



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

COMPARACIÓN ENTRE LOS MODELOS EULERIANO Y VOF-DPM-(K-
ÉPSILON) PARA LA DESCRIPCIÓN NUMÉRICA DE LA INTERACCIÓN AGUA-
ACEITES EN MODELO FÍSICO DE OLLAS AGITADAS CON GAS

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

PRESENTA:
ANA LUISA GÓMEZ RODRÍGUEZ

TUTOR PRINCIPAL
MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ
FACULTAD DE QUÍMICA – UNAM

CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX, ENERO 2023



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: Dr. Bernardo Fabián Campillo Illanes

Secretario: Dr. Carlos González Rivera

1er. Vocal: Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez

2do. Vocal: Dr. Adrián Manuel Amaro Villeda

3er. Vocal: Dr. Juan Pablo Aguayo Vallejo

Lugar o lugares donde se realizó la tesis: Laboratorio 203, Edificio D, Facultad de Química – UNAM, CDMX, México.

TUTOR DE TESIS:

Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez

FIRMA

Índice General

Índice de figuras.....	1
Índice de tablas.....	3
1. INTRODUCCIÓN	4
1.1 Antecedentes	4
1.2 Proceso de fabricación del acero	5
1.2.1 Siderurgia primaria.....	5
1.2.2 Siderurgia secundaria	7
1.3 Herramientas de la ingeniería de procesos metalúrgicos	10
1.3.1 Modelos físicos	10
1.3.2 Modelos matemáticos.....	12
1.4 Estado del arte	12
1.4.1 Enfoque Euleriano (E-E).....	15
1.4.2 Enfoque Lagrangiano (E-L)	17
1.5 Hipótesis.....	26
1.6 Objetivo.....	26
1.6.1 Metas	26
2. METODOLOGÍA	27
2.1 Modelo físico	27
2.2 Geometría y suposiciones.....	27
2.3 Ecuaciones gobernantes	29
2.3.1 Fase continua.....	29
2.3.2 Fase discreta	34
2.4 Condiciones de frontera y condiciones iniciales	37
2.5 Propiedades de los materiales	41
2.6 Solución numérica.....	41
2.6.1 Dominio de cómputo y malla	42
2.6.2 Solución en FLUENT.....	42
3. RESULTADOS	44
3.1 Validación del modelo	44
3.2 Comparación de modelos multifásicos: Euleriano y Lagrangiano.....	47
3.2.1 Fluidodinámica.....	47
3.2.2 Ojo de escoria.....	55
3.3 Emulsión de escoria	59

4.	CONCLUSIONES	65
5.	REFERENCIAS	68
6.	ANEXO A: Sensibilidad de la malla.....	70
7.	ANEXO B: Procesamiento en FLUENT®.....	72
8.	ANEXO C: UDF para remover partículas	86
9.	ANEXO D: Teorema de π -Buckingham	87

Índice de figuras

Figura 1.1. Evolución de la producción de acero china y mundial en los últimos 30 años[2].	4
Figura 1.2. Producción primaria y secundaria de acero de los principales países fabricantes del mundo[2].	5
Figura 1.3. Esquema del proceso completo de producción del acero.	6
Figura 1.4. Esquema con los componentes principales de Horno Olla.	8
Figura 1.5. Fenómenos generados por la inyección de gas. Adaptado de [7].	10
Figura 1.6. Esquema de tipos de clasificaciones de la información existente del horno olla.	13
Figura 1.7. Representación esquemática de a) Enfoque Euleriano b) Enfoque Lagrangiano	14
Figura 1.8. Diagrama representativo del mecanismo de acción de la aproximación Lagrangiana (E-L). Adaptado de [15].	18
Figura 1.9. Esquema de los fenómenos que ocurren en la escoria. Adaptado de [17].	20
Figura 1.10. Resultados obtenidos por Cao a partir de modelar matemáticamente un sistema acero-escoria-argón.	22
Figura 2.1. Representación 3D del sistema físico empleado.	27
Figura 2.2. Esquema del proceso a) Vista superior b) Vista lateral.	28
Figura 2.3. Condiciones de frontera del sistema	38
Figura 2.4. Estructuras obtenidas en DesignModeler® y Meshing® a) Geometría y fronteras b) Acercamiento a la malla a la zona de la escoria	42
Figura 3.1. Posición de las líneas de medición para hacer la validación del modelo matemático.	44
Figura 3.2. Perfil de velocidad axial predicho por el modelo y medido experimentalmente a diferentes alturas del modelo a) 4cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.	45
Figura 3.3. Perfil de Energía cinética turbulenta predicho por la simulación y medido experimentalmente a diferentes alturas del modelo a) 4cm b) 8 cm c) 12 cm.	46
Figura 3.4. Vectores de velocidad de agua para a) Modelo físico experimental obtenido por PIV, b) Modelo matemático con la aproximación Euleriana c) Modelo matemático con la aproximación Lagrangiana.	48
Figura 3.5. Perfiles radiales de velocidad axial para modelo físico medidos experimentalmente. modelo euleriano y modelo lagrangiano a diferentes alturas a) 4 cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.	49
Figura 3.6. Perfiles radiales de velocidad radial para el modelo físico obtenidos experimentalmente. modelo euleriano y modelo lagrangiano a diferentes alturas a) 4 cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.	50
Figura 3.7. Contornos de energía cinética turbulenta para a) Modelo experimental b) Modelo Euleriano c) Modelo Lagrangiano.	51
Figura 3.8. Perfiles radiales de energía cinética turbulenta para el modelo físico experimental medido con PIV. modelo euleriano y modelo lagrangiano a diferentes alturas a) 4 cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.	52
Figura 3.9. Mapa de error experimental de velocidad axial para los modelos matemáticos a) Euleriano b) Lagrangiano.	54
Figura 3.10. Esquema del proceso de formación del ojo de escoria. Adaptado de [10].	55
Figura 3.11. Vectores de velocidad sobre el plano de medición del ojo de escoria.	56
Figura 3.12. Vista superior del ojo de escoria experimental formado en un modelo físico de escala 1/17 y flujo de aire de 2.85 L/min a) Modelo experimental b) Modelo Euleriano c) Modelo Lagrangiano.	57
Figura 3.13. Esquema del mecanismo de formación de emulsión de escoria en una olla de acero con inyección céntrica. Adaptado de [17].	59
Figura 3.14. Contornos de fracción volumen de escoria para los seis distintos aceites usados a) Silicón tipo B b) Lubricante industrial marino c) IF30 d) Silicón tipo A e) Isoparafina f) Keroseno.	61
Figura 3.15. Área interfacial agua-aceite en función de la diferencia de densidades entre las fases inmiscibles (a) y la magnitud de la velocidad en la zona 2 (b).	62
Figura 3.16. Área interfacial adimensional en función del número de Froude y de la relación de densidades. $R^2=0.9841$.	62
Figura 3.17. Magnitud de la velocidad media en la zona 2 en función de la relación de densidades agua-aceite.	63
Figura 3.18. Velocidad de zona 2 adimensional en función del número de Eötvös, relación de densidades y el área de ojo adimensional. $R^2=0.9614$.	64
Figura 6.1. Posición de monitor para análisis de velocidad promedio a 16 cm.	71
Figura 6.2. Magnitud de velocidad promedio a una altura de 16 cm.	71
Figura 7.1. Detalles del módulo general.	72
Figura 7.2. Propiedades físicas del aire.	72
Figura 7.3. Selección de VOF como modelo multifásico.	73
Figura 7.4. Identificación de fase primaria y fases secundarias.	73

Figura 7.5. Panel de interacción entre fases del módulo de modelos.	74
Figura 7.6. Set up de turbulencia.	74
Figura 7.7. Activación del Modelo de Fase Discreta con condiciones de seguimiento de partícula.	75
Figura 7.8. Modelos físicos opcionales de partícula.	75
Figura 7.9. Solución numérica de la trayectoria de partícula.	76
Figura 7.10. Compilación y carga de UDF.	76
Figura 7.11. Selección de UDF que realiza la remoción de partículas.	77
Figura 7.12. Propiedades de inyección.	77
Figura 7.13. Set up de la inyección. a) Modelo de arrastre b) Dispersión turbulenta c) Parcela	78
Figura 7.14. Imagen de la experimentación de inyección de aire por el fondo de un modelo físico de horno olla.[27]	78
Figura 7.15. Modificación de propiedades físicas de la fase discreta (aire).	79
Figura 7.16. Condiciones de frontera para paredes del modelo.	79
Figura 7.17. Esfuerzo de corte especificado para la frontera superior.	80
Figura 7.18. Set up de métodos de solución.	80
Figura 7.19. Valores de factores de relajación.	81
Figura 7.20. a) Inicialización b) Creación de regiones.	81
Figura 7.21. Parchado de fases.	82
Figura 7.22. Respaldo de datos cada 2000 iteraciones.	82
Figura 7.23. Representación esquemática de la concordancia entre escalas de tiempo de las aproximaciones euleriana y lagrangiana.	83
Figura 7.24. Disposición del panel para iniciar el cálculo del caso.	83
Figura 7.25. Región que comprende únicamente la interfase de la zona 2.	84
Figura 7.26. Tratamiento de región de interés a) Creación b) Separación.	84
Figura 7.27. Tratamiento de iso superficie a) Creación b) Comprobación.	85
Figura 7.28. Cálculo de magnitud velocidad promedio en la interfase.	85

Índice de tablas

Tabla 1.1. Proceso de operación de la Olla.....	9
Tabla 1.2. Números adimensionales más frecuentes en el estudio de la Olla.....	11
Tabla 1.3. Estructura general de los modelos matemáticos aplicados la simulación hidrodinámica de ollas agitadas con gas. Adaptada de [8].....	14
Tabla 1.4. Expresión característica para estimar la fuerza de cuerpo incorporada en las ecuaciones de conservación de momentum.....	15
Tabla 1.5. Modelos usados en el planteamiento de marco de referencia Euleriano.....	16
Tabla 1.6. Resumen de principales suposiciones y modelos empleados en estudios considerando DPM (Modelo de Fase Discreta).....	24
Tabla 2.1. Dimensiones de horno olla de 140 ton y el correspondiente modelo físico a escala 1/17.....	28
Tabla 2.2. Principales modelos de arrastre para fase discreta disponibles en FLUENT®.....	35
Tabla 2.3. Condiciones de frontera especificadas en el marco de referencia Euleriano.....	38
Tabla 2.4. Propiedades de los materiales para las fases continuas presentes en todos los casos.....	41
Tabla 2.5. Propiedades de los distintos materiales usados para la fase escoria.....	41
Tabla 3.1. Error cuadrático medio de velocidad axial, velocidad radial y energía cinética turbulenta.....	53
Tabla 3.2. Resultados del área de ojo de escoria, tanto experimental como simulada por aproximación Euleriana y Lagrangiana.....	57
Tabla 3.3. Propiedades de las escorias consideradas y cambio de área interfacial obtenido respecto al área interfacial agua-aceite en reposo.....	60
Tabla 6.1. Características de las mallas evaluadas.....	70

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Antecedentes

Puede considerarse al acero como el material base de la industria a nivel global. Solamente en 2021 la producción de acero a nivel mundial fue de 1.9 mil millones de toneladas[1]. En los últimos años ha sido consistente el aumento de producción de acero año con año [Figura 1.1], que seguirá creciendo a la par del incremento de la demanda de este, siendo casi un hecho que se alcanzará la producción global de 2 y 3 mil millones de toneladas, sin la certeza del tiempo requerido para alcanzar estos niveles.

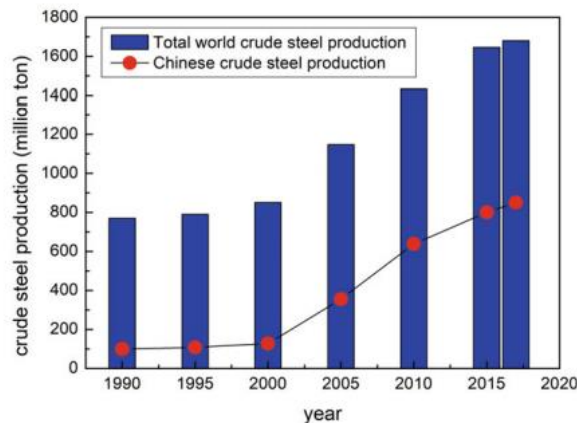


Figura 1.1. Evolución de la producción de acero china y mundial en los últimos 30 años[2].

El acero es uno de los puntos invariantes en la estimación del crecimiento de una sociedad, entre otras cosas, porque presenta flexibilidad para adaptarse a los nuevos tiempos y necesidades. El acero es un material de alto movimiento en el mercado; el 40% es comerciado internacionalmente, principalmente entre regiones geográficas cercanas, sin embargo, también existen casos donde el comercio se da entre diferentes regiones. El caso más representativo de lo anterior es la compraventa existente entre China y Estados Unidos, dos de las principales potencias en producción de acero. En los últimos 25 años la producción de acero en China se cuatuplicó, convirtiéndose actualmente en el mayor exportador a nivel mundial de acero y materia prima para su producción y, a su vez, siendo el principal proveedor de materia prima y acero crudo de Estados Unidos, que en los últimos años ha ido transformando sus actividades dentro del acero hasta llegar a hoy en día importar el 90% de materia prima.

En la Figura 1.2 se presenta de forma gráfica a los principales países productores de acero, indicando a la vez la comparativa visual del nivel interno de fabricación primaria y secundaria en cada país. Estados Unidos actualmente se dedica a llevar a cabo procesos de refinación de acero más que producirlo primariamente, contrario a lo que realiza China, que solo refina el 11% del total de su producción total[2].

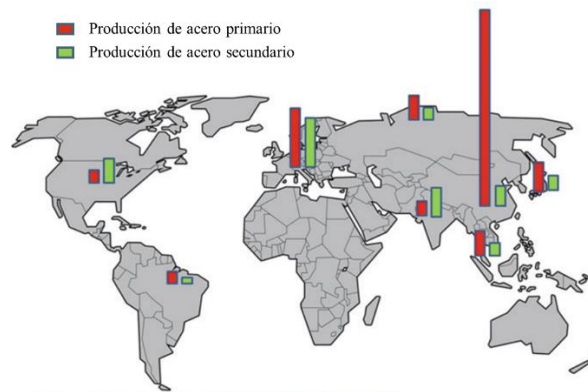


Figura 1.2. Producción primaria y secundaria de acero de los principales países fabricantes del mundo[2].

El proceso de producción se ha transformado y evolucionado a través del tiempo variando, incluso en órdenes de magnitud, las propiedades del material y las técnicas de fabricación,

La Comisión Europea ha definido dentro de las Tecnologías Clave de Habilitación (KET por sus siglas en inglés) que los materiales avanzados no solo son aquellos que son recientemente creados, sino que también se consideran aquellos ya existentes que adicionalmente son refinados, reformulados y cambiados continuamente, siendo el acero uno de los más grandes ejemplos que, además, tiene la ventaja frente a otros materiales avanzados de ser un material que puede usarse para artefactos de corta o larga vida, siendo posible su reuso; consolidándose, de hecho, como el material más reciclado del mundo[3].

Bajo el escenario del cambio del mercado global se han desarrollado nuevas técnicas de producción de acero para otorgar a las empresas fabricantes alternativas económicas y sustentables[4]. Este panorama ha propiciado el enfoque del desarrollo tecnológico hacia la reducción de energía eléctrica, la emisión de gases contaminantes e incremento de las propiedades, permitiendo que en la actualidad se mantenga como un material vigente y con una amplia proyección a futuro.

1.2 Proceso de fabricación del acero

1.2.1 Siderurgia primaria

El proceso general consta de llevar a cabo la elaboración de una aleación Hierro-Carbono, en la cual el contenido de C puede variar hasta un máximo de 2%. Por la naturaleza de la materia prima y del proceso de fabricación, también se encontrarán presentes otros elementos que durante las diversas etapas de fabricación serán controladas en su contenido en el acero (añadidos o removidos) dependiendo del grado de acero requerido y, en consecuencia, de su efecto en las propiedades mecánicas.

El proceso de producción de acero puede tomar diferentes rutas dependiendo de la materia prima, fuente de hierro, empleada para la fabricación. A su vez, estas diferentes rutas han evolucionado a lo largo del tiempo para mejorar la precisión en el control de la composición química final, reducir lentitud de los procesos y disminuir el consumo de energía externa requerida para la producción de acero. En la actualidad el proceso de producción es posible calificarlo en dos principales rutas: “Integrada” y “No integrada”, mostradas esquemáticamente en la Figura 1.3.

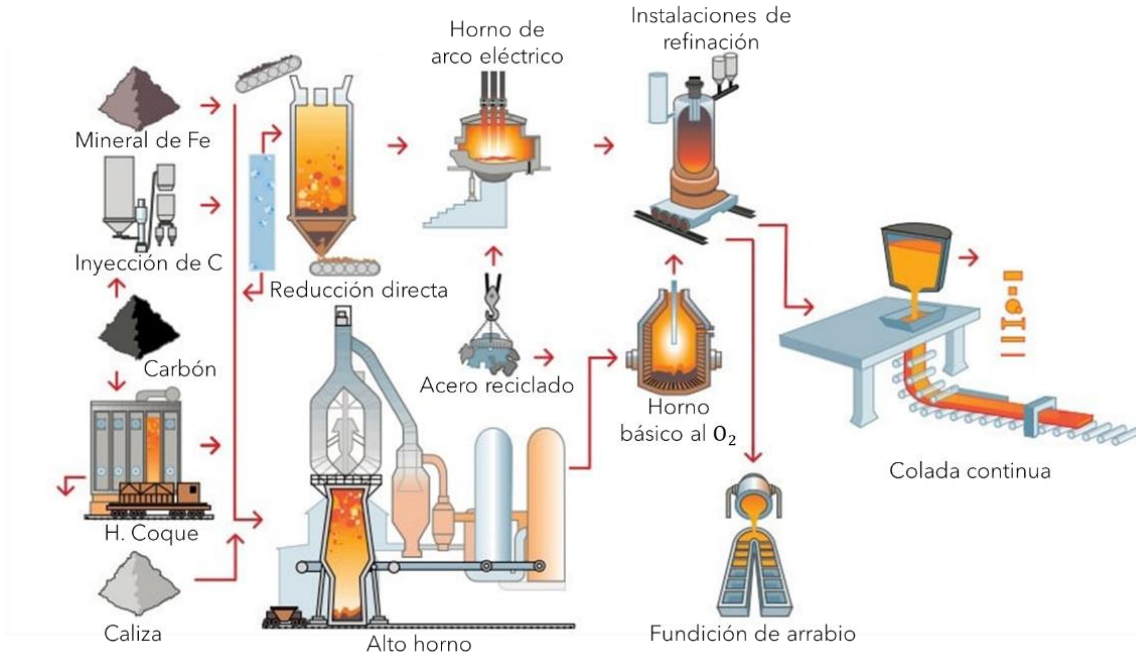


Figura 1.3. Esquema del proceso completo de producción del acero.

Vía integrada

En esta ruta se parte, como materia prima, de mineral de hierro (Hematita y Magnetita) en forma de pellets sinterizados de ½ pulgada. La reducción de los óxidos (*ironmaking*) y la aceración (*steelmaking*) puede tomar dos distintas rutas:

- Alto Horno-BOF
- Reducción directa-Horno de Arco Eléctrico

Alto Horno - Horno Básico de Oxígeno (BOF)

El Alto Horno es cargado con pellets de hierro, carbón coquizado y piedra caliza. La reducción del mineral es hecha por medio de inyectar aire enriquecido con O_2 (38-40%), produciendo CO que reduce al óxido formando hierro, fundiéndolo y obteniendo arrabio (Fe líquido) con alto contenido de Carbono (5-6%) e impurezas.

Para eliminar el exceso de Carbono, el arrabio es transferido al BOF, que es un convertidor donde inyecta a presión Oxígeno puro por medio de una lanza que produce un jet supersónico sobre el Hierro, oxidando el Carbono formando acero líquido.

Reducción Directa-Horno de Arco Eléctrico

La materia prima con alta concentración de Hierro (mayor a 66 % en peso) es enviada al Horno de Reducción Directa donde usando H_2 y/o CO como compuestos reductores y sin alcanzar la

temperatura de fusión de ninguno de los componentes, se elimina el Oxígeno (reducción) de los pellets para obtener Fe de alta porosidad (hierro esponja).

Después pasa al Horno de Arco Eléctrico que posee 3 electrodos de grafito colocados en la parte superior que forman arcos eléctricos, a través de corriente alterna o corriente directa, que provee el calor necesario para fundir al hierro esponja. Si el Horno no funde 100% el hierro esponja como carga, se añade chatarra de acero como materia prima. También se puede practicar la adición de pellets en esta etapa para diluir el contenido de Carbono en el baño.

Vía NO integrada

En esta ruta no se usa materia prima proveniente de minería en lo absoluto. No involucra la producción de hierro primario (*ironmaking*) descrita anteriormente. En esta ruta se funde 100% chatarra de acero en Hornos de Arco Eléctrico, siendo de vital importancia la adecuada selección de la chatarra a utilizar. Lo destacable de este método reside en el reúso que se le dio a la chatarra de acero que abunda en países industrializados, reduciendo el consumo de energía con una producción más amigable en el medio ambiente.

Entonces, el acero se produce por medio de alguno de los procesos de aceración existentes (Convertidor BOF u Horno de Arco Eléctrico), sin embargo, este todavía no tiene calidad óptima por la cantidad de impurezas indeseadas que posee y que son nocivas a las propiedades mecánicas; entonces, para removerlas, el acero es transferido al Horno Olla donde se realiza la refinación secundaria que proporciona la calidad del material para finalmente proceder a su solidificación en la máquina de colada continua.

1.2.2 Siderurgia secundaria

El acero líquido proveniente de alguna de las rutas primarias de fabricación no posee la composición química óptima para ser colada (entre la falta de aleantes y el alto nivel de impurezas), de modo tal que este acero líquido pasa por un proceso adicional de refinación en el reactor conocido como Horno Olla.

El proceso de refinación de acero en la olla implica la ejecución de distintos subprocesos como lo son:

Ajuste de composición química

Eliminación de impurezas (desfosforación, desulfuración, desoxidación y en algunos casos deshidrogenación)

Homogenización química

Homogenización térmica

Eliminación de inclusiones no metálicas

A grandes rasgos la Olla [Figura 1.4] es un horno cilíndrico recubierto en el interior por refractario con un sistema de 3 electrodos de grafito posicionados en la parte superior, empleados para establecer arcos eléctricos que aporten calor y se pueda mantener la temperatura del baño, y además cuenta con una tolva para la adición de ferroaleaciones, pudiendo adicionar aleantes por carretes en forma de alambre.

Hay una estrecha relación entre el refractario usado y las características de la escoria y el baño metálico. El grado de saturación del óxido de Calcio (CaO) y óxido de Magnesio (MgO) en la escoria es un parámetro clave para el proceso de desulfuración, siendo estos los principales componentes de la escoria y otorgándole un índice de basicidad mayor a 2.0 que permite considerarla como básica. Esta es la razón por la que en esa zona de trabajo de la escoria se emplee ladrillo de refractario de naturaleza básica; MgO-C es uno de los materiales más usados para este propósito. En la línea de trabajo del acero líquido la basicidad no es tan marcada, situación que posibilita la incorporación de materiales de carácter ácido, que permiten resistir el desgaste ante las altas temperaturas de trabajo, como lo es la alúmina. En esta zona es común el uso de ladrillo refractario MgO-Al₂O₃-C.

En la parte inferior generalmente suele haber un tapón poroso para llevar a cabo la inyección desde el fondo de un gas inerte que favorecerá la agitación del acero líquido y acelerar la cinética de limpieza del acero. La inyección de gas desde el fondo promueve la recirculación del acero, dando lugar a diferentes procesos de la refinación secundaria, como la remoción flotación de inclusiones desde el seno del acero hasta la fase escoria que está en la parte superior del baño, cuya función es cubrir y proteger al acero del ambiente, o la disminución del gradiente químico y térmico.

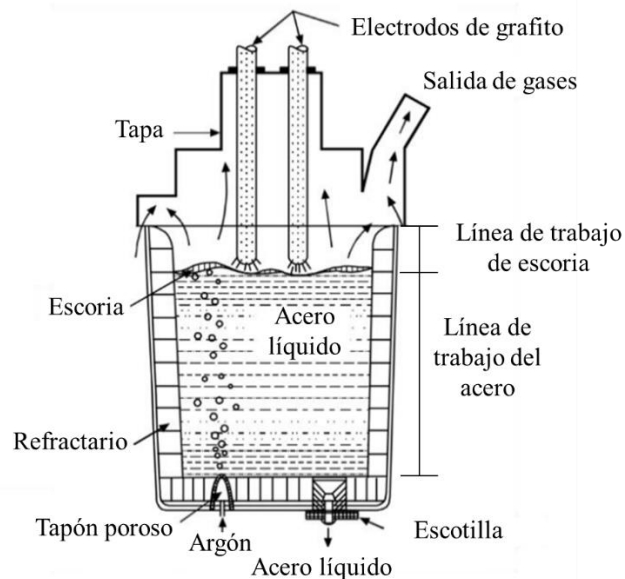


Figura 1.4. Esquema con los componentes principales de Horno Olla.

Una vez que el acero proveniente del BOF o el Horno de Arco Eléctrico fue vaciado en la olla y esta fue trasladada a la estación de trabajo, el proceso de operación a ejecutar varía dependiendo del tipo de reactor empleado[5], sin embargo, en general la secuencia de operaciones de refinación es el que se especifica en la Tabla 1.1.

Tabla 1.1. Proceso de operación de la Olla.

Número de etapa	Etapa	Descripción
1	Desoxidación y escorificación	<p>Se añade Al o Mn o Si que reaccionan con el Oxígeno disuelto y se añaden escorificantes</p> $2Al + 3O \rightarrow Al_2O_3$ $Si + 2O \rightarrow SiO_2$ $Mn + O \rightarrow MnO$
2	Calentamiento	<p>Se introducen los 3 electrodos en la escoria para formar arcos sumergidos (evitando así el desgaste del refractario por el arco eléctrico) y se lleva a cabo un calentamiento con una rampa térmica de 3-5°C/min. Este calentamiento puede durar hasta 10 minutos dependiendo del proceso.</p>
3	Toma de muestra	<p>Se analiza la composición química para planear el ajuste de carga de aleantes y satisfacer el grado del acero a fabricar.</p>
4	Aleación	<p>Adición de elementos aleantes directamente en la escoria, para obtener el grado de acero deseado, y de compuestos para llevar a cabo diferentes procesos (CaSi, CaC₂, CaO + CaF₂, Ca, Mg) como desulfuración, desfosforación y modificación de inclusiones.</p> <p>Desulfuración:</p> $Ca + S \rightarrow CaS$ $CaO + S \rightarrow CaS + O$ $Mg + S \rightarrow MgS$ <p>Desfosforación:</p> $2P + 5O \rightarrow P_2O_5$ $2P + 5O + nCaO \rightarrow P_2O_5nCaO$
5	Agitación	<p>Se inyecta Argón desde el fondo para promover la agitación de la olla y, por ende, las reacciones antes enlistadas, propiciar la absorción de inclusiones en la escoria mediante la interacción de esta fase con el acero y además homogenizar el baño química y térmicamente. El proceso se lleva a cabo por medio de un incremento gradual del flujo hasta una meseta de operación.</p>
6	Vaciado	<p>Se realiza el vaciado de la Olla ya sea en el tundish para colada continua o en un sistema de alimentación para lingotes.</p>

Como puede apreciarse en la Tabla 1.1, la agitación inducida por la inyección de gas inerte es imprescindible para que ocurran los procesos de refinación en la olla. La caracterización de esta etapa del horno olla ha sido ampliamente estudiada desde aproximadamente 80 años.

Los primeros esfuerzos se concentraron en caracterizar la fluidodinámica derivada del fenómeno de agitación, principalmente en la zona de la pluma bifásica (gas-líquido).

La física derivada del ascenso de burbuja en un líquido inicialmente estático se puede describir principalmente a través de 5 parámetros físicos[6], siendo la diferencia de densidades la variable crítica:

- Densidad de los fluidos (ρ)
- Viscosidad de los fluidos (μ)
- Tensión interfacial (σ)
- Gravedad (g)
- Dimensiones de burbuja (d_p)

A partir de la entrada del gas inyectado, en el sistema de la olla se generan ciertas fuerzas que promoverán el movimiento de los fluidos y estos a su vez dan paso a los diversos fenómenos que se representan esquemáticamente en la Figura 1.5. Para el estudio de las fuerzas que promueven los fenómenos y los resultados de los mismos, se han empleado de principales herramientas que son el modelado matemático y el modelado físico.

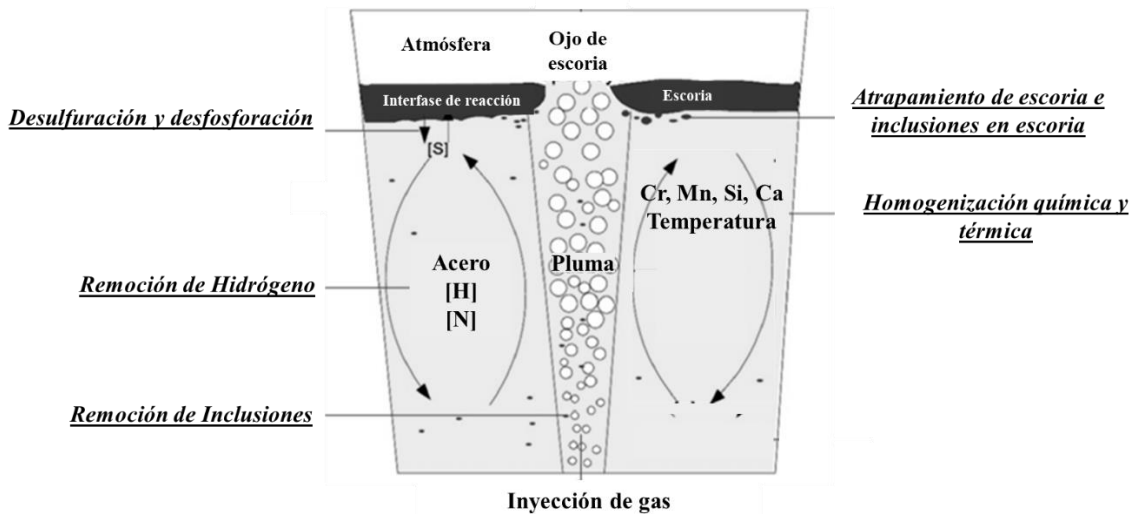


Figura 1.5. Fenómenos generados por la inyección de gas. Adaptado de [7]

1.3 Herramientas de la ingeniería de procesos metalúrgicos

El análisis de procesos metalúrgicos industriales considera diferentes herramientas y métodos de estudio para el entendimiento, control y optimización de la operación de la cual se tenga interés.

