



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Facultad de Química

“Estudio del mezclado en ollas de
aluminio equipadas con el rotor-
inyector asistido por modelado físico y
matemático”

T E S I S
PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO
P R E S E N T A :
DIEGO ALBERTO ABREU LÓPEZ



México D.F.

2011



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Jurado asignado:

PRESIDENTE: Prof. Eusebio Cándido Atlatenco Tlapanco

VOCAL: Prof. Carlos González Rivera

SECRETARIO: Prof. Marco Aurelio Ramírez Argáez

1er SUPLENTE: Prof. Arturo Alejandro Sánchez Santiago

2do SUPLENTE: Prof. Héctor Cruz Mejía

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

Edificio "D"

Departamento de Ingeniería Metalúrgica

Laboratorio de Solidificación y Simulación Matemática

Facultad de Química, UNAM.

ASESOR DEL TEMA:

Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez

SUPERVISOR TÉCNICO:

M. en I. Adrián Manuel Amaro Villeda

SUSTENTANTE:

Diego Alberto Abreu López

*El misterio es la cosa más bonita que podemos experimentar. Es la fuente de todo arte
y ciencia verdaderos.*

Albert Einstein.

Agradecimientos

A Dios.

A mis padres Rosi y Jorge: son mi apoyo, inspiración y motivación en todo momento y por el cariño y cuidado que me han brindado desde siempre.

A mi hermano Jorge "Coco": por todo lo que eres y representas, eres lo más amado que poseo.

A mis abuelos: por el cuidado y cariño que tuvieron de mí como a un hijo y a quienes admiro y respeto.

A mis tíos Javier, Libia, Martha y Carmen: por todo su apoyo y afecto brindado.

A Nico: por tu cariño y consejos, porque más que un tío eres mi hermano.

A Mareva: por todo el amor, cariño y momentos maravillosos que hemos pasado juntos. ¡Te adoro mi amor!

A todos mis amigos: Isaac, Erika, Gibran, Deborah, Rubén, Liz, Iza, Zulemi, Vero y tantos amigos por las vivencias y momentos inolvidables que pasamos juntos.

A Esmeralda: por los momentos especiales que nunca olvidare.

A mis profesores: sus enseñanzas son de gran valor a mi formación.

Al doctor Marco Aurelio: por los conocimientos compartidos y paciencia brindadas que representan un aporte invaluable en mí vida.

A las Sociedades Estudiantiles, Consejos, Autoridades de la facultad y Comité: con quienes logramos tantos proyectos y actividades juntos.

A la UNAM y a la Facultad de Química: que fue mi segunda casa y donde pase una de las etapas más hermosas en la vida.

Al *Roberto Rocca Education Program*: por la beca otorgada durante mis estudios de licenciatura.

*Se agrade atentamente, por el apoyo económico brindado durante la realización de este trabajo, al **CONACYT** y al proyecto con **clave 60033**, titulado “**Modelación Matemática y Física de la Desgasificación de Aluminio Líquido por medio de Purgado de Gases con la Técnica Rotor-Inyector**”, a cargo del **Dr. Marco Aurelio Ramírez Argález** (responsable técnico).*

Contenido

Lista de símbolos.....	iv
Capítulo 1. Antecedes	1
1.1 Generalidades del Aluminio	1
1.1.1 Obtención.....	1
1.1.2 Aleaciones	2
1.1.3 Propiedades.....	4
1.2 Hidrógeno en el aluminio.....	7
1.2.1 Solubilidad del hidrógeno en aluminio	7
1.2.2 Efectos del hidrógeno en el aluminio sólido	10
1.2.3 Eliminación del hidrógeno en el aluminio.....	12
1.2.4 Mecanismo de eliminación de hidrógeno con purga de gases.....	16
1.2.5 Variables que afectan la desgasificación con rotor inyector	17
1.2.6 Importancia del mezclado.....	18
1.2.7 Mecanismo del mezclado.....	19
1.3 Estudios de mezclado con modelos físicos y matemáticos	20
1.3.1 Modelos matemáticos	20
1.3.2 Modelos Físicos	21
1.4 Revisión Bibliográfica	24
Capítulo 2. Modelación física y matemática	30
2.1 Justificación y planteamiento del problema	30
2.2 Hipótesis.....	31

2.3	Objetivos	31
2.4	Modelado físico	32
2.4.1	Preparación e instalación del modelo físico	32
2.4.2	Diseño experimental.....	34
2.5	Planteamiento del modelado matemático	37
2.5.1	Suposiciones y consideraciones	37
2.5.2	Ecuaciones gobernantes	38
2.5.3	Condiciones de frontera e iniciales	41
2.5.4	Propiedades físicas de los fluidos utilizados	42
2.6	Solución numérica al modelo matemático	43
2.6.1	Breve descripción de PHOENICS CFD	43
2.6.2	Algoritmos de PHOENICS manejados	45
2.6.3	Discretización	46
2.6.4	Consideraciones numéricas	47
2.6.5	Simulación de las corridas.....	48
Capítulo 3. Resultados.....		49
3.1	Observaciones en modelo físico.....	49
3.2	Determinación de los tiempos de mezclado.....	51
3.3	Validación.....	55
3.4	Patrones de flujo.....	59
3.5	Contornos fracción de volumen de fase gaseosa.....	63
3.6	Contornos de viscosidad cinemática turbulenta	66
3.7	Contornos de presión.....	69
3.8	Efectos de las principales variables de proceso sobre el tiempo de mezclado	72

3.8.1	Efecto del punto de inyección	72
3.8.2	Efecto del flujo de gas	73
3.8.3	Efecto del diseño de rotor	75
3.8.4	Efecto de la velocidad del rotor	77
3.9	Correlación para el tiempo de mezclado	79
Capítulo 4. Discusión de resultados		83
4.1	Efecto del tipo de inyección de gas	83
4.2	Efecto del flujo de gas inyectado	84
4.3	Efecto del diseño de rotor	86
4.4	Efecto de la velocidad de rotor	88
Capítulo 5. Conclusiones		91
5.1	Trabajo futuro	93
Referencias bibliográficas		94
Anexo 1. Ejemplo de archivo <i>Q1</i>		96
Anexo 2. Ejemplo de subrutina en <i>GROUND</i>		102

Lista de símbolos

Símbolo	Significado	Unidades
$A_{boquilla}$	Área de la boquilla.	m^2
a_H	Coefficiente de actividad del equilibrio de la reacción de solubilidad de hidrógeno.	$atm^{1/2}$
C	Concentración de trazador instantánea.	$kg_{trazador}/kg$
C_0	Concentración de trazador inicial.	$kg_{trazador}/kg$
C_∞	Concentración de trazador al equilibrio.	$kg_{trazador}/kg$
C^*	Concentración de trazador normalizado.	Adimensional
C_D	Coefficiente de arrastre.	Adimensional
C_f	Coefficiente de fricción.	Adimensional
C_p	Capacidad calorífica.	$J/kg \cdot K$
C_1	Constante empírica del modelo de turbulencia $k-\varepsilon$.	Adimensional
C_2	Constante empírica del modelo de turbulencia $k-\varepsilon$.	Adimensional
C_μ	Constante empírica del modelo de turbulencia $k-\varepsilon$.	Adimensional
D_{A-B}	Coefficiente de difusión molecular de la especie A en B.	m^2/s
$D_{C,l}$	Coefficiente de difusión molecular del trazador en la fase líquida.	m^2/s
F_{fricc}	Término fuente de la ecuación de continuidad.	N/m^2
Fr	Número de Froud.	Adimensional
Fr^*	Número de Froud modificado.	Adimensional
\vec{g}	Vector de la fuerza de gravedad.	m/s^2
G	Generación de energía cinética turbulenta.	$N/m^2 \cdot s$
H	Altura característica de la olla.	m
K	Conductividad térmica.	$W/m \cdot K$
K_H	Constante de equilibrio de la reacción de solubilidad de	Adimensional

	hidrógeno en aluminio líquido.	
k	Energía cinética turbulenta.	m^2/s^2
k_d	Coefficiente de transporte de masa de la especie d .	m/s
L	Longitud característica.	m
P_i	Presión de la fase i .	Pa
P_{H_2}	Presión parcial de hidrógeno gaseoso.	Pa
P_{H_2O}	Presión parcial de vapor de agua.	Pa
PI	Punto de inyección de gas.	m
Pr	Número de Prandtl.	Adimensional
Q_{gas}	Flujo de gas.	L/min
r	Componente radial.	m
R_i	Fracción volumétrica de la fase i .	Adimensional
Re	Número de Reynolds.	Adimensional
RPM	Velocidad angular del rotor.	rpm
S	Solubilidad de hidrógeno en aluminio.	cm^3 de H_2 / 100g de $Al_{(l)}$
Sc	Número de Schmidt laminar.	Adimensional
Sc_t	Número de Schmidt turbulento.	Adimensional
Sh	Número de Sherwood.	Adimensional
T	Diámetro característico de la olla.	m
t	Tiempo.	s
t_{mix}	Tiempo de mezclado en correlación.	s
\vec{V}_i	Velocidad de la fase i .	m/s
$V_{r,g}$	Velocidad en la dirección radial de la fase gaseosa.	m/s
$V_{\theta,g}$	Velocidad en la dirección angular de la fase gaseosa.	m/s
$V_{z,g}$	Velocidad en la dirección axial de la fase líquida.	m/s
$V_{z,l}$	Velocidad en la dirección radial de la fase líquida.	m/s
$V_{r,l}$	Velocidad en la dirección angular de la fase líquida.	m/s

$V_{\theta,l}$	Velocidad en la dirección axial de la fase gaseosa.	m/s
V_{rotor}	Velocidad en la pared del rotor.	m/s
V_{flecha}	Velocidad en la pared de la flecha.	m/s
We	Número de Weber.	Adimensional
z	Componente axial.	m
β_0	Constante en la ecuación de correlación.	s
β_1	Coefficiente de la velocidad de rotor en correlación.	s/rpm
β_2	Coefficiente de la velocidad del flujo de inyección de gas en correlación.	$s \cdot (L/min)^{-1}$
β_3	Coefficiente de la velocidad del punto de inyección en correlación.	s/m
$\Gamma_{\bar{v}_i}$	Coefficiente de difusión turbulenta al interior de la fase i .	Ns/m^2
Γ_{R_i}	Coefficiente de difusión de la fase i .	Ns/m^2
ε	Tasa de disipación de energía cinética turbulenta.	m^2/s^3
θ	Componente angular.	radianes
λ	Factor de escalamiento.	m/m
μ_{eff}	Viscosidad efectiva.	kg/m·s
μ_g	Viscosidad laminar de la fase gaseosa.	kg/m·s
μ_l	Viscosidad laminar de la fase líquida.	kg/m·s
μ_t	Viscosidad turbulenta.	kg/m·s
ν_l	Viscosidad cinemática de la fase líquida.	m^2/s
ρ_i	Densidad de i .	kg/m^3
σ	Tensión superficial.	N/m
σ_k	Constante empírica del modelo de turbulencia $k-\varepsilon$.	Adimensional
σ_ε	Constante empírica del modelo de turbulencia $k-\varepsilon$.	Adimensional

Capítulo 1. Antecedes

1.1 Generalidades del Aluminio

Después del acero, el aluminio es el metal que más se utiliza en el mundo para la fabricación de componentes ingenieriles y estructurales. Debido a su baja densidad, buenas propiedades mecánicas y resistencia a la corrosión posee una alta relación resistencia/densidad, lo que lo hace un material muy útil para la construcción de aviones, trenes y automóviles donde es muy importante la movilidad y conservación de energía.

Esta multiplicidad e importancia de sus aplicaciones y también el desarrollo de otros materiales de menor costo, han provocado que la manufactura del aluminio siga innovando en tecnologías de proceso para disminuir costos de producción y hacer al aluminio más competitivo, para poder ofrecer a los clientes materiales baratos con buenas propiedades. Las compañías del aluminio necesitan invertir en investigación y desarrollo tecnológico, siendo este factor el más importante en la competitividad de los productos derivados del aluminio.

1.1.1 Obtención

El aluminio es el metal no ferroso más consumido en el mundo, con un consumo anual de 24 millones de toneladas. ^[1] Cerca del 75% del volumen total es “aluminio primario”, el cual es reducido a partir de las menas extraídas, opuesto al aluminio secundario derivado del procesamiento de la chatarra de aluminio.

El proceso de producción de aluminio primario se puede dividir en tres etapas independientes, llevadas a cabo en diferentes plantas:

- Minería para extraer la materia prima necesaria (bauxita y variedades de otros minerales);
- Procesamiento de mena y preparación de óxido de aluminio (alúmina);
- Producción de aluminio primario a partir de alúmina.

Toda la alúmina producida comercialmente es obtenida por un proceso patentado por Karl Bayer en 1888. El proceso *Bayer* involucra una lixiviación cáustica a temperatura y presión elevada, seguida por una separación del resultado de solución de aluminato de sodio y precipitación selectiva de óxido de aluminio hidratado ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$).

El aluminio de pureza comercial se manufactura principalmente por electrólisis en el proceso *Hall-Héroult*. La alúmina refinada de la bauxita es disuelta en un baño de criolita (Na_3AlF_6) con varias sales de flúor para controlar la temperatura, densidad y resistividad de la alúmina. Una corriente eléctrica se pasa a través del baño para producir la electrólisis de la alúmina disuelta con la formación de oxígeno y reacción con el ánodo de carbono, y el aluminio se colecta como una capa de metal en el cátodo ^[2].

Se tienen tres grupos de impurezas contenidas en el aluminio proveniente de ésta electrólisis: no metálicos (sales de flúor), metálicos (hierro y silicio) y gaseosos principalmente hidrógeno formado por la electrólisis del agua. La pureza del aluminio es el principal criterio para definir su composición y valor. El método más efectivo para purificar aluminio de impurezas no metálicas e hidrógeno es aplicando una filtración y refinación inyectando una mezcla de nitrógeno y cloro gaseoso al aluminio fundido mediante distintas técnicas, siendo la más utilizada la del rotor inyector.

1.1.2 Aleaciones

Algunos de los elementos aleantes en el aluminio pueden mejorar sus propiedades, pero otros las disminuyen, por ejemplo, se emplea cobre, titanio y boro en bajas concentraciones para

refinar el grano en aleaciones de fundición susceptibles a éste fenómeno y el estroncio se usa en bajos niveles (0.008-0.04%) para modificar el eutéctico de las aleaciones Al-Si.

Las aleaciones de aluminio se dividen en dos principales categorías: composiciones para fundición y composiciones para conformado. Esta diferenciación se basa en el mecanismo primario para desarrollar sus propiedades.

Aleaciones de conformado	Aleaciones de fundición
1xxx: Controlado sin alear usado en industria eléctrica y química	1xx.x: Composición sin alear, empleada para manufactura de torno
2xxx: Aleaciones que contienen cobre como mayor elemento aleante. Ampliamente usada en aviones	2xx.x: Aleaciones que contienen cobre como mayor elemento aleante
3xxx: Magnesio como principal elemento, para aplicaciones en arquitectura y productos varios	3xx.x: Aleaciones Al-Si que también contiene Mg o Cu (esta serie comprende cerca del 90% de los productos de fundición)
4xxx: Silicio como principal elemento usadas en varillas y hojas de soldadura	4xx.x: Aleaciones binarias Al-Si.
5xxx: Aleaciones que contienen Mg como principal elemento aleante, usada en productos expuestos a ambientes marinos	5xx.x: Aleaciones que contienen Mg como principal elemento aleante.
6xxx: aleaciones con Mg y Si como principales elementos aleantes, usadas para extrusión	6xx.x: Sin usar.
7xxx: Aleación de aluminio que contiene Zn como principal elemento aleante, además de contener Cu, Mg, Cr y Zr, aplicada en componentes estructurales aéreas y otras aplicaciones de alta dureza	7xx.x: Aleación de aluminio que contiene Zn como principal elemento aleante, pero otros elementos como Cu y Mg pueden ser especificados
8xxx: Aleaciones de aluminio que contienen estaño y alguna cantidad de litio	8xx.x: Aleaciones de aluminio que contienen estaño como mayor elemento aleante.
9xxx: Reservado para futuro uso	9xx.x: Sin usar

Tabla 1.1 Familia de aleaciones para composiciones de fundición y de conformado. ^[1]

La variedad de elementos aleantes y los efectos de estos sobre las aleaciones de aluminio, han provocado la necesidad de agruparlos en diferentes familias de aleaciones. La *Aluminum Association of America* ha designado series o familias de aleaciones donde se ha determinado un sistema de cuatro dígitos para aleaciones de conformado y un sistema de tres dígitos seguida por un valor decimal para las aleaciones de fundición. El decimal .0 se refiere a productos directos de fundición. Los decimales .1 y .2 conciernen a composición de piezas que resultan de la conformación química posterior a especificaciones requeridas de fundición (Tabla 1.1).

De estas series, las aleaciones más comúnmente empleadas son las de la serie 3xx.x, debido al incremento de la fluidez encontrada por la adición de Si y su respuesta al endurecimiento por envejecimiento por la adición de Cu o Mg.^[1]

1.1.3 Propiedades

Dentro de las características más notables del aluminio destaca su versatilidad en el rango de propiedades mecánicas que pueden desarrollarse desde el aluminio puro hasta aleaciones complejas.

Las propiedades del aluminio que hacen de este metal más económico y atractivo para una amplia variedad de usos son su apariencia, bajo peso, propiedades eléctricas, propiedades mecánicas y su alta resistencia a la corrosión.

El aluminio puro tiene una densidad de 2.7 g/cm^3 , aproximadamente un tercio que la del acero (7.83 g/cm^3), o la del latón (8.53 g/cm^3). En la Tabla 1.2 se compara la resistencia a la tensión, densidad y la relación resistencia/densidad de varias aleaciones de aluminio contra otros materiales como el hierro y algunos aceros, mientras que en la Tabla 1.3 se presenta un resumen de las propiedades físicas del aluminio puro.

Material	Resistencia a la tensión (MPa)	Densidad (g/cm ³)	Relación resistencia/densidad
7178-T6	12.6	0.0368	342
7075-T6	11.9	0.0365	326
2024-T361	10.3	0.0365	283
5056-H18	9.0	0.0347	260
6066-T6	8.2	0.0354	231
Aceros inoxidables (tipo 302)	20.1	0.1048	191
6061-T6	6.4	0.0354	182
3004-H380	5.9	0.0354	166
Fibra de vidrio (promedio)	2.7	0.0187	145
1350-H19	3.9	0.0352	110
6063-T5	3.9	0.0358	108
3003-H14	3.2	0.0358	88
Acero al carbón (1020)	8.6	0.1026	84
Bronce de arquitectura	8.6	0.1095	79
5005-O	2.6	0.0354	73
3003-O	2.3	0.0358	64
Plástico PVC	1.1	0.0182	59
1060-O	1.4	0.0352	41
Cobre	4.6	0.1163	39
Hierro	5.4	0.1384	39

Tabla 1.2. Comparación de la resistencia a la tensión, densidad y la relación resistencia/densidad de varias aleaciones de aluminio ante otros materiales.

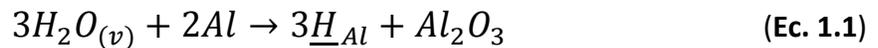
Propiedad	Valor
Parámetro reticular	4.9496x10 ⁻¹⁰ m a 298K
Densidad del aluminio puro(sólido)	2699 kg/m ³
Densidad del aluminio puro(líquido)	2357 kg/m ³ a 973K 2304 kg/m ³ a 1173K
Coefficiente de expansión Térmica	23x10 ⁻⁶ K ⁻¹ a 293K
Conductividad térmica	23.7 W/cm·K a 298K
Resistividad eléctrica	2655x10 ⁻⁸ Ω·m
Susceptibilidad magnética	16 x10 ⁻³ m ³ / g-mol
Tensión superficial	868 dina/cm en punto de fusión
Viscosidad	.0012 poise en punto de fusión
Punto de fusión	933.5 K
Punto de ebullición	2767 K
Calor de fusión	397 J/g
Calor de vaporización	1.08x10 ⁻⁴ J/g
Capacidad calorífica	0.90 J/g·K

Tabla 1.3. Resumen de las propiedades físicas del aluminio puro.

1.2 Hidrógeno en el aluminio

1.2.1 Solubilidad del hidrógeno en aluminio

El aluminio y sus aleaciones son muy susceptibles a la absorción de hidrógeno en estado líquido debido a su alta solubilidad a alta temperatura y la afinidad del aluminio por el oxígeno (Figura 1.1). La principal fuente de hidrógeno viene de la humedad de la atmósfera en contacto con el metal líquido, la cual reacciona con el aluminio líquido mediante la siguiente reacción:



Cada aleación de aluminio tiene diferente tendencia a absorber hidrógeno. Por ejemplo, al incrementar el contenido de Cu y Si como elementos aleantes se reduce la solubilidad de hidrógeno, mientras que Mg la incrementa (Tabla 1.4).

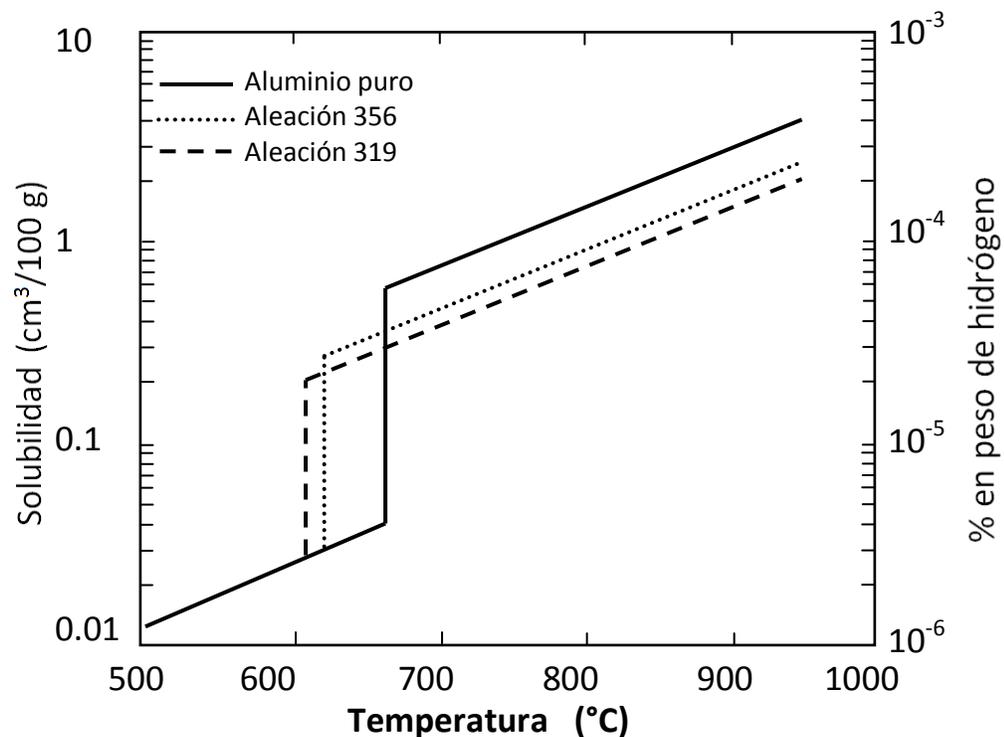


Figura 1.1 Solubilidad estimada de hidrógeno a una atmósfera de presión en función de la temperatura para las aleaciones 356 y 319 en comparación con el aluminio puro. ^[1]

Aleación	Solubilidad de Hidrógeno (ppm)
Aluminio puro	1.20
Al-7Si-0.3 Mg	0.81
Al-4.5 Cu	0.88
Al-6Si-3.5 Cu	0.67
Al-4Mg-2Si	1.15

Tabla 1.4 Solubilidad de hidrógeno en aluminio y algunas composiciones de aleaciones a 750°C. ^[1]

El hidrógeno disuelto en el aluminio líquido presenta el siguiente equilibrio termodinámico con la presión parcial del gas hidrógeno de la atmósfera:



La constante de equilibrio K_H de la reacción anterior es:

$$K_H = \frac{P_{H_2}^{1/2}}{a_H [H]} \quad (\text{Ec. 1.3})$$

Donde a_H es el coeficiente de actividad del hidrógeno en aluminio, $[H]$ es la concentración de hidrógeno en aluminio y P_{H_2} es la presión parcial de hidrógeno en la atmósfera.

T.A. Engh ^[1] propone un modelo numérico de absorción de hidrógeno desde el vapor de agua de la atmósfera, y sugiere que la concentración de hidrógeno en el aluminio líquido, expuesto a esa atmósfera, depende de la presión de vapor de agua y puede ser calculada a partir de principios termodinámicos y cinéticos. El modelo cinético propuesto que describe la absorción de hidrógeno en la interfase involucra varias etapas:

1. El vapor de agua difunde a través de una capa límite para adsorberse en la superficie de metal;
2. Las moléculas de agua adsorbidas reaccionan con aluminio fundido (Ec. 1.1);
3. Las moléculas de hidrógeno son desorbidas de la superficie, difunden de vuelta en la capa límite y se disocian formando hidrógeno atómico sobre la superficie, y finalmente;
4. Los átomos de hidrógeno difunden a través de la capa límite del metal hacia el seno del mismo (Figura 1.2).

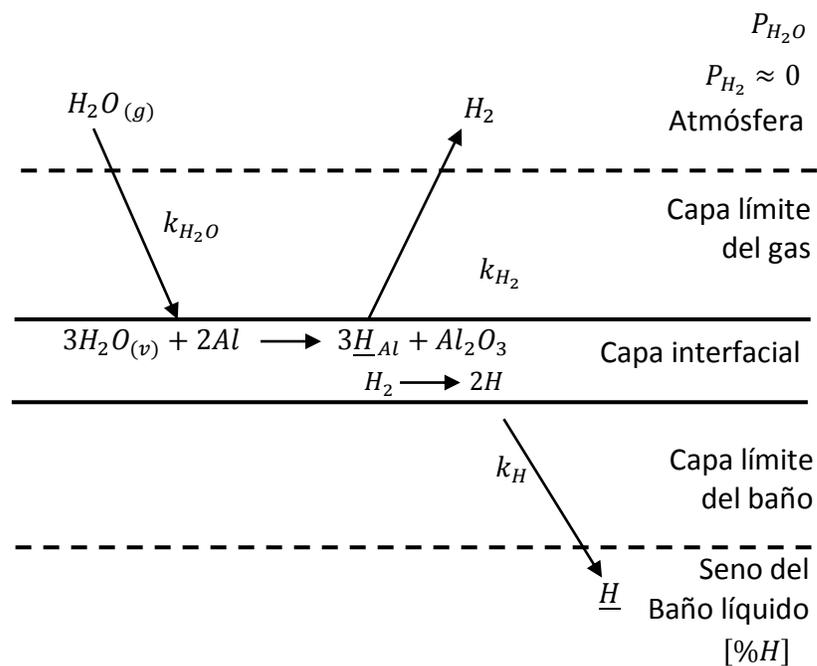


Figura 1.2 Mecanismo de la absorción de hidrógeno en el aluminio líquido. ^[1]

Ransley y Neufeld, Opie y Grant, y Eichenhauer, Hattenbach, y Pebler^{[1], [20]}, desarrollaron las siguientes ecuaciones para determinar la solubilidad del hidrógeno en aluminio líquido y sólido en función de la temperatura.

Solubilidad de	{	$\log S = \frac{-2760}{T} + 2.796$	(Ec. 1.4)
hidrógeno en aluminio		$\log S = \frac{-2550}{T} + 2.62$	(Ec. 1.5)
líquido		$\log S = \frac{-3086}{T} + 2.969$	(Ec. 1.6)
Solubilidad de	{	$\log S = \frac{-2080}{T} + \frac{\log P_{H_2O}}{2} - 0.652$	(Ec. 1.7)
hidrógeno en aluminio sólido		$\log S = \frac{-3042}{T} + \frac{\log P_{H_2O}}{2} + 0.521$	(Ec. 1.8)

1.2.2 Efectos del hidrógeno en el aluminio sólido^[1]

Como la solubilidad de hidrógeno es mucho mayor en estado líquido comparada con la solubilidad de hidrógeno en el aluminio sólido, y si se asume que la difusión de hidrógeno en el sólido es insignificante comparada con la difusión en el líquido, al final de la solidificación habrá un gran incremento de la concentración de hidrógeno en la pieza. Por lo tanto, aun cuando el contenido de hidrógeno en el baño líquido sea menor que el valor de su límite de solubilidad, durante la solidificación, la concentración en el líquido aumentará y el límite de solubilidad podría excederse resultando en nucleación de burbujas de hidrógeno que dan una pieza porosa (ver Figura 1.3).

Las porosidades formadas pueden ser muy finas, dispersas o localizadas en las áreas que solidifican al final. Algunos defectos por porosidad pueden ser bastante grandes y parecer grietas o rechupes. Es importante enfatizar que las porosidades que se ven a simple vista se llaman *macroporosidades*, mientras las que requieren una magnificación para ser observadas son referidas como *microporosidades*.

Además de las porosidades presentes en las piezas causadas por gas también están los huecos producidos por contracción (microrechupes) que se producen por el cambio de densidad asociado a la solidificación junto con una pobre alimentación de metal para compensar la contracción, la cual ocurre cuando el flujo interdendrítico del metal fundido se ve obstruido. Estos rechupes se diferencian por tener una forma más irregular y alargada comparada con la forma esférica de las porosidades formadas por gas.

Los defectos causados por la no remoción de hidrógeno en las piezas coladas se reflejan en la reducción de las propiedades mecánicas, como su resistencia a la tensión y el esfuerzo de cedencia. En la Figura 1.4 se muestra la variación de estas propiedades en aleaciones de aluminio en función de la porosidad y concentración de hidrógeno.

