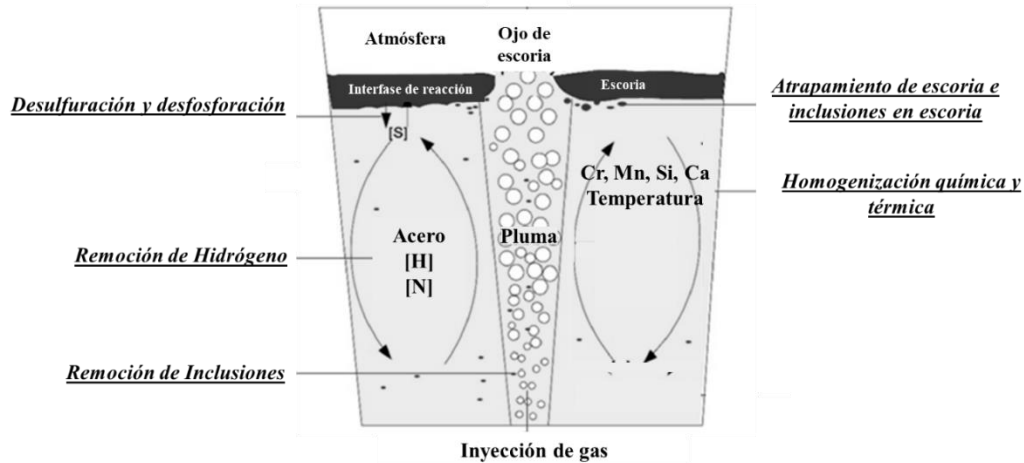


Figura 3. Los distintos fenómenos desarrollados dentro del LF [29].

1.2 Modelado matemático

El modelado matemático es actualmente una importante herramienta en la investigación metalúrgica del horno de olla. En este se lleva a cabo una representación aproximada de la realidad mediante la resolución numérica de ecuaciones fundamentales ligadas a los fenómenos gobernantes de los procesos.

Normalmente los modelos matemáticos son planteados específicamente para encajar y representar ciertas observaciones experimentales. Así, la implementación de estos modelos depende estrictamente de su validación, con el objetivo de ser capaz de simular distintas geometrías y parámetros sin necesidad de experimentación, de esta manera siendo capaz de optimizar procesos ahorrando tiempo, esfuerzo y, principalmente, recursos.

Los modelos matemáticos se han ido desarrollando de la mano del desarrollo del poder computacional a lo largo de la historia, siendo cada vez más relevantes en tiempos actuales debido a la capacidad de resolver casos cada vez más complejos, con un gran número de ecuaciones, en tiempos cada vez más cortos. Sin embargo, en el caso del horno de olla, no existe un algoritmo global que modele todas y cada una de las regiones acorde a las observaciones experimentales, existiendo distintas aproximaciones para representar sistemas multifásicos [30].

1.2.1 Modelado multifase

La mayor distinción entre los estudios de modelado matemático documentados en la literatura es la elección del modelo multifásico con el cual trabajar, dependiendo de la región o fenómeno de interés. Se pueden considerar tres aproximaciones [19]:

Quasimonofásico. Fue el modelo multifásico utilizado en los intentos iniciales para modelar sistemas multifásicos de ollas agitadas por gas. Mantiene cierta popularidad hoy en día. En este acercamiento, varios parámetros deben ser definidos previamente, como dimensiones y velocidades del gas inyectado (burbuja).

Es computacionalmente eficiente, sin embargo, no es del todo confiable al presentar ciertos grados de error en la representación de la transferencia de momentum en general. Adicionalmente, este modelo asume la *superficie libre* del baño como **plana y sin fricción**. Resulta útil para conocer las distribuciones de velocidades y de disipación de energía turbulenta, lo cual se relaciona con la posición, tamaño y número de inyectores [30].

Euleriano-Lagrangiano. En este acercamiento, se trata a la burbuja como una *partícula discreta* sobre la cual se realiza un balance de todas las fuerzas que actúan sobre ella. Es igualmente eficiente con los recursos computacionales, pero requiere modelos precisos de las fuerzas actuantes, crecimiento de partícula, etcétera, así como las interacciones turbulentas, para describir el movimiento de éstas. Representa una mejora con respecto al modelo cuasimonofásico al estar las burbujas representadas de forma móvil y por términos fuentes de momentum distintos. Es útil para cuantificar las distribuciones fluidodinámicas, describir el comportamiento del gas en la zona bifásica del baño (*plume zone*), y la formación del ojo de escoria [30].

Euleriano-Euleriano. Aquí se resuelve un **set** de ecuaciones gobernantes (continuidad y Navier Stokes) por cada fase presente en el sistema separadamente, con un monitoreo de interfase exacto. Por sí mismo, el acercamiento *Euleriano* no requiere de modelos adicionales, resolviendo cada aspecto del flujo desde principios fundamentales, sin embargo, se vuelve impráctico al requerir resoluciones de malla lo suficientemente finas para representar adecuadamente sistemas tridimensionales de ollas agitadas por gas. Resulta adecuado para procesos de transferencia de masa, remoción de gases e inclusiones, al igual que homogeneización química (tiempos de mezclado) y térmica.

Acercamiento combinado. Este tipo de estudio se favorece de la eficiencia computacional del acercamiento Euleriano-Lagrangiano y la habilidad de monitorear precisamente la superficie libre del acercamiento Euleriano-Euleriano. Así, se realiza una combinación en donde la denominada “fase continua” es separada con una interfase bien definida entre metal, escoria y gas superior, mientras que el gas inerte inyectado, tratado como una fase dispersa, se monitorea a manera de partículas dispersas a través de las distintas fases continuas, interactuando e intercambiando momentum entre sí. ANSYS Fluent [18] es capaz de realizar un monitoreo interfacial definido utilizando el modelo multifásico VOF (*volumen of fluid*), mientras trata a las burbujas como partículas discretas utilizando el modelo DPM (*discrete particule model*).

1.3 Estado del arte

Uno de los primeros trabajos, si no el primero, en realizar un estudio de modelado matemático de desulfuración acoplado un software CFD con un modelo termodinámico fue el de Jonsson et al. [25]. Se trató de una aproximación con una termodinámica más bien sencilla, utilizando correlaciones empíricas obsoletas para

el cálculo de la actividad de alúmina y la capacidad de sulfuro. De igual forma, el modelo de transporte de masa es independiente de la fluidodinámica dentro de la olla, es decir, no existe un coeficiente cinético de transporte de masa.

Sin embargo, a pesar de lo mencionado, la aproximación fue capaz de mostrar los cambios en concentración de azufre, aluminio y oxígeno dentro de la olla, a lo largo del tiempo, en forma de contornos, al igual que una curva de contenido de azufre dentro del acero como función del tiempo de refinado.

Poco después, el mismo equipo de investigación, después de trabajar en modelos de capacidad de sulfuro más complejos [8], formularon un nuevo modelo termodinámico y cinético [34]. Este nuevo modelo consideraba, además de la desulfuración del baño de acero, las reacciones de reoxidación presentes, es decir, la presencia de Si, Mn, Al, Ca, Mg, Fe, y sus óxidos. Lo anterior implicaba la necesidad de incorporar el cálculo de las actividades de los diversos óxidos (mediante correlaciones empíricas [17]), al tener influencia en el cálculo de la actividad de oxígeno, haciendo más robusto al modelo. Sin embargo, el trabajo seguía limitado por la tecnología de ese tiempo, ya que la simulación, al igual que su trabajo anterior, se llevó a cabo utilizando el software Phoenics en un modelo bidimensional axisimétrico de inyección central.

No fue sino hasta 15 años después con los trabajos de Lou y Zhu [3, 35] que se logró la implementación de un modelo de geometría tridimensional compleja, de doble inyección, y comparación con datos experimentales en planta, gracias a los avances en la capacidad de procesamiento computacional.

La formulación termodinámica de estos trabajos se caracteriza por incluir, de forma novedosa, coeficientes de partición (o distribución) al equilibrio, L_i , para todas las reacciones presentes, no solo para la desulfuración; cálculo de capacidad de sulfuro, C_s , mediante el modelo de Young; y determinación de las actividades de los componentes en la escoria ya no por medio de correlaciones empíricas, sino por el modelo de solución regular propuesto por Ban-ya [36]. Todo lo anterior, al ser demasiado complejo para ese entonces, fue introducido en el modelo mediante un software termodinámico SRM (*Simultaneous Reaction Model*) el cual fue acoplado al software CFD. Cabe destacar que la formulación propuesta es dependiente de un coeficiente cinético de transferencia de masa, calculado mediante la turbulencia dentro del sistema, haciendo así a la formulación termodinámica dependiente de la fluidodinámica. Sus trabajos fueron realizados en el software Fluent ANSYS, utilizando el modelo multifásico *Euleriano*, el cual se caracteriza por describir de manera precisa el flujo de fluidos, pero resolviendo de manera insuficiente la interfase metal-escoria [18], lo cual limitó la descripción de los fenómenos presentes en esta región.

Tabla 1. Síntesis de los trabajos revisados y sus características.

| Año | Autor(es) | Software | Modelos | Suposiciones | Partícula | Materiales | Características |
|-------------|-----------------|--------------|--|---|--|---|---|
| 1998 | Jonsson y otros | Phoenics | Correlaciones empíricas. k-ε "modificado" [39]. | Superficie de escoria libre y sin fricción. Transferencia de azufre, aluminio y oxígeno. 2D axisimétrico de inyección central. | NA | Acero, escoria, gas inyectado. | Correlaciones empíricas para actividades y capacidad de sulfuro. Sin coeficiente cinético de transferencia de masa. Sin validación. |
| 2000 | Jonsson y otros | Phoenics | Cálculo de capacidad de sulfuro mediante un modelo propio, KTH [8]. k-ε "modificado" [39]. | Superficie de escoria libre y sin fricción. Transferencia de azufre, aluminio, oxígeno, silicio, manganeso, calcio, magnesio, hierro, y sus óxidos. 2D axisimétrico de inyección central. | NA | Acero, escoria, gas inyectado. | Correlaciones empíricas para el cálculo de actividad de los óxidos. Sin coeficiente cinético de transferencia de masa. Sin validación. |
| 2014 y 2015 | Lou y Zhu | ANSYS Fluent | Eulerian, solución regular de Ban-ya, Young, Small Eddy. Estándar k-ε [38]. | Superficie de escoria libre y sin fricción. 3D simétrico, doble inyección. Isotérmico. | Esféricas, diámetro constante. Fuerzas: Drag, Virtual Mass, Lift, Turbulent Dispersion [38]. | Acero, escoria, gas inyectado. | Transferencia de especies metal-escoria y reoxidación en el ojo de escoria. Uso de software termodinámico. Constantes de ajuste. |
| 2016 | Cao y otros | ANSYS Fluent | VOF, Small Eddy, Young, correlaciones empíricas. k-ε realizable. | Superficie de escoria sin fricción. 3D completo, doble inyección. Isotérmico. | NA | Acero, escoria, gas inyectado, atmósfera gaseosa. | Correlación empírica para la actividad de alúmina; solo desulfuración; Validación con datos en planta; |
| 2018 y 2019 | Cao y otros | ANSYS Fluent | VOF-DPM, Small Eddy, Young, solución regular de Ban-ya. k-ε realizable. | 3D completo, doble inyección. Isotérmico. Sin reoxidación. | Fuerzas: Drag (Ishii-Zuber), Gravedad, Virtual Mass, Gradiente de presión. Expansión, coalescencia, y rompimiento. | Acero, escoria, gas inyectado, atmósfera gaseosa. | Modelo termodinámico completo y complejo. 2018: transferencia de masa en Excel, no acoplado. 2019: completamente acoplado mediante UDF. |

Los encargados de intentar corregir lo anterior fueron Cao & Nastac, cuya primera aproximación al modelado matemático de intercambios metal-escoria en ollas de acero se dio en 2016 [22]. La principal característica de su trabajo fue la utilización del modelo multifásico *Volume-of-Fluid*, *VOF*, de Ansys FLUENT, permitiendo así el monitoreo y resolución de una interfase metal-escoria más bien definida.