La herramienta de estudio más directa es la medición en planta. Con esta técnica de análisis, se llevan a cabo mediciones durante el proceso real o a partir de resultados derivados del mismo. Otro método de estudio derivado de la medición en planta es el empleo de plantas piloto. En estas se lleva a cabo un análisis del proceso usando los mismos materiales y condiciones, no obstante, en equipos y condiciones a una escala reducida.

A causa de las condiciones extremas de temperatura y tonelaje, es difícil en sobremanera realizar estudios meticulosos sobre el sistema real de un horno olla o inclusive en plantas piloto. Para sobrellevar estas adversidades y poder analizar el proceso, los modelos físicos y matemáticos han sido las principales herramientas de análisis de procesos del horno olla.

1.3.1 Modelos físicos

En esta técnica se busca representar el sistema de estudio a través de un modelo de menor escala y, al mismo tiempo, usando materiales distintos al acero y más sencillos de manipular y de menor costo. Para definir los materiales a utilizar es necesario cumplir con ciertos requerimientos o criterios de

similitud para que el modelo final realmente sea una representación de la física del proceso. En el caso de la Olla, los materiales más comúnmente empleados son el agua como simul del acero líquido y aire para representar el gas de inyección.

Las condiciones de operación son otro tema de interés en el modelado físico ya que, al igual que con los materiales de elección, los parámetros de estas condiciones son de vital importancia para representar adecuadamente la física del proceso. Para englobar las características de material y operación utilizados en el modelo y establecer una relación con las condiciones de la Olla real, se usan los criterios de similitud; que permiten equiparar los diferentes fenómenos dentro del sistema, en este caso la olla. La naturaleza de estos criterios varía dependiendo de los fenómenos que se lleguen a considerar para el estudio, sin embargo, hay 3 que se toman en cuenta en prácticamente todos los casos:

- Similitud geométrica: Se determina con el factor de escala, λ , definido de la siguiente forma

$$\lambda = \frac{L_{modelo}}{L_{real}}$$

Este factor de escalamiento se aplica para construir cada dimensión lineal, L (altura y diámetro en el caso de la Olla) del modelo, guardando una relación fija respecto al sistema real.

- Similitud dinámica: Por medio de este criterio se busca asemejar las fuerzas que se generan dentro del sistema con las del modelo para promover el movimiento del fluido. Estas fuerzas pueden ser gravitacionales, de tensión superficial, inerciales, de presión, viscosas; y es posible estudiar su relación por medio de cantidades adimensionales definidas que además permiten correlacionar las fuerzas en un sistema real de la olla y en modelos a escala. En la Tabla 1.2 se presentan los números adimensionales que más se emplean en el estudio de la Olla a través de establecer la similitud dinámica con grupos adimensionales.

- *Tabla 1.2. Números adimensionales más frecuentes en el estudio de la Olla.*

Número Adimensional	Expresión	Relación de fuerzas
Número de Reynolds	$Re = \frac{\rho Lv}{\mu}$	$\frac{\text{Fuerza inercial}}{\text{Fuerza viscosa}}$
Número de Eotvos	$Eo = \frac{g\Delta\rho L^2}{\sigma}$	$\frac{\text{Fuerza gravitacional}}{\text{Fuerza de tensión superficial}}$
Número de Morton	$Mo = \frac{g\mu^4 \Delta\rho}{\rho^2 \sigma^3}$	$\frac{\text{Fuerza gravitacional} \cdot \text{Fuerza viscosa}}{\text{Fuerza de tensión superficial}}$
Número de Froude modificado	$Fr' = \frac{\rho v^2}{\Delta\rho g L}$	$\frac{\text{Fuerza inercial}}{\text{Fuerza gravitacional}}$
Número de Weber	$We = \frac{\rho Lv^2}{\sigma}$	$\frac{\text{Fuerza inercial}}{\text{Fuerza de tensión superficial}}$

Donde ρ es la densidad, L es la longitud característica, σ es la tensión superficial, g es la gravedad y v es la velocidad.

- Similitud cinemática: Este tipo de similitud permite asegurar que el movimiento del fluido, en el modelo, como resultado del balance de fuerzas, sea similar a aquel del prototipo (sistema real). En este caso la similitud en el movimiento de flujos es corroborada por medio de la viscosidad cinemática del acero a 1600°C y el agua a 20°C.

$$\nu_{\text{acero } 1600^{\circ}\text{C}} \approx \nu_{\text{agua } 20^{\circ}\text{C}}$$

$$\nu_{\text{acero } 1600^{\circ}\text{C}} = 1 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$$

$$\nu_{\text{agua } 20^{\circ}\text{C}} = 0.97 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$$

1.3.2 Modelos matemáticos

Otra herramienta que ha ido adquiriendo fuerza es el modelado matemático. En un modelo matemático se realiza una aproximación de la realidad mediante la resolución de ecuaciones fundamentales que representan cuantitativamente los fenómenos que gobiernan los procesos.

Esta resolución puede ser de forma analítica o en casos más complejos de forma numérica. Actualmente, con el poder computacional que se ha desarrollado, es posible la resolución de un gran número de ecuaciones en tiempos cortos; disponiendo, incluso, de softwares especializados que permiten la integración de diversos modelos matemáticos.

En el caso de la Olla, el modelado matemático se puede llevar a cabo sobre el proceso real o sobre el modelo físico. En el presente trabajo se construyó el modelo matemático basado en un modelo físico del horno olla, en un acoplamiento de ambos tipos de modelado.

Los métodos de resolución de ecuaciones y los marcos de referencia usados para modelar los procesos ocurridos dentro del Horno olla por medio del modelado matemático, han evolucionado conforme a los avances en la investigación de la fenomenología de la olla, en el desarrollo de algoritmos computacionales y poder computacional.

1.4 Estado del arte

Los estudios sobre el horno olla se pueden clasificar de diversas formas; ya sea por el fenómeno de estudio, el tipo de modelado, zona dentro de la olla estudiada o los efectos de las variables. En la Figura 1.6 se presenta una propuesta de clasificación hecha en esta tesis.

El modelado físico ha estado presente en las investigaciones del horno olla desde el inicio, de igual forma sucede con el modelo matemático, sin embargo, este último ha ganado popularidad en los últimos años, logrando obtener resultados que experimentalmente son sumamente difíciles de instrumentar.

La atención a las zonas de olla para su estudio de igual forma ha evolucionado. En un inicio al considerarse un sistema bifásico acero-gas, el principal interés fue caracterizar la fluidodinámica del baño de acero líquido y la interacción acero-gas que generaba los flujos de recirculación; todo esto por medio de variar los parámetros que se muestran en la Figura 1.6. Con la adecuada descripción de la dinámica de fluidos fue posible llevar a cabo estudios sobre el mezclado químico y térmico, sin embargo, el avance de los años y el aumento de los requerimientos de calidad del acero, exhortaron a la inclusión de la fase escoria. Su integración significó modificar, hasta cierto punto, el conocimiento adquirido sobre las ollas con base en sistemas de dos fases. Adicionalmente, significó la incursión de fenómenos de estudio que no existían en sistemas acero-gas (Desulfuración, apertura de ojo de escoria y su atrapamiento). Estos últimos son los que actualmente representan un reto en el estudio la olla.

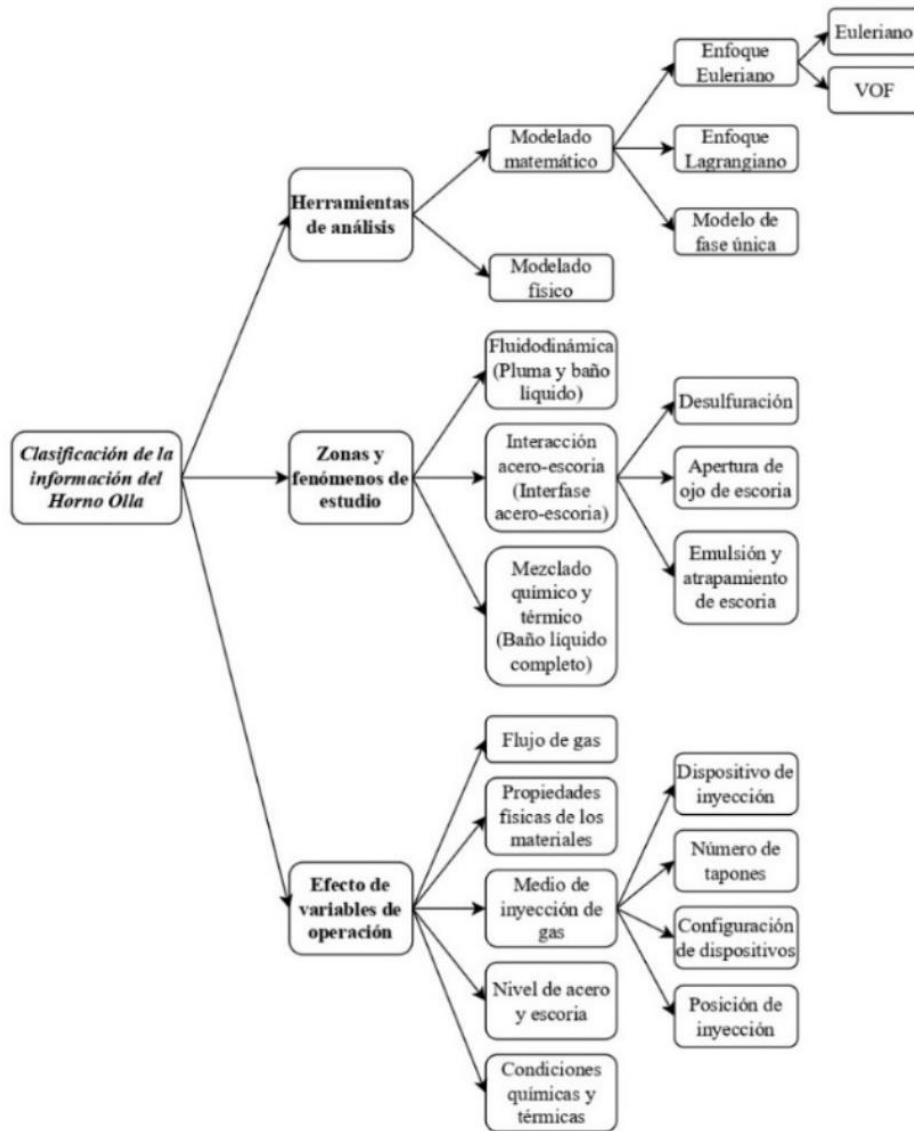


Figura 1.6. Esquema de tipos de clasificaciones de la información existente del horno olla.

En cuanto a la aproximación matemática; esta técnica ha ganado relevancia para efectuar el análisis de procesos; auxiliándose de modelos físicos y mediciones en planta real o planta piloto (en menor medida) para llevar a cabo la validación de los modelos.

En una de las primeras revisiones completas de la literatura a cerca del horno olla, Mazumdar y Guthrie [8] recopilaron tres enfoques matemáticos diferentes para modelar la olla.

Las tres técnicas de modelado que históricamente han sido utilizadas para abordar matemáticamente la función del horno olla se presentan en la Tabla 1.3.

Tabla 1.3. Estructura general de los modelos matemáticos aplicados a la simulación hidrodinámica de ollas agitadas con gas. Adaptada de [8].

Modelo	Elementos en común	Elementos de distinción
Euleriano de dos fases	Resolución de ecuación de conservación de masa y momentum para la fase líquida	Resolución de ecuación de conservación de masa y momentum para la fase gaseosa
Lagrangiano de dos fases	Modelo de turbulencia	Empleo de ecuación de trayectoria de partículas de fase gaseosa
Fase única	Condiciones de frontera	Modelo considerando una sola fase en la zona de la pluma.

Como se observa, si bien la descripción matemática de la fase líquida continua (acero) tiene el mismo tipo de tratamiento donde se utiliza la resolución de las ecuaciones diferenciales parciales provenientes de las ecuaciones de conservación en un sistema discretizado, el tratamiento de la fase gaseosa inyectada difiere en cada uno de los enfoques. Estos enfoques pueden ser definidos de la siguiente forma:

- Enfoque Euleriano (E-E): Esta aproximación se basa en el estudio del proceso por medio de emplear geometrías discretizadas y evaluando la evolución de la fluidodinámica en cada elemento de control. Adicional a las ecuaciones de conservación planteadas para el modelado de la fase líquida continua, se resuelve un set adicional de ecuaciones de conservación para la fase gaseosa inyectada. Este método es el más costoso en términos computacionales.
- Enfoque Lagrangiano (E-L): Se aplica principalmente a razón de que existen partículas que se pueden considerar discretas al encontrarse inmersas en otra fase continua; las burbujas que se forman al elevarse el gas inyectado. Este enfoque es más bien una aproximación acoplada entre Euleriano y Lagrangiano en el cual la fase continua es resuelta usando el marco de referencia Euleriano al tiempo que las partículas son monitoreadas individualmente por medio de la ecuación de trayectoria o en el marco de referencia Lagrangiano [Figura 1.7].

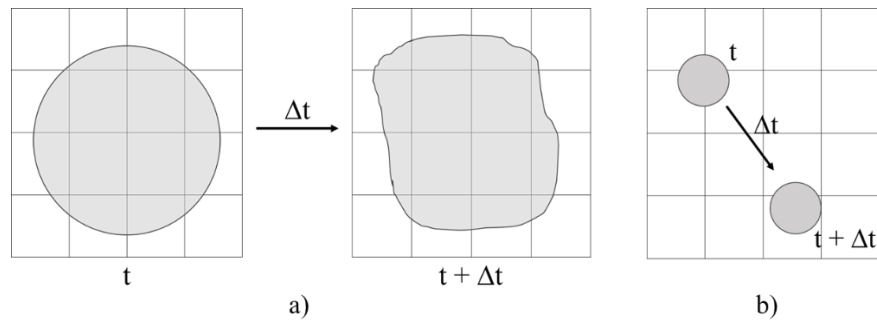


Figura 1.7. Representación esquemática de a) Enfoque Euleriano b) Enfoque Lagrangiano

- Modelo de fase única: Realiza la resolución de los fenómenos hidrodinámicos de la zona bifásica tomando en cuenta la existencia de una sola fase a partir de la densidad y la fracción volumen tanto del gas como del líquido. Un set de ecuaciones algebraicas es planteado para modelar el fenómeno, no obstante, la resolución de este set no permite predecir la distribución de gas o la forma de la pluma, parámetros que se deben conocer a priori. Este enfoque es el que ocupa menor poder computacional para ser ejecutado.

Para ese tiempo, los estudios solamente se elaboraban sobre sistemas bifásicos acero-gas sin la presencia de escoria. No obstante, la diferencia entre modelos reside principalmente en la forma en

la que realizan el tratamiento y descripción de la interacción acero-gas. Y es que cabe mencionar que la zona de la pluma es la de mayor dificultad para describir pues involucra la determinación de los términos de fuerza de cuerpo inducidos por la inyección de gas y que promueven la agitación del acero. En la Tabla 1.4. se aprecian las diferentes expresiones para el cálculo de la fuerza de cuerpo, inducida por el gas inyectado en la fase líquida para cada una de las técnicas multifásicas.

Tabla 1.4. Expresión característica para estimar la fuerza de cuerpo incorporada en las ecuaciones de conservación de momentum.

Tipo de modelo	Expresión de la fuerza de cuerpo	Parámetros empíricos en la expresión de la fuerza de cuerpo
Modelo de fase única	$\rho_L g \alpha; \alpha = \frac{Q - \pi r_{av}^2 U_{slip} \alpha (1 - \alpha)}{U_p \int_0^{r_{av}} 2\pi r dr}$	Velocidad de deslizamiento y dimensiones de la pluma
Modelo Lagrangiano	$\frac{Q}{N\Delta V} \sum_{m=1}^{m=N} \int_0^{t_f} \frac{3C_D \mu}{d_b^2} Re(V_b - v) dt$	Tamaño de burbuja y coeficiente de arrastre
Modelo Euleriano	$C_f(V_b - v); C_f = f(Re, d_b, C_D, \dots)$	Tamaño de burbuja y coeficiente de arrastre

Donde Q es el flujo de gas, r_{av} es el radio de la pluma, α es la fracción volumen de gas, g es la gravedad, N es el número de partículas, C_D es el coeficiente de arrastre, μ es la viscosidad dinámica, d_b es el tamaño de burbuja, Re es el número de Reynolds, V_b es el volumen de burbuja y C_f es el coeficiente de fricción interfacial.

Mazumdar también establece que los tres métodos de modelado realizan estimados diferentes de velocidad, fracción volumen y turbulencia, sin embargo, ya que la pluma solo ocupa un 2 – 3 % del volumen total del reactor, las variaciones en las velocidades calculadas en la pluma (y más en tapón y superficie) generan variaciones mínimas en el seno del fluido, por lo que los patrones de flujo obtenidos principalmente fuera de la pluma (en la zona de recirculación) tienen buena concordancia con los resultados experimentales.

Esta recopilación concluye que la exactitud de las predicciones numéricas recae mucho en la elección de los modelos empíricos o semi empíricos que se usan. Al momento de la publicación de esta revisión se habían ignorado posibles perturbaciones en la superficie y, además, como consecuencia de la omisión de la presencia de la fase escoria, tampoco se había estudiado la formación del ojo de escoria en la superficie.

1.4.1 Enfoque Euleriano (E-E)

En los siguientes 15 años, si bien inicialmente el modelo de fase única fue en un inicio el modelo de mayor uso, el modelo que tuvo un creciente auge fue el Euleriano, en gran parte debido al desarrollo tecnológico de la capacidad de computación.

Con el modelo Euleriano se hicieron extensivas investigaciones de diversos fenómenos del horno olla, tanto de fluidodinámica, mezclado químico y térmico, transferencia de masa y formación de ojo en la escoria. Como se había mencionado anteriormente, la elección de los modelos para la simulación del proceso es vital en los resultados que se obtengan. En la investigación llevada a cabo bajo el marco de referencia Euleriano se han variado un gran número de modelos de turbulencia, de arrastre e interacción turbulenta principalmente para poder acercarse a la realidad del problema. En la Tabla 1.5 se presentan algunos de los modelos empleados para la simulación con aproximación Euleriana.

Tabla 1.5. Modelos usados en el planteamiento de marco de referencia Euleriano.

Modelo Euleriano	Modelo de turbulencia	Modelos de arrastre	Modelos de interacción turbulenta
<ul style="list-style-type: none"> • Euleriano • VOF (<i>Volume of Fluid</i>) 	<ul style="list-style-type: none"> • k-ε (<i>Realizable, RNG y Standard</i>) • k-ω (<i>Standard y SST</i>) • Spallart-Allmaras • LES (<i>Large Eddy Simulation</i>) • DNS 	<ul style="list-style-type: none"> • Symmetric • Morsi y Alexander • Schiller y Naumann • Grace • Arrastre universal 	<ul style="list-style-type: none"> • Troshko & Hassan • Sato

Chattopadhyay, Isac y Guthrie[9] en su recopilación de métodos de CFD aplicados a la siderurgia dejan en claro que, gracias a los estudios llevados a cabo hasta ese momento, ya está ampliamente comprobado que el fenómeno de ascenso de burbujas dentro de la zona de pluma está dominado por el número de Froude modificado. Esta elevación induce un movimiento recirculatorio del líquido dentro del reactor. Si la inyección es céntrica, el vortex toroidal de líquido es típicamente localizado en los cuadrantes superiores de la olla, con desplazamiento del acero hacia las paredes; en vista de esto, el líquido en el fondo de la olla se encuentra relativamente quieto. Con el tiempo fue introducida la fase escoria en la parte superior que, con su correspondiente modelado, se concluyó que disminuye la intensidad de movimiento de la fase acero y afecta negativamente los tiempos de mezclados respecto a investigaciones donde no se consideró la presencia de una tercera fase de escoria.

La influencia de las variables de operación en la fluidodinámica del baño y los procesos de transporte asociados ha sido ampliamente estudiada mediante modelos matemáticos en CFD (*Computational Fluid Dynamics*) basados ya sea directamente en el proceso real o en modelos físicos, siendo este último la opción más concurrida al facilitar etapas como la de validación de la simulación obtenida, debido a la facilidad para realizar las mediciones experimentales con las que se realiza la comparación.

Krishnapishnarody y Irons [10][11] estudiaron la formación del ojo de escoria por efecto de la inyección de gas. En su modelo midieron el efecto de las variables de operación en tamaño del ojo de escoria formado. Además, obtuvieron correlaciones, que, mediante validaciones experimentales, pueden ser aplicadas a diversos tipos de sistemas multifásicos. En su trabajo concluyen que el área de ojo expuesta aumenta al incrementar el flujo de gas y disminuir el espesor de capa de escoria, teniendo en consideración que existe un flujo crítico dependiendo de las características del sistema, debajo del cual este ojo no se forma. Adicionalmente presentan diversas correlaciones para poder estimar el área del ojo de escoria, como la que se muestra en la Ecuación 1.1 :

Ecuación 1.1

$$\frac{A_{eye}}{A_p} = -0.54 + 5.07 \left(\frac{\rho_l - \rho_s}{\rho_l} \right)^{-0.5}$$

Donde A_{eye} es el área del ojo de escoria, A_p es el área transversal de la pluma, mientras que ρ_l y ρ_s son la densidad del líquido y la fase escoria respectivamente.

Existe otro modelo para simular fases continuas que es de tipo Euleriano que, sin embargo, tiene algunas diferencias en su formulación respecto a este último; se trata del modelo *Volume of Fluid* (VOF). Este método es aplicado a la simulación de la interacción de dos o más líquidos inmiscibles por medio de emplear una ponderación de las propiedades físicas en función de la fracción volumen de las fases presentes para la resolución de las ecuaciones de conservación, permitiendo así un seguimiento detallado de las interfases presentes; siendo incorporado al estudio de la olla algunos años después de la recopilación realizada por Mazumdar y Guthrie[12].

El VOF fue implementado por Li, Yin, Zhou y Tsukihashi[13] en el análisis matemático de una olla trifásica de 3 dimensiones. Este fue de utilidad para evaluar en la parte superior el comportamiento de la escoria como consecuencia del efecto de variar el número de tapones, posición de inyección y flujo de gas. Los resultados arrojaron que, al impactar intermitentemente las burbujas de gas en la escoria, estas la rompen formando además una onda en la interfase acero-escoria, cuya frecuencia aumenta al haber un solo tapón excéntrico de inyección. Otro dato a resaltar es que la velocidad hacia abajo de acero en la periferia del ojo de escoria es un parámetro importante pues un incremento de este puede propiciar la aparición del fenómeno de emulsificación; dicha variable depende directamente del flujo de gas en la entrada del modelo.

Pese a las numerosas investigaciones y avances sobre el estudio del entendimiento del horno olla que se han efectuado bajo el marco de referencia Euleriano, este enfoque presenta algunas desventajas. El problema de la aproximación Euleriana es que implica un mayor nivel de modelado en lugar de cálculo directo de las fuerzas implicadas en el movimiento de fluidos y no es tan fácil implementar para procesos más complejos como la aglomeración y rompimiento de fases. En el ámbito de la investigación sobre la olla, este enfoque no ha podido resolver con buena precisión los procesos en la zona de la escoria, sobre todo aquellos vinculados con el fenómeno de emulsificación de esta fase que ampliamente se ha observado en modelos físicos, tal como lo estipulan Uzgoren, Singh, Sim y Shyy [14].

1.4.2 Enfoque Lagrangiano (E-L)

Como alternativa se planteó el empleo del marco de referencia Lagrangiano para modelar la zona de la pluma. En esta formulación Lagrangiana, la fase continua es resuelta en un sistema de referencia fijo Euleriano, mientras las burbujas son resueltas desde la perspectiva Lagrangiana. En la Figura 1.8 se representa esquemáticamente como se acoplan el marco de referencia Euleriano y Lagrangiano en sistemas multifásicos dispersos.

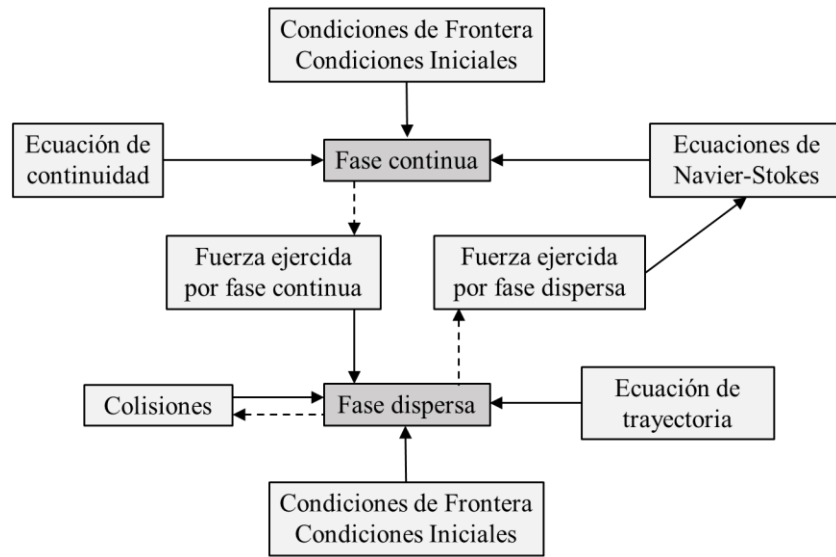


Figura 1.8. Diagrama representativo del mecanismo de acción de la aproximación Lagrangiana (E-L). Adaptado de [15].

Portela y Oliemans [15] estudiaron las capacidades y limitaciones del marco de referencia Euleriano en flujos multifásicos dispersos industriales, ya que a pesar de que mediante la resolución de las ecuaciones constitutivas es posible resolver por completo simulaciones de sistemas multifásicos dispersos, esto solo es cierto para sistemas de estudios fundamentales, involucrando un pequeño número de partículas.

Ciertos aspectos de interés en el modelo Lagrangiano son:

- Arrastre de burbuja: Este es independiente de la fracción volumen de gas
- Abertura de la pluma: Se puede modelar a través de una fuerza de empuje y dispersión turbulenta
- Desintegración/integración de burbujas: Posibilidad de modelar estos fenómenos mediante la interacción entre partículas
- Condiciones de frontera: Permite el uso de condiciones de frontera complejas

En la agitación con gas desde el fondo se pueden considerar 4 tipos de interacciones que permiten modelar y describir el proceso y sobre todo las interacciones de transferencia de momentum (*four-way coupling*):

1. Burbuja → Fluido continuo
2. Fluido continuo → Burbuja
3. Burbuja A → Burbuja B
4. Burbuja B → Burbuja A

La relevancia de las interacciones depende de la presencia de fase discreta. Para flujos muy diluidos, la influencia de la transferencia de momentum de las partículas sobre la fase continua puede ser despreciada. Conforme aumenta la cantidad de fase dispersa, la influencia de la turbulencia promovida por parte de las partículas tiene que ser tomada en cuenta. En caso de que la densidad del número de partículas es aún mayor, las interacciones entre partículas tienen que ser tomadas en cuenta. En flujos con una alta densidad de partículas, la fase continua no juega un rol importante y el flujo es completamente dominado por las interacciones entre partículas.

Por las características del problema, hasta el momento es muy difícil que se tomen en cuenta las interacciones entre partículas, por lo que solo se toman en cuenta en contados artículos de investigación para casos muy específicos de estudio de la interfase de las partículas. A raíz de lo anterior, los modelos más comunes son los de tipo *'two-way coupling'* o doble acoplamiento en la zona de la pluma.

Las características de la partícula (sobre todo el tamaño y la inercia) son sumamente importantes en la forma de modelar estas interacciones. En flujos burbujeados, el tamaño de las partículas es del mismo orden de las escalas de turbulencia intermedias, haciendo difícil modelar la interacción entre burbujas y turbulencia.

Portela y Oliemans[15] mencionan que si el enfoque E-L se emplea junto con las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas en el tiempo (*RANS*), la desventaja principal es, a pesar de considerar menos modelos en su planteamiento, la falta de buenos modelos para la modificación de la turbulencia hecha por las partículas, la interacción entre partículas y los efectos cerca de las paredes. Una de las medidas que se ha implementado es la incorporación de un término extra que cuantifica directamente las interacciones entre las partículas y el fluido.

Idealmente, las simulaciones deberían ser capaces de predecir la distribución de partículas, las velocidades alisadas con el tiempo y velocidades fluctuantes de las fases, sin embargo, el hecho de la consideración de suposiciones propias del modelado, conlleva a la presencia inconsistencias que dificultan el entendimiento del fenómeno, siendo altamente dependiente de cómo se incorpora la física del problema.