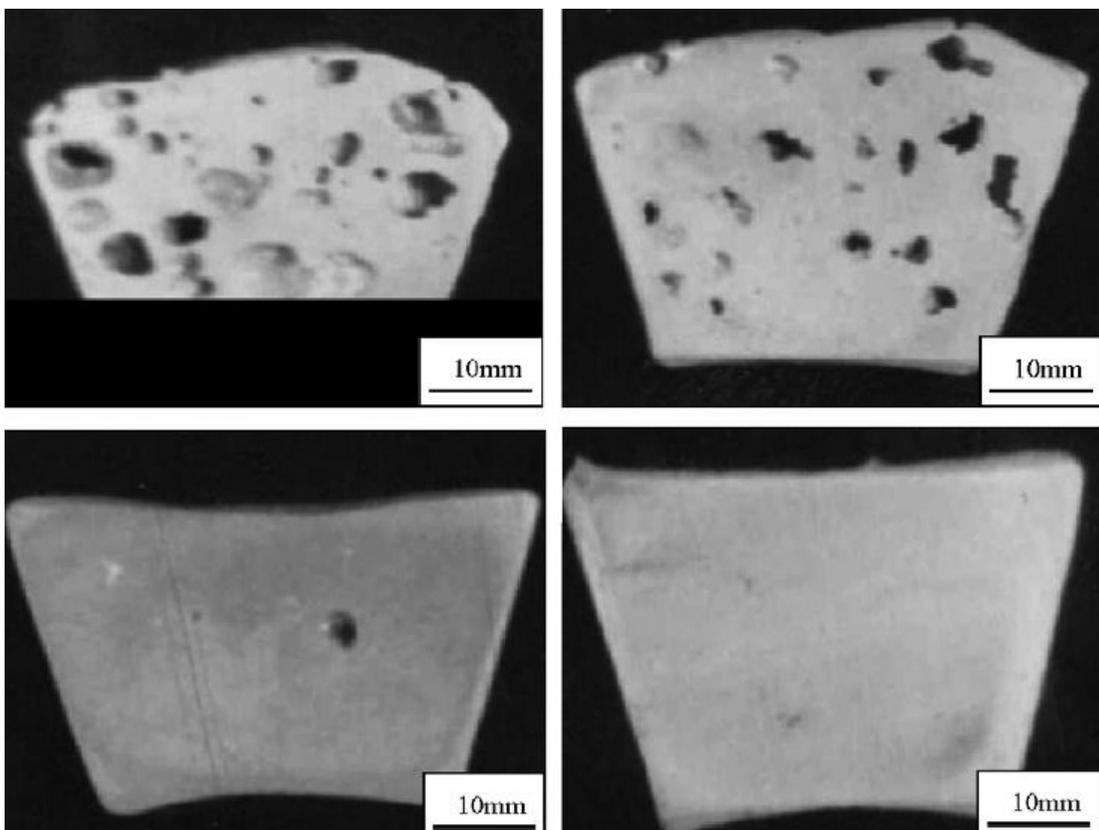


Figura 1.3. Ejemplo de la porosidad en probetas de aluminio, con diferentes grados de desgasificación. ^[10]

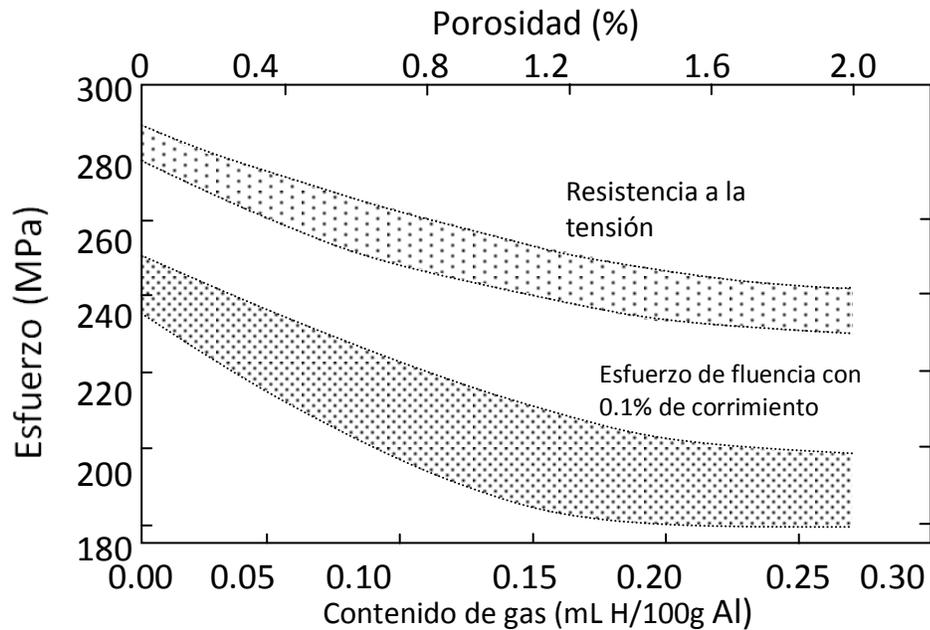


Figura 1.4. Propiedades de resistencia a la tensión y esfuerzo de cedencia (MPa) para una aleación A356 en función del porcentaje de contenido de gas (mL de H/100g de Al). ^[1]

1.2.3 Eliminación del hidrógeno en el aluminio ^{[1],[2],[3],[17]}

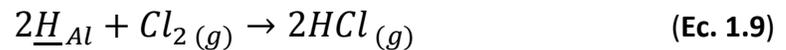
Los niveles de hidrógeno pueden ser reducidos por varios métodos, el más simple es mantener el metal a baja temperatura por un periodo de tiempo durante el cual, la baja solubilidad de hidrógeno en un metal fundido sobresaturado de hidrógeno, provocan una desgasificación lenta, por lo que no es conveniente utilizarlo en la industria. A éste método se le conoce como desgasificación natural.

La desgasificación por vacío consiste en eliminar la presión atmosférica y esto provoca la formación de hidrógeno gaseoso dentro del metal que asciende y es removido una vez que llega a la superficie.

Otra técnica es añadir tabletas de hexacloroetano (C_2Cl_6), el cual reacciona con el aluminio para formar $AlCl_3$ gaseoso que colecta al hidrógeno y lo remueve en la superficie. Las

desventajas son que hay pérdida de aluminio y que los gases que escapan hacia la atmósfera son contaminantes.

Añadir cloro o *freón* ayuda a la tasa de remoción al reaccionar con el hidrógeno y al ser favorable en ciertas circunstancias. La reacción que describe la desgasificación con cloro es la siguiente:



La inyección de gases con una lanza es un método de purga de gases que consiste en inyectar un gas o mezcla de gases a presión a través de un tubo o lanza de diámetro interno de aproximadamente 0.3 cm, produciendo burbujas relativamente grandes, lo que retarda el desgasificado.

El tapón poroso es otra técnica de purga de gases que usa tapones porosos de grafito o material cerámico con cavidades pequeñas por las cuales pasa el gas, logrando burbujas finas y tiempos más cortos de desgasificado que con otras técnicas como la de purga gaseosa con lanza. Se puede combinar con un rotor para dispersar mejor a las burbujas.

El rotor inyector es un método de desgasificado que tiene una alta eficiencia comparada con las pobres eficiencias que exhiben las lanzas o tapones porosos. La cinética de desgasificado es muy rápida y eficiente. Esto lo convierte en uno de los procesos más importantes en la industria del aluminio, aunque aún es susceptible a mejorar, por lo que optimizar la productividad y el costo de operación a través del control de las variables que afectan al proceso es objeto de estudio e investigación como en esta tesis.

En la Figura 1.5 se presenta una comparación de las cinéticas de desgasificado con las diversas técnicas de purga de gases, donde se aprecia el desempeño superior del rotor-inyector.

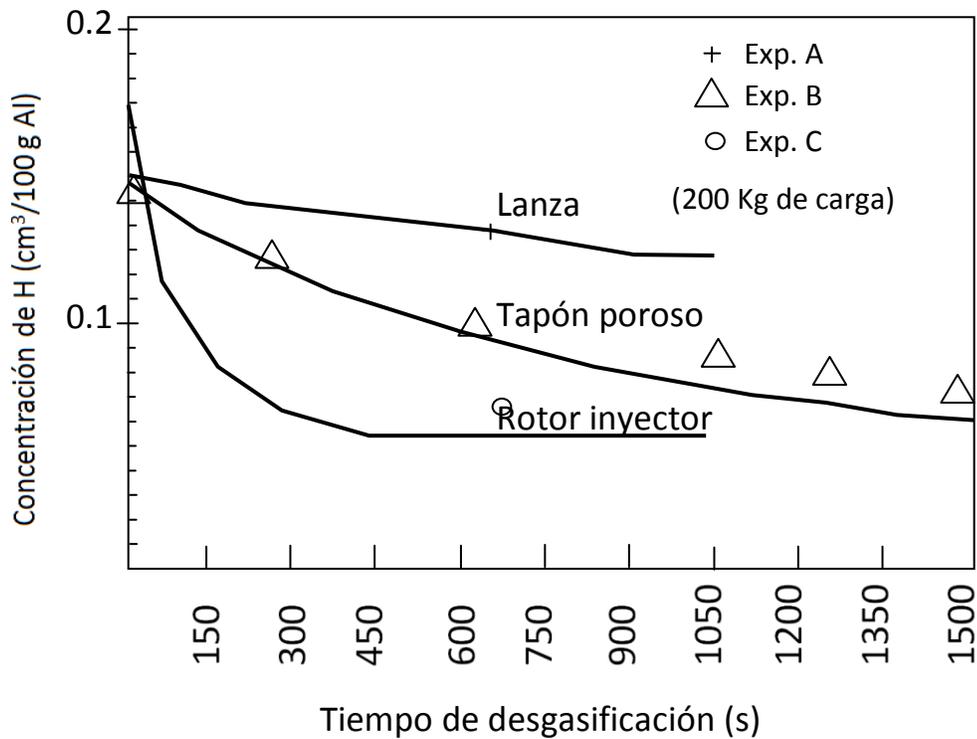


Figura 1.5 Comparación de la remoción de hidrogeno con diferentes técnicas de desgasificación con purga de gases: lanza, tapón poroso y rotor en 200kg de Al-7% Si-0.5% Mg para el mismo flujo de gas (6 L/min). ^[3]

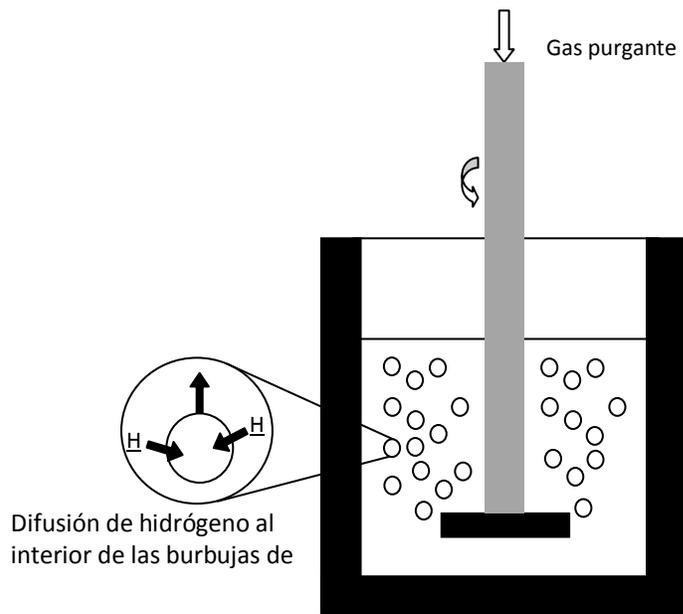


Figura 1.6. Esquema representativo del proceso de desgasificación por la técnica del rotor-inyector. ^[10]

El primer dispositivo dentro de la técnica del rotor-inyector usado en el desgasificado de aluminio para producir burbujas finas, se remonta al trabajo de Szekely (1966) ^[3], (ver Figura 1.6), quien en esencia construyó una celda de flotación de grafito inmersa dentro del aluminio líquido. Esto representó un avance significativo para la purificación de aleaciones de aluminio. Su dispositivo también incorporó un flujo de cloro para remover elementos alcalinotérreos (Na, Li, K) provenientes de la descomposición de la celda electrolítica *Hall*. El trabajo de Szekely fue una importante contribución a la industria.

El primer estudio sobre la cinética de hidrógeno removido fue en 1962 por Pehlke y Bement ^[3]. Concluyeron que la cinética de remoción de hidrógeno se controla por la rapidez de difusión de hidrógeno hacia las burbujas, determinada por el área interfacial aluminio-burbujas. El tamaño de las burbujas generadas por el rotor son de 1/8 de pulgada comparadas con las de una lanza que aproximadamente miden 1 pulgada, por lo que el área interfacial es 64 veces mayor con el rotor. Desafortunadamente la cinética de desgasificado no se incrementa 64 veces, ya que las burbujas se saturan de gas hidrógeno y solo pueden remover la cantidad de hidrógeno que establece el equilibrio termodinámico.

La lanza es ineficiente, mientras que el tapón poroso es razonablemente bueno pero requiere de tiempos largos para producir los mismos resultados que el rotor. Así que uno de los principales beneficios del rotor es que la cinética de desgasificado es más rápida. Los tiempos cortos de tratamiento se traducen en bajos costos de operación y mayor productividad en las fundiciones.

En la literatura especializada hay varios trabajos acerca del rotor inyector por la gran importancia que ha adquirido esta técnica debido a su alta eficiencia para remover hidrógeno y partículas indeseables en el aluminio.

1.2.4 Mecanismo de eliminación de hidrógeno con purga de gases ^{[1], [2], [17]}

Varios factores cinéticos controlan la remoción del hidrógeno del aluminio líquido mediante purga de gases. Es más fácil removerlos a menores temperaturas y mayores concentraciones. La remoción de hidrógeno se describe con un mecanismo que involucra las siguientes etapas cinéticas (ver Figura 1.7):

- Transporte de hidrógeno en el baño hacia la vecindad de una burbuja de gas inerte por convección y difusión.
- Transporte difusivo a través de la frontera de la delgada capa que rodea la burbuja.
- Adsorción química y subsecuente desorción de hidrógeno en la superficie de la burbuja.
- Difusión de hidrógeno gaseoso dentro de la burbuja.
- Escape de hidrógeno de la superficie líquida.

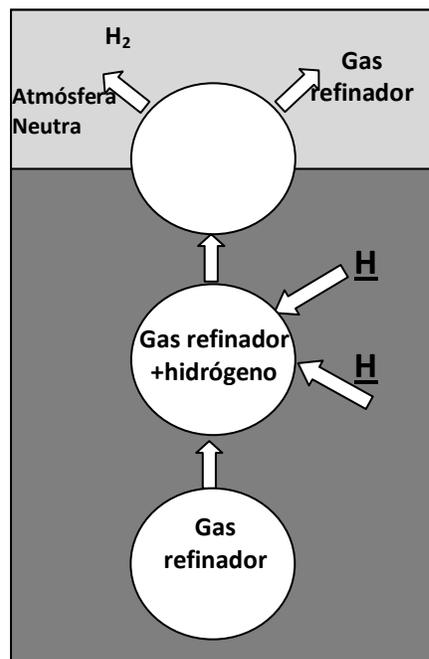


Figura 1.7. Esquema de la remoción de hidrógeno del aluminio líquido a la atmósfera. ^[5]

Consecuentemente, la remoción de hidrógeno dependerá de coeficientes de transferencia de masa. Se ha encontrado que la purga eficiente depende principalmente del tamaño de la burbuja (Figura 1.8).

1.2.5 Variables que afectan la desgasificación con rotor inyector

El rendimiento del desgasificado está determinado por varios factores interrelacionados, incluyendo concentración de hidrógeno, flujo de gas, tamaño de la olla (el cual determina el tiempo de residencia junto con la tasa de flujo de gas), capacidad de mezclado, especificaciones de la aleación (factores termodinámicos y coeficientes de transferencia de masa) y tamaño de las burbujas de gas en el baño.

La capacidad de este proceso para desgasificar depende en gran medida de los tamaños de burbujas generadas y del área de contacto alcanzada entre las burbujas y el baño metálico. Las burbujas grandes son muy comunes en ollas grandes cuando se usan lanzas y se lleva a cabo un mezclado pobre porque el flujo de gas puede cubrir el rotor, reduciendo fuertemente su efectividad. En la Figura 1.8 se aprecia éste efecto.

Velocidades de rotación de 300 a 500 rpm ayudan a romper las burbujas haciéndolas más pequeñas además de dispersarlas en el baño, mejorando los niveles de remoción de hidrógeno que dependen también de la tasa de inyección de gas así como del contenido inicial de hidrógeno.

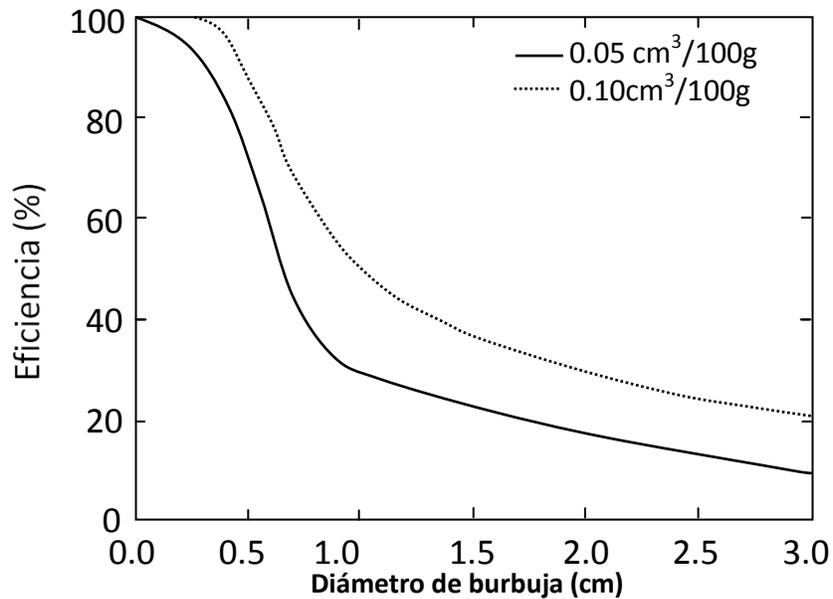


Figura 1.8. Eficiencia de la remoción de hidrógeno en función del tamaño de burbuja para dos diferentes flujos de inyección de gas purgante. ^[1]

1.2.6 Importancia del mezclado

El mezclado es la reducción de la no uniformidad química y térmica en un sistema. La uniformidad química y térmica significa tener la misma composición química de las especies y la misma temperatura dentro de todo el sistema. Cuando el sistema es un fluido, como en el caso del proceso de desgasificación aplicado a baños de aluminio líquido, la cinética para alcanzar la uniformidad química y térmica se acelera agitando el baño para promover los mecanismos convectivos de transporte de masa y de energía, que en general son más eficientes que los mecanismos difusivos. Si el régimen de flujo creado por la agitación es turbulento, el transporte de masa y energía se aceleran aún más promoviendo el mezclado del sistema. Es claro que se podrá desgasificar más rápido en un baño bien mezclado, ya que los átomos de hidrógeno disueltos en el seno del aluminio líquido podrán alcanzar una burbuja vecina en menor tiempo cuando hay una buena agitación, ya que viajarán a mayor velocidad mediante los mecanismos de transporte convectivo turbulento. Además, la agitación vigorosa dispersará más uniformemente a las burbujas, por lo que los átomos de hidrógeno siempre tendrán cerca una burbuja vecina que los pueda remover. En cambio en

baños mal mezclados, el transporte de un átomo de hidrógeno del seno del líquido a una burbuja tardará más al haber menor convección y las burbujas estarán concentradas en la zona de inyección por lo que no habrá burbujas vecinas cercanas para todos los átomos de hidrógeno disuelto lo que se traduce en una lenta cinética de remoción de H. Mayor productividad y reducción de costos de producción son el resultado económico que puede generar un mezclado apropiado en una olla de desgasificación de aluminio.

1.2.7 Mecanismo del mezclado ^[17]

La homogenización depende del tamaño del reactor y del régimen de flujo. La turbulencia es fundamental para alcanzar el mezclado ya que en éste régimen de flujo las velocidades fluctúan en el tiempo y todas las direcciones en el espacio, mediante grandes y pequeños elementos estructurales conocidos como *eddies* o vórtices, aumentando la dispersión o la rapidez con la que las especies químicas o el calor se transportan.

Los principales mecanismos que se presentan en el fenómeno de mezclado son:

- Dispersión, que es el acto de distribuir (B se dispersa en A).
- Difusión molecular, es causada por el movimiento molecular relativo y se caracteriza por un coeficiente de difusividad molecular y un gradiente de la cantidad a transportar.
- Difusión turbulenta, que es la dispersión asociada a regímenes de flujo turbulentos causada por los movimientos caóticos de grandes grupos de moléculas llamadas remolinos (*eddies*). La difusividad turbulenta es una analogía conceptual de la difusividad molecular pero es una propiedad local del flujo en vez de ser una propiedad física del fluido.
- Convección, que es la dispersión causada por el movimiento del fluido que arrastra a la cantidad a ser transportada (masa o energía).

La completa resolución del complejo problema del mezclado turbulento requeriría del conocimiento de la velocidad instantánea en el todo el campo sobre el tiempo, además del campo de concentraciones para cada componente, por lo que se han desarrollado diversas técnicas experimentales y teóricas para describir y resolver este problema complejo.

En reactores tipo *batch* el mezclado se mide usando el concepto de tiempo de mezclado, que se define como el tiempo que tarda en homogenizarse un trazador medido desde que se inyecta en un punto del sistema. Como la uniformidad química es muy difícil de alcanzar, se emplean los criterios de mezclado. En este trabajo se empleó el criterio del 95%, es decir, se considera que el tiempo de mezclado es el tiempo que toma un soluto en alcanzar $\pm 5\%$ de la composición de equilibrio, medido desde que se inyectó el soluto en un punto del sistema. Por otro lado, en reactores continuos, el mezclado se mide caracterizando los porcentajes de volúmenes ocupado por flujo pistón o tapón, zona muerta y volumen de mezclado en el sistema.

1.3 Estudios de mezclado con modelos físicos y matemáticos^[4]

Las técnicas de modelos físicos y matemáticos que han sido desarrollados para representar las operaciones de los procesos metalúrgicos han funcionado efectivamente para entender, controlar, optimizar y diseñar nuevos procesos.

1.3.1 Modelos matemáticos

Un modelo matemático consiste en un conjunto de ecuaciones algebraicas o diferenciales las cuales representan cuantitativamente un proceso o algún aspecto del proceso. Los modelos matemáticos se pueden clasificar en los siguientes tres grupos principales:

- i) Modelos mecanísticos o fundamentales, basados en fundamentos teóricos. Son derivados de leyes físicas con mínimos ajustes empíricos, resultando en la representación matemática cuantitativa del proceso. En la mayoría de los casos se

representan por ecuaciones diferenciales parciales junto con sus apropiadas condiciones de frontera y se pueden resolver de manera analítica o numérica.

- ii) Modelos semiempíricos. Se basan esencialmente en leyes físicas pero al mismo tiempo combinan información recabada empíricamente, debido a que en la práctica es muy difícil obtener todos los datos desde primeros principios, y a veces es común obtener información experimentalmente para completar el modelo. La mayoría de los modelos matemáticos utilizados en la práctica caen en esta categoría.
- iii) Modelos Entrada – Salida o de “Caja Negra”. No están basados en leyes físicas sino que representan una relación totalmente empírica entre las variables del proceso. Estos modelos son auxiliares en el control de procesos. Usualmente se obtienen usando correlaciones estadísticas entre las variables de proceso y las respuestas del mismo.

En la actualidad, gracias los avances tecnológicos se han logrado desarrollar técnicas numéricas para resolver modelos matemáticos cada vez más complejos, especialmente en el campo de los problemas de flujo de fluidos, dando origen a la *Dinámica de Fluidos Computacional* (CFD por sus siglas en inglés), que a grandes rasgos consiste en la solución de las ecuaciones de conservación de masa (continuidad) y de conservación de cantidad de movimiento, conocidas como ecuaciones de Navier-Stokes, las cuales son extremadamente complejas. Mediante métodos de volumen finito se transforma el problema de sistemas de ecuaciones diferenciales parciales en un problema de sistemas de ecuaciones lineales algebraicas, que se resuelven con técnicas iterativas para converger una solución a éstas ecuaciones.

1.3.2 Modelos Físicos

En la construcción de un modelo físico de un proceso o parte de un aspecto particular de un proceso se busca representar o modelar el sistema cambiando los materiales y dimensiones del reactor original para que el nuevo sistema experimental sea manejable, con el fin de hacer experimentos seguros y a bajo costo.

El principal objetivo de modelar físicamente un sistema es alcanzar una representación realista del mismo usando materiales y equipos tales que permitan mediciones convenientemente y de manera económica. Para lograr el realismo requerido se utilizan criterios de similitud.

Los modelos físicos sirven para estudiar dos aspectos de un proceso:

1. Modelos físicos rigurosos contruidos siguiendo reglas estrictas o criterios de similitud. Son escalados directamente, para describir algún aspecto particular de un sistema real.
2. Un enfoque alternativo podría ser estudiar con el modelo físico un sistema o parte de un sistema con el objetivo de proveer información para la construcción y validación de un modelo matemático.

Los principales criterios de similitud son:

- Similitud geométrica
- Similitud cinemática
- Similitud dinámica
- Similitud térmica

En la similitud geométrica se utiliza un factor de escalamiento que tiene que ser determinado para cada dimensión lineal, como por ejemplo, el diámetro T y la altura H de un tanque podrían escalarse en un modelo físico con dimensiones λT y λH , donde λ es el factor de escalamiento, con lo cual todas las dimensiones del sistema real o industrial guardan una relación fija con las dimensiones del modelo.

Las similitudes dinámicas son muy importantes en dinámica de fluidos debido a que equiparan las distintas fuerzas que promueven el movimiento de un fluido en el sistema real con las fuerzas presentes en el modelo. Las fuerzas que generalmente promueven flujo de fluidos son: inerciales, presión, viscosas, gravitacionales, de tensión superficial, boyantes, de arrastre, elásticas y electromagnéticas entre otras. La similitud de fuerzas entre el sistema real y el

modelo físico se logra a través de números adimensionales que resultan de la combinación de éstas fuerzas. En la Tabla 1.5 se presentan algunos de los principales números adimensionales que se utilizan en el estudio de procesos metalúrgicos y que incluyen a las distintas fuerzas promotoras de flujo.

Número	Fórmula	Cantidades que representa	Aplicaciones
Coeficiente de arrastre, C_D	$\frac{g(\rho - \rho_f)L}{\rho\mu^2}$	$\frac{\text{fuerza gravitacional}}{\text{fuerza de inercia}}$	Sedimentación libre
Número de Froude, Fr	$\frac{\vec{V}^2}{gL}$	$\frac{\text{fuerza de inercia}}{\text{fuerza gravitacional}}$	Comportamiento de olas y superficie libre
Número de Froude modificado, Fr^*	$\frac{\rho_g\mu^2}{(\rho_l - \rho_g)gL}$	$\frac{\text{fuerza de inercia}}{\text{fuerza gravitacional}}$	Comportamiento de los fluidos de los sistemas de gas-liquido
Número de Reynolds, Re	$\frac{L\vec{V}\rho}{\mu}$	$\frac{\text{fuerza de inercia}}{\text{fuerza viscosa}}$	Flujo de fluidos
Número de Weber, We	$\frac{\rho L\vec{V}^2}{\sigma}$	$\frac{\text{fuerza de inercia}}{\text{fuerza de tensión superficial}}$	La formación de burbujas, la atomización de un jet liquido
Número de Prandtl, Pr	$\frac{Cp \cdot \mu}{k}$	$\frac{\text{viscosidad cinemática}}{\text{difusividad térmica}}$	Convección forzada y libre
Número de Schmidt, Sc	$\frac{\mu}{\rho D_{A-B}}$	$\frac{\text{viscosidad cinemática}}{\text{difusividad}}$	Transferencia de masa
Número de Sherwood, Sh	$\frac{k_d L}{D_{A-B}}$	$\frac{\text{transferencia total de masa}}{\text{difusividad molecular}}$	Convección forzada y libre

Tabla 1.5. Algunos números adimensionales útiles para el estudio de procesos metalúrgicos ^[4].

Debido a los diferentes fenómenos que involucran el proceso de desgasificación del rotor inyector y con el objetivo de establecer las condiciones en las que es más efectiva la remoción de hidrógeno, se han desarrollado diversos modelos físicos y matemáticos reportados en la literatura donde se simulan la dinámica de fluidos bifásica (líquido-burbujas de gas) del proceso. Además, con el avance computacional, la modelación matemática del sistema de reactores bifásicos se ha vuelto un camino viable para investigar y caracterizar en una escala completamente industrial de operaciones.

1.4 Revisión Bibliográfica

Debida a la importancia económica y técnica del proceso de desgasificación de aluminio con el rotor inyector, se han desarrollado diversas investigaciones de este complejo sistema, en cuyos estudios se han tomado en cuenta diversas suposiciones y técnicas de solución usando y proponiendo modelos físicos y matemáticos.

M. Jahoda, L. Tomásková y M. Mostek^[6], simularon un modelo computacional bifásico para predecir la homogenización del líquido en tanques agitados con rotor inyector y compararon los resultados numéricos con mediciones experimentales de homogenización. La experimentación se realizó en un reactor con baffles con un diámetro interno (T) de 0.29m y una configuración del experimento mostrada en la Figura 1.9.

En este caso, para medir las concentraciones de trazador se utilizó el método de conductividad. El conductímetro se colocó entre los baffles a una distancia de T/4 del fondo a una distancia T/20 de la pared. El volumen de trazador inyectado fue de 4 mL de NaCl saturada. El punto de inyección fue directamente sobre la superficie libre del líquido a una distancia horizontal T/4 de la pared del tanque opuesta a la sonda. Se midió conductividad y el tiempo de mezclado se definió cuando las concentraciones en el sistema caen adentro de la ventana de $\pm 5\%$ de la concentración de equilibrio.

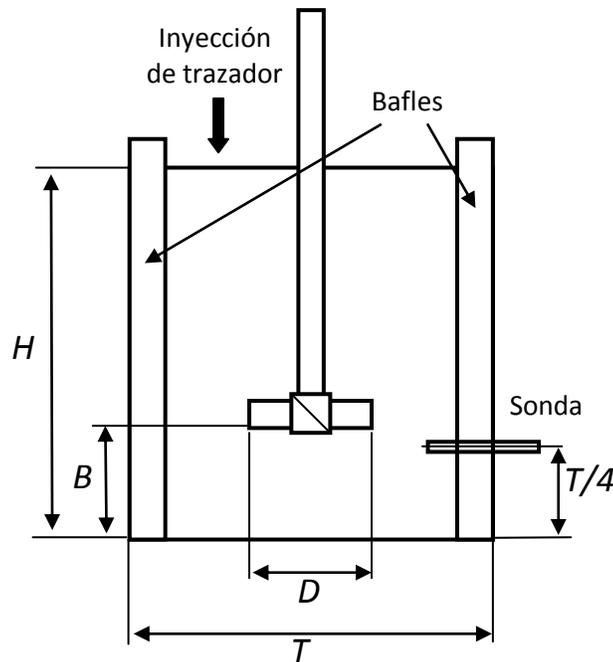


Figura 1.9. Configuración experimental utilizada en el trabajo de M. Jahoda. ^[6]

Los resultados obtenidos en el modelo CFD concordaron con los experimentales. La mejor concordancia experimental fue usando el modelo de malla móvil donde el mezclado se calculó con la dispersión del trazador dominada por la fluidinámica del sistema gas-líquido.

Autumn Fjeld, James W. Evans y D. Corleen Chesonis ^[7], desarrollaron dos modelos computacionales para simular la dinámica de fluidos de dos fases de un sistema de inyección de gas rotatorio para refinar aluminio con cloro. Se comparan los resultados con mediciones experimentales de burbujas usando una sonda de capacitancia, el cual detecta burbujas en el aluminio fundido. Utiliza primeramente un enfoque *Euleriano-Eueraino* para modelar la interacción multifásica tratándolas como una fase continua usando el concepto de fracción de volumen de fases en cada una de las celdas de una *grid* o malla computacional. Las ecuaciones de conservación de cantidad de movimiento y de masa se resuelven para cada fase y en la interfase se calculan intercambios de cantidad de movimiento y masa. Después, en otro modelo con un enfoque *Euleriano-Lagrangiano* se modeló la fase discreta (burbujas de gas) calculando sus trayectorias usando la segunda ley de Newton del movimiento.

Los resultados de la simulación se compararon con pruebas experimentales de prueba de sonda en una unidad industrial. Se hizo en lugares específicos del reactor y se reportó la frecuencia de burbuja detectada cada 2 y 3 min. La frecuencia de burbuja disminuye conforme aumenta la distancia. Estas tendencias se correlacionan con las simulaciones, que indican que hay una fracción de gas alta o gran número de burbujas cerca de la región del impulsor y que se obtienen mejores resultados asumiendo tamaños de burbujas de 10mm que de 1mm.

M. Maniruzzamana y M. Makhoulouf ^{[8],[9]}, desarrollaron un modelo matemático para simular el campo de flujo multifásico turbulento en el metal en un sistema industrial de desgasificado de aluminio, donde se calcula la remoción de hidrógeno y la remoción partículas indeseables considerando aglomeración. Se remueven partículas del metal mediante un gas inerte a través del impulsor rotatorio. La turbulencia ayuda a la aglomeración de partículas y el ascenso de las burbujas permite removerlas.

El modelo propuesto consiste en modelar la múltiple interacción de fases como dos subsistemas separados pero interdependientes.

Se resuelve una sola ecuación de conservación de cantidad de movimiento cuyas propiedades físicas cambian de acuerdo a un marcador que define la fracción de volumen de cada una de las dos fases (líquido y gas). Las ecuaciones turbulentas de conservación de cantidad de movimiento son complementadas empleando el *modelo de turbulencia k-ε* para calcular el grado de turbulencia en el sistema. Este modelo de turbulencia emplea el concepto de viscosidad de remolinos a través de calcular valores locales de la viscosidad turbulenta. Se hizo un análisis de varianza (ANOVA) para identificar el efecto de los principales parámetros del proceso en la varianza de la energía de disipación.

La velocidad de rotación es la principal variable del proceso. A mayor velocidad de rotación se disipa mayor energía en el baño. La rotación invertida tiene un efecto positivo en la eficiencia del proceso (estudiaron el sistema de rotación invertida introducido primeramente por Apoges. Inc. ^[8]).

Z. C. Hu, E. L. Zhang y S. Y. Zeng^[10], desarrollaron un modelo matemático para simular la remoción de hidrogeno de aleaciones de aluminio con el rotor inyector. Utilizaron un modelo físico agua/oxígeno para determinar el área total de burbujas del gas. Su modelo matemático fue descrito por las ecuaciones de balance masa globales (que tienen la forma de ecuaciones diferenciales ordinarias) y con los experimentos se estimaron los coeficientes de transferencia de masa y el área de las burbujas. El modelo es adecuado para predecir los efectos de las principales variables de proceso en la eficiencia de desgasificación y para determinar los parámetros de operación eficiente en la industria.