Al tratarse de una primera aproximación, la formulación termodinámica utilizada por el equipo de investigación se trató de una más bien sencilla, similar a las utilizadas veinte años atrás: actividades calculadas mediante correlaciones y un modelo solo de desulfuración. A pesar de lo anterior, obtuvieron resultados bastante satisfactorios, obteniendo curvas de desulfuración a lo largo del tiempo que, al compararlas con datos obtenidos experimentalmente en planta, se observaron con concordancias aceptables. El modelo multifásico, considerando sus deficiencias, fue capaz de representar satisfactoriamente el fenómeno.

Con el propósito de contrarrestar las limitaciones del modelo multifásico *VOF*, Cao & Nastac, estudiaron la implementación de una aproximación combinada Euleriana-Lagrangiana para la representación del gas inyectado en ollas de acero [20,21]. De esta manera, utilizando el modelo *DPM* de Ansys FLUENT, lograron, modelar satisfactoriamente las burbujas de argón inyectado como partículas discretas en un marco de referencia lagrangiano, considerando su expansión, coalescencia y rompimiento, al comparar sus resultados fluidodinámicos con mediciones experimentales de modelos físicos.

A partir de estos estudios, implementaron la transferencia de masa en un sistema cuya fluidodinámica se basó en los modelos *VOF-DPM-k-epsilon* *realizable*.

El primero de sus dos trabajos [1] se llevó a cabo utilizando un software CFD para el cálculo de fluidodinámica, así como coeficientes de transferencia de masa y área interfacial, mientras que las ecuaciones del modelo termodinámico (incluyendo todas las reacciones presentes) se resolvieron en hojas de Microsoft Excel, reduciendo el costo computacional de la utilización de un modelo acoplado CFD-STR (*Simultaneous Thermodynamic Reaction*).

Su modelo fue validado satisfactoriamente utilizando datos de concentración experimental de concentración en planta, al igual que su trabajo anterior, pero ya no solo para azufre, sino también para aluminio, silicio, y manganeso, mejorando su robusticidad. Gracias a lo anterior, realizaron un estudio de optimización del proceso, en donde una de sus conclusiones fue que el incremento del contenido inicial de aluminio en el baño de acero, el incremento de óxido de calcio en la escoria y/o la reducción del contenido de alúmina en la escoria, mejoran la eficiencia de la desulfuración.

Su segundo trabajo [37] consistió en la eliminación del uso de un segundo software, incorporando las reacciones del modelo termodinámico dentro del mismo CFD, mediante UDF, con el objetivo de volver más eficiente el cálculo al poder resolver la fluidodinámica y la transferencia de masa en la interfase al mismo tiempo. Lo anterior permite capturar el comportamiento transitorio de todos los fenómenos dentro de la olla, sin la necesidad de calcular el campo de velocidades en primer lugar. Las conclusiones de la eficiencia de desulfuración son iguales al anterior.

En la tabla 1 se encuentra la síntesis de las características de los trabajos previamente mencionados.

2 Hipótesis

Usando los algoritmos *DPM-VOF-k-epsilon realizable* que describen el flujo de fluidos cerca de la intercara metal-escoria, se podrá simular de manera realista la cinética de intercambios metal-escoria, asimismo definirá un área interfacial metal-escoria mejor que las calculadas por otros métodos multifásicos disponibles.

3 Objetivos

- Objetivo General: Implementar el intercambio de especies químicas entre el metal y la escoria en un modelo matemático cuya fluidodinámica se basa en simular la olla agitada con gas.
- Objetivo Particular 1: Definir el intercambio metal-escoria a simular, en base a la revisión de la literatura.
- Objetivo particular 2: Implementar el intercambio de especies químicas entre el acero (o agua) y la escoria (o aceite) en ollas de acero agitadas con gas empleando el algoritmo DPM-VOF- k-epsilon realizable.
- Objetivo particular 3: Validar el modelo matemático contrastando los resultados que arrojará el modelo con las mediciones ya hechas en modelos físicos o mediciones experimentales encontradas en la literatura.

4 Metas

- Desarrollar un modelo matemático del intercambio de especies químicas entre el acero (o agua) y la escoria (o aceite) de una olla agitada con gas usando los algoritmos VOF-DPM- k-epsilon realizable.
- Validar el modelo al comparar los resultados calculados, con resultados experimentales reportados en la literatura.

5 Metodología

La geometría, dimensiones, parámetros, propiedades termofísicas y concentraciones del baño de acero y la escoria son las mismas (o similares) que las utilizadas por Cao et al. [22], con el objetivo de realizar una comparación con su trabajo. Lo anterior se da debido a que los autores utilizaron una formulación y

termodinámica de coeficiente de partición constante, en donde la actividad de oxígeno es calculada mediante la reacción de oxidación del aluminio y la capacidad de sulfuro es calculada con el modelo de Young, lo cual permite realizar una validación simplificada del fenómeno.

Para reducir el tiempo de cómputo, se decidió simplificar el modelo de Cao et al. [22] a uno bidimensional axisimétrico de inyección central.

Es importante tener en cuenta que el modelo de Cao et al. [22] se trata de uno tridimensional, con diámetro superior e inferior diferentes, inyección doble excéntrica, consideración de superficie libre sin fricción y utilización del modelo VOF para simular tanto el baño como la inyección de gas, sin acoplar con DPM.

5.1 Suposiciones

Las siguientes suposiciones se realizaron en este trabajo:

- Debido a que se trata de un sistema de inyección céntrica y, por ende, a un eje axisimétrico; la simulación se resolvió en una sección bidimensional.
- Las simulaciones fueron resueltas isotérmicamente a una temperatura de 1608 °C (1885 K).
- Todos los fluidos se consideran newtonianos (propiedades constantes) e incompresibles.
- Estado transitorio.
- Sistema turbulento representado por el modelo $k-\varepsilon$ *realizable*.
- Se utilizó el modelo multifásico VOF acoplado con DPM.
- Se desprecian las interacciones térmicas entre el refractario de la olla y las fases metal/escoria. Sistema isotérmico.
- No se considera la influencia de la variación de la composición del metal/escoria en la fluidodinámica.
- El modelo solo considera desulfuración; el coeficiente de partición de azufre entre el acero y la escoria se considera constante.
- El azufre se encuentra uniformemente distribuido en el acero al inicio del cálculo.
- La reoxidación en el ojo de escoria es despreciada.
- No se considera el rompimiento de la burbuja. Se considera la coalescencia y la expansión.

5.2 Ecuaciones gobernantes

En este estudio el modelo VOF es utilizado para describir las fases continuas (acero, escoria y aire) y para calcular las interfases entre éstas. El gas burbujeado se trató como una fase discreta al inyectar burbujas de gas en las fases continuas acero, escoria y atmósfera gaseosa.

5.2.1 Fase continua

Ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad en el modelo multifásico VOF para la fase q – *enésima* está descrita de la siguiente manera:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{u}_q) = 0, \dots\dots\dots (1)$$

donde α_q, ρ_q y \vec{u}_q son la fracción volumen, la densidad y la velocidad de la fase q -*enésima*, respectivamente.

La fracción volumen α_q se encuentra restringida por:

$$\sum_{q=1}^N \alpha_q = 1 \dots\dots\dots (2)$$

donde N es en número de fases continuas presentes en el sistema.

Cálculo de las propiedades de materiales

Las propiedades que aparecen en las ecuaciones de transporte (momentum, especies) se determinan con base en la presencia de distintas fases. Por ejemplo, para un sistema bifásico, donde las fases se representan por los subíndices 1 y 2, y donde la fracción volumen de la segunda se monitorea, la densidad en cada celda está dada por:

$$\rho = \alpha_2 \rho_2 + (1 - \alpha_2) \rho_1 \dots\dots\dots (3)$$

Y, para un sistema n -fásico, la densidad toma la siguiente forma:

$$\rho = \sum \alpha_q \rho_q \dots\dots\dots (4)$$

Todas las demás propiedades (viscosidad, por ejemplo) se determinan de esta manera.

Conservación de momentum

La ecuación de conservación de la cantidad de movimiento se resuelve a lo largo de todo el dominio y el campo de velocidades resultante es compartido entre todas las fases. La ecuación es dependiente de las fracciones volumen de todas las fases, a través de las propiedades de densidad y viscosidad:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu_{eff} (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T)] + \rho \vec{g}, \dots\dots\dots (5)$$

donde ρ y μ son la densidad y la viscosidad, respectivamente, de la muestra, las cuales son dependientes de la fracción volumen de cada fase. \vec{v} es el campo de velocidades y \vec{g} es el vector de aceleración gravitacional. La viscosidad efectiva se calcula como la suma entre la viscosidad y la viscosidad turbulenta, obtenida por medio del modelo de turbulencia (ec. 6):

$$\mu_{eff} = \mu + \mu_t \dots\dots\dots (13)$$

Conservación de especies químicas

Para la especie *i*, la fracción masa *X* es estimada a través de una ecuación de convección-difusión [18]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho X_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} X_i) = \nabla \cdot \rho \left(D + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) + S_i, \dots\dots\dots (7)$$

donde *Sc_t* es el número de Schmidt turbulento, con un valor predeterminado de 0.7 y *ν_t* es la viscosidad cinemática turbulenta. *S_i* es la tasa de creación de la especie *i* desde la fase dispersa más alguna otra fuente; el modelo cinético para la determinación de *S_i* para el azufre está descrita en la sección 2.3. Para el acero este término es negativo, mientras que para la escoria es positivo.

5.2.2 Modelo de turbulencia *k – ε* realizable

Se utilizó el modelo *k – ε* realizable para cuantificar la turbulencia. Este modelo resuelve una ecuación de conservación para la energía cinética turbulenta (*k*) y otra ecuación de conservación para la rapidez de disipación de energía cinética turbulenta (*ε*) [18]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon \dots\dots\dots (8)$$

y

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \varepsilon u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_1 S_\varepsilon - \rho C_2 \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b, \dots\dots\dots (9)$$

donde:

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \eta = S \frac{k}{\varepsilon}, S = \sqrt{2 S_{ij} S_{ij}} \dots\dots\dots (10,11,12)$$

En estas ecuaciones *k* es la energía cinética turbulenta, *μ_t* es la viscosidad turbulenta, *σ_k* y *σ_ε* son los números de Prandtl, *G_k* es un término de generación de *k* por efecto del gradiente de la velocidad media de la fase continua, *ε* es la rapidez de dispersión de energía cinética turbulenta, *ν* es la viscosidad cinemática, *C₂* y *C_{1ε}* son constantes del modelo.