Liu, Ersson, Jönsson y Gan [7] realizaron una comparación formal de los modelos Euleriano y Lagrangiano comparando los parámetros de ambos modelos entre sí y con modelos físicos. Encontraron que en el patrón de flujo fuera de la zona de la pluma no hay efecto del tamaño de burbuja y frecuencia de inyección tanto en la aproximación E-E como E-L. No obstante, dentro de esta, sí hay notable efecto en la velocidad axial en el eje de inyección, pues la velocidad calculada fue sobreestimada entre un 80-160% en ambos enfoques. Para el caso Lagrangiano, el patrón de inyección no afecta significativamente en la disipación de la turbulencia (en el caso de que la inyección sea simétrica). Si lo que se varía es el tamaño de partícula, se encuentra que, a menor diámetro, mayor es la velocidad axial, sin causar tanto impacto en la disipación de la turbulencia. Finalizan con la conclusión de que tanto para E-E como E-L, entre más pequeño sea el diámetro, más alta será la velocidad y la disipación de energía cinética turbulenta. Guo, Gu y Irons[16] en el 2002 realizaron una de las primeras discusiones acerca de la debilidad de una aproximación completamente Euleriana de la olla que al no ser definida la interface entre las burbujas y la fase continua, se debe cuidar la difusión numérica en regiones sin partículas. Implementaron el modelo Lagrangiano (E-L) para dos sistemas bifásicos diferentes, uno con agua y otro con la aleación metal Woods líquida (Bi-Pb-Sn-Cd), ambos con la presencia de una fase de aire, llevando a cabo la validación con mediciones experimentales en los modelos físicos correspondientes. Compararon resultados matemáticos y los experimentales; en cuanto a la fracción de gas obtuvo buena concordancia entre los resultados con una ligera sobre estimación en el fondo del baño. En cuanto a velocidades, alcanzaron buenos resultados tanto en el baño líquido como en la pluma, a excepción de una ligera subestimación en el fondo. Finalmente concluyen que el modelo Lagrangiano es más sencillo y favorable para cuantificar cambios en la física de las burbujas.

Ya con la fluidodinámica del baño, características de la pluma y mezclado tanto químico como térmico de la olla ampliamente estudiados y caracterizados; el incremento en la demanda de acero

con el menor contenido de impurezas posible aumentó en consecuencia, el interés por los fenómenos de la interacción acero-escoria. Gracias a la aproximación Lagrangiana y por medio de emplear el Modelo de Fase Discreta (*DPM* por sus siglas en inglés), ha sido posible estudiar los procesos derivados de la interacción acero-escoria; los cuales son nombrados a continuación:

- Transferencia de masa
- Remoción de inclusiones
- Formación de ojo de escoria
- Emulsión y atrapamiento de escoria

La relación del nivel de impurezas en el baño líquido y la interfase acero-escoria reside en que es en esta zona interfacial donde ocurre el proceso de desulfuración. El proceso de desulfuración es crítico ya que el azufre (S) es una de las impurezas más dañinas en los aceros (el contenido de Azufre no debe ser mayor 0.1%) pues la formación de sulfuros como el FeS disminuye sus propiedades mecánicas e induce la fragilización del acero durante el trabajo en caliente. El S presente en el baño líquido cercano a las inmediaciones de la escoria reacciona con el Calcio y Magnesio que esta contiene, formando sulfuros que, por las condiciones químicas de la misma escoria, son absorbidos en ella. El movimiento de recirculación inducido por la inyección de gas por el fondo es el que transporta contantemente fluido hacia la zona superior de la olla. Este fluido además de contener impurezas como el ya mencionado azufre, tiene la presencia de inclusiones no metálicas que no reaccionan con la escoria, pero sí se incrustan en ella y son removidas.

El efecto del ascenso de burbujas de gas y por ende el constante choque de partículas con la escoria provoca un rompimiento de esta fase en la parte superior del baño que, aunado a la transferencia de momentum de las burbujas al baño, desplaza la escoria hacia las paredes del reactor por efecto de las corrientes formadas en la parte superior del *spout* [Figura 1.9]; dando paso a la formación del ojo de escoria. Un alto nivel de apertura del ojo puede ser perjudicial para la calidad del acero ya que permite la exposición del acero líquido a la atmósfera pudiendo ocasionar la oxidación del baño y la disminución de su temperatura.

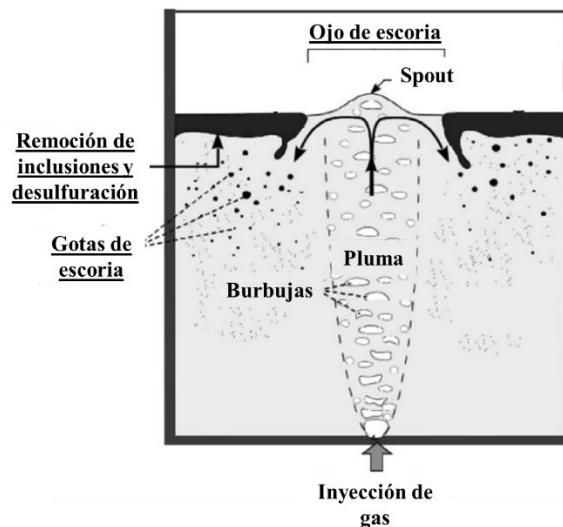


Figura 1.9. Esquema de los fenómenos que ocurren en la escoria. Adaptado de [17].

La corriente de acero líquido generada en la interfase acero-escoria más cercana al *spout* provoca el arrastre de escoria hacia abajo que gradualmente, y por encima una velocidad crítica, desprende gotas de escoria del cuerpo principal. Lo anterior modifica el área interfacial donde ocurre la reacción de desulfuración y, por ende, modifica la cinética de la reacción. Si los brazos formados se separan por completo de la escoria formando gotas que incluso pueden llegar a ser transportadas al seno del fluido por las corrientes de acero líquido (como se puede observar en la Figura 1.9), se considera que se formó el fenómeno de atrapamiento de escoria que es perjudicial para la calidad del acero al propiciar la presencia de inclusiones no metálicas.

A continuación, se presentan los avances que se han obtenido usando la aproximación Lagrangiana en sistemas acero-escoria-gas (fase discreta), especialmente en algunos de los procesos arriba mencionados.

En 2011 Liu, Qi y Xu[18] estudiaron en un sistema de olla industrial el efecto de la configuración de tapones (número y posición) y nivel de flujo sobre el tiempo de mezclado, apertura del ojo de escoria e interacción acero-escoria; esto mediante el modelo matemático empleando VOF-DPM-($k-\epsilon$). Encontraron que a bajos flujos, el ojo no se forma mientras que un alto flujo apertura el ojo, incrementa la velocidad interfacial y propicia la desulfuración. En cuanto a la configuración de tapones, se recomienda emplear dos tapones a 180° , puesto que en caso de usar uno a flujos altos, es posible que se produzca el atrapamiento de escoria. También se recomiendan que en un proceso donde las condiciones de inyección de gas *se mantengan prácticamente constantes, en algún punto se debe comprometer la desulfuración para asegurar la no re-oxidación del acero*, esto por medio de dividir el flujo en dos plumas débiles que reducen la velocidad interfacial y la deformación de la escoria. El gran aporte que realizan es la recomendación de emplear distintas condiciones de inyección dependiendo la etapa en que se encuentre el proceso de horna olla, empezando por la inyección de gas con un solo tapón a flujo alto para la etapa de desulfuración, luego, para la etapa media recomienda el uso de dos tapones a 90° a flujo alto y en la etapa final emplear los dos tapones a 180° con flujo bajo sin ojo para terminar de mezclar y con pequeñas burbujas favorecer la remoción de inclusiones.

Para 2015, Li, Liu, Cao y Li [19] emplearon el VOF-DPM-LES (*Large Eddy Simulation*) para simular un modelo físico de agua con N_2 inyectado por medio de tapones porosos a escala 1/3 e investigar el movimiento de las burbujas y la formación de la apertura del ojo de escoria. En esta investigación concluyeron que en la fluctuación de la escoria y ojo se encuentra un fenómeno multifásico complejo turbulento y transitorio con gran número de *eddies* en un amplio rango de escalas de tamaño y tiempo. El uso de LES para modelar la turbulencia permite obtener flujos más complejos y patrones de flujo más adecuados. Expresan que la agregación y rompimiento de la burbuja raramente sucede en la burbuja durante su ascenso, por lo que usa diámetro uniforme de partícula. En los resultados obtuvieron buena concordancia en la apertura de escoria y el atrapamiento. Se termina concluyendo que las burbujas inducen Eddies en la región cercana a la pluma que hacen que la interfase acero-escoria fluctúe rompiendo la escoria en gotas, principalmente a flujo altos de inyección de gas. Complementando esta investigación, en 2016 Li y Li[20] analizaron adicionalmente la distribución de diámetro y coalescencia de burbujas, concluyendo de igual forma que las *eddies* son las causantes de la apertura de ojo y el atrapamiento. Finalmente, propone un mecanismo por el cual ocurre la apertura-cierre del ojo de escoria a flujos muy bajos.

En 2018 Cao y Nastac [21][22] simularon en tres dimensiones un sistema acero-escoria-argón mediante los modelos VOF-DPM-($k-\epsilon$). Estudiaron el efecto de considerar la coalescencia expansión y rompimiento de burbujas, así como la configuración de los tapones (número y posición) sobre la

fluidodinámica de la olla, el tiempo de mezclado químico y la apertura del ojo de escoria. Llevaron a cabo una validación por separado en un modelo de agua a escala 1/3, la cual también le fue útil para demostrar que los efectos de la expansión de burbuja son despreciables en modelos físicos de agua, dada la corta altura y diferencia de densidad del agua al acero (resultando en menor presión estática que la industrial), este fenómeno no se alcanza a desarrollar en el modelo en agua fría, no así en la olla real donde este fenómeno sí ocurre y que también se pudo observar en el resto de sus resultados.

Respecto a la configuración de los tapones de inyección, se obtuvo el tiempo de mezclado más largo con un tapón céntrico y el menor con dos tapones excéntricos. El ojo de escoria es de mayor tamaño cuando hay solo un tapón. En cuanto a los patrones de flujo obtenidos, cuando la inyección es con un solo tapón excéntrico, se produce una recirculación mayor que homogeniza más el patrón. Adicionalmente, confirmaron que la consideración de presencia de escoria afecta el tiempo de mezclado, dado que la deformación de esta consume parte de la energía proporcionada por el gas. Al ser este un artículo de investigación bastante amplio y completo con diversas variables y efectos, sobre todo la fluidodinámica obtenida mediante modelo DPM, en la Figura 1.10 se presenta un diagrama donde se resumen los resultados de la variación de los diversos parámetros empleados en la fluidodinámica, tiempo de mezclado y características de burbuja de la olla.

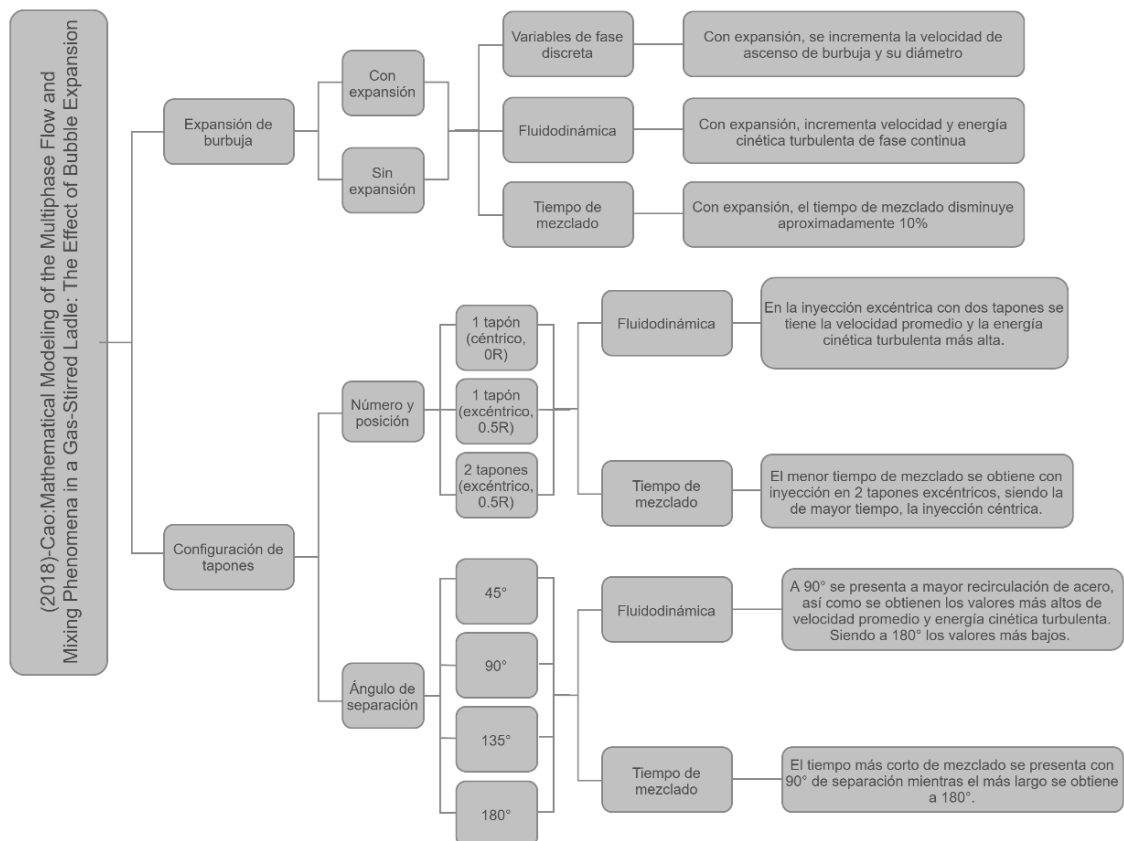


Figura 1.10. Resultados obtenidos por Cao a partir de modelar matemáticamente un sistema acero-escoria-argón.

En 2018 Duan, Ren y Zhang [23] llevaron a cabo un análisis de las fuerzas interfaciales consideradas para las burbujas de gas. Evaluaron el efecto de la fuerza de arrastre, la fuerza de empuje, la fuerza de masa virtual y el gradiente de presión.

Efecto de la fuerza de arrastre: Esta es la fuerza interfacial dominante. Actúa en oposición al movimiento relativo de la burbuja, siendo la principal resistencia al ascenso de esta. La fuerza de arrastre es cuantificada y corregida por el coeficiente de arrastre. Duan obtuvo que el coeficiente de arrastre tiene poca influencia en la forma de la pluma, pero afecta en gran medida el campo de velocidad y la fracción volumen a lo largo del eje de inyección.

Efecto de la fuerza de empuje: Esta fuerza se origina de los gradientes de velocidad de la partícula en el flujo cortante y el efecto de vórtice. Esta fuerza es perpendicular al movimiento de las burbujas. Quedó claro que el empuje tiene mucha influencia en la forma de la burbuja, pues al incrementar el coeficiente, el ancho de pluma también lo hace, provocando que se expanda esta; sin embargo, reduciéndose la velocidad axial del fluido y la fracción volumen.

Efecto de la masa virtual: Es la fuerza de resistencia que toma en cuenta la aceleración del líquido desplazado por las burbujas. El gradiente de velocidad entre ambas fases es muy pequeño por lo que comúnmente no se toma en cuenta. En el estudio se varió el coeficiente de masa virtual entre 0 y 1. Si se desestima la fuerza de masa virtual, la velocidad axial es sobreestimada. Al incrementar esta, la velocidad vertical disminuye.

Efecto del gradiente de presión: La diferencia de presión en la superficie de la burbuja incrementa el gradiente de presión. Esta última es principalmente gobernada por el diámetro adimensional, el número de Reynolds y la relación de densidades de las fases. Se encontró que la fuerza de gradiente presión es relevante solo para pequeñas relaciones de densidad. Esta fuerza se puede despreciar.

Efecto de la turbulencia inducida por las burbujas: La producción adicional de turbulencia de las burbujas hacia el fluido, es igual al trabajo de corte aplicado en la fase continua. El término fuente de energía cinética turbulenta por unidad de volumen está directamente ligado con el coeficiente de turbulencia inducida por las burbujas (C_{nk}), la cual es relativa al tamaño de burbuja, forma y escala de turbulencia. Al incrementar el valor de la constante, disminuye el valor de la velocidad axial y la fracción volumen, pues cuando se eleva la turbulencia inducida, se promueve la expansión de la pluma, facilitando la disipación de la energía cinética turbulenta.

Finalmente, Duan probó la simulación de una olla de 150 toneladas, obteniendo buena concordancia con las mediciones experimentales disponibles; y hace mención a que el volumen de las burbujas aumenta por la disminución de la presión ferrostática y la pluma se abre gracias a la fuerza de empuje y la turbulencia inducida.

En 2020 Cao y Nastac [24] por medio del software ANSYS Fluent cuantificaron el proceso de desulfuración tomando en cuenta la reoxidación de elementos aleantes en un sistema de horno olla industrial. Para esta acción tomaron en cuenta el flujo de fluidos, la turbulencia y el área interfacial de la zona acero-escoria. Las predicciones de composición de acero y desulfuración bajo el efecto de la inyección de gas por el fondo fueron buenas; sugiriendo además que la adición de aluminio y óxido de calcio favorece la reacción de desulfuración del acero.

En la Tabla 1.6 se muestra un concentrado de modelos y suposiciones físicas de las investigaciones llevadas a cabo bajo el marco de referencia Lagrangiano para la fase discreta. Se puede apreciar que el modelo DPM ha sido principalmente aplicado a simulaciones de sistema real de horno olla, acoplándolo con el modelo de turbulencia k- ϵ .

Tabla 1.6. Resumen de principales suposiciones y modelos empleados en estudios considerando DPM (Modelo de Fase Discreta).

Año	Autores	Sistema	Geometría	Fase discreta				Fases continuas		
				Material	Modelo	Consideraciones	Fuerzas actuando en partícula	Materiales	Modelo	Modelo de turbulencia
2002	Guo, Gu, Irpns[16]	Modelo físico de agua ($\lambda=1/3$)	2D	Aire	DPM	Partícula esférica sin distribución de tamaño	Fuerza boyante Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual	Agua/Aceite	Euleriano	k- ϵ
2011	Liu, Qi, Xu[18]	Olla industrial	3D	Argón	DPM	Partícula no esférica con distribución de tamaño	Fuerza boyante Fuerza de arrastre	Acero/Escoria	VOF	k- ϵ Estándar
2015	Li, Liu, Cao, Li[19]	Modelo físico de agua ($\lambda=1/3$)	3D	Nitrógeno	DPM	Partícula esférica sin rompimiento ni coalescencia	Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Agua/Aceite	VOF	LES
2016	Li, Li[20]	Modelo físico de agua ($\lambda=1/3$)	3D	Nitrógeno	DPM	Partícula esférica con coalescencia	Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Agua/Aceite	VOF	LES
2018	Cao y Nastac[22]	Olla industrial	3D	Argón	DPM	Partícula no esférica con distribución de tamaño	Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Acero/Escoria	VOF	k- ϵ Realizable

Año	Autores	Sistema	Geometría	Fase discreta				Fases continuas		
				Material	Modelo	Consideraciones	Fuerzas actuando en partícula	Materiales	Modelo	Modelo de turbulencia
2018	Cao, Nastac[21]	Olla industrial	3D	Argón	DPM	Partícula no esférica con expansión, rompimiento y coalescencia	Fuerza de arrastre Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Acero/Escoria	VOF	k-ε Realizable
2018	Duan, Zhang, Thomas, Conejo [25]	Olla industrial	3D	Argón	DPM	Partícula esférica con distribución de tamaño	Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Acero/Escoria	Euleriano	k-ε Estándar
2018	Duan, Ren, Zhang[23]	Olla industrial	3D	Argón	DPM	Esférico con distribución de tamaño	Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Acero/Escoria	Euleriano	k-ε Estándar
2019	Liu, Ersson, Liu, Jönsson, Gan[7]	Modelo físico de agua	3D	Aire	DPM	Partícula no esférica con coalescencia	Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Agua (sin escoria)	VOF	k-ε Realizable
2020	Tyulenev et al.[26]	Olla industrial	3D	Argón	DPM	no especificado	Fuerza boyante de Fuerza de arrastre	Acero/Escoria	VOF	k-ε Estándar
2020	Cao y Nastac[24]	Olla industrial	3D	Argón	DPM	Partícula no esférica con expansión, rompimiento y coalescencia	Fuerza de arrastre Fuerza de empuje Fuerza de masa virtual Fuerza boyante Gradiente de presión	Acero/Escoria	VOF	k-ε Realizable

Como queda claro, el empleo de la aproximación Lagrangiana para a resolución de la fase discreta en ollas agitadas con gas ha ido en aumento y se han realizado nuevos avances en las investigaciones respecto a la zona de la interfase acero-escoria, logrando caracterizar de buena manera la fluidodinámica del baño. No obstante, como se aprecia en la revisión de la literatura presentada, los resultados obtenidos a través del enfoque Lagrangiano, y más específicamente el Modelo de Fase Discreta, todavía no han llevado a una clara resolución y cuantificación de los fenómenos en la región de la escoria de la olla, sobre todo del fenómeno de emulsión, el cual afecta directamente la cinética de reacción del proceso de desulfuración.

Esta es la razón por la que en el presente trabajo se buscó implementar el Modelo de Fase Discreta, pues este modelo permite una descripción más adecuada de los procesos en la interfase acero-escoria, además tener una formulación más simplificada y tener una mayor eficiencia computacional.

1.5 Hipótesis

La combinación de aproximaciones numéricas VOF-DPM-LES podrá predecir con realismo las interacciones acero-escoria gas y predecir con mejor concordancia las mediciones de velocidad y turbulencia cerca de la intercara acero-escoria y que potencialmente servirá para predecir fenómenos de emulsión e intercambios metal-escoria.

1.6 Objetivo

Desarrollar un modelo matemático con los algoritmos VOF-DPM-(k- ϵ) para ollas agitadas con gas e implementarlo en el software ANSYS FUENT®.

1.6.1 Metas

- Plantear y convergir un modelo matemático de una olla agitada con inyección céntrica de gas; usando el enfoque Lagrangiano acoplado con VOF y k- ϵ .
- Validar el modelo al comparar los resultados calculados con los obtenidos en nuestro grupo en trabajos previos.

2. METODOLOGÍA

2.1 Modelo físico

El modelo matemático usado para estudiar la olla se basa en un modelo físico de un horno olla industrial de 140 toneladas. Este modelo físico se encuentra escalado geoméricamente a $\lambda=1/17$, y ha sido previamente estudiado en el grupo de trabajo mediante técnicas experimentales para caracterizar la dinámica de fluidos en diferentes condiciones de inyección, específicamente con la utilización de la técnica de Velocimetría de Partículas por Imágenes (*PIV* por sus siglas en inglés).

El modelo experimental está constituido de material acrílico, y consta de un cilindro embebido en una chaqueta en forma de prima rectangular, la cual tiene función meramente experimental para evitar aberraciones ópticas causadas por la curvatura del modelo. El sistema que como tal representa al horno olla es el cilindro, el cual contiene las fases que son modeladas y que en este caso particular se trata de un sistema agua-aceite-aire, modelando el sistema industrial de acero-escoria-gas inerte. En la Figura 2.1 se aprecia una representación en 3 dimensiones del modelo físico sobre el que se basó esta investigación.

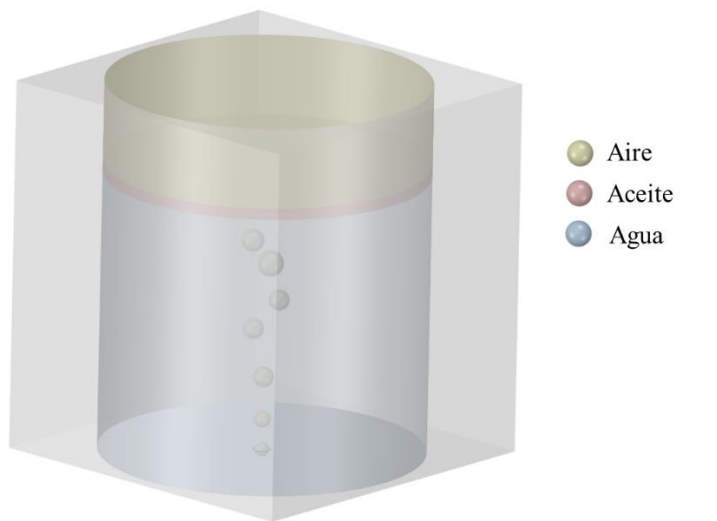


Figura 2.1. Representación 3D del sistema físico empleado.

Previamente López [27] llevó a cabo la obtención de los parámetros de trabajo mediante el uso de los criterios de similitud geométrica, dinámica y cinemática entre el modelo físico y el sistema industrial, los cuales más adelante se detallan.

2.2 Geometría y suposiciones

El sistema del modelo físico tiene dimensiones que fueron obtenidas a partir de hacer un escalamiento de factor 1/17 de horno olla de 140 toneladas, obteniendo de este modo, la altura escalada del baño líquido y el correspondiente espesor de escoria que representa el 4% de altura del baño líquido [Tabla 2.1].

Tabla 2.1. Dimensiones de horno olla de 140 ton y el correspondiente modelo físico a escala 1/17.

Reactor	Altura de modelo (H) [m]	Altura del baño (H) [m]	Diámetro [m]	Espesor de escoria [m]	D_{inlet} [m]
Modelo físico	0.219	0.1648	0.0945	0.0066	0.005
Horno Olla (prototipo)	3.736	3.736	3.226	0.1122	-

Para la elección de la porción del modelo físico a simular en el software, se tomó en consideración la inyección de aire por el fondo en el centro del modelo. Esta posición de inyección permite considerar que el sistema tiene axisimetría y, como resultado de esto, es posible considerar solo la mitad del plano frontal del modelo físico, como se representa en la Figura 2.2a donde se presenta una vista superior de la posición del plano modelado y en la Figura 2.2b se representa frontalmente el plano con un esquema de la inyección de aire en el fondo con el consecuente ascenso de las burbujas y la formación de una pluma en la zona cercana al eje de simetría

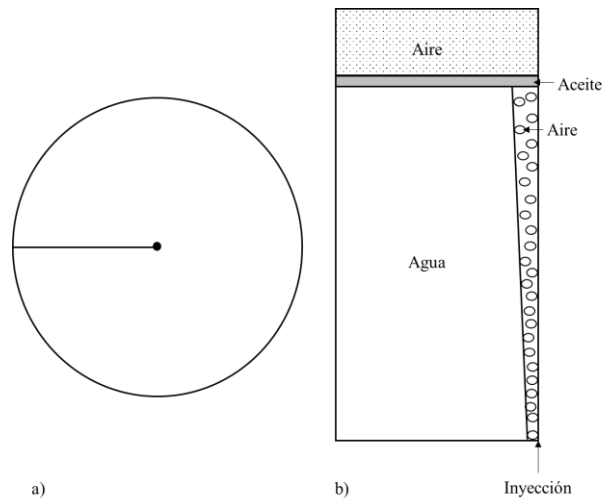


Figura 2.2. Esquema del proceso a) Vista superior b) Vista lateral.

Tomando en cuenta ciertas consideraciones antes explicadas y las condiciones bajo las que se llevó a cabo la experimentación, es posible enlistar las siguientes suposiciones de trabajo sobre el sistema:

- Sistema bidimensional
- Sistema axisimétrico
- Paredes impermeables con condición de no deslizamiento
- No hay transferencia de masa
- Sin transferencia de energía, modelo isotérmico a 25°C
- Todas las fases son newtonianas e incompresibles (Propiedades constantes de los fluidos)
- Estado pseudo-transitorio
- Inyección céntrica
- Inyección de partícula desde tiempo cero
- Diámetro de burbuja constante

- La recirculación de aire propicia que el sistema sea de tipo turbulento
- Hay intercambio de momentum entre la fase discreta y las fases continuas
- La fuerza de arrastre y boyante son las principales fuerzas actuando sobre la burbuja

Pese a que en un sistema real de horno olla, la viscosidad puede variar en función de su composición química, temperatura y presencia de sólidos y llegar a considerarse “no newtoniano”, el modelo físico sobre el cuál este trabajado está basado emplea aceite de motor que tiene comportamiento Newtoniano; por lo que, para llevar a cabo la validación del presente modelo matemático, es necesario considerar la escoria como Newtoniana.

El "estado pseudo transitorio" es un enfoque numérico empleado en el software de simulación ANSYS Fluent para resolver problemas que implican transitorios de tiempo en flujos fluidos. Este enfoque permite simular fenómenos transitorios de manera más rápida y eficiente, evitando la necesidad de resolver cada paso de tiempo completo. el método pseudo transitorio divide el intervalo de tiempo total en pasos más pequeños y realiza iteraciones dentro de cada paso. Cada iteración se basa en la solución del sistema de ecuaciones de flujo en estado estacionario, pero con ciertas adaptaciones para tener en cuenta los cambios transitorios en las condiciones de flujo, añadiendo un término derivativo temporal a las ecuaciones de Navier-Stokes en estado estacionario. El uso del estado pseudo transitorio puede ser especialmente útil en casos donde la evolución a largo plazo del sistema es lo que se busca comprender con mayor profundidad.

En cuanto al diámetro de burbuja, cuando se trabaja en modelos físicos a escala, la corta altura del baño impide el desarrollo de fenómenos como expansión, rompimiento y coalescencia de burbujas de aire, por lo que estos fenómenos son tomados como despreciables con base en el sistema físico de trabajo.

2.3 Ecuaciones gobernantes

Para el presente caso se implementó el enfoque E-L para el modelado de una fase discreta (aire) en una fase continua (agua) contando con la presencia de una capa de escoria (aceite de silicón) en la parte superior del baño.

2.3.1 Fase continua

En este sistema existen 3 fases continuas, el agua que asemeja al acero, el aceite que actúa como escoria y el gas de la atmósfera. Para la descripción matemática de la fluidodinámica de estas fases se empleó como base el modelo de Volumen de Fluido (VOF) que es una simplificación del modelo Euleriano completo.

Modelo acoplado de Volumen de Fluido - Level-set (VOF)

El VOF es un modelo que aproxima el comportamiento fluctuante y complejo de los procesos mediante el uso de las ecuaciones de Navier-Stokes promediadas (RANS por sus siglas en inglés), cuyo resultado es el promediado en el tiempo de las variables fluctuantes; esto significa que las velocidades obtenidas de las ecuaciones de conservación no representan valores instantáneos sino promedio en el tiempo, como se establece en la Ecuación 2.1.

Ecuación 2.1

$$u = \bar{u} + u'$$

Donde u es la velocidad instantánea, \bar{u} es la velocidad promediada en el tiempo y u' es la fluctuación de la velocidad.