Un modelo polinomial cuadrático de eficiencia de desgasificación fue construido por Guofa Mi, Shouping Qi, Xiangyu Liu y Jitai Niu^[11], usando el método de regresión ortogonal. Se usó un simulador desarrollado por *Henan Polytechnic University and Harbin Institute of Technology*. Se realizaron experimentos en un modelo físico y utilizaron una video cámara para grabar los resultados de medición de pH. Papel pH e indicador fueron aplicados para evaluar la prueba. Un esquema del sistema experimental se presenta en la Figura 1.10.

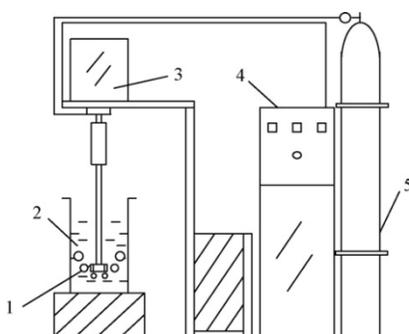


Figura 1.10. Diagrama esquemático de la configuración experimental. (1) Impulsor, (2) solución, (3) motor, (4) sección de control y (5) colector de aire. ^[11]

El material del tubo es un grafito con diámetro externo de 80mm, diámetro interno de 10mm y H=900mm. La distancia entre el impulsor y el fondo se fijó en 45mm. Agua destilada fue adicionada en el contenedor y NaOH fue disuelto en el agua. CO₂ fue inyectado en la solución

acuosa mientras un cronómetro se usó para grabar el tiempo del experimento de desgasificado.

Papel pH se usó para evaluar las variaciones en la solución, cuando se volvió acromático al valor de pH 7 se completó la prueba. Para garantizar que cada prueba tuviese condiciones idénticas, la cantidad de agua se fijó a 9 dm^3 y el NaOH se adicionó en 10g cada vez.

La regresión ortogonal, dio por resultado que las principales variables que afectan la cinética de desgasificado fueron la velocidad del impulsor y el flujo de alimentación de gas. Los parámetros óptimos del proceso de desgasificado fueron: velocidad de rotor de 374 rpm y un flujo de gas de $1.8 \text{ dm}^3/\text{min}$.

Jin L Song, Fabio Chiti, Waldemar Bujalski, Alvin W Nienow & Mark R Jolly^[12], compararon los procesos de la lanza y rotor inyector para la refinación del aluminio mediante un modelado físico y matemático. El modelo físico fue un tanque industrial a escala completa (altura de 65 cm, ancho de 25.4 cm y altura de 13.0 cm). Se usó aire para simular al Cl_2 y un impulsor de 5 aspas con una lanza sencilla. Se agregó $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ al agua yodada para ver el cambio de color. El tiempo de mezclado se midió con el cambio de color y el rotor se inclinó 45° rotando a 303 rpm. El parámetro para comprar los procesos simulados fue la energía disipada, ϵ . La modelación matemática se resolvió con los software CFD Flow-3D y CFX 5.6. Se resolvieron numéricamente las ecuaciones de continuidad y de conservación de cantidad de movimiento usando el modelo $k-\epsilon$ para representar la turbulencia en el sistema. Se fijó el diámetro de burbuja a 5mm. Se utilizó la técnica *MFR (Multiple Frame of Reference)* para la solución numérica y la técnica *PIV (Particle Image Velocimetry)* para medir las velocidades instantáneas en el modelo físico. El modelo matemático contempló la solución de una ecuación de conservación adicional para determinar el mezclado de un marcador o trazador en el agua. Se escogieron 5 puntos de monitoreo en el tanque para el modelo físico.

Las velocidades predichas con el modelo matemático concordaron bien con los resultados medidos con *PIV*, pero el tiempo de mezclado experimental fue 83.7s (menor que el tiempo

obtenido con la simulación numérica). Las simulaciones numéricas para aluminio líquido predicen menores velocidades que en agua, pero coinciden con los mismos patrones de flujo.

F. Scargiali, A. D’Orazio, F. Grisafiy A. Brucato^[13], simularon la hidrodinámica en tanques agitados con una propela rotatoria concerniente a datos experimentales de Bombac (1997) en tanques cilíndricos agitados con baffles.

Se realizó la simulación numérica construyendo una *grid* gruesa y otra fina subdividiendo el dominio en 2 subsistemas por el enfoque de malla móvil. Se usó el software CFD Ansys-CFX 4.4 para la solución de las ecuaciones de continuidad y las ecuaciones turbulentas de *Navier-Stokes* usando el marco *Euleriano* de referencia donde las ecuaciones de conservación se resuelven tanto para el líquido como para el gas. Partieron de condiciones de rotación de 100rpm para el rotor, a lo que le llamaron caso base, pero que en realidad supone una muy baja velocidad de rotación que difícilmente se encuentra en las industrias.

La distribución de fracción de gas o gas *hold up* fue bien predicha por el modelo. Hay una acumulación de gas debajo del impulsor. No se afectó la distribución predicha de gas *hold up* con la refinación de la malla, ver Figura 1.11.

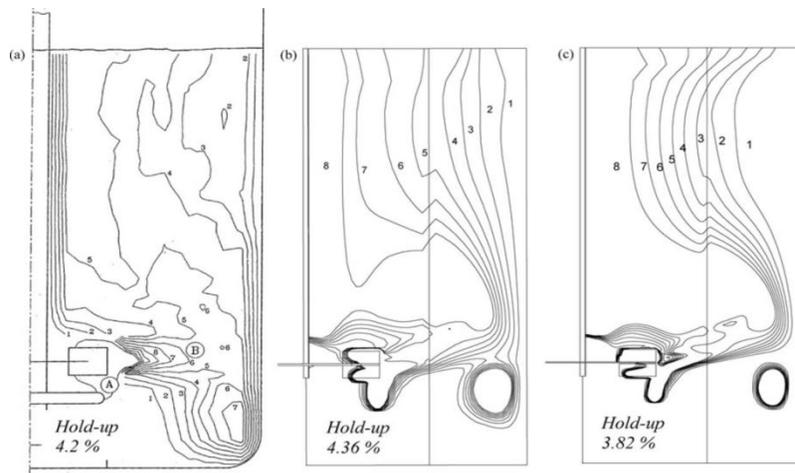


Figura 1.11. Distribución de fracciones de gas con un flujo de gas de $1.67 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$ y velocidad del rotor de 6.27rps. (a) Bombac *et al.* (1997). (b) Resultados de CFD con una malla gruesa. (c) Resultados de CFD con una malla fina. ^[13]

Capítulo 2. Modelación física y matemática

2.1 *Justificación y planteamiento del problema*

El aluminio compite con materiales de igual calidad y desempeño ya que se están generando avances en otros materiales para que sean más costeados. Consecuentemente los procesos para producción de aluminio tienen que ser estudiados, entendidos y optimizados para obtener los mejores parámetros de operación con el fin de que el aluminio sea un producto que cumpla con sus funciones y su manufactura sea rentable. Es así que uno de los problemas que se tiene con el aluminio fundido es la afinidad que tiene por el hidrógeno y los defectos que produce al solidificar en piezas terminadas. Por lo tanto, el proceso de desgasificado con rotor-inyector es de suma importancia para la industria de manufactura de éste metal. Particularmente el mezclado es un factor substancial asociado a la eficiencia del proceso ya que un buen mezclado acelera la cinética del desgasificado.

Debido a lo difícil que es estudiar los procesos en planta, se recurre a herramientas de estudio como son los modelos físicos y matemáticos los cuales son muy recurrentes para el estudio en la ingeniería de procesos metalúrgicos. Los modelos físicos mediante un adecuado escalamiento y con el cumplimiento de estrictos criterios de similitud geométrica, cinemática y dinámica, pueden ser usados para realizar mediciones y observaciones fáciles y económicas que en el proceso real de desgasificación de aluminio, pues en planta sería muy difícil medir las variables de proceso y la experimentación implicaría alto riesgo por las condiciones agresivas de operación y alto costo. Los modelos matemáticos en cambio, pueden llegar no solo a simular las condiciones experimentales de un modelo físico, sino que pueden llegar a simular casos con condiciones de operación de planta e inclusive proponer nuevas condiciones de trabajo para estudiar su efecto.

Es por estas razones que en el presente trabajo se recurre a estas herramientas de estudio para describir el fenómeno de mezclado para el proceso de desgasificado equipado con rotor-inyector y establecer los efectos de las principales variables de operación sobre los tiempos de mezclado.

2.2 Hipótesis

En las ollas de aluminio equipadas con el rotor inyector la minimización en el tiempo de mezclado debe corresponder con la maximización de la cinética de desgasificación. Una mayor agitación generará mayor turbulencia y consecuentemente un tiempo de homogenización menor ya que los patrones de flujo en el líquido y turbulencia del fluido gobiernan el transporte de masa y la uniformidad química del sistema. Los estudios cinéticos de mezclado en el sistema de desgasificado de aluminio con el rotor inyector pueden ser asistidos por la modelación física y matemática de procesos.

2.3 Objetivos

Esté trabajo tiene como principal objetivo determinar los tiempos de mezclado en un modelo físico de un sistema de desgasificado de aluminio equipado con el rotor inyector mediante la medición de un trazador añadido al baño y comprobar estos tiempos de mezclado calculándolos con el desarrollo de un modelo matemático riguroso que represente la fluidinámica del sistema bifásico líquido-burbujas.

Particularmente se pretende evaluar el efecto del flujo inyectado, velocidad de rotor, diseño de rotor y modo de inyección de gas sobre los tiempos de mezclado con los modelos y establecer las condiciones en que se obtiene la minimización del tiempo de mezclado.

2.4 Modelado físico

2.4.1 Preparación e instalación del modelo físico

El modelo físico fue construido en un trabajo previo con un factor de escalamiento $\lambda=1$ ($\lambda =$ diámetro característico del modelo/diámetro característico del reactor) ^[15], es decir, un modelo a escala completa de un reactor industrial de la empresa *Cooper Crouse-Hinds* similar al horno de la Figura 2.1. El modelo físico consiste en una base estructural de perfiles de acero, un soporte para la flecha y un soporte para el motor, un motor de $\frac{3}{4}$ HP, una flecha rotatoria con encordamiento hecha de un plástico conocido comercialmente como *Nylamid* con uniones enroscadas para los rotores hechos del mismo material. Los rotores considerados se muestran en la Figura 2.2, donde hay un rotor liso (ver Figura 3.2 b) que no es comercial y sirve como referencia de un rotor comercial diseñado por FOSECO (ver Figura 3.2 a), ambos de 17 cm de diámetro.



Figura 2.1. Reactor industrial semejante al que utiliza la empresa *Cooper Crouse-Hinds*.

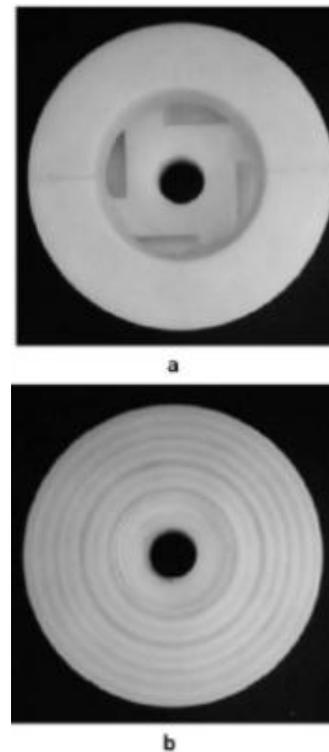


Figura 2.2. Rotores considerados en este trabajo; a) Rotor estándar y b) Rotor liso.

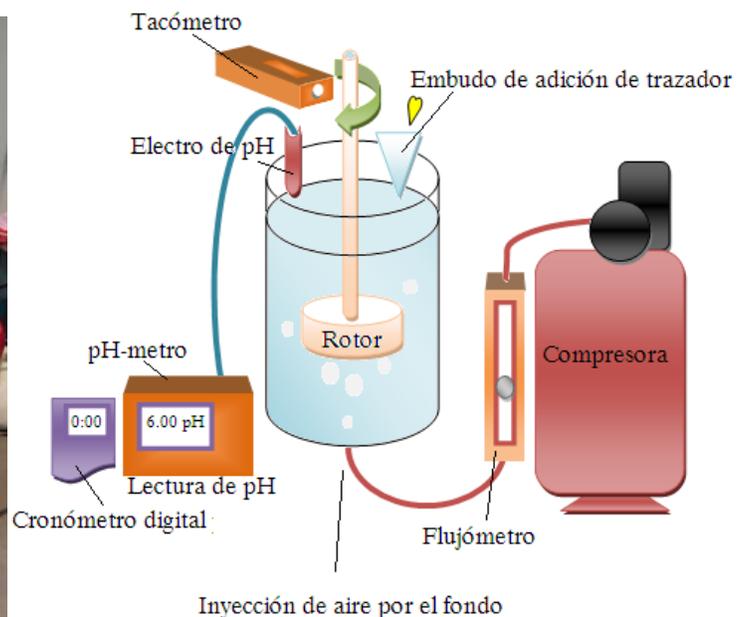
La olla es un cilíndrico de acrílico encaquetado con un cubo también de acrílico para evitar la distorsión visual del sistema transparente. Sus dimensiones son 50 cm de diámetro por 63 cm de altura. La olla cuenta con una entrada en el fondo para permitir la inyección de gas de purga por el fondo, mientras que una junta rotativa y la flecha hueca, descrita arriba, permiten la inyección de gas de manera convencional a través del rotor, que es de 5 cm de diámetro exterior y 0.5 cm de diámetro interno.

La Figura 2.3 a) muestra una fotografía de la instalación construida en un trabajo previo ^[15] para realizar los experimentos desarrollados, donde se aprecian los siguientes elementos en la foto: 1) electrodo para medir pH; 2) embudo de adición de trazador; 3) pH-metro; 4) cronómetro digital; 5) motor; 6) flecha; 7) rotor; 8) compresora; 9) conexiones rápidas de gas; 10) reactor lleno de agua hasta los 50 cm de altura (100 L de agua destilada); 11) video cámara y 12) flujómetro.

También se utilizó un tacómetro para medir la velocidad angular del rotor y un flujómetro para regular el flujo de gas inyectado. El esquema de la Figura 2.3 b) presenta la instalación simplificada de equipos y accesorios utilizada en la experimentación.



a)



b)

Figura 2.3. Instalación para los experimentos desarrollados en el modelo físico (a) y esquema de las conexiones utilizadas ejemplificando la inyección de aire por el fondo (b).

2.4.2 *Diseño experimental*

Los parámetros que se variaron fueron el tipo de rotor, la velocidad del rotor, el flujo y el punto de inyección de gas. Se evaluaron dos tipos de rotores, uno liso y uno industrial que se le llamó estándar (abreviado como STD). Se usaron dos velocidades de rotación, una alta y otra baja (300 y 583 rpm respectivamente); el flujo de gas se evaluó para tres cantidades de gas inyectado, 0, 20 y 40 L/min; y se variaron dos puntos de inyección, la convencional a través del rotor y que pasa por la flecha, y una nueva forma de inyección de gas (propuesta por este grupo de la UNAM) denominada inyección Novel que consiste en introducir el gas por el fondo del reactor. Es importante mencionar que aunque también la altura del rotor es una variable importante debido a que afecta el tiempo de residencia de las burbujas ^[15], ésta se dejó fija a una altura de 15 cm del fondo.

La experimentación consistió en medir el tiempo de mezclado de un trazador inyectado al fluido cuando el sistema está en funcionamiento con las condiciones de operación definidas y se ha establecido un patrón desarrollado de flujo de fluidos. La Tabla 2.1 muestra la matriz de experimentos realizados con cada uno de los valores asignados a cada variable y una representación abreviada de la configuración experimental para un posterior manejo de resultados.

Para cada experimento se realizaron tres réplicas para determinar el error experimental y estimar la reproducibilidad de las mediciones, las cuales fueron grabadas en video para dar seguimiento al mezclado del trazador, con la evolución pH con el tiempo. Los tiempos de medición variaron en cada corrida en función del tiempo en que se alcanzó el equilibrio con una variación ± 0.01 en pH por 60 segundos consecutivos.

El trazador utilizado fue NaOH 0.5 M, y se añadió por la parte superior del reactor a una distancia 22.5 cm de la pared del reactor. Algunos trabajos reportados lo realizan de la misma manera ^[6]. El volumen de trazador añadido fue de 10 mL, diseñado para poder tener lecturas detectables de pH y controlar la concentración sin modificar significativamente el volumen total de líquido. El

volumen de agua en el cilindro es 10^3 veces mayor al volumen añadido de trazador. El volumen añadido se tomó con una pipeta de 10 mL y se vertió a un embudo para dosificar controladamente la velocidad de la adición del trazador al agua.

Experimento	Diseño de rotor	rpm	L/min	Tipo de inyección	Abreviación
1	Liso	300	0	Sin gas	LISO300SINF
2	Liso	300	20	Convencional	LISO30020C
3	Liso	300	20	Novel	LISO30020N
4	Liso	300	40	Convencional	LISO30040C
5	Liso	300	40	Novel	LISO30040N
6	Liso	583	0	Sin gas	LISO583SINF
7	Liso	583	20	Convencional	LISO58320C
8	Liso	583	20	Novel	LISO58320N
9	Liso	583	40	Convencional	LISO58340C
10	Liso	583	40	Novel	LISO58340N
11	STD	300	0	Sin gas	STD300SINF
12	STD	300	20	Convencional	STD30020C
13	STD	300	20	Novel	STD30020N
14	STD	300	40	Convencional	STD30040C
15	STD	300	40	Novel	STD30040N
16	STD	583	0	Sin gas	STD583SINF
17	STD	583	20	Convencional	STD58320C
18	STD	583	20	Novel	STD58320N
19	STD	583	40	Convencional	STD58340C
20	STD	583	40	Novel	STD58340N

Tabla 2.1 Matriz experimental con sus respectivas condiciones de operación y correspondiente abreviación experimental.

Al final de cada experimento se retornó al pH inicial con soluciones de HCl con concentraciones 1.0 y 0.5 molar para evitar el desperdicio de agua destilada. La reacción que ocurre con el NaOH es de neutralización dando como productos agua y NaCl en solución. El poco volumen empleado de estos reactivos y el cambio continuo de agua destilada evitaron que la densidad del agua variase apreciablemente por el incremento en el contenido de sal, lo cual pudo dar resultados no realistas.

El pH-metro se colocó a una distancia de 5 cm de la pared del reactor para evitar el menor contacto con el vórtice que se forma y evitar romperlo. Se colocó en una posición vertical para ayudar a la reproducibilidad de experimentos y garantizar una mejor lectura de datos, pues ponerlo en forma inclinada disminuye el rompimiento del vórtice que se forma a altas revoluciones del rotor, pero causa una dificultad de reproducibilidad en la medición de pH. Al inclinar la posición del electrodo se alteran los tiempos de mezclado debido a que en las zonas aledañas a este, el fluido está estancado y nuclea burbujas pequeñas de aire que afectan las lecturas de pH, lo cual en ocasiones ocurrió y como se verá en la sección de resultados produjo dispersión en las mediciones hechas por triplicado bajo las mismas condiciones de operación.

El tiempo se comienza a medir desde el instante en que se añade el trazador. El electrodo de pH se colocó a una distancia angular de $\frac{3}{8}$ de circunferencia del punto de adición del NaOH y dependiendo del vórtice formado por altas revoluciones, se ajustó a una profundidad de 4 a 5 cm, la cual es una profundidad recomendable para una lectura adecuada. Estos puntos se fijaron para los experimentos y no se evaluó su efecto en el tiempo de mezclado.

Debido a la sensibilidad del electrodo a los iones sodio para medir pH, se utiliza agua destilada y al no cambiar el agua, las lecturas de concentración equilibrio aumentan en valores de pH, por lo que hay que cambiar regularmente el agua después de tener lecturas muy alejadas a la concentración de equilibrio teórica.

La similitud cinemática no se cumple al cien por ciento debido a que la viscosidad cinemática del agua, es solo parecida a la del aluminio líquido a la temperatura de proceso pero no es igual. Sin embargo, se reportan varios trabajos con agua para simular el aluminio líquido y aleaciones por su

conveniencia. La similitud dinámica se satisface escalando las fuerzas que promueven el movimiento en el líquido al igualar, tanto en el modelo como en el reactor industrial, los números adimensionales de Reynolds y de Froude, los cuales representan los cocientes entre fuerzas inerciales y viscosas así como fuerzas inerciales y gravitacionales, respectivamente.

2.5 Planteamiento del modelado matemático

2.5.1 Suposiciones y consideraciones

El modelado matemático que describe el comportamiento del fluido en el sistema se preside por las ecuaciones de Navier-Stokes. Para estudiar la agitación mecánica y la homogenización en el proceso se tienen que establecer suposiciones para simplificar el problema y así alcanzar una solución. Esto se debe a la naturaleza del sistema que se presenta en este trabajo el cual es dependiente del tiempo, es bifásico (líquido-gas), tridimensional y de régimen turbulento siendo así un problema muy complejo. Las simplificaciones y consideraciones que se tomaron en cuenta son las siguientes:

- Propiedades físicas constantes para ambas fases, implicado al líquido como fluido newtoniano e incompresible.
- Se considera al líquido como fase continua y al gas como fase dispersa. Se considera al gas en forma de burbujas esféricas rígidas de tamaño constante de 5 mm.
- La turbulencia se representa por el *modelo estándar de turbulencia k-ε* para la fase líquida.
- Baño isotérmico, despreciando calentamiento por fricción y posibles gradientes térmicos.
- Se utiliza un coeficiente interfacial de fricción para describir a la fuerza de arrastre las burbujas ejercen sobre el líquido.
- Impermeabilidad y no deslizamiento son considerados tanto en las paredes y fondo del recipiente como en la flecha y rotor.
- Condiciones cíclicas en π radianes del reactor.

Las consecuencias de tomar simplificaciones en el modelo son que no se puede tener una solución exacta a la realidad, pero sí una solución aproximada realista que prediga los comportamientos del proceso.

2.5.2 Ecuaciones gobernantes

Basándose en las consideraciones anteriores y al tratarse de un flujo bifásico de dinámica de fluidos, las ecuaciones gobernantes se consideran desde un marco *Euleriano-Euleriano* y deben resolverse para cada fase para el sistema en coordenadas cilíndricas, debido a esto, las fracciones de volumen (R_g y R_l) de cada fase ocupan completamente todo el espacio disponible, la suma de éstas da la unidad (Ec. 2.1).

$$R_l + R_g = 1 \quad (\text{Ec. 2.1})$$

Como se mencionó anteriormente, las ecuaciones de continuidad y ecuaciones de momentum turbulentas de Navier-Stokes son las que describen completamente la dinámica de fluidos del sistema. A continuación se presentan las ecuaciones diferenciales de continuidad y movimiento respectivamente:

$$\frac{\partial(R_i\rho_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (R_i\rho_i\vec{V}_i) - \nabla \cdot (\rho_i\Gamma_{R_i}\nabla R_i) = 0 \quad (\text{Ec. 2.2})$$

$$\frac{\partial(R_i\rho_i\vec{V}_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (R_i\rho_i\vec{V}_i\vec{V}_i) - \nabla \cdot (R_i\Gamma_{\vec{V}_i}\nabla\vec{V}_i) - \nabla \cdot (\vec{V}_i\Gamma_{R_i}\nabla R_i) = R_i\nabla P_i + R_i\rho_i\vec{g} + F_{fricc} \quad (\text{Ec. 2.3})$$

La de continuidad (Ec. 2.2) representan la conservación de materia mediante un balance de masa, donde R_i es la fracción de volumen de cada fase y el subíndice "i" especifica a la fase líquida con $i = 1$, ó a la fase gaseosa para $i = 2$; ρ_i corresponde a la densidad de fase y \vec{V}_i es el vector de velocidad. El primer término de la ecuación representa el termino transitorio, el segundo corresponde al termino convectivo y el tercero es el difusivo de fase, caracterizado por el coeficiente de difusión turbulenta para la fase i (Γ_{R_i}), el cual modela la dispersión turbulenta de la fase discreta en la fase continua mediante mecanismos turbulentos.

Las ecuaciones de movimiento de Navier-Stokes describen un balance de flujo de cantidad de movimiento o balance de fuerzas que se realiza por componente sobre un volumen de control diferencial en cualquier instante de tiempo (Ec. 2.3). En los términos del lado derecho de la ecuación, el primero se refiere al término transitorio que establece la dependencia del tiempo; el segundo término es el convectivo; el tercero es difusivo de la fase "i" que constituye el transporte causado por la dispersión turbulenta de la fase misma caracterizada por el término $\Gamma_{\vec{v}_i}$; y el último término es difusivo en el interior de la fase misma y difusión turbulenta presente en la fase misma, definido por el coeficiente Γ_{R_i} . Del lado derecho se encuentran los términos de gradiente de presión (P_i es presión), fuerza de gravedad donde \vec{g} es el vector de gravedad solo con componente en z y valor de -9.8m/s^2 ; y el último es el término fuente de intercambio de cantidad de movimiento entre ambas fases (Ec. 2.4). El término fuente (F_{fricc}) representa la fricción y el arrastre entre las fases y está en función de un coeficiente de arrastre interfacial C_f , involucrando implícitamente al coeficiente de arrastre de partícula C_D .

$$F_{fricc} = C_f(\vec{V}_i - \vec{V}_j) \quad (\text{Ec. 2.4})$$

En el término difusivo al interior de la fase, el coeficiente difusivo $\Gamma_{\vec{v}_i}$ representa a la viscosidad molecular para la fase gaseosa, μ_g , y para la fase líquida representa una viscosidad efectiva representada como μ_{eff} y se define en la siguiente ecuación:

$$\mu_{eff} = \mu_l + \mu_t \quad (\text{Ec. 2.5})$$

$$\mu_t = \frac{C_\mu \rho_l k^2}{\varepsilon} \quad (\text{Ec. 2.6})$$

En donde μ_l es la viscosidad molecular del líquido y μ_t es la viscosidad turbulenta, definida por la Ecuación 2.6, la cual depende de dos cantidades que varían localmente: energía cinética turbulenta k y su rapidez de disipación ε , las cuales se estiman con el *Modelo Estándar de Turbulencia k-ε*. El modelo de turbulencia consiste de dos ecuaciones diferenciales parciales provenientes de un balance de energía cinética turbulenta (k) y de su rapidez de disipación (ε) y de cinco constantes determinadas empíricamente (Tabla 2.2). Las ecuaciones de balance de k y de ε se expresan mediante las siguientes ecuaciones diferenciales parciales:

$$\frac{\partial(\rho_l k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \vec{V}_l k) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_k} \nabla k \right) + R_l \rho_l (G - \varepsilon) \quad (\text{Ec. 2.7})$$

$$\frac{\partial(\rho_l \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l \vec{V}_l \varepsilon) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + R_l \rho_l \frac{\varepsilon}{k} (C_1 G - C_2 \varepsilon) \quad (\text{Ec. 2.8})$$

El término G de las Ecuaciones 2.7 y 2.8 se refiere a la generación de energía cinética turbulenta determinada como:

$$G = \mu_t \left\{ \left(\frac{\partial v_{z,l}}{\partial r} + \frac{\partial v_{r,l}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{z,l}}{\partial \theta} + \frac{\partial v_{\theta,l}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{r,l}}{\partial \theta} + \frac{\partial v_{\theta,l}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left[\left(\frac{\partial v_{z,l}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{r,l}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial v_{\theta,l}}{\partial \theta} \right)^2 \right] \right\} \quad (\text{Ec. 2.8})$$

Completando el modelo de turbulencia, las constantes empíricas referidas en el modelo se muestran en la Tabla 2.2.

C_μ	C_1	C_2	σ_ε	σ_k
0.09	1.44	1.92	1.3	1.0

Tabla 2.2. Constantes empíricas utilizadas en el *modelo de turbulencia k-ε*.

Para predecir los tiempos de mezclado, se tiene que resolver la ecuación de conservación de la especie química que representa al soluto, C , que es la fracción masa de la concentración del trazador añadido en fase líquida. La dispersión del trazador está gobernada por la ecuación de conservación de especies químicas, mediante la siguiente ecuación:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{V}_l C) = \nabla \cdot (D_{C,l} \nabla C) + \nabla \cdot \left(\frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla C \right) \quad (\text{Ec. 2.9})$$

El primer término es el transitorio seguido del termino convectivo. Del lado derecho se encuentran los términos difusivos que representan el mezclado molecular y turbulento presentes en la fase en donde $D_{C,l}$ es el coeficiente de difusión molecular del trazador en la fase líquida y Sc_t es número de Schmidt turbulento tomándolo con un valor de 0.36 para este trabajo.

2.5.3 Condiciones de frontera e iniciales

Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales parciales que describe la física del problema de mezclado, se requieren de condiciones de frontera adecuadas para llegar a la solución particular del problema. La Figura 2.3 describe gráficamente las fronteras del sistema mientras que en la Tabla 2.3 se listan las ecuaciones que representan las condiciones de frontera que básicamente expresan impermeabilidad y no deslizamiento de fluido en todas las paredes sólidas (incluyendo el rotor y la flecha), así como condiciones cíclicas en dirección acimutal y en la superficie libre no se permite flujo de líquido pero si de gas. Además de que no hay corte por la atmosfera arriba del baño. Asimismo, en el punto de inyección de gas, entra gas con una velocidad definida por el flujo de gas usado.

Para el cálculo de mezclado que se corrió en estado transitorio, las condiciones iniciales son un patrón de flujo desarrollado en estado estable (velocidades, fracciones de cada fase y variables turbulentas) y concentración cero del trazador en toda la olla excepto en el punto de inyección donde se agrega la masa añadida de NaOH.

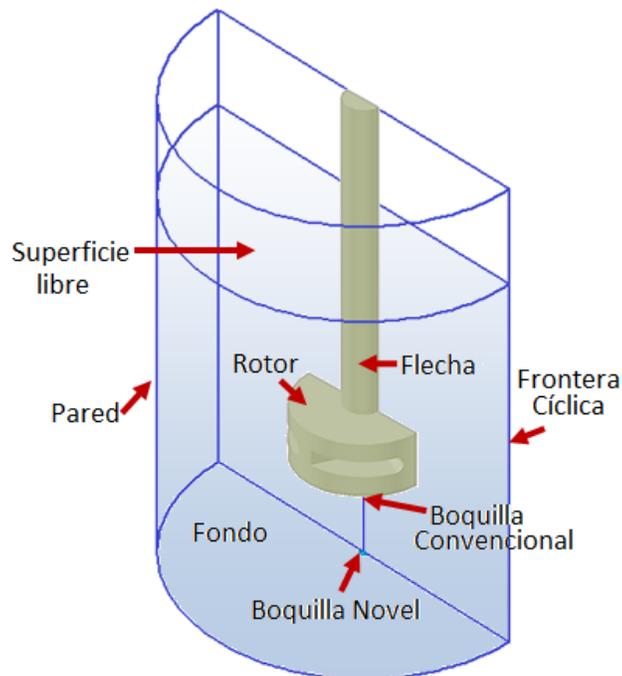


Figura 2.3. Esquema de las condiciones de frontera en el sistema.

Variable	Flecha	Rotor	Pared	Fondo	Boquilla Convencional	Boquilla Novel	Superficie libre	Frontera Cíclica
$V_{r,l}$	0	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{r,l}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{r,l}}{\partial \theta} = 0$
$V_{r,g}$	0	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{r,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{r,g}}{\partial \theta} = 0$
$V_{\theta,l}$	V_{flecha}	V_{rotor}	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial \theta} = 0$
$V_{\theta,g}$	V_{flecha}	V_{rotor}	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{\theta,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{\theta,g}}{\partial \theta} = 0$
$V_{z,l}$	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{z,l}}{\partial \theta} = 0$
$V_{z,g}$	0	0	0	0	$\frac{-Q_{gas}}{A_{boquilla}}$	$\frac{Q_{gas}}{A_{boquilla}}$	$\frac{\partial V_{z,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{z,g}}{\partial \theta} = 0$
R_l	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial z} = 0$	0	0	0	$\frac{\partial R_l}{\partial \theta} = 0$
R_g	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$	1	1	1	$\frac{\partial R_g}{\partial \theta} = 0$
k	0	0	0*	0*	k_{ini}	k_{ini}	$\frac{\partial k}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial k}{\partial \theta} = 0$
ε	0	0	0*	0*	ε_{ini}	ε_{ini}	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial \theta} = 0$

Tabla 2.3. Resumen de las condiciones de frontera (*función pared).

