

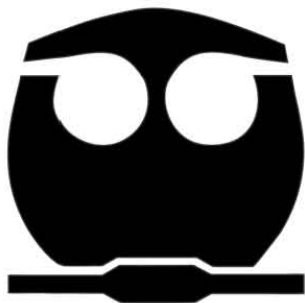


UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

MODELO CINÉTICO Y TERMODINÁMICO
DE LA DESOXIDACIÓN APLICADO A UN
MODELO FÍSICO DEL PROCESO DE
DESGASIFICACIÓN CON
R O T O R - I N Y E C T O R

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO METALÚRGICO
P R E S E N T A
WIENER FERNANDO CRUZ MÉNDEZ



México, D. F.

2013



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: **Profesor:** Eusebio Cándido Atlatenco Tlapanco.

VOCAL: **Profesor:** Carlos González Rivera.

SECRETARIO: **Profesor:** Marco Aurelio Ramírez Argáez.

1er. SUPLENTE: **Profesor:** Héctor Cruz Mejía.

2do. SUPLENTE: **Profesor:** Adrián Manuel Amaro Villeda.

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

**Edificio D, Facultad de Química, UNAM,
Departamento de Ingeniería Metalúrgica,
Laboratorio de Solidificación.**

ASESOR DEL TEMA:

Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez.

SUPERVISOR TÉCNICO:

M. en I. Adrián Manuel Amaro Villeda.

SUSTENTANTE:

Wiener Fernando Cruz Méndez.

Contenido

CONTENIDO	I
ÍNDICE DE TABLAS	III
ÍNDICE DE FIGURAS	V
NOMENCLATURA	IX
SÍMBOLOS UTILIZADOS	IX
SÍMBOLOS GRIEGOS	XIII
SUBÍNDICES	XIV
SUPERÍNDICES	XV
NÚMEROS ADIMENSIONALES	XVI
RESUMEN	1
CAPÍTULO 1 ANTECEDENTES	2
HIPÓTESIS	2
OBJETIVOS	2
SOLUBILIDAD DE HIDRÓGENO EN ALUMINIO	3
<i>Disolución de hidrógeno</i>	3
<i>Solubilidad en aluminio puro</i>	3
<i>Solubilidad en aleaciones de aluminio</i>	6
MÉTODOS DE DESGASIFICACIÓN DE ALUMINIO	8
MECANISMO DE DESGASIFICACIÓN DE ALUMINIO MEDIANTE LA INYECCIÓN DE UN GAS INERTE (ARGÓN) [31]	9
PROCESOS DE REFINAMIENTO DE ALUMINIO	11
<i>Resumen de las etapas de refinamiento del metal</i>	12
<i>Procesos de refinamiento batch</i>	13
Proceso tradicional de inyección de Cl ₂ /Ar	13
Proceso de tratamiento de aluminio en el crisol (TAC)	14
Proceso IMN	15
Proceso Inyección de flujo rotatorio (Rotatory Fluxing Injection, RFI) / Inyección de gas rotatorio (Rotatory Gas Injection, RGI)	16
Proceso de unidad de desgasificado rápido (Rapid Degassing Unit, RDU)	16
Proceso de filtración por burbujeo de gas (GBF)	16
Proceso de remoción de metales alcalinos	17
<i>Proceso continuos (en línea) de refinamiento</i>	19
Proceso ALCOA 503	19
Proceso de flotación con gas inerte por medio de boquilla giratoria (Proceso SNIF)	20
Proceso ALPUR	21
Proceso MINT	22
Proceso de desgasificado de multivaciado	23

Proceso con sistema de inyección de gas	24
Proceso Alcan Filter Degasser (AFD).....	25
Proceso Desgasificado Compact Alcan.....	26
Proceso SIGMA	27
Proceso HI.....	27
REVISIÓN BIBLIOGRÁFICA	28
<i>Introducción</i>	28
<i>Modelos físicos y modelos a escala</i>	28
<i>Modelado matemático del proceso de desgasificado de aluminio líquido</i>	30
<i>Modelos analíticos</i>	30
<i>Modelos que utilizan dinámica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics (CFD))</i>	37
CAPÍTULO 2 MODELO MATEMÁTICO.....	39
SUPOSICIONES DEL MODELO MATEMÁTICO	41
DISCUSIÓN DE LAS CONSIDERACIONES	41
MODELO MATEMÁTICO	43
<i>Balance de masa en un volumen de control</i>	43
<i>Balance en reactores batch</i>	47
CORRELACIONES PARA EL CÁLCULO DE LAS PROPIEDADES TERMODINÁMICAS	48
<i>Determinación de coeficientes de transporte de masa</i>	48
<i>Determinación del diámetro promedio de burbuja</i>	53
CAPÍTULO 3. RESULTADOS.....	57
VALIDACIÓN DEL MODELO	57
CÁLCULO DE LA EFICIENCIA DE DESGASIFICADO	66
<i>Dependencia del diámetro de burbuja en función de la velocidad del rotor</i>	71
CAPÍTULO 4. CONCLUSIONES.....	73
CAPÍTULO 5. BIBLIOGRAFÍA Y REFERENCIAS	74
APÉNDICE I.....	84
PARÁMETROS PARA LA ESTIMACIÓN DE LA VISCOSIDAD DE GASES ECUACIONES (2.29) - (2.31)	87
NÚMEROS ADIMENSIONALES	88
APÉNDICE II	89
DIAGRAMA DE FLUJO DEL ALGORITMO UTILIZADO EN ESTE TRABAJO.....	89
CÓDIGO FUENTE DEL PROGRAMA PARA SIMULAR EL DESGASIFICADO DE UN SISTEMA H ₂ O-O ₂ , MEDIANTE LA TÉCNICA DE ROTOR INYECTOR	90

Índice de tablas

<i>Tabla 1. Correlaciones para la solubilidad de hidrógeno en aluminio y sus aleaciones [21].</i>	6
<i>Tabla 2. Correlaciones para la solubilidad de hidrógeno en aleaciones de aluminio-litio [4, 5].</i>	7
<i>Tabla 3. Métodos para remover impurezas sólidas y gaseosas en Al líquido.</i>	8
<i>Tabla 4. Determinación de patrones de flujo para obtener la dispersión de burbujas en tanques batch y continuos en los reactores URC-700 y URO-200 [37].</i>	29
<i>Tabla 5. Optimización de parámetros en el diseño experimental de Wang, L., y colaboradores [55].</i>	36
<i>Tabla 6. Fórmulas termodinámicas utilizadas para el desarrollo del modelo.</i>	49
<i>Tabla 7. Correlaciones para el cálculo de $k \bullet A$ para reactores GIR.</i>	52
<i>Tabla 8. Correlaciones para el cálculo de $k \bullet A$ para reactores GSR.</i>	52
<i>Tabla 9. Correlaciones utilizadas para el cálculo del diámetro de burbuja promedio en reactores GIR.</i>	53
<i>Tabla 10 Correlaciones utilizadas para el cálculo del diámetro de burbuja promedio en reactores GSR.</i>	53
<i>Tabla 11. Intervalos de validez de las ecuaciones (2.36)-(2.41).</i>	54
<i>Tabla 12. Parámetros experimentales utilizados para la eliminación de oxígeno disuelto en agua, mediante la inyección de N_2 en un modelo físico, realizados por Torres [63] y Hernández [74].</i>	57

<i>Tabla 13. Cálculo y cambio de la eficiencia de desgasificado para los trabajos de Torres [63] y Hernández [74] para un cambio de 90 % de la concentración inicial de oxígeno disuelto.</i>	<i>67</i>
<i>Tabla 14. Parámetros para la ecuación de viscosidad de varios gases Lemmon y Jacobsen [73].</i>	<i>87</i>
<i>Tabla 15. Coeficientes para la ecuación de colisión integral [73].</i>	<i>87</i>
<i>Tabla 16. Números adimensionales utilizados en este trabajo.</i>	<i>88</i>

Índice de figuras

<i>Figura 1. Solubilidad de hidrógeno en aluminio puro y algunas aleaciones. [27].....</i>	<i>4</i>
<i>Figura 2. Comparación de las eficiencias de desgasificado mediante diferentes técnicas [27-29].</i>	<i>9</i>
<i>Figura 3. Efecto de diferentes métodos de desgasificación en una aleación Al-7Si-3Mg [30].</i>	<i>9</i>
<i>Figura 4. Transporte de H desde el seno del líquido hacia la burbuja de Ar por difusión y convección.</i>	<i>10</i>
<i>Figura 5. Transporte difusivo del H a través de la capa límite.</i>	<i>10</i>
<i>Figura 6. Proceso de adsorción-desorción en la superficie de la burbuja de Ar. ...</i>	<i>10</i>
<i>Figura 7. Difusión de H₂ dentro de la burbuja de Ar.</i>	<i>10</i>
<i>Figura 8. Remoción de H₂ a través de la superficie del Al líquido.</i>	<i>10</i>
<i>Figura 9. Resumen de la clasificación de métodos de refinamiento de aluminio... 11</i>	
<i>Figura 10. Secuencia del procesado del metal fundido. [32].</i>	<i>12</i>
<i>Figura 11. Eventos que ocurren durante la remoción de elementos alcalinos y alcalinotérreos.</i>	<i>14</i>
<i>Figura 12. Proceso TAC [33].</i>	<i>15</i>
<i>Figura 13. Proceso IMN.</i>	<i>15</i>
<i>Figura 14. Unidad RDU.</i>	<i>17</i>
<i>Figura 15. a) Diagrama esquemático de un reactor GBF. b) dispersión de burbujas de Ar en un modelo físico de agua para un reactor GBF, flujo de Ar=30 litros por minuto, velocidad del rotor 500 revoluciones por minuto [30].</i>	<i>18</i>
<i>Figura 16. Diagrama esquemático del proceso HYDRO RAM.</i>	<i>18</i>

<i>Figura 17. Geometría del rotor y patrones de flujo para el proceso RAM.</i>	<i>18</i>
<i>Figura 18. Proceso ALCOA 503.</i>	<i>19</i>
<i>Figura 19. Remoción de impurezas en aluminio líquido del proceso ALCOA 503.</i>	<i>20</i>
<i>Figura 20. Esquema del reactor SNIF [35].</i>	<i>21</i>
<i>Figura 21. Geometría de la boquilla giratoria [35, 36].</i>	<i>21</i>
<i>Figura 22. Proceso ALPUR.</i>	<i>22</i>
<i>Figura 23. Proceso MINT.</i>	<i>23</i>
<i>Figura 24. Procesos DMC.</i>	<i>24</i>
<i>Figura 25. Diagrama del reactor GIFS.</i>	<i>25</i>
<i>Figura 26. Proceso AFD.</i>	<i>26</i>
<i>Figura 27. Proceso ACD.</i>	<i>26</i>
<i>Figura 28. Proceso SIGMA.</i>	<i>27</i>
<i>Figura 29. Dimensiones del sistema utilizado, en donde d_{tanque} representa el diámetro del tanque.</i>	<i>39</i>
<i>Figura 30. Reactor industrial para el desgasificado de aluminio [63, 64].</i>	<i>40</i>
<i>Figura 31. Modelo físico del reactor. 1) Junta rotativa. 2) Oxímetro. 3) Rotor de Nylamid. 4) Flecha de Nylamid. 5) Compresor. 6) Flujómetro. 7) Motor. 8) Reactor. 9) Recipiente externo del reactor [64].</i>	<i>40</i>
<i>Figura 32. Rotor FDU-SPR de FOSECO.</i>	<i>40</i>
<i>Figura 33. Rotor B fabricado en Nylamid [63].</i>	<i>40</i>
<i>Figura 34. Volumen de control en el reactor con el gas de purga.</i>	<i>45</i>
<i>Figura 35. Representación esquemática de los reactores GIR y GSR.</i>	<i>52</i>
<i>Figura 36. Pantalla ilustrativa del programa desarrollado.</i>	<i>55</i>
<i>Figura 37. Diagrama de flujo del algoritmo propuesto.</i>	<i>56</i>

Figura 38. Resultados experimentales reportados por integrantes del grupo de trabajo; los resultados corresponden al desgasificado de oxígeno en modelo físico bajo diferentes condiciones de operación: velocidad de rotación (N), rapidez de inyección del gas de purga (G) y método de inyección del gas de purga. 58

Figura 39. Representación gráfica de los datos experimentales obtenidos en el modelo físico de Torres [63]. 59

Figura 40. Representación gráfica de los datos experimentales reportados por Hernández [74]. 60

Figura 41. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 1. 536 rpm, 40 lpm inyección de gas convencional. 60

Figura 42. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 5. 536 rpm, 40 lpm inyección de gas por el fondo..... 61

Figura 43. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 2. 536 rpm, 10 lpm inyección de gas convencional. 61

Figura 44. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 6. 536 rpm, 10 lpm inyección de gas por el fondo..... 62

Figura 45. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 3. 290 rpm, 40 lpm inyección de gas convencional. 62

Figura 46. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 7. 290 rpm, 40 lpm inyección de gas por el fondo..... 63

Figura 47. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 4. 290 rpm, 10 lpm inyección de gas convencional. 63

Figura 48 Representación del modelo teórico y los datos del experimento 8. 290 rpm, 10 lpm inyección de gas por el fondo..... 64

<i>Figura 49. Eficiencia de desgasificado teórica.....</i>	<i>68</i>
<i>Figura 50. Eficiencias de desgasificado teóricas y experimentales mediante la inyección del gas convencional. La nomenclatura corresponde a la utilizada en la Tabla 12.....</i>	<i>69</i>
<i>Figura 51. Eficiencias de desgasificado teóricas y experimentales mediante la inyección del gas por el fondo. La nomenclatura corresponde a la utilizada en la Tabla 12.....</i>	<i>69</i>
<i>Figura 52. Comparativo de los datos experimentales obtenidos por Torres de forma convencional y por el fondo versus el modelo matemático bajo las condiciones indicadas.</i>	<i>70</i>
<i>Figura 53. Variación del diámetro promedio de burbuja en función de la velocidad radial del rotor a flujo constante para reactores en donde el gas de purga es inyectado por la técnica convencional.....</i>	<i>72</i>
<i>Figura 54. Diagrama de flujo para el cálculo de A y k_l mediante el algoritmo de Lemoine [66].....</i>	<i>89</i>

Nomenclatura

Símbolos utilizados

Símbolo	Descripción	Unidades
a	Actividad	
A	Área total	m^2
Al	Aluminio	
Al_2O_3	Óxido de Aluminio (alúmina)	
b	Coeficiente para el cálculo de la colisión integral en el cálculo de la viscosidad del N_2	adimensional
C	Concentración de la especie i por cada 100g de j	$\frac{ml\ i}{100g\ j}$
d	Diámetro	m
D	Coeficiente de difusión	$\frac{m^2}{s}$
e	Eficiencia de desgasificado	adimensional
f	Coeficiente de actividad henriano	adimensional
g	Aceleración de la gravedad	$\frac{m}{s^2}$
\dot{G}	Rapidez de flujo del gas inerte	$\frac{kmol}{s}$

Símbolo	Descripción	Unidades
h_i	Actividad henriana del elemento i . Sistema de referencia para la composición al 2 % wt	
H	Altura del tanque	m
\underline{H}	Hidrógeno atómico disuelto en Al líquido	
H_2	Hidrógeno molecular	
H_2O	Agua	
i	Especie $i = \underline{H}, O_2$	
I_v	Rapidez de cambio de volumen de partícula v debido al transporte de material ec. (1.33)	
j	$j = Al, H_2O$	
k	Coefficiente de transporte de masa en la interfase líquido-gas	$\frac{m}{s}$
K	Constante de equilibrio	
\ln	Logaritmo natural	<i>adimensional</i>
\log	Logaritmo de Briggs (logaritmo base 10)	<i>adimensional</i>
m	Molalidad del soluto en equilibrio a una presión, P	$\frac{mol}{kg}$
$m(P^0)$	Molalidad del soluto en equilibrio a la presión estándar, p^0	$\frac{mol}{kg}$

Símbolo	Descripción	Unidades
m^0	Valor estándar de la molaridad e.g. 8.93×10^{-4}	$\frac{mol}{kg}$
M	Masa del baño líquido	kg
MW	Masa molecular	$\frac{kg}{kmol}$
n	Número de moles	mol
n_v	Función de densidad de distribución de tamaño de partícula	
N	Velocidad radial del rotor	rpm
N_D	Número adimensional para el modelo de J. A. Dantzig, J. A. Clumper y E. Tyler	
O_2	Oxígeno	
P	Presión	Pa
$\frac{P^*}{V_L}$	Potencia total de entrada (mecánica + gas) por unidad de volumen	$\frac{W}{m^3}$
r	Radio	m^2
R	Constante universal de los gases	$\frac{J}{mol \cdot K}$
S	Solubilidad	$\frac{g}{100g}$
S_v	Rapidez neta de adición de nuevas partículas	

Símbolo	Descripción	Unidades
t	Tiempo	s
T	Temperatura absoluta	K
T^*	Temperatura adimensional para el cálculo de la viscosidad del agua	adimensional
\tilde{T}	Temperatura para el cálculo de cálculo de la viscosidad del N_2	adimensional
U	Velocidad de ascenso	$\frac{m}{s}$
V	Volumen total de la fase líquida	m^3
XW	Fracción molar del solvente	$\frac{mol}{mol}$
W_s	Rapidez de colisión entre partículas ec (1.33)	
Z	Número adimensional	Adimensional

Símbolos griegos

Símbolo	Descripción	Unidades
ΔG	Energía libre de Gibbs	$\frac{J}{mol}$
ΔH	Cambio en la entalpía	$\frac{J}{mol}$
α	Número adimensional	Adimensional
β	Número adimensional	Adimensional
δ	Densidad adimensional	Adimensional
$\frac{\varepsilon}{\kappa}$	Parámetro de energía de Lennard-Jonnes	K
ϕ	Número adimensional	Adimensional
ρ	Densidad	$\frac{kg}{m^3}$
μ	Viscosidad	$Pa \cdot s$
σ	Tensión superficial	$\frac{N}{m}$
σ	Parámetro de tamaño de Lennard-Jonnes Ec (2.30)	nm
τ	Temperatura adimensional	Adimensional
Ω	Parámetro de colisión integral	Adimensional
ξ	Constante de rapidez de la reacción de desgasificado por unidad de área de burbuja	$\frac{mol}{m^2}$

Subíndices

Símbolo	Descripción
0	Estado inicial o estándar
<i>Al</i>	Aluminio
<i>air</i>	Aire
<i>b</i>	Burbuja
<i>c</i>	Crítico
<i>cil</i>	Cilindro
<i>col</i>	Columna
<i>dil</i>	diluido
<i>eq</i>	Equilibrio
<i>g</i>	Fase gaseosa
<u><i>H</i></u>	Hidrógeno atómico
<i>H</i> ₂	Hidrógeno molecular
<i>H</i> ₂ <i>O</i>	Agua
<i>imp</i>	Rotor
<i>inert</i>	Inerte
<i>l</i>	Fase líquida
<i>m</i>	Concentración molar

Símbolo	Descripción
<i>Mg</i>	Magnesio
O_2	Oxígeno molecular
<i>r</i>	Reactor
<i>res</i>	Residual
<i>s</i>	Superficie de la fase líquida expuesta al aire
<i>T</i>	Total
<i>tanque</i>	Reactor

Superíndices

Símbolo	Descripción
0	Estado estándar de referencia
<i>eq</i>	equilibrio
<i>in</i>	Interno
<i>ini</i>	Estado inicial

Números Adimensionales

Número	Símbolo	Expresión
Aeración	Ae	$\frac{Q_g}{N \cdot d_{imp}^3}$
Euler	Eu	$\frac{Po}{d_{imp}^2 \cdot \rho_l \cdot N^2}$
Froude	Fr	$\frac{d_{imp}^2 \cdot N^2}{g \cdot H_L}$
Froud crítico	Fr_c	$\frac{d_{imp}^2 \cdot N_{cri}^2}{g \cdot H_L}$
Reynolds rotor	Re_{imp}	$\frac{d_{imp}^2 \cdot N \cdot \rho_L}{\mu_L}$
Weber	We	$\frac{d_{imp}^3 \cdot \rho_l \cdot N^2}{\sigma_l}$
Sherwood	Sh	$\frac{k_l \cdot d_{imp}}{D_{A-B}}$

Resumen

En el aluminio fundido y sus aleaciones se pueden obtener porosidades de hidrógeno debido a la alta solubilidad de hidrógeno en estado líquido a altas temperaturas y su disminución de esta variable al producirse el enfriamiento del material. Al alcanzar el nivel de saturación, se forman burbujas que producen discontinuidades de formas esféricas, alargadas y/o dendríticas dentro del material afectando las propiedades mecánicas y con esto produciendo piezas terminadas de baja calidad metalúrgica.

Para evitar los defectos antes mencionados, se debe de realizar el proceso de desgasificado en el estado líquido, etapa en la cual se procura reducir el contenido de hidrógeno a niveles en donde se pueda evitar la formación de porosidades.

La inyección de gases en el seno del metal líquido es un fenómeno muy complejo debido a la gran cantidad de parámetros de operación, cinéticos y termodinámicos que se encuentran involucrados, para entender los fenómenos de la fluidinámica se utilizan modelos físicos, los cuales permiten observar los patrones de flujo que determinan en gran medida la eficiencia del proceso de desgasificado.

Se desarrolló un modelo matemático que describe el proceso de desgasificado en un sistema agua-oxígeno, mediante un balance de masa global en un reactor batch con el cual se puede determinar la influencia de los parámetros de operación y de esta manera poder entender un proceso complejo mediante un modelo algebraico sencillo en donde solo es necesario determinar el coeficiente de transporte de masa y el diámetro promedio de las burbujas del gas de purga a partir de correlaciones reportadas en la literatura y validados con datos experimentales realizados previamente.

Capítulo 1 Antecedentes

Hipótesis

- La cinética de desgasificado a través de la purga de gases en una olla equipada con rotor-inyector puede representarse a partir de principios de transporte de masa acoplado a un balance global de materia, en donde la cinética del proceso se puede expresar a través de un coeficiente global de transporte de masa en función de los diferentes parámetros de operación.

Objetivos

- Simular la cinética de desoxidación usando principios de balances de materia y transporte de masa en un modelo físico de una olla batch de desgasificado equipada con rotor-inyector.
- Comparar las cinéticas de mezclado variando el flujo de gas y la rapidez de rotación del rotor.

Solubilidad de hidrógeno en aluminio

Disolución de hidrógeno

Las fundiciones generalmente se producen en ambientes donde el hidrógeno se encuentra invariablemente en forma de vapor de agua, se obtiene en grandes cantidades a partir de los productos de combustión utilizados en el horno, o a partir de la humedad del aire, o mediante la absorción por la superficie durante el proceso de vaciado.

El hidrógeno es el único gas capaz de disolverse en una apreciable cantidad con respecto al estado sólido. Cuando se expone el metal líquido, el vapor de agua se disocia en hidrógeno que se disuelve en forma atómica en el aluminio y el oxígeno forma parte de la escoria. La reacción se puede expresar de la siguiente forma:



La velocidad de reacción se incrementa rápidamente con la temperatura [1], debido al gran cambio de energía libre ΔG^0 , para la reacción reportado por Talbot [2]:

$$\Delta G^0 = -979100 - 719 \cdot T \cdot \log T - 413 \cdot T \left[\frac{J}{mol} \right] \quad (1.2)$$

En donde T es la temperatura en grados kelvin.

Solubilidad en aluminio puro

La solubilidad del hidrógeno en aluminio ha sido estudiada por varios autores [1-26]. Sievert [23] citado por la mayoría de ellos, reportó en 1929 los primeros datos de la solubilidad de hidrógeno en aluminio y la técnica para estudiar dicho fenómeno; el método aún es usado para determinar estos valores; aunque los primeros valores experimentales confiables reportados se atribuyen al artículo de Ransley y Neufeld [22], posteriormente Opie y Grant [21] estudiaron el efecto del

hidrógeno en aluminio puro y aleaciones de Al-Cu y Al-Si. Fowler y Smithell [11], desarrollaron una de las primeras relaciones teóricas sobre la solubilidad de hidrógeno en metales puros. La Figura 1 muestra la solubilidad de hidrógeno en función de la temperatura para aluminio puro y dos aleaciones.

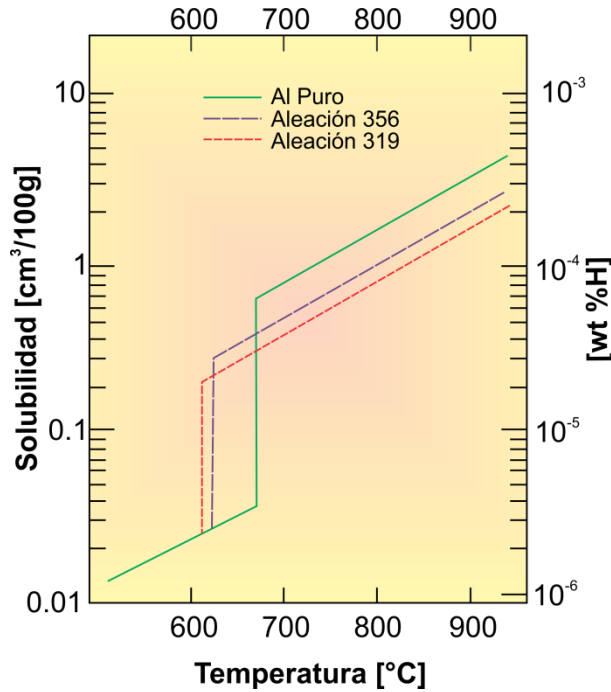


Figura 1. Solubilidad de hidrógeno en aluminio puro y algunas aleaciones. [27]

Se considera que la disociación del hidrógeno gaseoso sigue la reacción:



Donde \bar{H} representa el hidrógeno atómico disuelto en aluminio líquido. El hidrógeno atómico puede disolverse en los intersticios de la estructura FCC de Al. La solubilidad se representa por la constante de equilibrio K en la reacción (1.3). Aplicando la ley de Henry para disoluciones diluidas y considerando que el gas se comporta como ideal, el equilibrio está dado por:

$$K = \frac{a_{\bar{H}}^2}{a_{H_2}} = \frac{(m \cdot f_H / m^0)^2}{P / P^0} \quad (1.4)$$

$$\frac{m}{m(P^0)} = \left[\frac{P}{P^0} \right]^{0.5} \quad (1.5)$$

Donde a_H es la actividad de hidrógeno atómico disuelto en aluminio, a_{H_2} es la actividad de hidrógeno molecular en aluminio a una presión de referencia P^0 (usualmente 101325 Pa), m es la molalidad del soluto en equilibrio a la presión P , m^0 es el valor estándar de la molalidad ($m^0 = 8.93 \times 10^{-4} \frac{mol}{kg}$), $m(P^0)$ es la molalidad del soluto en equilibrio a la presión de referencia P^0 ; f_H es el coeficiente de actividad henriano del hidrógeno disuelto en aluminio.

Aplicando la isoterma de Van't Hoff se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial T} (\ln K)_P = 2 \frac{\partial}{\partial T} \ln \left[\frac{m}{m^0} \right]_P = \frac{\Delta H^0}{RT^2} \quad (1.6)$$

Donde ΔH^0 es la entalpía estándar, R es la constante universal de los gases y T es la temperatura absoluta. Integrando sobre el intervalo donde la entalpía estándar ΔH^0 se pueda considerar constante, se tiene:

$$\ln \left(\frac{m}{m^0} \right) = -\frac{\Delta H^0}{2RT} + \text{constante} \quad (1.7)$$

Los valores para ΔH^0 y la *constante* se obtienen de graficar los valores experimentales de $\ln \left(\frac{m}{m^0} \right)$ vs $\frac{1}{T}$.

En aplicaciones prácticas, la solubilidad de hidrógeno en metales es usualmente designada como S y referida a la unidad S^0 que es igual a 1 cm³ de hidrógeno diatómico medido a 273 K (0 °C) y 101325 Pa (1atm) [25]. Como el hidrógeno se comporta como gas ideal, esta unidad puede ser considerada dentro del SI de unidades igualando la molalidad para el soluto. Con un valor para m^0 igual a

$8.93 \times 10^{-4} \frac{mol}{kg}$, se puede establecer una identidad entre $\frac{S}{S^0}$ y $\frac{m}{m^0}$ la cual satisface las convenciones internacionales de unidades y símbolos [25].

Solubilidad en aleaciones de aluminio.

En soluciones binarias de Al (Al-H) la solubilidad del hidrógeno (a una presión y temperaturas dadas), solamente es determinada por la naturaleza y magnitud de las interacciones entre el los átomos del hidrógeno y aluminio. Sin embargo, para soluciones del tipo Al-H-X, en donde X= Cu, Si, Mg, Zn, Li, Fe, Ti, se presentan los siguientes tipos de interacciones, aluminio con hidrógeno, aluminio con el elemento aleante (X) y el hidrógeno con el elemento aleante. La naturaleza y la magnitud relativa de estas tres interacciones control el comportamiento termodinámico del hidrógeno en los sistemas mencionados. La solubilidad de hidrógeno en el aluminio se ve disminuida por la presencia de elementos aleantes, como se muestra en la Figura 1.

Se han desarrollado muchas correlaciones para determinar el efecto en la solubilidad del hidrógeno en aluminio, los primeros modelos publicado se deben a Opie y Grant [21], en donde estudiaron la solubilidad de hidrógeno a diferentes temperaturas en aluminio puro y aleaciones Al-Cu y Al-Si con diferentes concentraciones de los metales aleantes la Tabla 1 muestra las correlaciones reportadas por los autores.

Aleación	Correlación
Al puro	$\log S = -\frac{2550}{T} + 2.62$ (1.8)
2 wt % Cu	$\log S = -\frac{2950}{T} + 2.90$ (1.9)
4 wt % Cu	$\log S = -\frac{3050}{T} + 2.94$ (1.10)
8 wt % Cu	$\log S = -\frac{3150}{T} + 2.94$ (1.11)
16 wt % Cu	$\log S = -\frac{3150}{T} + 2.83$ (1.12)

Tabla 1. Correlaciones para la solubilidad de hidrógeno en aluminio y sus aleaciones [21].