Con fines pragmáticos en el presente trabajo, las velocidades promedio son escritas de forma simple, u ; indicando el tipo de velocidad considerada cuando la aclaración sea necesaria.

Este modelo es de utilidad para analizar las interacciones en interfases de tipo continuo-continuo entre fases que son inmiscibles entre ellas; sin embargo, a pesar de tener la virtud de presentar buena conservación de la fracción volumen de las fases, la resolución de la interfase no es adecuada. Para mejor estimación de la curvatura de intercaras y de la fuerza de tensión superficial, se emplea el método Level-Set, con el fin de realizar la reconstrucción y formación de interfases.

El monitoreo del contenido de las fases continuas implica obtener la fracción volumen de cada una de las fases, esto a través de resolver la ecuación de conservación de masa para $N-1$ fases o las fases secundarias (Ecuación 2.2).

Ecuación 2.2

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \bar{u}_q) = 0$$

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

La fracción volumen de la fase primaria no es calculada a través de la ecuación de conservación de fracción volumen, sino que se obtiene de la relación en la Ecuación 2.3.

Ecuación 2.3

$$\sum_{q=1}^N \alpha_q = 1$$

Donde N es el número de fases presentes en el sistema y q es la q -enésima fase.

La curvatura de las intercaras (representación gráfica que muestra cómo se distribuyen las diferentes fases en el dominio de simulación de la celda) se evalúa a través de la evolución, en el espacio y tiempo, de la función de nivel level-set que se muestra en la Ecuación 2.4.

Ecuación 2.4

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{u}_{fp} \varphi) = 0$$

Donde φ es la función level-set y \bar{u}_{fp} es la velocidad de la fase ponderada, explicada a detalle más adelante.

A diferencia del modelo VOF donde las derivadas espaciales de las fracciones volumen son tomadas en cuenta para la reconstrucción de la interfase; level-set es una función suave y continua, derivable en cada punto espacial. Su definición se encuentra en la Ecuación 2.5

Ecuación 2.5

$$\varphi(x, t) = \begin{cases} +|d| & \text{si } x \in \text{fase primaria} \\ 0 & \text{si } x \in \text{interfase} \\ -|d| & \text{si } x \in \text{fase secundaria} \end{cases}$$

Donde d es la distancia desde la interfase.

Existe una función para cada interfaz que puede existir dependiendo del número de fases, es decir, si hay 3 fases, lo más que se pueden generar son dos funciones que, en caso de coincidir al mismo tiempo en un mismo elemento, en ese volumen de control se generarán 2 funciones level-set.

Gracias a la mejor resolución de las intercaras, esta función es aceptable para modelar fenómenos interfaciales como la fuerza de tensión superficial, la cual se define en este método como se muestra en la Ecuación 2.6.

Ecuación 2.6

$$\vec{F}_{sf} = \sigma \kappa \delta(\varphi) \vec{n}$$

Donde \vec{F}_{sf} es la fuerza de tensión interfacial, σ es el coeficiente de tensión interfacial, κ es la curvatura de la interfase, $\delta(\varphi)$ es una función dependiente de φ y \vec{n} es el vector normal a la curvatura.

El vector normal, la curvatura de la interfase y la función dependiente de φ se encuentran definidas de la Ecuación 2.7 a la Ecuación 2.9.

Ecuación 2.7

$$\vec{n} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \Big|_{\varphi=0}$$

Ecuación 2.8

$$\kappa = \nabla \cdot \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \Big|_{\varphi=0}$$

Ecuación 2.9

$$\delta(\varphi) = \begin{cases} 0 & |\varphi| \geq a \\ \frac{1 + \cos\left(\frac{\pi\varphi}{a}\right)}{2a} & |\varphi| < a \end{cases}$$

Donde a es el espesor de la interfase.

Propiedades de los materiales

En el modelo VOF, con excepción de la ecuación de conservación de la fracción volumen, se resuelve un solo set de cada ecuación de conservación; esto significa que todas las fases comparten campo de velocidad y turbulencia; lo anterior es llevado a cabo por medio de obtener las propiedades de los materiales ponderadas con base en la fracción volumen, por ejemplo, la densidad y viscosidad [Ecuación 2.10].

Ecuación 2.10

$$\phi_{fp} = \sum \alpha_q \phi_q$$

Donde ϕ_{fp} es la propiedad ponderada.

Ecuación de continuidad y de conservación de momentum

Se resuelve una sola ecuación de continuidad, sin transferencia de masa; tomando en cuenta el campo de velocidad compartido por todas las fases (\vec{u}_{fp}) y la densidad ponderada (ρ_{fp}) [Ecuación 2.11].

Ecuación 2.11

$$\nabla \cdot (\rho_{fp} \vec{u}_{fp}) = 0$$

Para el caso de momentum, se calcula la solución de un solo set de ecuaciones. En la Ecuación 2.12 se presenta dentro del enfoque RANS, la forma general de la ecuación considerada, de la cual, en este caso, se resolvieron dos ecuaciones en sistema axisimétrico, aquella en dirección z y la correspondiente a la dirección radial.

Ecuación 2.12

$$\nabla \cdot (\rho_{fp} \vec{u}_{fp} \vec{u}_{fp}) = -\nabla p_{fp} + \nabla \cdot \left(\mu_{fp} [(\nabla \vec{u}_{fp} + \nabla \vec{u}_{fp}^T)] \right) + \rho_{fp} \vec{g} - \vec{F}_{sf} + \vec{F}_T - \rho_{fp} \nabla (\overline{u'_{fp} u'_{fp}})$$

Donde ρ_{fp} es la densidad ponderada, $\nabla \vec{u}_{fp}$ es el gradiente de la velocidad de las fases en el volumen de control, p_{fp} es la presión del sistema, μ_{fp} es la viscosidad ponderada, \vec{g} es la gravedad, \vec{F}_{sf} es la fuerza de tensión superficial entre fases, \vec{F}_T son fuentes externas de momentum y $\overline{u'_{fp} u'_{fp}}$ es el esfuerzo de Reynolds.

La influencia de la fase discreta en la fase continua está dada por \vec{F}_T , dado que las fuentes externas de momentum provienen del balance de fuerzas considerado en la ecuación de trayectoria de las burbujas, detallado más adelante.

Una forma de modelar el esfuerzo de Reynolds es mediante la hipótesis de Boussinesq, que relaciona este esfuerzo con el gradiente de la velocidad de la fase continua, utilizando la viscosidad turbulenta, que se encuentra en función de la energía cinética turbulenta y la rapidez de disipación de energía cinética turbulenta [Ecuación 2.13].

Ecuación 2.13

$$-\rho_{fp} \nabla (\overline{u'_{fp} u'_{fp}}) = \mu_t \left(\frac{\partial u_{fp,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial u_{fp,j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho_{fp} k_{fp} + \mu_t \frac{\partial u_{fp,k}}{\partial x_k} \right) \delta_{ij}$$

Donde μ_t es la viscosidad turbulenta, k_{fp} es la energía cinética turbulenta, δ_{ij} es la delta de Kronecker y i,j,k son los índices de la dirección del componente del vector.

Modelo de turbulencia

Para esta simulación se consideró del modelo k- ϵ Realizable para cuantificar la turbulencia. En la Ecuación 2.14 y Ecuación 2.15, se resuelve la ecuación de continuidad para la energía cinética turbulenta (k) y la rapidez de dispersión de energía cinética turbulenta (ϵ), compartiendo todas las fases en cada elemento de control, el valor de estas variables.

Ecuación 2.14

$$\nabla \cdot (\rho_{fp} k_{fp}) = \nabla \cdot \left(\left(\mu_{fp} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \nabla k_{fp} \right) + G_k - \rho_{fp} \epsilon_{fp} + S_k$$

Donde k_{fp} es la energía cinética turbulenta, μ_t es la viscosidad turbulenta, σ_k es el número de Prandtl, G_k es un término de generación de k_p por efecto del gradiente de la velocidad media de la fase

continua, ϵ_{fp} es la rapidez de dispersión de energía cinética turbulenta y S_k es un término fuente de los efectos de la fase dispersa en la energía cinética turbulenta.

Ecuación 2.15

$$\nabla \cdot (\rho_{fp} \epsilon_p) = \nabla \cdot \left(\mu_{fp} + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_{fp} \right) + \rho_{fp} C_1 S_\epsilon - \rho_{fp} C_2 \frac{\epsilon_{fp}^2}{k_{fp} + \sqrt{\nu \epsilon_{fp}}} + c_s S_k$$

Donde σ_ϵ es el número de Prandtl, C_1 , C_2 y c_s son constantes del modelo, ν es la viscosidad cinemática turbulenta y S_ϵ es un término fuente de los efectos de la fase dispersa en la rapidez de dispersión de la energía cinética turbulenta.

La condición de Realizable se aplica al tratar C_μ (de la Ecuación 2.16) variable en lugar de constante al hacer el cálculo de la viscosidad turbulenta, μ_t

Ecuación 2.16

$$\mu_t = \rho_p C_\mu \frac{k_{fp}^2}{\epsilon_{fp}}$$

Donde C_μ es un coeficiente del modelo.

De la Ecuación 2.17 a la Ecuación 2.20 se presenta los cálculos necesarios para cerrar el sistema de ecuaciones para la resolución de las ecuaciones correspondientes a las fases continuas.

Ecuación 2.17

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_s \frac{kU^*}{\epsilon}}, \quad A_0 = 4.04$$

Ecuación 2.18

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

Ecuación 2.19

$$U^* = \sqrt{S_{ij} S_{ij}}$$

Ecuación 2.20

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

Donde A_0 y A_s son constantes del modelo, U^* es coeficiente del modelo y S_{ij} es el tensor de rapidez de deformación.

El efecto de las burbujas en el campo de turbulencia de las fases continuas se encuentra cuantificado conforme a la Ecuación 2.21. Este es un modelo desarrollado para el cálculo de la fuente de momentum que existe en un sistema de ‘*spray*’ líquido-gas[28].

Ecuación 2.21

$$S_k = -\frac{1}{V_{cell} \Delta t} \sum_{p \in i, j, k} N'_p \frac{4}{3} \pi \rho_d (r_p)^3 (u_p^t - u'_p) \cdot u'_{fp}$$

Donde S_k es el término fuente de momentum generado por la turbulencia de las partículas, V_{cell} es el volumen de celda, Δt es el paso de tiempo, N'_p es el número de partículas, ρ_d es la densidad de partícula, r_p es el radio de partícula, u_p^t es la velocidad de partícula, u'_p es la velocidad de partícula como consecuencia de colisión y rompimiento de partículas y u'_{fp} es la velocidad fluctuante de la fase continua.

2.3.2 Fase discreta

Para la fase discreta fue usada una aproximación de resolución Lagrangiana que se cimienta en la Segunda Ley de Newton [Ecuación 2.22]; en la cual donde se realiza un balance de fuerzas actuando sobre la partícula discreta o, en este caso, la burbuja formada al inyectar aire.

Ecuación 2.22

$$m_p a_p = \sum F$$

Donde m_p es la masa de burbuja, a_p es la aceleración de burbuja y $\sum F$ es la suma de las fuerzas actuando sobre la burbuja.

En este conjunto, se engloban generalmente 5 principales tipos de fuerza que puede llegar a considerarse que actúan sobre la partícula de gas inyectada en modelos de ollas [Ecuación 2.23].

Ecuación 2.23

$$\sum F = F_D + F_B + F_G + F_{VM} + F_L + F_P$$

Donde F_D es la fuerza de arrastre, F_B es la fuerza boyante, F_G es la fuerza de gravedad, F_{VM} es la fuerza de masa virtual, F_L es la fuerza de empuje y F_P representa el gradiente de presión.

Ecuación de trayectoria

Realizando la combinación de la Ecuación 2.22 y Ecuación 2.23 y expresándola en su forma diferencial, se obtiene la ecuación de trayectoria de la burbuja que es posible representarla de la forma que se muestra en la Ecuación 2.24

Ecuación 2.24

$$\frac{du_p}{dt} = T_D(\vec{u}_{fp} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho_{fp})}{\rho_p} + \vec{F}_x$$

Donde \vec{u}_p es la velocidad de partícula, t es el tiempo de partícula, T_D es un término que involucra el arrastre de partícula, \vec{u}_{fp} es la velocidad de la fase continua, \vec{g} es la gravedad, ρ_{fp} y ρ_p son la densidad del líquido y de la partícula respectivamente y \vec{F}_x es una expresión donde se puede considerar el efecto de otras fuerzas adicionales.

En el ascenso de una partícula de gas a través de una fase líquida por su inyección desde el fondo; la fuerza de arrastre, la fuerza de cuerpo gravitacional y la fuerza boyante son de suma importancia y siempre son consideradas. En la Ecuación 2.24, el término $T_D(\vec{u}_{fp} - \vec{u}_p)$ cuantifica la fuerza de arrastre por unidad de masa, $\frac{\vec{g}(\rho_p - \rho_{fp})}{\rho_p}$ es el término que relaciona la fuerza de cuerpo y la fuerza boyante por unidad de masa. En la presente investigación, no se consideró el efecto de alguna fuerza adicional sobre las burbujas de aire, es decir, las fuerzas de masa virtual y de empuje (*lift*) fueron despreciadas.

El término que cuantifica el arrastre involucra el inverso del tiempo de relajación de partícula que en la Ecuación 2.25 es el primer cociente de la expresión. El tiempo de relajación de partícula es una medida de qué tan rápido la partícula responde a cambios en el campo de velocidad. El siguiente

cociente engloba el arrastre de la partícula mediante el coeficiente de arrastre y el Reynolds de la partícula.

Ecuación 2.25

$$T_D = \frac{18\mu_{fp}}{\rho_p d_p^2} \cdot \frac{C_D Re}{24}$$

Donde μ_{fp} es la viscosidad dinámica de la fase líquida, C_D es el coeficiente de arrastre, d_p es el diámetro de partícula y Re es el número de Reynolds relativo de la partícula

Ecuación 2.26

$$Re = \frac{\rho_{fp} d_p |\vec{u}_p - \vec{u}_{fp}|}{\mu_{fp}}$$

De la Ecuación 2.25 es necesario hacer el cálculo del coeficiente de arrastre C_D dependiendo del modelo que se elija y las suposiciones que se tomen en cuenta.

Modelos de arrastre

Las burbujas en elevación libre tienden a deformarse como consecuencia del balance de esfuerzos normales y de corte en la interfase aire-agua. Cuando las burbujas se encuentran en elevación libre, la variedad de formas geométricas que pueden adoptar se encuentran limitadas a 3 tipos: esférico, elipsoidal y esférico de capucha[6]. El tipo de forma en el que se presenten las partículas dependerá de la relación de fuerzas viscosas, inerciales y de tensión superficial en la intercara partícula-medio continuo y cuál de estas fuerzas sea la dominante en la burbuja. La forma de partícula es crucial para el cálculo de la fuerza de arrastre que experimenta la burbuja; a partir de la cual, se han desarrollado diversos modelos de arrastre. Los modelos de arrastre más actuales modifican considerablemente el método de cálculo del coeficiente de arrastre dependiendo del régimen en el que se encuentre la partícula.

En el software FLUENT® existen varios modelos para obtener el valor del coeficiente de arrastre, C_D . Esencialmente, estos mecanismos se encuentran subdivididos en 3 regímenes: viscoso, distorsionado y esférico-capucha. Dependiendo del régimen donde se encuentre la burbuja, es el tipo de consideración que los modelos contemplan para el cálculo del coeficiente de arrastre. En la Tabla 2.2 se presentan 3 de estos modelos: Esférico, Ishii-Zuber y Grace.

Tabla 2.2. Principales modelos de arrastre para fase discreta disponibles en FLUENT®.

Régimen	Modelo		
	Esférico	Ishii-Zuber	Grace
Viscoso (Esférico)		$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2}$	

Distorsionado	$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2}$	$C_D = \frac{2}{3}\sqrt{Eo}$ $Eo = \frac{g\Delta\rho d_p^2}{\sigma}$	$C_D = \frac{4 g d_p \Delta\rho}{3 U_\infty^2 \rho_{fp}}$ $u_\infty = \frac{\mu_{fp}}{\rho_{fp} d_p} Mo^{-0.149} (J - 0.857)$ $Mo = \frac{\mu_{fp}^4 g \Delta\rho}{\rho_{fp}^2 \sigma^3}$ $J = 0.94 H^{0.757} \quad 2 < H \leq 59.3$ $J = 3.42 H^{0.441} \quad H > 59.3$ $H = \frac{4}{3} Eo Mo^{-0.149} \left(\frac{\mu_{fp}}{\mu_{l,ref}} \right)^{-0.14}$
Esférico-capucha	$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2}$		$C_D = \frac{8}{3}$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre, a_1 , a_2 y a_3 son coeficientes empíricos, Re es el número de Reynolds, Eo es el número de Eotvos, $\Delta\rho$ es la diferencia de densidades, σ es la tensión superficial fase discreta-fase continua g es la gravedad, d_p es el diámetro de partícula, U_∞ es la velocidad terminal de partícula, μ_1 es la viscosidad dinámica de la fase continua, Mo es el número de Morton, J y H son coeficientes que dependen de las condiciones de partícula y $\mu_{l,ref}$ es el viscosidad dinámica del agua a las condiciones de referencia.

El modelo esférico considera la totalidad de los volúmenes de partícula como esféricos, variando entre cada régimen, ciertas constantes empíricas. Para el modelo Ishii-Zuber, se toma en cuenta el efecto de la tensión superficial agua-aire (en este caso) para determinar el arrastre en el régimen distorsionado. Finalmente, el modelo seleccionado, Grace, considera para la simulación, además de la tensión superficial partícula-medio continuo, la forma de las partículas; esto por medio de los números adimensionales Eotvos y de Morton respectivamente.

Una vez conocidas todas las variables involucradas en la Ecuación 2.24 es posible obtener la velocidad de partícula, su trayectoria y el balance de fuerzas actuando sobre la burbuja. Esto último es de importancia ya que es el medio por el que se examina la influencia de la fase dispersa a la fase continua, al evaluar el cambio de momentum en la partícula al pasar a través del volumen de control [Ecuación 2.27].

Ecuación 2.27

$$\vec{F}_b = \sum_i^{Nb,cell} \left(\frac{18\mu_{fp} C_D Re}{24\rho_{fp} d_p^2} (\vec{u}_p - \vec{u}_{fp}) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho_{fp})}{\rho_p} + \vec{F}_x \right) Q_i^s \Delta t$$

Donde \vec{F}_b es el cambio de momentum a través del volumen de control, Q_i^s es el flujo másico de la i -ésima partícula y Δt es el paso de tiempo de la partícula.

Este cambio de momentum es añadido en las ecuaciones de momentum de la fase continua, como un término fuente; modelando de esta forma la interacción fase dispersa-fase continua.

Para la obtención de la trayectoria de la partícula se realiza la integración numérica de la Ecuación 2.24 con la sustitución de las correspondientes fuerzas actuando sobre la partícula.

Interacción turbulenta

Debido a la presencia de turbulencia en la fase continua, las partículas de la fase discreta se dispersan afectando su trayectoria (interacción fase continua → fase discreta). FLUENT© cuenta con una herramienta de cálculo de esta modificación de trayectoria, la cual se basa en el cálculo de las velocidades instantáneas del fluido, se trata del ‘*Discrete Random Walk Model*’ (DRW). En este modelo se busca asemejar la interacción de una secuencia de *eddies* del fluido con una partícula.

El cálculo general de trayectoria de partícula en el software se hace por medio de emplear la velocidad media del fluido (\bar{u}) en la integración de la Ecuación 2.24, sin embargo, al utilizar el modelo DRW, la trayectoria se calcula usando la velocidad instantánea (u) de la burbuja. A través de la energía cinética turbulenta, se obtiene el tensor de inercia turbulenta [Ecuación 2.28], el cual se considera isotrópico y que está en función de la velocidad fluctuante.

La distribución de los valores de velocidad fluctuantes obtenidos para diferentes partículas varía conforme a una distribución de probabilidad Gaussiana [Ecuación 2.29]. El término obtenido se incorpora en la Ecuación 2.1 y se obtiene un nuevo valor de velocidad instantánea para trazar la trayectoria.

Ecuación 2.28

$$\sqrt{u'^2} = \sqrt{v'^2} = \sqrt{\frac{2k}{3}}$$

Donde $\sqrt{u'^2}$, $\sqrt{v'^2}$ son el tensor de inercia turbulenta.

Ecuación 2.29

$$u' = \zeta \sqrt{u'^2}$$

Donde ζ es un valor de distribución normal Gaussiana de números aleatorios

2.4 Condiciones de frontera y condiciones iniciales

Parte primordial de la definición del sistema es establecer las condiciones de frontera e iniciales para delimitar adecuadamente el problema. La condición inicial del modelo es un sistema trifásico agua-aceite-aire en reposo, con velocidad cero en todas las fases, previo a la inyección de aire por el fondo. La distribución inicial de las fases se aprecia en la Figura 2.3; de igual forma, en la misma figura se visualiza la disposición de las de fronteras del sistema.

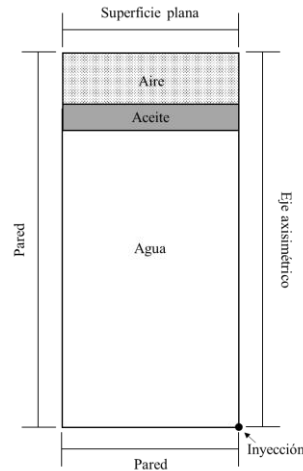


Figura 2.3. Condiciones de frontera del sistema

Las fases del modelo físico se encuentran contenidas físicamente en un contenedor de plexiglás y, conforme al plano considerado en el modelo matemático, estas están en contacto directo con este material, las cuales son la pared lateral y la pared del fondo. En el plano de simulación existe un eje axisimétrico a través del cual no hay flujo de materia (entrada o salida) perpendicular a este. Estas fronteras del sistema se encuentran especificadas en la Tabla 2.3.

Tabla 2.3. Condiciones de frontera especificadas en el marco de referencia Euleriano.

Frontera	Condición para transporte de momentum	Condición para transporte de masa	Condición para DPM
Superficie plana	Esfuerzo de corte especificado	Impermeable	Escape
Pared del modelo	No deslizamiento	Impermeable	Choque inelástico
Fondo del modelo	No deslizamiento	Impermeable	Choque inelástico

Las paredes adicionalmente consideran la función pared estándar para el cálculo de la turbulencia. En la parte superior del modelo, en la superficie plana, fue especificado el esfuerzo cortante y rugosidad como cero.

La introducción de la fase discreta en el sistema se quedó estipulada por medio de un punto de inyección sencillo, justo en la intersección de la pared inferior y el eje axisimétrico. Las condiciones de frontera e iniciales de la burbuja en su entrada al sistema son determinadas por las propiedades de inyección de aire, las cuales se encuentran especificadas a continuación:

Posición de inyección (m,m): (0,0)

Diámetro de partícula (m): 0.01

Velocidad de entrada (m/s):	0
Flujo de inyección (kg/s):	9.3×10^{-6}
Tiempo de inicio de inyección (s):	0
Tiempo final de inyección (s):	3000

Las burbujas son consideradas partículas inertes, para las cuales la trayectoria es calculada individualmente, sin considerar colisión entre partículas ni fenómenos de coalescencia y rompimiento en ellas.

En cuanto a la salida del sistema de la burbuja, aunque fue especificado que al momento de que la partícula impacte con la superficie plana superior, la trayectoria y aportes de momentum de esta deje ser calculada, aún existe la posibilidad de que estas partículas no lleguen hasta esta superficie y queden en recirculación dentro del modelo así que, para contrarrestar este efecto, se elaboró una UDF (*User Defined Function*) para la remoción de partículas una vez que estas se encuentren en la fase superior de aire, la cual se puede consultar en el

ANEXO C: UDF para remover partículas.

2.5 Propiedades de los materiales

Es importante detallar las propiedades físicas de los materiales porque estas son en gran parte las que dictaminan las fuerzas que actúan en el sistema, por ejemplo, son de gran importancia en la estimación de los números adimensionales.

El sistema trifásico general usado en la tesis consistió en agua-aceite-aire. En algunos casos el tipo de aceite fue variado para analizar los efectos que causaba. En la Tabla 2.4 se presentan las propiedades físicas del agua y el aire, los cuales estuvieron presentes en todos los casos de estudio; y en la

Tabla 2.5 se presentan las propiedades de los diferentes aceites considerados en la presente investigación. Para la elección de los diferentes aceites a modelar se buscó que el rango de propiedades fuera amplio, considerando valores más altos y bajos de los que poseían las propiedades del aceite de silicón A, usado en la experimentación del modelo físico.

Tabla 2.4. Propiedades de los materiales para las fases continuas presentes en todos los casos.

Material	Densidad [Kg/m ³]	Viscosidad dinámica [Kg/(ms)]	$\sigma_{\text{agua-aire}}$ [N/m]
Agua	998.2	0.001	0.0719
Aire	1.225	1.79x10 ⁻⁵	

Tabla 2.5. Propiedades de los distintos materiales usados para la fase escoria

Material	Densidad [Kg/m ³]	Viscosidad dinámica [Kg/(ms)]	$\sigma_{\text{escoria-aire}}$ [N/m]	$\sigma_{\text{escoria-agua}}$ [N/m]
Aceite de silicón A	800	0.08	0.02	0.05
Aceite de Silicón B	926	0.06	0.02	0.05
IF30	943.7	0.76	0.03	0.03
Isoparafina	819.8	0.01	0.03	0.03
Keroseno	815.9	00.02	0.03	0.04
Lubricante industrial	909.7	0.07	0.03	0.01

2.6 Solución numérica

El aumento de poder computacional disponible para investigación ha incrementado el uso de esta herramienta para el desarrollo de avances en diversas áreas, el uso específico de ella en el estudio de fluidos recibe el nombre de Dinámica de Fluidos Computacional (CFD por sus sigla en inglés), y es que las ecuaciones gobernantes planteadas difícilmente son resueltas por métodos analíticos, por lo que se emplean métodos numéricos que usan la discretización para realizar una aproximación a la

solución; en ellos las ecuaciones diferenciales parciales no lineales que gobiernan el sistema son aproximadas por un sistema de ecuaciones algebraicas lineales más sencillas de resolver[29].

Existen diversos métodos de solución numéricos en CFD que puede ser categorizados con base en el tipo de discretización que se hace sobre el dominio. El software ANSYS®, usado en esta investigación, mediante el módulo FLUENT® emplea el Método de Volumen Finito (FVM por sus siglas en inglés) para el análisis de fluidos. Este método consiste en crear un número definido de volúmenes de control en el dominio, resolviendo los campos de interés en el centro de las celdas de cálculo e interpolando los valores en las fronteras de cada volumen, lo que lo diferencia de otros métodos[30].

2.6.1 Dominio de cómputo y malla

El cuerpo fue dibujado en el módulo DesignModeler® del software ANSYS®, mediante el rectángulo que representa el plano de medición que fue antes especificado, colocando el eje axisimétrico sobre el eje x y la pared inferior del modelo sobre el eje y. Posteriormente se generó la malla en el complemento Meshing®. En la Figura 2.4a se observa el esquema de la geometría del plano formado y las fronteras nombradas en el programa Meshing®. En la Figura 2.4b se realiza un acercamiento al mallado en la zona de la escoria que cuenta con una refinación de malla sobre todo en la intercara agua-aceite y a lo largo de la región próxima al eje de simetría.

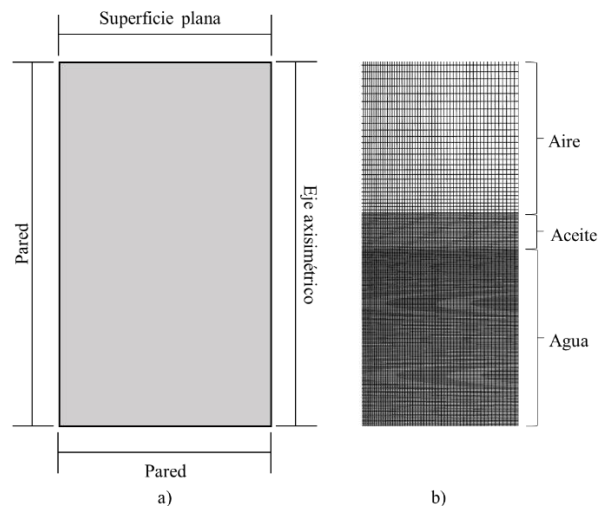


Figura 2.4. Estructuras obtenidas en DesignModeler® y Meshing® a) Geometría y fronteras b) Acercamiento a la malla a la zona de la escoria

Se llevó a cabo un estudio preliminar de análisis de sensibilidad para optimizar el tiempo de cómputo a través de evaluar mallas con diferente cantidad de celdas y seleccionar aquella que garantiza resultados independientes del número de volúmenes discretizados que la conforman. En el ANEXO B: Procesamiento en FLUENT® se desarrolla a detalle este proceso. Como resultado del estudio, se obtuvo que la estructura de malla óptima para el presente trabajo cuenta con 225000 celdas.

2.6.2 Solución en FLUENT

La resolución de las ecuaciones gobernantes planteadas para el modelo sobre el dominio creado y discretizado se llevó a cabo numéricamente mediante el software de CFD ANSYS FLUENT® versión 2021 R1. El equipo de cómputo usado para realizar dicha acción cuenta con un procesador Intel Core i5, 4 núcleos físicos y 12GB de memoria RAM. El tiempo de cómputo fue de aproximadamente 10

horas por cada caso. Para mayor detalle, el set up de este módulo se integra el ANEXO B: Procesamiento en FLUENT.

3. RESULTADOS

3.1 Validación del modelo

Para que sea posible obtener información fehaciente del modelo matemático, es necesario que este sea comparado con mediciones experimentales para asegurar que se está modelando adecuadamente el problema y que arroja resultados que concuerdan con la física real del sistema.