Las constantes del modelo en este estudio son *C₂* = 1.9, *σ_k* = 1.0, *σ_ε* = 1.2.

La condición de Realizable se aplica al tratar *C_μ* (ec. 13) variable en lugar de constante al hacer el cálculo de la viscosidad turbulenta, *μ_t*.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \dots\dots\dots (13)$$

Donde C_μ es un coeficiente del modelo, dependiente de los parámetros A_0, A_s y U^* :

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{kU^*}{\epsilon}} \dots\dots\dots (14)$$

donde $A_0 = 4.04$ y:

$$A_s = \sqrt{6} \left(\frac{1}{3} \cos^{-1} \left(\sqrt{6} \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\sqrt{S_{ij}S_{ij}}} \right) \right) \dots\dots\dots (15)$$

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij}} \dots\dots\dots (16)$$

donde S_{ij} es el tensor de rapidez de deformación:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \dots\dots\dots (17)$$

G_b es la generación de energía cinética turbulenta como producto de la fuerza boyante:

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \dots\dots\dots (18)$$

donde Pr_t es el número de Prandtl para energía y g_i es el componente de la aceleración gravitacional en la dirección i . El coeficiente de expansión térmica, β , se define como:

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \dots\dots\dots (19)$$

donde p es la presión local. Al tratarse de un sistema isotérmico, este término no se toma en cuenta.

5.2.3 Fase discreta

Ecuación de trayectoria de burbujas

La trayectoria de cada burbuja es calculada en cada instante de tiempo a través de un balance de fuerzas con base en la Segunda Ley de Newton del movimiento:

$$\frac{d\vec{v}_p}{dt} = F_D(\vec{v} - \vec{v}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + F_{vm} + F_p \dots\dots\dots (20)$$

donde \vec{v}_p es el campo de velocidades de la partícula y ρ_p es la densidad de la partícula. Los cuatro términos en la derecha representan la contribución de la fuerza de arrastre, de gravedad (fuerza boyante), masa virtual y gradiente de presión. La contribución de fuerza de empuje (lift) no fue tomada en cuenta, debido a que el cociente $\frac{\rho}{\rho_p} > 1$, las contribuciones de gradiente de presión y masa virtual son tomadas en cuenta [18].

La fuerza de arrastre tiene un coeficiente de fricción, F_D , el cual se expresa como:

$$F_D = \frac{18\mu_{eff} C_D Re}{\rho_p d_p^2} \dots\dots\dots (21)$$

donde d_p es el diámetro de la partícula, C_D es el coeficiente de arrastre y Re es el número de Reynolds relativo.

El coeficiente de arrastre, C_D , se calcula mediante el modelo de arrastre Ishii-Zuber en Ansys Fluent [18].

La fuerza de masa virtual se expresa como:

$$F_{vm} = C_{vm} \frac{\rho}{\rho_p} \left(\vec{v}_p \nabla \vec{v} - \frac{d\vec{v}_p}{dt} \right) \dots\dots\dots (22)$$

C_{vm} es el factor de masa virtual con un valor predeterminado de 0.5.

La fuerza proveniente del gradiente de presión se define:

$$F_p = \frac{\rho}{\rho_p} \vec{v} \nabla \vec{v} \dots\dots\dots (23)$$

El número de Reynolds relativo se define como:

$$Re = \frac{\rho d_p |\vec{v}_p - \vec{v}_l|}{\mu_{eff}} \dots\dots\dots (24)$$

Se utilizaron las opciones “*Discrete random walk model*” (con una *Time Scale Constante* igual a 0.16 [19], con la opción *Random Eddy Lifetime* activada [18]) y “*Two-way turbulence coupling*” para facilitar la transferencia de momentum entre la fase continua y las burbujas, así como para cuantificar los efectos de turbulencia [19,20,21].

Expansión y coalescencia de burbujas

La expansión de la burbuja se debe a los cambios de presión metalostática experimentados por la misma a lo largo de su trayectoria, los cuales son producto de los cambios en la columna de acero que afectan la presión sobre la burbuja (al ser un sistema isotérmico):

$$\rho_p = \rho_{p0} \frac{PT_0}{P_0 T_l} \dots\dots\dots (25)$$

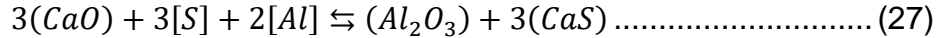
donde ρ_{p0} , P_0 y T_0 son la densidad, presión y temperatura *estándar* ($1.6337 \frac{kg}{m^3}$, $101325 Pa$ y $298.15 K$), respectivamente. Así, el diámetro de la partícula a lo largo de su trayectoria se define como:

$$d_p = \left(\frac{6m_b}{\pi\rho_p} \right)^{\frac{1}{3}} \dots\dots\dots (26)$$

donde m_b es la masa de la partícula.

5.3 Modelo cinético de transferencia de masa

La reacción de desulfuración está definida por la reacción (27)[16,22]:



En donde los compuestos en () y [] representan que se encuentran contenidos en escoria y acero, respectivamente. La tasa de reacción se calcula de acuerdo con la ecuación (28) [1,2,3,4]:

$$-\frac{d[\text{S}]}{dt} = S_s = k_{eff,S} A_i \rho_m \left\{ [\text{S}] - \frac{(S)}{L_S} \right\}, \dots\dots\dots (28)$$

donde A_i es la concentración de área interfacial, ρ_m es la densidad del acero, $k_{eff,S}$ es el coeficiente efectivo de transferencia de masa, L_S representa el coeficiente de partición del azufre, y $[\text{S}]$ y (S) representan la **fracción masa** del azufre en el acero y la escoria, respectivamente.

El coeficiente efectivo de transferencia de masa se calcula en función de los coeficientes particulares para cada fase y el coeficiente de partición, acorde a la ecuación (29):

$$k_{eff,S} = \frac{k_m k_s L_S \rho_s}{k_s L_S \rho_s + \rho_m k_m}, \dots\dots\dots (29)$$

donde ρ_s es la densidad de la escoria, y k_m y k_s son los coeficientes de transferencia de cada masa y se determinan a través de la teoría *small eddy* de Lamont et al. [7]:

$$k_m = c \sqrt{D_m \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}}}$$

$$k_s = c \sqrt{D_s \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}}}$$

donde c es una constante y es 0.4 para este trabajo, basado en el trabajo de Lamont et al. [7], ε es la disipación de energía turbulenta dentro de la olla, ν es la viscosidad cinemática de cada fase, y D_m y D_s son los coeficientes de difusión en el acero y la escoria.

El coeficiente de partición puede calcularse considerando las composiciones químicas del acero líquido y la escoria, con base en la ecuación (32) [8,9]:

$$\log L_S = \log \frac{(S)^*}{[\text{S}]^*} = -\frac{935}{T} + 1.375 + \log(Cs) + \log f_s - \log a_O^*, \dots\dots\dots (32)$$

el término Cs es la capacidad de sulfuro de la escoria, a_O^* es la actividad de oxígeno en la interfase acero-escoria y f_s es el coeficiente de actividad del azufre en el acero líquido.

La capacidad de sulfuro de la escoria puede calcularse con el modelo de Young [10], la cual se basa en el concepto de basicidad óptica de la escoria de la ec. (33):

$$\Lambda = \frac{\sum_i^j N_i X_i \Lambda_i}{\sum_i^j N_i X_i} \dots\dots\dots (33)$$

X_i y Λ_i son la fracción molar y la basicidad óptica para el óxido i -ésimo en la escoria, respectivamente. N_i representa el número de átomos de oxígeno contenidos en la molécula i -ésima, y j es el número de óxidos presentes en la escoria. Las basicidades ópticas de los óxidos utilizados en este trabajo se encuentran en la tabla 1.

Tabla 2. Basicidades ópticas de la escoria utilizada [11,12].

| | | | | |
|------------|------------------------------------|------------------------|------------|------------|
| <i>CaO</i> | <i>Al₂O₃</i> | <i>SiO₂</i> | <i>MgO</i> | <i>MnO</i> |
| 1.0 | 0.605 | 0.48 | 0.78 | 0.59 |

Así, con base en el valor de basicidad óptica y en la composición de la escoria, existen dos ecuaciones para el cálculo de la capacidad de sulfuro:

$$\Lambda < 0.8 \rightarrow \log C_S = -13.913 + 42.84\Lambda - 23.82\Lambda^2 - \frac{11710}{T} - 0.02223(\%wt SiO_2) - 0.02275(\%wt Al_2O_3) \dots\dots\dots (34)$$

$$\Lambda \geq 0.8 \rightarrow C_S = -0.6261 + 0.4808\Lambda - 0.7917\Lambda^2 - \frac{1697}{T} - \frac{2587\Lambda}{T} + 0.0005144(\%wt FeO), \dots\dots\dots (35)$$

donde T es la temperatura absoluta en K, y %wt es la concentración en porcentaje en peso de cada especie.

La actividad termodinámica el elemento i -ésimo se calcula con la ecuación (36):

$$a_i = f_i[\%wt i], \dots\dots\dots (36)$$

aquí, el coeficiente de actividad, f_i , puede ser calculado por la ecuación de Wagner [13]:

$$\log f_i = \sum_i^k (e_i^j [\%wt j]), \dots\dots\dots (37)$$

donde e_i^j es el parámetro de interacción del i -ésimo elemento con el j -ésimo. Los parámetros de interacción entre los distintos elementos dentro del baño de acero se encuentran en la tabla 2.

Tabla 3. Parámetros de interacción de los elementos en el acero [14,15].

| i $\downarrow j$ \rightarrow | S | Al | Si | Mn | C |
|--|--------------------------|-------|-------|--------|-------|
| S | $-\frac{120}{T} + 0.018$ | 0.041 | 0.075 | -0.026 | 0.111 |
| Al | 0.03 | 0.043 | 0.056 | 0 | 0.091 |

La actividad del oxígeno en equilibrio en la interfase metal-escoria se obtiene a través de la reacción de oxidación del aluminio:



cuya constante de equilibrio se establece con base en su energía libre de Gibbs [16]:

$$\Delta G^\circ = -1205115 + 386.714T \dots \dots \dots (39)$$

$$K_{eq} = e^{\left(\frac{-\Delta G^\circ}{RT}\right)} \dots \dots \dots (40)$$

$$K_{eq} = \frac{a_{Al_2O_3}}{a_{Al}^2 a_O^3} \dots \dots \dots (41)$$

La actividad de la alúmina se obtiene a través de una correlación basada en datos experimentales [16,17,22]:

$$\log a_{Al_2O_3} = \frac{-0.275(\%wt CaO) + 0.167(\%wt MgO)}{(wt\% SiO_2)} + 0.033(\%wt Al_2O_3) - 1.56 \dots \dots \dots (42)$$

5.4 Condiciones iniciales y de frontera

La geometría mostrada en la figura 4 representa la discretización utilizada en el sistema. Se encuentran representadas las distintas zonas dentro de la olla, es decir, las regiones donde la fracción volumen es unitaria para cada una de las fases al inicio de la simulación. La malla fue generada en el módulo de *meshing* de ANSYS, consta de 26600 elementos, con una ortogonalidad unitaria y una relación aspecto promedio de 1.8174.