Aleación	Correlación
32 wt % Cu	$\log S = -\frac{2950}{T} + 2.57$ (1.13)
2 wt % Si	$\log S = -\frac{2800}{T} + 2.79$ (1.14)
4 wt % Si	$\log S = -\frac{2950}{T} + 2.91$ (1.15)
8 wt % Si	$\log S = -\frac{3050}{T} + 2.95$ (1.16)
16 wt % Si	$\log S = -\frac{3150}{T} + 3.00$ (1.17)

Tabla 1(Continuación).Correlaciones para la solubilidad de hidrógeno en aluminio y sus aleaciones [21].

Anyalebechi y colaboradores [4, 5] , desarrollaron correlaciones para aleaciones de Al-Li, en función de la temperatura y a diferentes concentraciones de litio, la Tabla 2 muestra estas correlaciones.

Aleación	Correlación
1 wt % Li	$\log S = -\frac{2113}{T} + 2.568$ (1.18)
2 wt % Li	$\log S = -\frac{2797}{T} + 3.329$ (1.19)
3 wt % Li	$\log S = -\frac{2889}{T} + 3.508$ (1.20)

Tabla 2. Correlaciones para la solubilidad de hidrógeno en aleaciones de aluminio-litio [4, 5]

En trabajos posteriores Anyalebechi y colaboradores [6, 7] analizaron el efecto de elementos aleantes en la solubilidad del hidrógeno en aleaciones de aluminio en los sistemas Al-X, en donde X= Cu, Si, Mg, Zn, Li, Fe, Ti, a partir de datos reportados y mediante regresión multivariable obtuvieron la siguiente correlación:

$$\begin{aligned} \log S = & -1.066 - 3000.35\left(\frac{1}{T}\right) - 0.0133(\text{wt}\%Cu) - 0.0085(\text{wt}\%Si) \\ & + 0.07257(\text{wt}\%Mg) - 0.00783(\text{wt}\%Zn) + 0.24267(\text{wt}\%Li) \\ & - 0.03398(\text{wt}\%Fe) + 0.04338(\text{wt}\%Ti) \end{aligned} \quad (1.21)$$

Métodos de desgasificación de aluminio

Existen tres métodos principales para llevar a cabo la remoción de hidrógeno en el aluminio líquido, son:

1. Desgasificación natural
2. Desgasificación al vacío
3. Desgasificación mediante la inyección de gases o polvos (reactivos y no reactivos)

De las técnicas mencionadas la más eficiente y estudiada es la de inyección de gases, polvos o escorias realizada mediante tapones porosos, lanzas o rotores. De estos métodos, el uso de rotores es la técnica en donde se obtienen mejores resultados [27-29]. La Tabla 3, muestra algunas inyecciones típicas. La Figura 2 y Figura 3 muestran resultados experimentales que describen la superioridad de la técnica de inyección con rotor respecto a las otras formas de inyección.

	Gases	Polvos	Escoria
No reactivo	N ₂ , Ar	KCl, MgCl ₂	NaCl, KCl, MgCl ₂
Reactivo	SF ₆ , Cl ₂	AlF ₃ , AlCl ₃	

Tabla 3. Métodos para remover impurezas sólidas y gaseosas en Al líquido.

El uso de rotores ha sido muy utilizado en reactores para producir un mezclado homogéneo y diámetros de burbuja pequeños (2-8 mm). Se pueden alcanzar grandes áreas de contacto, las cuales favorecen las reacciones interfaciales.

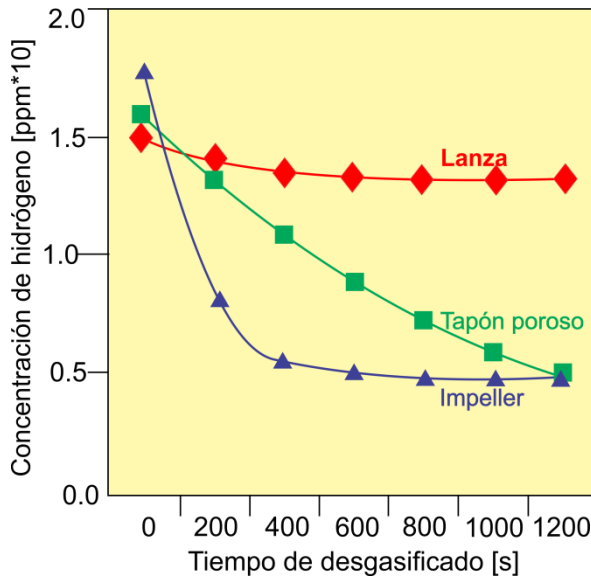


Figura 2. Comparación de las eficiencias de desgasificado mediante diferentes técnicas [27-29].

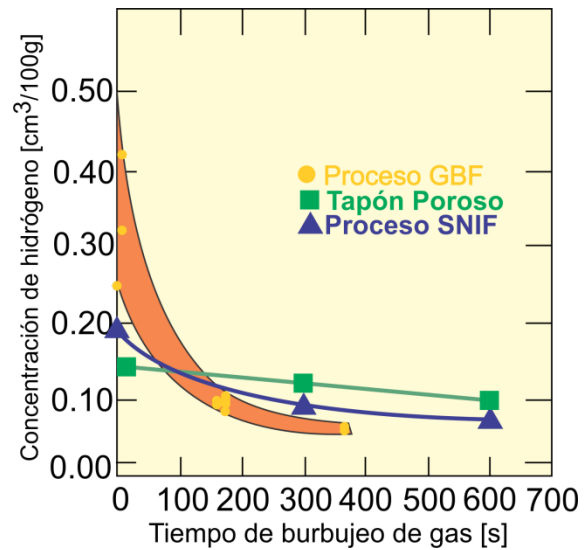


Figura 3. Efecto de diferentes métodos de desgasificación en una aleación Al-7Si-3Mg [30].

Mecanismo de desgasificación de aluminio mediante la inyección de un gas inerte (Argón) [31]

El mecanismo de remoción de hidrógeno es por difusión a través de la interfase metal/gas. El hidrógeno disuelto en el aluminio es transportado desde los alrededores hacia las burbujas de argón mediante los procesos de difusión y convección dentro del seno del fluido (ver Figura 4); a continuación el hidrógeno que se encuentra en los alrededores de la capa límite de la burbuja es transportado por difusión hacia la superficie de la burbuja (ver Figura 5), al llegar a dicha superficie el hidrógeno experimenta el fenómeno de adsorción sobre la misma y la desorción dentro de la burbuja de argón reaccionando el hidrógeno atómico para obtener hidrógeno en forma molecular (ver Figura 6); posteriormente el hidrógeno se difunde hacia el seno de la burbuja de argón (ver Figura 7). Finalmente la mezcla gaseosa de Ar-H₂, asciende por el fluido para escapar por la superficie del metal líquido (ver Figura 8).

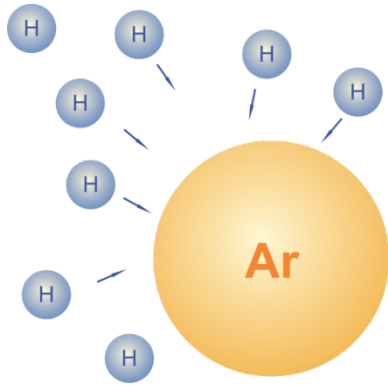


Figura 4. Transporte de H desde el seno del líquido hacia la burbuja de Ar por difusión y convección.

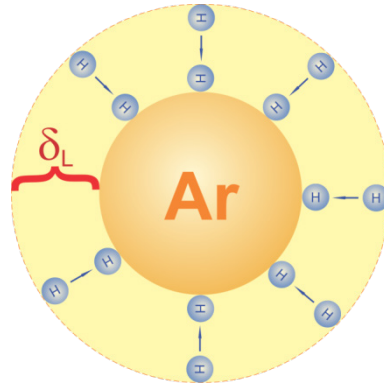


Figura 5. Transporte difusivo del H a través de la capa límite.

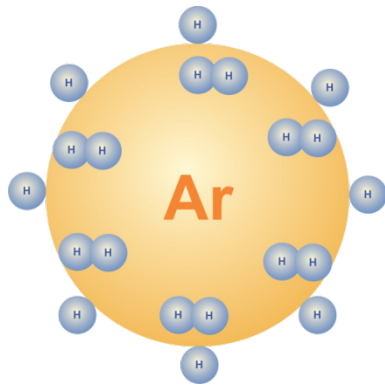


Figura 6. Proceso de adsorción-desorción en la superficie de la burbuja de Ar.

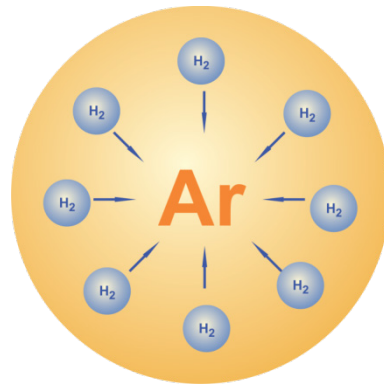


Figura 7. Difusión de H_2 dentro de la burbuja de Ar.

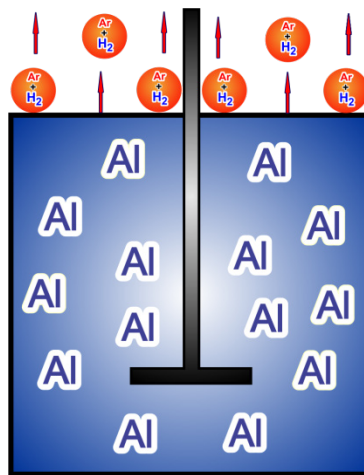


Figura 8. Remoción de H_2 a través de la superficie del Al líquido.

Procesos de refinamiento de aluminio

El proceso de refinamiento de aluminio se puede clasificar por diferentes criterios, estos pueden ser de acuerdo:

- Materia prima
- Uso de Cl_2
- Estado del reactivo
- Tiempo de refinamiento
- Método de refinamiento

La Figura 9 muestra las categorías de cada clasificación.

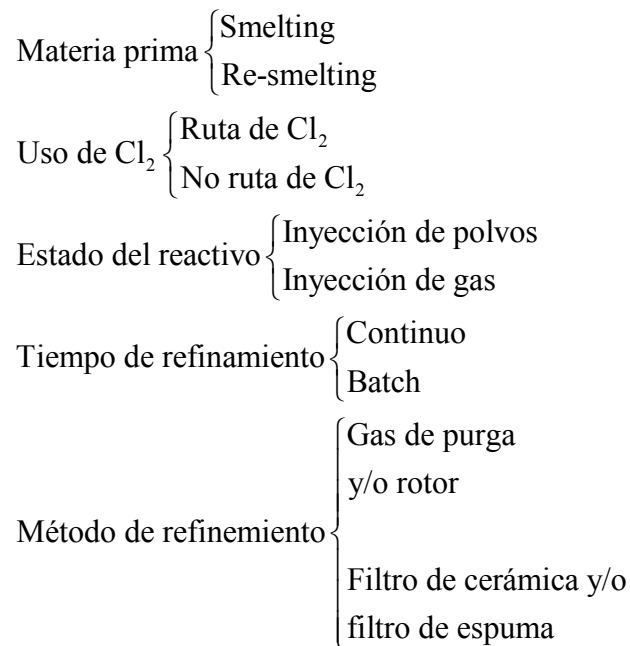


Figura 9. Resumen de la clasificación de métodos de refinamiento de aluminio.

Durante las últimas cuatro décadas se han desarrollado diversos métodos de purificación de aluminio, actualmente el método más empleado es la inyección de gas o mezclas de gases compuestas de nitrógeno, argón y cloro. Los gases son inyectados mediante lanzas, tapones porosos y/o rotores. La inyección por medio de lanzas no suelen ser tan eficientes como los métodos por tapón poroso y rotor.

La inyección de gases mediante el uso de lanzas genera grandes burbujas y tiempos de residencia muy cortos, lo cual afecta directamente al coeficiente de transporte de masa y de ahí su baja eficiencia. El uso de tapón poroso por debajo del reactor es otro método. Por esta vía se alcanzan tamaños de burbuja pequeños y la eficiencia respecto al uso de lanzas es mayor (Figura 2). Para las técnicas antes mencionadas se han diseñado reactores con varios elementos para aumentar la eficiencia del proceso. El uso de rotores para inyectar el gas de purga ha demostrado ser el proceso más eficiente de los tres, ya que se obtienen tamaños de burbuja muy pequeños y el esfuerzo de corte generado proporciona un buen mezclado, con lo cual se obtienen tiempos de residencia más largos y áreas interfaciales mayores.

Resumen de las etapas de refinamiento del metal

Actualmente se dispone de diferentes tecnologías para el refinamiento del aluminio. El éxito de la implementación y uso de estas tecnologías está acompañado solamente cuando se alcanza un equilibrio entre la calidad del metal, productividad, costo e impacto ambiental. La secuencia general del procesado del metal se muestra en la Figura 10 y consiste en el pretratamiento del horno, procesado en el horno, tratamiento en línea (desgasificado y filtración). Se debe de poner atención del vaciado del metal entre cada una de las etapas.

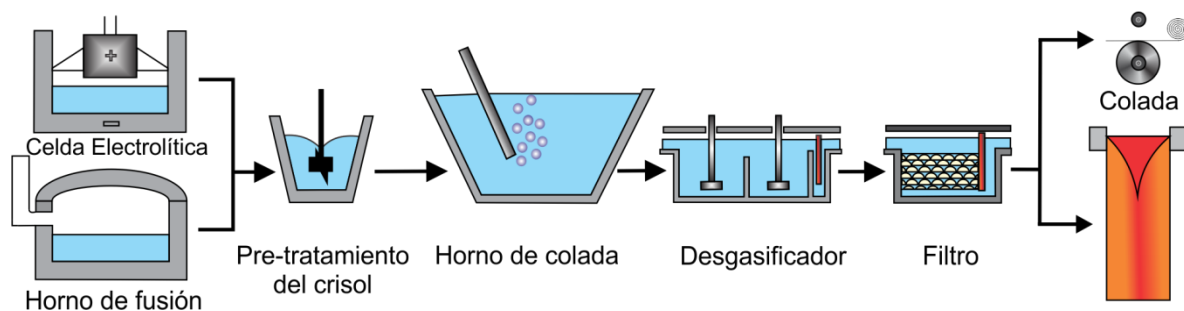


Figura 10. Secuencia del procesado del metal fundido. [32]

Tradicionalmente este proceso de limpieza se le conoce como fluxing, en donde se burbujea cloro puro, mezclas de cloro/nitrógeno o argón (1 a 50 % Cl_2) a través del aluminio fundido aproximadamente a una temperatura de 750 °C, aquí se

eliminas las impurezas por reacción directa. Hasta hace un par de años la industria solo utilizaba cloro como gas de purga, pero debido a los problemas de contaminación su uso ha disminuido dando paso a nuevas alternativas.

El aluminio se obtiene a partir de la celda primaria de electrólisis, el aluminio fundido es pretratado por medio de una lanza, llamada tratamiento del aluminio en el crisol TAC por sus siglas en inglés (Treatment Aluminum Crucible), en donde los metales alcalinos y alcalino-térreos son removidos mediante la inyección de polvos de AlF_3 . Entonces, el aluminio fundido es refinado por medio de la inyección de una mezcla de gases (nitrógeno o argón) y cloro para remover inclusiones y elementos de impurezas. Estos procesos ocurren en reactores batch. Seguido a estos procesos, el aluminio es purificado en reactores continuos, tales como desgasificado o filtración; finalmente el fundido limpio va a los procesos de lingoteo o de colada continua. Es complicado clasificar los procesos existentes en batch o continuos, debido a que algunos procesos como el de desgasificado también se pueden realizar en reactores batch.

Procesos de refinamiento batch

Proceso tradicional de inyección de Cl_2/Ar

En este proceso se utilizan mezclas Cl_2/Ar o Cl_2/N_2 para remover impurezas de elementos e inclusiones en el metal fundido mediante un reactor batch. En la Figura 11 se muestra un reactor de este tipo. Los fenómenos que ocurren durante el proceso son:

1. Las inclusiones previamente depositadas son suspendidas en el seno del líquido.
2. Las inclusiones son removidas por flotación/suspensión y atrapadas en la escoria; este proceso es mejorado con la presencia de Cl_2 .
3. Las inclusiones depositadas en zonas muertas desde el punto de inyección del gas.

4. Se forman gotas de $MgCl_2$ y son suspendidas en el seno del metal, estas pueden flotar o adherirse a las paredes del horno.
5. Ser generan nuevas inclusiones debido a la reacción del metal líquido con la atmósfera o con la escoria.

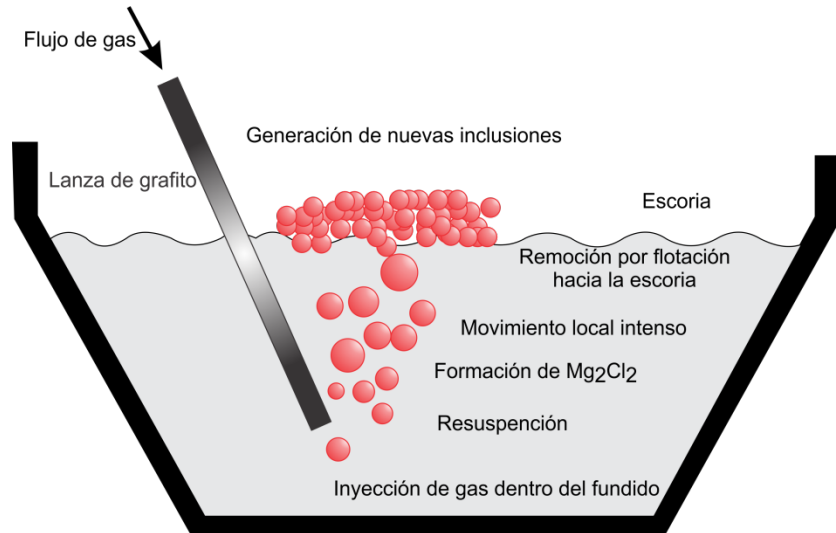


Figura 11. Eventos que ocurren durante la remoción de elementos alcalinos y alcalinotérreos.

Proceso de tratamiento de aluminio en el crisol (TAC)

Este proceso fue desarrollado por la empresa Alcan en 1983 (Figura 12). Este reactor es utilizado para remover elementos alcalinos y alcalino-térreos. El desarrollo de una reacción efectiva entre los polvos de AlF_3 y el aluminio fundido es la clave principal del proceso.

Los parámetros de operación y el diseño deben ser optimizados de manera que el vórtice generado alcance una penetración máxima, combinado con la rápida recirculación de partículas a través del metal. El flujo continuo de fluoruros en la superficie del fundido causa aglomeraciones y permite la formación de pellets, los cuales son agentes inactivos para la remoción de metales alcalinos y previenen la formación de escoria durante el mezclado. Después del tratamiento, estas partículas pueden aglomerarse sobre las paredes del crisol o flotar hacia la superficie y pueden ser recicladas.

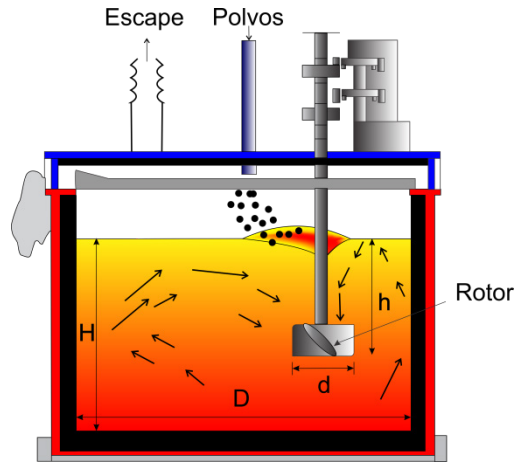


Figura 12. Proceso TAC [33].

En este reactor los niveles de litio pueden alcanzar hasta un nivel de 3 ppm con una eficiencia de 89 %. Las ventajas del proceso sobre otras tecnologías son los bajos costos de energía y operación [33].

Proceso IMN

Este proceso fue inventado por el Instituto Polaco de Metales no ferrosos en 1977. Es un tipo de proceso continuo de desgasificado. El hidrógeno es removido en la misma dirección del flujo de gas de purga. Las burbujas de gas son inyectadas mediante un tapón poroso por debajo del reactor. Se utiliza una mezcla de Ar/Cl₂ o N₂/Cl₂. Este proceso puede remover hasta un 70 % de inclusiones no metálicas (Figura 13).

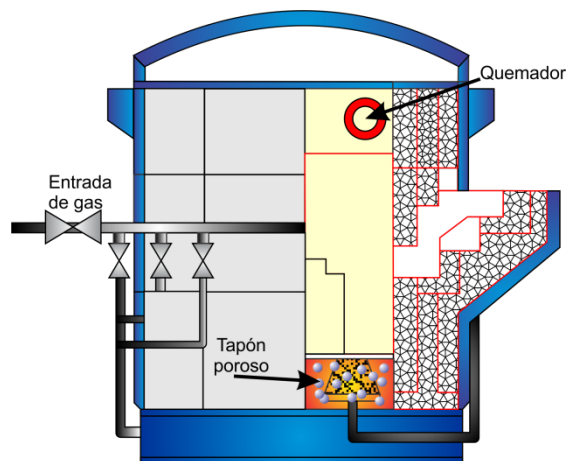


Figura 13. Proceso IMN.

Proceso Inyección de flujo rotatorio (Rotatory Fluxing Injection, RFI) / Inyección de gas rotatorio (Rotatory Gas Injection, RGI)

Este proceso se utiliza para remover metales alcalinos e inclusiones de una forma más eficiente. El proceso RFI utiliza cloruro de potasio y magnesio los cuáles son inyectados con un flujo de nitrógeno, mientras que el proceso RGI utiliza una mezcla de cloro y nitrógeno como gas de arrastre. En el proceso RFI se puede remover calcio desde un valor de 10.7 ppm hasta 4.2 ppm, y el sodio desde 3.1 ppm a 0.8 ppm. Con los procesos RFI y RGI se pueden eliminar inclusiones hasta en un 95 % [34].

Proceso de unidad de desgasificado rápido (Rapid Degassing Unit, RDU)

La compañía FOSECO inventó este proceso en 1986. Como se muestra en la Figura 14, la característica principal de este reactor es la implementación de un rotor, el cual tiene doble función, la de bombear aluminio líquido desde el fondo del reactor, para crear un baño homogéneo y segundo crear burbujas de diámetros pequeños en el gas de purga. Este rotor genera grandes áreas de contacto entre el gas y el aluminio líquido. La vida promedio del rotor es de 6 semanas. Se utilizan mezclas de argón o nitrógeno con cloro (2-5 %). La tendencia general en estos casos es que la eficiencia de remoción de hidrógeno disminuye con el incremento de la rapidez de flujo del metal líquido o la disminución de la rapidez de flujo del gas de purga.

Proceso de filtración por burbujeo de gas (GBF)

El proceso fue desarrollado por Showa Aluminum en 1977. Un diagrama del reactor se muestra en la Figura 15a [30]. El flujo por arriba choca con el flujo por debajo, a la mitad de la altura del rotor, causando una fuerte turbulencia que rompe en burbujas finas y las dispersa homogéneamente en el baño Figura 15b [30]. La disminución de la altura del rotor cerca del fondo del reactor mantiene los patrones de flujo sin cambio. Se puede observar una distribución uniforme de burbujas finas a través del baño. Se utiliza Argón como gas de purga sin el uso de

cloro. Modelos físicos de agua han demostrado que el tamaño promedio de la burbuja es aproximadamente de 5 mm.

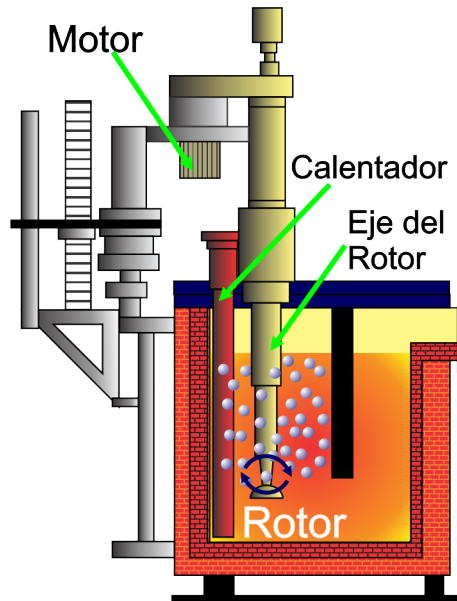


Figura 14. Unidad RDU.

Proceso de remoción de metales alcalinos

La compañía HYDRO (Noruega) inventó este proceso para la remoción de metales alcalinos (Removal of Alkaline Metals, RAM) en el año de 1995 como se muestra en la Figura 16. El proceso RAM es un sistema de refinamiento batch, se pueden obtener burbujas pequeñas porque el metal ingresa por la parte baja del rotor (Figura 17). La fracción de sodio, calcio y litio depende principalmente de la rapidez de alimentación de AlF_3 y la velocidad del rotor mientras que la temperatura y la rapidez de flujo del gas afecta ligeramente (Figura 17).

Parece que las dimensiones del reactor favorecen la remoción de impurezas debido a que se aumenta el tiempo de residencia de las burbujas. El proceso RAM se ha implementado en reactores continuos llamado Reactor HI10 Hycast.

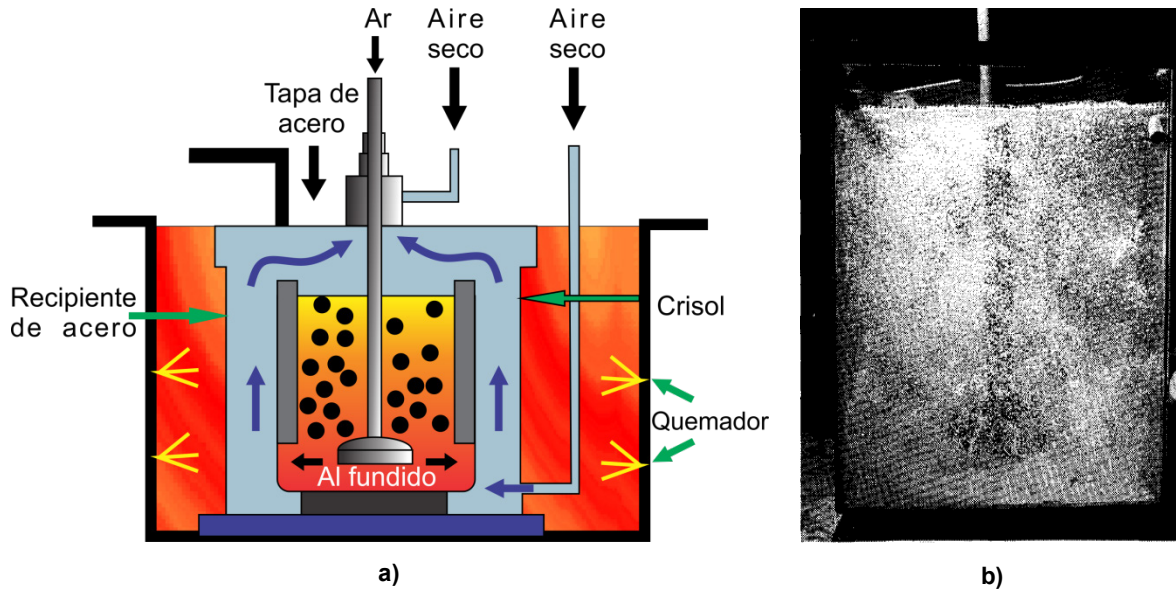


Figura 15. a) Diagrama esquemático de un reactor GBF. b) dispersión de burbujas de Ar en un modelo físico de agua para un reactor GBF, flujo de Ar=30 litros por minuto, velocidad del rotor 500 revoluciones por minuto [30].

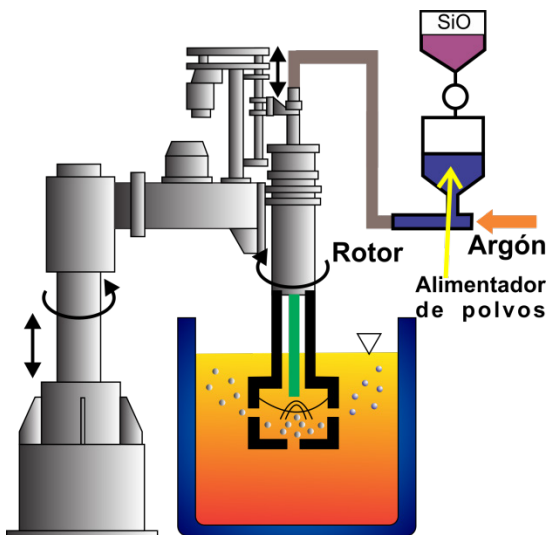


Figura 16. Diagrama esquemático del proceso HYDRO RAM.

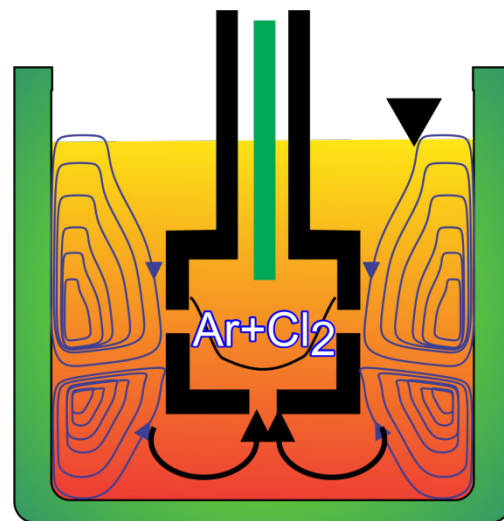


Figura 17. Geometría del rotor y patrones de flujo para el proceso RAM.