2.5.4 Propiedades físicas de los fluidos utilizados

Las propiedades físicas de la fase líquida, la fase gas y del trazador son requeridas para la descripción del fenómeno físico. Todos los valores se tomaron a una presión de 101325.0 Pa y a una temperatura de 20°C (condiciones a las cuales se realizaron los experimentos) y son presentados en la Tabla 2.4.

Propiedad	Densidad ρ [kg/m ³]	Viscosidad μ [kg/m·s]	Viscosidad cinemática ν [m ² /s]
Líquido (Agua)	998.23	1.0042x10 ⁻³	1.006x10 ⁻⁶
Gas (Aire)	1.189	1.846x10 ⁻⁵	1.553x10 ⁻⁵
Propiedad	Coeficiente de difusión $D_{c,l}$ [m ² /s]		Número de Schmidt laminar $Sc = \nu_l/D_{c,l}$
Trazador (NaOH en Agua a 20°C)	1.51x10 ⁻⁹		665.0

Tabla 2.4. Propiedades de las fases utilizadas en el modelo. ^{[19], [20]}

2.6 Solución numérica al modelo matemático

2.6.1 Breve descripción de PHOENICS CFD ^[20]

Debido a la enorme complejidad que representa resolver el sistema de ecuaciones diferenciales parciales del modelo matemático, se utiliza la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés) como herramienta para obtener las soluciones numéricas del sistema. *PHOENICS* 2009 fue la aplicación CFD utilizada para la resolución del problema.

PHOENICS (*Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code Series*) es el principal producto de la compañía de software de ingeniería *CHAM Ltd.* (*Concentration Heat and Momentum*) y está escrito en lenguaje de programación *Fortran*. Al igual que otras aplicaciones CFD, consiste en resolver ecuaciones de conservación mediante la técnica de volumen finito, que radica en discretizar el volumen del dominio en un número de partes finitas generando ecuaciones algebraicas que son obtenidas por la integración de las ecuaciones de balance en cada elemento de volumen y se resuelven por medio de métodos numéricos iterativos. Los componentes del software *PHOENICS* son tres módulos principales:

1. *Satellite* (Pre-procesador). Prepara los datos de entrada para la simulación traduciendo las instrucciones que el usuario provee mediante la escritura de un archivo llamado *Q1* para que lo use el programa que da solución, llamado *Earth*. El archivo *Q1* se crea mediante lenguaje *PIL (Phoenicis Input Language)* o también por medio un sistema de menú gráfico (*Editor VR*). *Satellite* crea el archivo *EARDAT*.
2. *Earth* (Módulo de solución). Lee el archivo *EARDAT* y ejecuta la solución de los sistemas de ecuaciones algebraicas con métodos iterativos. Una vez alcanzada la convergencia (obtenido el resultado) genera archivos de salida llamados *RESULT* y *PHI*, que puede ser desplegado para obtener gráficas de contornos de vectores en post procesador llamado *Photon*. Una opción de comunicación entre *Q1* y *Earth*, son las subrutinas creadas por el usuario para especificaciones de problemas complejos mediante un archivo en Fortran llamado *GROUND*.
3. *Photon* (Pos-procesador). Es un programa gráfico donde se despliegan los resultados de la simulación leyendo los archivos *PHI* creados por *Earth*.

Los ajustes en algunos parámetros numéricos son de gran importancia para llegar a resolver los problemas con CFD y entre los más importantes se encuentran las siguientes consideraciones:

- Discretización del dominio. La generación de una malla que tenga suficientes elementos de volumen es de gran importancia para tener una solución aproximada lo más realista posible. En *PHOENICS* se puede discretizar un dominio en coordenadas cartesianas, cilíndricas o ajustadas al cuerpo (*BFC*).
- Número de iteraciones. Los métodos numéricos son iterativos y las iteraciones son ciclos repetidos de cálculo que son necesarios para alcanzar una convergencia por debajo de un porcentaje de error establecido.
- Factores de relajación. En el proceso iterativo se corre el riesgo de la no convergencia causada por cambios bruscos en los valores de la variables provocadas por no linealidades presentes en el sistema de ecuaciones, por lo que un factor de relajación hace que la convergencia se alcance más lentamente y de manera estable pero con un mayor número de iteraciones.

- Esquema numérico convectivo. Entre las caras de cada volumen de control existe una diferencia entre los valores de una variable cuando cruza un fluido, por lo que un esquema de convección puede asignar el valor de un elemento de volumen contrario a la dirección de flujo. A este esquema se le conoce como esquema lineal “corriente arriba” (*UPWIND*). La desventaja de este esquema convectivo es que en las discontinuidades entre fluidos se presenta un fenómeno que se conoce como difusividad numérica o “difusión falsa” por lo que se pueden usar otros esquemas no lineales como el *Super Bee (SUPBEE)* que minimiza el inconveniente numérico de la difusión falsa.

2.6.2 Algoritmos de PHOENICIS manejados ^[20]

La naturaleza bifásica del proceso lleva a la utilización del algoritmo *IPSA (Inter-Phase-Slip Algorithm)* dentro de los algoritmos de cálculo del software. El algoritmo implica la solución completa de las ecuaciones de Navier-Stokes para cada fase y toma en cuenta la forma de calcular la fricción entre las fases y coeficiente de arrastre entre ellas según el término fuente de la ecuación de conservación de cantidad de movimiento (*CFIPS* en lenguaje *PIL*). Este esquema permite predecir la dispersión de la fase gaseosa en la fase líquida.

Por otro lado, también se manejó el método de *donor-acceptor (DONACC)* el cual es adecuado para la distinción de interfase continua entre líquido y gas y predice la deformación de la interfase como durante la formación de un vórtice o el ascenso de una burbuja en el líquido. En otras palabras, se encarga de predecir la deformación de las interfases en el transcurso del tiempo.

Se activaron los *modelos de turbulencia k-ε estándar* y con ello el uso de *funciones-pared*, que son necesarias debido a que en un flujo con régimen turbulento, como el de este sistema, el fluido cercano a la pared estática tendrá velocidades cercanas a cero por la condición de no deslizamiento, es decir, su régimen será laminar. Entonces, las funciones pared sirven para extrapolar el seno del fluido de naturaleza turbulenta con una capa cercana a las paredes estáticas de naturaleza laminar empleando formulas empíricas para realizar la extrapolación de las velocidades del fluido entre estas zonas.

2.6.3 Discretización

El dominio del sistema está considerado en coordenadas cilíndricas y se compone por las mismas dimensiones que el modelo físico para las componentes z y r (63 cm de altura y 50 cm de diámetro). La dimensión angular consta de media circunferencia (π radianes) debido a la simetría que presenta el sistema considerando la geometría del rotor. El tiempo total en que se realizaron las simulaciones fueron 210.0 segundos de tiempo real, distribuyendo 60.0 segundos a la agitación mecánica, 60.0 de agitación e inyección de gas y 90 segundos al mezclado. La discretización de cada dimensión se realizó con la subdivisión mostrada en la Tabla 2.5 para cada variable independiente, y con la malla geométrica mostrada en la Figura 2.4.

Se tuvieron un total de 80,000 elementos de volumen. En la Figura 2.4 se presenta un esquema desde dos perspectivas para apreciar la distribución de nodos en cada componente, donde se ve una malla en una vista superior de la olla (Figura 2.4a) y también una vista lateral de la misma (Figura 2.4b). Esta discretización se eligió porque los resultados obtenidos no diferenciaban mucho con los resultados de tiempo de mezclado para una malla con el doble de nodos y los tiempos de cómputo no eran tan prolongados, siendo de 30 horas por cada simulación con esta malla.

Componente	Dimensión	Número de particiones
θ	π radianes	20
r	0.25 m	40
z	0.63 m	100
t	210.0* s	2100*

Tabla 2.5. Discretización del dominio por cada variable independiente.

(*Distribuido en tiempo de agitación, inyección de gas y mezclado).

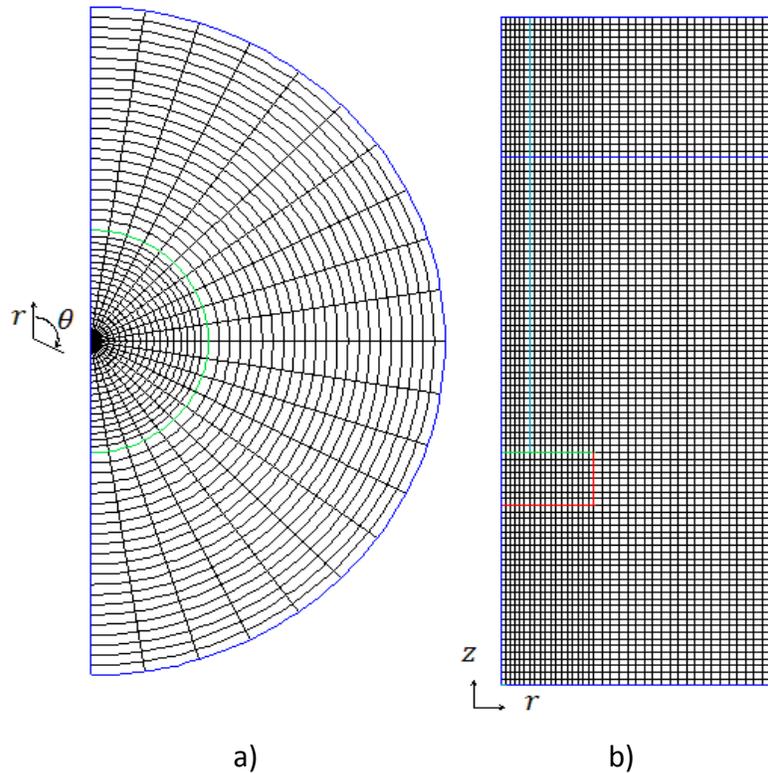


Figura 2.4. Esquema de la discretización del dominio usado en *PHOENICIS* con su respectivo origen coordenado. a) Plano $r - \theta$ de la malla; b) plano $r - z$ de la malla.

2.6.4 Consideraciones numéricas

Dentro de las consideraciones numéricas en la obtención de los patrones de flujo en estado transitorio se tomaron 50 iteraciones por cada paso de tiempo siendo cada uno de 0.1 segundos. Los factores de relajación para las velocidades de las fases líquida y gas se fijaron a 5×10^{-4} y 1×10^{-4} respectivamente, para la presión de 0.05 y para las fracciones de volumen y las dos variables de turbulencia (k y ϵ) se usaron factores de relajación de 0.1. En cambio para la simulación del mezclado, el número de iteraciones se redujo a 20 por cada paso de tiempo y los factores de relajación se redefinieron a 1×10^{-20} para todas las variables excepto la variable del trazador que se dejó en 0.5, esto para garantizar el estado estable en los patrones de flujo (que no cambiaran los patrones de flujo) y así reducir los tiempos de cómputo. El esquema numérico que se utilizó para estimar los términos convectivos fue *SUPBEE* (esquema numérico no lineal) para todas las variables.

2.6.5 Simulación de las corridas

Cada corrida se realizó con la misma configuración del modelo físico: dimensiones, flujos, punto de inyección y lectura de trazador. La manera en que se introdujeron las instrucciones al archivo *Q1* fue mediante *Editor VR* en combinación con lenguaje *PIL*. Un ejemplo de un archivo *Q1* desarrollado en esta tesis se presenta en el Anexo 1.

Como se mencionó anteriormente, inicialmente se calculó la fluidinámica del sistema en estado transitorio hasta alcanzar cierta estabilidad de los patrones de flujo dando los tiempos de agitación mecánica e inyección ya mencionados. Después se simuló el mezclado considerando que el campo de flujos alcanzados previamente estuviese en estado estable, mientras que la solución de la fracción masa del trazador se solventó en estado transitorio introduciendo una subrutina escrita en lenguaje *Fortran* dentro del archivo *GROUND* que registra la evolución del trazador (ver Anexo 2).

Capítulo 3. Resultados

3.1 Observaciones en modelo físico

En la Figura 3.1 se muestran todos los experimentos realizados tal como se apreciaron en el modelo físico cuando alcanzaron condición de flujo desarrollado. Para las corridas sin flujo de gas se aprecia la formación del vórtice, el cual es más pronunciado para altas revoluciones de rotor y comparando las dimensiones que se obtienen con el rotor estándar, los vórtices formados con el rotor liso son mucho más pequeños. Respecto al tamaño de burbuja, aunque no se puede determinar cuantitativamente el tamaño de las burbujas, sino que solo se pudo determinar de manera aproximada al comparar las imágenes entre los diferentes experimentos, hay una clara diferencia de los tamaños de burbuja generados entre el rotor estándar y el liso. Las burbujas con el rotor liso son mucho más grandes a bajas revoluciones y aún más a menores flujos con inyección convencional, además hay muy poca dispersión de las burbujas en el volumen total del sistema. Sin embargo, a revoluciones de 583 rpm y flujos de 40 L/min hay un mayor esparcimiento y menor tamaño de burbuja sin que haya una diferencia apreciable de tamaños en función de la forma de introducción del gas.

Para las corridas con rotor estándar y altas revoluciones se logra apreciar los tamaños de burbujas más finas y bien dispersas en todo el baño, en especial el experimento 20 en donde el rotor se ve prácticamente envuelto en burbujas. En estos casos (Figura 3.1, experimentos 17-20) no se distingue ninguna diferencia variando el punto de inyección de gas.

Conforme se aumenta las revoluciones es notable una formación de un vórtice más pronunciado y en caso del rotor estándar es aún mayor esta notoriedad. El efecto que tiene el punto de inyección del gas sobre la formación del vórtice no es muy apreciable con el rotor estándar ni a altas velocidades de rotor, solo para los arreglos con rotor liso y 300 rpm se hace evidente una inhibición del vórtice causado por el ascenso de las burbujas que en este mismo caso son las de mayor tamaño y menor dispersión.

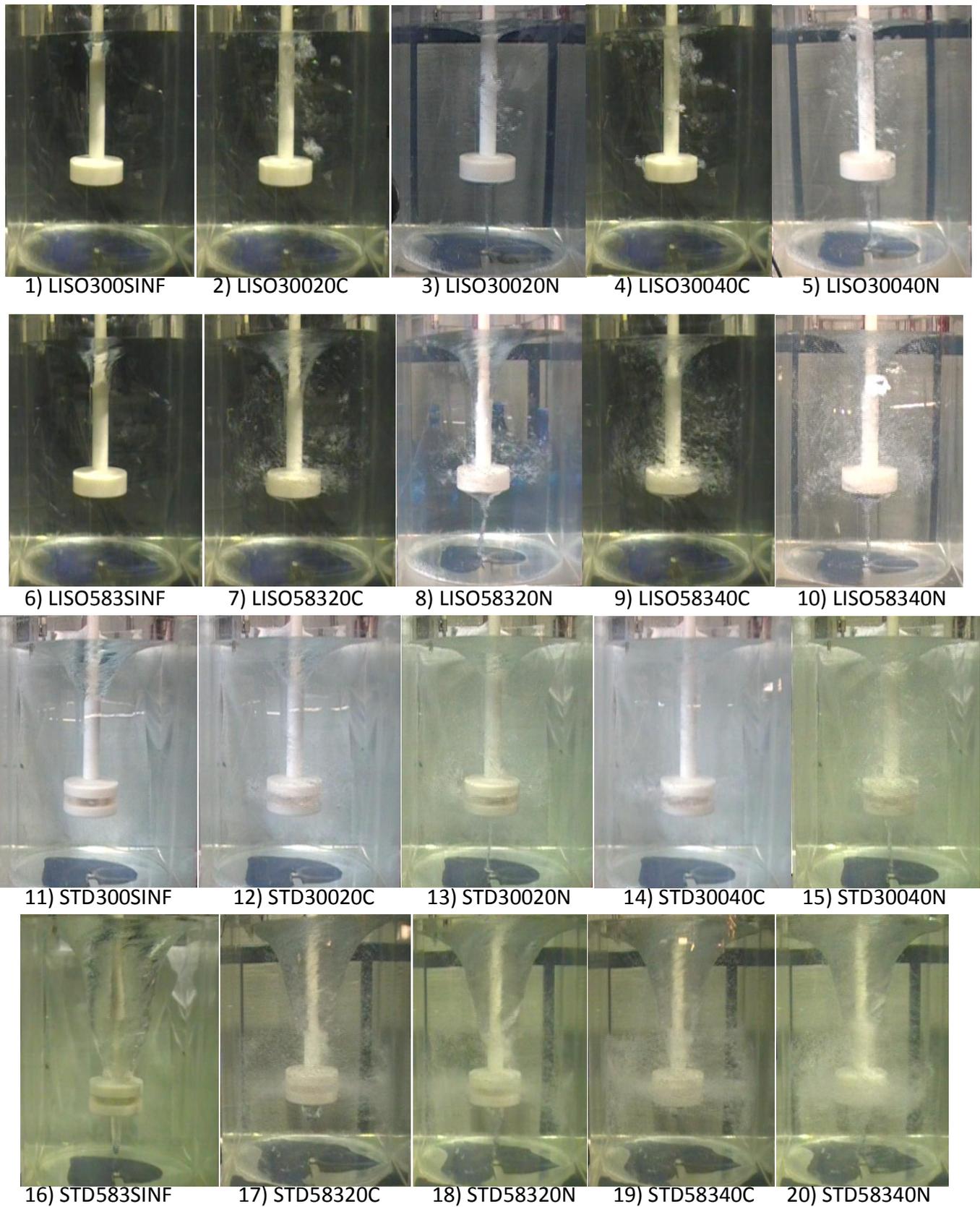


Figura 3.1. Visualización de las corridas realizadas, enumeradas según el experimento y con su respectiva configuración abreviada (ver Tabla 2.1).

3.2 Determinación de los tiempos de mezclado

En las siguientes figuras se ilustra la forma en que se determinaron los tiempos de mezclado en el modelo físico, utilizando una normalización de la concentración del trazador C^* , definida según la Ecuación 3.1 donde C es la concentración instantánea, C_0 es la concentración inicial y C_∞ es la concentración a la que se llega cuando se alcanza el equilibrio. Se utilizó un criterio del 95% de homogenizado en cada una de las corridas realizadas para cada configuración. En cada una de las gráficas de las Figuras 3.2 a la 3.5, la concentración normalizada de trazador se grafica contra el tiempo desde que se añadió el trazador (tiempo=0). Las tres curvas de cada gráfica representan la evolución de la concentración para cada réplica en los experimentos. La Figura 3.2 corresponde a las mediciones hechas con las condiciones asociadas al experimento 2 (ver Tabla 2.1), mientras que las Figuras 3.3, 3.4 y 3.5 corresponden a los casos de los experimentos 3, 10 y 15 respectivamente. En estas gráficas se presenta un acercamiento para observar mejor el rango de composiciones de interés y poder estimar con mayor exactitud el tiempo de mezclado. También se presentan líneas horizontales que representan la composición de equilibrio y la ventana que representa el rango de $\pm 5\%$ de acuerdo al criterio de mezclado del 95% explicado anteriormente.

$$C^* = \frac{C - C_0}{C_\infty - C_0} \quad (\text{Ec. 3.1})$$

En el caso del modelo matemático, los tiempos de mezclado se obtuvieron de forma casi exacta para el mismo criterio del 95% de homogenización ya que gracias a la subrutina empleada en *GROUND* se tiene el valor numérico de la concentración en cada nodo en cada incremento de tiempo (cada 0.1 s), por lo que resulta fácil comparar el criterio de mezclado en toda la olla cada paso de tiempo. Los resultados del tiempo de mezclado se muestran en la Tabla 3.1. Para cada experimento se tiene el tiempo de mezclado para cada réplica y su promedio experimental así como el tiempo homogenizado de obtenido con la simulación.

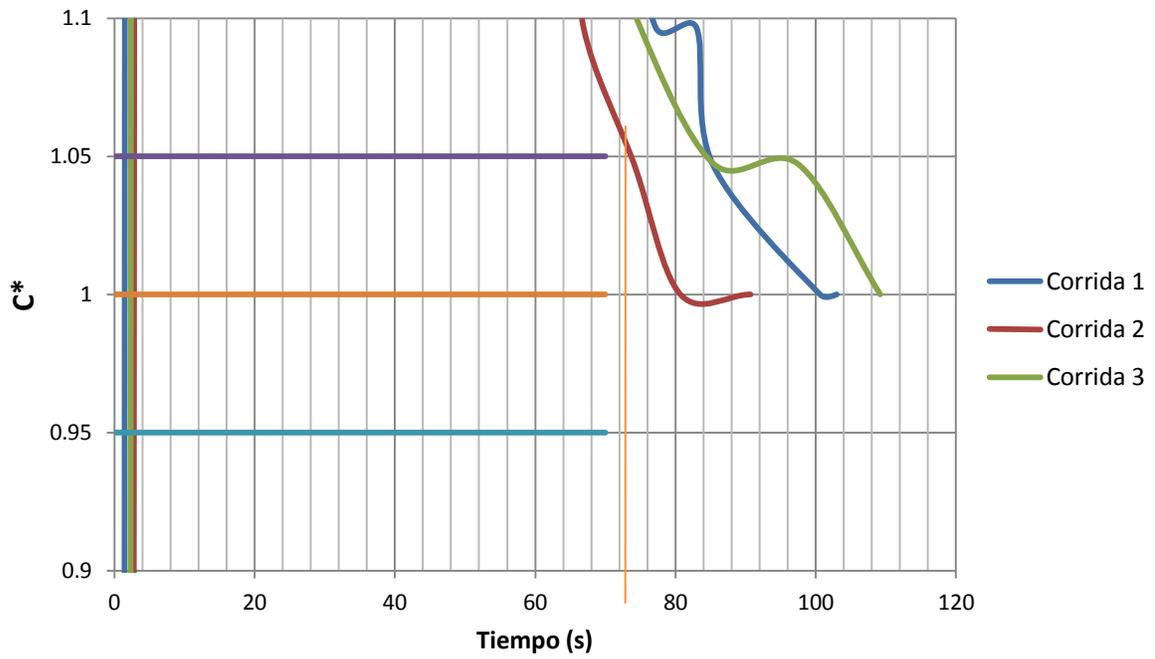


Figura 3.2. Determinación del tiempo de mezclado para Exp.2, rotor liso a 300 rpm con inyección de 20 L/min de manera convencional

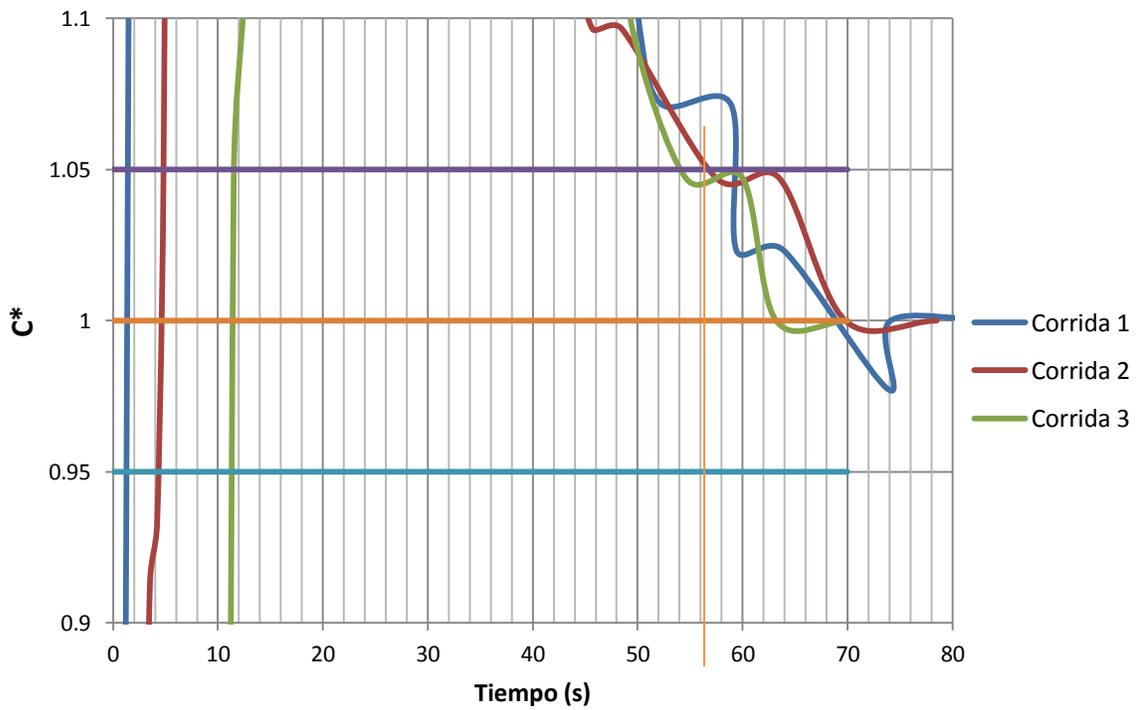


Figura 3.3. Determinación del tiempo de mezclado para el Experimento 3 (LISO30020N).

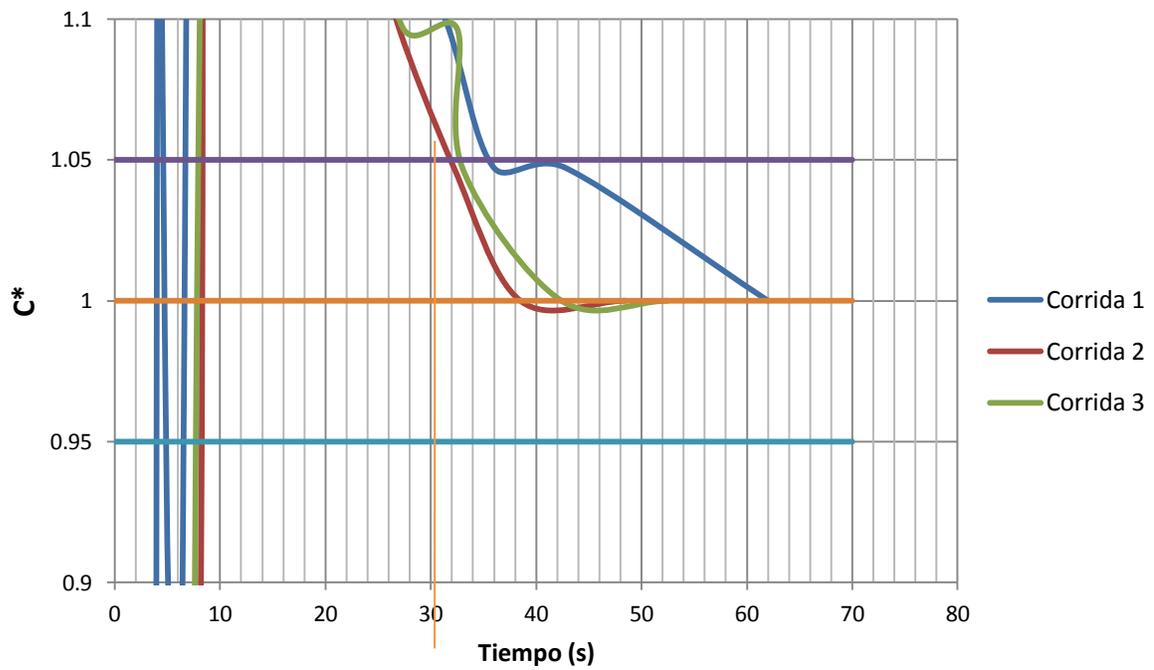


Figura 3.4. Determinación del tiempo de mezclado para el Experimento 10 (LISO58340N).

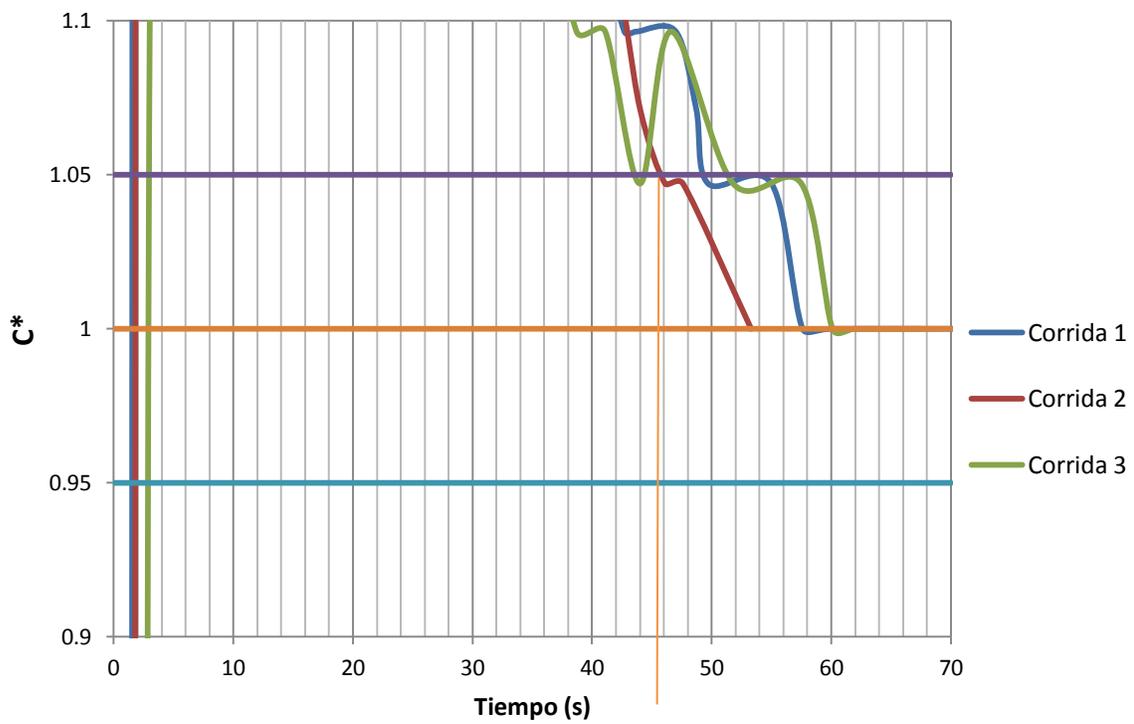


Figura 3.5. Determinación del tiempo de mezclado para el Experimento 15 (STD30040N).

Exp.	Diseño de rotor	rpm	L/min	Tipo de inyección	t_{mix} 1	t_{mix} 2	t_{mix} 3	t_{mix} Prom.Exp.	t_{mix} Simulación
1	Liso	300	0	Sin gas	44.0	19.5	63.0	42.2	22.4
2	Liso	300	20	Convencional	84.5	73.5	84.5	80.8	48.8
3	Liso	300	20	Novel	56.5	54.0	59.5	56.7	25.4
4	Liso	300	40	Convencional	85.5	84.5	85.0	85.0	27.1
5	Liso	300	40	Novel	73.5	68.0	77.5	73.0	26
6	Liso	583	0	Sin gas	32.0	28.0	33.0	31.0	15.9
7	Liso	583	20	Convencional	33.0	32.0	35.5	33.5	27.1
8	Liso	583	20	Novel	28.0	24.5	30.0	27.5	25.4
9	Liso	583	40	Convencional	33.0	23.0	47.0	34.3	34.5
10	Liso	583	40	Novel	29.0	24.5	31.0	28.2	28.4
11	STD	300	0	Sin gas	19.0	19.0	19.5	19.2	19.4
12	STD	300	20	Convencional	47.0	43.5	47.5	46.0	45.7
13	STD	300	20	Novel	43.5	41.0	49.0	44.5	43.7
14	STD	300	40	Convencional	50.0	42.5	52.0	48.2	50.2
15	STD	300	40	Novel	51.0	45.5	56.5	51.0	43.2
16	STD	583	0	Sin gas	10.5	9.0	20.5	13.3	13.2
17	STD	583	20	Convencional	25.5	24.0	27.0	25.5	28.1
18	STD	583	20	Novel	30.0	27.0	34.5	30.5	25.7
19	STD	583	40	Convencional	29.0	26.0	56.5	37.2	25.9
20	STD	583	40	Novel	36.0	32.5	36.5	35.0	21.7

Tabla 3.1. Tiempos de mezclado simulado y experimental para cada corrida.

3.3 Validación

Para poder tener certeza de los resultados conseguidos con el modelado matemático, se tienen que validar los resultados calculados comparándolos con datos experimentales. En lo correspondiente a las simulaciones compiladas en este trabajo, para validar el modelo se compararon los tiempos de mezclado experimentales con los simulados así como la evolución del trazador en el reactor. A pesar de que en algunos casos no concuerda el tiempo de mezclado medido con el calculado, el desarrollo de la concentración con el tiempo tiene forma, tendencia y magnitud muy similares entre predicciones y mediciones, donde se puede ver la naturaleza fluctuante y errática de la evolución de la concentración del trazado en un punto en este sistema turbulento. Las Figuras 3.6 y 3.7 presentan la evolución del trazador para los experimentos especificados en cada imagen donde las líneas rojas representan las mediciones experimentales y las líneas azules son las curvas simuladas de los mismos casos.