5.4.1 CFD

5.4.1.1 Fase Continua

La tabla 3 muestra las dimensiones del modelo y los parámetros del proceso utilizados en la simulación numérica. La tabla 4 contiene las propiedades termofísicas a 1612 °C utilizadas.

Tabla 4. Parámetros y dimensiones utilizadas en la simulación [26].

| Parámetros | Valor | Unidades |
|--------------------------|--------|------------|
| Altura de la olla | 3.5 | <i>m</i> |
| Diámetro | 2.572* | <i>m</i> |
| Altura del baño de acero | 2.65 | <i>m</i> |
| Espesor de la escoria | 0.15 | <i>m</i> |
| Flujo de argón | 0.051 | $N\ m^3/s$ |
| Diámetro del inyector | 0.092 | <i>m</i> |

*Promedio del diámetro superior e inferior.

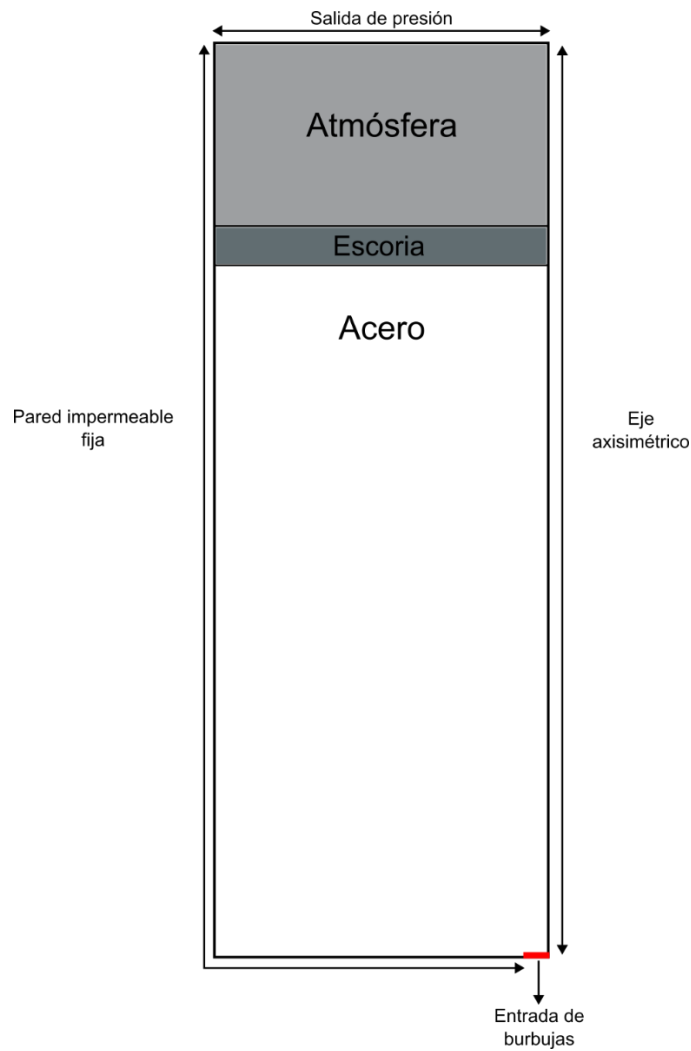


Figura 4. Geometría del sistema utilizado. Se encuentran señaladas las zonas presentes dentro de la olla y las distintas fronteras.

Tabla 5. Propiedades de los materiales utilizadas en la simulación.

| Propiedades | Valor | Unidades |
|-----------------------------------|------------------------|--------------|
| Densidad del acero fundido | 7020 | kg/m^3 |
| Densidad del argón | 0.568 | kg/m^3 |
| Densidad de la escoria | 3500 | kg/m^3 |
| Viscosidad del acero | 0.006 | $Pa \cdot s$ |
| Viscosidad de la escoria | 0.06 | $Pa \cdot s$ |
| Viscosidad del argón | 2.125×10^{-5} | $Pa \cdot s$ |
| Aceleración de la Gravedad | 9.81 | m/s^2 |
| Temperatura del baño | 1885 | K |
| Tensión superficial metal-escoria | 1.15 | N/m |
| Tensión superficial metal-argón | 1.4 | N/m |
| Tensión superficial escoria-argón | 0.58[26] | N/m |

5.4.1.2 Fase Discreta

El diámetro inicial de la burbuja se determina por la siguiente ecuación [43]:

$$d_p = 0.091 \left(\frac{\sigma}{\rho_m} \right)^{0.5} u_b^{0.44}, \dots \dots \dots (43)$$

donde σ es la tensión superficial entre el fluido (acero líquido en este caso) y la partícula de gas. u_b es la velocidad del gas argón en el *inlet* calculada con base en el flujo de gas Q :

$$u_b = \frac{P_0 T_l}{(P_0 + (\rho_m H + \rho_s h) g) T_0} \frac{Q}{A}, \dots \dots \dots (44)$$

donde P_0 y T_0 son la presión y la temperatura estándar (101325 Pa y 298.15 K), ρ_s es la densidad de la escoria, H es la altura del baño de acero, h es la altura de la capa de escoria, y A es el área del inyector.

5.4.2 Desulfuración

Las composiciones iniciales del baño de acero y de la escoria se encuentran en las tablas 5 y 6, respectivamente.

Tabla 6. Composición inicial del acero utilizada en los cálculos de desulfuración.

| Elemento | S | Al | Si | Mn | C |
|----------|--------|--------|-------|-------|-------|
| %wt | 0.0246 | 0.0604 | 0.004 | 0.661 | 0.085 |

Tabla 7. Composición inicial de la escoria utilizada en los cálculos de desulfuración.

| Elemento | Al_2O_3 | SiO_2 | MgO | CaO | FeO |
|----------|-----------|---------|-------|-------|-------|
| %wt | 36 | 3.7 | 5.5 | 53.3 | 1.5 |

5.5 Procedimiento de solución

La simulación transitoria continuó hasta que el criterio de estado-estable, el cual se trató de un promedio volumétrico de magnitud de velocidad del flujo, se cumplió. Una vez alcanzada esta condición, se parchó la concentración inicial de azufre en el acero a lo largo de todo el fluido, se desactivaron las ecuaciones de momentum, turbulencia y fracción volumen, y se reinició el tiempo a cero, permitiendo únicamente la resolución de la concentración de especies es un patrón de flujo en estado estable.

Las interfases fueron capturadas utilizando el esquema *geo-reconstruct*. Se utilizó el esquema PRESTO! para la discretización de la presión, Green-Gauss Node Based para el gradiente y Second Order Upwind para el momentum, energía cinética turbulenta y disipación de energía cinética turbulenta. El acoplamiento presión-velocidad se llevó a cabo utilizando el esquema SIMPLE.

El criterio de convergencia para todas y cada una de las ecuaciones fue de $< 10^{-3}$.

Las expresiones de expansión de burbuja fueron introducidas por medio de una UDF con ayuda del macro DEFINE_DPM_INJECTION_INIT [24] (ver Anexo).

ANSYS Fluent [18] modela y describe el proceso de colisión y coalescencia de partículas por medio del algoritmo de O'Rourke.

Desde el punto de vista de CFD [5,6] el valor de A para un flujo multifásico en cada celda se calcula utilizando la ecuación (45):

$$A_i = |\nabla\alpha_m| = \sqrt{\left(\frac{\partial\alpha_m}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\alpha_m}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\alpha_m}{\partial z}\right)^2}, \dots\dots\dots (45)$$

donde α_m es la fracción volumen del acero en la interfase. La derivación de la fracción volumen de acero en las direcciones x,y,z es 0 excepto en las celdas de la interfase. Esta restricción provee la selección de celdas interfaciales ya que S_s es 0 excepto en las celdas de la interfase.

La ecuación (46) es una expresión alternativa utilizada en este estudio para marcar las celdas de interfase del lado del acero [24,27]:

$$A_i = 2\alpha_m|\nabla\alpha_m| \dots\dots\dots (46)$$

Ambas expresiones son determinadas a cada paso de tiempo por medio de una UDF con ayuda del macro DEFINE_ADJUST [24].

Todas las simulaciones se llevaron a cabo utilizando el software ANSYS Fluent 2020 R2 en un equipo con poder de procesamiento de ocho núcleos de CPU y dieciséis procesadores lógicos, cada uno con una velocidad de reloj base de 2.90 GHz, Intel Core i7-10700.

Se utilizó un paso de tiempo de 0.0005 s para la fluidodinámica. Para la transferencia de masa, se utilizó uno de 1 s.

6 Validación

La validación del modelo matemático se llevó a cabo comparándolo con las mediciones experimentales realizadas en los trabajos de López [32] y Mommen [33]. En éstos, se realizó un modelo físico con un criterio de similitud 1:17 utilizando agua, aceite de silicón tipo A (como escoria) y aire como gas inyectado.

Se extrajeron como resultados los perfiles de velocidad axial a lo largo de 4 alturas diferentes, las cuales son 4, 8, 12 y 16 cm desde el fondo del modelo. Estos perfiles fueron comparados con los obtenidos por medio de la simulación numérica. Los resultados se muestran en la figura 5, donde la posición cero representa al centro del baño, ubicación del eje axisimétrico, donde se inyectan las burbujas. A partir de una distancia radial de aproximadamente 2 cm, la velocidad reduce su disminución gradual de forma lineal (al alejarse de la zona de inyección), alcanza una cierta estabilidad.

A lo largo de los cuatro perfiles se observa una buena concordancia entre los resultados experimentales y los obtenidos mediante el modelo matemático.

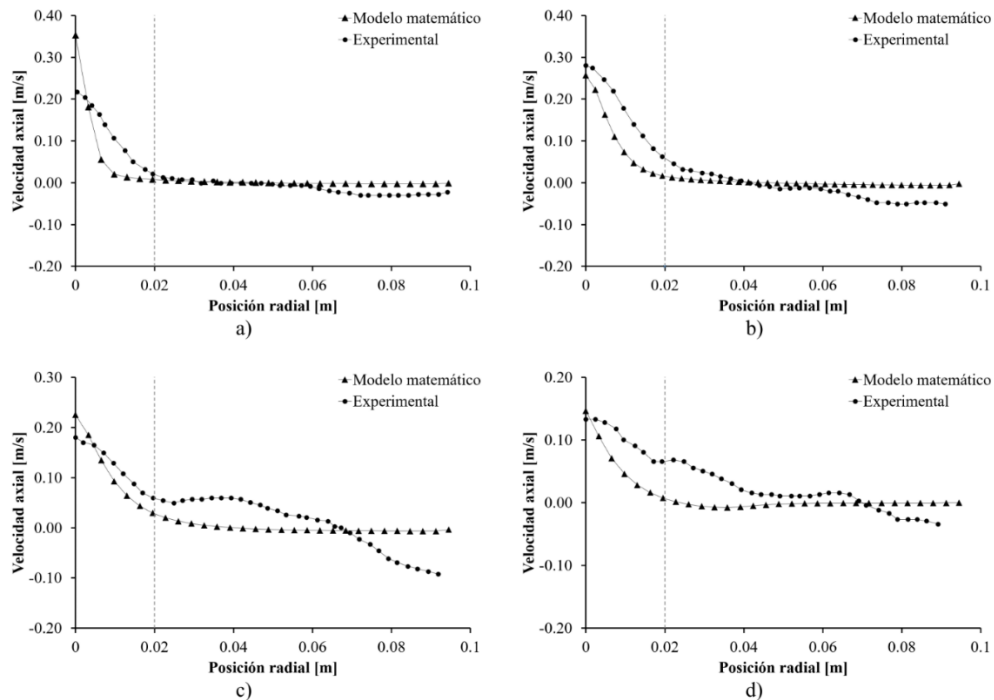


Figura 5. Perfiles de velocidad axial a a) 4cm, b) 8cm, c) 12 cm, d) 16 cm.