Proceso continuos (en línea) de refinamiento

Proceso ALCOA 503

Este proceso fue inventado en 1978 por la empresa ALCOA. Una descripción del reactor se puede observar en la Figura 18. El elemento principal es el dispersor rotatorio de gas; estequiométricamente se requiere introducir Cl_2 por el centro del reactor, para obtener una gran cantidad de burbujas donde se dispersan y ascienden a través de los dispersores. Experimentos a escala en modelos físicos aire-agua muestran que en la zona de reacción, el 50 % de las burbujas formadas son menores a 2mm de diámetro y el 90 % de las burbujas son menores a 4mm de diámetro aproximadamente.

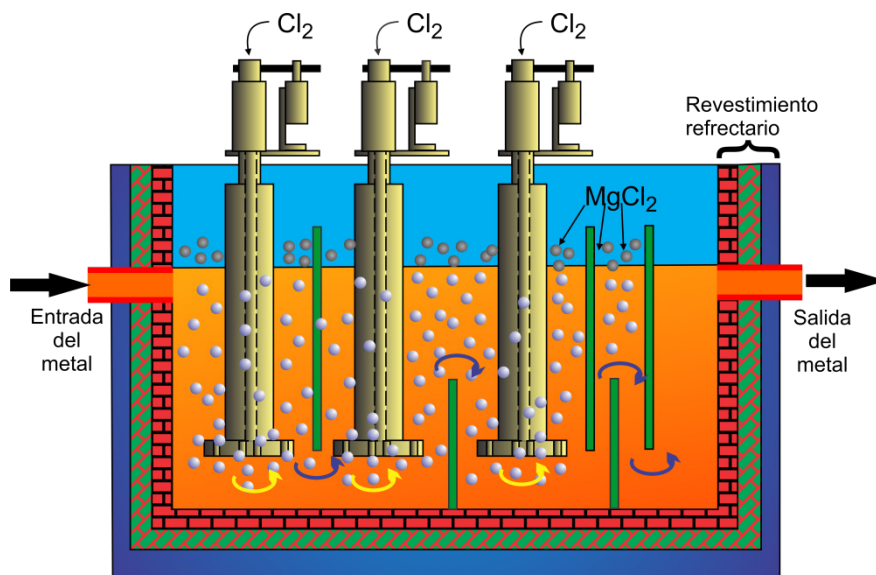


Figura 18. Proceso ALCOA 503.

El flujo es en paralelo inicialmente y a contracorriente en las siguientes etapas, que se encuentran separados por tres baffles. El flujo de gas es típicamente una mezcla de cloro y argón, aunque se pueden utilizar otros gases. Un proceso mejorado llamado ALCOA 622 ha sido desarrollado. Este proceso utiliza una menor cantidad de Cl_2 (<2 %), y elimina la capa de sales fundidas. En este proceso se pueden llegar a obtener concentraciones de hidrógeno de 0.21 ppm y el 95 % de sodio y calcio pueden ser removidos, hasta alcanzar un contenido final

de 1 - 4 ppm. La dependencia de remoción de impurezas disminuye con el incremento de la rapidez de flujo del gas de purga, mientras que el aumento en la fracción de cloro favorece la remoción de estos elementos (Figura 19).

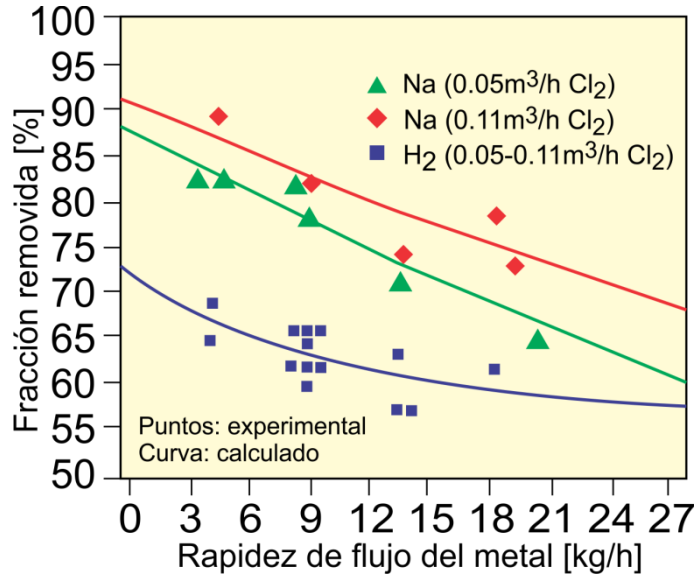


Figura 19. Remoción de impurezas en aluminio líquido del proceso ALCOA 503.

Proceso de flotación con gas inerte por medio de boquilla giratoria (Proceso SNIF).

Este proceso se conoce como SNIF por sus siglas en inglés (Spinning Nozzle Inert Flotation Process). El proceso SNIF fue desarrollado en 1974 por la Union Carbide Corporation. Como se muestra en la Figura 20, la parte principal es la boquilla giratoria, que produce burbujas finas y las dispersa uniformemente en el baño líquido (ver Figura 21). Además, provee una agitación intensa y un patrón de flujo favorable en el horno. El diámetro promedio de burbuja obtenido es de 5mm y solo se utiliza un máximo de cloro de 5 % en la mezcla de gases. Durante el proceso, el flujo de sales puede ser adicionado en el reactor con un flujo máximo de 0.001 % de la rapidez de flujo del gas. Se puede alcanzar concentraciones de hidrógeno de 0.06-0.07 ppm. En sodio se puede alcanzar niveles de 0.1 - 3 ppm. Todas las inclusiones se pueden recolectar, permitiendo una remoción de 95 %. La eficiencia de la remoción de hidrógeno depende de rapidez de flujo del gas de purga y del metal líquido alcanzando un 90 % de eficiencia de remoción de hidrógeno.

El proceso SNIF puede tener varias cámaras y cada una puede tener su boquilla independiente [33]. En Japón el proceso SNIF ha sido mejorado al llamado SNIF PHD-50 (de tipo móvil) y el SNIF HF 2000 (de tipo fijo).

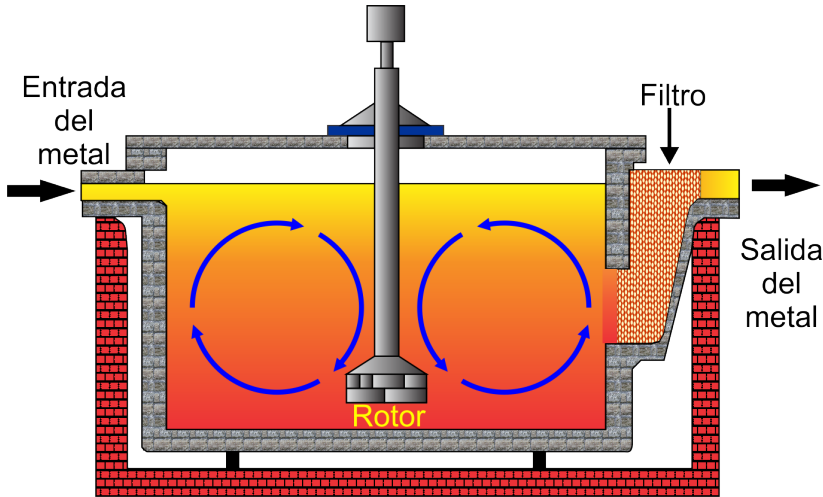


Figura 20. Esquema del reactor SNIF [35].

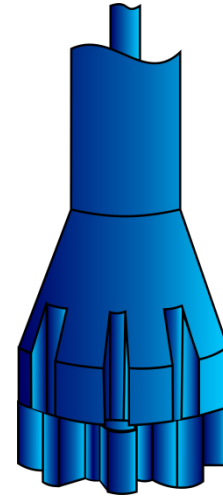


Figura 21. Geometría de la boquilla giratoria [35, 36].

Proceso ALPUR

El proceso ALPUR fue inventado por Pechinery Aluminum Engineering en 1975 (Figura 22). El metal líquido fluye desde el fondo hacia la parte superior de tubos oblicuos debido a los efectos en contracorriente provocados por la fuerza centrífuga (por la rotación del rotor). En los límites del rotor, existe una interacción entre el metal líquido y el gas de purga, y da como resultado una dispersión de burbujas finas a lo largo de la superficie lateral del rotor. Esta mezcla de dos gases es distribuida a través de las hojas hacia el baño metálico. El transporte de masa se mantiene hasta que la burbuja alcanza la superficie del fundido. El gas inyectado es una mezcla de argón y cloro (0-5 %). Los niveles de hidrógeno que se pueden alcanzar son de alrededor de 0.09 ppm con una eficiencia que va del 60-90 %. Los metales alcalinos como sodio pueden ser removidos hasta niveles de 3 ppm con una eficiencia de 80 %. La remoción de hidrógeno depende principalmente de la velocidad de agitación y del flujo de gas de purga.

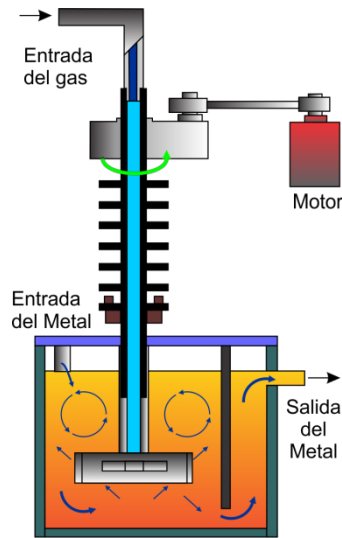


Figura 22. Proceso ALPUR.

Proceso MINT

Este proceso fue desarrollado por Clumper en 1979, cuando trabajaba en la empresa Swiss Aluminum Ltd. (ver Figura 23). El gas inyectado a altas velocidades dentro del líquido genera pequeñas burbujas en movimiento desplazándose a gran velocidad sin la necesidad de partes giratorias. El diámetro promedio de burbuja depende del número de Reynolds del orificio. Cuando se alcanza un valor de Reynolds de aproximadamente 10 000, se obtiene un diámetro de burbuja de alrededor de 5mm sin importar el tamaño del orificio. Se utiliza una mezcla de gases con cloro en una proporción de 0.5-3.0 %. La eficiencia de remoción de hidrógeno es de aproximadamente de 75 % y se alcanzan niveles de hidrógeno de 0.05 ppm. La eficiencia de remoción de sodio es de alrededor de 80 % alcanzando concentraciones menores a 2 ppm. El litio tiene una eficiencia de 75 % y una concentración de 0.7 ppm. El calcio se puede disminuir hasta una concentración de 1.7 ppm con una eficiencia de 60 %. La eficiencia de remoción de hidrógeno depende de la rapidez de flujo del gas de purga y de la rapidez de flujo del metal. En Polonia se desarrolló un proceso similar llamado URC-7000 [37].

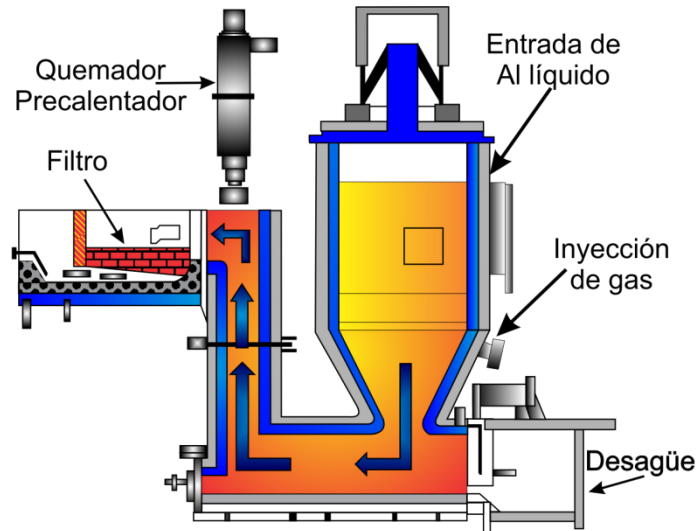


Figura 23. Proceso MINT.

Proceso de desgasificado de multivaciado

Este proceso se le conoce como DMC por sus siglas en inglés (Degassing MultiCast Process) y fue inventado por Metallics Systems en 1986. La unidad DMC consiste en una caja caliente con cámaras separadas para el desgasificado y filtración. La fuente de calor suele ser un quemador radiante de flama de gas con capacidad calorífica no solo para fundir el metal sino también para mantenerlo fundido. La cámara de desgasificado está equipada con un tapón poroso que genera pequeñas burbujas y promueve un buen mezclado dentro de la cámara. La cámara de filtración consiste en un plato con varios elementos verticales (ver Figura 24). Se utiliza una mezcla de argón y nitrógeno con hasta un 10 % de cloro. Las concentraciones alcanzadas de hidrógeno son alrededor de 0.1 ppm con una eficiencia de 60-70 %.

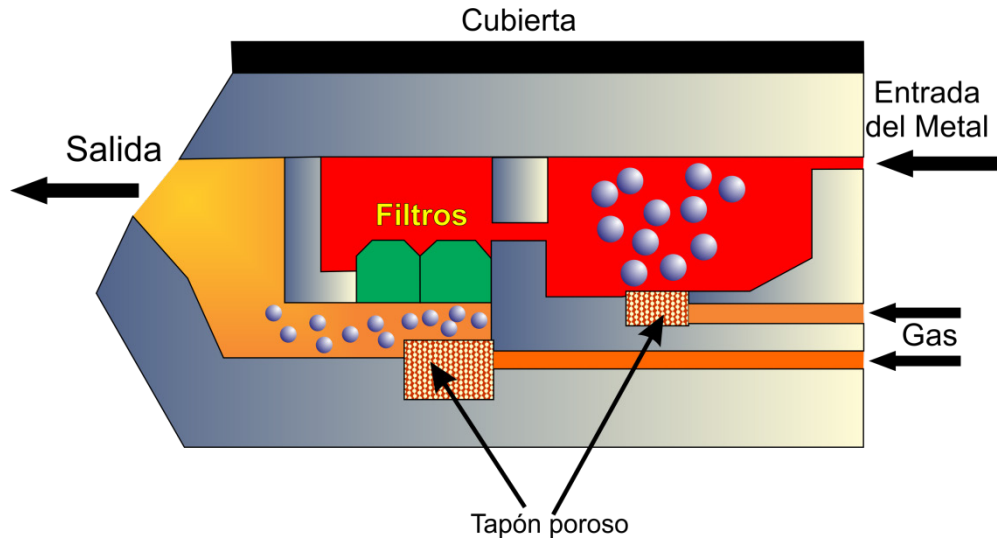


Figura 24. Procesos DMC.

Proceso con sistema de inyección de gas

A este proceso se le conoce como GIFS por sus siglas en inglés (Gas Injection Fluxing System) inventado en Noranda Aluminum en 1992 (Figura 25). Este proceso alcanza una dispersión homogénea de pequeñas burbujas debido al esfuerzo de corte y mezclado causado por dos dispositivos de inyección giratorios, cada uno consiste de un mango y un rotor fabricados en grafito. El eje del rotor es controlado por un motor instalado en la parte superior del sistema, la cual está dividida aproximadamente en cuatro secciones iguales con paredes refractarias por dentro y dos rotores e inyectores de gas por fuera del reactor. Por la configuración del reactor se facilita la remoción de haluros líquidos y escoria antes de realizar el vaciado (Figura 25).

En el proceso GIFS se utiliza argón mezclado con cloro (0.5- 2 %). La eficiencia de remoción de hidrógeno es de aproximadamente 50-76 % y se logra alcanzar concentraciones de 0.1 ppm. La remoción de inclusiones es mayor al 90 %. La eficiencia de remoción de hidrógeno aumenta cuando se incrementa la razón de rapidez de flujo del gas, respecto a la velocidad de vaciado; y a la razón de la velocidad de agitación con respecto a la velocidad de colado.

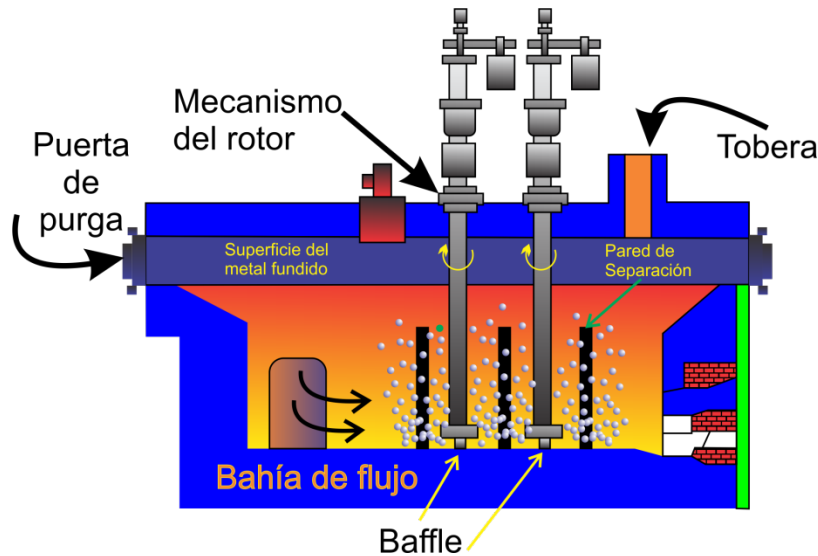


Figura 25. Diagrama del reactor GIFS.

Proceso Alcan Filter Degasser (AFD)

Este proceso fue inventado por Alcan International Ltd. en 1989 y consiste en un reactor de material refractario, a través del cual fluye el metal líquido en forma descendente. Un plato de cerámica perforado divide al reactor en tres secciones: una superior, otra inferior y el mismo plato en una sección central. En la sección interior el gas es descargado en forma de pequeñas burbujas a través de un rotor giratorio. Las burbujas del gas pasan subsecuentemente a través del plato perforado y ascienden en contracorriente al flujo del metal líquido. La sección intermedia es una zona de tres fases. La zona superior es esencialmente a de dos fases que permite la distribución del metal entrante en la sección intermedia del reactor el cual permite una superficie libre para el escape de las burbujas de gas (Figura 26).

Se utiliza una mezcla de argón y cloro (0-5 %). Alrededor del 70 -90 % del contenido de hidrógeno puede ser removido y alcanzar concentraciones de 0.09 ppm. La eficiencia de remoción de metales alcalinos es de 60- 80 % con niveles menores a 3 ppm. La eficiencia de remoción depende de la rapidez de flujo del metal y del gas de purga.

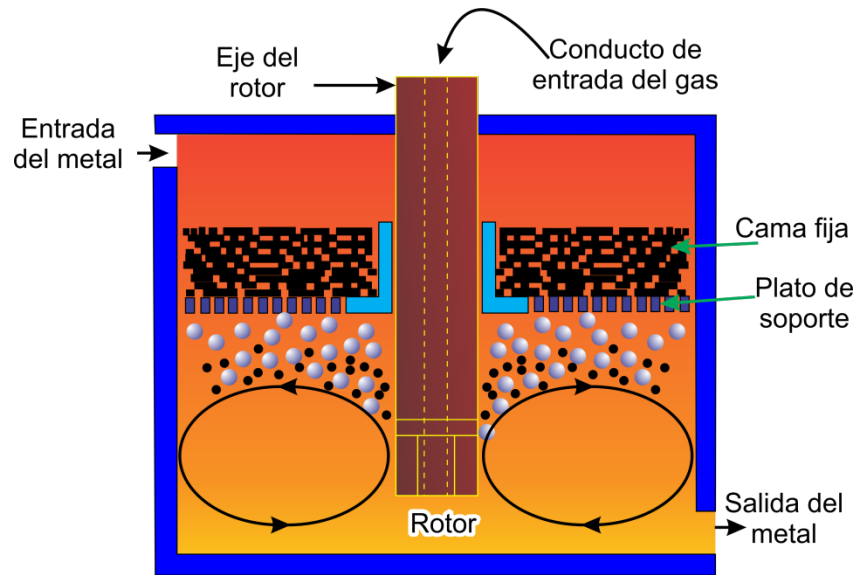


Figura 26. Proceso AFD.

Proceso Desgasificado Compact Alcan

El proceso ACD (Alcan Compact Degasser), fue inventado por la empresa Alcan International Ltd. en 1995. Consiste en una serie de desgasificadores arreglados en línea (ver Figura 27). El argón forma burbujas y se eleva dentro del baño eliminando el hidrógeno disuelto. Los rotores están separados por baffles verticales que dividen al reactor en diferentes secciones.

El desgasificador puede generar burbujas muy pequeñas. La eficiencia de desgasificado es de 55-60 % de remoción de hidrógeno. Y para metales alcalinos es de 70 % aproximadamente

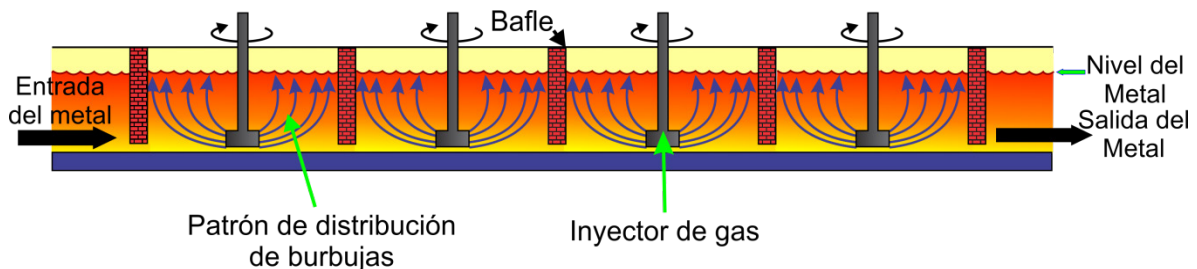


Figura 27. Proceso ACD.

Proceso SIGMA

Este proceso fue inventado por la compañía Air Products and Chemical Incorporation en 1980 (Figura 28), para remover el hidrógeno disuelto y promover la flotación de inclusiones. En este reactor se utiliza la inyección simultánea de gases en el baño metálico con una atmósfera inerte produce un producto de gran calidad. Se puede agregar una pequeña cantidad de SF_6 para obtener una mejor calidad en el aluminio. El SF_6 remueve al hidrógeno y al mismo tiempo genera una capa protectora sobre la superficie del metal líquido que inhibe la reabsorción de hidrógeno. La unidad está basada en un refractario único permeable al gas, permitiendo un buen mezclado sin el uso de rotores de geometría compleja (Figura 28).

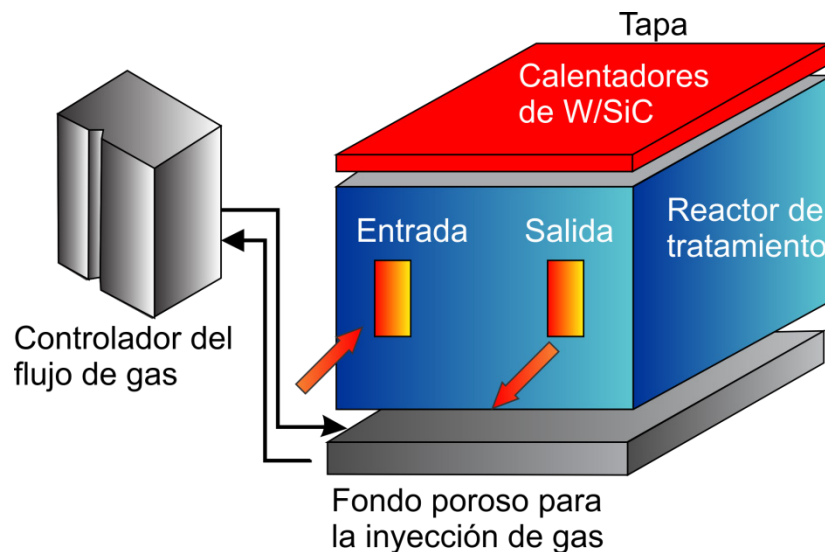


Figura 28. Proceso SIGMA

Proceso HI

La empresa Hydocast desarrolló los procesos HI10, HI422 y HI43X que son similares al proceso RAM (Figura 16). Sin embargo este proceso utiliza una mezcla de argón con cloro (3-5 %). El hidrógeno puede ser removido hasta una concentración de 0.09 ppm con una eficiencia de 60 %. Las inclusiones pueden ser removidas hasta concentraciones menores 1 ppm y eficiencias del 70 %.

Revisión Bibliográfica

Introducción

Existe en la literatura una gran variedad de modelos matemáticos para describir el proceso de desgasificado de aluminio desde la década de los años 80's, iniciando con los trabajos de Dantzig y Clumpner [38], Saternus y Botor [37], Sigworth y Engh [31], para la década de los 90' s con el uso de computadoras más rápidas se utilizaron las técnicas de CDF (Computational Fluid Dynamics), para estudiar los efectos del desgasificado de aluminio Johansen [39], Guo y Irons [40], Xu y Mc Grath [41], Dong y Johansen [42] , Jones and Launder [43].

Modelos físicos y modelos a escala

José Luis Camacho Martínez, y colaboradores [44], realizaron un estudio hidrodinámico de la desgasificación de aluminio por la técnica de rotor-inyector en un modelo físico de H_2O-O_2 , para tres distintas geometrías de rotores. Los autores reportan mapas vectoriales de velocidad, perfiles radiales de velocidad en diferentes planos propuestos para cada uno de los tres diseños de rotores.

J. J. J. Chen y J. C. Zhao [45], estudiaron la distribución de burbujas dispersas por un rotor en un modelo físico, para describir el proceso de tratamiento de aluminio fundido.

Qian Fu y James Evans [46] en el primero de una serie de dos artículos construyeron un modelo a escala para la remoción de Mg en Al líquido mediante la inyección de Cl_2 gaseoso con una lanza; en donde muestran la parte teórica de las reacciones que se llevan a cabo mediante este procedimiento, así como, datos termodinámicos; hacen una detallada descripción de la metodología de trabajo y del sistema con sus dimensiones. En este primer artículo se estudia el comportamiento de la burbuja con diferentes formas de lanzas y el análisis del metal fundido para observar la disminución del contenido de Mg.

Mariola Saturnus y Jan Botor [37] construyeron dos modelos físicos para los reactores URO-200 y URC-700, los cuales son reactores batch y continuos respectivamente. Ambos reactores tienen rotores para el desgasificado y el gas es inyectado por medio de un tapón poroso fabricado de un material cerámico. Los autores realizaron las siguientes consideraciones:

- Similitud geométrica entre el modelo físico y el reactor real.
- Similitud hidrodinámica entre el modelo físico y el reactor real, incluyendo similitudes: cinéticas, dinámicas y térmicas.

Para tal efecto fueron utilizados los siguientes números adimensionales: Reynolds, Froud y Weber. Para el reactor URC-7000, se utilizó un modelo a escala 1:4, mientras que para el reactor URO-200 se utilizó un modelo 1:1. Estos dos reactores son de geometría en forma de paralelepípedo.

Finalmente, muestran figuras de los cuatro patrones de flujo conocidos para tanques agitados en ambos reactores [45]. A partir de estos patrones se determinaron los intervalos de flujo, que se muestran en la Tabla 4 e indican el grado de dispersión de la burbuja.

URC-700		URO-200		
Q [dm ³ /min]	Dispersión	Q [dm ³ /min]	N [rpm]	Dispersión
2-6	Mínima	0-1.5	0-100	Mínima
7-10	Cercana	2.5-17.5	125-300	Cercana
11-25	Uniforme	10-17.5	150-350	Uniforme
>25	Sobre-dispersión	>17.5	325-400	Sobre-dispersión

Tabla 4. Determinación de patrones de flujo para obtener la dispersión de burbujas en tanques batch y continuos en los reactores URC-700 y URO-200 [37].

Modelado matemático del proceso de desgasificado de aluminio líquido.

Modelos analíticos

J. A. Dantzig, J. A. Clumper y E. Tyler [38] desarrollaron un modelo matemático para el proceso de desgasificación de aluminio mediante la inyección de un gas insoluble, se considera la difusión del hidrógeno disuelto en el metal fundido hacia la burbuja del gas inerte y la cinética de adsorción de hidrógeno en la superficie de la burbuja. El modelo se desarrolló, en una columna de diámetro reducido. Para este modelo se consideran tres grupos de números adimensionales β , N_D y α . El

primer grupo $\beta = \frac{r_{col}}{r_{cil}}$, es un factor geométrico y la dispersión del gas de purga en

el fundido, en donde r_{col} es el radio interno de la columna y r es el radio del

cilindro; el segundo grupo $N_D = \frac{d_b^2 \cdot n_b \cdot \xi \cdot r_{cil} \cdot (C_H^{ini} - C_{H_2}^{eq})}{r_{col} \cdot D_{H-Al}}$, es la rapidez de

incorporación de hidrógeno dentro de la columna de la burbuja con respecto a la rapidez de difusión de hidrógeno a través del fundido, en donde d_b corresponde al

diámetro promedio de la burbuja, n_b es el número de burbujas por unidad de

longitud en la columna, ξ es la constante de rapidez de la reacción de

desgasificado por unidad de área de burbuja, C_H^{in} concentración inicial de

hidrógeno, $C_{H_2}^{eq}$ concentración de hidrógeno en equilibrio con el gas de purga,

D_{H-Al} es el coeficiente de difusión del hidrógeno en aluminio líquido y finalmente el

tercer grupo $\alpha = \frac{2C_{H_2}^{eq}}{C_H^{in} - C_{H_2}^{eq}}$, determina la concentración al equilibrio de hidrógeno en

el fundido que es determinada totalmente *a priori*. El modelo se validó con diferentes flujos de gas y tamaños de reactor obteniendo resultados aceptables.

Qian Fu y James Evans [47], desarrollaron un modelo matemático para la remoción de Mg en aluminio líquido, las dimensiones y procedimientos realizados se encuentran detallados en la primera parte de este trabajo [46]. Las principales consideraciones para este modelo son:

1. El Cl_2 es convertido a AlCl_3 en un tiempo mucho menor que el tiempo de residencia de la burbuja dentro del metal líquido.
2. El MgCl_2 producido por la subsecuente reacción con el AlCl_3 no interfiere con el avance de la reacción.
3. El transporte de masa en la interface gas-metal del lado del gas, no es la etapa determinante.
4. La cinética de reacción en la interface gas-metal no es la etapa controlante.
5. La composición dentro del metal líquido es uniforme.
6. Las burbujas son de forma esférica y tienen la misma temperatura que el metal fundido.
7. La velocidad terminal de ascenso de las burbujas a través del metal fundido es determinada por el tamaño de la burbuja, pero no es afectado por la presencia de otras burbujas. La presión en la burbuja es igual a la presión metalostática a la altura H más la presión en la superficie del metal.
8. La reacción en la superficie del metal es despreciable.