En algunas configuraciones se aprecia un gran error experimental y en cuanto a los tiempos de mezclado calculados, no todos los casos concuerdan con las mediciones experimentales pero resaltan las configuraciones experimentales del 7 a 18 donde la concordancia entre predicciones y mediciones es muy buena y en algunos casos son idénticos. Sin embargo, se puede afirmar que existe una tendencia general muy clara en casi todos los casos donde el tiempo de mezclado simulado es ligeramente menor que el experimental y también se destaca que el tiempo de mezclado con una inyección de gas por el fondo (Novel) siempre es ligeramente menor que para los mismos casos con inyección convencional para ambas determinaciones (teórica y experimental). En la Figura 3.8 se exhiben comparaciones entre los resultados experimentales mostrando desviaciones estándar (barras) y promedio (circulo blanco), así como el tiempo de mezclado obtenido en la simulación (círculos rojos).

La razón de que algunos resultados experimentales de tiempos de mezclado mostraron una gran dispersión entre las réplicas, es que se asocia al error experimental pero también se debe a que se trata de un sistema muy caótico por su naturaleza bifásica y alta turbulencia, especialmente a altos flujos de gas y bajas revoluciones del rotor. La sensibilidad del instrumento es determinante

pues depende del tiempo de respuesta en hacer la medición. También una mala calibración puede hacer que los resultados sean imprecisos, además de que estos medidores de pH son muy sensibles a los iones sodio en medios alcalinos. Sin embargo, las mediciones fueron satisfactorias para la mayoría de los casos estudiados, ya que se aprecia buena concordancia entre mediciones y predicciones de los tiempos de mezclado.

Los resultados de tiempos de mezclado calculados con el modelo matemático se acoplan satisfactoriamente con los tiempos experimentales en la mayoría de los experimentos. Los casos que tuvieron discrepancia entre el tiempo simulado y calculado son donde también se tiene la mayor dispersión de datos experimentales (mayor desviación estándar), como las configuraciones de los experimentos 1) y 19) (ver Figura 3.8). Esto se puede deber a malas consideraciones, simplificaciones o suposiciones hechas en el modelo. Por ejemplo, el hecho de tomar en cuenta un tamaño de burbuja constante para todos los casos en el modelo matemático, puede describir erróneamente la fuerza que ejerce el gas sobre el líquido en su ascenso, ya que en las observaciones del modelo físico (ver Figura 3.1) es clara la diferencia en el tamaño de burbuja para cada experimento. En los ensayos con rotor liso a bajas revoluciones y bajos flujos de gas (experimento 1-5) se observan burbujas de mayor tamaño (entre 2 y 5cm de diámetro aproximadamente) y en las corridas con altas velocidades y con el rotor estándar a altos flujos de gas, los tamaños de burbuja (Experimentos 19 y 20) son mucho menores (menos de 0.5 cm que se supone en el modelo). Además, el *modelo estándar de turbulencia k-ε* tiene la desventaja de sobreestimar la turbulencia en el sistema y es por eso que en general los tiempos de mezclado calculados son menores a los medidos, pues el mezclado depende en gran medida del grado de turbulencia del baño, lo cual posiblemente plantea la posibilidad de un trabajo futuro para emplear otro modelo de turbulencia.

A pesar de que el sistema bajo estudio es muy complejo y caótico, se logró ajustar al modelo para predecir adecuadamente tiempos de mezclado y evolución del trazador en la mayoría de las configuraciones experimentales y por lo tanto se pudo validar el modelo de manera satisfactoria.

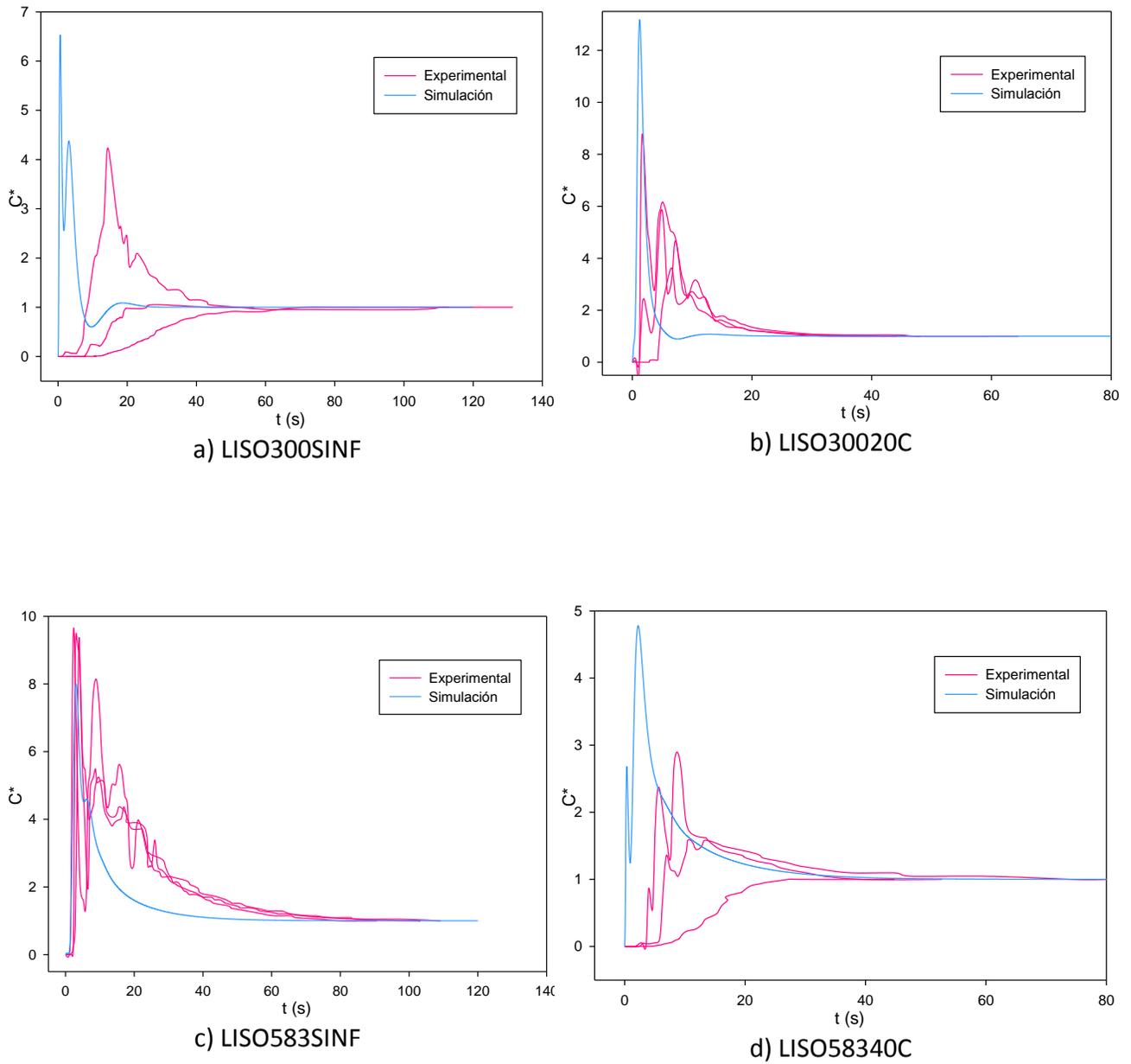


Figura 3.6. Comparación de la evolución del trazador teórica y experimental para las configuraciones con rotor liso: a) 300 rpm sin flujo; b) 300 rpm e inyección de 20 L/min de gas convencional; c) 583 rpm sin flujo y d) 583 rpm con inyección de 40 L/min convencional.

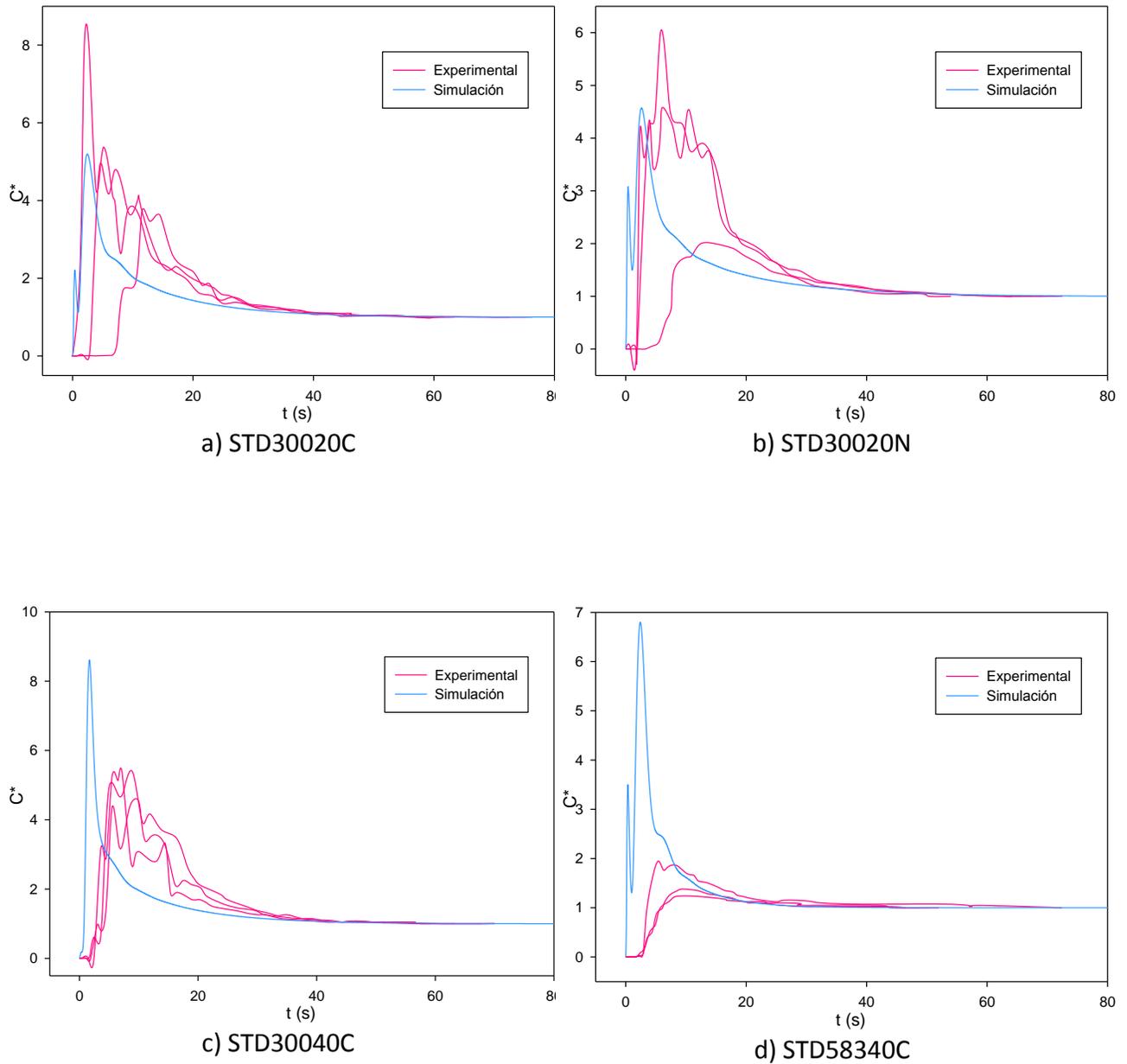


Figura 3.7. Comparación de la evolución del trazador teórica y experimental para las configuraciones con rotor estándar: a) 300 rpm e inyección de 20 L/min de gas en forma convencional; b) 300 rpm e inyección de 20 L/min de gas Novel; c) 300 rpm con inyección de 40 L/min convencional; y d) 583 rpm e inyección de 40 L/min convencional.

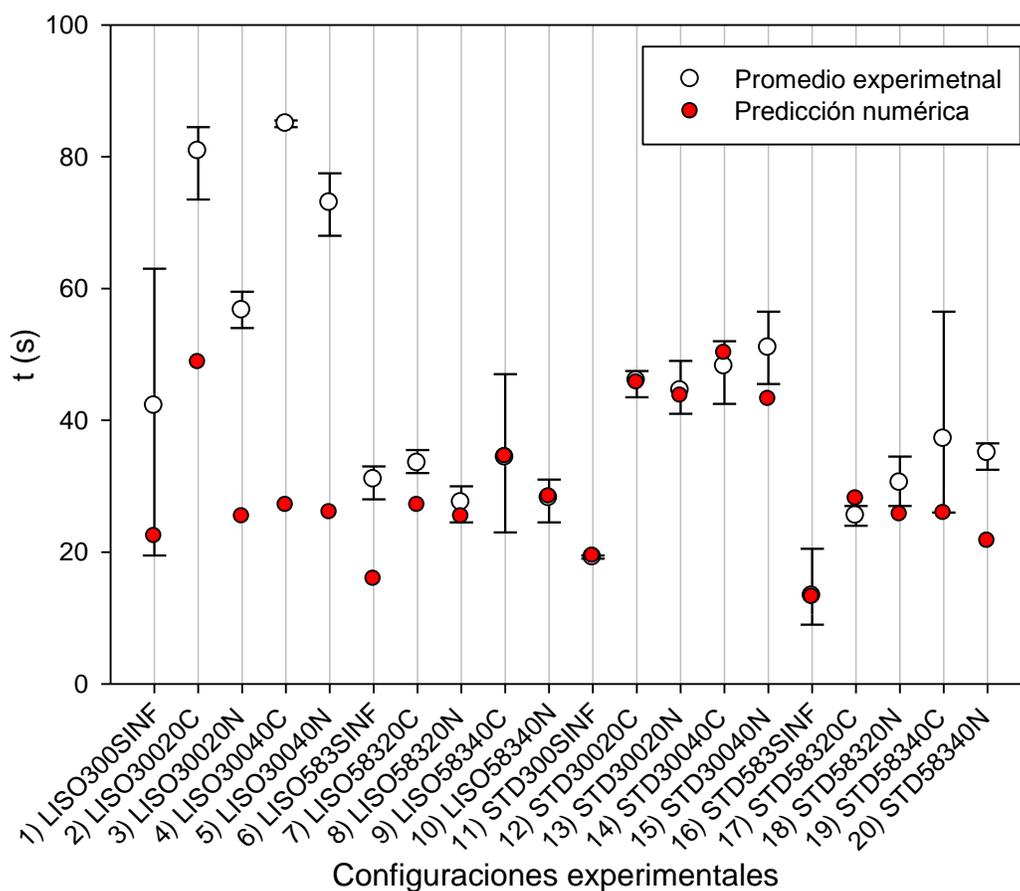


Figura 3.8. Comparación de los tiempos promedio de mezclado experimentales (blancos) y calculados (círculos rojos).

3.4 Patrones de flujo

Los patrones de flujo representan la velocidad promedio en cada nodo en forma de vector, de tal manera que se puede distinguir de manera global la dinámica del fluido dentro de la olla mostrando la anatomía del flujo como serían las recirculaciones o las corrientes convectivas que van a ayudar a la dispersión del trazador en el reactor logrando un mejor entendimiento del porqué con ciertas condiciones de operación se obtienen tiempos de mezclado menores que en otras. En las Figuras 3.9 y 3.10 se ven representados los patrones de flujo de la fase líquida en un plano r - z . Todos los campos vectoriales están graficados con un vector de

referencia de 2.0 m/s para poder comparar fácilmente el grado de agitación entre los casos. En cada figura se puntualiza el número de experimento y la configuración experimental presentadas en la Tabla 2.1.

Se puede observar que con altos flujos de gas hay mayores velocidades del fluido en contacto con la pluma de gas que con bajos flujos de gas (manteniendo las otras variables sin cambio), debido a que se incrementa la transferencia de cantidad de movimiento o la fricción que ejercen las burbujas sobre el líquido. En la Figura 3.9 (experimentos con rotor liso), el patrón de velocidades lo determina el flujo de gas a bajas revoluciones y a altas revoluciones el patrón de flujo está gobernado tanto por la velocidad del rotor como por el flujo de gas inyectado. Se puede apreciar que el ángulo de descarga se ve modificado desde un ángulo de cero grados con respecto a la horizontal en los casos sin flujo de gas hasta desaparecer en los experimentos de bajas revoluciones de rotor e incluso se puede apreciar un efecto parecido al de un tapón poroso por la deformación que acontece en la superficie libre (Exp. 3, 4 y 5).

En cambio, para el rotor estándar (Figura 3.10), el patrón de flujo es causado por la cantidad de movimiento que transfiere el rotor al baño, generando velocidades considerablemente mayores que con el rotor liso. El flujo y tipo de inyección de gas no afectan de manera muy distinguible, excepto para los experimentos con mayor flujo de gas (Exp. 14, 15, 19 y 20).

En todos los cálculos se pueden distinguir dos zonas de recirculación, justo por encima y debajo de los rotores entre la pared de reactor y la flecha así como zonas de muy baja velocidad como son las paredes y fondo, generándose una zona de muy baja velocidad en el vértice de éstos. Con el rotor estándar se nota claramente el efecto de bombeo consistente en succionar líquido localizado debajo de rotor hueco y expulsarlo a través de las toberas laterales en dirección radial con ángulos de descarga por debajo de la horizontal. Este efecto de bombeo mejora la convección y la agitación en la olla en la zona baja del sistema, y es ahí mismo donde se tienen los vectores de velocidad más altos en toda la olla. Este efecto no se presenta en el rotor liso sin huecos.

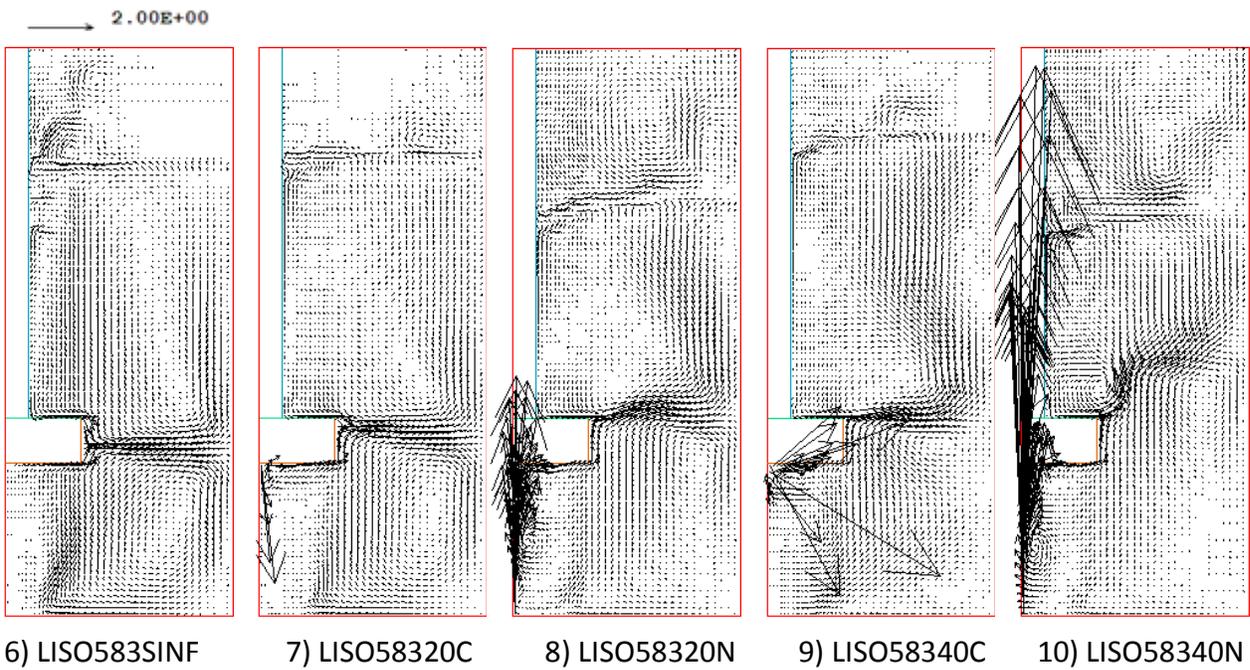
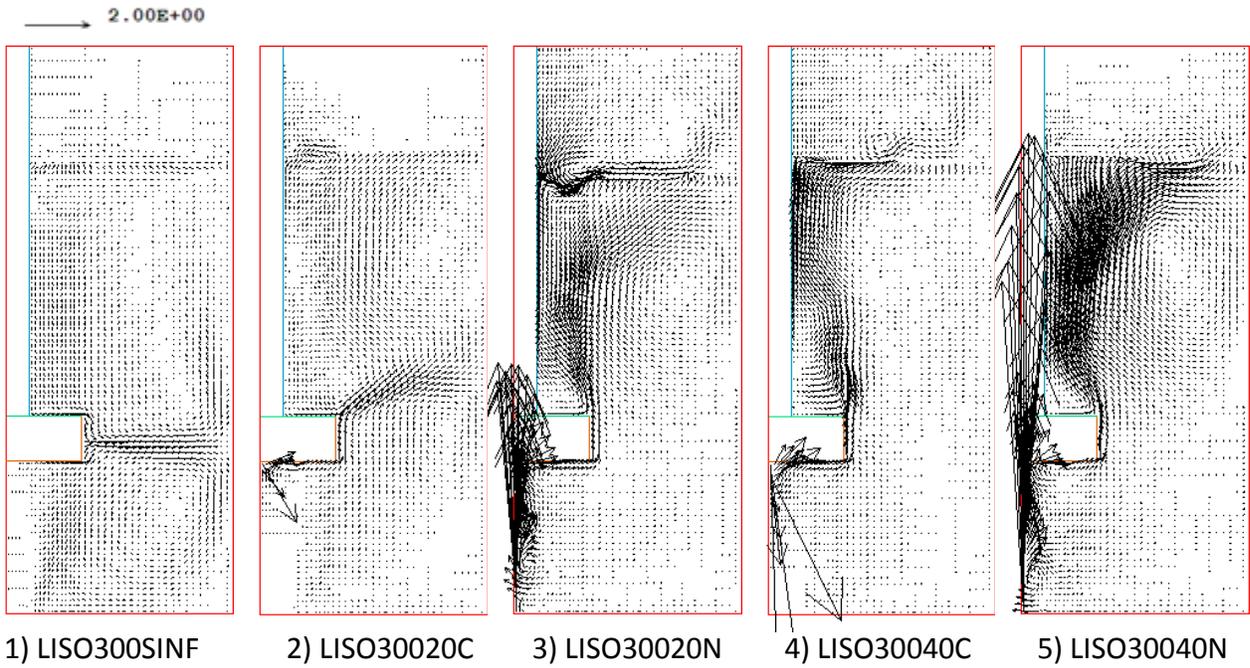


Figura 3.9. Patrones de flujo calculados con el rotor liso. Cada imagen está asociada con su correspondiente número de experimento y configuración. Vector de referencia de 2 m/s.

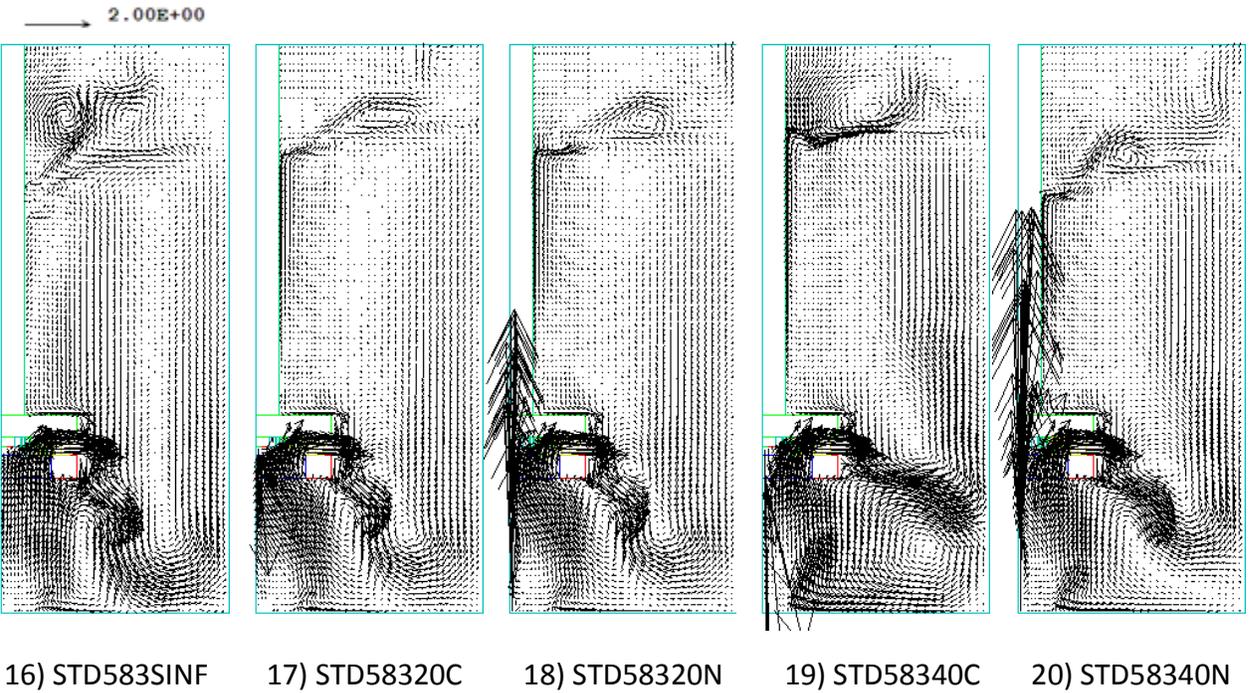
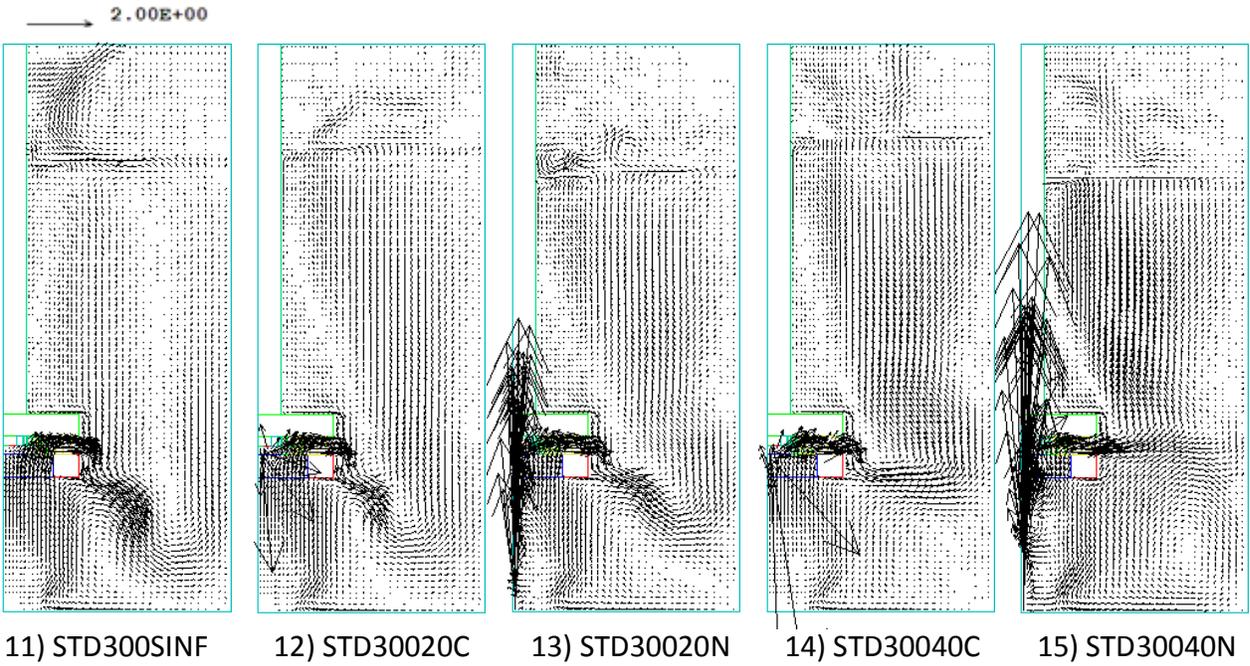


Figura 3.10. Patrones de flujo calculados con el rotor estándar. Cada imagen está asociada con su correspondiente número de experimento y configuración. Vector de referencia de 2 m/s.

3.5 Contornos fracción de volumen de fase gaseosa

En las Figuras 3.11 y 3.12 se presentan contornos de fracción de volumen de la fase gaseosa donde se especifican las configuraciones experimentales (ver Tabla 2.1), para el rotor liso (Figura 3.11) y par el rotor estándar (Figura 3.12). El código de colores denota a la fase líquida en azul ($R2=0$) y en rojo a la fase gas ($R2=1$). Con los contornos cercanos a la superficie libre se pude distinguir la forma del vórtice formado, el cual es visiblemente mayor a altas revoluciones del rotor y con el rotor estándar. También los contornos sirven para ver la forma y trayectoria de la pluma de gas y la dispersión de burbujas en la olla.

Los experimentos con rotor liso y bajas revoluciones de la Figura 3.11 (Exp. 1-5), presentan muy poca dispersión del gas en toda la olla comparada con la alta dispersión de gas lograda a altas revoluciones y comparada con la pluma de gas con este rotor es más dispersa que la que se obtiene con el rotor estándar, además presenta “doblecés” en su ascenso cuando la inyección es por el fondo y el gas rodea al rotor para después ascender próximo a la flecha con bajas velocidades.

Una tendencia similar se aprecia para el rotor estándar (Figura 3.12). El efecto de la manera de inyectar el gas no es muy evidente para las configuraciones con rotor liso para la distribución que tiene el gas en la olla, pero con el rotor estándar y la inyección por el fondo a flujo bajo de gas (20 L/min), la dispersión de burbujas mejora en la parte inferior del rotor y con 40L/min se distribuye gas hacia el fondo y la pared de la olla. Se puede distinguir un comportamiento de la pluma de gas parecido al rotor liso con bajas velocidades del rotor pero a altas revoluciones la pluma de gas es muy poco dispersa y no se tiene es mismo efecto de dobleces en su ascenso, la forma es muy recta y se nota mejor con la inyección tipo Novel. También, el gas en su ascenso no rodea el rotor como se observa con el rotor liso, sino que pasa por los huecos del rotor, lo que hace que se distribuya una parte hacia la parte baja del sistema y otra ascienda próximo a la flecha, efecto causado por el patrón de flujo.