7 Resultados

7.1 Fluidodinámica

La distribución de las fases, así como el spout y el ojo de escoria, se presentan en la figura 6. Los vectores de velocidad dentro de la olla se encuentran en la figura 7. Los contornos de energía cinética turbulenta, y la disipación de ésta, se encuentran en las figuras 8 y 9, respectivamente. Las evoluciones a lo largo del tiempo de agitado del coeficiente de transporte de masa y el área interfacial se presentan en las figuras 10 y 11, respectivamente.

7.2 Desulfuración

Los contornos de fracción masa, tanto en el baño de acero como en la escoria, en tres instantes de tiempo: 150, 300 y 700 segundos, se encuentran en las figuras 12, 13 y 14, respectivamente.

En la figura 15 se presenta la evolución de la concentración en el *seno* del baño a lo largo del proceso de desulfuración, comparada con la de la literatura.

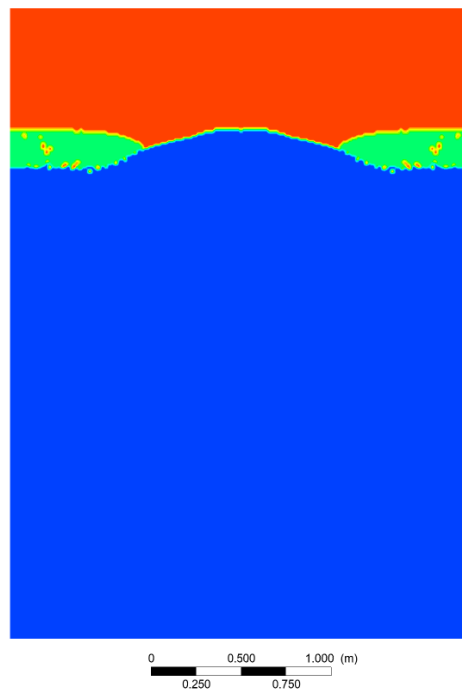


Figura 6. Contorno de distribución de fases de acero/escoria/argón. Se aprecia la apertura del ojo, así como el **spout**.

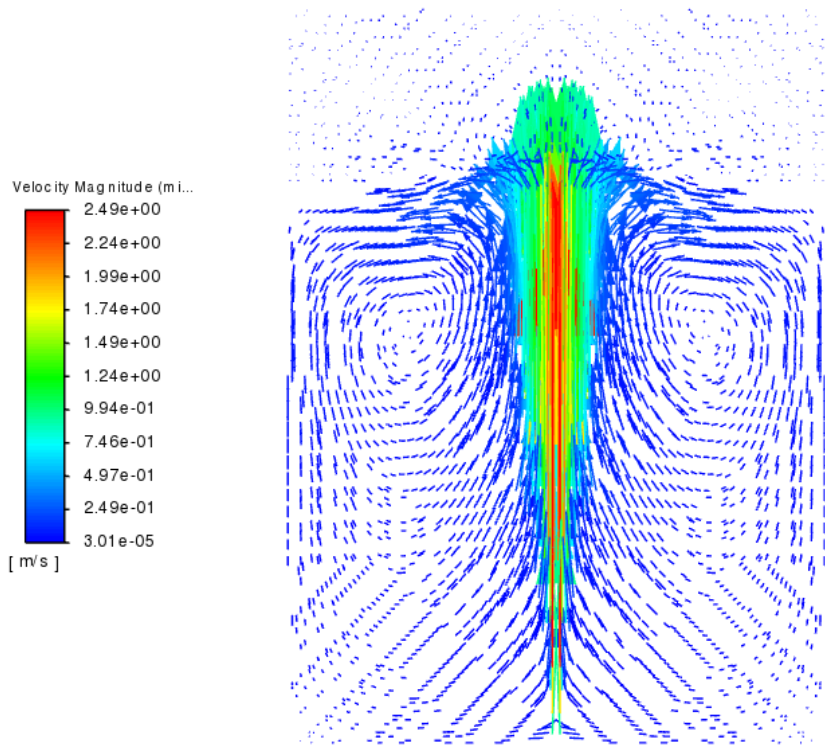


Figura 7. Vectores de velocidad dentro del sistema. Se observan las zonas de recirculación y la **pluma**.

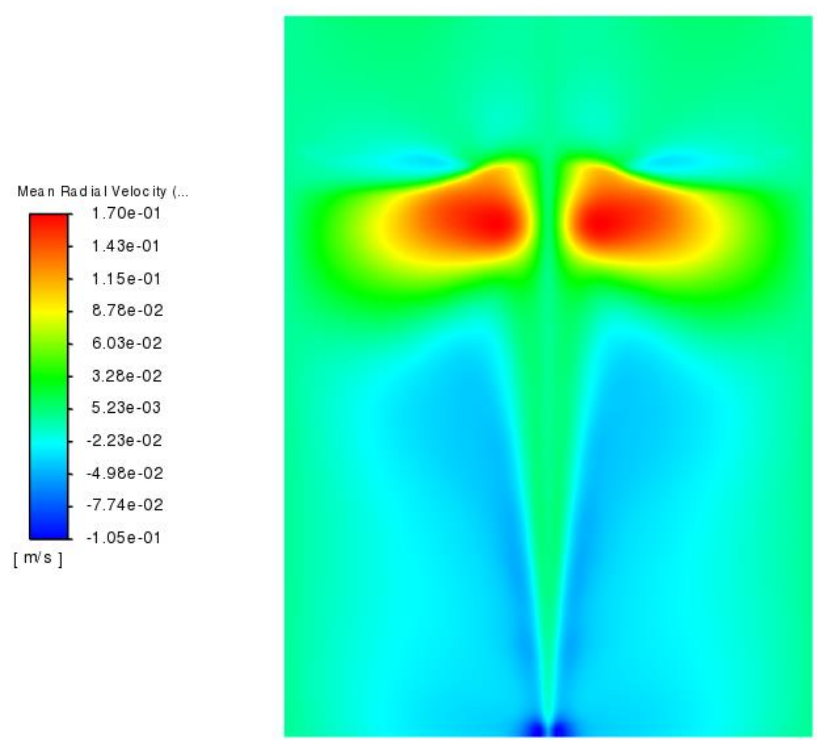


Figura 8. Contornos de velocidad radial dentro de la olla.

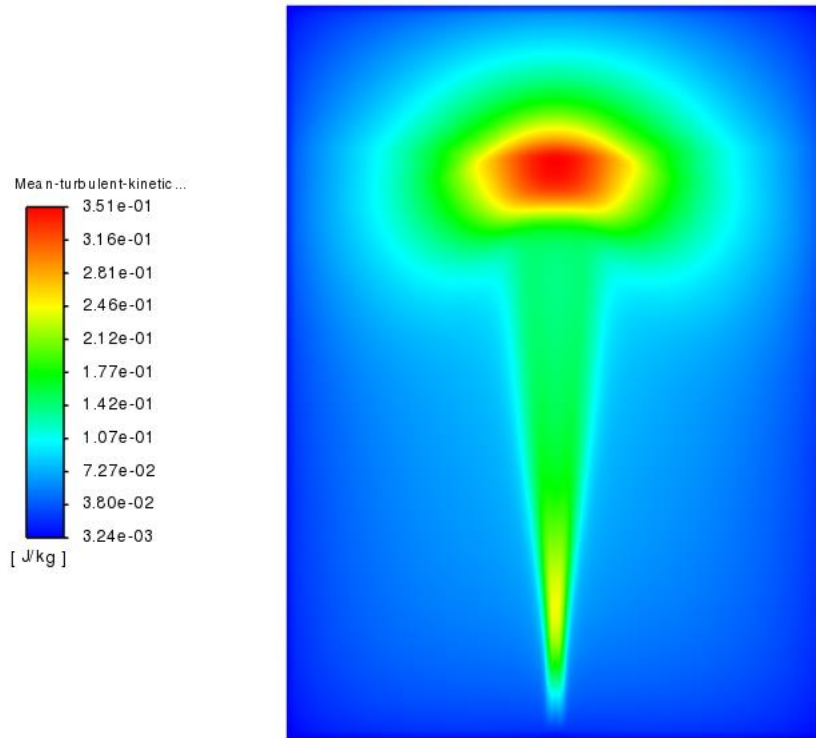


Figura 9. Contorno de energía cinética turbulenta, k , dentro de la olla.

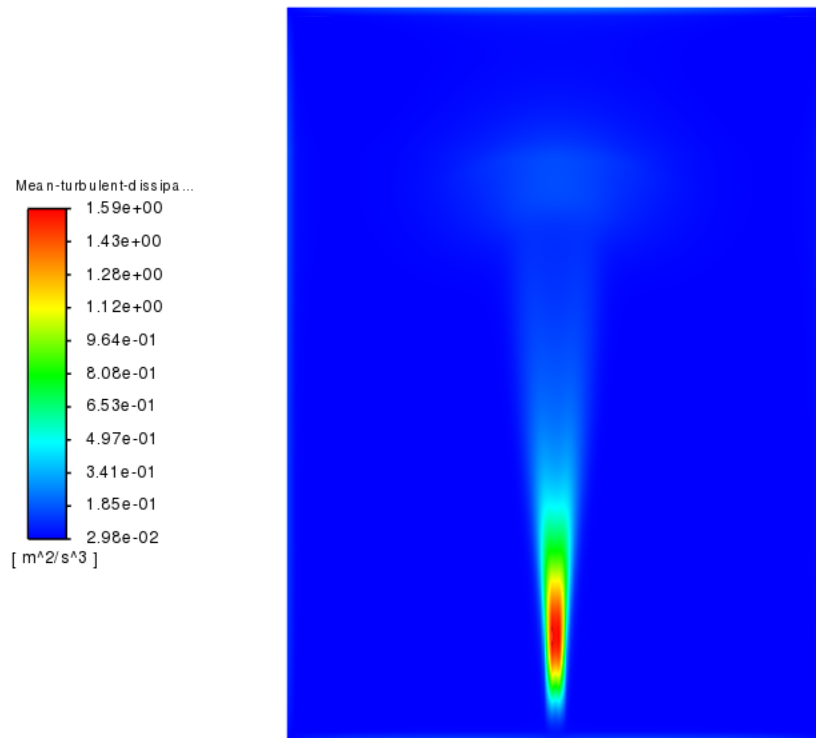


Figura 10. Contorno de disipación de energía cinética turbulenta, ε , dentro de la olla.