Con estas consideraciones se obtiene el siguiente modelo para el cambio en el contenido de AlCl_3 en una burbuja que asciende a través del metal fundido:

$$\frac{dn_{\text{AlCl}_3}}{dt} = \frac{d}{dt}(V_b \cdot \rho_g \cdot C_g) = -\frac{2}{3} \cdot k_{\text{Mg-Al}} \cdot A_b \cdot \rho_{\text{Al}} \cdot (C_{\text{Mg}}^{\text{ini}} - C_{\text{Mg}}^{\text{eq}}) \quad (1.22)$$

En donde n_{AlCl_3} representa el cambio en el contenido de reactor, V_b es el volumen de una burbuja de forma esférica, ρ_g es la densidad de la burbuja que contiene los gases, C_g es a concentración de Al_2O_3 en la burbuja, $k_{\text{Mg-Al}}$ es el coeficiente de transporte de masa en la interface Mg-Al , A_b es el área de una burbuja, ρ_{Al}

es la densidad del aluminio líquido, C_{Mg}^{ini} es la concentración inicial de Mg disuelto en el aluminio líquido, C_{Mg}^{eq} es la concentración al equilibrio en la interface líquido-gas. Con el modelo propuesto los autores lo aplican a nivel industrial obteniendo buenos resultados.

Guofa Mi, y colaboradores [48], estudiaron el efecto de los parámetros como alimentación del gas de purga y la velocidad rotacional del rotor, sobre la formación del vórtice formado, y su efecto en la eficiencia de desgasificado. Para ello utilizaron un modelo de H_2O , pero no aportan datos sobre las dimensiones del mismo. El gas utilizado fue argón. Finalmente calculan las dimensiones del vórtice analíticamente.

Jeong-Whan Han y colaboradores [49], simularon en un modelo físico H_2O-O_2 la cinética de desgasificación de hidrógeno en la refinación de aleaciones base Mg (AZ91D). Los autores realizaron una revisión teórica de la cinética de desgasificación de hidrógeno.

Se tienen dos consideraciones principales del sistema de estudio, las cuales son:

1. El oxígeno disuelto se encuentra homogéneamente distribuido en todo el reactor.
2. La remoción de oxígeno, es determinada por la rapidez de transporte de masa de oxígeno disuelto en el agua hacia la superficie de la burbuja.

A partir de estas consideraciones se obtiene el siguiente modelo matemático:

$$-V_{H_2O} \cdot \frac{dC_{O_2}}{dt} = k_{O_2-H_2O} \cdot A_b \cdot (C_{O_2}^{ini} - C_{O_2}^{eq}) \quad (1.23)$$

Con las condiciones iniciales y de frontera adecuadas se obtiene la solución analítica de la ecuación (1.23):

$$C_{O_2} = C_{O_2}^{eq} + [C_{O_2}^{ini} - C_{O_2}^{eq}] \cdot \exp \left[-\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot A_b}{V_{H_2O}} \cdot t \right] \quad (1.24)$$

En donde C_{O_2} representa la concentración de oxígeno, al tiempo t , V_{H_2O} es el volumen del reactor, $k_{O_2-H_2O}$ es el coeficiente de transporte de masa en la interface O_2-H_2O , A_b es el área de una burbuja, $C_{O_2}^{ini}$ es la concentración inicial de oxígeno disuelto en el líquido, $C_{O_2}^{eq}$ es la concentración al equilibrio de oxígeno en la interface líquido-gas finalmente t representa al tiempo.

En el artículo, se describen las dimensiones del sistema, así como los resultados obtenidos durante la experimentación, pero no muestra la aplicación industrial del modelo.

Z.C. Hu, E.L., Zhang y S.Y Zeng [50], desarrollaron un modelo matemático para simular la remoción de hidrógeno en un aleación de Mg (AZ92), mediante la técnica de rotor. Se utilizó un modelo físico H_2O-O_2 , para determinar el área superficial total de las burbujas de gas inyectadas. De acuerdo al modelo propuesto por *Warke, V.S. y colaboradores* [51], la concentración de hidrógeno en el metal fundido es descrita por el siguiente balance general de masa.

$$k_{H-Mg} \cdot A_b \cdot C_H = -V_{Mg} \cdot \frac{dC_H}{dt} \quad (1.25)$$

La solución a la ecuación (1.25) es:

$$C_H = C_H^{ini} \cdot \exp\left(-\frac{k_{H-Mg} \cdot A_b}{V_{Mg}} \cdot t\right) \quad (1.26)$$

Con los resultados obtenidos experimentalmente para el área superficial total de las burbujas y el coeficiente de transporte de masa, se verificó el modelo en un reactor con una aleación comercial de Mg (AZ91) dentro del intervalo de temperaturas de 973-1023 K. El desgasificado se llevó a cabo con un rotor a 280 rpm y un flujo de Ar de 1.0 litro por minuto, obteniendo resultados concordantes entre el modelo propuesto y los valores experimentales.

X Lvi y L. Zhang [52], desarrollaron varios modelos matemáticos para la remoción de impurezas sólidas y gaseosas (Na, Ca, Li, H) en Al líquido, a través de la inyección de gases inertes, polvos reactivos, refinación de escoria y combinaciones de los mismos. El desarrollo de los modelos incluye reactores continuos y batch para cada método. Todos los modelos propuestos son validados con datos experimentales.

Mi Guofa, y colaboradores [53], realizaron un diseño experimental, para identificar la influencia de los principales parámetros de operación (rapidez de flujo, velocidad rotacional del rotor, tiempo de inyección del gas) en la remoción de hidrógeno en aleaciones de Al líquido por la técnica de rotor-inyector, en un modelo físico H₂O/NaOH-CO₂; obteniendo por regresión multivariable una relación cuadrática polinomial, que describe la interacción de dichos parámetros.

Masamichi Sano y Kazumi Mori [54], determinaron la etapa controlante en el proceso de desgasificado por medio de la inyección de gas inerte en el seno del metal líquido mediante una lanza, para cada etapa propusieron modelos matemáticos, utilizaron un sistema formado por Ag líquida con O₂ disuelto y como gas de purga argón.

Geoffrey Sigworth y Thorvald Abel Engh [31], desarrollaron un modelo matemático para describir la remoción de hidrógeno en Al líquido (debido a la generalidad del modelo se puede utilizar para otras impurezas (Na, Ca, Li)), se introducen un

nuevo grupo adimensional $\frac{\psi}{C_H}$, llamado concentración adimensional de

hidrógeno, el cual representa el cociente de la habilidad del hidrógeno de difundir hacia la burbuja del gas de purga durante su ascenso entre la capacidad de purga del gas para remover el hidrógeno disuelto. Se hace una revisión de los aspectos termodinámicos y cinéticos, así como, modelos para procesos batch y continuos. Para un volumen de control de una burbuja ascendente en el metal fundido, se tiene el siguiente balance de hidrógeno:

$$\frac{k_{H-Al} \cdot \rho_{Al} (C_H - C_H^{eq}) \cdot \Delta A_b}{100 \cdot MW_H} = 2 \cdot \dot{G}_{Ar} \cdot \Delta \left(\frac{P_{H_2}}{P_T} \right) \quad (1.27)$$

La ecuación (1.27) representa la difusión de hidrógeno a través de la capa límite con un coeficiente de transporte de masa empírico. Realizando un balance de masa sobre todo el reactor, se obtiene:

$$-\frac{M_{Al}}{100 \cdot MW_H} \frac{d}{dt} C_H = 2 \cdot \dot{G}_{Ar} \cdot \left(\frac{P_{H_2}}{P_T} \right) \quad (1.28)$$

Combinando las ecuaciones (1.27) y (1.28), y realizando las sustituciones pertinentes, se obtiene el modelo:

$$\ln \frac{C_H}{C_H^{ini}} = - \frac{100 \cdot f_H \cdot K_{H-Al} \cdot Z \cdot MW_H \cdot \dot{G}_{Ar} \cdot t}{M_{Al} \cdot P_T} \quad (1.29)$$

Donde

$$Z = 1 - \exp(-\psi) \quad (1.30)$$

Y

$$\psi = \frac{k_{H-Al} \cdot \rho_{Al} \cdot A_b \cdot P_T}{100 \cdot MW_H \cdot \dot{G}_{Ar} \cdot f_H \cdot K_{H-Al}} \quad (1.31)$$

Liping Wang, y colaboradores [55] estudiaron el efecto de cuatro parámetros de operación en equipos de desgasificado (flujo de gas, velocidad de rotación del rotor, tiempo de refinamiento y tiempo del proceso), en el desgasificación de una aleación de Al 7075; para ello desarrollaron un diseño experimental ortogonal. La experimentación se llevó a cabo en un reactor de XD-J-100BP utilizando como gas de purga Ar de alta pureza. Se determinó que la velocidad de rotación es el principal parámetro en la remoción de hidrógeno, mientras que, el parámetro que menos influencia tiene es el tiempo de fundición. Finalmente, se optimizaron estos parámetros mediante un análisis ortogonal de los datos experimentales, que se presentan en la Tabla 5.

No se proporcionan dimensiones utilizadas del reactor, para la realización de la experimentación, pero se dan las condiciones de trabajo como temperatura, energía utilizada, etc.

Parámetro	Valor	Unidades
Velocidad de rotación	400	rpm
Flujo de gas	0.2	m ³ /h
Tiempo de refinamiento	15	min
Tiempo de fundición	6	min

Tabla 5. Optimización de parámetros en el diseño experimental de Wang, L., y colaboradores [55]

Viendra Warke, S. Shankar, y M.M. Makhlof [51], desarrollaron un modelo matemático para la remoción de hidrógeno y partículas sólidas en aleaciones de aluminio líquido, mediante la técnica de rotor. Los autores aplican un balance de masa total en el reactor, considerando que el metal líquido se encuentra bien mezclado y por lo tanto la concentración de hidrógeno disuelto no varía con respecto al sistema coordenado.

$$\underbrace{\left[k_{aire-Al} \cdot A_s (C_H^s - C_H) \right]}_{\text{Flujo de hidrógeno desde la atmósfera hacia el metal líquido}} - \underbrace{\left[k_{H-Al} \cdot A_b (C_H - C_H^{eq}) \right]}_{\text{Flujo de hidrógeno saliendo del metal líquido hacia la burbuja}} = \underbrace{V_{Al} \cdot \frac{d}{dt} C_H}_{\text{Rapidez de cambio de la concentración de hidrógeno dentro del metal líquido}} \quad (1.32)$$

Para el modelado de partículas sólidas se utilizó la ecuación de balance poblacional de partículas, el cual permite obtener la rapidez de cambio de partículas dentro del metal líquido.

El balance es el siguiente:

$$\frac{\partial}{\partial t} [n_v(v, t)] = \frac{\partial}{\partial v} [I_v(v, t) n_v(v, t)] + \int_0^v W_v(v - \tilde{v}, \tilde{v}) n_v(v - \tilde{v}, t) n_v(\tilde{v}, t) d\tilde{v} - n_v(v, t) \int_0^\infty W_v(v, \tilde{v}) n_v(\tilde{v}, t) d\tilde{v} + S_v [n_v(v, t), v, t] \quad (1.33)$$

Donde $n_v(v,t)$ es la función de densidad de distribución de partículas, $n_v(v,t)dv$ es el número de partículas dentro del volumen en el intervalo de $(v, v+dv)$ por unidad de volumen del fluido. Finalmente, los autores validan los modelos con datos experimentales obteniendo excelentes resultados y realizan simulación mediante la técnica de Dinámica de Fluidos Computacional (Computational Fluid Dynamics (CFD)).

Modelos que utilizan dinámica de fluidos computacional (Computational Fluid Dynamics (CFD))

Byung S. Choi, y colaboradores [56] realizaron estudios de CFD en la predicción del tiempo de residencia y compararon los resultados obtenidos contra datos experimentales utilizando un modelo de turbulencia $k-\varepsilon$ en el software FLUENT versión 6.0, obteniendo perfiles de vectores de velocidad para flujos turbulentos.

L. Dong, S. T. Johansen y T. A. Engh [42], utilizaron un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales para simular un tanque agitado cilíndrico sin baffles, las ecuaciones se realizan para momentum en la dirección axial, momentum en la dirección radial y momentum en la dirección tangencial, dichas ecuaciones fueron resueltas con el Software FLUENT versión 2.97, el método de solución consiste en discretizar la geometría física del sistema de interés en un número conocido de volúmenes de control. Paso seguido el conjunto de ecuaciones diferenciales parciales es integrado sobre cada volumen de control y se obtiene un conjunto de ecuaciones lineales algebraicas para todos los campos en cuestión. Para los casos descritos la comparación con los valores experimentales muestran una buena concordancia con tanques agitados reales.

D. Mazumdar, R. I. L. Guthrie y Y. Sahai [57], desarrollaron modelos matemáticos para describir los fenómenos de flujo y turbulencia en tanques agitados axisimétricos, basados en evidencia teórica y experimental los cálculos fueron realizados con el Software PHOENICS, resolviendo el conjunto de tres ecuaciones diferenciales parciales, es decir, resolviendo la ecuación de continuidad, la

ecuación de conservación de momentum en la dirección radial y axial respectivamente. Aunque se obtuvieron resultados similares con los datos experimentales llegan a existir algunas discrepancias significativas que son tratadas por los autores.

M. A. Ramírez-Argáez y colaboradores [[44](#), [58-62](#)], han estudiado el efecto de las diferentes variables en el proceso de refinamiento del aluminio con técnicas CFD y modelado físico en sistemas agua-oxígeno, obteniendo campos de velocidad, la influencia de la profundidad, geometría, y rapidez del rotor, velocidad de flujo, método de inyección.

En este trabajo se desarrolló un modelo matemático para la desoxidación de agua basado en un modelo de la desgasificación de aluminio mediante un balance global de masa que considera la cinética del transporte de masa a través de un coeficiente global de transporte de masa; el modelo matemático se validó con datos experimentales en un modelo físico de manera satisfactoria. Asimismo se realizó un extenso análisis de las variables del proceso: velocidad de rotación del rotor, rapidez de flujo del gas de purga y forma de inyección del mismo.

Capítulo 2 Modelo Matemático

El presente modelo se desarrolló para describir el proceso de desgasificación de un sistema $\text{H}_2\text{O}-\text{O}_2$. Este sistema de desgasificado se lleva a cabo mediante la inyección de N_2 gaseoso. El modelo físico fue construido por Iván Torres [63], para simular la desgasificación de aluminio puro, donde el agua sustituye al aluminio, el O_2 disuelto al H_2 y el gas de purga Ar es remplazado por N_2 . Este modelo físico representa un reactor de tipo batch de escala 1:1, diseñado por la empresa Cooper Crouse Hinds (ver Figura 30). El modelo físico consiste en un cilindro de acrílico de 0.52 metros de diámetro (d_{tanque}) el cual es llenado hasta una altura igual a la del diámetro del reactor (ver Figura 29 y Figura 31). Para mayor detalle sobre la construcción, dimensiones y escalamiento, consultar los trabajos realizados por Iván Robles [64] e Iván Torres [63], en donde se encuentra un extenso estudio y detalles sobre el tema.

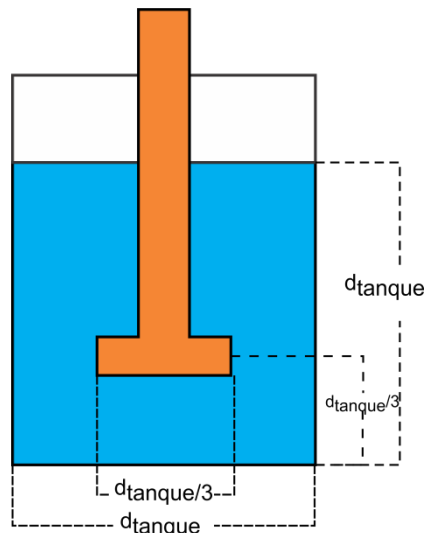


Figura 29. Dimensiones del sistema utilizado, en donde d_{tanque} representa el diámetro del tanque.

Torres, desarrolló un diseño experimental en donde analizó los principales parámetros de operación y su efecto combinado, las variables son: la velocidad de rotación del rotor, velocidad de flujo del gas de purga y método de inyección del gas de purga, para ello utilizó un rotor FDU-SPR patentado por la compañía FOSECOTM (ver Figura 32), denominado rotor B (ver Figura 33); en este trabajo el rotor fue fabricado en NylamidTM para la realización del trabajo experimental.



Figura 30. Reactor industrial para el desgasificado de aluminio [63, 64].

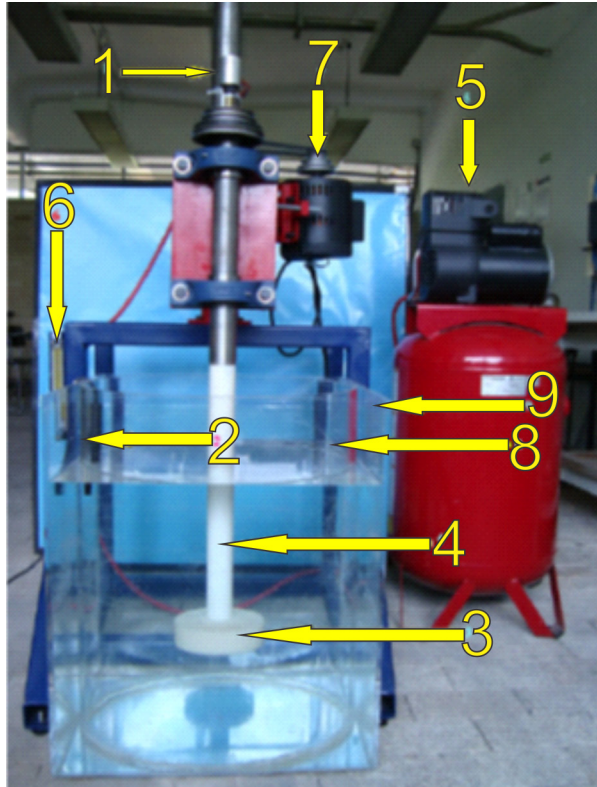


Figura 31. Modelo físico del reactor. 1) Junta rotativa. 2) Oxímetro. 3) Rotor de Nylamid. 4) Flecha de Nylamid. 5) Compresor. 6) Flujómetro. 7) Motor. 8) Reactor. 9) Recipiente externo del reactor [64].



Figura 32. Rotor FDU-SPR de FOSECO.



Figura 33. Rotor B fabricado en Nylamid [63].

Suposiciones del modelo matemático.

El modelo toma en cuenta los siguientes puntos:

1. El baño se encuentra bien agitado de tal forma que la concentración de oxígeno disuelto es la misma en todo el reactor.
2. La presión parcial de oxígeno (P_{O_2}), en las burbujas a la misma altura en el volumen de control es la misma.
3. El transporte de masa del oxígeno disuelto en la capa límite en la burbuja, es la etapa controlante del proceso.
4. El baño es poco profundo (menor a 1 metro), de forma que no se considera variación en el tamaño de burbuja durante su ascenso.
5. La presión parcial de oxígeno es mucho más pequeña que la presión total de la burbuja.
6. El área superficial de las burbujas es función solamente de la altura del baño.
7. Las burbujas son esferas rígidas.
8. Se desprecia la coalescencia de las burbujas.
9. El baño es isotérmico.

Discusión de las consideraciones

La consideración de la primera suposición no siempre es válida. En reactores que utilizan tapones porosos no se logra un mezclado homogéneo lo cual causa que existan gradientes de concentración. En reactores que utilizan rotor con un diámetro igual a un tercio del diámetro del reactor $d_{imp} = \frac{d_{tanque}}{3}$ se logra un mezclado homogéneo (ver Figura 29).

La presión parcial de oxígeno depende del diámetro de la burbuja (es mayor en burbujas pequeñas). Además estrictamente hablando esta consideración es válida solo si no existe una gran distribución en el tamaño y velocidad de ascenso de las burbujas.

Como se explicó en los antecedentes (capítulo 1), el mecanismo de desgasificación se lleva mediante los siguientes pasos:

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

Por evidencia experimental se sabe que la etapa en el inciso b) es la más lenta de todas las mencionadas [28, 29, 31, 65] y por lo tanto controla la cinética de la desoxidación.

La suposición 4 considera que la presión no es función de la profundidad del baño siempre y cuando sea menor a 1 metro de altura. Despreciando las fuerzas viscosas que actúan sobre la burbuja, la presión se puede expresar:

$$P_T = P_b + \rho_l \cdot g \cdot \Delta h + 4 \cdot \frac{\sigma}{d_b} \quad (2.1)$$

Donde P_b , representa la presión de la burbuja en un sistema evacuado, el segundo término ($\rho_l \cdot g \cdot \Delta H$) representa la presión hidrostática del fluido y el tercer término

$\left(4 \cdot \frac{\sigma}{d_b}\right)$ es la presión debido a las fuerzas de tensión superficial. Para burbujas de

un centímetro de diámetro se ha demostrado que el término $\left(4 \cdot \frac{\sigma}{d_b}\right)$ es alrededor

de 0.017 atm y el producto $(\rho_l \cdot g)$ es igual a $0.227 \frac{\text{atm}}{\text{m}}$. Entonces, las fuerzas

debidas a la tensión superficial son despreciables para reactores relativamente pequeños.

La suposición número 5 asume que todas las burbujas tienen el mismo comportamiento de ascenso, independientemente de la posición donde se encuentren dentro del reactor.

La presión total dentro de la burbuja (despreciando las fuerzas de viscosidad) es:

$$P_T = P_{N_2} + P_{O_2} \quad (2.2)$$

Si consideramos que la presión ejercida por el oxígeno es despreciable tenemos:

$$P_{O_2} \ll P_{N_2} \quad (2.3)$$

$$P_T \simeq P_{N_2} \quad (2.4)$$

Por lo tanto, se tiene que la presión dentro de la burbuja es constante y esto aplica para reactores que no trabajan bajo condiciones de vacío y la presión de trabajo es igual a una atmósfera de presión.

En la suposición número 7, el error involucrado es probablemente pequeño, debido a que las propiedades como es el coeficiente de transporte de masa k , el área superficial A_b , y la velocidad de ascenso de la burbuja U_b , se encuentran relacionadas con el volumen de la burbuja V_b .

La coalescencia de burbujas ascendiendo a través del baño no es considerada en el modelo dada la complejidad del fenómeno.

Finalmente, no se considera la expansión térmica de la burbuja ya que se trabajó con bajas temperaturas (alrededor de 20.0 °C).

Modelo matemático

Balance de masa en un volumen de control

La disolución de oxígeno en agua se puede expresar de la siguiente forma:



Es conocido que el oxígeno se disuelve en agua de forma molecular, (ecuación (2.5)). Para el modelo matemático, se consideró el ascenso de una burbuja del gas de purga dentro de un volumen de control de espesor Δh en el reactor (ver Figura 34). El balance de masa para O_2 es el siguiente

$$\left(\begin{array}{l} O_2 \text{ que difunde desde el seno} \\ \text{del líquido hacia la burbuja} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l} \text{Aumento en la concentración de } O_2 \\ \text{dentro de la burbuja del gas de purga} \end{array} \right)$$

En forma matemática se tiene:

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b}{100 \cdot MW_{O_2}} (C_{O_2} - C_{O_2}^{eq}) = \dot{G}_{N_2} \cdot \Delta \left(\frac{P_{O_2}}{P_T} \right) \quad (2.6)$$

Donde $C_{O_2} - C_{O_2}^{eq}$ es la fuerza motriz para la difusión de oxígeno. $C_{O_2}^{eq}$ es la concentración al equilibrio de oxígeno en el agua en *ppm*; $k_{O_2-H_2O}$ es el coeficiente de transporte de masa en $\frac{m}{s}$; ΔA_b es el área superficial de las burbujas en el volumen de control en m^2 ; \dot{G} es la rapidez de flujo molar del gas de purga $\frac{kmol}{s}$; MW_{O_2} es la masa molecular del oxígeno gaseoso en $\frac{kg}{kmol}$; P_T , P_{O_2} y P_{inert} son la presión total en la burbuja, presión parcial de O_2 y la presión parcial del gas de purga respectivamente, en *atm*.

La concentración al equilibrio de $C_{O_2}^{eq}$ en la superficie de la burbuja está dada por la relación:

$$K_{O_2-H_2O} = \frac{P_{O_2}}{C_{O_2}^{eq} \cdot f_{O_2}} \quad (2.7)$$

$$h_{O_2} = f_{O_2} \cdot C_{O_2} \quad (2.8)$$

Donde f_{O_2} es el coeficiente de actividad henriano de oxígeno en agua y h_{O_2} es la actividad henriana del oxígeno disuelto.

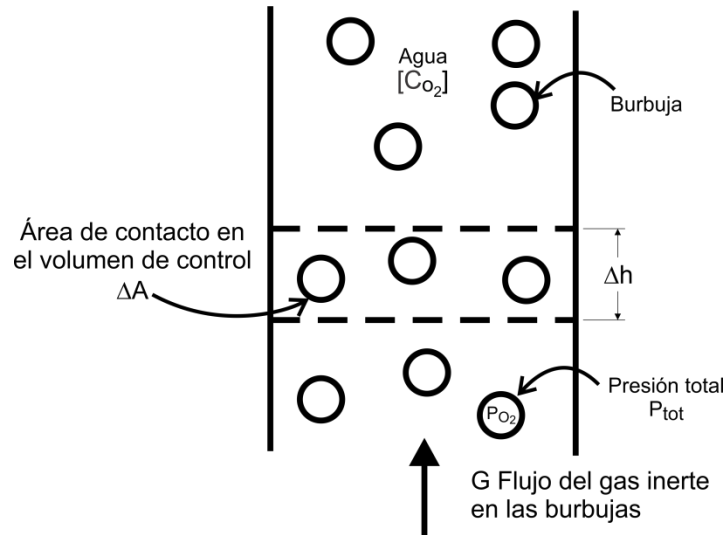


Figura 34. Volumen de control en el reactor con el gas de purga.

Si combinamos las ecuaciones (2.6), (2.7) y (2.8)

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b \cdot P_T}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = \frac{1}{P_{tot}} \cdot \frac{\Delta P_{O_2}}{\left(C_{O_2} - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}} \right)} \quad (2.9)$$

Rearreglando los términos

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b \cdot P_T}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = \int_0^{P_{O_2}^0} \frac{dP_{O_2}}{\left(C_{O_2} - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}} \right)} \quad (2.10)$$

Si integramos desde el fondo hasta la superficie del baño $P_{O_2}^0$ se obtiene

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot \Delta A_b \cdot P_T \cdot C_{O_2}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = \int_0^{P_{O_2}^0} \frac{dP_{O_2}}{1 - \frac{P_{O_2}}{f_{O_2} \cdot C_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}}} \quad (2.11)$$

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot A_b \cdot P_T \cdot C_{O_2}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = -\frac{f_{O_2} \cdot C_{O_2}}{K_{O_2-H_2O}} \cdot \ln \left(1 - \frac{K_{O_2-H_2O}}{f_{O_2} \cdot C_{O_2}} \cdot P_{O_2}^0 \right) \quad (2.12)$$

ó

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot A_b \cdot K_{O_2-H_2O} \cdot P_T}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2} \cdot f_{O_2}} = \ln \left(\frac{C_{O_2}}{\left(C_{O_2} - \frac{P_{O_2}^\circ}{f_{O_2} \cdot K_{O_2-H_2O}} \right)} \right) \quad (2.13)$$

Si introducimos el número adimensional Z y lo definimos como:

$$Z = \frac{K_{O_2-H_2O} \cdot P_{O_2}^\circ}{f_{O_2} \cdot C_{O_2}} \quad (2.14)$$

Sustituyendo la ecuación (2.14) en (2.12) se tiene

$$\frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot A_b \cdot P_T \cdot C_{O_2}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} = - \frac{f_{O_2} \cdot C_{O_2}}{K_{O_2-H_2O}} \cdot \ln(1-Z) \quad (2.15)$$

El parámetro Z representa la capacidad de las burbujas para remover el oxígeno a través de la superficie de las burbujas. Este parámetro Z fue sugerido por Engh [29]. Si se define el número adimensional ψ como:

$$\psi = \frac{k_{O_2-H_2O} \cdot \rho_{H_2O} \cdot A_b \cdot P_T \cdot K_{O_2-H_2O}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2} \cdot f_{O_2}} \quad (2.16)$$

Entonces la ecuación (2.13), puede ser escrita como:

$$Z = 1 - \exp(-\psi) \quad (2.17)$$

Para el número ψ pueden apreciar que:

$$\psi = \frac{P_T \cdot \rho_{H_2O}}{100 \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}} \cdot \frac{k_{O_2-H_2O} \cdot K_{O_2-H_2O}}{f_{O_2}} \cdot A_b \quad (2.18)$$

El primer término de lado derecho corresponde a una constante, el segundo término relaciona los parámetros cinéticos y termodinámicos del sistema, mientras que el tercer término es función de los parámetros de operación.