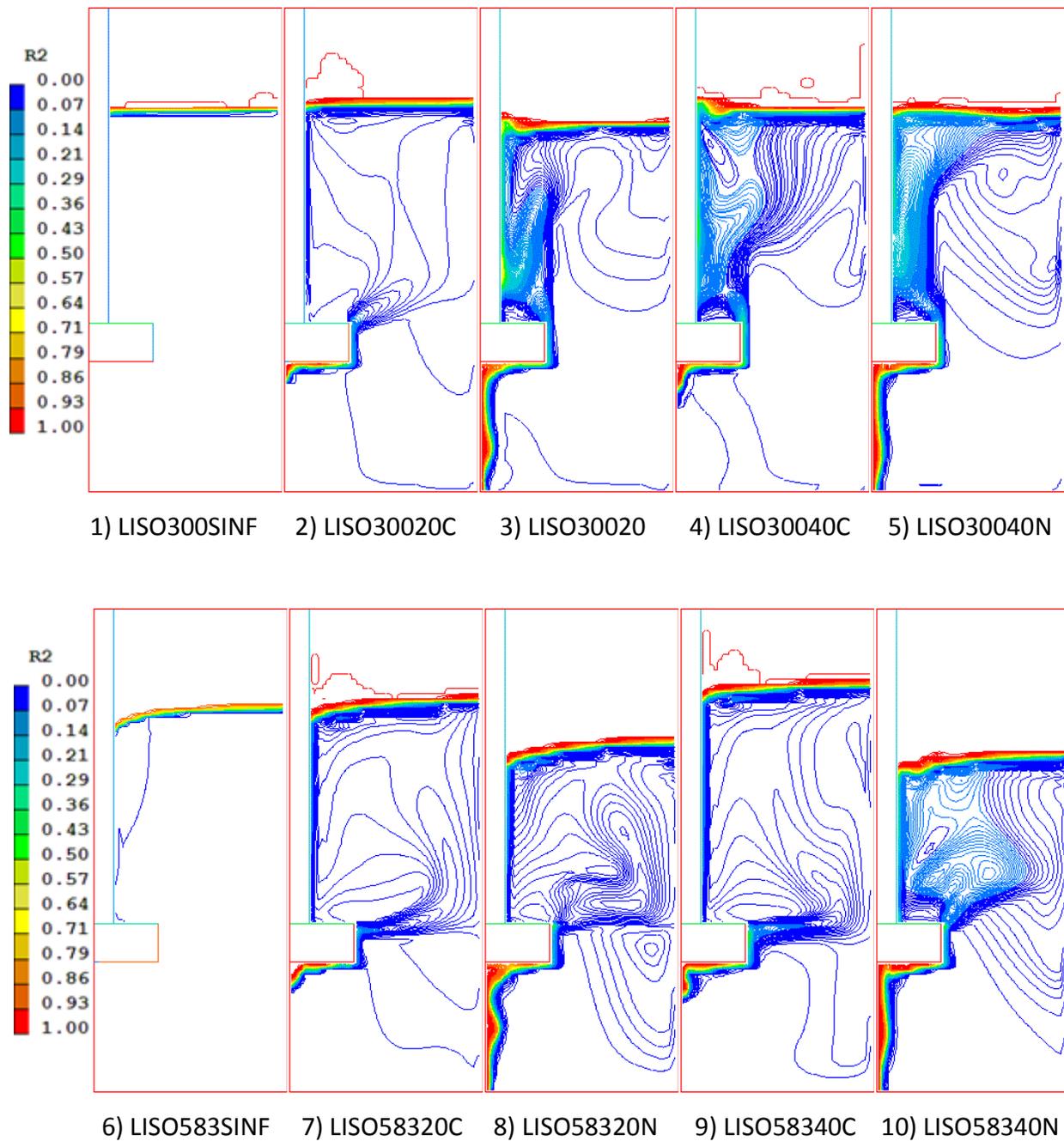


Figura 3.11. Contornos de fracción de volumen de la fase gaseosa para las configuraciones con rotor liso. Cada imagen está indicada con su respectiva configuración experimental.

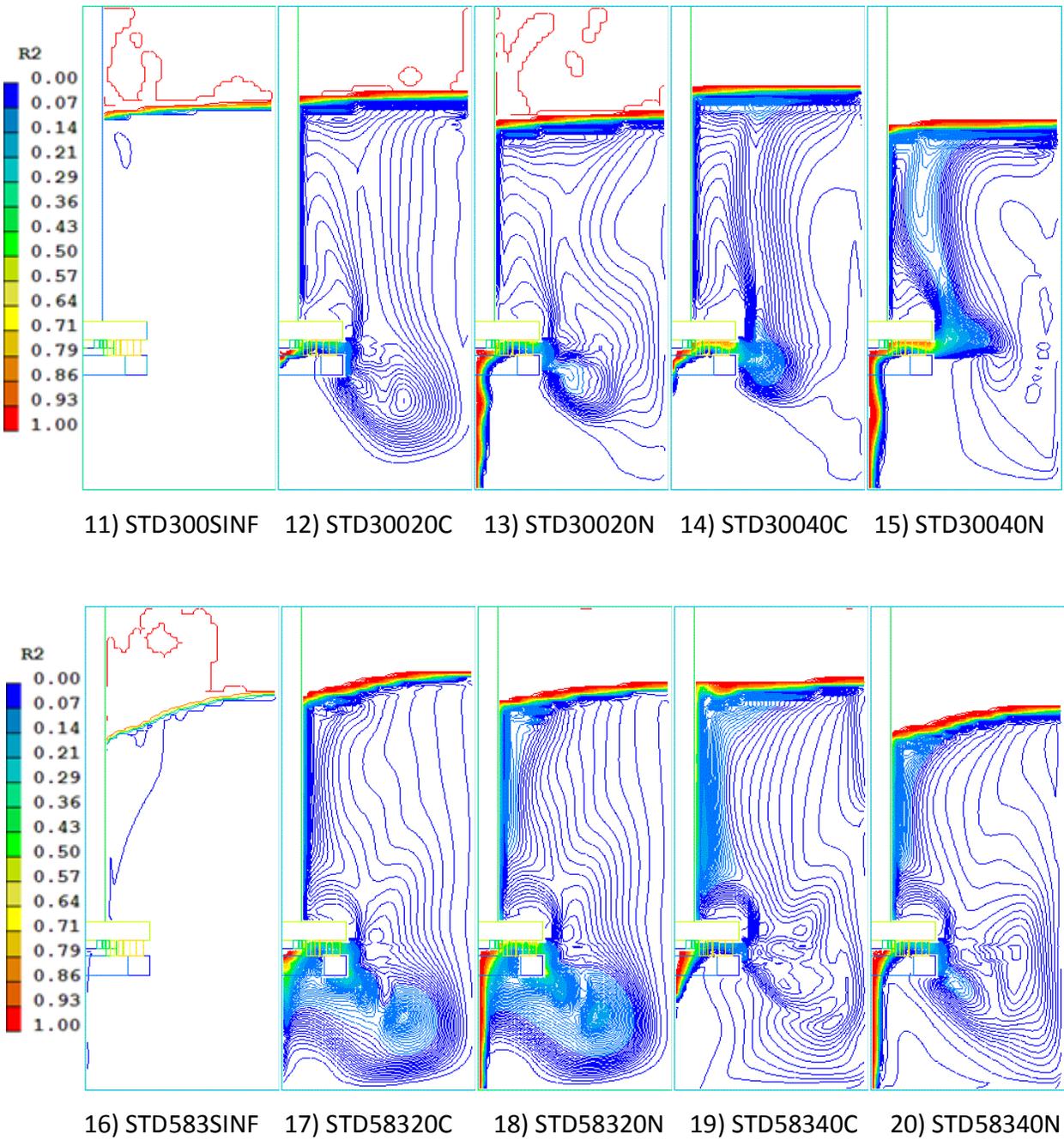


Figura 3.12. Contornos de fracción de volumen de la fase gaseosa para las configuraciones con rotor estándar. Cada imagen está indicada con su respectiva configuración experimental.

3.6 Contornos de viscosidad cinemática turbulenta

La viscosidad cinemática turbulenta es función de la disipación de energía cinética causada por la agitación y depende de la posición dentro de la olla, por lo que puede usarse como un indicador de la distribución y del nivel de turbulencia dentro del sistema. En la Figura 3.13 se presentan los contornos de viscosidad cinemática turbulenta para el rotor liso, presentando un rango de valores que van de 0 a $1.8 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$ y en la Figura 3.14 se muestran los mismos contornos pero en este caso para el rotor estándar, presentando un rango mayor de viscosidades desde 0 a $6.0 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$, es decir el rotor estándar genera más turbulencia que el liso.

En todos los casos se distinguen dos zonas de alta turbulencia, por debajo y encima de los rotores entre la pared y la flecha delimitadas por una zona de menor turbulencia aparentemente establecida por los patrones de flujo y en especial por el ángulo de descarga que se observó en los vectores de velocidad de flujo (Figuras 3.9 y 3.10), también cabe mencionar que cerca de las paredes del reactor la turbulencia es mínima y se debe a las condiciones de no deslizamiento del fluido en estas zonas y a la aplicación de las funciones pared, explicadas previamente en la modelación.

La velocidad de rotor propicia una mayor agitación en todos los casos, pero en el rotor liso la inyección de gas favorece una mayor turbulencia, contrario a lo que pasa con el rotor estándar donde se ve disminuida con el flujo de gas e igualmente no se logra apreciar claramente la influencia que tiene la cantidad y punto de inyección del gas. Comparando los contornos que se tienen sin inyección, el flujo de gas modifica la distribución de la turbulencia y es más visible a bajas velocidades con el rotor liso ya que la fricción y fuerzas de arrastre que las burbujas ejercen sobre el líquido es dominante en la transferencia de cantidad de movimiento a esas condiciones. Con este mismo rotor liso, hay una mayor turbulencia establecida en la parte superior de la olla pero es notorio que el efecto de la técnica Novel provee una mejor distribución de la agitación hacia el fondo de la olla.

La mayor agitación o distribución de la turbulencia de manera más uniforme en toda la olla, se presenta con el rotor estándar, pues su diseño provoca una transferencia de cantidad de movimiento más eficiente al baño siendo casi tres veces mayor que con el rotor liso y es por eso que se toma una escala diferente de viscosidad cinemática turbulenta para estos casos.

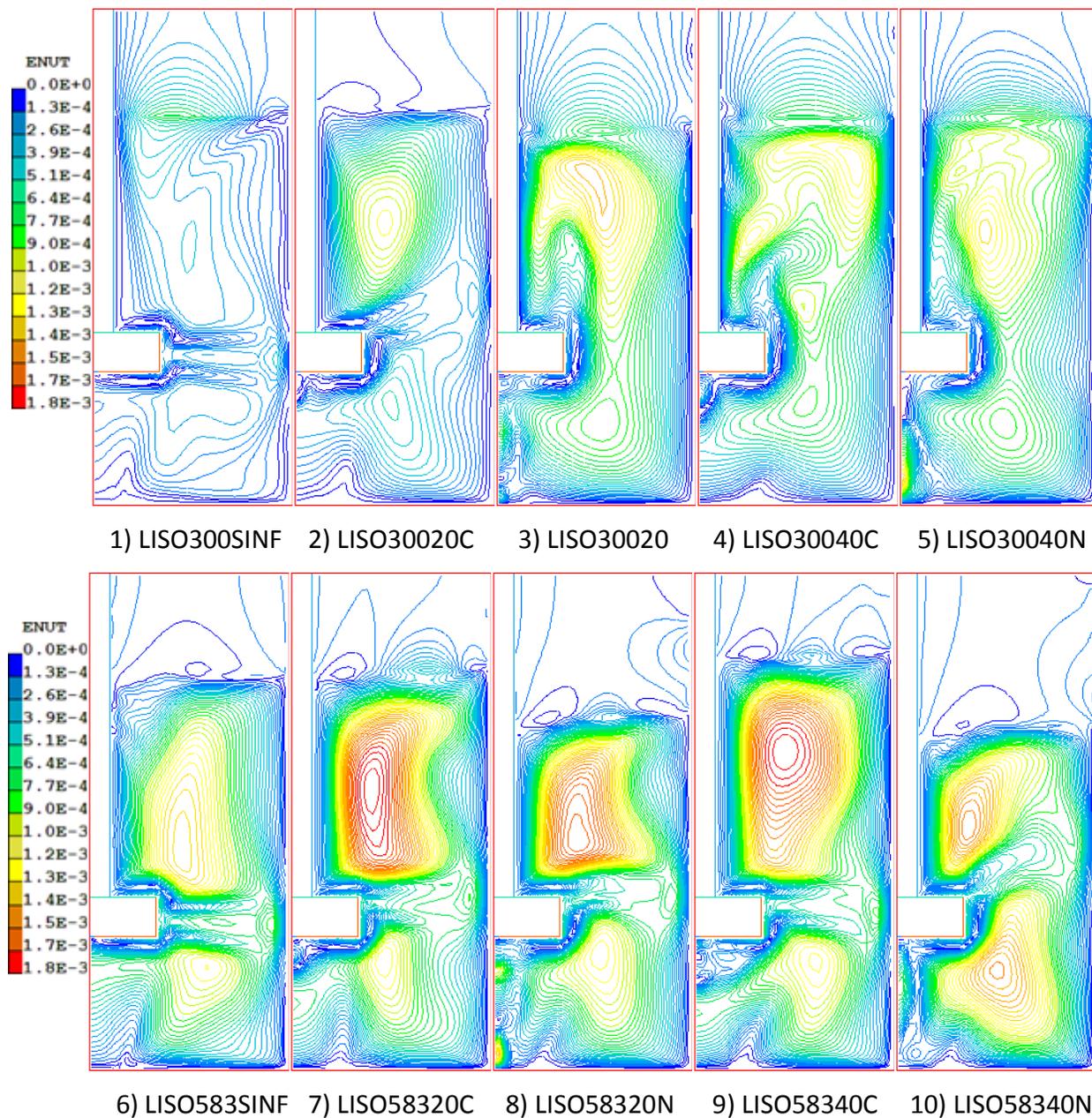


Figura 3.13. Contornos de viscosidad cinemática turbulenta para experimentos con rotor liso. Cada imagen se indica con su configuración experimental con un rango de 0 a $1.8 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$.

La diferencia más importante que se tiene comparada con el rotor liso, es una mayor turbulencia en toda la olla y se distingue una zona de mayor agitación en la parte baja de la olla justo debajo del rotor. Esta característica es una consecuencia del efecto bombeó que se produce por la succión del líquido en la zona de baja presión ocasionada por el diseño del rotor y promueve turbulencia que será benéfica para el tiempo de mezclado.

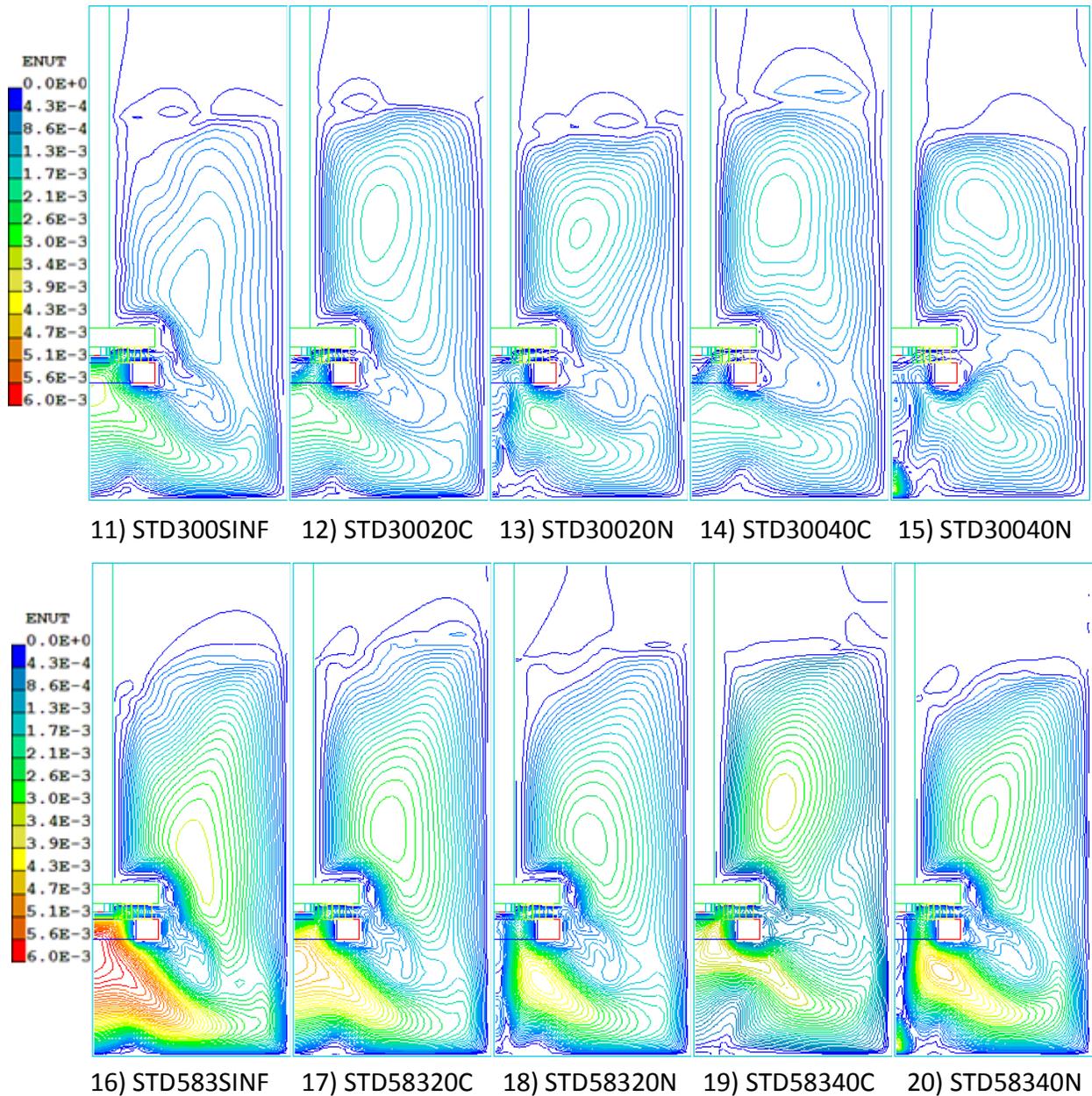


Figura 3.14. Contornos de viscosidad cinemática turbulenta para experimentos con rotor estándar. Cada imagen se indica con su configuración experimental con un rango de 0 a $6.0 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$.

3.7 Contornos de presión

Las Figuras 3.15 y 3.16 muestran los contornos de presión calculados para los casos con rotor liso (3.15) y estándar (3.16). La forma de los contornos de presión debe principalmente a la presión hidrostática generada por la masa del líquido y las fuerzas gravitatorias. También, el movimiento angular del rotor provoca fuerzas centrífugas radiales que empujan al líquido hacia la pared de la olla. Esta fuerza se balancea con un gradiente de presión en dirección radial, creando baja presión en el centro y altas presiones en las paredes de la olla. Por eso, los contornos de presión pierden la horizontalidad a medida que se incrementa la velocidad de rotación (incrementan las fuerzas centrífugas). Por otro lado, el diseño de rotor estándar es hueco por el fondo, lo que provoca una caída de presión debajo del rotor al girar, succionando líquido y eyectándolo radialmente a través de las toberas laterales presentes en el diseño de este rotor, lo que anteriormente se nombró como efecto de bombeo en la sección de patrones de flujo.

En la Figura 3.16 se aprecia que hay una menor presión debajo del rotor estándar comparada con el rotor liso (Figura 3.15) causada por presiones de vacío que son generadas por los huecos que posee el rotor estándar. El efecto de la inyección de gas tipo Novel ayuda a crear zonas de más baja presión que la inyección convencional. El rotor liso en general presenta menores caídas de presión y menores fuerzas centrífugas que el rotor estándar. Se aprecia que un aumento en las revoluciones de rotor crean caídas de presión mayores en el centro de la olla, inclinando más las isobaras.

Particularmente, en con el rotor estándar a altas revoluciones y sin flujo, se presta la mayor presión de vacío debajo del rotor, esto ocasiona que se tuviera el mayor efecto de bombeo de líquido y explicaría como bajo estas condiciones se muestran los mayores valores de viscosidad cinemática turbulenta (Figura 3.14 configuración STD583SINF) y del mismo modo como es que la inyección de gas compensa en parte la caída de presión y altera los efectos de fenómeno de bombeo.

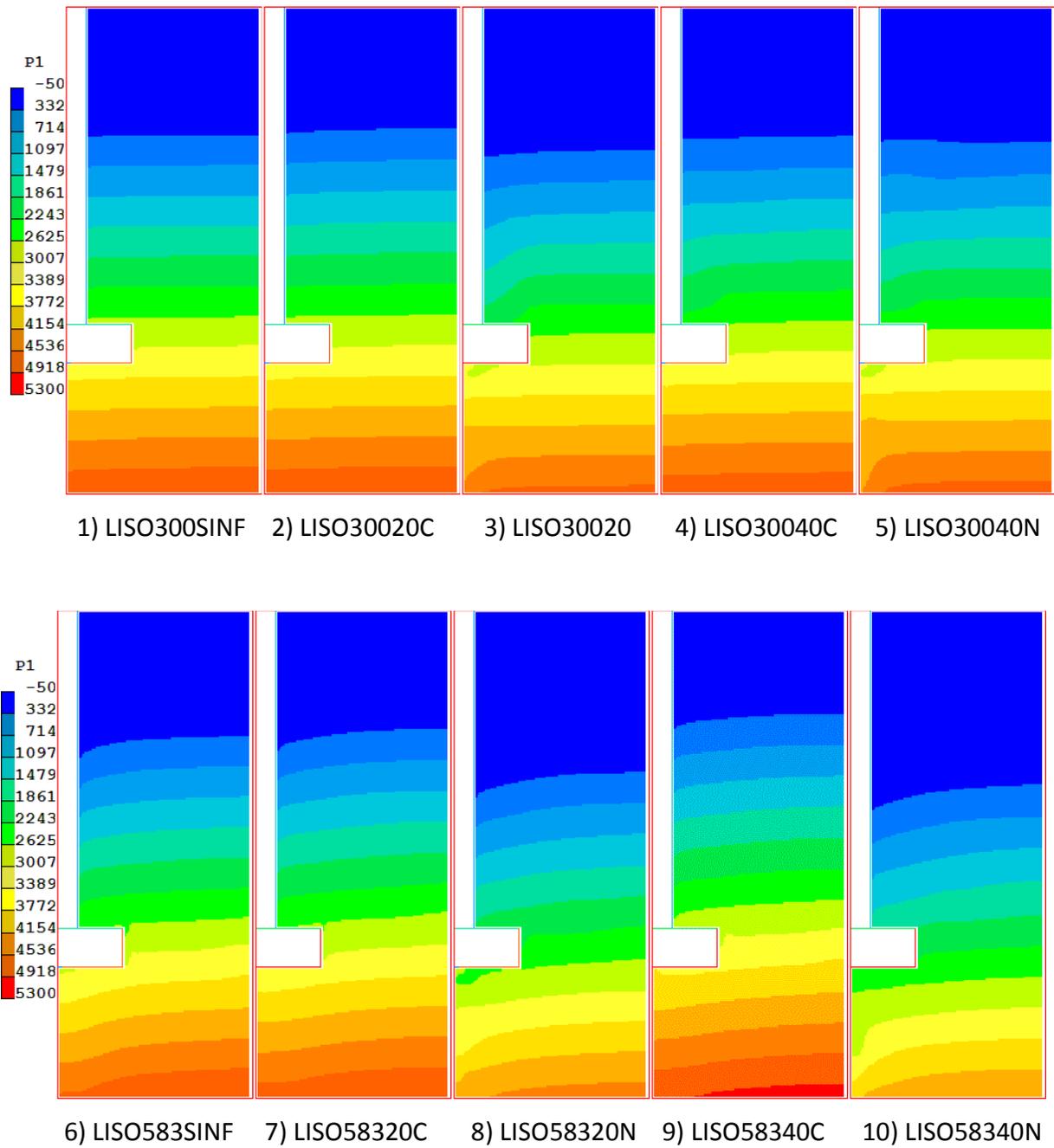


Figura 3.15. Contornos de presión para las configuraciones con rotor liso. Cada imagen está indicada con su configuración experimental para un rango de -50 a 5300 Pa.

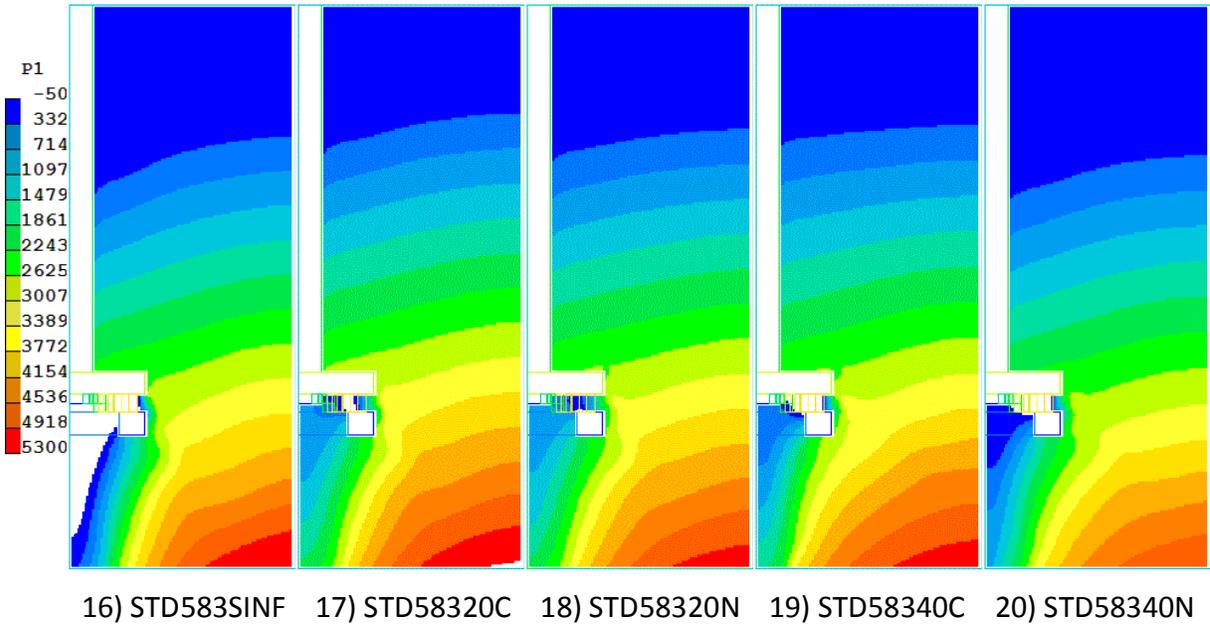
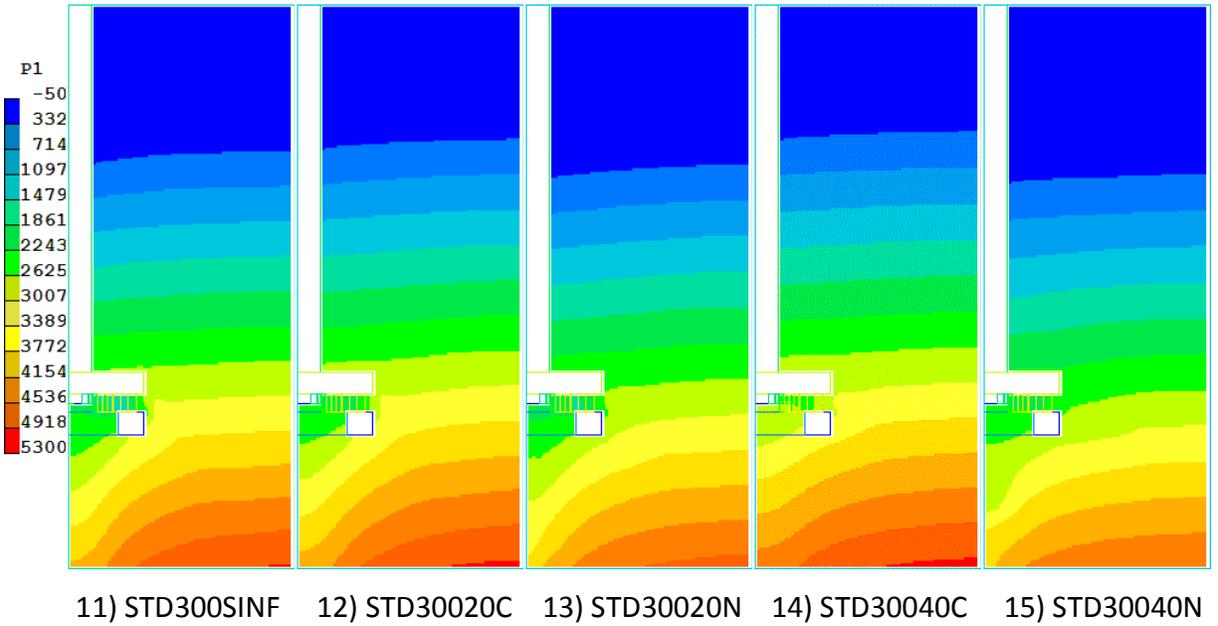


Figura 3.16. Contornos de presión para las configuraciones con rotor estándar. Cada imagen está indicada con su configuración experimental para un rango de -50 a 5300Pa.

3.8 Efectos de las principales variables de proceso sobre el tiempo de mezclado

A continuación se presentan los resultados en forma gráfica de los tiempos de mezclado experimentales comparados con los obtenidos en las simulaciones, tomando en cuenta los experimentos que tuvieron menor dispersión en las mediciones y los resultados numéricos que se ajustan mejor a éstos datos. En cada gráfica se evalúa el efecto que tiene cada una de las variables de proceso sobre el tiempo de homogenizado, manteniendo el resto de los parámetros en valores constantes.

3.8.1 Efecto del punto de inyección

En las Figura 3.17 y 3.18 se presenta el efecto que posee el punto de inyección de gas para rotor liso y estándar respectivamente, además se comparan las velocidades de rotor para cada caso. Con el rotor liso e inyección de gas por el fondo los tiempos de mezclado son ligeramente menores (símbolos rojos corresponde a 300 rpm y símbolos azules a 583 rpm), mientras que para el rotor estándar es más difícil apreciar este efecto. Para ambos casos se hace muy clara la reducción del tiempo de mezclado a altas velocidades angulares del rotor.

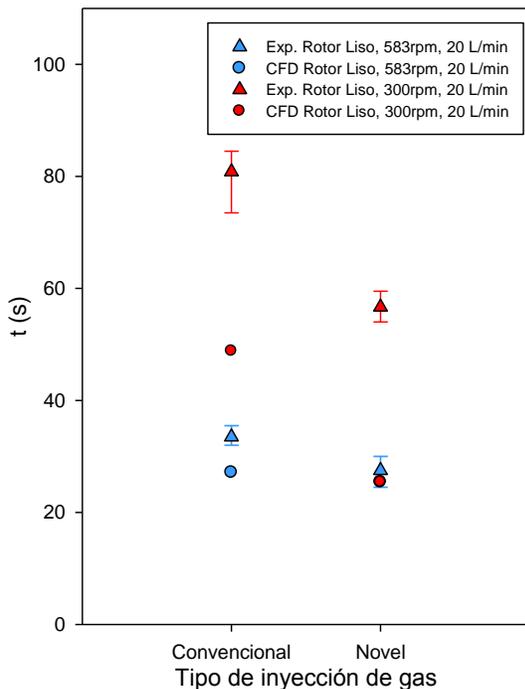


Figura 3.17. Efecto del punto de inyección de 20 L/min con rotor liso.

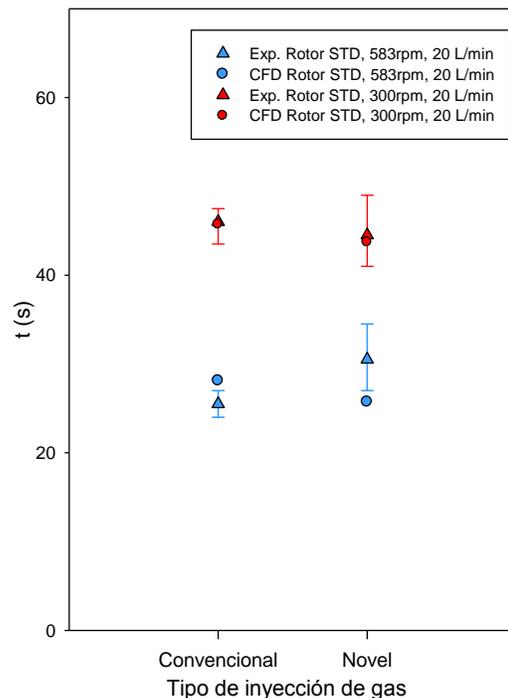


Figura 3.18. Efecto del punto de inyección de 20 L/min con rotor estándar.

3.8.2 Efecto del flujo de gas

De las Figuras 3.19 a 3.21 se presentan los tiempos de mezclado en función del flujo de gas inyectado. La Figura 3.19 también presenta la variación del tiempo de mezclado con las revoluciones por minuto (símbolos rojos 300 rpm y azules 583 rpm) manteniendo los otros parámetros constantes (rotor estándar y punto de inyección por el fondo). Las gráficas contienen las mediciones promedio experimentales (triángulos) con su desviación estándar y los valores obtenidos en las simulaciones (círculos). Al mismo tiempo se agregaron líneas de tendencia que siguen los valores promedio y calculados al aumentar el flujo de gas. De la misma forma, las Figuras 3.20 y 3.21 además de presentar el efecto del flujo de gas, se comparan los efectos del punto de inyección y diseño de rotor respectivamente.

En general el flujo de gas aumenta el tiempo de mezclado (comparado con casos sin inyección de gas) aunque en la Figura 3.19 (rotor estándar) se aprecia que con 40 L/min el tiempo de mezclado experimental es mayor que el simulado. Además, mientras que el modelo predice que un aumento en el flujo de gas disminuye el tiempo de mezclado, las mediciones experimentales dicen lo contrario. Lo único seguro es que el aumento en la velocidad de rotación baja el tiempo de mezclado sin excepción (mediciones o cálculos). El efecto del punto de inyección sobre el mezclado no es distinguible en base a la Figura 3.20.