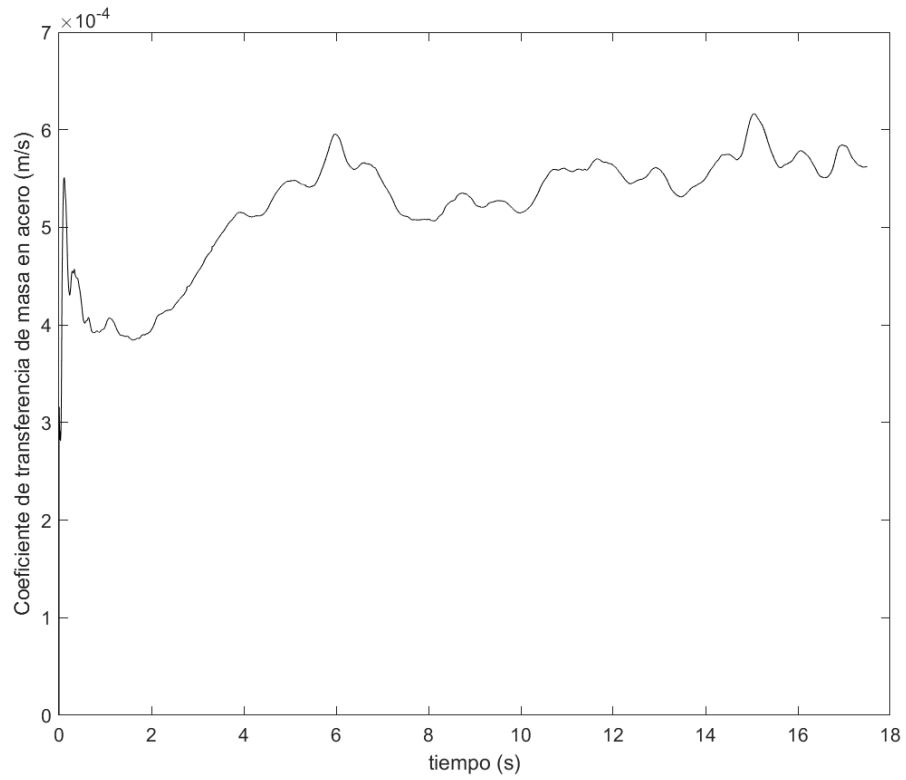


Figura 11. Evolución del coeficiente de transferencia de masa en acero, k_m , a lo largo del tiempo.

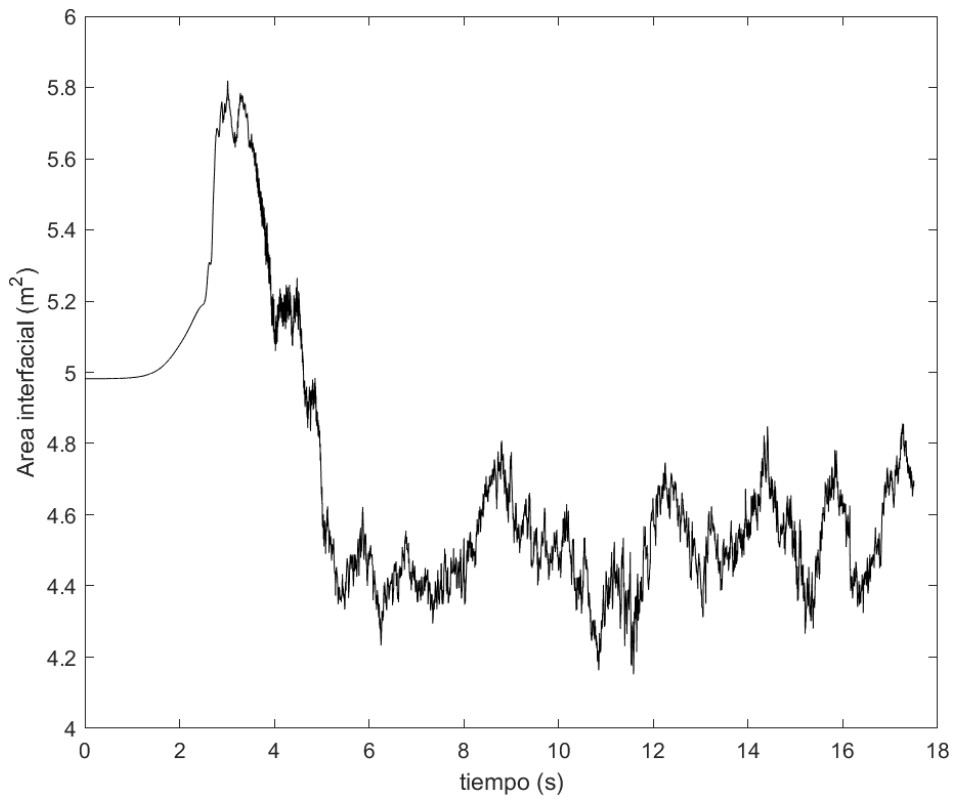


Figura 12. Evolución del área interfacial acero-escoria a lo largo del tiempo.

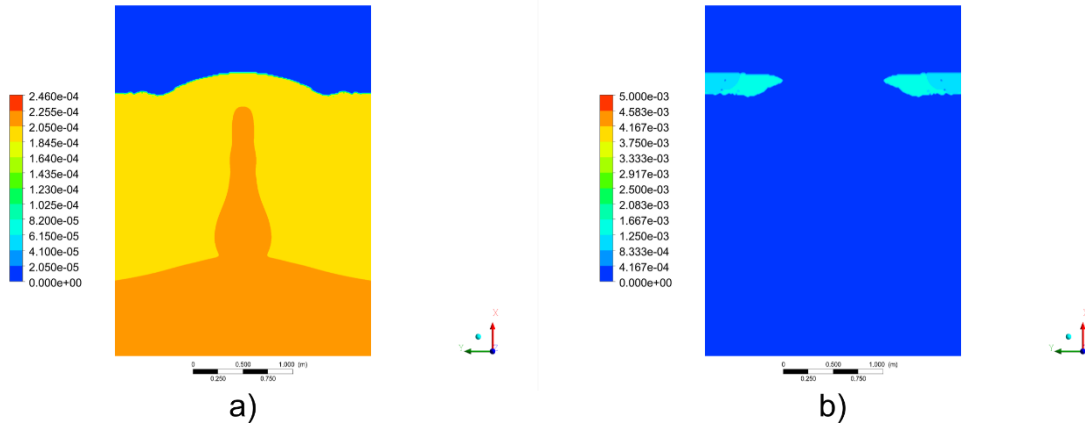


Figura 13. Contorno de fracción masa de azufre a 150 segundos en a) baño de acero y b) escoria.

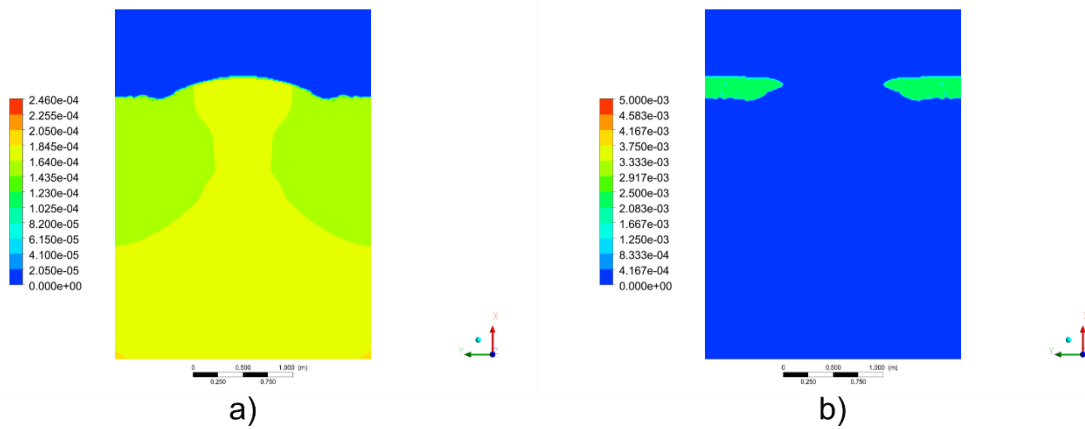


Figura 14. Contorno de fracción masa de azufre a 300 segundos en a) baño de acero y b) escoria.

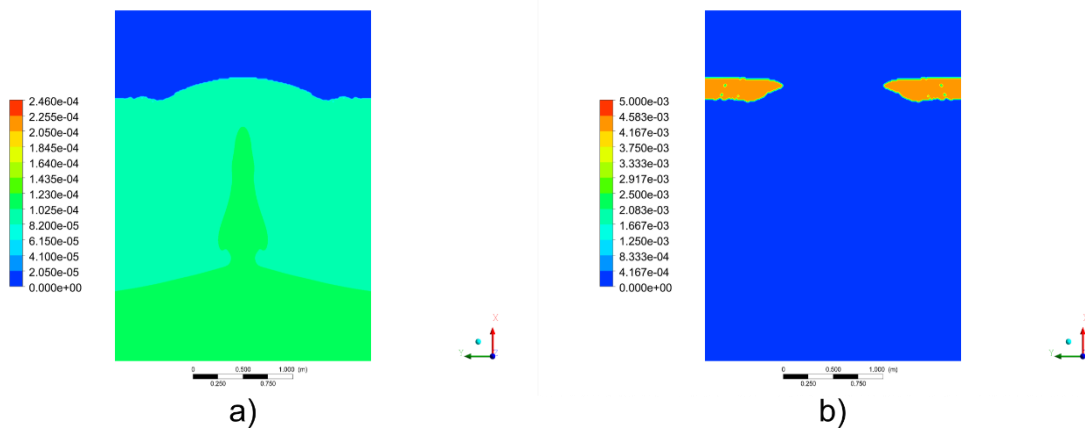


Figura 15. Contorno de fracción masa de azufre a 700 segundos en a) baño de acero y b) escoria.