Balance en reactores batch

Para reactores batch, el balance de masa total de oxígeno disuelto C_{O_2} se puede expresar de la siguiente forma:

$$-\frac{M_{H_2O}}{100 \cdot MW_{O_2}} \cdot \frac{d}{dt} C_{O_2} = \dot{G}_{N_2} \cdot \frac{P_{O_2}^o}{P_T} \quad (2.19)$$

Si despejamos $P_{O_2}^o$ de la ecuación (2.14) y sustituimos el valor de $P_{O_2}^o$ en la ecuación (2.19) se obtiene:

$$\frac{dC_{O_2}}{C_{O_2}} = -\frac{100 \cdot f_{O_2} \cdot Z \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2}}{M_{H_2O} \cdot P_T \cdot K_{O_2-H_2O}} dt \quad (2.20)$$

Si integramos la ecuación (2.20) desde $C_{O_2} = C_{O_2}^{ini}$ hasta $C_{O_2} = C_{O_2}$, y desde $t = 0$ hasta $t = t$ se obtiene:

$$\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^{ini}} = \exp\left(-\frac{100 \cdot f_{O_2} \cdot Z \cdot MW_{O_2} \cdot \dot{G}_{N_2} \cdot t}{M_{H_2O} \cdot P_T \cdot K_{O_2-H_2O}}\right) \quad (2.21)$$

En donde $C_{O_2}^{ini}$ representa la concentración inicial de oxígeno disuelto en el reactor, y C_{O_2} representa la concentración de oxígeno disuelto en el reactor al tiempo t .

De lo anterior se puede observar que solo es necesario determinar el coeficiente de transporte de masa $k_{O_2-H_2O}$ y el área interfacial total del gas de purga A_b para definir la evolución de oxígeno mediante la purga con nitrógeno gaseoso. Los parámetros restantes son conocidos o son variables de operación del proceso.

Correlaciones para el cálculo de las propiedades termodinámicas

Se recopilaron correlaciones teóricas, semiempíricas y experimentales para el cálculo de las propiedades termodinámicas y cinéticas. La Tabla 6 muestra las correlaciones utilizadas en el modelo propuesto.

Determinación de coeficientes de transporte de masa.

La determinación de los coeficientes de transporte de masa en tanques agitados es una tarea difícil, ya que este parámetro puede estar afectado por:

1. Variables geométricas: diámetro del reactor (d_{tanque}), diámetro del rotor (d_{imp}), la altura del rotor desde la base del reactor (H_F).
2. Variables de operación: tipo de inyección del gas dentro del reactor, velocidad de mezclado (N), altura del líquido (H), altura del líquido por encima del rotor (H_L), temperatura y presión parcial del gas (P).
3. Variables fisicoquímicas: viscosidad del líquido (μ_l), densidades del líquido y gas (ρ_l, ρ_g), tensión superficial del líquido (σ_l), el coeficiente de difusión del gas en el líquido (D_{g-l}) y la composición impurezas/mezcla (X_w).

Para el cálculo del coeficiente de transporte de masa y el diámetro promedio de burbuja se utilizaron las correlaciones y el algoritmo propuestos por Lemoine [66], ya que considera los dos casos de tanques inyectados desde el fondo denominado GSR por sus siglas en inglés (Gas Sparging Reactor) y mediante la inducción del gas por el rotor denominado GIR por sus siglas en inglés (Gas inducing Reactor) (ver Figura 35); además el autor toma en cuenta las dimensiones del reactor, la distancia del rotor hasta la superficie del fluido, la velocidad de rotación del rotor, rapidez de flujo del gas de purga y las propiedades fisicoquímicas tanto del líquido como del gas. La Tabla 7 y Tabla 8 muestran las correlaciones utilizadas para el cálculo de $k \cdot A$ para cada reactor.

	Relación	Unidades	Intervalo
Densidad del agua			
Kell [67]	$\rho_{H_2O} = (999.83952 + 16.945176 \cdot (T - 273.15) - 7.9870401 \times 10^{-3} \cdot (T - 273.15)^2 - 46.170461 \times 10^{-6} \cdot (T - 273.15)^3 + 105.56302 \times 10^{-9} \cdot (T - 273.15)^4 - 280.54253 \times 10^{-12} \cdot (T - 273.15)^5) / (1 + 16.879850 \times 10^{-3} T) \quad (2.22)$	$\frac{kg}{m^3}$	$0 \leq T \leq 150^\circ C$ $P = 0.1MPa$
Viscosidad del agua			
Patek, J., y colaboradores[68]	$\mu_{H_2O} = 1 \times 10^{-6} \cdot (280.68 \cdot T^{*-1.9} + 511.45 \cdot T^{*-7.7} + 61.131 \cdot T^{*-19.6} + 0.45903 \cdot T^{*-40.0}) \quad (2.23)$	$Pa \cdot s$	$253.15 \leq T \leq 383.15K$ $P = 0.1MPa$
	$T^* = \frac{T}{300K}, \quad T [=] K \quad (2.24)$		
Coefficiente de difusión O₂-H₂O			
Wilke y Chang [69]	$D_{O_2-H_2O} = 7.4 \times 10^{-8} \cdot \frac{(2.6 \cdot MW_{H_2O})^{0.5} \cdot T}{\mu_{H_2O} \cdot (V_m^{0.6})_{O_2}} \quad (2.25)$	$\frac{cm^2}{s}$	No se especifica
	$MW_{H_2O} [=] \frac{g}{mol}, \quad \mu [=] cp, \quad V_m [=] \frac{cm^3}{mol}, \quad T [=] K$		
Tensión Superficial del agua			
Vargaftik, N.B. y colaboradores [70]	$\sigma_{H_2O} = 235.8 \times 10^{-3} \left[\frac{T_c - T}{T_c} \right]^{1.256} \left[1 - 0.625 \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right) \right] \quad (2.26)$	$\frac{N}{m}$	$273.15 \leq T \leq 647.15K$
	$T_c = 647.15K, \quad T [=] K$		

Tabla 6. Fórmulas termodinámicas utilizadas para el desarrollo del modelo.

Autor	Relación	Unidades	Intervalo
Constante de equilibrio O₂-H₂O			
Tromans [71]	$K = \exp \left[\frac{0.046 \cdot T^2 + 203.35 \cdot T \cdot \ln \left(\frac{T}{298} \right) - (299.378 + 0.092 \cdot T)(T - 298) - 20.591 \times 10^3}{R \cdot T} \right]$	(2.27)	273 ≤ T ≤ 400K
Densidad del gas N₂			
Castellan G. [72]	$\rho_{N_2} = \frac{P_T}{R \cdot T} \cdot (MW_{N_2})$	(2.28)	$\frac{kg}{m^3}$ Temperaturas altas
	$P_T [=] atm, R [=] \frac{litro \cdot atm}{mol \cdot K}, MW [=] \frac{kg}{kmol}$		Presiones bajas
Viscosidad el gas N₂			
Lemmon ¹ [73]	$\mu_{N_2} = 1 \times 10^{-6} \cdot (\mu_{dil} + \mu_{res})$	(2.29)	$Pa \cdot s$ 233 ≤ T ≤ 523K 0.09 ≤ P ≤ 29.7MPa
	$\mu_{dil} = \frac{0.026666958 \cdot \sqrt{MW_{N_2} \cdot T}}{\sigma^2 \cdot \Omega}, \sigma [=] nm$	(2.30)	$\mu Pa \cdot s$
	$\Omega = \exp \left[\begin{array}{l} 0.43100 - 0.4623 \cdot (\ln \tilde{T})^{1.0} + 0.08406 \cdot (\ln \tilde{T})^{2.0} \\ + 0.005341 \cdot (\ln \tilde{T})^{3.0} - 0.00331 \cdot (\ln \tilde{T})^{4.0} \end{array} \right]$	(2.31)	adimensional

Tabla 6 (continuación). Correlaciones termodinámicas utilizadas para el desarrollo del modelo.

¹ La viscosidad del N₂ esta expresada mediante la fórmula $\mu_{N_2} = \mu_{dil} + \mu_{res}$ en donde la μ_{dil} es la viscosidad del gas diluido, μ_{res} es la viscosidad residual del fluido, $\tau = \frac{T_c}{T}$ y $\delta = \frac{\rho}{\rho_c}$ corresponden a parámetros adimensionales de temperatura y densidad, respecto a sus estados críticos.

Autor	Relación	Unidades	Intervalo
Viscosidad el gas N₂ (continuación)			
Lemmon [73]	$\tilde{T} = \frac{T}{\left(\frac{\varepsilon}{\kappa}\right)}$	(2.32)	adimensional
	$\begin{aligned} \mu_{res} = & 10.72 \cdot \tau^{0.10} \cdot \delta^{2.00} + 0.03989 \cdot \tau^{0.25} \cdot \delta^{10.0} \cdot \exp(-\delta^{1.0}) \\ & + 0.001208 \cdot \tau^{3.20} \cdot \delta^{12.0} \cdot \exp(-\delta^{1.0}) \\ & - 7.402 \cdot \tau^{0.90} \cdot \delta^{2.0} \cdot \exp(-\delta^{2.0}) \\ & + 4.620 \cdot \tau^{0.30} \cdot \delta^{1.0} \cdot \exp(-\delta^{3.0}) \end{aligned}$	(2.33)	$\mu Pa \cdot s$
	$\tau = \frac{T_c}{T}, \quad T_c [=] K$	(2.34)	adimensional
	$\delta = \left(\frac{\rho}{\rho_c}\right)_{N_2} \quad \rho [=] \frac{kmol}{m^3}$	(2.35)	adimensional

Tabla 6 (continuación). Correlaciones termodinámicas utilizadas para el desarrollo del modelo.

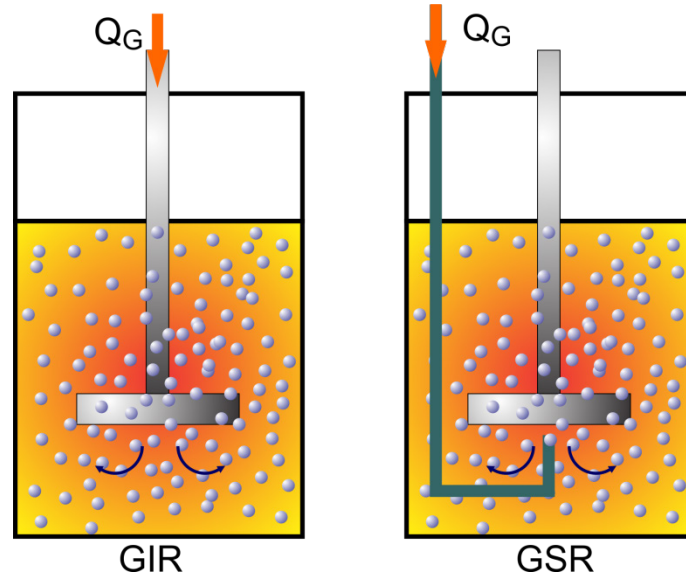


Figura 35. Representación esquemática de los reactores GIR y GSR.

Relación	Unidades
$k \cdot A = 1.383 \times 10^5 \cdot \frac{D_{O_2-H_2O}^{0.500} \cdot \varepsilon^{0.155} \cdot d_b^{0.414}}{\rho_{N_2}^{0.060}} \cdot \left(\frac{P^*}{V_l} \right)^\delta \cdot U_g^\eta \cdot \exp(-2.011 \cdot XW)$	s^{-1}
(2.36)	
$\delta = 7.010 \times 10^{-6} \cdot d_{imp}^{-0.395} \cdot d_{tanque}^{4.183} \cdot N^{2.237} \cdot \mu_l^{0.126} \cdot H_L^{-0.658}$	(2.37)
$\eta = 0.420 \cdot d_{imp}^{-2.385} \cdot d_r^{-2.485} \cdot N^{-3.238} \cdot \sigma_l^{-0.261} \cdot H_L^{3.249}$	(2.38)

Tabla 7. Correlaciones para el cálculo de $k \cdot A$ para reactores GIR.

Relación	Unidades
$k \cdot A = 2.564 \times 10^3 \cdot \frac{D_{O_2-H_2O}^{0.500} \cdot \varepsilon^{0.575}}{\rho_{N_2}^{0.060} \cdot d_b^{0.402}} \cdot \left(\frac{P^*}{V_l} \right)^\delta \cdot U_g^\eta \cdot \exp(-2.402 \cdot XW)$	s^{-1}
(2.39)	
$\delta = 4.664 \times 10^{-4} \cdot d_{tanque}^{0.124} \cdot N^{0.593} \cdot \mu_l^{-0.769}$	(2.40)
$\eta = 9.475 \times 10^{-5} \cdot d_{imp}^{0.363} \cdot N^{0.967} \cdot \rho_l^{-0.470} \cdot \mu_l^{-0.884} \cdot H_L^{-1.440}$	(2.41)

Tabla 8. Correlaciones para el cálculo de $k \cdot A$ para reactores GSR.

En donde $D_{O_2-H_2O}$, representa el coeficiente de difusión de oxígeno en agua, $\left(\frac{P^*}{V_l}\right)$ es la potencia total de entrada por unidad de volumen, U_g es la velocidad superficial del gas de purga a la salida de la flecha, N es la velocidad de rotación del rotor, ε es la fracción de gas retenida, μ_l es la viscosidad del líquido, ρ_{N_2} es la densidad del gas de purga, d_b es el diámetro promedio de la burbuja, H_L es la altura desde el rotor hasta la superficie del baño, d_{imp} es el diámetro del rotor y δ , η son parámetros obtenidos mediante análisis estadístico.

Determinación del diámetro promedio de burbuja.

Para el cómputo del diámetro promedio de burbuja se utilizaron las correlaciones propuestas por Lemoine [66] (ver Tabla 9 y Tabla 10).

Relación	Unidades
$d_b = 2.61 \times 10^{-3} \cdot U_g^\gamma \cdot \varepsilon^\lambda$	(2.42) m^2
$\gamma = 3.980 \times 10^{-2} \cdot d_{imp}^{1.500} \cdot d_{tanque}^{-2.020} \cdot N^{0.419} \cdot \mu_l^{0.102}$	(2.43)
$\lambda = 3.310 \times 10^{-2} \cdot \rho_l^{0.373} \cdot \sigma_l^{-0.044} \cdot \rho_g^{-0.093} \cdot H_L^{0.070} \cdot \exp(-1.180 \cdot XW)$	(2.44)

Tabla 9. Correlaciones utilizadas para el cálculo del diámetro de burbuja promedio en reactores GIR.

Relación	Unidades
$d_b = 9.38 \times 10^{-3} \cdot U_g^\gamma \cdot \varepsilon^\lambda$	(2.45) m^2
$\gamma = 1.380 \times 10^{-2} \cdot d_{imp}^{-0.878} \cdot d_{tanque}^{0.351} \cdot N^{0.563} \cdot H_L^{0.185}$	(2.46)
$\lambda = 1.300 \times 10^{-20} \cdot \rho_l^{7.490} \cdot \sigma_l^{-0.240} \cdot \rho_g^{-0.196} \cdot H_L^{0.070} \cdot \exp(-8.470 \cdot XW)$	(2.47)

Tabla 10 Correlaciones utilizadas para el cálculo del diámetro de burbuja promedio en reactores GSR.

En el Apéndice I se muestran las correlaciones necesarias para el cálculo del coeficiente de transporte de masa y el área de burbuja promedio. En la Tabla 11 se presentan los intervalos utilizados en este estudio de cada cantidad.

Variable	Unidades	Valor Mínimo	Valor Máximo
U_g	$\frac{m}{s}$	0	0.3
N	s^{-1}	0	54.0
H	m	0.064	6.542
H_L	m	1.15×10^{-2}	4.97
d_r	m	0.075	3.6000
d_{imp}	m	0.032	1.370
ρ_l	$\frac{kg}{m^3}$	310	2042
μ_l	$Pa \cdot s$	5.0×10^{-5}	0.09
σ_l	$\frac{N}{m}$	1.20×10^{-3}	0.077
ρ_g	$\frac{kg}{m^3}$	0.05	194.90
X_w	wt	0.5589	1.0000
D_{g-l}	$\frac{m^2}{s}$	0.08	153.94
n_{imp}		1	8
MW_g	$\frac{kg}{kmol}$	2	44

Tabla 11. Intervalos de validez de las ecuaciones (2.36)-(2.41).

Para el cálculo del modelo propuesto se desarrolló una aplicación de consola en el lenguaje de programación FORTRAN con el compilador, Intel® Visual Fortran Compiler v11.0, en donde es necesario ingresar los datos de operación (temperatura, concentración inicial de oxígeno, dimensión, tipo y velocidad del rotor, rapidez del flujo del gas de purga, dimensiones y tipo del reactor). El programa contiene las ecuaciones para el cálculo de los parámetros y propiedades termodinámicas presentadas anteriormente. Por último, el programa escribe un archivo de texto plano con los datos correspondientes al tiempo [s] *versus* la concentración adimensional de oxígeno disuelto en agua (ver Figura 36).

```

88 REAL, PARAMETER :: PARAMETRO_LEN_JON = 0.3656 !nm
89 !REAL, PARAMETER :: R_LATM = 0.08205 !(L ATM)/(MOL*K) PERRY
90 REAL, PARAMETER :: PRESION = 1.0 !atm
91
92 REAL, PARAMETER :: f_O2 = 1
93 REAL, PARAMETER :: Prot= 1 !Unidades [atm] latm = 101325 Pa
94 REAL, PARAMETER :: DIAMETRO_BURBUJA = 0.005 !m
95
96 !*****
97 !***** Datos de trabajo *****
98 !*****
99 REAL, PARAMETER :: Diametro_tanque = 0.52 !m
100 REAL, PARAMETER :: altura_tanque = 0.52 !m
101 REAL, PARAMETER :: Diametro_impeller = 0.18 !m
102
103 REAL, PARAMETER :: PCT_O2_in = 7.0 !ppm
104 REAL, PARAMETER :: QG_LPM = 10.0 !LPM
105 REAL, PARAMETER :: RPM = 290.0 !RPM
106 REAL, PARAMETER :: TEMP_C = 20.0 ![°C]
107 INTEGER :: TIEMPO
108
109 !*****
110 !***** Caracteres Especiales *****
111 !*****
112 CHARACTER :: out
113 INTEGER :: input =248 !símbolo de grados
114 out = ACHAR(input)
115
116 !*****
117 !***** Datos de entrada *****
118 !*****
119
120 ! Body of AlDegassing
    
```

Figura 36. Pantalla ilustrativa del programa desarrollado.

La Figura 37 muestra un diagrama de flujo simplificado del algoritmo del programa escrito para el cálculo de la concentración de oxígeno disuelto en agua.

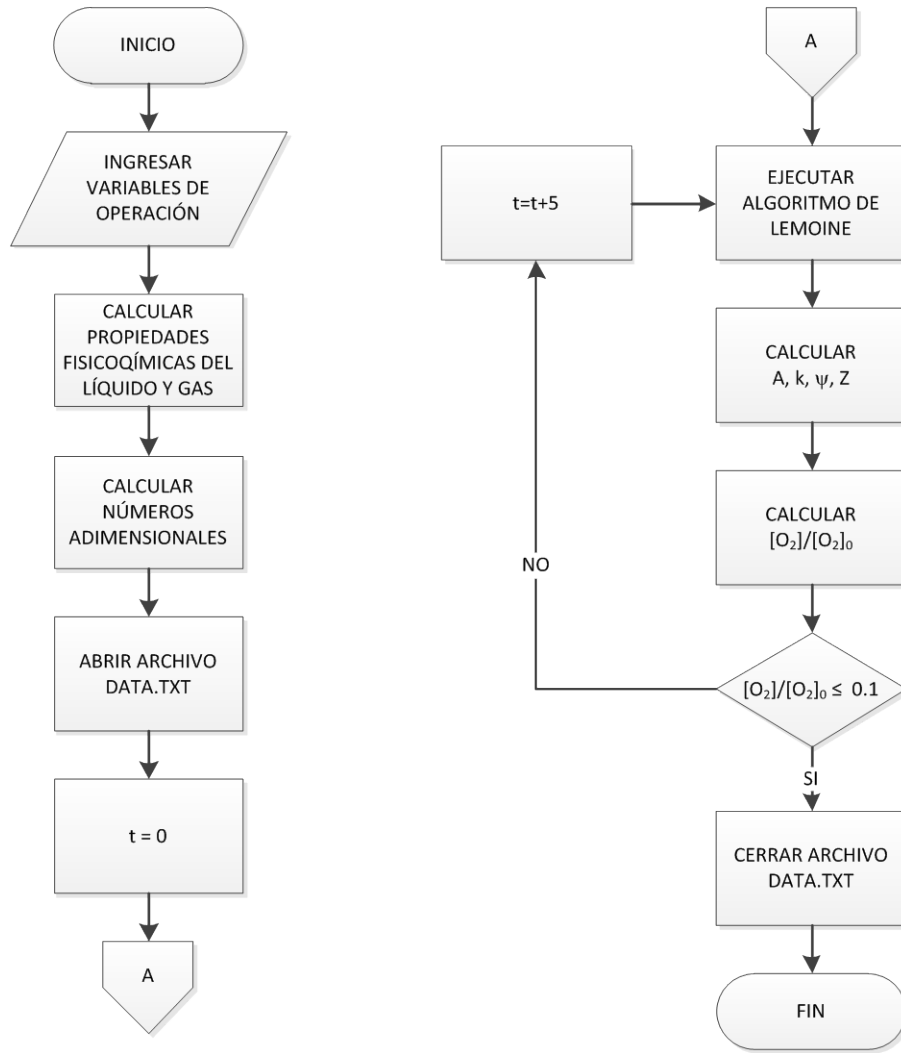


Figura 37. Diagrama de flujo del algoritmo propuesto.

Capítulo 3. Resultados

Validación del modelo

Para comprobar la validez del modelo desarrollado en la sección anterior es necesario validar los resultados obtenidos contra datos experimentales, para tal efecto se tomaron los resultados del trabajo realizado por Torres [63]. El autor realizó una serie de experimentos, en donde analizó el efecto en el desgasificado de oxígeno, estudiando los siguientes parámetros de operación: la velocidad de agitación N , la rapidez de flujo del gas de purga \dot{G} , y el modo de inyección del gas de purga (convencional a través del rotor y por el fondo).

Un segundo grupo de datos experimentales proporcionados por Maricruz Hernández estudiante de doctorado de este grupo de trabajo, fueron tomados para validar con el modelo propuesto; el sistema utilizado y las condiciones experimentales son las mismas que utilizó Torres [63] en su trabajo. La Tabla 12 y Figura 38 describen las condiciones experimentales empleadas y los valores obtenidos por ambos autores.

Experimento	Velocidad de agitación [rpm]	Rapidez de flujo del gas de purga [lpm]	Forma de inyección	Concentración inicial de O ₂ [ppm]	
				Torres	Hernández
1	573	40	1 (convencional)	5.35	6.18
2	573	10	1 (convencional)	5.44	6.14
3	290	40	1 (convencional)	5.40	5.73
4	290	10	1 (convencional)	5.38	6.20
5	573	40	2 (fondo)	5.40	6.17
6	573	10	2 (fondo)	5.38	6.14
7	290	40	2 (fondo)	5.40	5.68
8	290	10	2 (fondo)	5.38	5.73

Tabla 12. Parámetros experimentales utilizados para la eliminación de oxígeno disuelto en agua, mediante la inyección de N₂ en un modelo físico, realizados por Torres [63] y Hernández [74].

La Figura 39 y la Figura 40 muestran gráficamente los resultados experimentales de desgasificado reportados por Torres y Hernández respectivamente, en la desoxidación de agua en modelo físico.

Para comparar los resultados calculados contra los datos experimentales se obtuvo el cociente $\frac{C_{O_2}}{C_{O_2}^0}$, el cual representa la concentración adimensional en el proceso de desgasificado, en donde C_{O_2} es la concentración de oxígeno disuelto al tiempo t y $C_{O_2}^0$ es la concentración de oxígeno inicial en el baño.

La Figura 38 a la Figura 40 muestran los datos experimentales reportados y el modelo teórico, así como, los comparativos entre los casos de inyección convencional y por el fondo obtenidos por Torres y Hernández *versus* el modelo desarrollado, para las mismas condiciones de velocidad de rotación y rapidez de flujo de gas en el modelo propuesto.

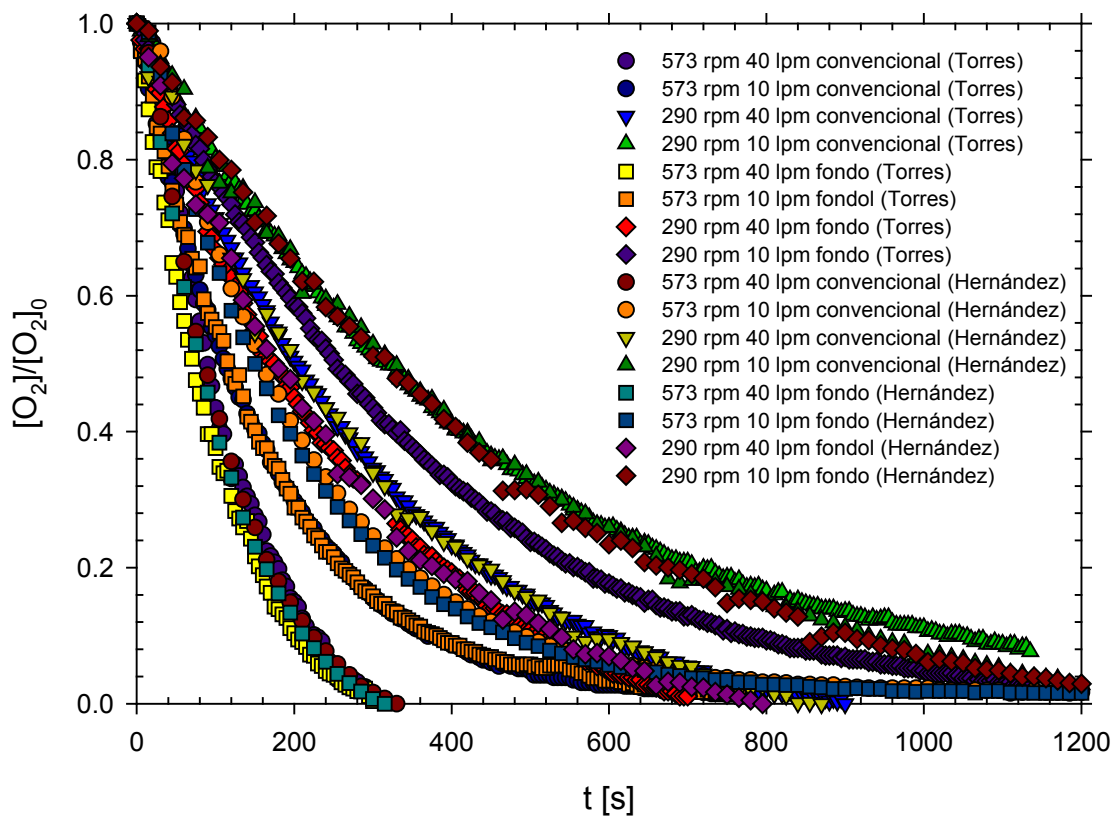


Figura 38. Resultados experimentales reportados por integrantes del grupo de trabajo; los resultados corresponden al desgasificado de oxígeno en modelo físico bajo diferentes condiciones de operación: velocidad de rotación (N), rapidez de inyección del gas de purga (G) y método de inyección del gas de purga.

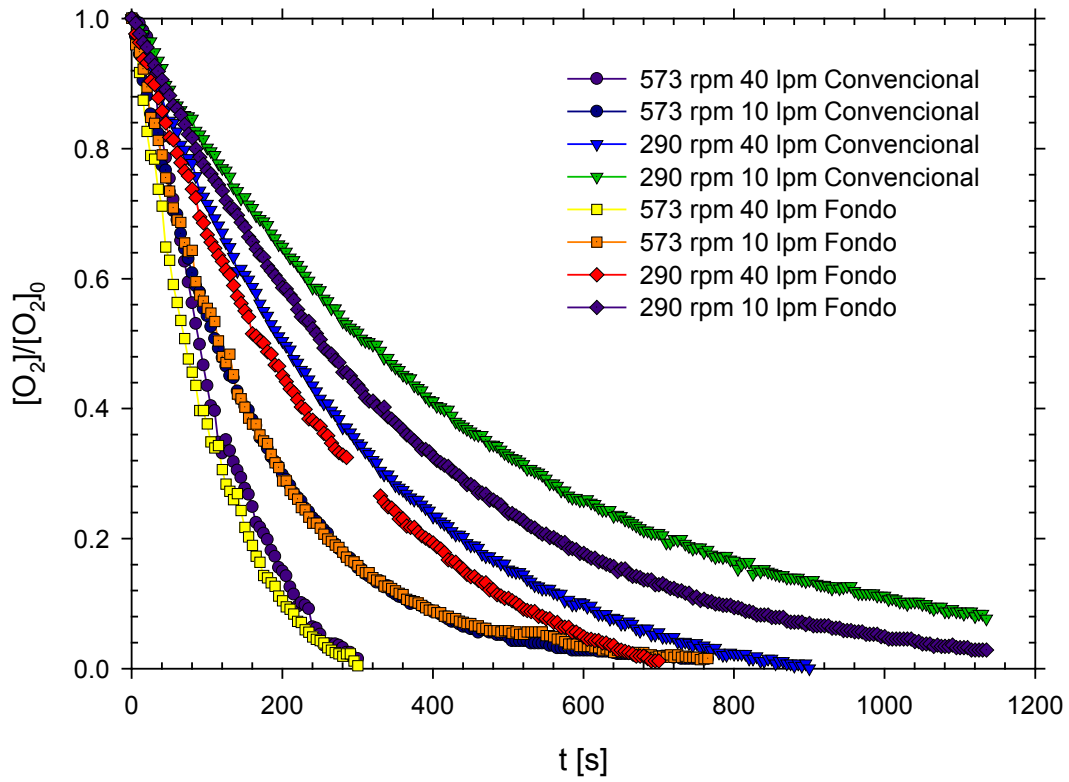


Figura 39. Representación gráfica de los datos experimentales obtenidos en el modelo físico de Torres [63].