Comparando el efecto del diseño de rotor variando los flujos de gas (Figura 3.21), se tiene la misma tendencia que los ensayos anteriores, solo que en éste caso se compara el resultado numérico con el experimental. Los resultados de los tiempos de mezclado calculados con el rotor estándar tienen buena concordancia con las mediciones experimentales. En cambio con el rotor liso se tiene mucha diferencia entre los resultados numéricos y las mediciones experimentales de los tiempos de mezclado (los resultados experimentales muestran dispersión o mucho error experimental). En la Figura 3.21 se aprecia con claridad que el rotor estándar promueve menores tiempos de mezclado que el rotor liso, aunque nuevamente el efecto del flujo de gas sobre el mezclado no es significativo.

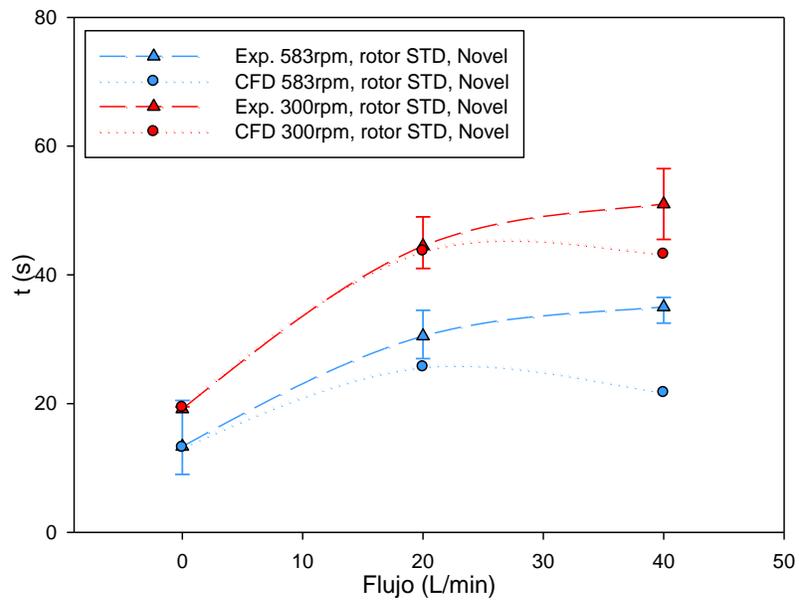


Figura 3.19. Efecto del flujo de gas para el rotor estándar, con inyección por el fondo.

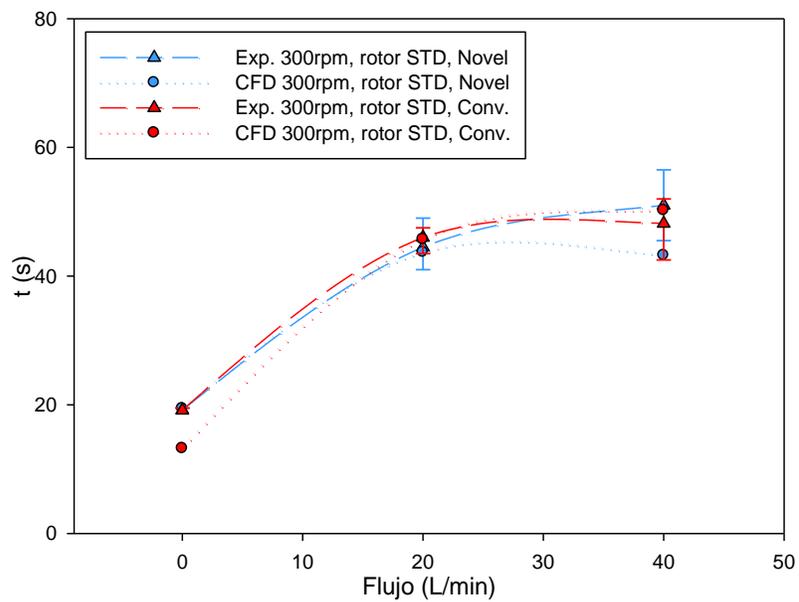


Figura 3.20. Efecto del flujo de gas a 300 rpm con el rotor estándar, y variando el punto de inyección.

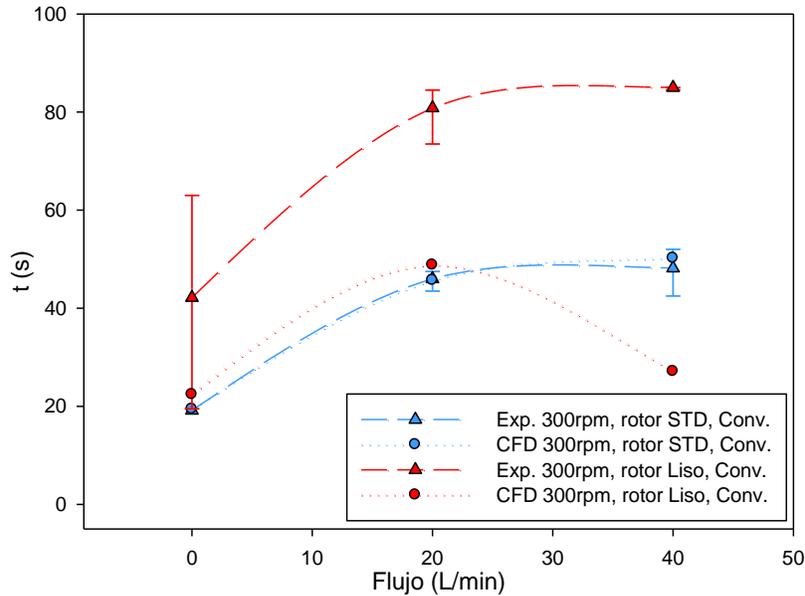


Figura 3.21. Efecto del flujo de gas a 300 rpm con inyección convencional y diferente tipo de rotor.

3.8.3 Efecto del diseño de rotor

De la Figura 3.22 a la Figura 3.24, se muestran resultados del efecto del diseño de rotor (rotores liso y estándar, Figura 2.2) sobre el tiempo de mezclado. La tendencia que siguen los resultados experimentales es muy clara donde con el rotor estándar, el tiempo de mezclado se ve reducido comparado con los tiempos producidos con el rotor liso.

En la Figura 3.22 se toma en cuenta también el efecto del flujo de gas inyectado convencionalmente a 300 rpm, donde en rojo se muestran los flujos a 40 L/min y en azul a 20 L/min. Los resultados del efecto de la velocidad del rotor (Figura 3.23), indican de nueva cuenta que a mayores velocidades se obtienen tiempos de mezclado menores y hay una mejor concordancia entre resultados numéricos y experimentales con el rotor estándar.

En la Figura 3.24, además del efecto del tipo de rotor, se toma en cuenta el efecto del tipo de inyección de gas, en el que la inyección convencional a través del rotor corresponde a los símbolos rojos y en color azul a la inyección tipo Novel por el fondo. Con el rotor estándar no es

clara la diferencia del punto de inyección como se ha presentado anteriormente. Sin embargo, experimentalmente se observa que con rotor liso e inyección por el fondo, el tiempo de mezclado aumenta ligeramente.

El efecto que tiene el diseño de rotor es el más influyente para el tiempo de mezclado ya que influye completamente en la dinámica del baño como se ha visto en los resultados de patrones de flujo, contornos de presión, distribución de gas y viscosidad cinemática turbulenta. El diseño del rotor estándar promueve una mejor eficiencia en el rompimiento de burbujas, un sobresaliente efecto de bombeo por su diseño con huecos y transferir mayor fuerza centrífuga al líquido para que éste sea arrojado a las paredes de la olla causando una agitación más vigorosa, derivando así en una mejor distribución de burbujas y menores tiempos de mezclado.

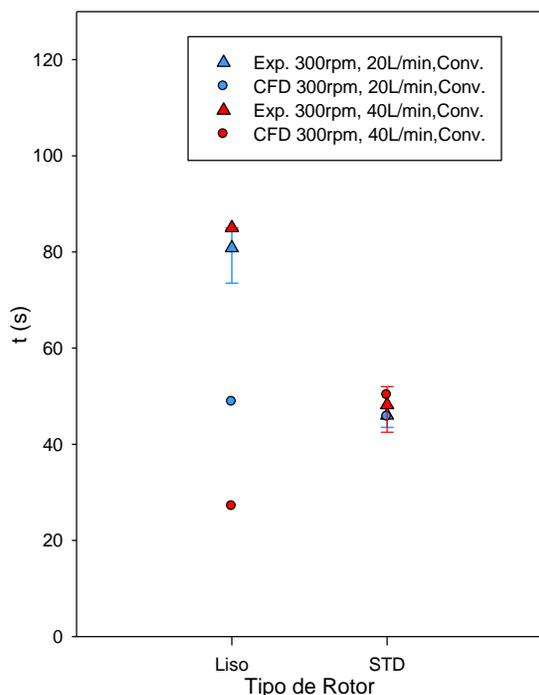


Figura 3.22. Efecto del tipo de rotor para flujo convencional, 300 rpm y diferente flujo de gas.

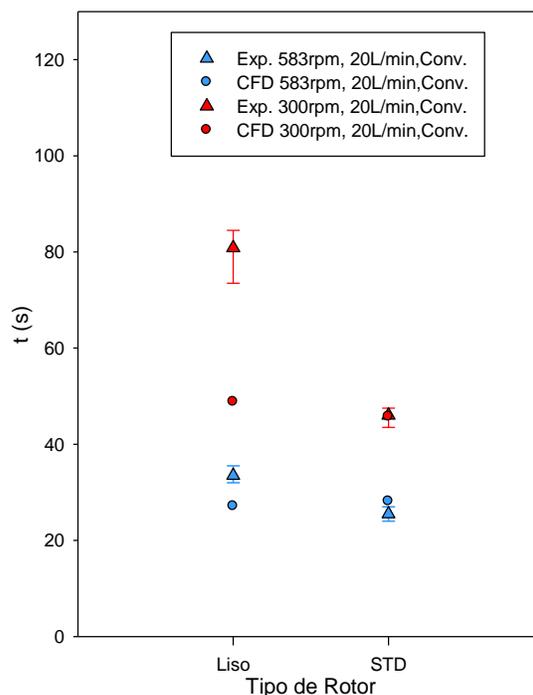


Figura 3.23. Efecto del tipo de rotor para flujo convencional, 20 L/min y diferente RPM.

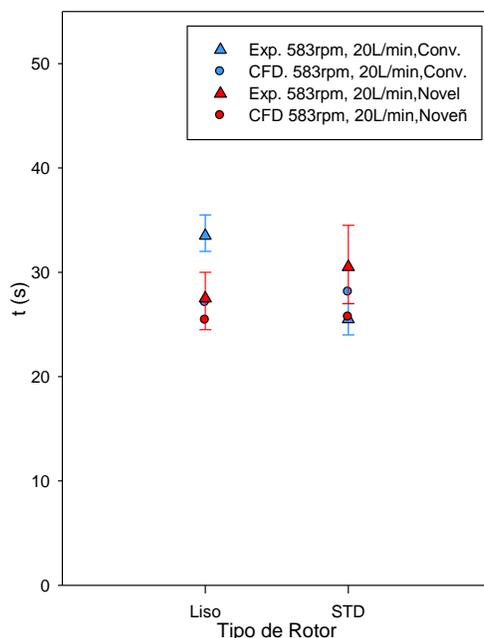


Figura 3.24. Efecto del tipo de rotor para 583 rpm, 20 L/min y diferente tipo de flujo.

3.8.4 Efecto de la velocidad del rotor

El efecto de la velocidad del rotor sobre los tiempos de mezclado es indicado de las Figuras 3.25 a 3.27, que presentan los valores experimentales promedio y simulados. Para todos los casos es apreciable una clara tendencia de un mejor mezclado a mayores velocidades de rotor. En la Figura 3.25 se incluye también el efecto del flujo de gas (20 L/min símbolos azules y 40 L/min símbolos rojos), con rotor estándar.

Con respecto a la Figura 3.26, se incluye la comparación del tipo de rotor (rotor estándar y liso en símbolos azules y rojos respectivamente). En esta figura se logran observar mejores resultados con velocidades de 583 rpm para ambos rotores, pero con el rotor estándar se obtiene aún mejores resultados. Comparando el punto de inyección no se aprecia el efecto que tiene esta variable en el tiempo de homogenización lo cual se observa mejor en la Figura 3.27 (Novel y convencional en rojo y azul correspondientemente) donde nuevamente es obvia la eficiencia del mezclado a altas velocidades de rotor.

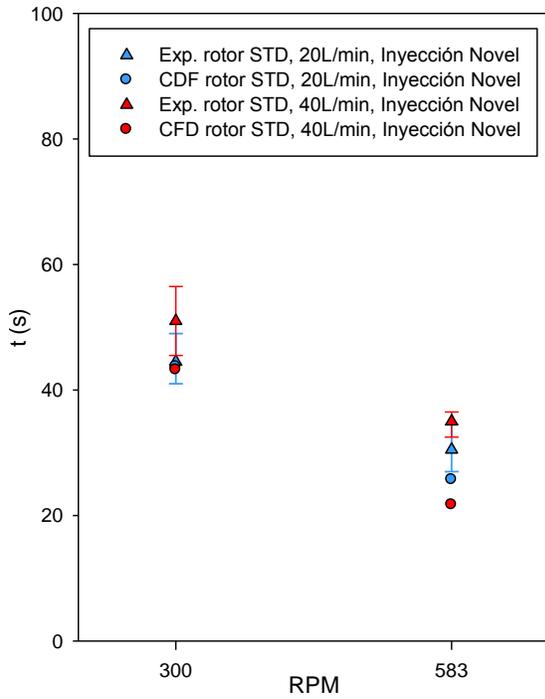


Figura 3.25. Efecto de RPM para flujo Novel, rotor estándar y diferentes flujos de gas.

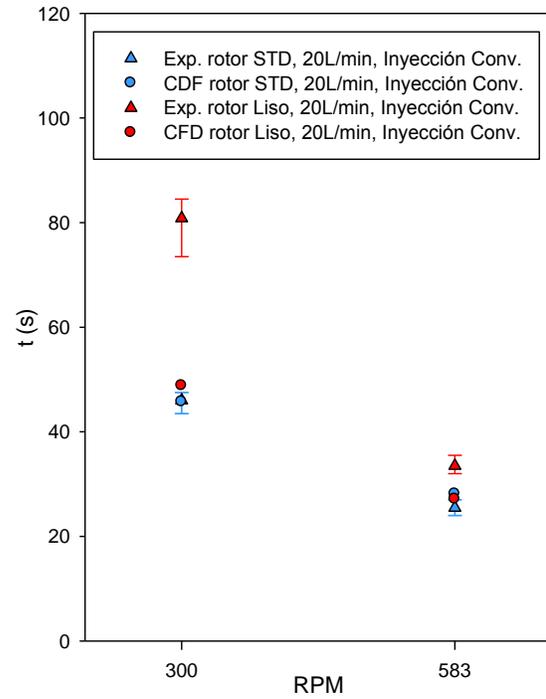


Figura 3.26. Efecto de RPM para flujo convencional, 20 L/min y diferente rotor.

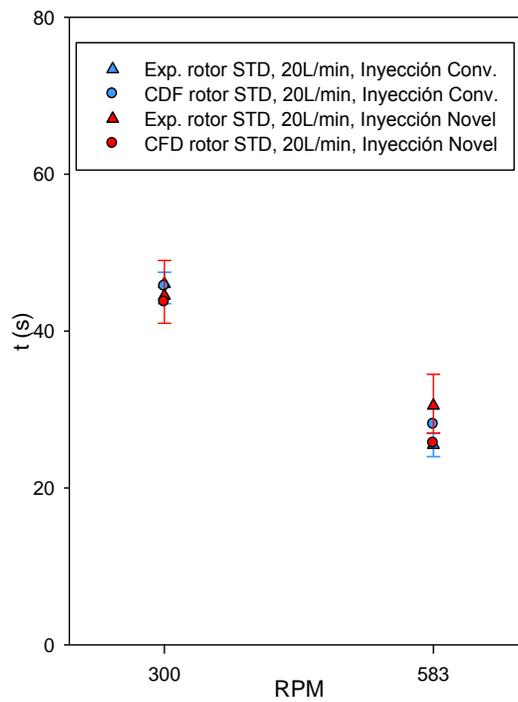


Figura 3.27. Efecto de RPM para 20 L/min, rotor estándar y diferente punto de inyección.

Las altas velocidades de rotor propician menores tiempos de homogenizado ya que el giro del rotor propicia una gran agitación en el sistema por transferir una mayor fuerza centrífuga radialmente y esto lo hace una de las variables más influyentes en el tiempo de mezclado y dinámica del fluido junto con el diseño del rotor.

3.9 Correlación para el tiempo de mezclado

Para poder estimar cuantitativamente la influencia de cada una de las variables del proceso, se propuso obtener una correlación entre los tiempos de mezclado calculados con el modelo matemático y las variables estudiadas en esta tesis (tipo de rotor, velocidad angular del rotor, flujo de gas y tipo de inyección de gas).

La correlación propuesta es multilineal, como se presenta en la Ecuación 4.1, donde t_{mix} es el tiempo de mezclado en segundos, RPM es la velocidad angular del rotor en revoluciones por minuto, Q_{gas} es el flujo de gas en L/min y PI representa el punto de inyección de gas el cual se cuantificó con la altura del punto de inyección de gas con respecto al fondo de la olla tomando el valor de 0.15 m para la inyección convencional y 0 m para la inyección por el fondo. Con los resultados de tiempo de mezclado calculados y sus respectivas configuraciones en base a la Tabla 3.1, se realizó el análisis de regresión lineal múltiple para obtener los coeficientes β_1 , β_2 y β_3 asociados a su respectiva variable y es la constante β_0 asociada a la ecuación.

$$t_{mix} = \beta_0 + \beta_1 RPM + \beta_2 Q_{gas} + \beta_3 PI \quad (\text{Ec. 3.1})$$

Es importante notar que el diseño de rotor no es una variable cuantificable y por lo tanto no se pudo incluir en la correlación propuesta, así que se optó por tener dos correlaciones, una para el rotor estándar y otra para el rotor liso, las cuales se presentan a continuación.

$$t_{mix}(STD) = 42.73 - 0.0552RPM + 0.474Q_{gas} + 17.33PI \quad (\text{Ec. 3.2})$$

$$t_{mix}(Liso) = 62.77 - 0.0812RPM + 0.389Q_{gas} + 17.33PI \quad (\text{Ec. 3.3})$$

La Ec. 3.2 para el rotor estándar presenta una correlación estadísticamente significativa entre las variables con un nivel de confianza del 95.0% con un coeficiente de correlación de 0.976, lo que puede ser constatado con la poca dispersión presentada en la Figura 3.28, mientras que la correlación correspondiente al rotor liso presenta una pobre correlación (coeficiente de correlación de 0.773 con mayor dispersión en la Figura 3.28). En la Figura 3.28 se puede corroborar la tendencia de los datos de la correlación y los obtenidos numéricamente dando una tendencia importante para poder validar las ecuaciones conseguidas del análisis de regresión dentro de los rangos de las variables estudiadas.

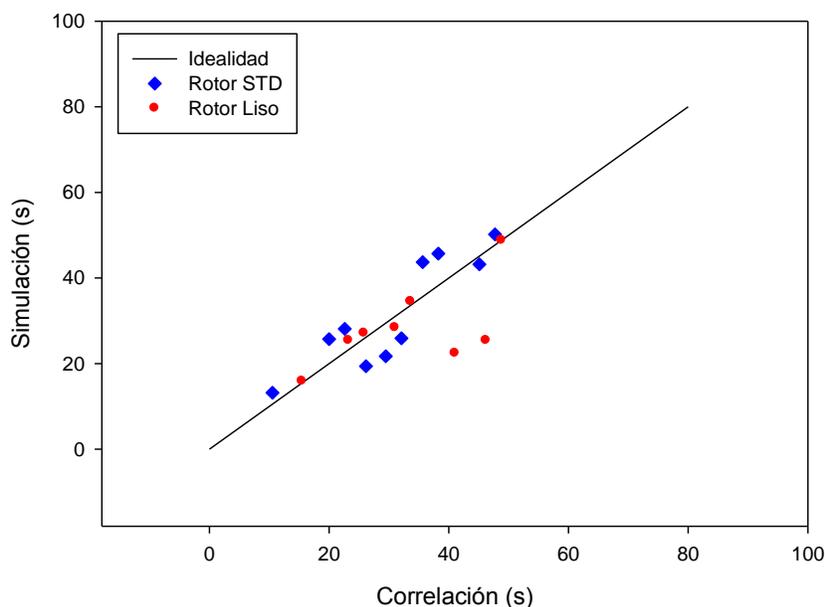


Figura 3.28. Dispersión de las correlaciones obtenidas y simuladas numéricamente para el rotor estándar (diamantes azules) y rotor liso (círculos rojos).

En cada ecuación es visto que el tiempo de mezclado varía inversamente proporcional con la velocidad del rotor y directamente proporcional tanto para el flujo de gas como para el punto de inyección.

En la Tabla 3.2, se presenta cuantitativamente la aportación de cada variable en el tiempo de mezclado. El diseño de rotor es el que influye mayoritariamente en el tiempo de mezclado

teniendo los valores numéricos más altos si se considera solo la constante de cada ecuación, la diferencia es de 20.04 segundos menos con el rotor estándar respecto al liso. Comparando los coeficientes de las ecuaciones, el parámetro que acompaña a la velocidad angular del rotor es más negativo en la ecuación del rotor liso, indicando que el tiempo de mezclado se ve disminuido aún más que con el rotor estándar, ésta variable también es altamente significativa en el tiempo de mezclado después del diseño de rotor.

		Aportación en t_{mix} para cada diseño de rotor (s)	
		STD	Liso
Constante de rotor en correlación		42.73	62.77
Velocidad angular del rotor (rpm)	300	-16.56	-24.36
	583	-32.18	-47.34
Flujo de gas (L/min)	0	0	0
	20	9.48	7.78
	40	18.96	15.56
Altura del punto de inyección (m)	0.0 (Novel)	0	0
	0.15 (Convencional)	2.60	2.60

Tabla 3.2. Aportación de cada variable en el tiempo de mezclado en base a las correlaciones obtenidas con la regresión lineal múltiple.

En cambio, el coeficiente para la cantidad de gas inyectado es mayor para el rotor estándar siendo más influyente para este rotor, lo cual mencionado anteriormente, la razón de éste efecto se puede atribuir a que el flujo de gas disminuye la agitación por afectar el efecto bombeo en el rotor estándar. La influencia que tiene por sí misma esta variable es que al duplicar el flujo de gas, también aporta el doble de tiempo por lo que no es conveniente utilizar

altos flujos. Aún así, la significancia que tiene en el tiempo de mezclado es menor que la del diseño de rotor y la velocidad de rotación.

El punto de inyección es la variable menos influyente en el proceso, sin embargo es notorio que aporta el mismo incremento en el tiempo para ambos rotores siendo de 2.6 segundos cuando el flujo es convencional, pero se deja en claro que la inyección por el fondo es ligeramente más efectiva que la inyección convencional.

Capítulo 4. Discusión de resultados

4.1 Efecto del tipo de inyección de gas

Como ya se ha visto en los resultados mencionados (Figuras 3.17, 3.18, 3.20 y 3.27), el efecto del punto de inyección sobre el mezclado es difícil de determinar de manera cualitativa puesto que no se distingue una tendencia clara para todos los casos. A pesar de eso, la inyección Novel mejora el mezclado tanto para altas como bajas velocidades de rotor y se distingue más claramente con el rotor liso, donde en base a los resultados numéricos, la turbulencia es mayor con la inyección por el fondo (ver Figura 3.13, experimentos 2, 3, 4 y 5), el flujo de gas se distribuye mejor según contornos de fase de la Figura 3.11 y se transfiere una mayor velocidad al fluido por aumentar la distancia de ascenso de las burbujas debido a fuerzas boyantes predominan sobre las fuerzas de arrastre que transfieren movimiento y turbulencia al líquido haciendo que así la energía mecánica contribuya al rompimiento de burbujas repercutiendo en un desgasificado más efectivo y menores tiempos de mezclado.

Con el rotor liso se observa que la velocidad del fluido está determinada por la transferencia de cantidad de movimiento de la inyección de gas en su ascenso a la superficie y además si la inyección es por el fondo es aún mayor la contribución.

En los ensayos con rotor estándar, el cual genera mayor turbulencia (Figura 3.14), no se aprecia una tendencia clara del efecto del punto de inyección del gas sobre el mezclado porque este rotor contribuye mayoritariamente a la agitación con generación de turbulencia, siendo casi tres veces mayor la magnitud de la viscosidad cinemática turbulenta comparada con el rotor liso. La inyección de gas envuelve al rotor en burbujas haciendo más ineficiente la agitación o inhibiendo la transferencia de cantidad de movimiento entre el rotor y el líquido. Cualitativamente, en la Figura 3.14 se observa éste efecto de la inyección de gas sobre la turbulencia en el sistema con rotor estándar.

Otro efecto que se distingue de la inyección Novel, es que para el rotor liso, se crea una zona de baja presión justo debajo del rotor contribuyendo con el efecto bombeo (contornos de presión, Figuras 3.15 y 3.16) propiciando así una mejor agitación. Ésta contribución es poca pero es suficiente para mejorar el mezclado y se puede apreciar más claramente la aportación de turbulencia con el rotor liso a 300 rpm en la Figura 3.13 en los experimentos 2 y 3.

En base a los resultados calculados de tiempo de mezclado (Figura 3.8), es muy distinguible que se tienen menores tiempos de mezclado con la técnica de inyección de gas por el fondo así como también se demuestra en base a la correlación y a pesar de ser una contribución baja, es significativa porque sería ventajosa para la desgasificación debido a que el tiempo de residencia de las burbujas es mayor de acuerdo a las observaciones hechas en el modelo físico (Figura 3.1). La inyección Novel provee un mayor rompimiento de las burbujas produciendo burbujas más homogéneas de menor tamaño. Estas características garantizarían un desgasificado más eficiente al generarse un área mayor de contacto entre gas y aluminio líquido permitiendo un mayor flujo de hidrógeno del aluminio líquido hacia la burbuja de gas. Otra ventaja de la inyección por el fondo es que no se requeriría de rotores y flechas perforadas, previniendo fugas causadas por posibles grietas o poros en las piezas de grafito, lo cual podría alargar el tiempo de vida de estos dispositivos con un ahorro en costos de material.

4.2 Efecto del flujo de gas inyectado

Los resultados del efecto de la cantidad de gas inyectado (Figuras 3.19, 3.20 y 3.21) y correlaciones obtenidas sobre el tiempo de mezclado indican que al aumentar el flujo de gas también se incrementa el tiempo de mezclado, dando los menores tiempos precisamente cuando no hay flujo de gas. La aportación al tiempo de mezclado es de 8 y 9.5 segundos con un flujo bajo hasta aportar el doble de tiempo con el doble de flujo (Tabla 3.2, datos de correlación). Sin embargo el hecho de que no haya flujo de gas no va a producir desgasificación alguna, pues no se involucran los fenómenos de transporte de hidrógeno del baño líquido a las burbujas del gas y su posterior liberación a la atmosfera.

Para el rotor liso a bajas revoluciones, la razón de éste comportamiento es que la ausencia de burbujas implica que el rotor tenga un mejor contacto con la fase líquida, siendo más eficiente para transferir movimiento como se aprecia en los vectores de velocidad en la Figura 3.9 en los experimentos 1 a 5. El flujo de gas en este caso promueve la mayoría de la agitación y determina el patrón de flujo viéndose reflejado en las altas velocidades de líquido en la misma dirección que asciende el gas. Esto causa una recirculación cerca de la superficie por encima del rotor y muy bajas velocidades de fluido en la parte baja del reactor provocando un patrón de flujos menos homogéneo, lo que causa que cuando el trazador es agregado por la parte superior, éste tarde más tiempo en transportarse a zonas inferiores de menor agitación, como se puede ver en la Figura 3.13 (experimentos con rotor liso). También la distribución del gas a altos flujos con este rotor es menor y se concentra también en la parte superior debido al mismo patrón de flujos (Figura 3.11).

En el caso de altas velocidades del rotor liso, el efecto que tiene una inyección de gas sobre los patrones de flujos es menos apreciable con bajo flujo de gas (Figura 3.9, experimentos 6 a 10). En estos casos tanto el rotor como el gas inyectado contribuyen con la agitación, siendo el rotor el que proporciona la mayoría del movimiento al baño (contornos de viscosidad cinemática turbulenta, Figura 3.13). En general la distribución de la turbulencia con rotor liso e inyección de gas está distribuida principalmente en la parte superior del reactor y es la razón de que el trazador tarde más en llegar a zonas de menor agitación por lo que el tiempo de mezclado es mayor con un aumento en el flujo de gas.

Para el rotor estándar, la inyección de gas influye poco en el patrón de flujo, sin embargo una inyección mayor de gas altera levemente el ángulo de descarga del líquido acercándolo a la horizontal donde es más notoria a bajas velocidades como se aprecia en la Figura 3.10. Con este rotor el flujo de gas en cualquiera de los puntos de inyección afecta de dos maneras: el flujo de gas afecta la presión de vacío en la zona baja del rotor y consecuentemente altera el efecto bombeo y se verá reducido al compararlo cuando no hay inyección de gas; y el otro efecto es que el rotor se envuelve con burbujas del gas afectando la eficiencia de agitar el baño tan vigorosamente por limitar el contacto íntimo entre el rotor y el baño.

La turbulencia generada por el rotor estándar es mayor sin presencia de gas y esto se debe a que el efecto bombeo es mayor que en presencia de un flujo de gas (ver Figura 3.14, contornos de viscosidad cinemática turbulenta para el rotor estándar), y en la Figura 3.16 inciso 16 (sin flujo de gas) pues se tiene una menor presión debajo del rotor comparada con los incisos 17 a 20 (con inyección de gas) en la misma zona. Por estas razones se obtienen menores tiempos de homogenizado con el rotor estándar sin inyección de gas pues la turbulencia y la agitación promovida por el rotor dominan el mezclado. En cuanto al tiempo de mezclado con rotor estándar, la influencia de los flujos entre 20 y 40 L/min es poca en magnitud y distribución de la turbulencia.

Un mayor flujo de gas con el rotor estándar no implica una mejor distribución del gas. En las figuras de contornos de fracción de la fase gaseosa (Figura 3.12) es claro que la distribución de la fase dispersa es mejor con bajos flujos de gas y bajas velocidades del rotor, pero para altas velocidades del mismo rotor, la distribución del gas entre altas y bajas cantidades de gas inyectado es muy parecida, implicando que la cinética de desgasificación sea más eficiente en todo el baño.

Con el rotor estándar se tienen mejores distribuciones de gas que con el rotor liso. Si se pueden obtener mejores distribuciones de gas y menores tiempos de mezclado con menor flujo, el hecho de utilizar una menor cantidad de gas purgante sería una ventaja substancial para el proceso de desgasificado de aluminio con rotor inyector.

4.3 Efecto del diseño de rotor

El efecto del tipo de rotor se exhibe cualitativamente en las Figuras 3.22 a 3.24, y en la Tabla 3.2 se puede notar cuantitativamente una diferencia importante en la contribución que tiene cada rotor en el tiempo de mezclado dando una diferencia de hasta 20 segundos menos con el rotor estándar. Este comportamiento es esperado ya que el rotor estándar genera la mayor parte de la turbulencia al ser más eficiente el transporte de cantidad de movimiento debido a su diseño con aspas (Figura 3.13 y 3.14). Éste parámetro es el más determinante no solo en el tiempo de

mezclado sino para toda la fluidinámica del sistema. Además el diseño del rotor estándar presenta un hueco en la parte inferior que provoca el famoso efecto de bombeo, el cual consiste en la creación de una zona de baja presión debajo del rotor que succiona al fluido y lo avienta a través de las toberas laterales del rotor en dirección radial y se presente una mayor inclinación en las isobaras de presión (Figura 3.16, contornos de presión). La descarga del líquido bombeado puede con un ángulo debajo de la horizontal como se apreció en los mapas vectoriales del rotor estándar y diferenciándose con los ángulos del rotor liso que son en la horizontal y puede llegar a inhibirse a bajas velocidades e rotor y altos flujos. Cualitativamente, en el modelo físico se aprecia la influencia que tienen los rotores en la formación del vórtice (Figura 3.1). Aunque no se pudo determinar por completo la magnitud del vórtice con las simulaciones, se tiene la misma tendencia de la forma y mayores tamaños con rotor estándar y con altas revoluciones de rotor.