Para efectuar la validación, se realizó la simulación replicando las condiciones experimentales especificadas en los trabajos de López [27] y Mommen [31], en los cuales se realizó la inyección de aire hasta la estabilización del flujo y empleando como fase de escoria el aceite de silicón tipo A, material también usado en los dos trabajos antes referenciados, cuyas propiedades fueron especificadas previamente en la

Tabla 2.5.

Se extrajeron resultados de los perfiles radiales de velocidad axial, velocidad radial y energía cinética turbulenta a cuatro alturas diferentes, las cuales son 4, 8, 12 y 16 cm desde el fondo del modelo. La posición de estas líneas de medición se representa en el esquema de la Figura 3.1. Estos perfiles fueron considerados a razón de los datos experimentales de los que se tuvo disposición, y que experimentalmente fueron considerados como ubicaciones para poder evaluar las variables de respuesta en zonas del modelo con diferentes características fluidodinámicas.

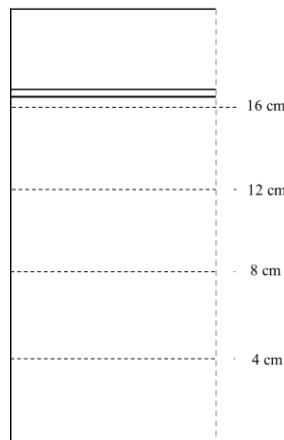


Figura 3.1. Posición de las líneas de medición para hacer la validación del modelo matemático.

El perfil de velocidad axial del agua fue medido a lo largo del radio del modelo a las alturas antes especificadas, obteniendo los resultados de validación que se observan en la Figura 3.2, donde se realiza una comparación de los perfiles radiales de velocidad axial de la simulación y los obtenidos experimentalmente. En las gráficas, la posición cero equivale al centro del baño donde se ubica el eje axisimétrico y, por ende, las burbujas de aire.

En las gráficas de validación de la velocidad axial, se aprecia cómo al incrementar la distancia desde el fondo, en la zona del eje de inyección las curvas del modelo matemático y experimental se asemejan más entre ellas, siendo la altura de medición más baja a 4cm, donde hay mayor diferencia en la región cercana el eje de inyección (0.5 m/s), entre mediciones del modelo experimental y la simulación.

Para el caso específico de la validación, se segmentaron los perfiles graficados en tres zonas para un mejor entendimiento.

La primera región es la correspondiente al centro del modelo con posición radial cero. Físicamente, esta zona corresponde a aquella sobre el eje de inyección y donde el agua tiene contacto directo con las burbujas a través de que el líquido experimenta un arrastre inducido por las burbujas al elevarse por fuerza boyante. En este punto, la velocidad del acero es máxima respecto al resto del modelo. La diferencia de valores para esta zona es evidente en el fondo del modelo a 4cm de altura, que también se aprecia en la Figura 3.3 donde se realiza la comparación de los perfiles de energía cinética turbulenta en la misma posición.

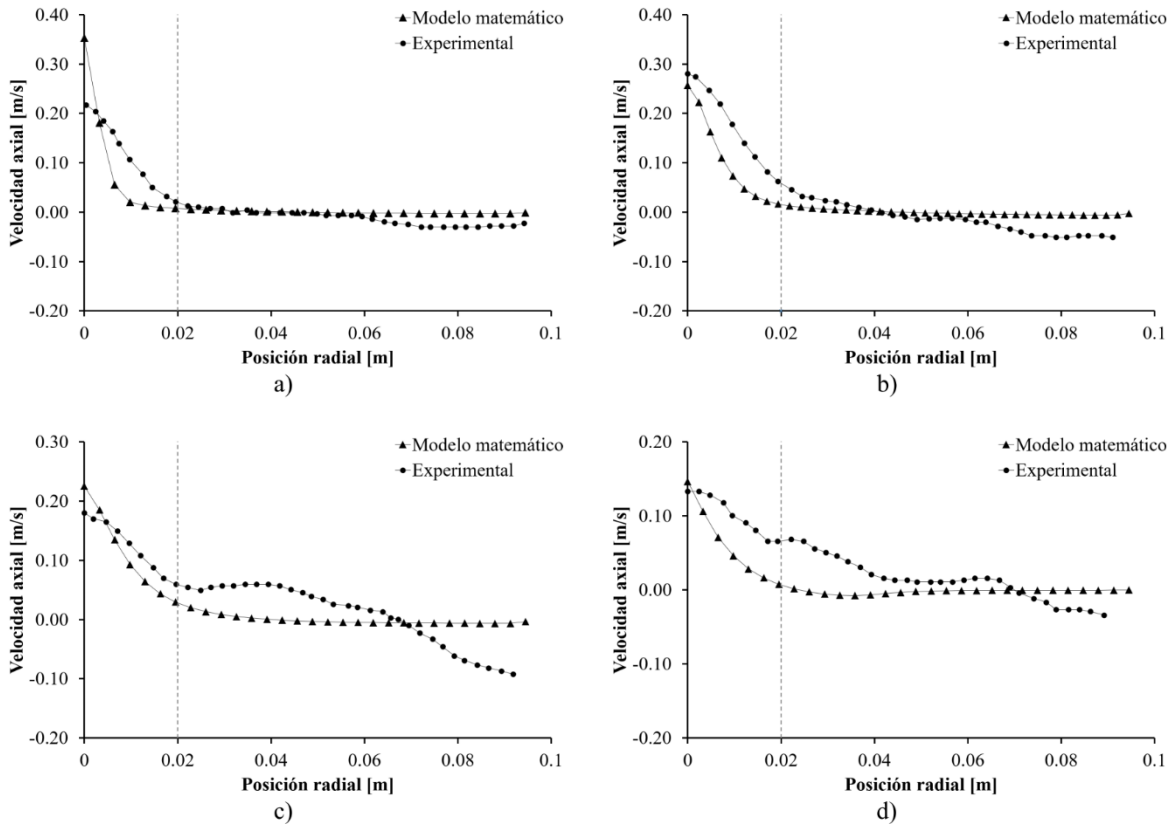


Figura 3.2. Perfil de velocidad axial predicho por el modelo y medido experimentalmente a diferentes alturas del modelo a) 4cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.

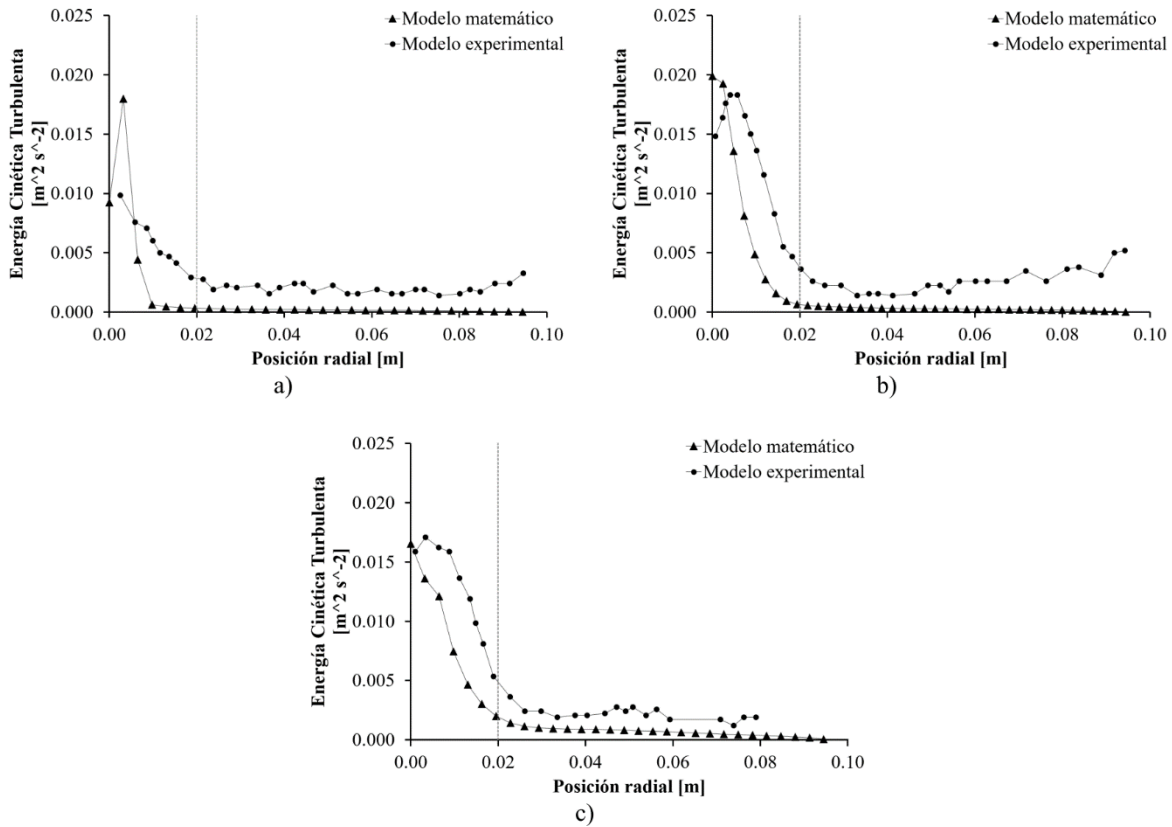


Figura 3.3. Perfil de Energía cinética turbulenta predicho por la simulación y medido experimentalmente a diferentes alturas del modelo a) 4cm b) 8 cm c) 12 cm.

En la segunda región, inmediatamente después del eje de inyección y hasta 2 cm radiales aproximadamente, la velocidad axial va disminuyendo gradualmente de forma lineal con el aumento en el radio. En los perfiles de velocidad en las 2 posiciones más bajas, esta caída de velocidad es más rápida, sobre todo en el fondo del modelo a 4 cm de altura. El desempeño del modelo matemático para este caso tiene buena concordancia en los perfiles radiales de velocidad axial a los 8 y 12 cm, siguiendo la misma tendencia de los datos experimentales, no siendo así en el fondo del modelo ni en el perfil de velocidad más cercano a la superficie [Figura 3.2d], donde los resultados de la simulación están un poco sobre estimados. En cuanto a la comparación de energía cinética turbulenta, se observa que los perfiles radiales simulados en general siguen la misma tendencia que en las curvas experimentales de k , con una ligera sobreestimación por parte del modelo matemático.

En la última zona, aledaña a la pared del modelo físico, la velocidad axial experimental disminuye en las dos alturas de medición más bajas a 4 y 8 cm [Figura 3.2a y Figura 3.2b] coincidiendo en buen grado con los resultados del modelo matemático. En los perfiles a las alturas de 12 y 16 cm, los valores de velocidad experimentales continúan disminuyendo [Figura 3.2d] hasta cambiar el sentido de la velocidad, y por ende del flujo, como consecuencia de la recirculación formada. Por parte de la simulación, los datos obtenidos tienden a ser bajos respecto a los experimentales, presentando una diferencia en la velocidad final del perfil (más cercana a la pared) debido a la condición de no deslizamiento impuesta en la misma y las condiciones de medición complicadas en pared (como a ruido de luz y recorte de imagen). En lo respectivo a la energía cinética turbulenta, k , ambos modelos

presentan tendencia similar con subestimación de k por parte del modelo matemático respecto a la experimentación.

Dado que los valores comparados se encuentran en el mismo orden de magnitud, además del análisis ya hecho donde se observó que ambas curvas (experimental y de simulación) presentan el mismo comportamiento de valor máximo en el eje con un gradual decaimiento conforme hay aproximación a la pared del sistema, se considera que el modelo está validado para poder llevar a cabo estudios.

3.2 Comparación de modelos multifásicos: Euleriano y Lagrangiano

3.2.1 Fluidodinámica

Con el fin de implementar este nuevo enfoque propuesto en este trabajo de usar la técnica DPM+VOF y considerar la conveniencia de emplear este tipo de aproximación matemática, se llevó a cabo una equiparación de los resultados que arrojan la propuesta ya descrita contra la aproximación Euleriana explorada previamente en este grupo.

Como primera comparación se presentan los vectores de velocidad para la olla en la Figura 3.4 para el modelo físico obtenidos experimentalmente por PIV [Figura 3.4a], los obtenidos con el modelo euleriano [Figura 3.4b] y los obtenidos con el modelo Lagrangiano [Figura 3.4c]. Con esta figura es posible analizar la fluidodinámica del agua que está sucediendo en el plano de medición y, al ser este un caso axisimétrico, al mismo tiempo en toda la olla.

Cuando el flujo de aire es inyectado desde el fondo con cierta velocidad inicial e inercia asociada, y entra al líquido, pronto, el movimiento de la burbuja hacia arriba es promovido y gobernado por la fuerza boyante en sentido ascendente como resultado de la baja densidad de este material respecto a la densidad del agua. El movimiento de elevación de la burbuja de aire conlleva a la transferencia de movimiento hacia el líquido que la rodea por la fuerza de arrastre que se establece en la interfase agua-aire. Dicho ascenso por arrastre del líquido hasta la parte superior de la olla y su posterior cambio de dirección en el flujo favorece la formación de un movimiento de recirculación que más adelante será explicado.

Experimentalmente se sabe que la pluma incrementa gradualmente su velocidad desde el fondo hasta aproximadamente la mitad de la altura del baño y posteriormente disminuye su velocidad. En contraste, los modelos matemáticos estiman velocidades que aumentan desde el fondo hasta llegar a un máximo aproximadamente a un cuarto de la altura y se mantiene a esa velocidad hasta la superficie libre. Entonces, la mayor diferencia entre el experimento y la simulación se aprecia en la parte superior de la olla donde la velocidad no presenta disminución en el modelo matemático, esto quiere decir, que en ambos tipos de aproximación numérica la pluma se eleva con una velocidad casi constante.

Cuando el agua llega a la parte superior, el momentum que ésta lleva asociada, es transferido a la capa de aceite que funge como escoria, a raíz de esto se forma un fenómeno conocido como “ojo de escoria” que más adelante será tratado a detalle. La apertura de este ojo implica un arrastre que ejerce la escoria sobre el agua y aunado a esto, el movimiento continuo de agua al llegar a superficie es cambiado a una dirección horizontal con sentido hacia las paredes del modelo que, al llegar a estas, una vez más cambia la dirección y sentido para ahora apuntar hacia el fondo de la olla. El regreso de la fase análoga al acero al eje de inyección completa un ciclo que se conoce como recirculación.

Este movimiento de recirculación es el aprovechado para algunas de las principales funciones de la olla como el mezclado químico y térmico, además del hecho que transporta especies hacia la zona de la escoria donde se remueven inclusiones y se lleva a cabo la desulfuración.

Mientras la zona más activa, en cuanto al movimiento de fluidos se refiere, se encuentra en la parte media y superior de la olla, en el fondo de esta se ubican las zonas denominadas muertas dado que la velocidad es mínima y por ende lo son los fenómenos derivados como el mezclado químico y térmico.

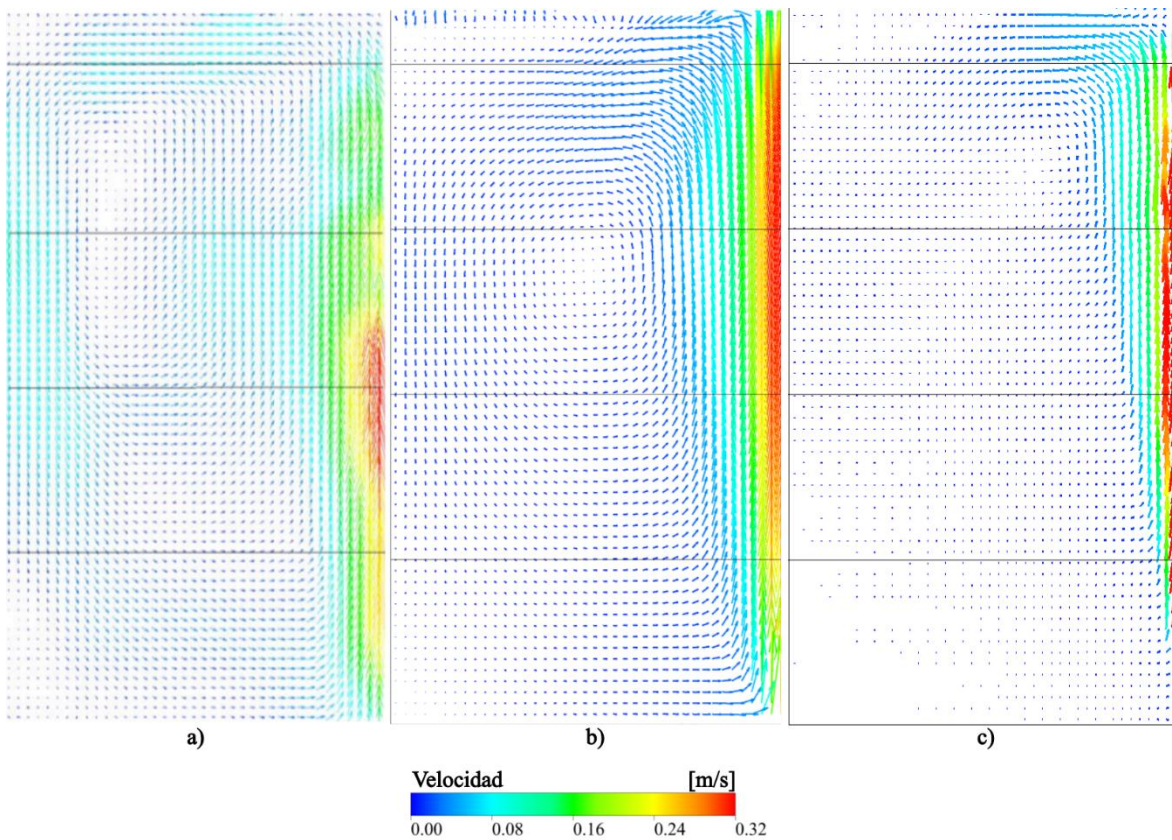


Figura 3.4. Vectores de velocidad de agua para a) Modelo físico experimental obtenido por PIV, b) Modelo matemático con la aproximación Euleriana c) Modelo matemático con la aproximación Lagrangiana.

Para poder realizar una evaluación del desempeño de cada modelo matemático, se realizaron las comparaciones con los resultados experimentales por medio de graficar los perfiles a 4 alturas diferentes de 3 variables: velocidad axial, velocidad radial y energía cinética turbulenta.

En la Figura 3.5 y Figura 3.6 se presentan los perfiles radiales de velocidad axial y radial a 4, 8, 12 y 16 cm. En estos se aprecia que la velocidad axial decrece experimentalmente en el eje de inyección hasta un 50%, sin embargo, la velocidad radial es mínima en este punto.

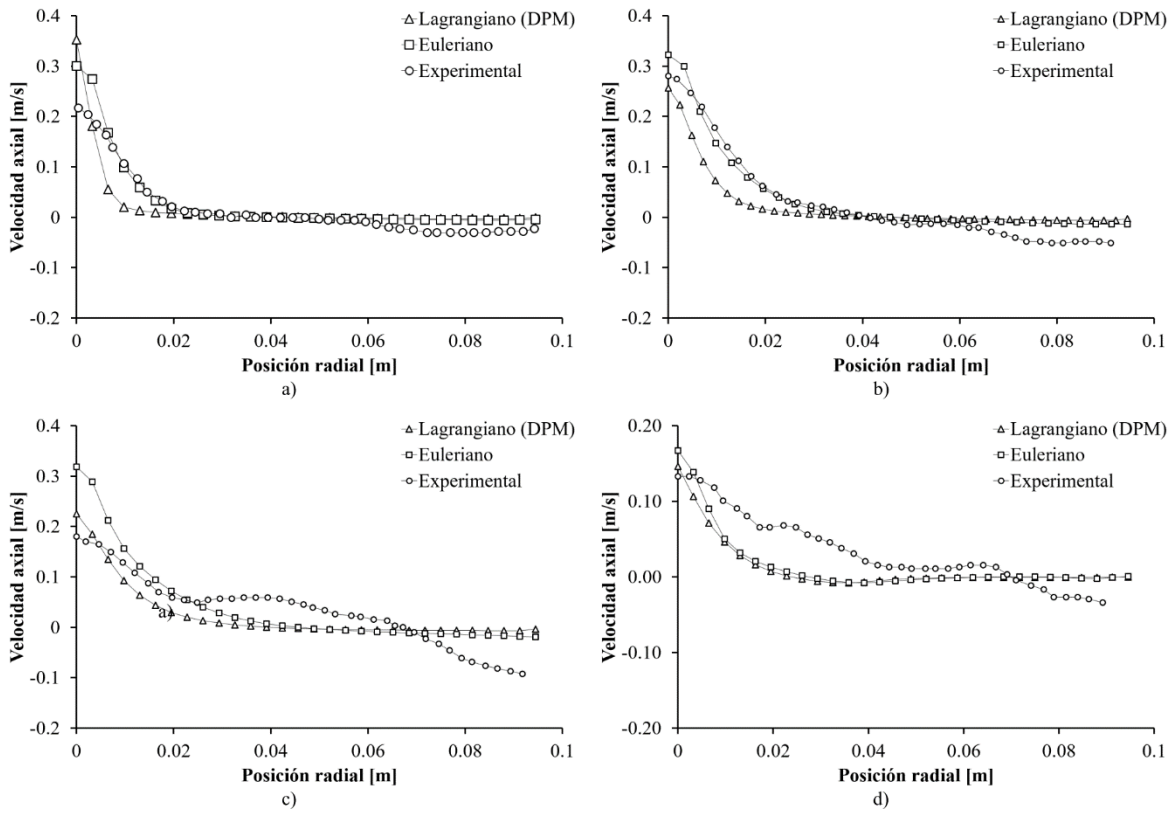


Figura 3.5. Perfiles radiales de velocidad axial para modelo físico medidos experimentalmente, modelo euleriano y modelo lagrangiano a diferentes alturas a) 4 cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.

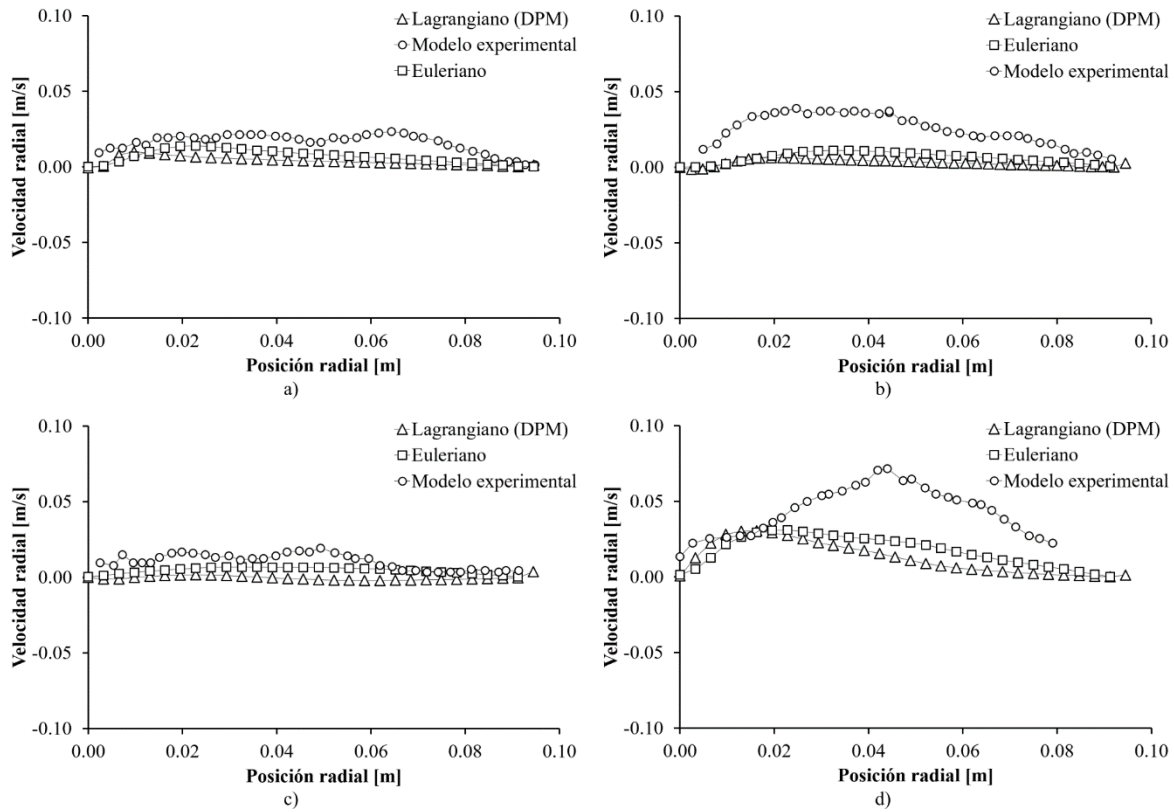


Figura 3.6. Perfiles radiales de velocidad radial para el modelo físico obtenidos experimentalmente. modelo euleriano y modelo lagrangiano a diferentes alturas a) 4 cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.

Pese a que, en los perfiles de velocidad radial, el modelo euleriano presenta una mejor concordancia con los perfiles experimentales, ya que el modelo Lagrangiano tiende a subestimar la velocidad, sobre todo en la parte baja del modelo, cerca de la superficie esta diferencia respecto a los resultados de la aproximación euleriana no es tan marcada, no obstante, ambos modelos subestiman los valores de velocidad radial respecto a las mediciones con PIV.

En cuanto a la velocidad axial, lo que se observa es que las curvas de ambos modelos se empalman con buena correspondencia entre ellas, incluso con la curva experimental los primeros 12 cm de altura, no así a los 16 cm donde ambas simulaciones subestiman la velocidad axial en la zona más cercana al eje de inyección respecto a la medición experimental.

En lo relacionado a la energía cinética turbulenta, esta es una forma de cuantificar las fluctuaciones de la velocidad, en este caso, del agua y a su vez complementando los patrones de flujo ya comentados. Los contornos mostrados en la Figura 3.7 presentan que experimentalmente la turbulencia en la olla está presente principalmente en la zona de la pluma. El incremento de turbulencia comienza unos centímetros por encima de la entrada de aire y prácticamente se mantiene constante hasta la superficie, con cierta expansión de la turbulencia alrededor de la pluma. Las simulaciones, por otro lado, tienden a presentar puntos máximos de turbulencia en la parte baja y superior del modelo, resaltando las zonas donde se presentó una alta velocidad.

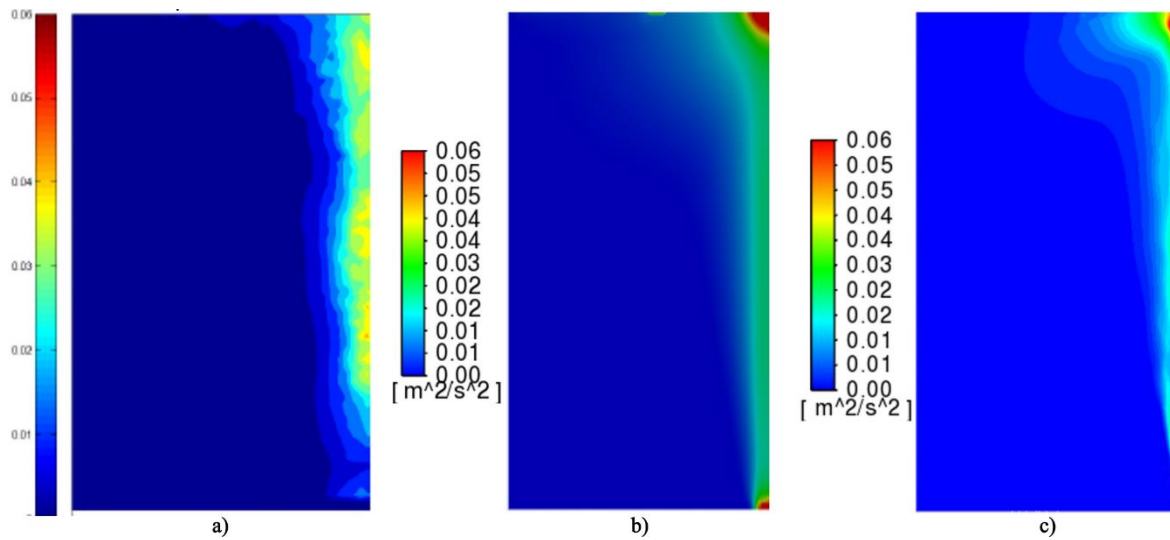


Figura 3.7. Contornos de energía cinética turbulenta para a) Modelo experimental b) Modelo Euleriano c) Modelo Lagrangiano.

Tal como se hizo con la velocidad axial, para la energía cinética turbulenta de igual forma se graficaron los perfiles radiales a 4, 8 y 12 cm de altura desde el fondo [Figura 3.8]. A bajas alturas, los modelos matemáticos sobre estiman la turbulencia medida experimentalmente en la zona de la pluma para, sin embargo, subestimar los valores en el resto del baño. El modelo Euleriano es el que más sobreestima el valor de la turbulencia en la región de la pluma, pero tiene una mejor correspondencia con los resultados experimentales en el resto del baño.