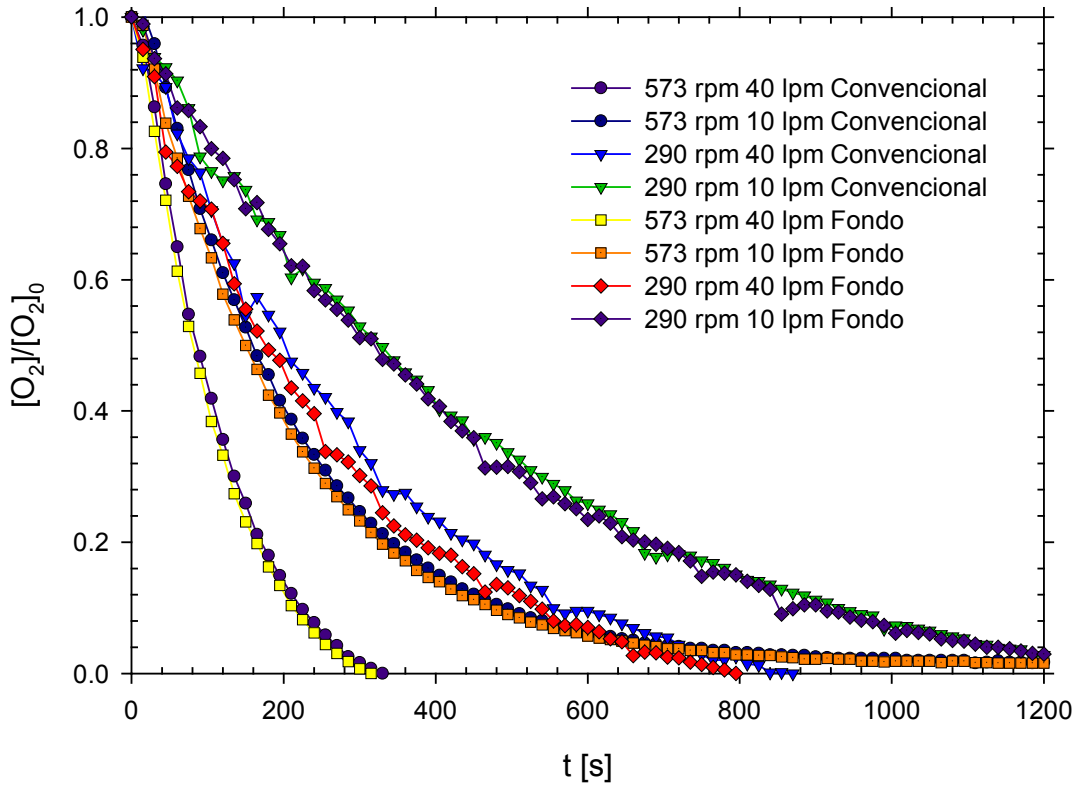


Figura 40. Representación gráfica de los datos experimentales reportados por Hernández [74].

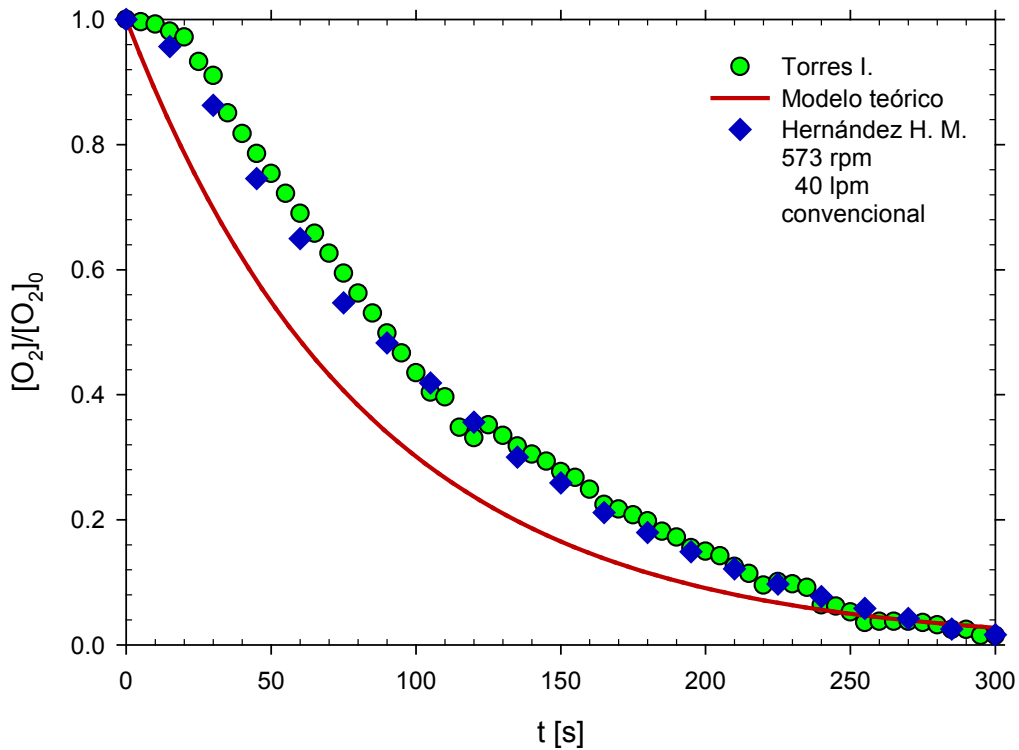


Figura 41. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 1. 536 rpm, 40 lpm inyección de gas convencional.

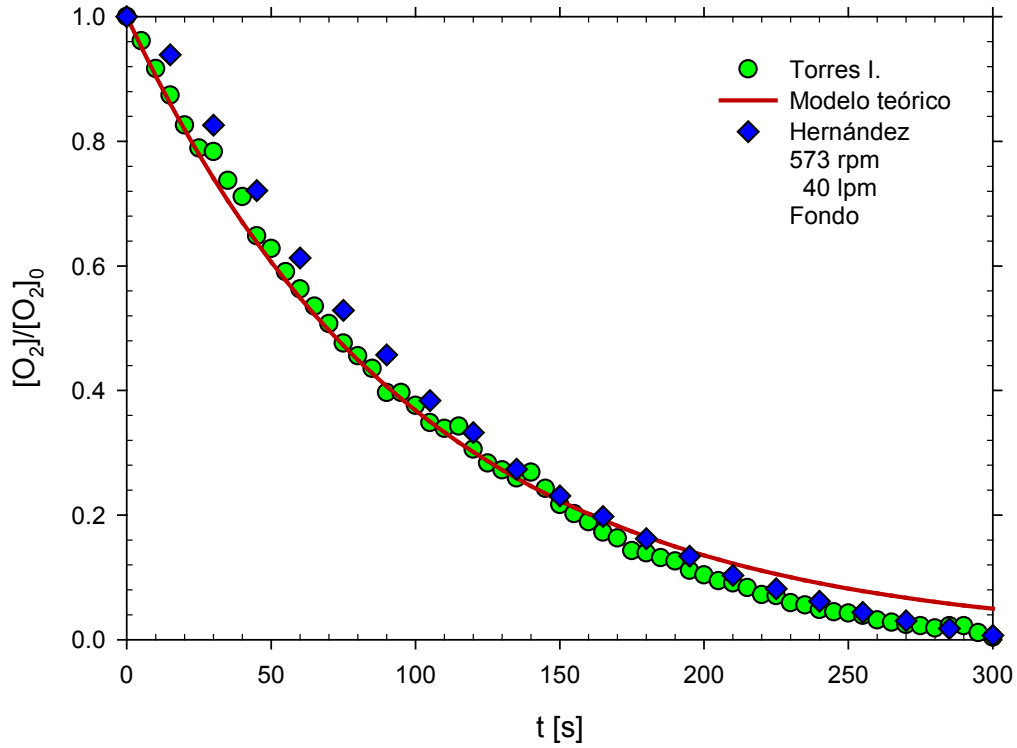


Figura 42. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 5. 536 rpm, 40 lpm inyección de gas por el fondo.

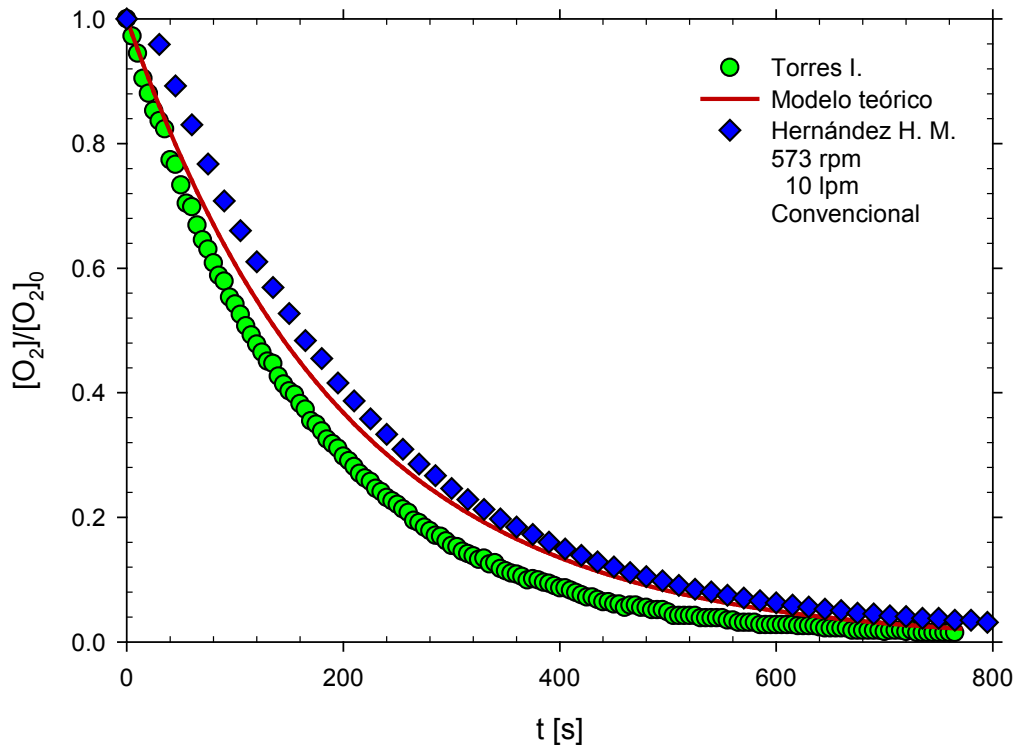


Figura 43. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 2. 536 rpm, 10 lpm inyección de gas convencional.

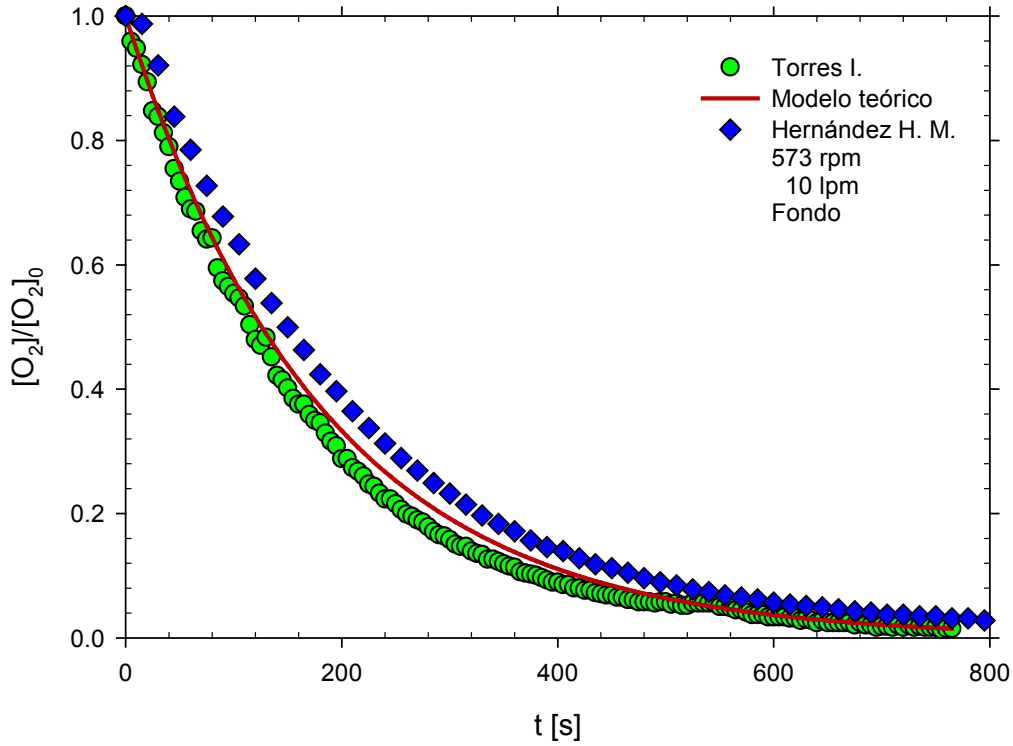


Figura 44. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 6. 536 rpm, 10 lpm inyección de gas por el fondo.

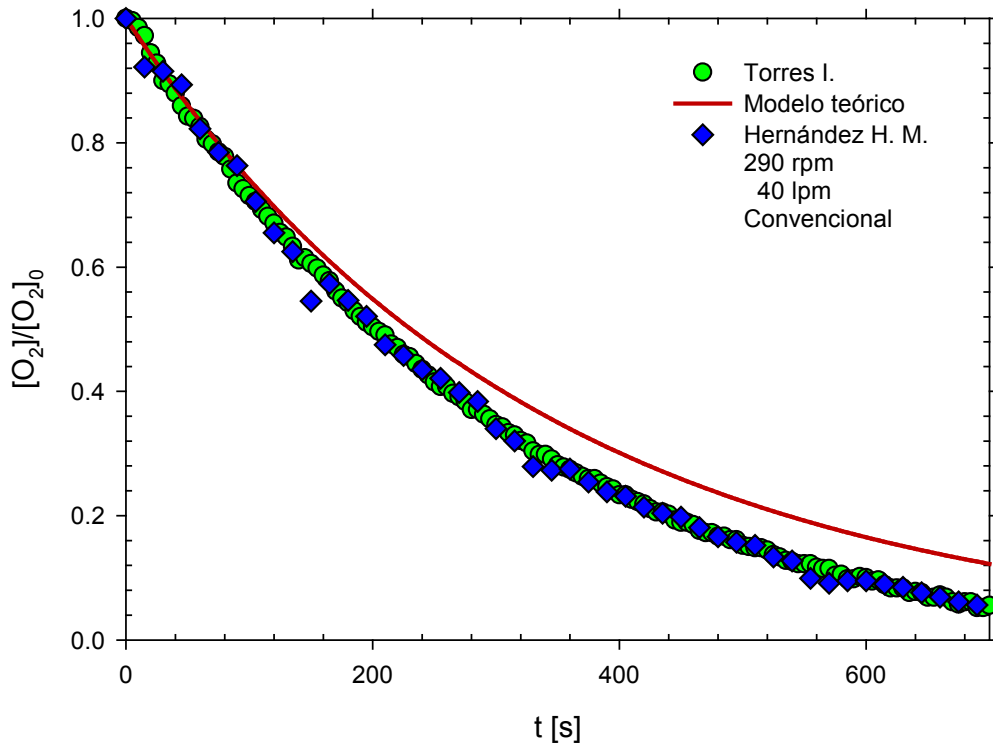


Figura 45. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 3. 290 rpm, 40 lpm inyección de gas convencional.

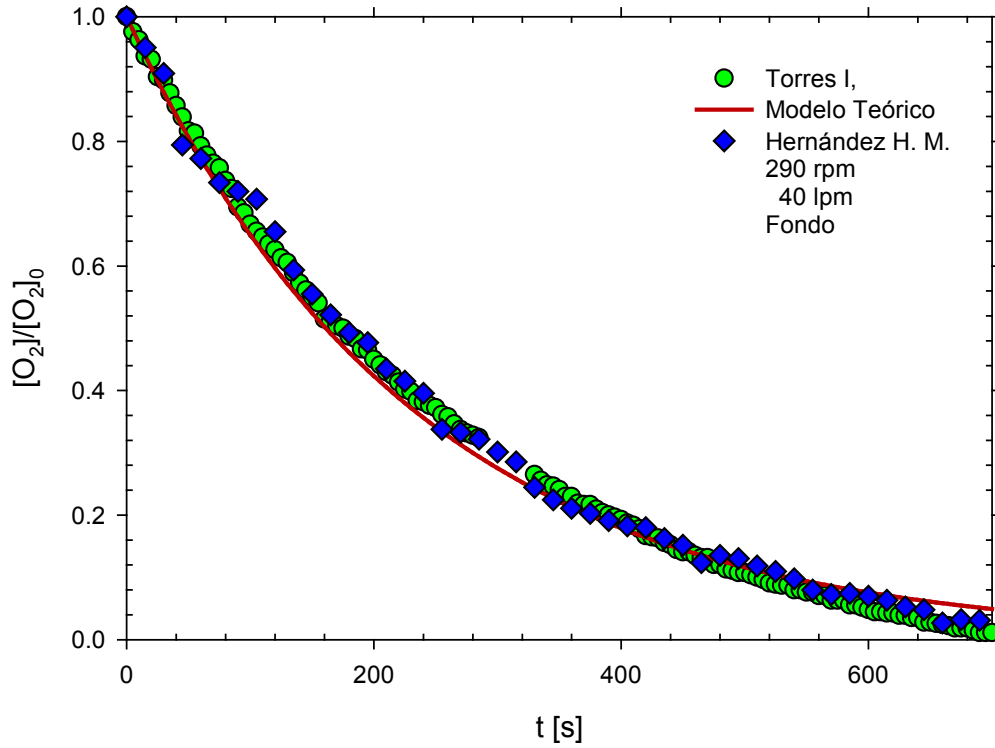


Figura 46. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 7. 290 rpm, 40 lpm inyección de gas por el fondo.

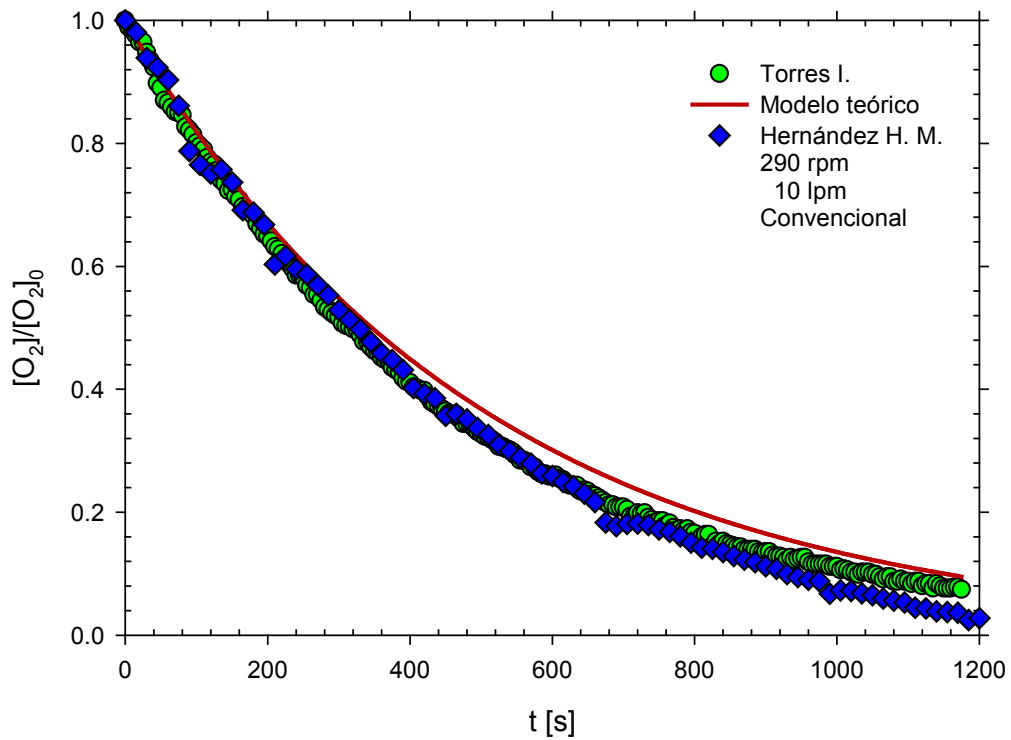


Figura 47. Representación del modelo teórico y los datos del experimento 4. 290 rpm, 10 lpm inyección de gas convencional.

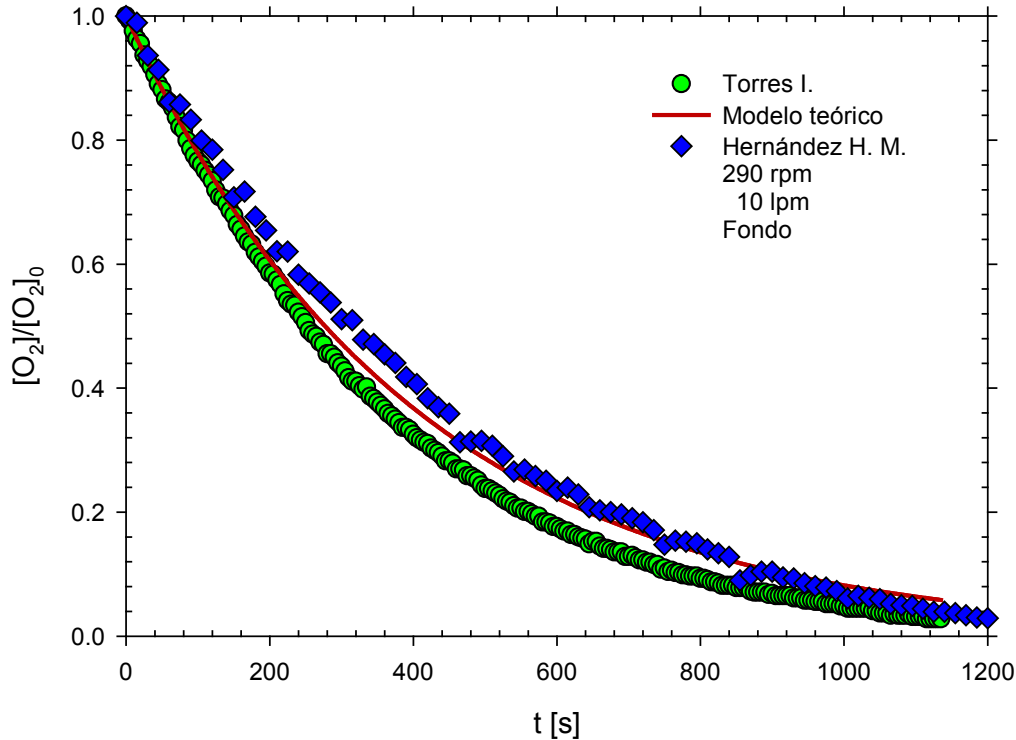


Figura 48 Representación del modelo teórico y los datos del experimento 8. 290 rpm, 10 lpm inyección de gas por el fondo.

De los resultados experimentales de los dos autores (Torres [63] y Hernández [74]) que muestran mismas tendencias, se aprecia que una combinación de alta velocidad de rotación (573 rpm) y alto flujo (40 l/min) resulta en una alta velocidad de desgasificado sin importar el punto de inyección del gas. Por el contrario, combinando bajo flujo de gas (10 lpm) y baja velocidad de rotación (290 rpm) se tienen muy bajas rapidezces de desgasificación (ver, Figura 39 y Figura 40). Al parecer a bajas velocidades de rotación la inyección por el fondo es mejor, en términos de cinética de desgasificado, que la inyección convencional. De la Figura 41 a Figura 48, en donde se comparan las predicciones del modelo desarrollado en este trabajo con los experimentos de ambos autores (Torres [63] y Hernández [74]), se puede afirmar que existe una excelente concordancia entre simulaciones y mediciones experimentales tanto en tendencia como en magnitud, dando prácticamente las mismas cinéticas de desgasificado. Solo en los casos de los experimentos 1 (573 rpm, 40 lpm, convencional) y 3 (290 rpm, 40 lpm, convencional), hay desviaciones o discrepancias entre predicciones y mediciones

que se pueden atribuir a la presencia de un vórtice que aumenta el área superficial y puede provocar transporte de masa del aire hacia el baño, lo cual no se contempla en el modelo matemático. La cinética de desgasificado se ve influenciada por los mecanismos convectivos y difusivos de transporte de masa, así como por el tamaño total del área interfacial burbuja-líquido y por su distribución en todo el baño. La velocidad de rotación es la variable que más afecta la cinética de desgasificado porque acelera los procesos de transporte de masa y además produce burbujas más finas (mayor área interfacial), generando mucha turbulencia que mejora aún más el transporte de masa y ayuda a dispersar a las burbujas hasta los sitios más alejados del centro de la olla. Todo esto impacta positivamente al proceso de desgasificado. En cuanto al flujo de gas, un incremento en esta variable también incrementa la velocidad de desgasificado, aunque no en el grado que lo hace la velocidad de rotación. Un aumento en el flujo de gas implica un incremento en la fracción de gas presente en el baño (gas hold-up) y consecuentemente una mayor turbulencia provocada por la presencia de gas. El aumento en el flujo de gas puede propiciar un incremento en el tamaño de la burbuja y por consecuencia una disminución en el área interfacial total, por lo que un aumento en el flujo de gas debe ir acompañado de un aumento en la velocidad de rotación para que se pueda romper el flujo gaseoso en burbujas pequeñas. Sin embargo, hay que tomar en consideración que el aumento en el flujo de gas no debe ser ilimitado, ya que se ha reportado [44] que un aumento desmedido en el flujo de gas crea una capa de gas localizada entre el rotor y el baño, la cual impide una eficiente transferencia de momentum entre el rotor y el líquido lo que redundaría en una merma en la agitación global del baño. Por último, la variable que menos efecto tiene sobre la cinética de desgasificado es variar el punto de inyección de gas, aunque la técnica de inyección por el fondo es superior a la convencional para bajas velocidades de rotación del rotor. Además, la inyección por el fondo implicaría en la práctica metalúrgica que no se reemplazarían flechas ni rotores de grafito (para fundiciones de aluminio) cuando estas presenten grietas o fisuras, lo cual representaría una ventaja adicional de la inyección por el fondo de la olla. Otra posible ventaja de la inyección por el fondo

es que se podría evitar la capa de gas que a veces se forma entre el rotor y el baño, evitando la disminución en la agitación. Además, la inyección por el fondo aprovecha la fuerza boyante del gas y al llegar al rotor es presumible un intercambio de momentum más intenso entre las burbujas y el rotor que en el caso de la inyección convencional, en donde el gas viaja en sentido contrario a la dirección de flotación que seguirán las burbujas ascendiendo a través del baño.

Cálculo de la eficiencia de desgasificado

La eficiencia de desgasificado e , se define como la cantidad de oxígeno eliminado por unidad de volumen de nitrógeno inyectado, se considera como el volumen necesario para remover el 90 % de oxígeno contenido en el baño. Esto implica un cambio de valores de 1 hasta 0.1 para el cociente de $\frac{[O_2]}{[O_2]_0}$, donde el valor de 0.1 representa el 90 % de oxígeno eliminado. Expresado en forma matemática se tiene:

$$e = \frac{[O_2]_0 - [O_2]_{0.1}}{V_{N_2}} \quad (3.1)$$

El cambio en la eficiencia de desgasificado con respecto a los valores experimentales se calculó de la siguiente forma:

$$\Delta e = \left(\frac{e_{experimental} - e_{teórico}}{e_{experimental}} \right) \cdot 100 \quad (3.2)$$

Donde $e_{experimental}$ corresponde a la eficiencia de desgasificado experimental y $e_{teórico}$ al valor calculado mediante el modelo. La Tabla 13, muestra la eficiencia y cambios de la eficiencia calculados para cada experimento de Torres [63] y Hernández [74]. De la Tabla 13 se aprecia que con flujo de gas bajo (10 lpm) y altas revoluciones del rotor (573 rpm) se alcanzan las mejores eficiencias, ya que se combina alta cinética de desgasificado con poco consumo de gas y que esta eficiencia es independiente del punto de inyección. También se aprecia que todas las simulaciones predicen en un rango menor al 10 % de error las eficiencias medidas experimentalmente por ambos autores experimentalistas. Son obvias las

eficiencias mayores a altas velocidades del rotor, ya que como se ha descrito anteriormente, la alta velocidad del rotor promueve un mejor transporte de masa, mayor turbulencia, mayor área interfacial burbuja-líquido y mejor dispersión de burbujas.

Experimento	$e \left[\frac{ppmO_2}{litrosN_2} \right]$				$\Delta e [\%]$	
	Torres		Hernández		Torres	Hernández
	Teórico	Experimental	Teórico	Experimental		
573rpm 40lpm Conv	0.0333	0.0321	0.0384	0.0372	-3.75	-3.32
573rpm 10lpm Conv	0.0730	0.0774	0.0698	0.0671	5.58	-3.98
290rpm 40lpm Conv	0.0113	0.0122	0.0126	0.0139	7.26	9.98
290rpm 10lpm Conv	0.0273	0.0283	0.3333	0.0312	3.22	6.25
573rpm 40lpm Fond	0.0344	0.0363	0.0368	0.0378	3.79	2.59
573rpm 10lpm Fond	0.0744	0.0764	0.0713	0.0694	2.59	-2.73
290rpm 40lpm Fond	0.0141	0.0143	0.0142	0.0142	1.29	0.02
290rpm 10lpm Fond	0.0356	0.0375	0.0355	0.0366	5.06	3.06

Tabla 13. Cálculo y cambio de la eficiencia de desgasificado para los trabajos de Torres [63] y Hernández [74] para un cambio de 90 % de la concentración inicial de oxígeno disuelto.

La Figura 49 muestra la eficiencia de desgasificado teórica en función del tiempo. La Figura 50 y la Figura 51 muestran los resultados experimentales en un modelo físico de desgasificado por las técnicas de inyección convencional y por el fondo junto con los valores determinados por el modelo matemático reportados por Torres y Hernández respectivamente. La Figura 50 y Figura 51 muestra nuevamente buena concordancia entre simulaciones y las mediciones experimentales, aunque en todos los casos hay un ligero desfase entre el modelo matemático y la medición, estando siempre la simulación desfasada a la derecha prediciendo menores eficiencias que las medidas. De la Figura 49 a la Figura 51 se desprende que con altas velocidades de rotación (573 rpm) y altos flujos de gas (40 lpm) se logran eficiencias altas en menos de 5 minutos, mientras que con las condiciones contrarias (bajo flujo y baja velocidad de rotación) no se logran las mismas eficiencias sino hasta tiempos muy largos mayores a 20 minutos, por lo que el consumo de gas no solo depende del flujo usado sino también del tiempo de proceso para lograr la remoción del gas del baño.