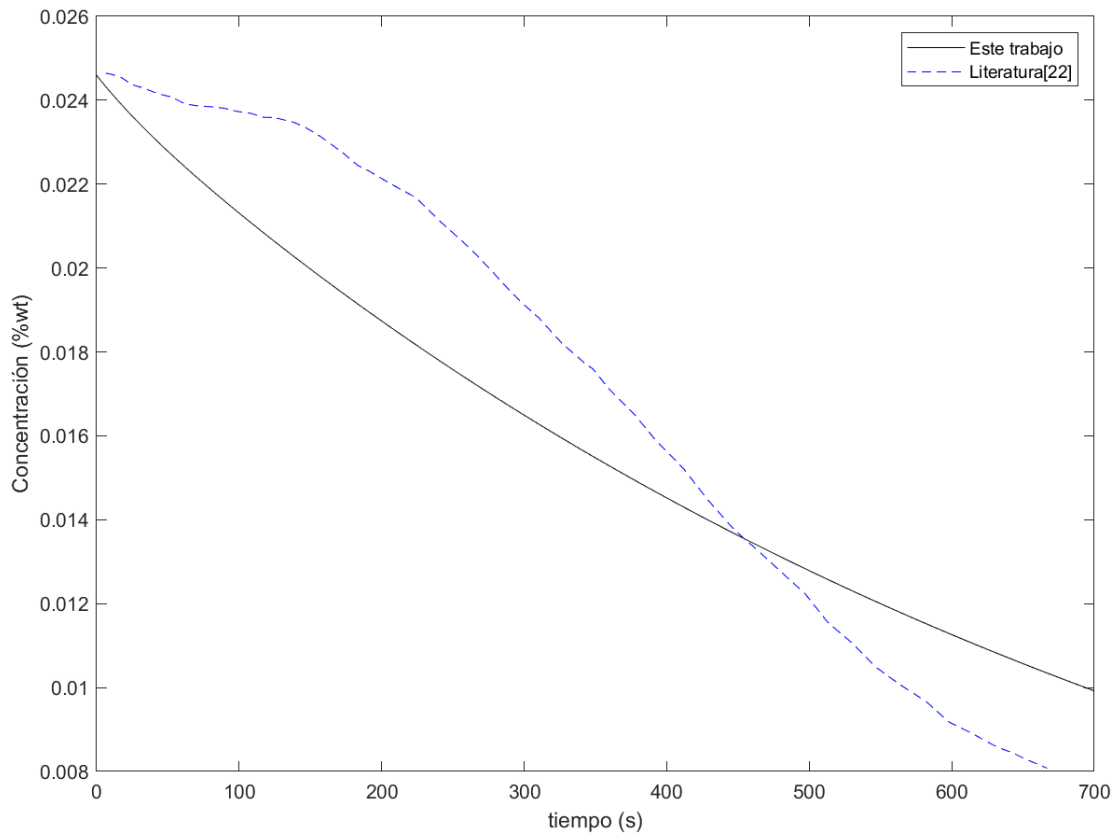


Figura 16. Evolución de la concentración de azufre (en porcentaje en peso) a lo largo del tiempo dentro del baño de acero comparada con la de la literatura.

8 Discusión

8.1 Fluidodinámica

Debido a la intensidad y al alto flujo de gas inyectado, se observa un ojo de escoria considerablemente grande, aproximadamente la mitad del diámetro (figura 6). Es apreciable, también, la emulsión resultante en la interfase acero-escoria, en donde ciertas partículas de escoria se separan del seno hacia el baño de acero, así como el atrapamiento de partículas de argón dentro de la escoria.

Los vectores de velocidad (figura 7) representan el comportamiento de la fase continua. La zona de la pluma, la cual da origen al ojo de escoria, se encuentra presente en gran magnitud, provocando el desplazamiento de la capa de escoria hacia las paredes del horno. Se presentan también dos zonas de recirculación, las cuales son de gran importancia en fenómenos térmicos y químicos, reduciendo los gradientes existentes entre las regiones superiores e inferiores del baño.

La figura 8 ayuda a entender el fenómeno de formación del ojo de escoria: debido a la intensidad del flujo de argón y a la fluidez de la escoria (i.e. su viscosidad), existen altos valores de velocidad radial en esa zona, empujando la escoria hacia las paredes de la olla.

Sin embargo, a pesar de que propicia la apertura del ojo, es imperativo el uso de escoria fluida (alta concentración de alúmina), por su relevancia en los fenómenos de intercambio. Ahora bien, una escoria demasiado fluida propicia el atrapamiento de escoria en el baño, aumentando la cantidad de inclusiones.

En los parámetros turbulentos presentes en las figuras 9 y 10 se observa la presencia de turbulencia principalmente en las regiones de la pluma y la interfase metal-escoria, regiones de alta velocidad e interacciones con la fase discreta. Estos parámetros resultan relevantes debido a su influencia en la interacción de transferencia de masa entre el metal y la escoria, ya que el coeficiente cinético de dicha transferencia depende del valor de disipación de energía cinética turbulenta ε . La evolución de dicho coeficiente se presenta en la figura 11, donde es apreciable que alcanza un valor máximo a lo largo de la simulación transitoria igual a $6 \times 10^{-4} \text{ m/s}$.

Otro parámetro de relevancia en las interacciones metal-escoria es el área interfacial. A mayor área interfacial, mayor cantidad de interacción existe entre ambas fases, acelerando así procesos como la desulfuración. La evolución del área interfacial se encuentra representada en la figura 12. A través de esta evolución, es posible saber que, poco antes de los dos segundos de que empezó el proceso de inyección de gas, la interacción de la fase continua con la discreta alcanzó la interfase, al presentarse un incremento del valor. Dicho incremento continua hasta alcanzar un máximo a, aproximadamente, 3 segundos, para después disminuir y alcanzar cierta estabilidad a un valor aproximado de 5 m^2 , después de 17.5 segundos de simulación. Este comportamiento de incremento y posterior reducción se debe a la formación del ojo de escoria. La formación de emulsiones favorece el incremento del área interfacial.

8.2 Desulfuración

En cada uno de los contornos de fracción masa (figs. 13-15) se observa un comportamiento similar: el azufre se encuentra mayormente concentrado en el fondo y en la zona de la pluma. El primero se debe a que se trata de una inyección central el cual, como se ha observado con anterioridad [31], tiene una mayor eficiencia en procesos de transferencia de masa a la par de mayores tiempos de mezclado, comparado con una inyección excéntrica. El segundo se debe a que la interfase metal-escoria, en donde se está llevando el proceso, se encuentra en las paredes, alcanzando menores concentraciones en estas regiones. De igual manera, es destacable la presencia de gradientes de concentración de azufre en la escoria a 150 segundos, mientras que, a 300 y 700 segundos, se encuentra más bien distribuido. Lo anterior se debe a una alta tasa de desulfuración al inicio del proceso, debido a un alto gradiente de concentraciones, el cual disminuye conforme al proceso avanza.

Por último, en la figura 15 se observa la concentración de azufre dentro del baño a lo largo del tiempo, comparado con los resultados en la literatura [22]. Se obtiene

una buena concordancia entre las dos curvas, con ligeras desviaciones producto de las diferencias en las condiciones geométricas y de inyección. La concentración final después de 700 segundos de proceso fue de aproximadamente 0.01% de azufre, mientras que en los resultados de la literatura fue de aproximadamente 0.008%.

9 Conclusiones

El acercamiento combinado Euleriano-Lagrangiano *VOF-DPM*, con modelo de turbulencia *k-epsilon realizable*, fue aplicado con éxito para modelar condiciones fluidodinámicas y de transferencia de masa en ollas de acero agitadas por gas, cumpliendo el objetivo general. Esto se prueba con la validación de los perfiles radiales de velocidad axial que muestran concordancia entre las predicciones y las mediciones experimentales con PIV.

La revisión de la literatura fue clave para la determinación del intercambio simulado, encontrando que los trabajos realizados por Cao et al. Plantean modelos y situaciones lo suficientemente complejos para una aproximación realista.

Implementar intercambio de especies químicas entre acero y escoria con el algoritmo *DPM-VOF- k-epsilon realizable* con éxito permitió obtener interfases más definidas que otros modelos multifásicos, al igual que monitorear y construir de forma más adecuada el área interfacial entre el acero y la escoria.

Cabe señalar que se pudo predecir el fenómeno interfacial de la emulsión de escoria, lo cual impactó en el incremento de la concentración de área interfacial, pudiendo representar el intercambio metal-escoria de azufre de manera más realista.

Los resultados de la cinética de desulfuración muestran una razonable concordancia con aquellos reportados por Cao et al. [22], validando así el modelo matemático implementado, y cumpliendo el objetivo, ya que, aunque no son idénticas las curvas de desulfuración, las tendencias son similares y los tiempos de desulfuración son muy parecidos. Lo anterior permite la implementación y realización de estudios que tengan como objetivo la optimización del proceso, proponiendo condiciones alternativas.

Futuros trabajos con condiciones más apegadas al modelo comparado son capaces de obtener validaciones más próximas.

10 Referencias

- [1] Q. Cao, L. Nastac, A. Pitts-Baggett and Q. Yu: Metall. Mater. Trans. B, 49 (2018), 988. <https://doi.org/10.1007/s11663-018-1234-7>
- [2] D. Roy, P.C. Pistorius, and R.J. Fruehan: Metall. Mater. Trans. B, 2013, vol. 44, pp. 1086–94.
- [3] W.T. Lou and M.Y. Zhu: Metall. Mater. Trans. B, 2014, vol. 45, pp. 1706–22.

- [4] Kim, Seon-Hyo, and R. J. Fruehan. "Physical modeling of liquid/liquid mass transfer in gas stirred ladles." *Metallurgical transactions B* 18.2 (1987): 381-390.
- [5] Xu, Yuan Yuan, et al. "Computational Approach to Characterize the Mass Transfer between the Counter-Current Gas-Liquid Flow." *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology* 32.8 (2009): 1227-1235.
- [6] Furkan Özkan, Achim Wenka, Edgar Hansjosten, Peter Pfeifer & Bettina Kraushaar-Czarnetzki (2016) Numerical investigation of interfacial mass transfer in two phase flows using the VOF method, *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 10:1, 100-110, DOI: 10.1080/19942060.2015.1061555
- [7] J.C. Lamont and D.S. Scott: *AIChE J.*, 1970, vol. 16, pp. 513–19.
- [8] M.A.T. Andersson, P.G. Jonsson, and M.M. Nzotta: *ISIJ Int.*, 1999, vol. 39 (11), pp. 1140–49.
- [9] A. Shankar: *Ironmak. Steelmak.*, 2006, vol. 33 (5), pp. 413–18.
- [10] R.W. Young, J.A. Duffy, G.J. Hassall, and Z. Xu: *Ironmak. Steelmak.*, 1992, vol. 19 (3), pp. 201–19.
- [11] VDEh: *Slag Atlas*, 2nd ed., Verlag Stahleisen GmbH, Dusseldorf, Germany, 1995, p. 11.
- [12] M. Allibert: *Slag Atlas*, Verlag Stahleisen GmbH, Düsseldorf, (1995), 11.
- [13] C. Wagner: *Thermodynamics of Alloys*, Addison-Wesley Press, Cambridge, MA, (1952), 109.
- [14] Lauri Holappa, Chapter 1.6 - Secondary Steelmaking, Editor(s): Seshadri Seetharaman, *Treatise on Process Metallurgy*, Elsevier, 2014, Pages 301-345, ISBN 9780080969886, <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-096988-6.00012-2>.
- [15] Shin-ya Kitamura, Chapter 1.3 - Hot Metal Pretreatment, Editor(s): Seshadri Seetharaman, *Treatise on Process Metallurgy*, Elsevier, 2014, Pages 177-221, ISBN 9780080969886, <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-096988-6.00015-8>.
- [16] Antonio Urióstegui-Hernández, Pedro Garnica-González, José Ángel Ramos-Banderas, Gildardo Solorio-Díaz, Constantin Alberto Hernández-Bocanegra, Desulphurization Kinetic Prediction into a Steel Ladle by Coupling Thermodynamic Correlations, Fluidynamics and Heat Transfer, *ISIJ International*, 2022, Volume 62, Issue 6, Pages 1189-1198, Released on J-STAGE June 21, 2022, Online ISSN 1347-5460, Print ISSN 0915-1559, <https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2021-514>, https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational/62/6/62_ISIJINT-2021-514/article-char/en