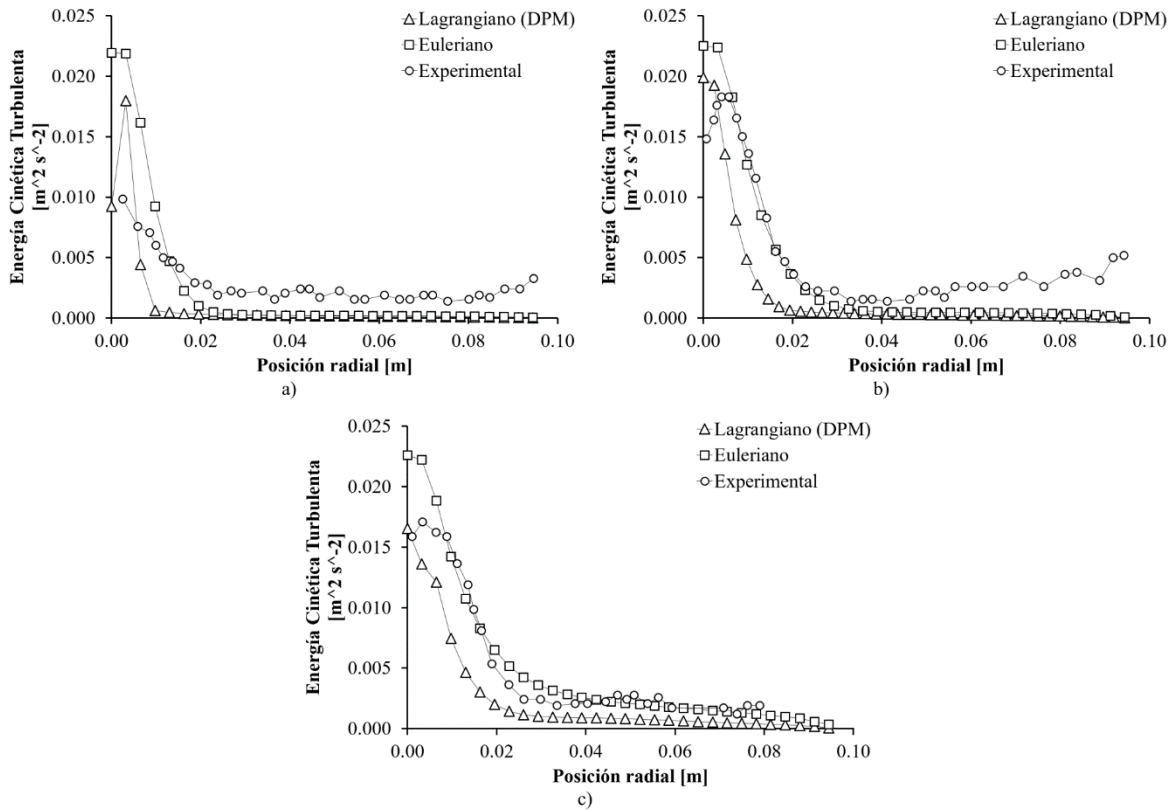


Figura 3.8. Perfiles radiales de energía cinética turbulenta para el modelo físico experimental medido con PIV, modelo euleriano y modelo lagrangiano a diferentes alturas a) 4 cm b) 8 cm c) 12 cm d) 16 cm.

Para finalizar, se efectuó una comparación cuantitativa de los resultados obtenidos con ambos modelos matemáticos, al evaluar el error cuadrático medio (RMSE por sus siglas en inglés) de ambos modelos matemáticos respecto a la experimentación en las 4 alturas evaluadas. En la Ecuación 3.1 se presenta la expresión utilizada para calcular el RMSE en el presente trabajo.

Ecuación 3.1

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_{mat} - X_{exp})^2}{n}}$$

Donde X_{mat} es el resultado a partir del modelo matemático, X_{exp} es el resultado proveniente de la experimentación y n es el número de observaciones.

Este parámetro permite la evaluación del error entre dos conjuntos de datos; en este caso de los datos experimentales y los datos de alguno de los modelos matemáticos. A su vez, el valor obtenido entre dos conjuntos cobra relevancia al compararlo con el error obtenido entre los mismos datos experimentales y el otro modelo matemático; mientras más pequeño sea el valor obtenido de RMSE, el error respecto a los datos experimentales es menor.

Los resultados se concentran en la Tabla 3.1, donde se aprecia que el modelo matemático Lagrangiano es ligeramente superior en la predicción de valores a una altura mayor en cuanto a la velocidad axial, mientras que la aproximación Euleriana presenta mejor predicción de velocidad axial a bajas alturas.

Tabla 3.1. Error cuadrático medio de velocidad axial, velocidad radial y energía cinética turbulenta

Altura [m]	RMSE Velocidad axial [m/s]		RMSE Velocidad radial [m/s]		RMSE TKE [m ² /s ²]	
	Euleriano	Lagrangiano	Euleriano	Lagrangiano	Euleriano	Lagrangiano
0.04	0.023	0.048	0.076	0.076	0.004	0.002
0.08	0.022	0.028	0.096	0.096	0.002	0.003
0.12	0.060	0.053	0.005	0.009	0.002	0.003
0.16	0.031	0.031	0.022	0.028	-	-

Respecto a la velocidad radial, no hay diferencia entre el acercamiento Euleriano y Lagrangiano hasta aproximadamente la mitad del baño, a diferencia de las dos alturas superiores, donde la velocidad radial presenta mejor concordancia con los valores experimentales. Para la energía cinética turbulenta no se observó gran diferencia en los resultados obtenidos con ambos modelos respecto a los datos experimentales, solo considerando una ligera mejor aproximación por parte del modelo Euleriano a 4 cm de altura del baño.

Para finalizar con el análisis de la fluidodinámica, se presenta un esquema comparativo de los errores experimentales de velocidad axial en la Figura 3.9, donde se observa a detalle una mejor distribución de los errores respecto a los valores experimentales (definido en la Ecuación 3.2) a lo largo de los perfiles de evaluación. A pesar de que la Tabla 3.1 es contundente en cuanto a cuál modelo es más exacto en sus resultados en cada altura evaluada; este esquema permite analizar espacialmente el desempeño de ambos modelos.

Ecuación 3.2

$$\% \text{ Error} = \frac{|\varphi_m - \varphi_{\text{exp}}|}{\varphi_{\text{exp}}} * 100$$

Donde % Error es el porcentaje de error, φ_m es el valor de la variable obtenida del modelo matemático y φ_{exp} es el valor de la variable obtenida de los experimentos.

Del mapa de error experimental de velocidad axial se puede apreciar que ambos modelos tienen buena predicción en la zona de la pluma, sin embargo, esta exactitud disminuye hacia la zona del seno del baño, incluso incrementando el error para el modelo Euleriano a $\frac{3}{4}$ de la altura del baño de agua. En la zona próxima a la escoria, existe una diferencia notable entre los errores obtenidos por ambos modelos, siendo menor aquel correspondiente a la aproximación Lagrangiana. En lo que respecta a la zona de la pared de la olla, el modelo Euleriano presenta mayor concordancia con la experimentación.

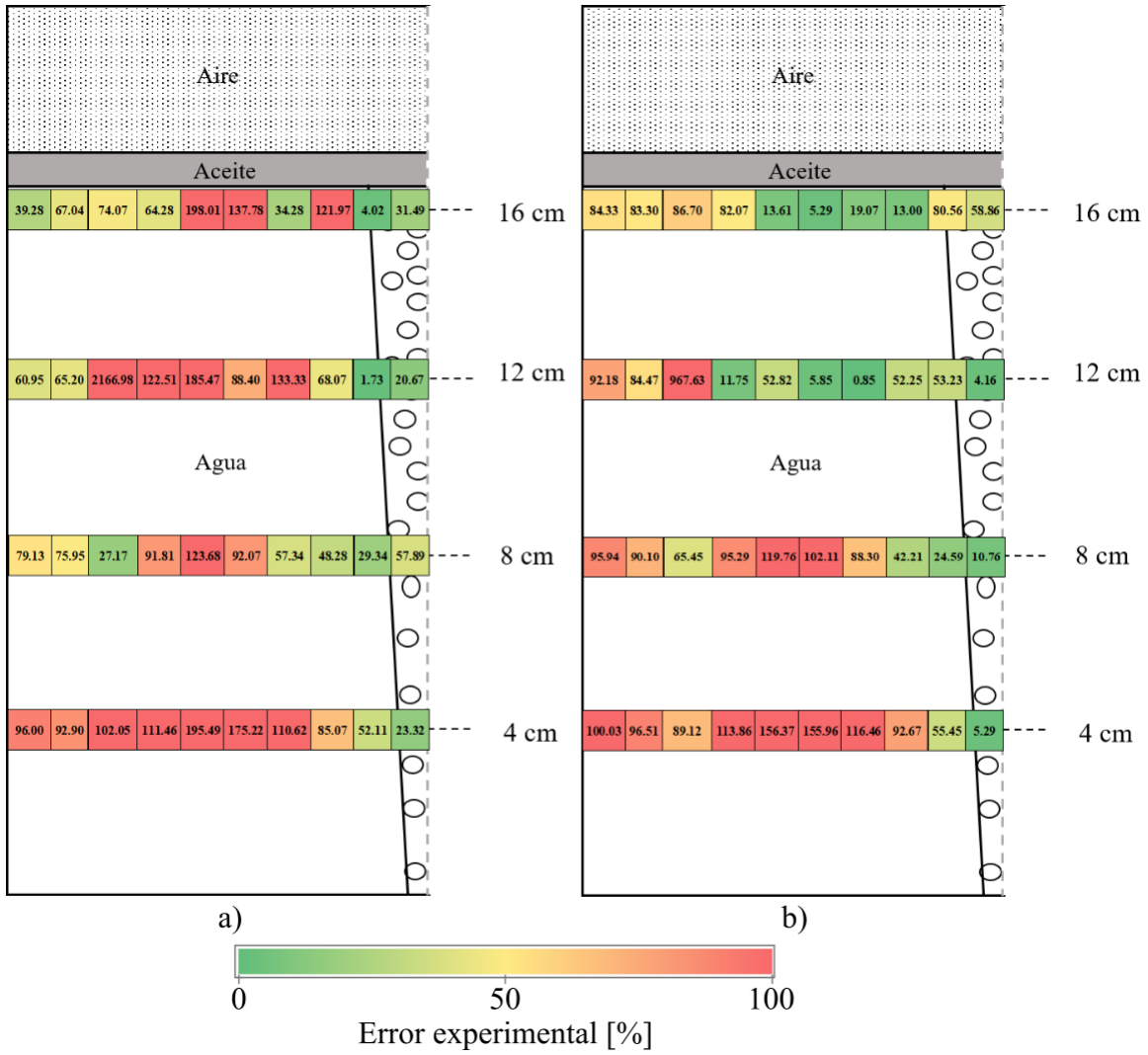


Figura 3.9. Mapa de error experimental de velocidad axial para los modelos matemáticos a) Euleriano b) Lagrangiano.

3.2.2 Ojo de escoria

Como parte natural del proceso, suele aparecer un fenómeno en la superficie libre conocido como ojo de escoria bajo algunas condiciones específicas de operación de la olla.

Por la fuerza boyante con dirección ascendente que las burbujas de gas experimentan, estas continúan elevándose hasta salir del sistema agua-aceite; pasando a través de la capa de escoria. Al aproximarse las burbujas a la parte superior del baño, se comienza a generar un desplazamiento hacia arriba del agua que está siendo empujada por el gas y a su vez formando el *spout* que se observa en la Figura 3.10.

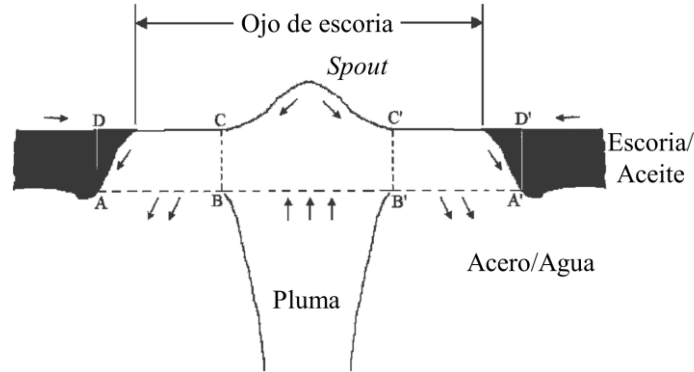


Figura 3.10. Esquema del proceso de formación del ojo de escoria. Adaptado de [10].

Una vez que la burbuja salió del sistema, venciendo la tensión superficial de la escoria y rompiendo la capa de esta; el agua en la parte superior del *spout* regresa con una velocidad que se dirige hacia abajo y hacia las paredes de la olla. Este cambio de la dirección de velocidad del agua provoca un arrastre en la interfase acero-escoria con la misma dirección que el agua, y favorece la apertura del ojo de escoria, que tiene incluso mayor área que el *spout*.

La formación del ojo se ve ampliamente afectada por el flujo de gas, la altura del baño, la densidad de la escoria y el espesor de esta misma, y estas variables definen tanto si es posible la apertura de la escoria como qué tanta es el área de exposición del acero con la atmósfera. Bajo las condiciones de operación consideradas en este caso de estudio, sí fue posible visualizar el ojo de escoria tanto experimental como matemáticamente (con ambos tipos de aproximación numérica).

Desafortunadamente no se contaba con mediciones experimentales existentes del área de ojo bajo la condición de inyección por el centro con un flujo de 2.85 L/min; de manera que fue necesario implementar el modelo matemático con otras condiciones de modelado físico para las cuales sí había mediciones experimentales del ojo de escoria. Estos nuevos parámetros de operación en el modelo físico previamente fueron ampliamente validados y estudiados mediante el enfoque matemático Euleriano. Las condiciones se especifican son: Flujo de gas de 2.22 L/min, Espesor de escoria de 3%, Número de tapones 2, División de flujos entre tapones 50/50, Ángulo entre tapones 180° y Posición de tapones 4/5 r/R.

Al hacer división de flujos y haber dos puntos de inyección, habrá dos ojos de escoria formados. Al elevarse el gas en las proximidades del modelo, al igual que cuando se trata de una sola inyección céntrica, el agua es arrastrada hacia arriba donde al aproximarse a la superficie, comienza a empujar el baño y formando el *spout*. La diferencia en este caso radica en que, al encontrarse la fase gaseosa cercana a la pared, cuando sale del baño, el agua elevada regresa al baño en sentido radial y angular,

como se aprecia en la Figura 3.12. Cerca del *spout* la velocidad es mayor y va disminuyendo conforme se aproxima al eje central del modelo, perpendicular al eje de inyección.

Al generarse los *spouts*, y por la inercia que lleva el agua, la fase oleosa es arrastrada hacia el eje central de la olla. La zona de menor ancho de escoria se encuentra en el eje de inyección, donde hay mayor interacción entre ambas plumas por la posición en que se encuentran, tal como se visualiza en la Figura 3.11. En las zonas del eje central próximas a la paredes, el desplazamiento de escoria es menor debido a que hay menor interacción entre plumas y el desplazamiento de la fase de aceite es mayor al suceder en sentido angular, por lo que no alcanza a ser completamente arrastrada.

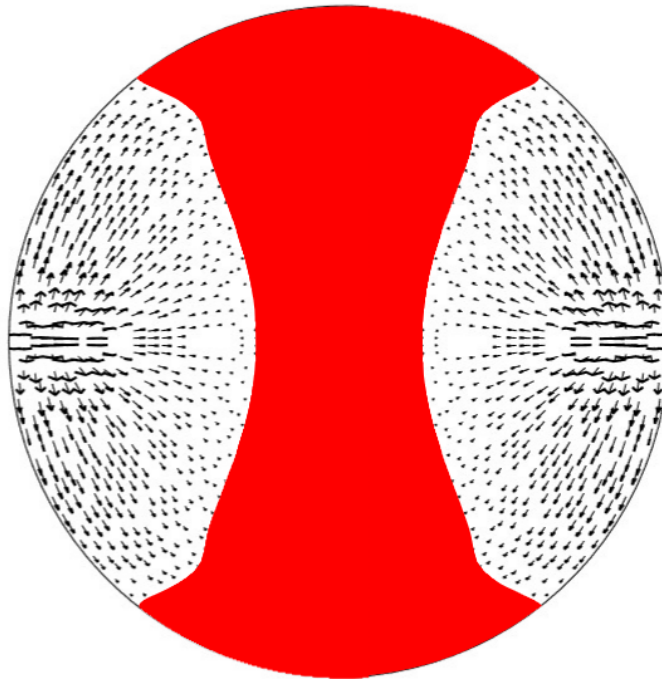


Figura 3.11. Vectores de velocidad sobre el plano de medición del ojo de escoria.

La variable crítica y representativa para el estudio y cuantificación de este fenómeno, es el área de ojo de escoria, que es evaluada mediante el porcentaje de ojo de escoria formado respecto al área total circular del modelo físico. La importancia de este parámetro radica en que, si bien la apertura de escoria puede ser aprovechada para añadir aleantes al acero y propiciar las reacciones de desulfuración, también incrementa el área de exposición del acero a la atmósfera, causando pérdidas de calor y favoreciendo la absorción de oxígeno hacia el acero. En la Figura 3.12a, Figura 3.12b y Figura 3.12c se observan los ojos de escoria para medición experimental, aproximación matemática Euleriana y aproximación matemática Lagrangiana respectivamente. Visualmente se distingue que, ambos modelos matemáticos son muy parecidos al resultado experimental. La Tabla 3.2 contiene el área medida tanto para el experimento como para cada uno de los modelos matemáticos, corroborando cuantitativamente lo que se observa cualitativamente en la Figura 3.12. Como es posible apreciar en los resultados, tanto el enfoque Lagrangiano como el Euleriano subestiman el área del ojo de escoria respecto al valor obtenido experimentalmente, no obstante, se acercan en alto grado al valor experimental, siendo el modelo con aproximación Lagrangiana aquel que presenta menor error con respecto a los datos experimentales, siendo de 1.67% mientras el modelo Euleriano posee un error de cálculo de área de ojos de escoria de 3.17%.

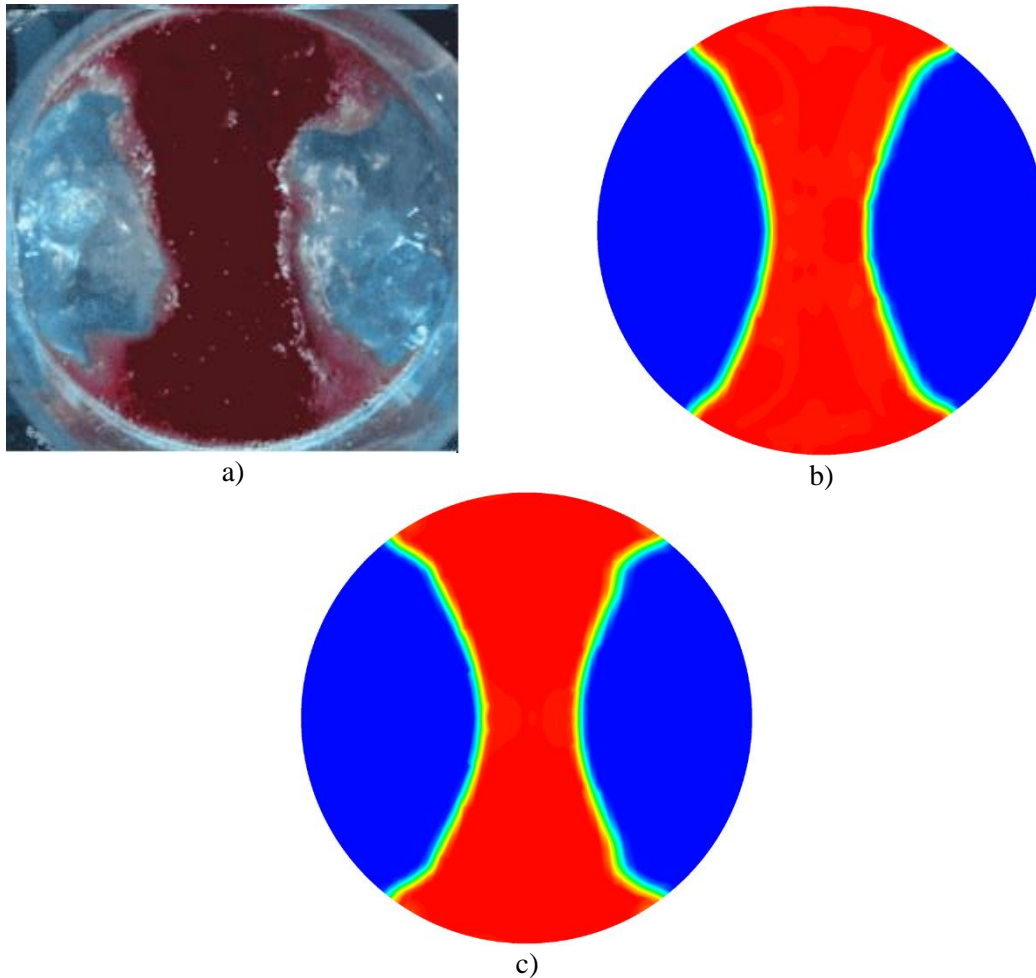


Figura 3.12. Vista superior del ojo de escoria experimental formado en un modelo físico de escala 1/17 y flujo de aire de 2.85 L/min a) Modelo experimental b) Modelo Euleriano c) Modelo Lagrangiano.

Tabla 3.2. Resultados del área de ojo de escoria, tanto experimental como simulada por aproximación Euleriana y Lagrangiana.

Parámetro	Lagrangiano	Euleriano	Experimental
Porcentaje de área [%]	50.71	51.47	54.47
Error [%]	1.67	3.17	-

Los contornos de fracción volumen de escoria presentados estiman la formación de ojos de escoria simétricos, con aperturas muy parecidas entre sí. La difusión numérica que se alcanza a apreciar en ambas aproximaciones matemáticas es prácticamente igual. No obstante, en el modelo experimental se distingue la formación de ojos no simétricos derivados posiblemente de una ligera variación en la aplicación de flujos como consecuencia de la dificultad de controlar totalmente el nivel de flujo, situación que es difícil de representar en los modelos matemáticos.

En el caso de la apertura de escoria en la Figura 3.12c correspondiente a la aproximación Lagrangiana, es posible percibir con mejor detalle la deformación de la escoria en la zona de interfase aceite-agua,

deformación que es altamente visible en el modelo experimental [Figura 3.12a]. Una explicación atribuible a esto es que el modelo VOF-*Level-Set* se caracteriza por realizar la estimación de una interfase bien definida gracias a emplear la técnica *level-set* que emplea una función suave para reconstruirla, al tiempo que hay una adecuada conservación de masa derivada de emplear el algoritmo VOF.

En términos generales, la diferencia en la cuantificación del área del ojo se encuentra en cierto grado explicada por la diferencia de las componentes velocidad presente entre los modelos matemáticos y el modelo experimental. Previamente al revisar la fluidodinámica se constató que, a mayores alturas, los modelos matemáticos arrojaron velocidades menores a los valores experimentales, lo que en consecuencia reduce la cantidad de momentum trasferida a la escoria por parte del agua y deriva en la subestimación del valor del área de ojo de escoria que en este caso no es tan significativa.

Dentro del error experimental que presentan ambos modelos matemáticos, la aproximación Lagrangiana mediante el modelo VOF para la simulación de la fase continua, mejoró ligeramente los resultados obtenidos previamente en el grupo de trabajo[31].

3.3 Emulsión de escoria

Además de los resultados de la fluidodinámica y de la formación de ojo de escoria; aún falta tratar el fenómeno derivado y estrechamente relacionado con la formación del ojo de escoria, la emulsificación de esta.

El fenómeno de emulsificación tiene relevancia dado que cuando este ocurre, el área interfacial acero-escoria incrementa y acelera la cinética de la reacción de desulfuración y la remoción de inclusiones. Aunque, por otra parte, como efecto adverso esta misma emulsión puede llegar a generar atrapamiento de escoria en el baño de acero.

Cuando el ojo de escoria es formado mediante el mecanismo previamente explicado, forma un movimiento de recirculación que inicia en la zona del spout, tal como se muestra en la Figura 3.13. La escoria puede ser dividida en 4 regiones, la primera es aquella que está en contacto con la atmósfera y que por inercia se mueve en dirección hacia el centro de la olla. La zona crucial en el fenómeno de emulsión es la número dos; ya que en ella se da el primer contacto del acero proveniente del *spout* con la escoria y se extiende hasta el inicio de formación de la emulsión. En este sector si la velocidad axial es lo suficientemente grande y alcanza un valor crítico, la transferencia de momentum a la fase escoria aumentará y generará un movimiento con sentido hacia abajo lo suficientemente elevado para empezar el arrastre y eventualmente formar emulsión.

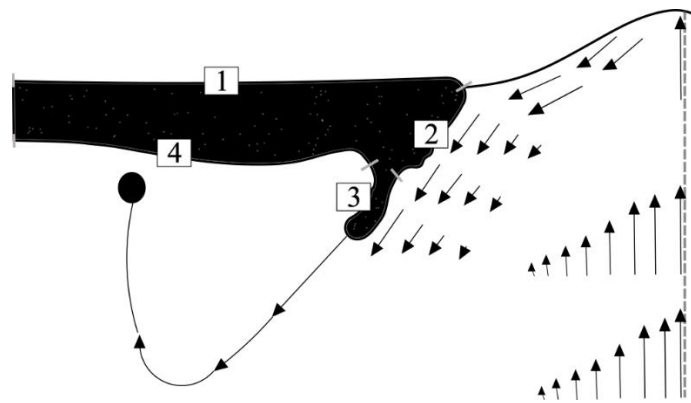


Figura 3.13. Esquema del mecanismo de formación de emulsión de escoria en una olla de acero con inyección céntrica. Adaptado de [17]

La región tres del esquema en la Figura 3.13 corresponde al ligamento que se suscita al comenzar la emulsificación del aceite, que, dependiendo en la inercia presente en esta fase, puede presentar desprendimiento de gotas o no. De igual manera en la zona 4 puede presentarse la formación de gotas con la inercia que viene asociada desde regiones anteriores en la escoria y por el arrastre.

Para el presente caso de simulación, no fue posible disponer de datos cuantitativos de la emulsión de escoria. Sin embargo, con previa validación, con el uso de la herramienta de CFD sí fue posible estudiar el nivel de emulsión para los modelos matemáticos simulados, obteniendo diferencias significativas.

Para analizar y observar de forma más realista la influencia del tipo de aceite considerado como escoria en la emulsificación, se consideraron aceites con propiedades físicas en rangos mayores y menores a aquellas del aceite de Silicón tipo B usado durante la validación del modelo. En estos aceites propiedades clave como la densidad y la viscosidad dinámica variaron simultáneamente, permitiendo hacer una aproximación del efecto combinado de las variables.

Para la comparación del nivel de emulsión, solo se tomó en cuenta el área interfacial de la intercara agua-aceite del modelo físico. En la Tabla 3.3 se presentan las propiedades de los seis aceites empleados y los resultados obtenidos en la relación al área interfacial generada como consecuencia del fenómeno de emulsión. El aumento de área interfacial se calculó respecto al valor que hay cuando el baño de agua se encuentra en reposo, previo a la inyección de aire.

Tabla 3.3. Propiedades de las escorias consideradas y cambio de área interfacial obtenido respecto al área interfacial agua-aceite en reposo.

Material	Silicón B	Lub. industrial	IF30	Silicón A	Isoparafina	Keroseno
Densidad de escoria (ρ) [Kg/m ³]	926.000	909.700	943.700	800.000	819.800	815.900
Viscosidad dinámica (μ) [Kg/(ms)]	0.003	0.070	0.760	0.080	0.006	0.002
Tensión superficial ($\sigma_{\text{oil-agua}}$) [N/m]	0.053	0.007	0.031	0.053	0.028	0.037
Aumento de Área interfacial (%)	125.702	56.956	50.021	7.119	-7.684	-8.300

Visualmente el nivel de emulsión se puede apreciar en la Figura 3.14, donde se presentan los contornos de fracción volumen de escoria para todos los aceites usados, ordenados de mayor a menor nivel de emulsión, tomando en cuenta el porcentaje de cambio de área interfacial mostrado en la Tabla 3.3. El aceite que presentó mayor emulsión fue el de Silicón tipo B [Figura 3.14a] que presenta una de las densidades más altas y una de las viscosidades dinámicas más bajas. Los siguientes aceites con mayor emulsión son el Lubricante industrial marino y el IF30 en ese orden, con un cambio de área interfacial muy parecidos entre sí.

Los siguientes 3 aceites (Silicón tipo A, Isoparafina y Keroseno, en ese orden) ya se alejan del área interfacial presentada por el Silicón tipo B, disminuyendo el valor del área de interfase incluso hasta un punto donde este es menor al área interfacial en reposo del sistema agua-aceite.

De la Figura 3.14a a la Figura 3.14c se distingue que en los casos donde hubo mayor emulsificación, el espesor de la escoria aumentó, ya que esta es empujada radialmente hacia la pared al haber mayor inercia en esta fase y por ende habrá mayor momentum en la intercara agua-aceite.

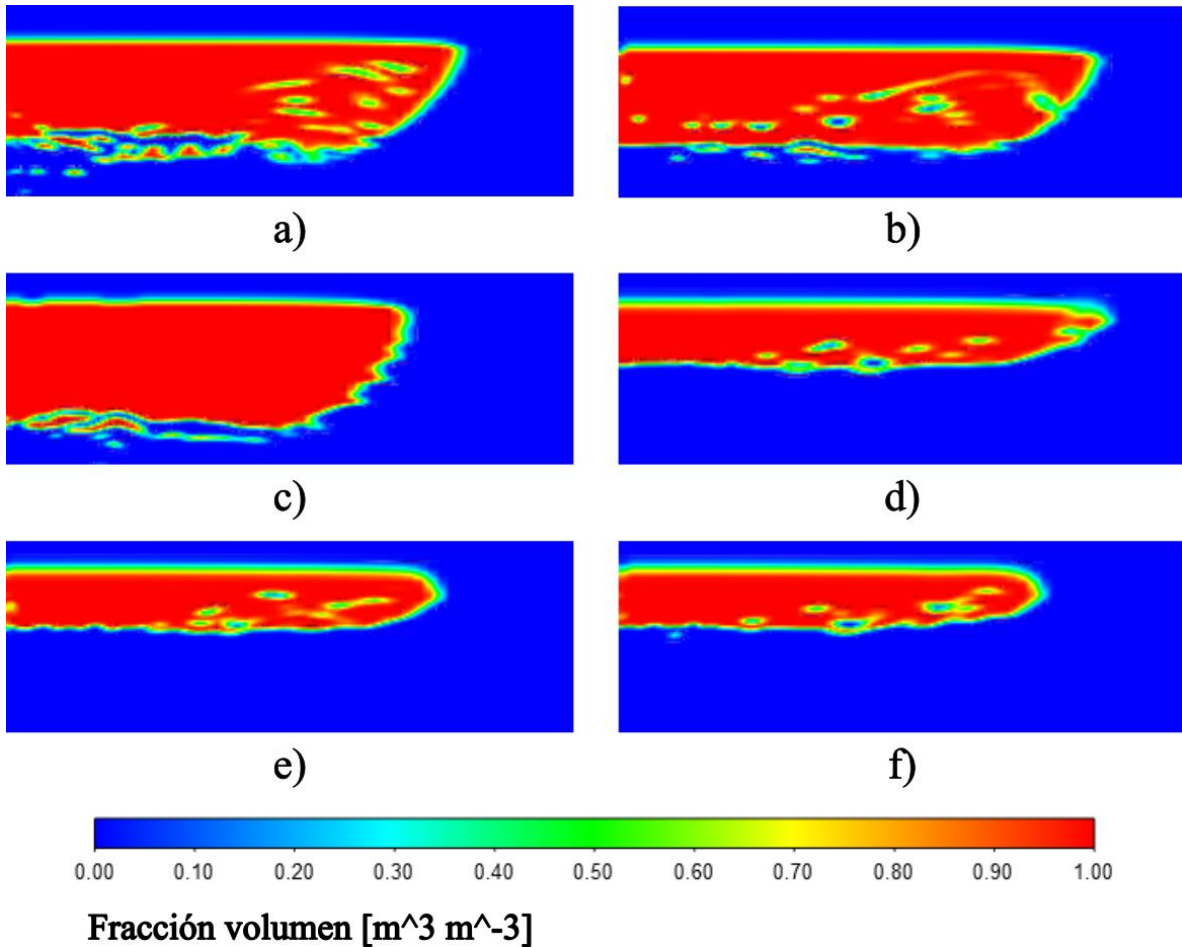


Figura 3.14. Contornos de fracción volumen de escoria para los seis distintos aceites usados a) Silicón tipo B b) Lubricante industrial marino c) IF30 d) Silicón tipo A e) Isoparafina f) Keroseno.