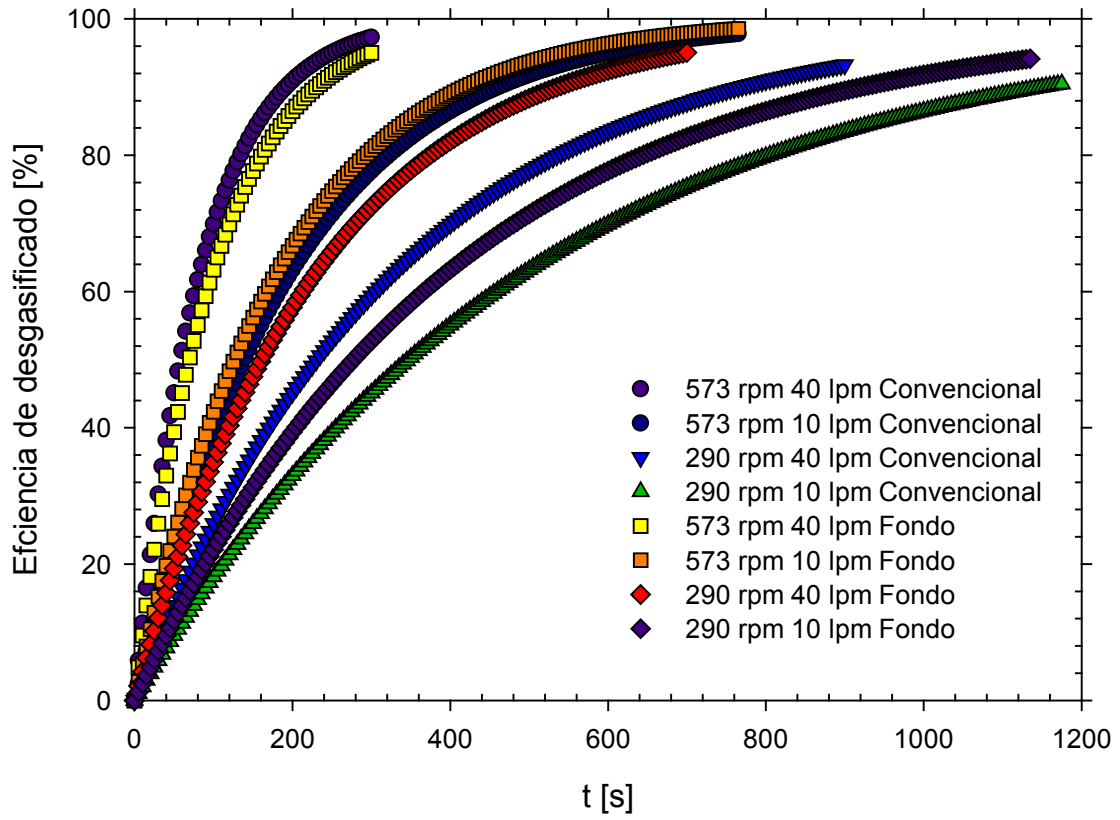


Figura 49. Eficiencia de desgasificado teórica.

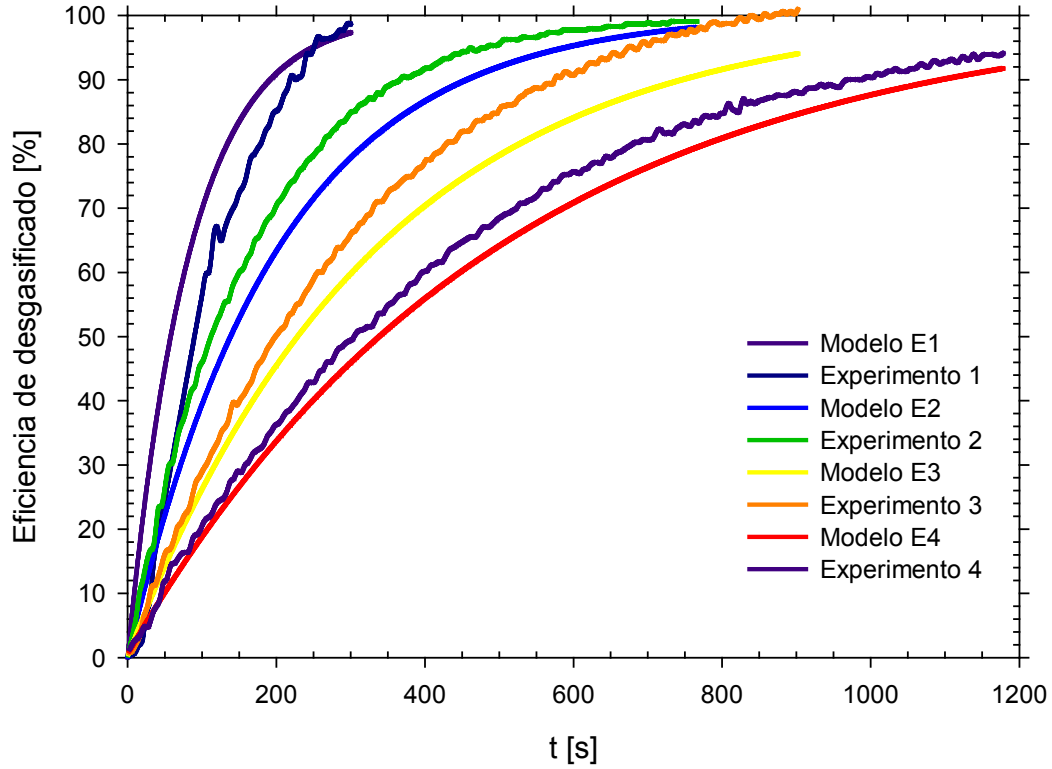


Figura 50. Eficiencias de desgasificado teóricas y experimentales mediante la inyección del gas convencional. La nomenclatura corresponde a la utilizada en la Tabla 12.

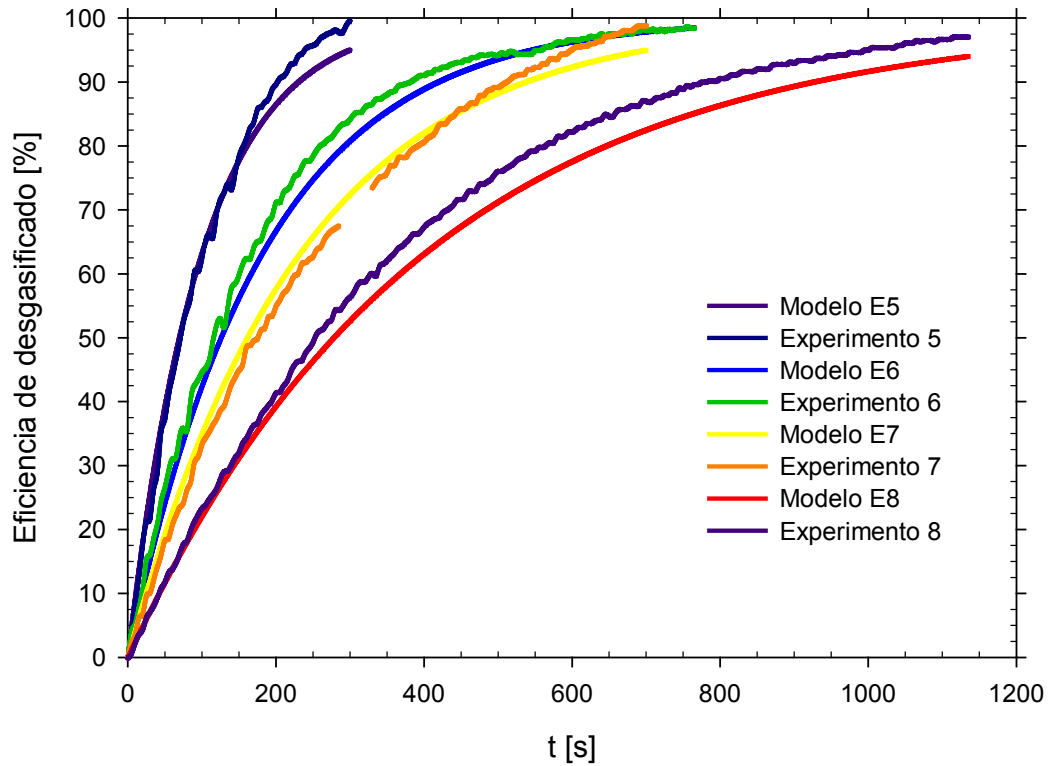


Figura 51. Eficiencias de desgasificado teóricas y experimentales mediante la inyección del gas por el fondo. La nomenclatura corresponde a la utilizada en la Tabla 12

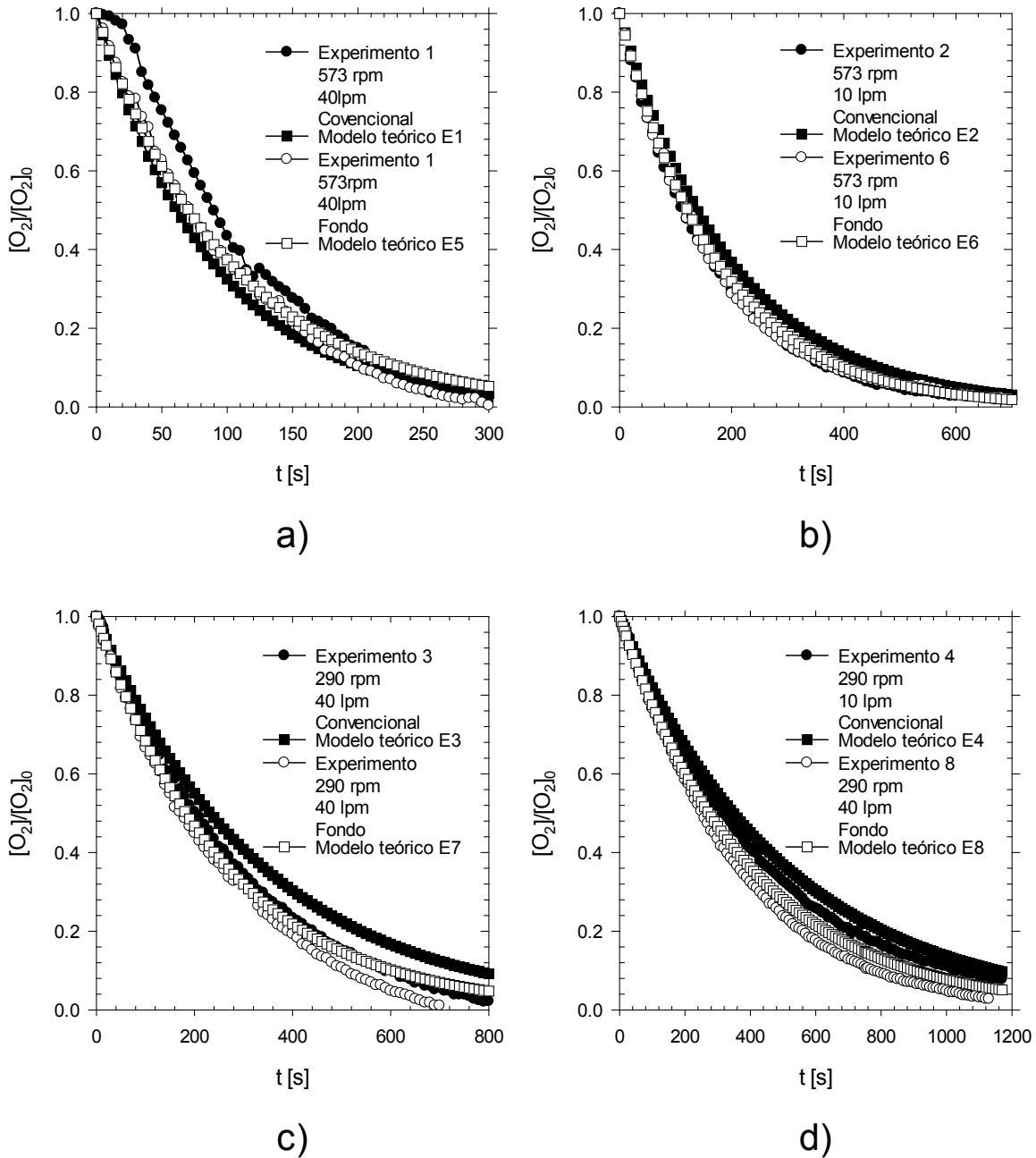


Figura 52. Comparativo de los datos experimentales obtenidos por Torres de forma convencional y por el fondo versus el modelo matemático bajo las condiciones indicadas.

La Figura 52 es un comparativo entre los diferentes experimentos realizados y el modelo desarrollado entre diferentes formas de inyección de gas (cambiando el punto de inyección: a través del rotor o convencional y por el fondo de la olla), bajo las mismas condiciones de velocidad de rotación del rotor y rapidez de flujo (la nomenclatura corresponde a la empleada en la Tabla 12). En ambas inyecciones

se ve una gran concordancia entre experimentos y mediciones experimentales, aunque es claro que el modelo reporta mejores simulaciones con altas velocidades de rotación (573 rpm en gráficas superiores de la Figura 52) que con bajas velocidades de rotación (290 rpm en gráficas inferiores de la Figura 52). Se vuelve a confirmar que la variable que más impacta a la cinética de desgasificado es la velocidad de rotación del rotor. Cuando la velocidad de rotación es de 573 rpm junto con un flujo alto de gas de 40 lpm se logra una desgasificación casi total en 300 segundos. Cuando el flujo de gas baja a 10 lpm y se mantiene la velocidad alta en el rotor baja la cinética de desgasificado alcanzando una eliminación total de gas hasta los 800 segundos. Finalmente con bajas velocidades de rotación del rotor (290 rpm) las desgasificaciones completas se logran a los 800 segundos (para 40 lpm) y se va los 1200 segundos (para 10 lpm). También se repite el poco o nulo efecto que tiene el punto de inyección sobre la cinética de desgasificado.

Dependencia del diámetro de burbuja en función de la velocidad del rotor

La Figura 53 muestra el diámetro promedio de la burbuja calculada en función de la velocidad de rotación del rotor para tres flujos de gas distintos. Se puede observar que el diámetro de promedio de la burbuja disminuye al aumentar la velocidad de rotación del rotor, mientras que el aumento en el flujo del gas de purga provoca un aumento en el diámetro de la burbuja. El rango de tamaños de burbuja que se predicen va de los 4 a los 8 mm de diámetro, lo cual concuerda con lo reportado por otros autores [\[27-29\]](#).

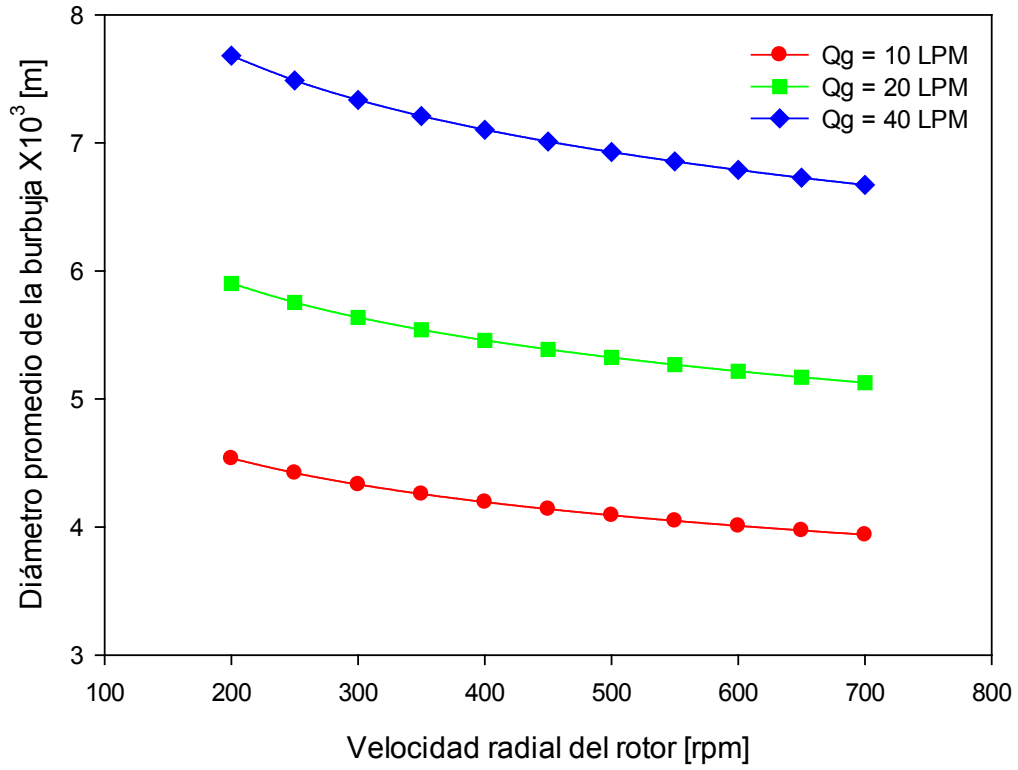


Figura 53. Variación del diámetro promedio de burbuja en función de la velocidad radial del rotor a flujo constante para reactores en donde el gas de purga es inyectado por la técnica convencional.

Capítulo 4. Conclusiones

En este trabajo se desarrolló un modelo matemático basado en principios de transporte de masa y termodinámica, a través de un balance microscópico de masa para simular el proceso de desgasificado en una olla batch equipada con el rotor-inyector. El modelo considera correlaciones empíricas para determinar los parámetros cinéticos más influyentes que son el coeficiente de transporte de masa, k , y el diámetro de la burbuja, d_b , que a su vez es función de los principales parámetros de operación, velocidad del rotor N , flujo de gas Q_g , y técnica de inyección, llegando a las siguientes conclusiones:

- El modelo matemático desarrollado se comparó contra las mediciones experimentales obtenidas por dos investigadores de este grupo de trabajo, obteniendo una excelente concordancia entre las predicciones que arroja este modelo y lo medido experimentalmente en cuanto a la cinética de desgasificación y la eficiencia en el consumo de gas. Particularmente la cinética de desgasificado predicha con el modelo concuerda muy bien con las cinéticas medidas excepto para dos de los ocho casos comparados. Mientras que las eficiencias de gas predichas muestran un ligero, pero consistente, desfase en relación a las eficiencias medidas.
- El parámetro más influyente es la velocidad de rotación, en donde a valores mayores se obtiene la mejor distribución de burbujas y área interfacial.
- El punto de inyección es determinante para velocidades de rotación del rotor (290 rpm), observándose una mejoría substancial en la técnica novel (inyección por el fondo); mientras que a altas velocidades (573 rpm), esta dependencia desaparece.
- La inyección de flujo de gas contribuye de menor manera para ambas técnicas de inyección.
- El modelo se puede utilizar como una primera aproximación para compararlo con sistemas reales y con programas de código comercial CFD que requieren de tiempo y de recursos económicos considerablemente mayores.

Capítulo 5. Bibliografía y Referencias

1. Samuel, A.M. and F.H. Samuel, *Various aspects involved in the production of low-hydrogen aluminium castings*. Journal of Materials Science, 1992. **27**(24): p. 6533-6563.
2. Talbot, D.E.J., *Effects of Hydrogen in Aluminium, Magnesium, Copper, and Their Alloys*. International Metallurgical Reviews, 1975. **20**(1): p. 166-184.
3. Anyalebechi, P., *Hydrogen diffusion in Al-Li alloys*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1990. **21**(4): p. 649-655.
4. Anyalebechi, P., D. Talbot, and D. Granger, *The solubility of hydrogen in liquid binary Al-Li alloys*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1988. **19**(2): p. 227-232.
5. Anyalebechi, P., D. Talbot, and D. Granger, *The solubility of hydrogen in solid binary aluminum-lithium alloys*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1989. **20**(4): p. 523-533.
6. Anyalebechi, P.N., *Analysis of the effects of alloying elements on hydrogen solubility in liquid aluminum alloys*. Scripta Metallurgica et Materialia, 1995. **33**(8): p. 1209-1216.
7. Anyalebechi, P.N., *Attempt to predict hydrogen solubility limits in liquid multicomponent aluminum alloys*. Scripta Materialia, 1996. **34**(4): p. 513-517.
8. Anyalebechi, P.N., *Critical review of reported values of hydrogen diffusion in solid and liquid aluminum and its alloys*, in *Light Metals 2003*, P.N. Crepeau, Editor. 2003, TMS The Minerals, Metals & Materials Society. p. 857-872.

9. Bircumshaw, L.L., *The solubility of hydrogen in molten aluminium*. Transactions of the Faraday Society, 1935. **31**: p. 1439-1443.
10. Birnbaum, H.K., et al., *Hydrogen in aluminum*. Journal of Alloys and Compounds, 1997. **253-254**(0): p. 260-264.
11. Fowler, R.H. and C.J. Smithells, *A Theoretical Formula for the Solubility of Hydrogen in Metals*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1937. **160**(900): p. 37-47.
12. Gee, R. and D. Fray, *Instantaneous determination of hydrogen content in molten aluminum and its alloys*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1978. **9**(4): p. 427-430.
13. Harvey, J.-P. and P. Chartrand, *Modeling the Hydrogen Solubility in Liquid Aluminum Alloys*. Metallurgical and Materials Transactions B, 2010. **41**(4): p. 908-924.
14. Jiang, G.-r., Y.-x. Li, and Y. Liu, *Calculation of hydrogen solubility in molten alloys*. Transactions of Nonferrous Metals Society of China, 2011. **21**(5): p. 1130-1135.
15. Kirchheim, R., *Solubility and diffusivity of hydrogen in complex materials*. Physica Scripta, 2001. **2001**(T94): p. 58.
16. Lapham, D., et al., *The detection of hydrogen in molten aluminium*. Ionics, 2002. **8**(5): p. 391-401.
17. Lewis, F.A., *Solubility of hydrogen in metals*. Pure and Applied Chemistry, 1990. **62**(11): p. 2091-2096.
18. Lin, R. and M. Hoch, *The solubility of hydrogen in molten aluminum alloys*. Metallurgical and Materials Transactions A, 1989. **20**(9): p. 1785-1791.

19. Liu, H., M. Bouchard, and L. Zhang, *An experimental study of hydrogen solubility in liquid aluminium*. Journal of Materials Science, 1995. **30**(17): p. 4309-4315.
20. Oates, W.A., R. Lasser, and H. Wenzl, *The temperature variation of hydrogen solubility in metals*. Journal of the Less Common Metals, 1987. **130**(0): p. 545.
21. Opie, W.R. and N.J. Grant, *Hydrogen Solubility in Aluminum and Some Aluminum Alloys*. Transactions AIME Journal of Metals, 1950. **188**: p. 1237-1241.
22. Ransley, C.E. and H. Neufeld, *The solubility of hydrogen in liquid and solid aluminium*. Journal of the Institute of Metals, 1948. **74**(12): p. 599-620.
23. Sieverts, A., *Die Aufnahme von Gasen durch Metalle*. Zeitschrift für Metallkunde, 1929. **21**: p. 37-46.
24. Szökefalvi-Nagy, Á., E. Fromm, and L. Stojanova, *A novel method for the determination of the hydrogen solubility in aluminum and aluminum alloy melts*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1998. **29**(2): p. 421-427.
25. Talbot, D.E.J. and P.N. Anyalebechi, *Solubility of hydrogen in liquid aluminium*. Materials Science and Technology, 1988. **4**(1): p. 1-4.
26. Wipf, H., *Solubility and diffusion of hydrogen in pure metals and alloys*. Physica Scripta, 2001. **2001**(T94): p. 43.
27. Neff, D.V., *Understanding aluminum degassing*. Modern Casting, 2002. **95**(5): p. 24-26.

28. Engh, T.A. and G.K. Sigworth, *Molten Aluminium Purification*, in *Light Metals 1982*, J.E. Andersen, Editor. 1982, The Minerals, Metals & Materials Society: Dallas. p. 983-1001.
29. Engh, T.A., C.J. Simensen, and O. Wijk, *Principles of metal refining*. Oxford science publications. 1992, Oxford ; New York: Oxford University Press. xxx, 473 p.
30. Otsuka, R., et al., *Hydrogen removal from molten aluminum by inert gas bubbling*. Journal of Japan Institute of Light Metals, 1990. **40**(4): p. 290-297.
31. Sigworth, G.K. and T.A. Engh, *Chemical and kinetic factors related to hydrogen removal from aluminum*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1982. **13**(3): p. 447-460.
32. Kimata, M., et al., *Mixing Studies Related to the Cleaning of Molten Aluminium*. Chemical Engineering & Technology, 2004. **27**(3): p. 310-314.
33. Gariépy, B. and G. Dubé, *TAC: A New Process for Molten Aluminum Refining*, in *Light Metals 1986*. 1986, TMS: Warrendale, Pennsylvania. p. 111-116.
34. Taylor, M.B., *Molten Metal Fluxing/Treatment: How Best to Achieve the Desired Quality Requirements*, 2006: Canada. p. 12.
35. Szekely, A., *The removal of solid particles from molten aluminum in the spinning nozzle inert flotation process*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1976. **7**(2): p. 259-270.
36. Szekely, A.G., *Apparatus for Refining Molten Aluminum*, 1973: United States. p. 9.

37. Saternus, M. and J. Botor, *Physical Model of Aluminium Refining Process in the Batch and Continuous Reactors*. Materials Science Forum, 2010. **654 - 656**: p. 1553-1556.
38. Dantzig, J., J. Clumpner, and D. Tyler, *Degassing of static melts by insoluble purge gases*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1980. **11(3)**: p. 433-438.
39. Johansen, S.T., *Applications of computational fluid dynamics in optimisation and design of metallurgical processes*. Modeling, Identification and Control, 1997. **18(2)**: p. 101-122.
40. Guo, D. and G. Irons, *Modeling of gas-liquid reactions in ladle metallurgy: Part II. Numerical simulation*. Metallurgical and Materials Transactions B, 2000. **31(6)**: p. 1457-1464.
41. Xu, Y. and G. Mc Grath, *CFD predictions of stirred tank flows*. Chemical Engineering Research and Design, 1996. **74(4)**: p. 415-504.
42. Dong, L., S.T. Johansen, and T.A. Engh, *Flow induced by an impeller in an unbaffled tank—II. Numerical modelling*. Chemical Engineering Science, 1994. **49(20)**: p. 3511-3518.
43. Jones, W.P. and B.E. Launder, *The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence*. International Journal of Heat and Mass Transfer, 1972. **15(2)**: p. 301-314.
44. Camacho-Martinez, J.L., et al., *Physical Modelling of an Aluminium Degassing Operation with Rotating Impellers—A Comparative Hydrodynamic Analysis*. Materials and Manufacturing Processes, 2010. **25(7)**: p. 581-591.

45. Chen, J.J.J. and J.C. Zhao, *Bubble Distribution in a Melt Treatment Water Model*, in *Light Metals 1995*, J. Evans, Editor 1995, The Minerals, Metals and Materials Society. p. 1227-1231.
46. Fu, Q., D. Xu, and J. Evans, *Chlorine fluxing for removal of magnesium from molten aluminum: Part I. Laboratory-scale measurements of reaction rates and bubble behavior*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1998. **29**(5): p. 971-978.
47. Fu, Q. and J. Evans, *Chlorine fluxing for removal of magnesium from molten aluminum: Part II. Mathematical model*. Metallurgical and Materials Transactions B, 1998. **29**(5): p. 979-986.
48. Mi, G.F., et al., *Analyses of the Influencing Factors of Rotating Impeller Degassing Process and Water Simulation Experiment*. Materials Science Forum, 2008. **575 - 578**: p. 1258-1265.
49. Han, J.W., et al., *Effect of Gas Bubbling and Impeller Agitation on Degassing Kinetics during Magnesium Alloy (AZ91D) Melt Recycling – Water Model Approach*. Materials Science Forum, 2003. **439**: p. 192-199.
50. Hu, Z.C., E.L. Zhang, and S.Y. Zeng, *Degassing of magnesium alloy by rotating impeller degasser: Part 1 – Mathematical modelling*. Materials Science & Technology, 2008. **24**(11): p. 1304-1308.
51. Warke, V.S., S. Shankar, and M.M. Makhlof, *Mathematical modeling and computer simulation of molten aluminum cleansing by the rotating impeller degasser: Part II. Removal of hydrogen gas and solid particles*. Journal of Materials Processing Technology, 2005. **168**(1): p. 119-126.

52. Lvi, X. and L. Zhang, *Purification of Aluminum Through Gas and Powder Fluxing: Part I. Mathematical Models*. Canadian Metallurgical Quarterly, 2009. **48**(4): p. 369-377.
53. Mi, G., et al., *Research on water simulation experiment of the rotating impeller degassing process*. Materials Science and Engineering: A, 2009. **499**(1-2): p. 195-199.
54. Sano, M. and K. Mori, *Rate Determining Mechanism of Degassing by Inert Gas Flushing in Molten Metal*. Transactions of The Japan Institute of Metals, 1982. **23**(8): p. 440-450.
55. Wang, L., et al., *Rotary impeller refinement of 7075Al alloy*. Rare Metals, 2009. **28**(3): p. 309-312.
56. Choi, B.S., et al., *Residence Time Distributions in a Stirred Tank: Comparison of CFD Predictions with Experiment*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004. **43**(20): p. 6548-6556.
57. Mazumdar, D., R.I.L. Guthrie, and Y. Sahai, *On mathematical models and numerical solutions of gas stirred ladle systems*. Applied Mathematical Modelling, 1993. **17**(5): p. 255-262.
58. Camacho-Martínez, J.L., et al., *Novel Degasification Design for Aluminum Using an Impeller Degasification Water Physical Model*. Materials and Manufacturing Processes, 2012. **27**(5): p. 556-560.
59. Ramírez-Argáez, M., et al., *On the degassing kinetics in a ladle equipped with a rotating impeller assisted through physical modeling*. Roznov pod Radhostem, 2010.