Para el rotor liso, a bajas revoluciones, la agitación está dominada por la inyección de gas con recirculaciones que suelen presentarse arriba y abajo del rotor, mientras que a altas revoluciones la transferencia de movimiento está determinada por el giro del rotor (Figura 3.9) con un ángulo de descarga horizontal pero influenciada por el movimiento ascendente del gas. En contraste con el rotor estándar, se presenta un patrón de flujo desarrollado (Figura 3.10) con zonas de alta recirculación debajo del rotor con velocidades promedio mucho más altas que con el rotor liso y donde se observa un ángulo de descarga por debajo de la horizontal afectado sólo por altos flujos de gas que reducen éste ángulo a un valor más cercano de la horizontal.

Los contornos de fase gas muestran que el rotor estándar propicia una mejor distribución del gas en el líquido (Figuras 3.11 y 3.12) ya que con el rotor liso se observa una dispersión de gas en la zona superior del otro y con el rotor estándar se propicia una dispersión más homogénea de gas, alcanzado zonas como el fondo y el vértice entre fondo y pared. En las configuraciones de rotor estándar a altas revoluciones (Figura 3.12, experimentos 17, 18, 19 y 20) se tiene la mejor distribución de gas ya que por el efecto bombeo, las burbujas de gas al pasar por los huecos y ser golpeadas por las aspas, se transfiere una mayor energía a las burbujas

favoreciendo su rompimiento y son arrojadas hacia la parte baja de la olla por el ángulo de descarga presente y distribuido por los patrones de flujo formados.

La eficiencia del mezclado se ve mayormente afectada por la turbulencia, es por eso que el rotor estándar tiene una mayor generación de agitación mejor distribuida tanto en la parte superior como en la inferior del rotor comparado con el rotor liso cuando se tienen las mismas condiciones de operación. Inclusive el menor tiempo de mezclado lo tiene el ensayo con valores de viscosidad cinemática turbulenta más altos (Figura 3.14, exp. 16). Esta configuración de rotor estándar a 583 rpm sin inyección de gas registró un tiempo mezclado de 13.2 segundos (el menor de todos los casos estudiados).

Asimismo, los contornos de presión del rotor estándar (Figura 3.16) muestran una zona de baja presión debajo del rotor mucho más pronunciada que con el rotor liso (Figura 3.15), esto es lo que genera el efecto de bombeo debajo y es por eso que se alcanza mejor agitación, turbulencia y dispersión de gas en las zonas de cercanas a las paredes del reactor. Por tales motivos, el rotor estándar propicia un mezclado mejor debido a una transfiere una agitación más efectiva al sistema pero a altas velocidades se generan vórtices muy pronunciado exponiendo un área mayor a la atmósfera corriendo el riesgo de propiciar reacciones de oxidación y absorción de hidrógeno hacia el baño desde la humedad del ambiente.

4.4 Efecto de la velocidad de rotor

El factor más importante que tiene la velocidad del rotor es que a altas revoluciones se tiene una mayor energía para mezclar viéndose reflejada en los altos valores y mejor distribución de la viscosidad cinemática turbulenta como se considera en las Figuras 3.13 y 3.14 así como en los tiempos de mezclado menores cuando la velocidad del rotor es mayor sustentándose en base a las correlaciones obtenidas y las Figuras 3.25 a 3.26. Una mayor velocidad angular propicia una mayor transferencia de cantidad de movimiento al fluido en la componente radial dominando sobre las fuerzas boyantes en el ascenso de las burbujas, la distribución del gas es mejor hacia las paredes del recipiente (Figuras 3.11 y 3.12, fracción de volumen de la fase gas) y en

consecuencia se tiene un mezclado más efectivo. En las correlaciones se puede observar de manera cuantitativa que a mayor velocidad del rotor disminuye el tiempo de mezclado y también se nota que afecta más en el rotor liso que en el rotor estándar. El rotor liso se ve más favorecido porque la velocidad del rotor es la que promueve la mayor parte de la agitación en el proceso, mientras que el rotor estándar con solo su diseño de aspas y huecos es el que propicia la mayoría de la agitación.

También el tamaño del vórtice se ve aumentado con mayores revoluciones del rotor como se distingue en las observaciones del modelo físico en la Figura 3.1, al propiciar una mayor fuerza centrífuga del líquido hacia las paredes suministrando los perfiles de presión más inclinados. El tamaño de burbuja igualmente se ve afectado de tal manera que a altas revoluciones propician tamaños menores de burbujas causadas por la mayor energía mecánica aplicada por el rotor y la flecha resultando en el rompimiento de burbujas por la energía turbulenta promovida, mejorando la cinética de desgasificado al haber una área mayor entre el gas purgante y el baño líquido. También un aumento en las revoluciones por minuto del rotor produce mayor efecto bombeo al crear una mayor caída de presión debajo del rotor, mejorando la agitación en la olla.

Para revoluciones de 300 rpm y rotor liso se nota una pobre transferencia de cantidad de movimiento al líquido y al gas comparada con el rotor estándar, donde el flujo de gas gobierna en el patrón de flujos propiciado por las fuerzas boyantes y fricción durante su ascenso (Figura 3.9, ensayos 2, 3, 4 y 5). A revoluciones de 583 rpm con éste rotor se ven mayores vectores de velocidad en general y se pueden apreciar recirculaciones que se generan en justo en encima y debajo del rotor, favoreciendo una mayor agitación mecánica proporcionada por el rotor. El efecto que tiene el flujo de gas es menos dominante pero se observan contribuciones tanto del rotor como de las burbujas en los patrones de flujo y se obtiene una mejor agitación dando los menores tiempos de mezclado para estas configuraciones.

Se tienen patrones de flujo muy parecidos para altas y bajas velocidades con el rotor estándar, diferenciándose solo por la magnitud de los vectores de velocidad (Figura 3.10), lo que indica que la velocidad de los patrones y recirculaciones de flujo son directamente proporcionales a la

velocidad angular del rotor. Demostrado junto con las regresiones multilineales que el tiempo de homogenizado depende también de la velocidad del líquido y mientras mayores sea éste el tiempo de mezclado será menor.

Sin dejar de lado las consecuencias que traería un vórtice más pronunciado debido a mayores velocidades de rotor, una mejor agitación se pudo lograr y en consecuencia una mayor energía turbulenta para el mezclado, por lo que es mejor para alcanzar homogenizados más rápidamente en el reactor.

Capítulo 5. Conclusiones

En este trabajo se realizó un estudio del mezclado en el proceso de desgasificado de aluminio equipado con el rotor inyector mediante modelación física y matemática, obteniendo resultados satisfactorios de tiempo de mezclado para diferentes variables del sistema mediante el seguimiento de un trazador añadido al medio líquido.

El desarrollo de un modelo matemático *Euleriano-Euleriano* para comparar los resultados del modelo físico fue realizado con ayuda de la aplicación CFD *PHOENICS* con el que se representó la fluidinámica del sistema bifásico de naturaleza turbulenta. A pesar de las dificultades de modelar la turbulencia, se logró acoplar satisfactoriamente con casi todas las configuraciones experimentales que se ensayaron. La evolución del trazador y tiempos de mezclado obtenidos con las simulaciones son muy parecidos en magnitud y forma a los resultados con el modelo físico, pudiendo validar el modelo matemático. Con estos datos numéricos se propuso obtener una correlación para cada diseño de rotor donde se pudo constatar cuantitativamente la influencia de cada parámetro de operación sobre el tiempo de homogenizado.

El mezclado en este sistema depende principalmente de la turbulencia generada en el baño pero también de la distribución que ésta tenga dentro de la olla y de los patrones de flujo que se establecen. Una distribución de gas y turbulencia más homogénea (especialmente hacia las zonas bajas del reactor cercanas a la pared) hará más eficiente tanto el mezclado como la desgasificación del baño. También el tamaño de burbuja es un factor determinante en la fluidinámica y desgasificación del sistema, aunque no se evaluó su efecto como tal en el modelo matemático, las burbujas de menor tamaño propician mejores tiempos de mezclado así como una cinética de desgasificación más rápida.

De las variables estudiadas se tiene que el diseño del rotor es la más importante en la fluidinámica, homogenizado y desgasificado del baño, dando una agitación más vigorosa y

alcanzando a distribuir mejor los patrones de flujo y gas en zonas bajas de la olla ocasionada por el efecto de bombeo que se genera debajo el rotor. También provee rompimiento de burbujas para producir unas más pequeñas incrementando así el área de contacto entre gas y líquido haciendo que la desgasificación sea ventajosa. La desventaja que se tiene con el rotor estándar es que generan vórtices más pronunciados dando lugar a que se disuelva más hidrógeno por la humedad de la atmósfera y se presente oxidaciones debido a que se expone mayor área interfacial al ambiente.

El efecto de la velocidad de rotor también es de suma importancia por la contribución de energía mecánica que aporta y que se transforma en energía de mezclado, principalmente a altas velocidades de rotor. Los menores tiempos de mezclado se obtuvieron a altas revoluciones para ambos rotores. Una alta velocidad de rotor agita mejor al baño al incrementar la convección y la turbulencia, distribuir mejor a las burbujas en toda la olla y en magnificar el fenómeno de bombeo en el rotor estándar mejorando así el mezclado.

Un aumento en el flujo de gas inyectado aumenta ligeramente el tiempo de mezclado debido a que disminuye la velocidad promedio en el fluido ocasionada por una pobre transferencia de cantidad de movimiento del rotor al líquido por la presencia de gas en medio y por perjudicar el efecto bombeo así como modificar el patrón de flujos. Aun así, la agitación se ve mejorada en algunos casos por la inyección de gas debido a las fuerzas boyantes, principalmente con el rotor liso. Aunque se mezcla mejor sin inyección de gas, no es posible realizar la desgasificación del hidrógeno.

El efecto que tiene el tipo de inyección de gas sobre los tiempos de mezclado es que introduciendo el gas por el fondo (Novel) se obtienen homogenizados ligeramente más rápidos que con la técnica convencional. La ventaja que representa la inyección Novel contra la técnica convencional es que el tiempo de residencia del gas es mayor al recorrer una distancia más larga en su ascenso a la superficie beneficiando la cinética de desgasificación, además los rotores y flechas estarían sin perforaciones facilitando su fabricación y previniendo posibles fugas de gas que se pudieran tener.

Tomando en cuenta los efectos de las variables estudiadas se considera que las mejores condiciones donde se obtiene un homogenizado eficiente del baño, una favorable cinética de desgasificación y un menor costo en cuanto a consumo de gas y fabricación de piezas, son con un rotor estándar a 583 rpm con una inyección por el fondo de 20L/min. Éste caso tiene una buena dispersión del gas hacia las zonas bajas del reactor y posee tamaños de burbujas muy pequeños así como una turbulencia mayor y más homogénea en todo el sistema.

Las correlaciones obtenidas indican que se tuvieron las mismas tendencias que se analizaron anteriormente, lo que hace que éstas sean una aportación significativa en el estudio de las variables más importantes que influyen sobre el tiempo de mezclado en el proceso de desgasificación de ollas de aluminio con el rotor inyector.

5.1 Trabajo futuro

Como trabajo futuro se propone estudiar el efecto que tendrían otras variables del sistema como son: tamaño de burbuja, altura del rotor, otras técnicas de medición de trazador como conductimetría, variar los puntos de lectura de trazador, añadir uno a varios baffles al reactor para evitar la formación del vórtice así como hacer un mejor estudio de la turbulencia (a través de modelarla con otros modelos de turbulencia distinto al $k-\epsilon$). También sería recomendable evaluar los efectos de transferencia de calor, haciendo experimentos y simulando un baño de aluminio líquido. Finalmente, se pueden explorar otras técnicas de solución numérica para resolver el modelo matemático y mejorar la convergencia.

Referencias bibliográficas

1. Totten, George E. Handbook of Aluminum, Vol 1. Physical Metallurgy and Process. EUA 2003.
2. J.R. Davis. ASM Specialty Handbook: Aluminum and Aluminum Alloys. ASM International, EUA 1993.
3. Geoffrey K. Singworth. "Practical Degassing of Aluminum". Modern Casting, March 1988.
4. J. Szekely. "The Mathematical and Physical Modelling of Metals Processing Operations Metallurgical". Treatises. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society), 1987.
5. Mariola Saternus, Jan Botor. "The physical and mathematical model of aluminium refining process in reactor URO-200". TMS (The Minerals, Metals & Materials Society).
6. M. Jahoda, L. Tomásková, M. Mostek. "CFD prediction of liquid homogenisation in a gas-liquid stirred tank". Chemical Engineering Research and Design, 2009.
7. Autumn Fjeld, James W. Evans & D. Corleen Chesonis. "Gas Fluxing of Aluminum: Modeling Fluid Dynamics and Magnesium Removal". TMS (The Minerals, Metals & Materials Society).
8. M. Maniruzzaman and M. Makhlof. "Mathematical Modeling and Computer Simulation of the Rotating Impeller Particle Flotation Process: Part I. Fluid Flow". Metallurgical and Materials Transactions. Abril 2002.
9. M. Maniruzzaman and M. Makhlof. "Mathematical Modeling and Computer Simulation of the Rotating Impeller Particle Flotation Process: Part II. Particle Agglomeration and Flotation". Metallurgical and Materials Transactions. Abril 2002.

10. Z. C. Hu, E. L. Zhang and S. Y. Zeng. "Degassing of magnesium alloy by rotating impeller degasser: Part 1 - Mathematical modelling". *Materials Science and Technology*, 2008.
11. Guofa Mi, Shouping Qi, Xiangyu Liu & Jitai Niu. "Research on water simulation experiment of the rotating impeller degassing process". *Materials Science and Engineering A*, 2008.
12. Jin L Song, Fabio Chiti, Waldemar Bujalski, Alvin W Nienow & Mark R Jolly. "Study of Aluminum Molten Cleaning Process Using Physical Modelling and CFD". *Lights Metals 2004*, TMS (The Minerals, Metals & Materials Society).
13. F. Scargiali, A. D'Orazio, F. Grisafi and A. Brucato. "Modelling and Simulation Of Gas-Liquid Hydrodynamics in Mechanically Stirred Tanks". *Chemical Engineering Research and Design*. May 2007.
14. Torres Patiño Iván Daniel. "Estudio de una nueva técnica de desgasificación con rotor inyector asistido por modelado físico y matemático". Tesis de Licenciatura UNAM, Facultad de Química, México 2009.
15. Robles Flores Iván. "Modelado Físico de la Fluidinámica durante la Desgasificación de Al por la Técnica de Rotor-Inyector". Tesis de Licenciatura UNAM, Facultad de Química, México 2009.
16. Aguayo de la Rosa Héctor Benjamín. "Comparación de la desgasificación de aluminio líquido usando inyección de gas convencional y por el fondo asistido por simulación numérica". Tesis de Licenciatura UNAM, Facultad de Química, México 2010.
17. Edward L. Paul. "Handbook of Industrial Mixing: Science and Practice". Wiley-Interscience. EUA 2004.
18. John E. Hatch. "Aluminum: Properties and Physical Metallurgy". ASM. EUA 1990.
19. Coulson, John M., "Ingeniería Química Tomo I: Flujo de fluidos, transmisión de calor y transferencia de materia". Editorial Reverté. España 1979.
20. "Phoenics On-Line Information (POLIS)", Cham Company, Reino Unido 2011.

Anexo 1. Ejemplo de archivo Q1

```
TALK=F;RUN( 1, 1)
CPVNAM=VDI;SPPNAM=Core
IRUNN = 1 ;LIBREF = 0
      Group 1. Run Title
TEXT(LISO 583RPM 20L NOVEL MIX      )
BOOLEAN(RESTT)
RESTT=T
NAMFI=PHIA
      Group 2. Transience
STEADY=F
RSET(U,0.,120.,1200)
RSET(T,1,1200,1.)
      Groups 3, 4, 5 Grid Information
RSET(M,NX,NY,NZ,tolerance)
RSET(M,20,40,100)
CARTES=F
*****
      Group 6. Body-Fitted coordinates
      * X-cyclic boundaries switched
XCYIZ( 1, T ) ; XCYIZ( 2, T ) ; XCYIZ( 3, T )
XCYIZ( 4, T ) ; XCYIZ( 5, T ) ; XCYIZ( 6, T )
XCYIZ( 7, T ) ; XCYIZ( 8, T ) ; XCYIZ( 9, T )
XCYIZ( 10, T ) ; XCYIZ( 11, T ) ; XCYIZ( 12, T )
XCYIZ( 13, T ) ; XCYIZ( 14, T ) ; XCYIZ( 15, T )
XCYIZ( 16, T ) ; XCYIZ( 17, T ) ; XCYIZ( 18, T )
XCYIZ( 19, T ) ; XCYIZ( 20, T ) ; XCYIZ( 21, T )
XCYIZ( 22, T ) ; XCYIZ( 23, T ) ; XCYIZ( 24, T )
XCYIZ( 25, T ) ; XCYIZ( 26, T ) ; XCYIZ( 27, T )
XCYIZ( 28, T ) ; XCYIZ( 29, T ) ; XCYIZ( 30, T )
XCYIZ( 31, T ) ; XCYIZ( 32, T ) ; XCYIZ( 33, T )
XCYIZ( 34, T ) ; XCYIZ( 35, T ) ; XCYIZ( 36, T )
XCYIZ( 37, T ) ; XCYIZ( 38, T ) ; XCYIZ( 39, T )
XCYIZ( 40, T ) ; XCYIZ( 41, T ) ; XCYIZ( 42, T )
XCYIZ( 43, T ) ; XCYIZ( 44, T ) ; XCYIZ( 45, T )
XCYIZ( 46, T ) ; XCYIZ( 47, T ) ; XCYIZ( 48, T )
XCYIZ( 49, T ) ; XCYIZ( 50, T ) ; XCYIZ( 51, T )
XCYIZ( 52, T ) ; XCYIZ( 53, T ) ; XCYIZ( 54, T )
XCYIZ( 55, T ) ; XCYIZ( 56, T ) ; XCYIZ( 57, T )
XCYIZ( 58, T ) ; XCYIZ( 59, T ) ; XCYIZ( 60, T )
XCYIZ( 61, T ) ; XCYIZ( 62, T ) ; XCYIZ( 63, T )
XCYIZ( 64, T ) ; XCYIZ( 65, T ) ; XCYIZ( 66, T )
XCYIZ( 67, T ) ; XCYIZ( 68, T ) ; XCYIZ( 69, T )
XCYIZ( 70, T ) ; XCYIZ( 71, T ) ; XCYIZ( 72, T )
XCYIZ( 73, T ) ; XCYIZ( 74, T ) ; XCYIZ( 75, T )
```

```
XCYIZ( 76, T ) ; XCYIZ( 77, T ) ; XCYIZ( 78, T )
XCYIZ( 79, T ) ; XCYIZ( 80, T ) ; XCYIZ( 81, T )
XCYIZ( 82, T ) ; XCYIZ( 83, T ) ; XCYIZ( 84, T )
XCYIZ( 85, T ) ; XCYIZ( 86, T ) ; XCYIZ( 87, T )
XCYIZ( 88, T ) ; XCYIZ( 89, T ) ; XCYIZ( 90, T )
XCYIZ( 91, T ) ; XCYIZ( 92, T ) ; XCYIZ( 93, T )
XCYIZ( 94, T ) ; XCYIZ( 95, T ) ; XCYIZ( 96, T )
XCYIZ( 97, T ) ; XCYIZ( 98, T ) ; XCYIZ( 99, T )
XCYIZ( 100, T )
*****
      Group 7. Variables:
STORED,SOLVED,NAMED
ONEPHS = F
NAME(146)=GENK ;NAME(147)=CFIP
NAME(148)=DEN1 ;NAME(149)=EL1
NAME(150) =ENUT
SOLVE(P1,U1,U2,V1,V2,W1,W2,R1)
SOLVE(R2,C3)
STORE(ENUT,EL1,DEN1,CFIP,GENK)
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(U1,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(U2,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(V1,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(V2,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(W1,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(W2,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(R1,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(R2,Y,Y,N,Y,N,Y)
SOLUTN(C3,Y,Y,N,N,N,Y)
TURMOD(KEMODL)
*****
      Group 8. Terms & Devices
TERMS (P1 ,Y,Y,Y,Y,Y)
TERMS (R1 ,N,Y,Y,Y,Y)
TERMS (R2 ,N,Y,Y,Y,N,Y)
TERMS (c3 ,N,Y,Y,Y,Y,N)
DIFCUT =0.
DONACC = T
RUPLIM =0.51 ;RLOLIM =0.49
SCHEME(SUPBEE,P1 ,U1 ,U2 ,V1 ,V2 ,W1 ,W2 ,R1 )
SCHEME(SUPBEE,R2,C3)
*****
```

Group 9. Properties
 PRESS0 =1.01325E+05 ;TEMPO =273.
 SETPRPS(1, 67)
 SETPRPS(2, 0)
 PRNDTL(U2)=0.06515 ;PRNDTL(V2)=0.06515
 PRNDTL(W2)=0.06515 ; PRNDTL(c3)=665.
 PRT(U2)=1.0E+10 ;PRT(V2)=1.0E+10
 PRT(W2)=1.0E+10 ;PRT(R2)=1.0E+10
 PRT(U1)=1.0
 PRT(V1)=1.0
 PRT(W1)=1.0
 PRT(EP)=1.314
 PRT(C3)=0.36

Group 10. Inter-Phase Transfer Processes
 CFIPS = GRND2
 RLOLIM =0.49 ;CMDOT =0.
 CFIPC =0.914 ;CFIPD =0.

Group 11. Initialise Var/Porosity Fields
 IF(RESTT) THEN
 FIINIT(P1)=READFI
 FIINIT(U1)=READFI
 FIINIT(V1)=READFI
 FIINIT(W1)=READFI
 FIINIT(R1)=READFI
 FIINIT(U2)=READFI
 FIINIT(V2)=READFI
 FIINIT(W2)=READFI
 FIINIT(R2)=READFI
 FIINIT(KE)=READFI
 FIINIT(EP)=READFI
 FIINIT(CFIPS)=READFI
 FIINIT(GENK)=READFI
 FIINIT(DEN1)=READFI
 FIINIT(EL1)=READFI
 FIINIT(ENUT)=READFI
 FIINIT(C3)=0.0
 PATCH(NAOH, INIVAL, 3, 3, 25, 25, 77, 77, 1, 1)
 INIT(NAOH, C3, 0.0, 0.091377195)
 ELSE
 FIINIT(P1)=0. ;FIINIT(R1)=0.
 FIINIT(R2)=1.
 PATCH(LIQUIDO, INIVAL, 1, 20, 1, 40, 1, 79, 1, 1)
 INIT(LIQUIDO , R1, 0., 1.)
 INIT(LIQUIDO , R2, 0., 0.)
 ENDIF
 INIADD = F

Group 13. Boundary & Special Sources
 PATCH(BUOYANCY, PHASEM, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1,
 1200)
 COVAL(BUOYANCY, U1, FIXFLU, GRND1)
 COVAL(BUOYANCY, V1, FIXFLU, GRND1)
 COVAL(BUOYANCY, W1, FIXFLU, GRND1)
 PATCH(OUT, HIGH, 1, 20, 1, 40, 100, 100, 1, 1200)
 COVAL(OUT, R2, 1000., 0.)
 BUOYA =0. ; BUOYB =0.
 BUOYC =-9.81
 XCYLE = T
 WALLA =1.0E-04 ;WALLB =0.
 EGWF = T
 WALLCO = GRND5

Group 15. Terminate Sweeps
 LSWEEP = 20
 RESFAC =1.0E-03

Group 16. Terminate Iterations
 LITER(R1)=1 ;LITER(R2)=1

Group 17. Relaxation
 RELAX(P1 ,LINRLX,1.0E-20)
 RELAX(C3 ,LINRLX,0.5)
 RELAX(U1 ,FALSDT,1.0E-20)
 RELAX(U2 ,FALSDT,1.0E-20)
 RELAX(V1 ,FALSDT,1.0E-20)
 RELAX(V2 ,FALSDT,1.0E-20)
 RELAX(W1 ,FALSDT,1.0E-20)
 RELAX(W2 ,FALSDT,1.0E-20)
 RELAX(R1 ,LINRLX,1.0E-20)
 RELAX(R2 ,LINRLX,1.0E-20)
 RELAX(KE ,LINRLX,1.0E-20)
 RELAX(EP ,LINRLX,1.0E-20)
 KELIN = 0

Group 18. Limits
 VARMAX(R1)=1. ;VARMIN(R1)=1.0E-06
 VARMAX(R2)=1. ;VARMIN(R2)=1.0E-06

Group 19. EARTH Calls To GROUND
 Station
 GENK = T
 IDISPB = 1 ;IDISPC = 1200

Group 22. Monitor Print-Out
 IXMON = 7 ;IYMON = 40 ;IZMON = 2
 NPRMON = 100000

```

NPRMNT = 1
TSTSWP = -1
*****
      Group 23.Field Print-Out & Plot Control
NPRINT = 100000
NTPRIN = 100000 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL = 100000
YZPR = T
ISWPRF = 1 ;ISWPRL = 100000
*****
      Group 24. Dumps For Restarts
IDISPA = 50 ;IDISPB = 1 ;IDISPC = 900
CSG1  ='M'
GVIEW(P,-0.707586,0.691791,-0.144042)
GVIEW(UP,-0.070592,0.133621,0.988515)

> DOM,  SIZE,      3.141600E+00, 2.500000E-01,
6.300000E-01
> DOM,  MONIT,      1.021020E+00, 2.462121E-
01, 9.444444E-03
> DOM,   SCALE,      1.000000E+00,
1.000000E+00, 1.000000E+00
> DOM,  INCREMENT,  1.000000E-02, 1.000000E-
02, 1.000000E-02
> GRID, RSET_X_1,   20, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_1,    1, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_2,    1, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_3,    2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_4,    2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_5,    2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_6,    2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_7,    2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_8,    2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_9,    2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_10,   2, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Y_11,   22, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_1,   27, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_2,    8, 1.000000E+00
> GRID, RSET_Z_3,   65, 1.000000E+00
> DOM,  INI_AMB,  YES
> DOM,  INI_BUOY, YES

> OBJ,  NAME,      PARED
> OBJ,  POSITION,    0.000000E+00, 2.500000E-
01, 0.000000E+00
> OBJ,  SIZE,      3.141600E+00, 0.000000E+00,
6.300000E-01
> OBJ,  ROT-MODE,  OLD
> OBJ,  GEOMETRY,  polcu10
> OBJ,  VISIBLE,   NO

```

```

> OBJ,  TYPE,      PLATE
> OBJ,  COLOR-MODE, USER
> OBJ,  COLOR-VAL,  31
> OBJ,  OPAQUE,    50
> OBJ,  TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ,  ROUGH,     2.5E-03

> OBJ,  NAME,      FONDO
> OBJ,   POSITION,      0.000000E+00,
0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ,  SIZE,      3.141600E+00, 2.500000E-01,
0.000000E+00
> OBJ,  ROT-MODE,  OLD
> OBJ,  GEOMETRY,  polcu10
> OBJ,  VISIBLE,   NO
> OBJ,  TYPE,      PLATE
> OBJ,  COLOR-MODE, USER
> OBJ,  COLOR-VAL,  31
> OBJ,  OPAQUE,    50
> OBJ,  TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE

> OBJ,  NAME,      INLET
> OBJ,   POSITION,      0.000000E+00,
0.000000E+00, 0.000000E+00
> OBJ,  SIZE,      3.141600E+00, 4.762500E-03,
0.000000E+00
> OBJ,  ROT-MODE,  OLD
> OBJ,  GEOMETRY,  polcu5t
> OBJ,  TYPE,      INLET
> OBJ,  PRESSURE,   P_AMBIENT
> OBJ,  PRESSURE-2, P_AMBIENT
> OBJ,  VELOCITY,   0. ,0. ,0.
> OBJ,  VOLUFLOW-2, 1.667E-04
> OBJ,  TIME_LIMITS, 60. ,120.
> OBJ,  TURB-INTENS, 5.

> OBJ,  NAME,      FLECHA
> OBJ,   POSITION,      0.000000E+00,
0.000000E+00, 2.200000E-01
> OBJ,  SIZE,      3.141600E+00, 2.540000E-02,
4.100000E-01
> OBJ,  ROT-MODE,  OLD
> OBJ,  GEOMETRY,  polcu8
> OBJ,  VISIBLE,   NO
> OBJ,  TYPE,      BLOCKAGE
> OBJ,  COLOR-MODE, DEFAULT2
> OBJ,  COLOR-VAL,  30
> OBJ,  OPAQUE,    50

```

```

> OBJ, MATERIAL, 198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE

> OBJ, NAME, LISO
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 8.333300E-02, 5.000000E-02
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu8
> OBJ, VISIBLE, NO
> OBJ, TYPE, BLOCKAGE
> OBJ, COLOR-MODE, DEFAULT2
> OBJ, COLOR-VAL, 30
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, MATERIAL, 198,Solid with smooth-wall friction
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE

> OBJ, NAME, FLECHAEX
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 2.540000E-02, 2.200000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 0.000000E+00, 4.100000E-01
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 1.550711 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO1DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 0.000000E+00, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 8.466000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.

> OBJ, NAME, LISO2DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 8.466000E-03, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 8.467000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW
> OBJ, VEL_LOW, 0.258431 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO3DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 1.693300E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 8.467000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW
> OBJ, VEL_LOW, 1.292249 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO4DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 2.540000E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.655000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW

```

```

> OBJ, VEL_LOW, 1.845438 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO5DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 3.505500E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.655000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW
> OBJ, VEL_LOW, 2.434891 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO6DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.471000E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.655000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW
> OBJ, VEL_LOW, 3.024344 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO7DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 5.436500E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.656000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW
> OBJ, VEL_LOW, 3.613828 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO8DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 6.402100E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.656000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW
> OBJ, VEL_LOW, 4.203343 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO9DWN
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 7.367700E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.656000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, LOW
> OBJ, VEL_LOW, 4.792857 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISOEX
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 8.333300E-02, 1.700000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 0.000000E+00, 5.000000E-02
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 5.087614 ,0. ,0.

```

```

> OBJ, NAME, LISO1UP
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 2.540000E-02, 2.200000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.655000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 1.845438 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO2UP
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 3.505500E-02, 2.200000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.655000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 2.434891 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO3UP
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 4.471000E-02, 2.200000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.655000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 3.024344 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO4UP
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 5.436500E-02, 2.200000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.656000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 3.613828 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO5UP
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 6.402100E-02, 2.200000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.656000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 4.203343 ,0. ,0.

> OBJ, NAME, LISO6UP
> OBJ, POSITION, 0.000000E+00, 7.367700E-02, 2.200000E-01
> OBJ, SIZE, 3.141600E+00, 9.656000E-03, 0.000000E+00
> OBJ, ROT-MODE, OLD
> OBJ, GEOMETRY, polcu10
> OBJ, TYPE, PLATE
> OBJ, COLOR-MODE, USER
> OBJ, COLOR-VAL, 212
> OBJ, OPAQUE, 50
> OBJ, TIME_LIMITS, ALWAYS_ACTIVE
> OBJ, POROSITY, 0.
> OBJ, SIDE, HIGH
> OBJ, VEL_HIGH, 4.792857 ,0. ,0.
STOP

```


C--- GROUP 19. Special calls to GROUND from EARTH

19 GO TO (191,192,193,194,195,196,197,198,199,1910,1911),ISC
191 CONTINUE

C * ----- SECTION 6 ---- Finish of iz slab.

```
IF (ISTEP.EQ.1)THEN
IF (ISWEEP.EQ.1)THEN
LOFVOL=LOF(VOL)
DO IX=1, NZ
DO IY=1, NY
WRITE(380,*)IX,IY,IZ,F(LOFVOL+NY*(IX-1)+IY)
ENDDO
ENDDO
ELSE
ENDIF
ELSE
ENDIF
```

```
CALL GETYX(LBNAME('C3'),GC3,NYD,NXD)
IF (ISWEEP.EQ.LSWEEP)THEN
DO IX=1,NX
DO IY=1,NY
IF (IZ.EQ.71.AND.IY.EQ.34.AND.IX.EQ.18)THEN
WRITE(390,*)ISTEP,GC3(20,1)
ELSE
ENDIF
ENDDO
ENDDO
ELSE
ENDIF
```

```
RETURN
197 CONTINUE
END
```