No obstante, a pesar de ser posible la cuantificación directa de la emulsión, no es posible determinar la relación directa del área interfacial con alguna de las propiedades del aceite o de otros parámetros como la velocidad de la interfase en la zona 2, como se distingue en la Figura 3.15 donde se presenta el área de la interfase agua-aceite en función de la diferencia de densidades entre las fases inmiscibles (Figura 3.15a) y de la magnitud de velocidad de la zona 2 (Figura 3.15b), numerados de mayor a menor área interfacial obtenida. Se encontró que, si bien en ninguno de los dos casos estas variables pueden estimar correctamente del grado de emulsión, sí se puede observar que hay dos zonas claramente definidas para las escorias de alta y baja emulsión. A baja diferencia de densidades y mayor velocidad en la zona 2, la emulsión es mayor.

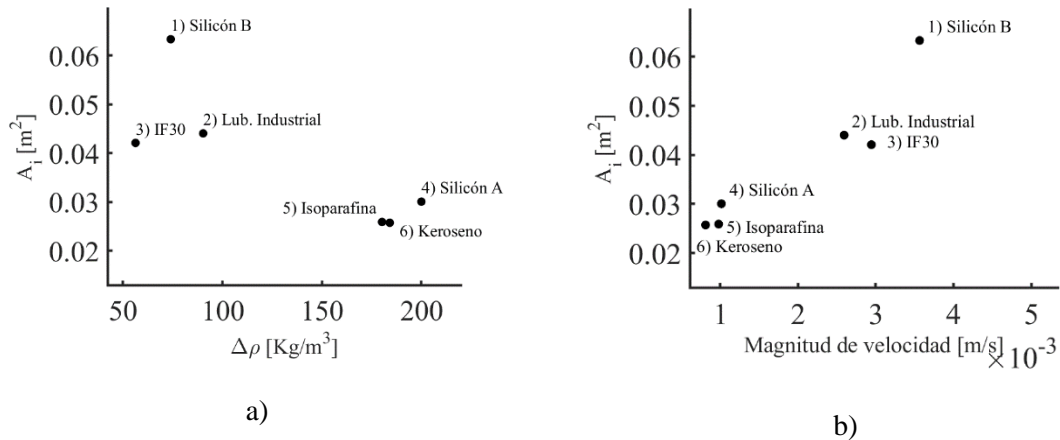


Figura 3.15. Área interfacial agua-aceite en función de la diferencia de densidades entre las fases inmiscibles (a) y la magnitud de la velocidad en la zona 2 (b).

Para incorporar los efectos de otros parámetros de los que no se posee conocimiento claro de su efecto en la emulsión, se aplicó el método del teorema de π -Buckingham. Por medio de este teorema se obtuvieron relaciones adimensionales del área interfacial agua-aceite, considerando parámetros geométricos del sistema, propiedades de los materiales y variables de interés en la zona crítica de la interfase para la formación de emulsión (zona 2 en la Figura 3.13). En el ANEXO D: Teorema de π -Buckingham (página 87) se explica un ejemplo de cálculo de la metodología seguida para obtener las correlaciones presentadas en el trabajo.

En la Figura 3.16 se presenta el área interfacial adimensional en función de la expresión adimensional que depende del número del número de Froude y de la relación de densidades.

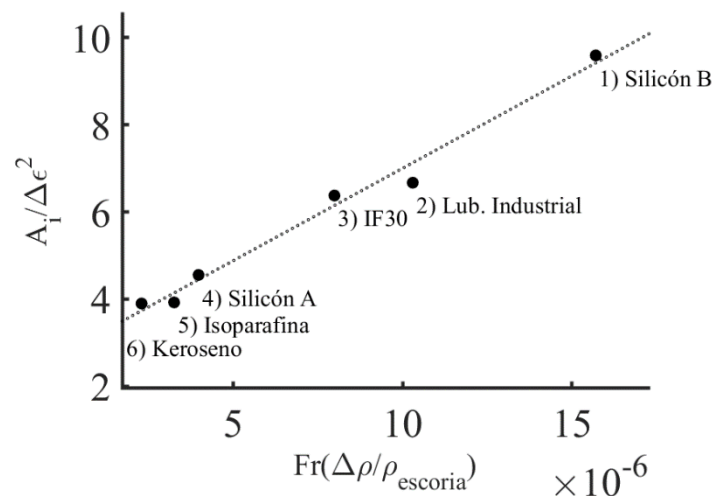


Figura 3.16. Área interfacial adimensional en función del número de Froude y de la relación de densidades. $R^2=0.9841$.

La expresión del número de Froude se determina conforme a la relación en la Ecuación 3.3 que relaciona las fuerzas de inercia y de gravedad. La expresión completa de la variable independiente del gráfico de la Figura 3.16 se refiere a la relación de la diferencia en las fuerzas de inercia en la interfase entre agua-aceite (movimiento relativo entre fases) y la fuerza gravitatoria del aceite. La fuerza característica en cada aceite para la determinación de la diferencia en el grado de emulsión es

la inercia relativa entre fases, que en cada caso varía con la densidad del aceite y con la velocidad en la zona 2. Al incrementar esta diferencia de inercia, el área interfacial aumenta debido al mayor esfuerzo de corte presente en la interfase.

Ecuación 3.3

$$Fr = \frac{v_{\text{zona2}}^2}{g\Delta\varepsilon}$$

Si bien con la correlación anterior es posible cuantificar adecuadamente el área interfacial, el parámetro de la velocidad en la zona 2 es de carácter muy específico y no es un valor del cual se tenga conocimiento *a priori*, por lo que es necesario también encontrar una correlación para estimarla, dado que no se encuentra directamente en función de un solo parámetro, como se parecía en la Figura 3.17 donde se presenta la velocidad de la zona 2 en función de la relación de densidades agua-aceite para los diferentes aceites. En la gráfica se aprecian 2 principales zonas, aquellas de menor velocidad (Keroseno, Isoparafina y Silicón A) y las de mayor velocidad (Lubricante industrial, IF30 y Silicón B), numeradas de mayor a menor velocidad. En términos general es posible observar que, a mayor densidad de aceite, la magnitud de velocidad es mayor. Con el resto de los parámetros no fue posible hallar correlaciones estadísticamente confiables con la velocidad.

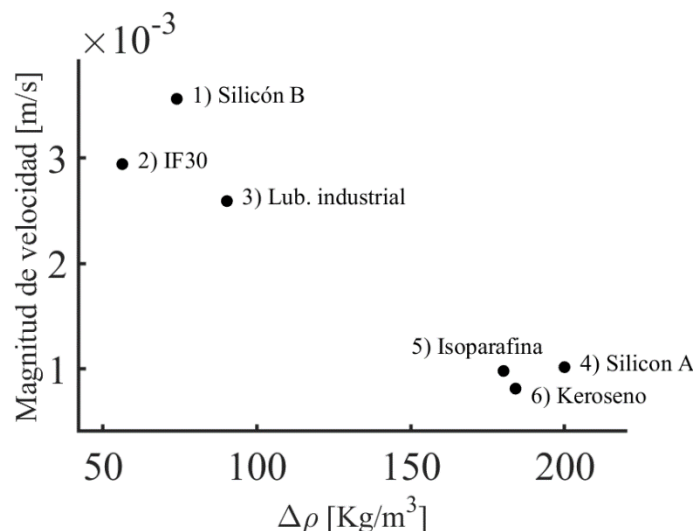


Figura 3.17. Magnitud de la velocidad media en la zona 2 en función de la relación de densidades agua-aceite.

La explicación de la influencia de la densidad de la escoria proviene desde lo ya desarrollado para la formación del ojo de escoria, no obstante, este parámetro no es suficiente para estimar el orden correcto de la velocidad en la interfase, por lo que se determinó una correlación que pudiera estimar adecuadamente la velocidad. En la Figura 3.18 se presenta la correlación propuesta para estimar la velocidad de interfase en la zona 2 en función de varios grupos adimensionales como el número de Eotvos, la relación de densidades y el área de ojo adimensional.

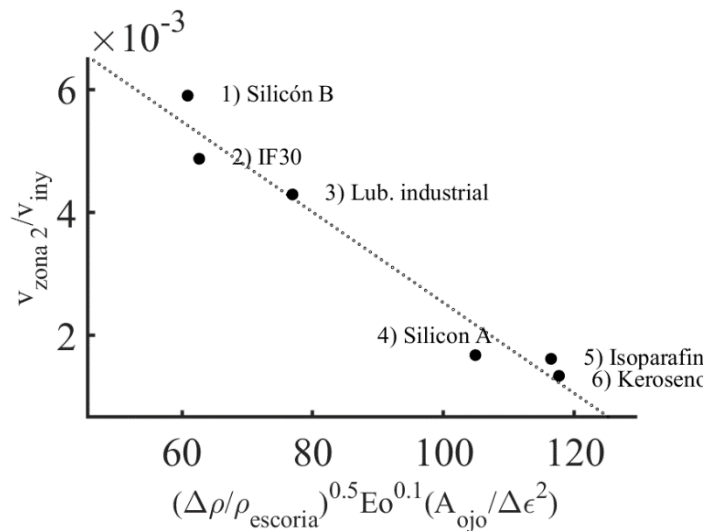


Figura 3.18. Velocidad de zona 2 adimensional en función del número de Eötvos, relación de densidades y el área de ojo adimensional. $R^2=0.9614$.

En la correlación se encuentra presente la relación de densidades que tiene un efecto importante como ya se pudo apreciar en la Figura 3.17, sin embargo, también se debe tomar en cuenta el área del ojo ya que es el fenómeno donde el fluido del baño del modelo adquiere las condiciones inerciales que actúan en el fenómeno de emulsión, como fue explicado previamente. Derivado del estudio, se observa que en términos generales un aumento en el área de exposición del baño favorece un aumento en la velocidad de la interfase.

Como complemento del análisis, los efectos de la relación de las fuerzas gravitatorias (fuerza boyante y de cuerpo) que la escoria experimenta y la fuerza de tensión superficial también son tomados en consideración por medio del número de Eötvos. Si este número adimensional incrementa, disminuye la contribución en el balance de fuerzas por parte de la fuerza de tensión superficial y la velocidad de interfase disminuye, ya que la fuerza de atracción entre partículas es menor y, por lo tanto, decrece el arrastre entre fases que termina afectando la transferencia de momentum en la interfase.

4. CONCLUSIONES

El estudio llevado a cabo permitió explorar una nueva aproximación matemática para la cuantificación de la contribución de momentum por parte de las burbujas a la fase continua de acero, en este grupo. Esta aproximación consistió en usar un Modelo de Fase Discreta para estimar con mejor aproximación la transferencia de momentum del gas inyectado hacia el agua, fase análoga al acero. A su vez, resolviendo la fluidodinámica de las fases continuas mediante el modelo de Volumen de Fluido acoplado con el modelo de turbulencia k- ϵ de tipo realizable; y definiendo la interfase acero-escoria con la técnica *Level-Set*.

La validación de este nuevo algoritmo DPM-VOF-(k- ϵ) que se comparó con mediciones experimentales y con trabajos previos que usaron métodos eulerianos. El sistema fue un modelo físico 1/17 con inyección céntrica por el fondo con un flujo de 2.85 L/min. El análisis arrojó las siguientes conclusiones:

Sobre la comparación de algoritmos Euleriano contra VOF-DPM- k- ϵ realizable.

- La estimación de velocidad, sobre todo aquella de sentido axial, es más aproximada a los resultados experimentales en el caso del modelo Lagrangiano; especialmente en la zona cercana a la pluma, regiones con mayor altura como la interfase agua-aceite y el seno del movimiento de recirculación.
- En la región de más altura, el modelo empleando DPM en promedio general tiene un error experimental 27% menor al error obtenido mediante cálculos realizados con la aproximación Euleriana, sin embargo, ambos modelos subestiman la velocidad respecto a la física real del sistema.
- Entre modelos matemáticos no es posible apreciar mayor diferencia en los resultados obtenidos para los datos de velocidad radial, no obstante, ambas aproximaciones subestiman en casi la misma proporción esta velocidad respecto al modelo experimental.
- El error obtenido mediante el modelo Lagrangiano en cuanto a las velocidades del agua, es más homogéneo, sin presentar grandes fluctuaciones de valores de velocidad como sí ocurre con la aproximación Euleriana.
- La Energía Cinética Turbulenta es subestimada por ambos modelos, aunque el error cuadrático medio general es prácticamente igual en ambos tipos de aproximación con un valor de 0.0026 m²/s², afectando principalmente a las condiciones de formación del ojo de escoria.
- El Modelo de Fase Discreta permite realizar una inyección de gas lo más cercano a la realidad, a diferencia del modelo Euleriano que realiza aproximaciones más generales. La posibilidad de determinar la frecuencia y masa de inyección permite disminuir suposiciones, aplicando directamente la realidad física del fenómeno de boyancia en cada una de las burbujas. En este modelo el parámetro de dispersión turbulenta de la fase continua hacia la fase discreta es crítico tanto para las variables de momentum como para la apertura de la pluma.
- De manera global tanto el enfoque Lagrangiano como el enfoque Euleriano son muy similares en los resultados obtenidos, con la aproximación de DPM siendo ligeramente más exacto. A lo anterior se le añade la consideración de que el tiempo de cómputo es similar, siendo de aproximadamente 36 horas.

Sobre la apertura del ojo de escoria comparando Euleriano contra VOF-DPM- k- ϵ realizable.

- Para la validación de la formación del ojo de escoria se empleó una inyección doble posicionada en 4/5R y disminuyendo el flujo total a 2.22 L/min en un modelo a escala 1/17, diferente a la inyección céntrica del análisis en esta tesis por contar con experimentos de apertura de ojo de escoria. La validación de la formación del ojo de escoria fue llevada a cabo con éxito para el modelo Lagrangiano, obteniendo un error de 1.67%, la mitad del error experimental conseguido mediante el enfoque Euleriano.
- Pese a las diferencias en el error experimental entre enfoques matemáticos, ambos tienen buena exactitud con el valor obtenido mediante el modelo físico experimental (error no mayor al 4%). La diferencia entre los ojos de escoria resueltos matemáticamente y los medidos experimentales radica en la forma del ojo. En el modelo matemático el ojo presenta una interfase agua-escoria de forma no bien definida fluctuante, mientras en las aproximaciones matemáticas la forma del ojo se muestra de forma más continua. No obstante, entre las aproximaciones matemáticas, aquella que integra el modelo de fase discreta (DPM) presenta un contorno de ojo más realista.

Sobre la emulsión de escoria que solo lo puede predecir la técnica VOF-DPM- $k-\epsilon$ realizable

- A pesar de ser algoritmos matemáticos con resultados semejantes en cuanto a fluidodinámica y formación de ojo de escoria, se encontró que la aproximación Lagrangiana adicionalmente permite estudiar más extensivamente el fenómeno de emulsión, cuantificando de mejor forma el cambio en el área interfacial de la escoria durante el proceso.
- Para la realización de un estudio más realista, se llevó a cabo la sustitución de la escoria con seis aceites con propiedades fisicoquímicas conocidas y disponibles comercialmente, contemplando de esta manera la variación simultánea de las propiedades. Mediante el análisis de correlaciones encontradas a través del teorema de π -Buckingham, se pudo correlacionar efectivamente el área interfacial de la escoria con relaciones adimensionales que contemplan parámetros de diseño, operación y proceso de la agitación de un modelo físico 1/17 de horno olla. Se concluyó que el movimiento relativo entre fases es vital para la determinación del nivel de emulsión de una fase. Este se encuentra principalmente cuantificado por el número de Froude y la relación de densidades entre fases; al incrementar el movimiento relativo entre agua y aceite, el área interfacial de la escoria aumenta como consecuencia del aumento del esfuerzo de corte en la región.
- El movimiento relativo está principalmente caracterizado por la magnitud de velocidad presente en la primera zona de contacto del fluido de recirculación con la escoria. El alza de este valor de velocidad deriva directamente en el incremento del área interfacial, sin embargo, no es el único parámetro a tomar en cuenta pues, a partir de este, no es posible predecir completamente el área interfacial, también se deben tomar en cuenta propiedades como la relación de densidades de ambas fases.
- La velocidad crítica en la interfase a su vez depende de parámetros del proceso como el área de ojo de escoria y de propiedades como la diferencia de densidades y la tensión interfacial. La densidad del aceite es la propiedad crítica del fenómeno de emulsión, pues la que determina mayormente la velocidad crítica en la interfase, con una pequeña contribución de la propiedad de tensión interfacial. Menor diferencia de densidad acero-escoria, deriva en el incremento de área interfacial.
- Bajo las condiciones de estudio realizadas y los resultados obtenidos, la viscosidad dinámica de las fases no tiene injerencia significativa en el fenómeno.
- El nivel de emulsión de los aceites se puede dividir en dos rangos, Los de alta emulsión que son aquellos que aumentaron el área interfacial más del 50% y los de baja emulsión donde el

incremento máximo de área interfacial fue de 10% y algunos incluso percibieron reducción en el área. En el primer grupo se encuentran el aceite de Silicón tipo B IF30 y Lubricante Industrial en ese orden, mientras que el segundo grupo contempla el aceite de Silicón tipo A, la Isoparafina y el Keroseno, siendo estos dos últimos materiales de baja densidad derivados del petróleo, los que redujeron su valor de área interfacial escoria-acero respecto al valor inicial.

5. REFERENCIAS

- [1] World Steel Association, “Total production of crude steel.” [Online]. Available: https://worldsteel.org/steel-by-topic/statistics/annual-production-steel-data/P1_crude_steel_total_pub/CHN/IND. [Accessed: 14-Mar-2022].
- [2] P. Cavaliere, *Clean Ironmaking and Steelmaking Processes*. 2019.
- [3] J. P. Birat, “Life-cycle assessment, resource efficiency and recycling,” *Metall. Res. Technol.*, vol. 112, no. 2, pp. 24–28, 2015.
- [4] H. Ghanbari, *Polygeneration systems in iron and steelmaking*. Elsevier Inc., 2018.
- [5] A. M. Amaro-Villeda, “Modelación física y matemática del mezclado y de intercambios metal/escoria en ollas de acero agitadas con gas,” UNAM, 2015.
- [6] R. Clift, R. Grace, and M. E. Weber, *Bubbles, Drops, and Particles*. 1978.
- [7] Y. Liu, M. Ersson, H. Liu, P. Jönsson, and Y. Gan, “Comparison of Euler-Euler Approach and Euler–Lagrange Approach to Model Gas Injection in a Ladle,” *Steel Res. Int.*, vol. 90, no. 5, pp. 1–13, 2019.
- [8] D. Mazumdar and R. I. L. Guthrie, “The Physical and Mathematical Modelling of Gas Stirred Ladle Systems,” *ISIJ Int.*, vol. 35, no. 1, pp. 1–20, 1995.
- [9] K. Chattopadhyay, M. Isac, and R. I. L. Guthrie, “Applications of Computational Fluid Dynamics (CFD) in iron- and steelmaking: Part 2,” *Ironmak. Steelmak.*, vol. 37, no. 8, pp. 562–569, 2010.
- [10] K. Krishnapisharody and G. A. Irons, “Modeling of slag eye formation over a metal bath due to gas bubbling,” *Metall. Mater. Trans. B Process Metall. Mater. Process. Sci.*, vol. 37, no. 5, pp. 763–772, 2006.
- [11] K. Krishnapisharody and G. A. Irons, “An extended model for slag eye size in ladle metallurgy,” *ISIJ Int.*, vol. 48, no. 12, pp. 1807–1809, 2008.
- [12] D. Mazumdar and R. I. L. Guthrie, “The Physical and Mathematical Modelling of Gas Stirred Ladle Systems,” *ISIJ Int.*, vol. 35, no. 1, pp. 1–20, 1995.
- [13] B. Li, H. Yin, C. Q. Zhou, and F. Tsukihashi, “Modeling of three-phase flows and behavior of slag/steel interface in an argon gas stirred ladle,” *ISIJ Int.*, vol. 48, no. 12, pp. 1704–1711, 2008.
- [14] E. Uzgoren, R. Singh, J. Sim, and W. Shyy, “Computational modeling for multiphase flows with spacecraft application,” *Prog. Aerosp. Sci.*, vol. 43, no. 4–6, pp. 138–192, 2007.
- [15] L. M. Portela and R. V. A. Oliemans, “Possibilities and limitations of computer simulations of industrial turbulent dispersed multiphase flows,” *Flow, Turbul. Combust.*, vol. 77, no. 1–4, pp. 381–403, 2006.
- [16] D. C. Guo, L. Gu, and G. A. Irons, “Developments in modelling of gas injection and slag foaming,” *Appl. Math. Model.*, vol. 26, no. 2, pp. 263–280, 2002.
- [17] A. Senguttuvan and G. A. Irons, “Modeling of slag entrainment and interfacial mass transfer in gas stirred ladles,” *ISIJ Int.*, vol. 57, no. 11, pp. 1962–1970, 2017.
- [18] H. Liu, Z. Qi, and M. Xu, “Numerical simulation of fluid flow and interfacial behavior in

- three-phase argon-stirred ladles with one plug and dual plugs,” *Steel Res. Int.*, vol. 82, no. 4, pp. 440–458, 2011.
- [19] L. Li, Z. Liu, M. Cao, and B. Li, “Large eddy simulation of bubbly flow and slag layer behavior in ladle with discrete phase model (DPM)–volume of fluid (VOF) coupled model,” *Jom*, vol. 67, no. 7, pp. 1459–1467, 2015.
- [20] L. Li and B. Li, “Investigation of Bubble-Slag Layer Behaviors with Hybrid Eulerian–Lagrangian Modeling and Large Eddy Simulation,” *Jom*, vol. 68, no. 8, pp. 2160–2169, 2016.
- [21] Q. Cao and L. Nastac, “Numerical modelling of the transport and removal of inclusions in an industrial gas-stirred ladle,” *Ironmak. Steelmak.*, vol. 45, no. 10, pp. 984–991, 2018.
- [22] Q. Cao and L. Nastac, “Mathematical Modeling of the Multiphase Flow and Mixing Phenomena in a Gas-Stirred Ladle: The Effect of Bubble Expansion,” *Jom*, vol. 70, no. 10, pp. 2071–2081, 2018.
- [23] H. Duan, Y. Ren, and L. Zhang, “Effects of Interphase Forces on Fluid Flow in Gas-Stirred Steel Ladles Using the Eulerian–Lagrangian Multiphase Approach,” *Jom*, vol. 70, no. 10, pp. 2128–2138, 2018.
- [24] Q. Cao and L. Nastac, “Mathematical modelling of slag–metal reactions and desulphurization behaviour in gas-stirred ladle based on the DPM-VOF coupled model,” *Ironmak. Steelmak.*, vol. 47, no. 8, pp. 873–881, 2020.
- [25] H. Duan, L. Zhang, B. G. Thomas, and A. N. Conejo, “Fluid Flow, Dissolution, and Mixing Phenomena in Argon-Stirred Steel Ladles,” *Metall. Mater. Trans. B Process Metall. Mater. Process. Sci.*, vol. 49, no. 5, pp. 2722–2743, 2018.
- [26] E. N. Tyulenev *et al.*, “Investigation of Argon Blowing in a Steel-Teeming Ladle,” *Metallurgist*, vol. 64, no. 3–4, pp. 223–232, 2020.
- [27] J. A. López Gutiérrez, “Modelado físico y matemático de intercambios metal/escoria en ollas de acero agitadas con gas,” UNAM, 2016.
- [28] A. Amsden, P. O’Rourke, and T. Butler, “KIVA-II: A computer program for chemically reactive flows with sprays, Los Alamos - National Laboratory, report LA-11560-MS,” *Los Alamos Natl. Lab.*, no. May, p. LA-11560-MS, 1989.
- [29] W. M. H. Versteeg, *An introduction to computational fluid dynamics : the finite volume method*, vol. M. Prentice Hall, 1996.
- [30] J. P. M. Ferziger, *Computational Methods for Fluid Dynamics*, vol. 56, no. 2. Springer, 1991.
- [31] M. Mommen, “Modelling of a Three-Phase Gas-Stirred Ladle,” 2019.

6. ANEXO A: Sensibilidad de la malla

Para garantizar que los resultados sean independientes del número de elementos discretizados se realiza una prueba de sensibilidad malla donde se hace una comparación de resultados obtenidos con mallas de diferente número de elementos para evitar que el tamaño de ella afecte los resultados y al mismo tiempo prevenir el gasto innecesario de tiempo de cómputo en caso de que el número de elementos de control ya no afecte a los resultados. En este caso, se realizó la modelación robusta de un modelo físico de olla con inyección por el fondo.

Fueron elaboradas cinco mallas diferentes, todas ellas totalmente ortogonales (ortogonalidad 1.0). Los detalles de número de elementos y relación de aspecto se detallan en la Tabla 6.1. El número de elementos fue variado de 27000 a 234000, sin que este afectara de gran manera el promedio de relación de aspecto. Una relación de aspecto cercana a uno indica menor desviación de que los elementos sean de la misma longitud en todos sus lados; en este caso, la malla donde este indicador fue menor tomando en cuenta el promedio fue la número cuatro con 225000 elementos.

Tabla 6.1. Características de las mallas evaluadas.

Malla	Número de elementos	Relación de aspecto promedio
1	27 200	1.558
2	108 800	1.555
3	205 700	1.557
4	225 040	1.538
5	234 213	1.554

Para analizar el desempeño de cada malla y probar que los resultados obtenidos son independientes de las características de la malla, se llevó a cabo una comparación de todas las mallas construidas donde el parámetro de comparación fue la evolución en el tiempo durante 14 segundos de la velocidad de agua promedio en un plano localizado a 16 cm de altura del modelo [Figura 6.1] debido a su cercanía con la fase de la escoria, que es la zona de interés en el presente trabajo.

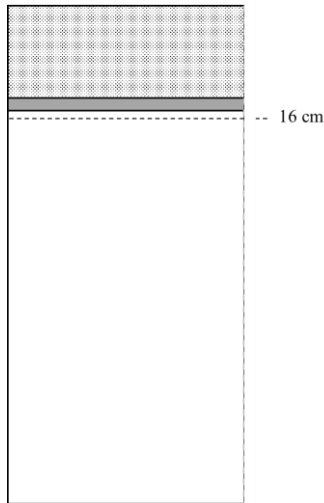


Figura 6.1. Posición de monitor para análisis de velocidad promedio a 16 cm.

En la Figura 6.2 se presentan los resultados para las condiciones del parámetro previamente mencionado. Es posible observar que en general todas las mallas presentan un comportamiento general en el que la velocidad aumenta hasta llegar a un punto en el que el flujo se desarrolla completamente y la velocidad promedio en la superficie a 16 cm ya no cambia respecto al tiempo. Las mallas 4 y 5 se empalman en la parte superior, indicando que en el caso de usar alguna de ellas, los resultados no dependen de la discretización del sistema. El resto de las mallas con menor número de elementos, la velocidad promedio fue subestimada respecto a las mallas 4 y 5.

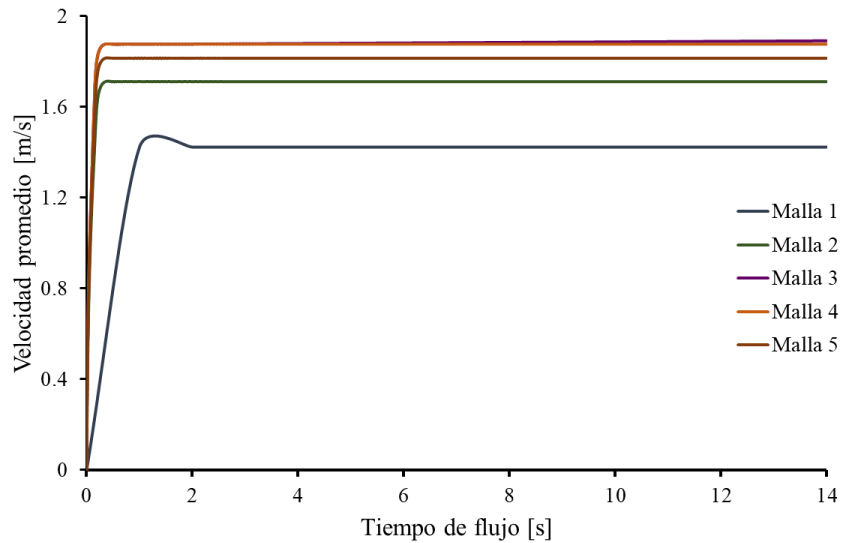


Figura 6.2. Magnitud de velocidad promedio a una altura de 16 cm.