- [17] H. Ohta and H. Suito: Metall. Mater. Trans. B, 29 (1998), 119. <https://doi.org/10.1007/s11663-998-0014-1>
- [18] ANSYS Inc., ANSYS Fluent 19 Theory Guide.
- [19] Cloete, S.W.P., Eksteen, J.J. and Bradshaw, S.M. (2009) 'A mathematical modelling study of fluid flow and mixing in full-scale gas-stirred ladles', Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 9, Nos. 6/7, pp.345–356.
- [20] Cao, Q., Nastac, L. Mathematical Modeling of the Multiphase Flow and Mixing Phenomena in a Gas-Stirred Ladle: The Effect of Bubble Expansion. JOM 70, 2071–2081 (2018). <https://doi.org/10.1007/s11837-018-2977-y>
- [21] Cao, Q., Nastac, L. Mathematical Investigation of Fluid Flow, Mass Transfer, and Slag-steel Interfacial Behavior in Gas-stirred Ladles. Metall Mater Trans B 49, 1388–1404 (2018). <https://doi.org/10.1007/s11663-018-1206-y>
- [22] Q. Cao, A. Pitts & L. Nastac (2016): Numerical modelling of fluid flow and desulphurisation kinetics in an argon-stirred ladle furnace, Ironmaking & Steelmaking. <http://dx.doi.org/10.1080/03019233.2016.1262574>
- [23] G.J. Chen, S.P. He, and Y.G. Li: Metall. Mater. Trans. B., 2017, vol. 48B, pp. 2176–86.
- [24] ANSYS Fluent 17.1, User's Guide (ANSYS, Inc.).
- [25] Lage Jonsson, Du Sichen, Pär Jönsson, A New Approach to Model Sulphur Refining in a Gas-stirred Ladle –A Coupled CFD and Thermodynamic Model, ISIJ International, 1998, Volume 38, Issue 3, Pages 260-267, Released on J-STAGE May 31, 2007, Online ISSN 1347-5460, Print ISSN 0915-1559, <https://doi.org/10.2355/isijinternational.38.260>
- [26] Farrera-Buenrostro, J.E., Hernández-Bocanegra, C.A., Ramos-Banderas, J.A. et al. Analysis of Temperature Losses of the Liquid Steel in a Ladle Furnace During Desulfurization Stage. Trans Indian Inst Met 72, 899–909 (2019). <https://doi.org/10.1007/s12666-018-1548-9>
- [27] Shirodkar, V. (2015). Slug flow modelling using blended drag law and interface turbulence damping. In Proceedings of the Forty Second National Conference on Fluid Mechanics and Fluid Power, NITK Surathkal, Karnataka, India.
- [28] *Steel Production - American Iron and Steel Institute.* (2021, November 16). American Iron and Steel Institute. <https://www.steel.org/steel-technology/steel-production/>
- [29] Y. Liu, M. Ersson, H. Liu, P. Jönsson, and Y. Gan, "Comparison of Euler-Euler Approach and Euler–Lagrange Approach to Model Gas Injection in a Ladle," Steel Res. Int., vol. 90, no. 5, pp. 1–13, 2019.

- [30] Y. Liu, M. Ersson, H. Liu, P. G. Jonsson, and Y. Gan, "A review of physical and numerical approaches for the study of gas stirring in ladle metallurgy," *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 50, pp. 555–577, Feb 2019.
- [31] Dipak Mazumdar, Roderick I. L. Guthrie, *The Physical and Mathematical Modelling of Gas Stirred Ladle Systems*, ISIJ International, 1995, Volume 35, Issue 1, Pages 1-20, Released on J-STAGE May 31, 2007, Online ISSN 1347-5460, Print ISSN 09151559, <https://doi.org/10.2355/isijinternational.35.1>, https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational1989/35/1/35_1_1/article/-char/en
- [32] J. A. López Gutiérrez, "Modelado físico y matemático de intercambios metal/escoria en ollas de acero agitadas con gas," UNAM, 2016.
- [33] M. Mommen, "Modelling of a Three-Phase Gas-Stirred Ladle," 2019.
- [34] Andersson, Margareta & Jonsson, Lage. (2000). A Thermodynamic and Kinetic Model of Reoxidation and Desulphurisation in the Ladle Furnace. *ISIJ International*. 40. 1080-1088. 10.2355/isijinternational.40.1080.
- [35] Wentao Lou, Miaoyong Zhu, Numerical Simulation of Slag-metal Reactions and Desulfurization Efficiency in Gas-stirred Ladles with Different Thermodynamics and Kinetics, *ISIJ International*, 2015, Volume 55, Issue 5, Pages 961-969, Released on J-STAGE May 27, 2015, Online ISSN 1347-5460, Print ISSN 0915-1559, <https://doi.org/10.2355/isijinternational.55.961>, https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational/55/5/55_961/article/-char/en
- [36] Shiro Ban-Ya, Mathematical Expression of Slag-Metal Reactions in Steelmaking Process by Quadratic Formalism Based on the Regular Solution Model, *ISIJ International*, 1993, Volume 33, Issue 1, Pages 2-11, Released on J-STAGE May 31, 2007, Online ISSN 1347-5460, Print ISSN 0915-1559, <https://doi.org/10.2355/isijinternational.33.2>, https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational1989/33/1/33_1_2/article/-char/en
- [37] Qing Cao & Laurentiu Nastac (2019): Mathematical modelling of slag–metal reactions and desulphurization behaviour in gas-stirred ladle based on the DPM-VOF coupled model, *Ironmaking & Steelmaking*, DOI: 10.1080/03019233.2019.1629155
- [38] Lou, W., Zhu, M. Numerical Simulation of Gas and Liquid Two-Phase Flow in Gas-Stirred Systems Based on Euler–Euler Approach. *Metall Mater Trans B* 44, 1251–1263 (2013). <https://doi.org/10.1007/s11663-013-9897-6>
- [39] Lage Jonsson, Pär Jönsson, Modeling of Fluid Flow Conditions around the Slag/Metal Interface in a Gas-stirred Ladle, *ISIJ International*, 1996, Volume 36, Issue 9, Pages 1127-1134, Released on J-STAGE May 31, 2007, Online ISSN 1347-5460, Print ISSN 0915-1559, <https://doi.org/10.2355/isijinternational.36.1127>,

https://www.jstage.jst.go.jp/article/isijinternational1989/36/9/36_9_1127/article/-char/en

Anexo

```
/*UDF para remover partículas del modelo*/
#include "udf.h"
#include "surf.h"
#include "dpm.h"

DEFINE_DPM_SCALAR_UPDATE (mass_neg, c, t, initialize, p)
{
    Thread *phase_air=THREAD_SUB_THREAD(t,2);
    if (C_VOF(c,phase_air)>=0.5)
    {
        MARK_PARTICLE(p, P_FL_REMOVED);
    }
}

DEFINE_DPM_INJECTION_INIT(init_diam,I)
{
    Particle *p;
    cell_t c;
    Thread *t;
    loop(p,I->p)
    {
        c=P_CELL(p);
        t=P_CELL_THREAD(p);
        if(P_POS(p)[0]==0.)
        {
            P_DIAM(p)=0.0044712;
        }
        else
        {
            P_RHO(p)=1.6337*(101325.+C_P(c,t))*298.15/(101325.*1885.);
            P_DIAM(p)=pow(6.*P_MASS(p)/(M_PI*P_RHO(p)),1./3.);
        }
    }
}
```

Figura 17. UDFs utilizadas para la eliminación y expansión de burbujas.

```

#include "udf.h"
#define Dm 7e-9 /* difusividad molecular de especies en acero*/
#define Ds 7e-11 /* difusividad molecular de especies en escoria*/
#define nu 8.547e-7 /* viscosidad cinematica dentro de la olla */
#define domain_ID 3
DEFINE_MASS_TRANSFER(Ss, cell, thread, from_index, from_species_index, to_index, to_species_index)
{
  Thread *m = THREAD_SUB_THREAD(thread, from_index); /* fase acero */
  Thread *s = THREAD_SUB_THREAD(thread, to_index); /* fase escoria*/

  real s_vf, m_vf, a, epsilon, Ss, Ym, Ys, Lm, mm, ms, meff,flag;

  Lm=4781.7; /* Coeficiente de particion */
  s_vf=C_VOF(cell,s); /* Fraccion volumen escoria */
  m_vf=C_VOF(cell,m); /* Fraccion volumen acero */
  a = C_UDMI(cell,thread,2);

  Ys=C_YI(cell,s,to_species_index); /* Fraccion masa en la escoria */
  Ym=C_YI(cell,m,from_species_index); /* Fraccion masa en el acero */

  mm=C_UDMI(cell,thread,3);

  ms=C_UDMI(cell,thread,4);

  meff=(mm*ms*Lm*3500.)/(ms*Lm*3500.+7020.*mm);

  if (Ys/Lm > Ym) /* Evitar terminos fuente negativos */
  {
    Ss=0.;
  }
  else
  {
    Ss=2.*M_PI*meff*a*7020.*(Ym-Ys/Lm); /* Calculo del termino fuente. Modificar densidades acorde a las sustancias */
  }
  C_UDMI(cell,thread,5)=Ss;
  return (Ss);
}
DEFINE_ADJUST(adjust_gradient, domain)
{
  #if !RP_HOST
  Thread *t;
  cell_t c;
  face_t f;
  real epsilon,ms,mm;
  domain = Get_Domain(domain_ID);
  Domain *domain_m= Get_Domain(2);
  {
    Alloc_Storage_Vars(domain, SV_VOF_RG, SV_VOF_G, SV_NULL);
    Scalar_Reconstruction(domain, SV_VOF, -1, SV_VOF_RG, NULL);
    Scalar_Derivatives(domain, SV_VOF, -1, SV_VOF_G, SV_VOF_RG, Vof_Deriv_Accumulate);
  }
  {
    Alloc_Storage_Vars(domain_m, SV_VOF_RG, SV_VOF_G, SV_NULL);
    Scalar_Reconstruction(domain_m, SV_VOF, -1, SV_VOF_RG, NULL);
    Scalar_Derivatives(domain_m, SV_VOF, -1, SV_VOF_G, SV_VOF_RG, Vof_Deriv_Accumulate);
  }
  thread_loop_c (t,domain)
  {
    begin_c_loop (c,t)
    {
      C_UDMI(c,t,0) = NV_MAG(C_VOF_G(c,t)); }
    end_c_loop (c,t) }
  thread_loop_c (t,domain_m)
  {
    begin_c_loop (c,t)
    {
      epsilon=C_D(c,t);
      mm=0.4*pow(Dm,0.5)*pow(epsilon/nu,0.25); /* Calculo del coeficiente por small eddy */
      C_UDMI(c,t,3)=mm;
      ms=0.1*mm;
      C_UDMI(c,t,4)=ms;
      C_UDMI(c,t,1) = NV_MAG(C_VOF_G(c,t));
      if(C_UDMI(c,t,0)==0 || C_UDMI(c,t,1)==0)
      C_UDMI(c,t,2)=0;
      else
      C_UDMI(c,t,2)=2.0*C_VOF(c,t)*C_UDMI(c,t,1); }
    end_c_loop (c,t) }
  Free_Storage_Vars(domain, SV_VOF_RG, SV_VOF_G, SV_NULL);
  Free_Storage_Vars(domain_m, SV_VOF_RG, SV_VOF_G, SV_NULL);
  #endif
}

```

Figura 18. UDFs para el cálculo de área interfacial, coeficientes de transferencia de masa y término fuente de azufre.