60. Ramírez-Argáez, M.A., *Numerical Simulation of Fluid Flow and Mixing in Gas-Stirred Ladles*. *Materials & Manufacturing Processes*, 2008. **23**(1): p. 59-68.
61. Ramírez-Argáez, M.A., F. Contreras, and C. González, *Modelación matemática del mezclado en ollas (cucharas) de aluminio equipadas con la técnica de desgasificación rotor-inyector*. *Revista de Metalurgia*, 2006. **42**(3): p. 185-202.
62. Ramírez-Argáez, M.A., F. Contreras-Bustos, and C. González-Rivera, *On the Fluid Flow and Mixing Phenomena in Ladles Equipped with Impeller and Gas Purging for Degassing of Al-Based Alloys*. *Materials Science Forum*, 2007. **560**: p. 145-150.
63. Torres Patiño, I.D., *Estudio de una nueva técnica de desgasificación con rotor-inyector asistido por modelado físico y matemático*, in *Departamento de Ingeniería Metalúrgica 2010*, Universidad Nacional Autónoma de México. Facultad de Química: México. p. X, 79.
64. Robles Flores, I., *Modelado físico de la fluidinámica durante la desgasificación de Al por la técnica del rotor-inyector* in *Departamento de Ingeniería Metalúrgica 2009*, Universidad Nacional Autónoma de México. Facultad de Química.: México. p. 73.
65. Engh, T.A. and T. Pedersen, *Removal Hydrogen from Molten Aluminium*, in *Light Metals 1984*, M. Geer, Editor. 1984, The Minerals, Metals & Materials Society: Warrendale, Pa. p. 1329-1344.

66. Lemoine, R. and B.I. Morsi, *An algorithm for predicting the hydrodynamic and mass transfer parameters in agitated reactors*. Chemical Engineering Journal, 2005. **114**(1-3): p. 9-31.
67. Kell, G.S., *Density, thermal expansivity, and compressibility of liquid water from 0° to 150°C. Correlations and tables for atmospheric pressure and saturation reviewed and expressed on 1968 temperature scale*. Journal of Chemical & Engineering Data, 1975. **20**(1): p. 97-105.
68. Patek, J., et al., *Reference Correlations for Thermophysical Properties of Liquid Water at 0.1 MPa*. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 2009. **38**(1): p. 21-29.
69. Wilke, C.R. and P. Chang, *Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions*. AIChE Journal, 1955. **1**(2): p. 264-270.
70. Vargaftik, N.B., B.N. Volkov, and L.D. Voljak, *International Tables of the Surface Tension of Water*. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 1983. **12**(3): p. 817-820.
71. Tromans, D., *Temperature and pressure dependent solubility of oxygen in water: a thermodynamic analysis*. Hydrometallurgy, 1998. **48**(3): p. 327-342.
72. Castellan, G.W., *Physical chemistry*. 3rd ed. 1983, Reading, Mass.: Addison-Wesley. xxvii, 943, 46, 17 p.
73. Lemmon, E.W. and R.T. Jacobsen, *Viscosity and Thermal Conductivity Equations for Nitrogen, Oxygen, Argon, and Air*. International Journal of Thermophysics, 2004. **25**(1): p. 21-69.
74. Hernández Hernández, M., *Estudiante de Doctorado*, 2012.

75. Bird, R.B., W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot, *Transport phenomena*. 2nd, Wiley international ed. 2002, New York: J. Wiley. xii, 895 p.
76. Clift, R., J.R. Grace, and M.E. Weber, *Bubbles, drops, and particles*. 1978, New York: Academic Press. xiii, 380 p.

Apéndice I

Algoritmo para calcular los parámetros hidrodinámicos y de transporte de masa

Se utilizaron correlaciones empíricas en reactores agitados como se muestra en la Figura 35. El cálculo del algoritmo consiste de la siguiente secuencia de pasos:

1. Calcular N_{cri} :

$$N_c^2 = 0.512 \cdot \left(\frac{\mu_l}{\mu_{H_2O}} \right)^{0.146} \cdot \left(\frac{\sigma_l}{\sigma_{H_2O}} \right)^{-0.180} \cdot \left(\frac{\rho_l}{\rho_{H_2O}} \right)^{-0.265} \cdot \left(\frac{H_L}{d_{tanque}} \right) \cdot \left(\frac{g}{d_{imp}} \right) \quad (A.1)$$

2. Si $N \leq N_{cri}$ entonces calcular Q_{GI}

$$\frac{Q_{GI}}{N \cdot d_{imp}^3} = 50.03 \cdot \frac{n_{imp}^{1.695} \cdot d_{tanque}^{2.584} \cdot \mu_l^{0.627} \cdot \rho_l^{1.991} \cdot \rho_g^{2.847}}{\sigma_l^{4.440} \cdot MW_g^{3.203}} \cdot \exp \left[-3.957 \cdot \frac{Eu^{0.142} \cdot We^{0.174}}{Re_{imp}^{0.048} \cdot (Fr - Fr_{cri})^{0.042}} \right] \quad (A.2)$$

3. Obtener $\left(\frac{P^*}{V_l} \right)$ para cada tipo de reactor

$$\left(\frac{P^*}{V_l} \right)_{SAR} = \frac{N_p \cdot d_{imp}^5 \cdot \rho_l \cdot N^3}{V_l} \quad (A.3)$$

- a. Para reactores GIR

$$\left(\frac{P^*}{V_l} \right)_{GIR} = \left(\frac{P^*}{V_l} \right)_{SAR} \cdot \left[1 - \exp \left(-0.486 - \frac{0.802}{\sqrt{Fr}} - 5.10 \times 10^{-7} \cdot Re_{imp} \right) \right] \quad (A.4)$$

- b. Para reactores GSR

$$\left(\frac{P^*}{V_l} \right)_{GSR} = \frac{0.706}{V_l} \cdot \left(\frac{(P^*)_{SAR} \cdot N \cdot d_{imp}^3}{Q_g^{0.56}} \right)^{0.45} \quad (A.5)$$

4. Calcular ε para cada tipo de reactor

- a. Para reactores GIR

$$\varepsilon = 0.102 \cdot \left(\frac{P^*}{V_l} \right)_{GIR}^\alpha \cdot U_g^\beta \cdot \exp(-0.349 \cdot X_w) \quad (A.6)$$

$$\alpha = 3.770X10^{-5} \cdot d_{tanque}^{-2.540} \cdot N^{0.005} \cdot \mu_l^{-0.012} \cdot \sigma_l^{-0.603} \cdot \rho_g^{-0.122} \quad (A.7)$$

$$\beta = 0.087 \cdot d_{imp}^{-0.819} \cdot H_L^{0.617} \cdot N^{-0.854} \cdot \rho_l^{-0.036} \cdot \mu_l^{-0.043} \cdot \sigma_l^{-0.560} \quad (A.8)$$

b. Para reactores GSR

$$\varepsilon = 9.620X10^{-3} \cdot \left(\frac{P^*}{V_l} \right)_{GSR}^{\alpha} \cdot U_g^{\beta} \cdot \exp[-0.216X_w] \quad (A.9)$$

$$\alpha = 0.190 \cdot d_{tanque}^{-0.179} \cdot N^{0.043} \cdot \mu_l^{-0.228} \cdot \sigma_l^{0.261} \cdot \rho_g^{-0.011} \quad (A.10)$$

$$\beta = 1.86X10^{12} \cdot d_{imp}^{-0.087} \cdot H_L^{-0.279} \cdot N^{0.063} \cdot \rho_l^{-4.270} \cdot \mu_l^{-0.464} \cdot \sigma_l^{1.380} \quad (A.11)$$

5. Calcular d_b

a. Para reactores GIR

$$d_b = 2.61X10^{-3} \cdot U_g^{\gamma} \cdot \varepsilon_g^{\lambda} \quad (A.12)$$

$$\gamma = 3.980X10^{-2} \cdot d_{imp}^{1.500} \cdot d_{tanque}^{-2.020} \cdot N^{0.419} \cdot \mu_l^{0.102} \quad (A.13)$$

$$\lambda = 3.310X10^{-2} \cdot \rho_l^{0.373} \cdot \sigma_l^{-0.044} \cdot \rho_g^{-0.093} \cdot H_L^{0.070} \cdot \exp[-1.180 \cdot X_w] \quad (A.14)$$

b. Para reactores GSR

$$d_b = 9.380X10^{-3} \cdot U_g^{\gamma} \cdot \varepsilon_g^{\lambda} \quad (A.15)$$

$$\gamma = 1.380X10^{-2} \cdot d_{imp}^{-0.878} \cdot d_{tanque}^{0.351} \cdot N^{0.563} \cdot H_L^{0.185} \quad (A.16)$$

$$\lambda = 1.300X10^{-20} \cdot \rho_l^{7.490} \cdot \sigma_l^{-0.240} \cdot \rho_g^{-0.196} \cdot \exp[-8.470 \cdot X_w] \quad (A.17)$$

6. Calcular $k_L \cdot A_b$

a. Para reactores GIR

$$k_L \cdot A_b = 1.383X10^5 \cdot \frac{D_{A-B}^{0.500} \cdot \varepsilon_g^{0.155} \cdot d_b^{0.414}}{\rho_g^{0.060}} \cdot \left(\frac{P^*}{V_l} \right)_{GIR}^{\delta} \cdot U_g^{\eta} \cdot \exp[-2.011 \cdot X_w] \quad (A.18)$$

$$\delta = 7.010X10^{-6} \cdot d_{imp}^{-0.395} \cdot d_{tanque}^{4.183} \cdot N^{2.237} \cdot \mu_l^{0.126} \cdot H_L^{-0.658} \quad (A.19)$$

$$\eta = 0.420 \cdot d_{imp}^{-2.385} \cdot d_{tanque}^{-2.485} \cdot N^{-3.238} \cdot \sigma_l^{-0.261} \cdot H_L^{3.249} \quad (A.20)$$

b. Para reactores GSR

$$k_L \cdot A = 2.564 X 10^3 \cdot \frac{D_{A-B}^{0.500} \cdot \varepsilon_g^{0.575}}{\rho_g^{0.060} \cdot d_b^{0.402}} \cdot \left(\frac{P^*}{V_L} \right)_{GSR}^{\delta} \cdot U_g^{\eta} \cdot \exp[-2.402 \cdot X_w] \quad (A.21)$$

$$\delta = 4.664 X 10^{-4} \cdot d_{tanque}^{0.124} \cdot N^{0.593} \cdot \mu_l^{-0.769} \quad (A.22)$$

$$\eta = 9.475 X 10^{-5} \cdot d_{imp}^{0.363} \cdot N^{0.967} \cdot \rho_l^{-0.470} \cdot \mu_l^{-0.884} \cdot H_L^{-1.440} \quad (A.23)$$

7. Calcular a_{wave}

$$a_{wave} = \frac{1}{H} + \frac{1}{H_L} \cdot \frac{Re_{imp}^{1.75} \cdot We^{3.00}}{Eu^{3.00}} \cdot \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{-2.67} \cdot \exp[(-12.95 \cdot H) - (0.59 \cdot N)] \quad (A.24)$$

8. Calcular A_b

$$A_b = \frac{6 \cdot \varepsilon_g}{(1 - \varepsilon_g) \cdot d_b} + a_{wave} \quad (A.25)$$

9. Calcular k

$$k = \frac{k_L \cdot A}{A_b} \quad (A.26)$$

Parámetros para la estimación de la viscosidad de gases ecuaciones (2.29) - (2.31)

Parámetro	Nitrógeno	Argón	Oxígeno	Aire
T_c [K]	126.192	150.687	154.581	132.6312
ρ_c [mol/dm ³]	11.1839	13.40743	13.63	10.4477
P_c [MPa]	3.3958	4.863	5.043	3.78502
MW [g/mol]	28.01348	39.948	31.9988	28.9586
$\frac{\varepsilon}{k}$ [K]	98.94	143.2	118.5	103.3
σ [nm]	0.3656	0.335	0.3428	0.360

Tabla 14. Parámetros para la ecuación de viscosidad de varios gases Lemmon y Jacobsen [73].

El cálculo de Ω esta dado por la ecuación:

$$\Omega = \exp \left[\sum_{i=0}^4 b_i \cdot \left[\ln(T^*) \right]^i \right] \quad (\text{A.27})$$

La Tabla 15 muestra los coeficientes para la ecuación (A.27)

i	b_i
0	0.431
1	-0.4623
2	0.08406
3	0.005341
4	-0.00331

Tabla 15. Coeficientes para la ecuación de colisión integral [73].

Números adimensionales

Número	Símbolo	Expresión
Aeración	Ae	$\frac{Q_g}{N \cdot d_{imp}^3}$
Euler	Eu	$\frac{P_T}{d_{imp}^2 \cdot \rho_l \cdot N^2}$
Froude	Fr	$\frac{d_{imp}^2 \cdot N^2}{g \cdot H_L}$
Froud crítico	Fr_c	$\frac{d_{imp}^2 \cdot N_{cri}^2}{g \cdot H_L}$
Reynolds rotor	Re_{imp}	$\frac{d_{imp}^2 \cdot N \cdot \rho_L}{\mu_L}$
Weber	We	$\frac{d_{imp}^3 \cdot \rho_l \cdot N^2}{\sigma_l}$
Sherwood	Sh	$\frac{k_l \cdot d_{imp}}{D_{A-B}}$

Tabla 16. Números adimensionales utilizados en este trabajo.

Apéndice II

Diagrama de flujo del algoritmo utilizado en este trabajo

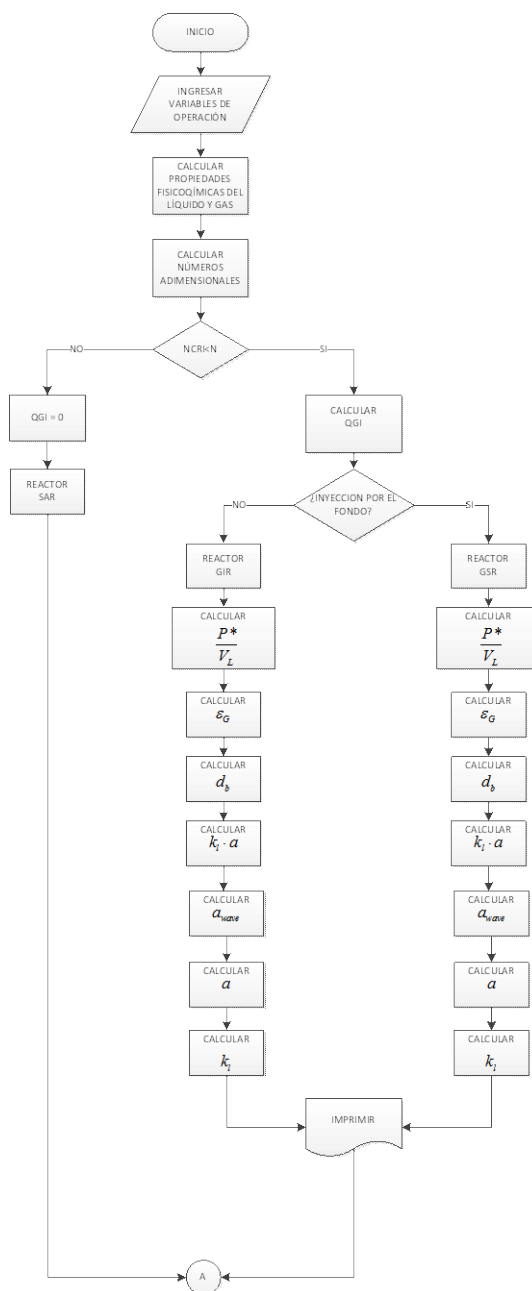


Figura 54. Diagrama de flujo para el cálculo de A y k_1 mediante el algoritmo de Lemoine [66].

Código Fuente del programa para simular el desgasificado de un sistema H₂O-O₂, mediante la técnica de rotor inyector

```

! Lemoine.f90
!
! FUNCTIONS:
! Lemoine - Entry point of console application.
!
!*****
!
! PROGRAM: Lemoine
!
! PURPOSE: Entry point for the console application.
!
!*****

program Lemoine

implicit none
REAL::      AB
REAL::      AWAVE
REAL::      ATOT
REAL::      Ceq
REAL::      DENSIDAD_LIQ
REAL::      DENSIDAD_GAS
REAL::      DIFUSION
REAL::      DS
REAL::      EU, EU1
REAL::      FR, FRC, FRMOD
REAL::      FS
REAL::      IMP_VEL
REAL::      KL
REAL::      KLA
REAL::      N
REAL::      NCR
REAL::      NCRI
REAL::      PGIR
REAL::      P_ASTER
REAL::      P_SAR
REAL::      QG
REAL::      QGI
REAL::      RE
REAL::      S
REAL::      T_AST
REAL::      TEMP_K
REAL::      TEMP_VISC
REAL::      TENSIONSUP_LIQ
REAL::      UG
REAL::      VISC_DIL
REAL::      VISC_RES
REAL::      VISCOSIDAD_CIN
REAL::      VISCOSIDAD_LIQ
REAL::      VISCOSIDAD_GAS
REAL::      VOL_LIQ
REAL::      WE
REAL::      TIEMPO
REAL::      PCTO2
REAL::      PCTO2A
REAL::      Z
REAL::      ALFA
REAL::      BETA

```

```

REAL:: DELTA
REAL:: DELTA_GAS
REAL:: EPSILON
REAL:: GAMA
REAL:: LAMBDA
REAL:: OMEGA_T
REAL:: ETA
REAL:: TAU
REAL:: PHI
REAL:: VB
REAL:: NB
!*****
!*****      PARAMETROS DE ENTRADA      *****
!*****
REAL, PARAMETER:: PCT_O2_IN = 7.00      ![=] ppm = mg/kg
REAL, PARAMETER:: TEMP_C = 20.0      !TEMPERATURA [=] °C
REAL, PARAMETER:: RPM = 290.0      !VELOCIDAD DEL IMPELLER [=]RPM
REAL, PARAMETER:: QG_LPM = 10.0      !RAPIDEZ DE FLUJO DE GAS [=] LPM
REAL, PARAMETER:: PRESION = 1.0      !PRESION DEL SISTEMA [=]atm CIUDAD DE
REAL, PARAMETER:: DT = 0.52      !DIAMETRO DEL TANQUE [=] m
REAL, PARAMETER:: H = DT      !ALTURA DEL TANQUE [=] m
REAL, PARAMETER:: D_IMP = 0.18      !DIAMETRO DEL IMPELLER [=]m
REAL, PARAMETER:: ANCHO_IMP = 0.05      !DIAMETRO DEL IMPELLER [=]m
REAL, PARAMETER:: HL = (2.0/3.0)*DT      !DISTANCIA POR ENCIMA DEL IMPELLER
!*****
!*****
!*****
REAL, PARAMETER:: NP = 5.0
REAL, PARAMETER:: N_IMP = 1.0
REAL, PARAMETER:: NUM_IMP = 1.0
REAL, PARAMETER:: XW = 1
REAL, PARAMETER:: GRAVEDAD = 9.80665
REAL, PARAMETER:: PI = 3.14159
REAL, PARAMETER:: CDO = 22.24
REAL, PARAMETER:: CDY = 6.71
REAL, PARAMETER:: TAU_RG = 1.767
REAL, PARAMETER:: DENSIDAD_CRIT_GAS = 11.1839
REAL, PARAMETER:: ENERGIA_LEN_JON = 98.94
REAL, PARAMETER:: MM_GAS = 28.01348
REAL, PARAMETER:: MM_O2 = 0.031999
REAL, PARAMETER:: MM_LIQ = 0.018015
REAL, PARAMETER:: f_O2 = 1.0
REAL, PARAMETER:: PARAMETRO_LEN_JON = 0.3656
REAL, PARAMETER:: PT = 0.7596715
REAL, PARAMETER:: P_Pa = 101325
REAL, PARAMETER:: R = 8.31441
REAL, PARAMETER:: R_LATM = 0.08205
REAL, PARAMETER:: TEMP_CRIT_GAS = 126.192
REAL, PARAMETER:: TEMP_CRIT_LIQ = 647.15
REAL, PARAMETER:: VM_O2 = 25.6
REAL, PARAMETER:: D_ORI = 0.05
REAL, PARAMETER:: D_BOQUILLA = 0.01
INTEGER:: REACTOR = 1
!CHARACTER:: REACTOR = 'GIR'
QG = QG_LPM * (1.0/(1000.0 * 60.0)
N = RPM*(1.0/60.0)
VOL_LIQ = (PI/4.0) * (DT**2.0) * H
TEMP_K = TEMP_C + 273.15
TEMP_VISC = TEMP_K/300.0
!*****
!*****      PROPIEDADES TERMODINAMICAS DEL LIQUIDO      *****
!*****
DENSIDAD_LIQ = (999.83952 + 16.945176*temp_c - 7.9870401e-3*temp_c**2
-46.170461e-6*temp_c**3.0 + 105.56302e-9*temp_c**4 - 280.54253e-
12*temp_c**5)/(1+16.879850e-3*temp_c)
VISCOSIDAD_LIQ = ( 280.68 * Temp_visc**(-1.9 ) + 511 .45 * temp_visc**(-7.7 ) + &61.131
*temp_visc**(-19.6) + 0.45903* temp_visc**(-40.0) ) * 1e-6
VISCOSIDAD_CIN = (VISCOSIDAD_LIQ / DENSIDAD_LIQ)
DIFUSION = 4286.0e-9*exp(-4470.0/(1.987*temp_k))
TENSIONSUP_LIQ = 235.8e-3*(( temp_crit_LIQ - temp_k) / temp_crit_LIQ)**1.256) * &
(1 - 0.625 * ( temp_crit_LIQ - temp_k) / temp_crit_LIQ) )

```

```

Ceq      =   exp((0.046*temp_k**2 + 203.357*temp_k*log(temp_k/298.0)
              -(299.378+0.092*temp_k)*(temp_k-298.0)-20.591e3)/(R*temp_k))
!*****
!***** PROPIEDADES TERMODINAMICAS DEL GAS *****
!*****

DENSIDAD_GAS = (PRESION) / (R_LATM * TEMP_K) * MM_GAS
TAU = TEMP_CRIT_GAS/TEMP_K
DELTA_GAS = (DENSIDAD_GAS/MM_GAS)/DENSIDAD_CRIT_GAS
T_AST = TEMP_K/ENERGIA_LEN_JON

OMEGA_T = EXP(0.431000 * (LOG(T_AST))**0.0 - 0.4623 * (LOG(T_AST))**1.0 &
+ 0.08406 * (LOG(T_AST))**2.0 + 0.005341*(LOG(T_AST))**3.0 &
- 0.00331 * (LOG(T_AST))**4.0)

VISC_DIL = ( 0.0266958* SQRT(MM_GAS*TEMP_K) ) / ( (PARAMETRO_LEN_JON**2.0) * OMEGA_T)

VISC_RES = 10.72 * TAU**0.10 * DELTA_GAS**2.00 * EXP(-0.0*DELTA_GAS**0.0) &
+ 0.03989 * TAU**0.25 * DELTA_GAS**10.0 * EXP(-1.0*DELTA_GAS**1.0) &
+ 0.001208* TAU**3.20 * DELTA_GAS**12.0 * EXP(-1.0*DELTA_GAS**1.0) &
- 7.402 * TAU**0.90 * DELTA_GAS**2.00 * EXP(-1.0*DELTA_GAS**2.0) &
+ 4.620 * TAU**0.30 * DELTA_GAS**1.00 * EXP(-1.0*DELTA_GAS**3.0)

VISCOSIDAD_GAS = (1E-6) * (VISC_DIL + VISC_RES)

NCRI = SQRT ( 0.512 * (HL/DT) * GRAVEDAD/D_IMP)

!*****
!***** CALCULO DE NUMEROS ADIMENSIONALES *****
!*****

EU      =   P_Pa/(D_IMP**2.0 * DENSIDAD_LIQ * N**2.0)
FR      =   (D_IMP**2.0 * N**2.0)/(GRAVEDAD * HL)
FRC     =   (D_IMP**2.0 * NCRI**2.0)/(GRAVEDAD * HL)
FRMOD   =   (D_IMP*N**2.0)/(GRAVEDAD)
RE      =   (D_IMP**2.0 * DENSIDAD_LIQ * N)/(VISCOSIDAD_LIQ)
WE      =   (D_IMP**3.0 * DENSIDAD_LIQ * N**2.0)/TENSIONSUP_LIQ

IF (NCRI < N) THEN

QGI = (50.03*((NUM_IMP**1.695) * (DT**2.584) * (VISCOSIDAD_LIQ**0.627) * &
(DENSIDAD_LIQ**1.991) * (DENSIDAD_GAS**2.847))/( (TENSIONSUP_LIQ**4.440) &
* (MM_GAS**3.203) ) * EXP(-3.957 * (EU**0.142 * WE**0.174)/&
(RE**0.048 * (FR-FRC)**0.042)))*(N * D_IMP**3.0)

ELSE

QGI=0
END IF

EU1      =   (P_SAR/(D_IMP**2.0 * DENSIDAD_LIQ * N**2.0))*VOL_LIQ

IF (REACTOR == 1) THEN
  Ug = QG/(PI/4.0 * D_BOQUILLA**2.0)
  P_ASTER = (P_SAR) * (1 - EXP(-0.486 - (0.802/ SQRT (FR)) -5.10E-7 * RE))

  ALFA = 3.770E-5 * DT**2.540*(N**0.005) * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.012)
        *TENSIONSUP_LIQ**-0.603) *(DENSIDAD_GAS**-0.122)
  BETA = 0.087 * (D_IMP**-0.819) * (HL**0.617) * (N**-0.854) * (DENSIDAD_LIQ**-0.0369)
        * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.043) * (TENSIONSUP_LIQ**-0.560)
  EPSILON = 0.102 *(P_ASTER**ALFA) * (UG**BETA) * EXP(-0.349 * XW)
  GAMA = 3.980E-2 * (D_IMP**1.500)*(DT**2.020)*(N**0.419) * (VISCOSIDAD_LIQ**0.102)
  LAMBDA = 3.310E-2 *(DENSIDAD_LIQ**-0.044)*(DENSIDAD_GAS**-0.093) (HL**0.070) *
        EXP(-1.180 * XW)
  DS = 2.61E-3 * (UG**GAMA) * (EPSILON**LAMBDA)
  DELTA = 7.010E-6 * (D_IMP**-0.395) * (DT**4.183) * (N**2.237)
        * VISCOSIDAD_LIQ**0.126) * (HL**-0.658)
  ETA = 0.420 * (D_IMP**-2.385) * (DT**2.485) * (N**-3.238) * (TENSIONSUP_LIQ**0.261)
        * (HL**3.249)
  KLA = 1.383E5 * (((DIFUSION**0.500) * (EPSILON**0.155) * (DS**0.414))
        /((DENSIDAD_GAS**0.060)) * (P_ASTER**DELTA) * (UG**ETA) * EXP(-2.011 * XW)

```

```

ELSE
P_ASTER = (0.706 / VOL_LIQ) * ((P_SAR * N * (D_IMP**3)) / (QG**0.56))**0.45
ALFA = 0.190 * (DT**-0.179) * (N**0.043) * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.228)
      * (TENSIONSUP_LIQ**0.261) * (DENSIDAD_GAS**-0.011)
BETA = 1.86E12 * (D_IMP**-0.087) * (HL**-0.279) * (N**0.063)
      * (DENSIDAD_LIQ**-4.270) * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.464) * (TENSIONSUP_LIQ**1.380)
EPSILON = 9.620E-3 * (P_ASTER**ALFA) * (UG**BETA) * EXP(-0.216 * XW)
GAMA = 1.380E-2 * (D_IMP**-0.878) * (DT**0.351) * (N**0.563) * (HL**0.185)
LAMBDA = 1.300E-20 * (DENSIDAD_LIQ**7.490) * (TENSIONSUP_LIQ**-0.240)
      * (DENSIDAD_GAS**-0.196) * EXP(-8.470 * XW)
DS = 9.380E-3 * (UG**GAMA) * (EPSILON**LAMBDA)
DELTA = 4.664E-4 * (DT**0.124) * (N**0.593) * (DENSIDAD_LIQ**-0.769)
ETA = 9.475E-5 * (D_IMP**0.363) * (N**0.967) * (DENSIDAD_LIQ**-0.470)
      * (VISCOSIDAD_LIQ**-0.884) * (HL**-1.440)
KLA = 2.564E3 * (DIFUSION**0.500 * EPSILON**0.575) / (DENSIDAD_GAS**0.060 * DS**0.402)
      * (P_ASTER**DELTA) * (UG**ETA) * EXP(-2.402 * XW)
END IF
AWAVE = (1.0/H) + (1.0/HL) * (RE**1.75 * WE**3.00)/EU**3.00
      * ((DENSIDAD_LIQ/DENSIDAD_GAS)**-2.67) * EXP((-12.95 * H) - (0.59 * N))
AB = (6.0 * EPSILON/(1 - EPSILON)) + AWAVE
KL = KLA/AB

!*****
!***** MODELO MATEMATICO *****
!*****

Vb = (1.0/6.0) * PI * DS **3.0
NB = QG / VB
ATOT = 0.5 * PI * DS**2 * NB
PHI = (KL * Atot * PRESION * DENSIDAD_LIQ) / (100.0 * MM_O2 / 1000 * (QG / 22.4 * 3600) * f_O2 * ceq** -1)
Z = 1 - EXP(-PHI)
TIEMPO = 0.0
PCTO2A = 0.11

WRITE(10, 160)PHI,Z
160 FORMAT(1X, T25, 'RESULTADOS CINÉTICOS'///, &

DO
OPEN (UNIT = 10, FILE = 'DATA.TXT', STATUS = 'UNKNOWN')

IF (PCTO2A <= 0.10)EXIT
PCTO2 = PCT_O2_IN * EXP(-(100.0 * F_O2 * ceq * Z * MM_O2 * 1000.0 * (QG/22.4)) / &
(VOL_LIQ * densidad_LIQ * PRESION) * TIEMPO)
PCTO2a = PCTO2 / PCT_O2_IN

WRITE (10,*)TIEMPO, PCTO2a, pcto2

TIEMPO = TIEMPO + 1.0

END DO
end program Lemoine

```