Finalmente, la malla 4 fue seleccionada para realizar los cálculos del problema, ya que dentro de las mallas que se empalman, esta tiene menor número de elementos que se traduce en menor tiempo de cómputo.

7. ANEXO B: Procesamiento en FLUENT®

El *set up* de los casos en el módulo FLUENT fue realizado en la versión 2021R1 de ANSYS. Es en este módulo donde se especifican las condiciones del sistema, los materiales y los métodos de resolución. El *set up* se va construyendo por módulos dependiendo de las características a detallar. A continuación, se precisa la secuencia de pasos seguidos para correr la simulación de la presente investigación.

Módulo general

En esta sección (mostrada en la Figura 7.1) se indicó que el sistema es estable (posteriormente especificado como pseudo-transitorio). El tipo de geometría es axisimétrica alrededor del eje de simetría definido anteriormente; debido a que, por las características del software el eje de simetría en un sistema axisimétrico debe ser dibujado sobre el eje x, la acción de la gravedad se indica sobre la coordenada negativa de este eje.

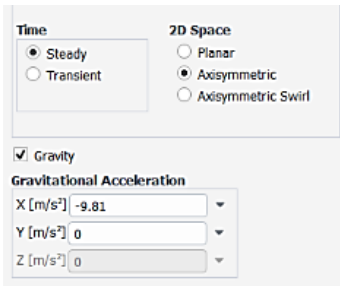


Figura 7.1. Detalles del módulo general.

Módulo de materiales

Para este caso es necesario precisar primero las fases continuas del problema y sus propiedades físicas, densidad y viscosidad dinámica específicamente. A esta parte fueron añadidos los materiales de agua, aceite y aire. En la Figura 7.2 se muestran las propiedades físicas para el aire.

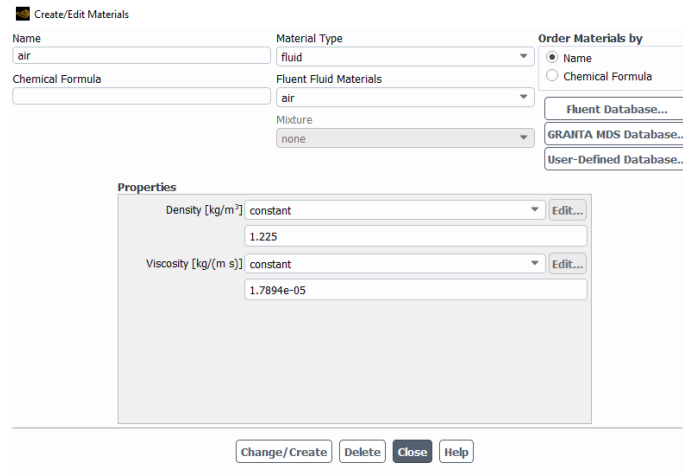


Figura 7.2. Propiedades físicas del aire.

Módulo de modelos

En esta parte se definen los modelos bajo los cuales se van a resolver las fases continuas presentes en el sistema, implícitamente delimitando así las ecuaciones a resolver.

Primero fue activado el modelo VOF para resolver las fases continuas [Figura 7.3]. El número de fases a resolver por este método es de tres, con un modelo acoplado de Level Set para la resolución de la interfase. El sistema es resuelto implícitamente con una formulación de fuerza de cuerpo implícita. El tipo de interfase es seleccionada como ‘definida’ y con un tratamiento para contrarrestar la difusión numérica.

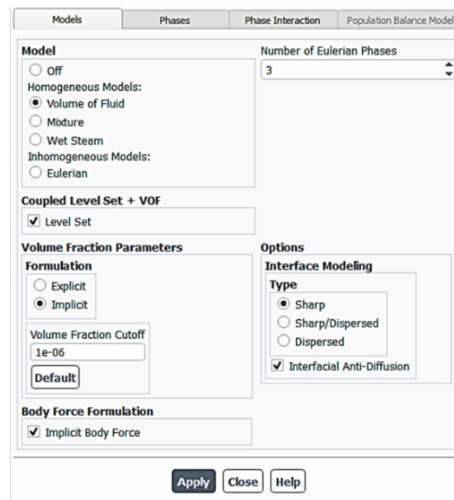


Figura 7.3. Selección de VOF como modelo multifásico.

Al seleccionar VOF para modelar las fases continuas, es necesario establecer cuál es la fase principal o primaria y cuáles son las fases secundarias. En la pestaña de ‘phases’ [Figura 7.4] es señalada el agua como fase primaria mientras el aceite es la primera fase secundaria y el aire de la atmósfera es la segunda fase secundaria.

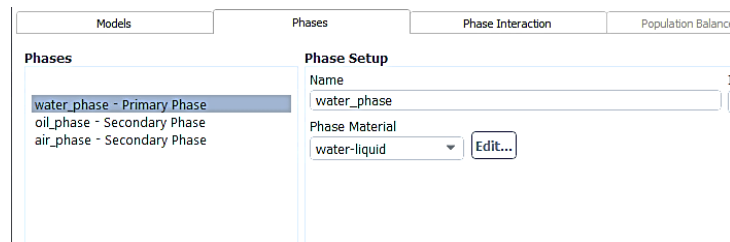


Figura 7.4. Identificación de fase primaria y fases secundarias.

Una vez designados los materiales de las fases, se procede a especificar la interacción entre fases, que en consecuencia es especificada por medio de la tensión interfacial. Para que el valor de este coeficiente sea cuantificado en la física del problema, se activa el modelo de fuerza de tensión superficial [Figura 7.5].

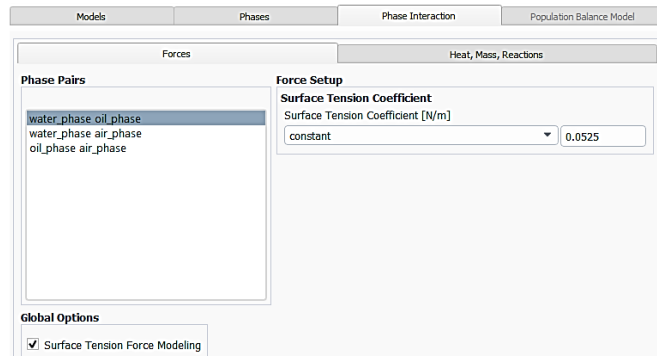


Figura 7.5. Panel de interacción entre fases del módulo de modelos.

Módulo de modelo de turbulencia

En el panel correspondiente a turbulencia, el modelo de seleccionado es el k-ε Realizable, con la consideración de un tratamiento estándar de las regiones cerca de la pared. Las constantes del modelo son las que se muestran en la Figura 7.6

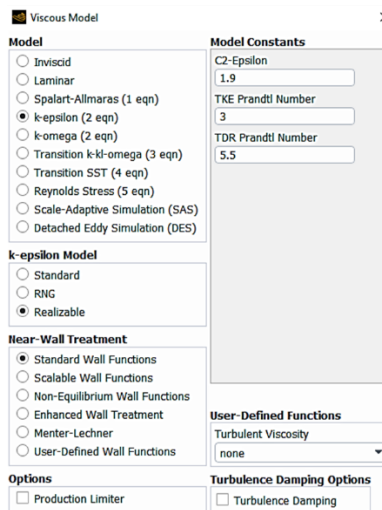


Figura 7.6. Set up de turbulencia.

Módulo de fase discreta

El módulo de *Discrete Phase Model* se activa al especificar las características que a continuación se detallan. En la Figura 7.7 se observa que fue activa la consideración de la interacción fase continua→fase discreta, sincronizando el efecto de las fuentes de DPM con cada iteración de flujo continuo y considerando que una iteración de la fase discreta comprende 30 iteraciones de la fase continua, estipulando además de esta forma, el momento de inyección de partícula. El número máximo de iteraciones para el seguimiento de partícula y evitar que esta sea monitoreada infinitamente, es fijado en un número elevado que, sin embargo, pierde cierto grado de relevancia debido a la UDF compilada, que redefine el momento en el que una partícula es removida del sistema. El '*Length Scale*' sirve para calcular el paso de tiempo a tomar en cuenta para resolución de la ecuación de trayectoria y proviene de la expresión de la Ecuación 7.1.

Ecuación 7.1

$$\Delta t = \frac{L}{u_p + u_c}$$

Donde Δt es el paso de tiempo de partícula, u_p es la velocidad de partícula, u_c es la velocidad de la fase continua y L es la distancia que la partícula recorre antes de la siguiente iteración (*Length Scale*).

El valor fue estimado con base en valores aproximados de velocidad de ascenso de burbuja, dimensiones del sistema y características de la malla. La sección de Tratamiento de Partícula, es explicada más adelante.

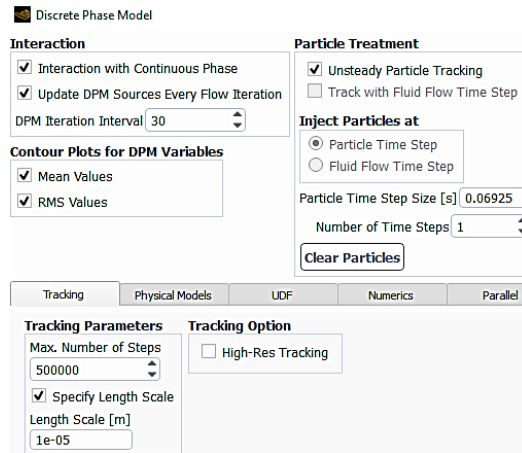


Figura 7.7. Activación del Modelo de Fase Discreta con condiciones de seguimiento de partícula.

Para los modelos físicos opcionales, solo se añadió la consideración de qué tanto la fase continua como discreta afectan la turbulencia de la otra [Figura 7.8].

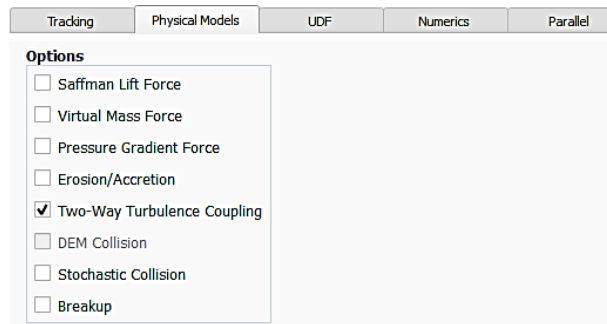


Figura 7.8. Modelos físicos opcionales de partícula.

El método de solución numérica empleado fue el que se muestra en la Figura 7.9, usando esquemas de solución tanto de alto como de bajo orden, alternados conforme las características del problema van cambiando; de igual manera que el paso de tiempo considerado para la partícula va siendo modificado. De este modo, el criterio de cálculo de paso de tiempo '*Length Scale*' es únicamente utilizado para el primer cálculo.

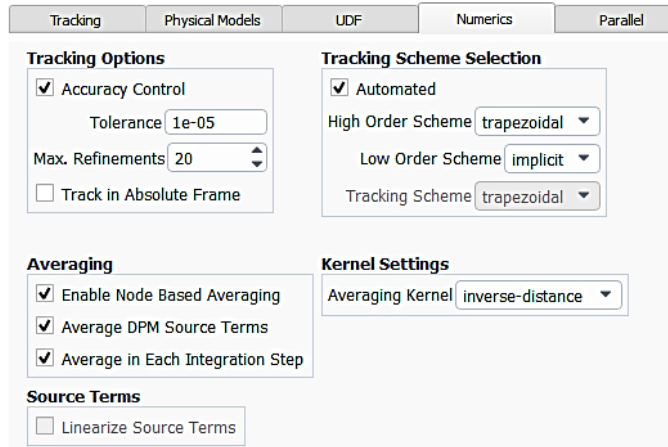


Figura 7.9. Solución numérica de la trayectoria de partícula.

Adicionalmente fue considerada la distribución de los efectos de las partículas a celdas vecinas por medio del *Node Based Averaging*, además de promediar las fuentes de una partícula tomando en cuenta fuentes provenientes de partículas DPM en celdas vecinas, lo último a través de *Average DPM Source Terms*.

Para el modelo de fase discreta se empleó una UDF (*User Defined Function*) para hacer que una vez que las partículas lleguen a la atmósfera, estas sean removidas del sistema, para evitar así que estas queden atrapadas dentro del modelo, minimizando de esta forma, el efecto del parámetro de número máximo de iteraciones. Por definición del software, la UDF hecha no puede ser interpretada a razón del macro empleado, esta debe ser compilada. En este caso se usó el compilador que viene adjunto en el software el cual es GCC®, que es de tipo libre.

El primer paso es seleccionar el archivo que contiene la udf con extensión .c y compilarlo como se muestra en la Figura 7.10, posteriormente solo se requiere cargar la librería generada para que pueda estar disponible su selección consecuente en el panel correspondiente.

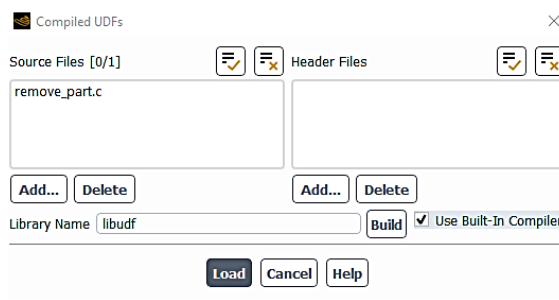


Figura 7.10. Compilación y carga de UDF.

Una vez creada la librería, esta se carga en la sección del panel principal de DPM para que sea tomada en cuenta durante el cálculo [Figura 7.11].

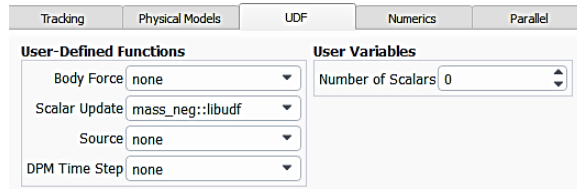


Figura 7.11. Selección de UDF que realiza la remoción de partículas.

También es necesario especificar las características de la inyección de partículas. En la Figura 7.12 se señala que el tipo de inyección es sencillo, siendo la partícula inyectada en un solo punto. En esta ocasión la posición de inyección fue en el origen de la geometría, el cual representa el centro del modelo físico de olla. El diámetro de partícula considerado fue de 1 cm y el flujo de masa fue obtenido con base en el flujo experimental de 2.85L/min, el área de inyección y la división por 2π tomando en cuenta la consideración de que se trata de un sistema axisimétrico.

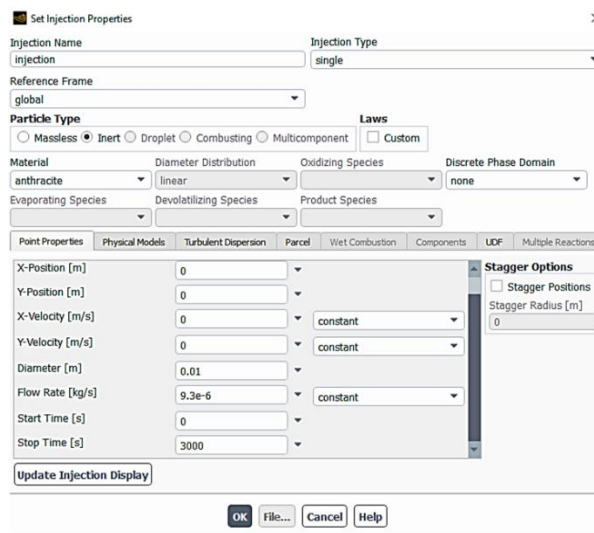


Figura 7.12. Propiedades de inyección.

Información complementaria acerca del tratamiento de la partícula se hace en las consecuentes pestañas. En la Figura 7.13a y Figura 7.13b se muestran las condiciones para el cálculo de arrastre y dispersión turbulenta.

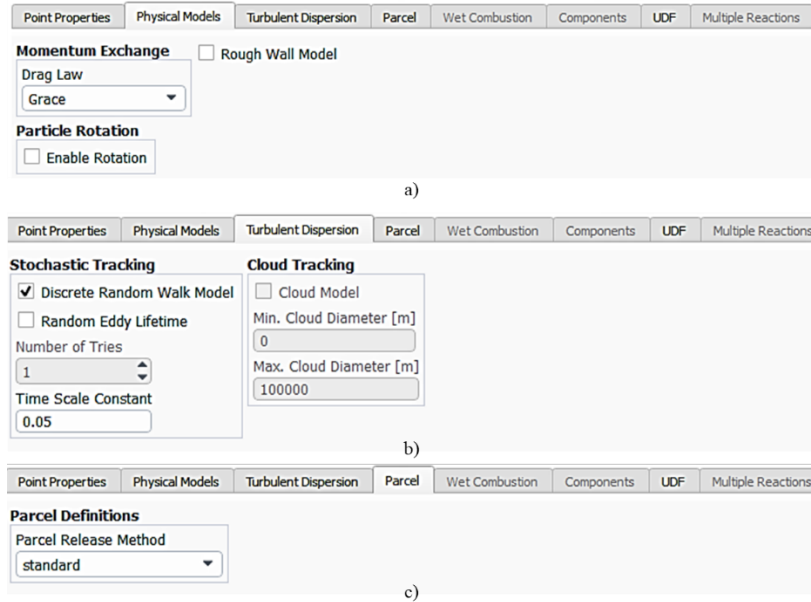


Figura 7.13. Set up de la inyección. a) Modelo de arrastre b) Dispersión turbulenta c) Parcela

En el segmento de parcela se usó el método estándar para relacionar los parámetros de partícula y el paso de tiempo, lo anterior conforme a la relación que se expresa en la Ecuación 7.2.

Ecuación 7.2

$$NP = \dot{m}_s \frac{\Delta t}{m_p}$$

Donde NP es el número de partículas por inyección, \dot{m}_s es el flujo másico de aire, m_p es la masa de partícula y Δt es el paso de tiempo. En este caso se usó esta relación para fijar el ingreso de una sola burbuja de aire en cada momento de inyección, conforme a lo observado en la experimentación, tal como se observa en la Figura 7.14 y obteniendo de esta manera el Δt especificado en el set up general del modelo de fase discreta que se puede ver en la Figura 7.7. El paso de tiempo calculado corresponde, además, con lo estimado de la información experimental.

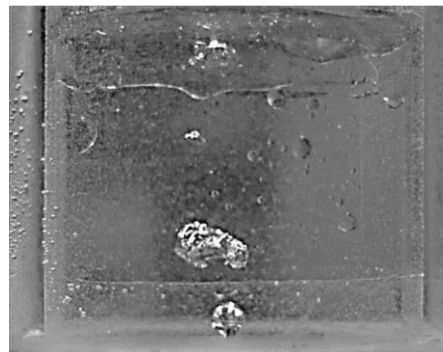


Figura 7.14. Imagen de la experimentación de inyección de aire por el fondo de un modelo físico de horno olla.[27]

Módulo de materiales (Partícula inerte)

Dado que en la configuración de la inyección el material no puede ser debidamente elegido, este se modifica en el panel de materiales de la fase discreta. Las propiedades requeridas son las que se muestran en la Figura 7.15.

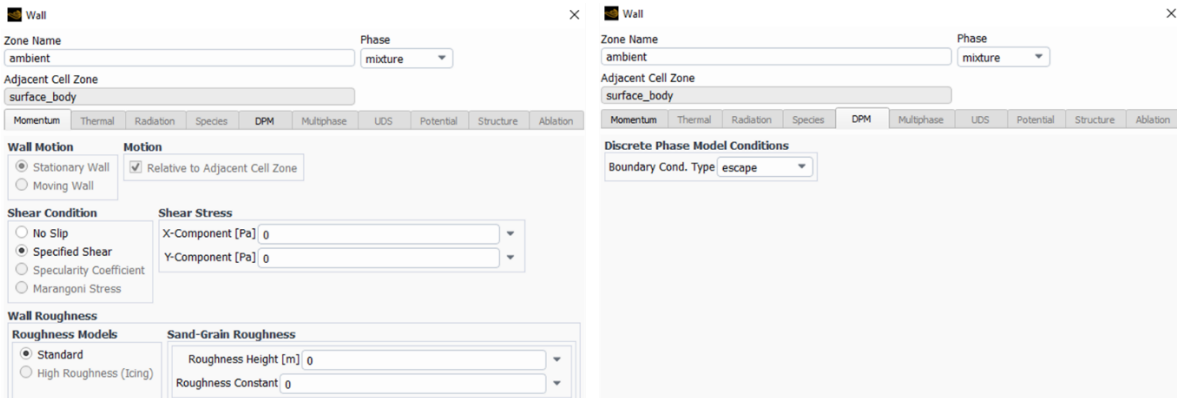
Figura 7.15. Modificación de propiedades físicas de la fase discreta (aire).

Módulo de condiciones de frontera

La configuración de las fronteras físicas del modelo que son las paredes lateral e inferior fue colocada conforme a lo que se observa en la Figura 7.16a y Figura 7.16b. Las condiciones de momentum en cuanto a las fases continuas, se refiere que existe no deslizamiento en las paredes mientras que respecto a las burbujas, estas actúan reflejando el movimiento mediante choque inelástico.

Figura 7.16. Condiciones de frontera para paredes del modelo.

La parte superior del modelo fue considerada como una superficie plana, la característica de este tipo de frontera es que se fija el esfuerzo de corte en la superficie en cero para indicar no interacción de fases continuas con esta frontera. En caso de que alguna partícula alcance esta frontera, esta saldrá del sistema, por el tipo de condición especificada en la Figura 7.17b.



a)

b)

Figura 7.17. Esfuerzo de corte especificado para la frontera superior.

Métodos de solución

Para la resolución numérica de las ecuaciones, se emplean algoritmos de solución y métodos de interpolación que fueron especificados conforme a lo que se muestra en la Figura 7.18. Indicando además que se trata de un sistema pseudo-transitorio.



Figura 7.18. Set up de métodos de solución.

Factores de relajación

Debido a la no linealidad de las cantidades conservadas, se emplean factores de relajación para controlar el cambio de estos parámetros. El valor de estos factores fue dispuesto conforme a lo señalado en la Figura 7.19.

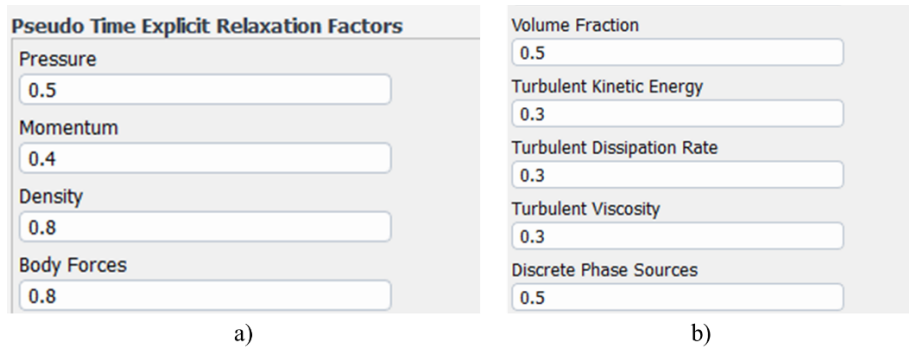


Figura 7.19. Valores de factores de relajación.

Inicialización y parchado de fases

Se lleva a cabo la inicialización híbrida con la fracción volumen de las fases secundarias en cero [Figura 7.20a]. Posteriormente es necesario crear las regiones que cada fase continua ocupa inicialmente en *Domain>Manual>Cell registers>New>Region* con los datos de las dimensiones del sistema [Figura 7.20b].

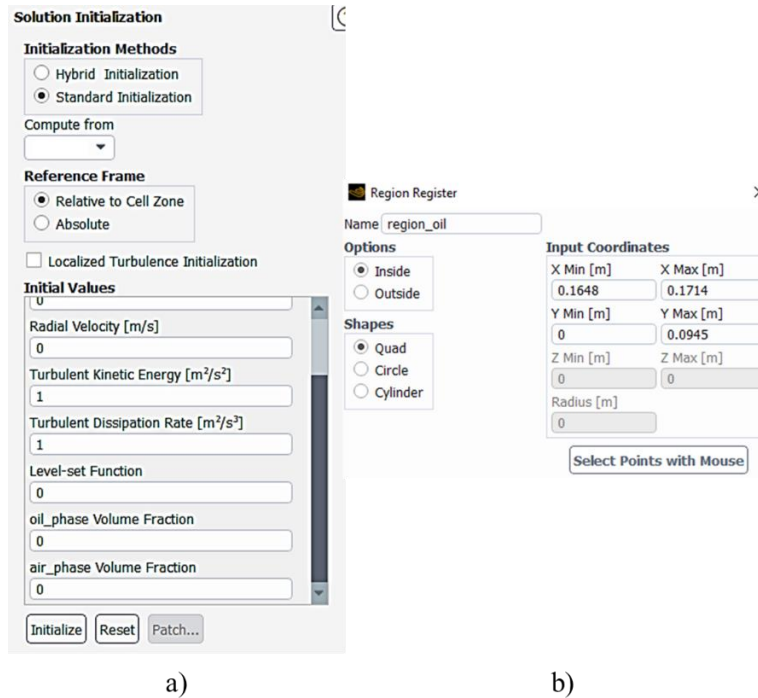


Figura 7.20. a) Inicialización b) Creación de regiones.

Una vez creadas las regiones, estas son parchadas seleccionando la fracción volumen de cada fase secundaria con su correspondiente región [Figura 7.21].

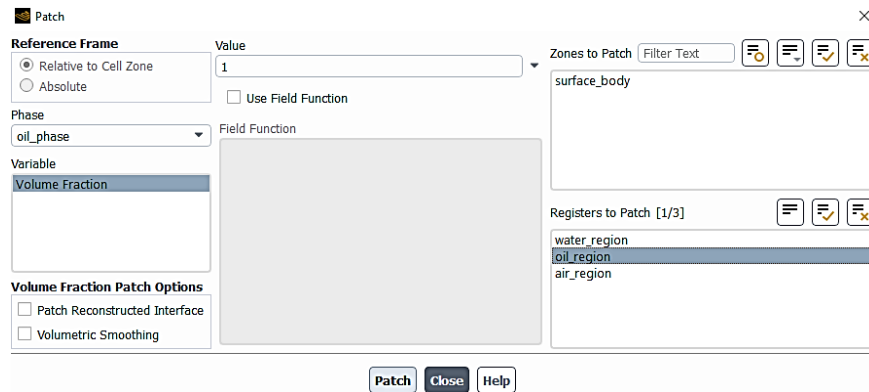


Figura 7.21. Parchado de fases.

Auto guardado

Para generar respaldo de los datos cada cierto número de iteraciones, esto queda señalado en el apartado de ‘*Calculation activities*’, tal como se encuentra en la Figura 7.22.

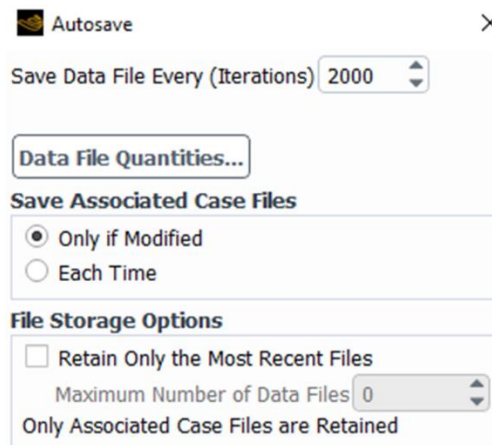


Figura 7.22. Respaldo de datos cada 2000 iteraciones.

Correr caso

Por último, se hace el set up del paso de tiempo para resolver las fases continuas. El tipo de paso de tiempo es cambiado a “especificado por el usuario” y el valor de Δt está definido por la expresión de la Ecuación 7.3.

Ecuación 7.3

$$\Delta t_{\text{euleriano}} = \frac{\Delta t_{\text{partícula}}}{\text{Intervalo de iteraciones}}$$

Donde $\Delta t_{\text{euleriano}}$ es el paso de tiempo para resolver las fases continuas, $\Delta t_{\text{partícula}}$ es el paso de tiempo en el marco de referencia Lagrangiano y el intervalo de iteraciones es el declarado en el panel principal de DPM. El ejemplo de cálculo para este caso se presenta a continuación:

$$\Delta t_{\text{euleriano}} = \frac{0.06925\text{s}}{30}$$

$$\Delta t_{\text{euleriano}} = 0.00230833\text{s}$$

Esto se realiza a razón de que, por características del software, el paso de tiempo de las fases continuas tiene que ser menor al paso de tiempo de la partícula y que, además, ambos Δt 's sean múltiplos para que el tiempo en el que sucede la inyección de partícula coincida con el inicio de una nueva iteración de las fases continuas, siendo esto esquematizado en la Figura 7.23. Si el tiempo de inyección no coincide con el inicio de una nueva iteración en el marco euleriano, la contribución de momentum es cuantificada en el inicio de la siguiente iteración, comenzando un desfase.

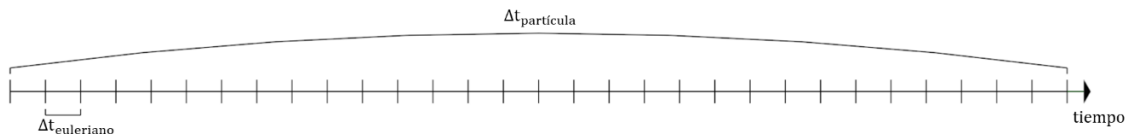


Figura 7.23. Representación esquemática de la concordancia entre escalas de tiempo de las aproximaciones euleriana y lagrangiana.

Con la información previa, la sección de 'Run calculation' es llenada indicando además el número de iteraciones a ejecutarse [Figura 7.24]. Es necesario además activar el 'Data Sampling for Steady Statistics' para al final de la simulación poder obtener resultados promediados en el tiempo y no solo los de la última iteración; finalizando con el inicio del cálculo.

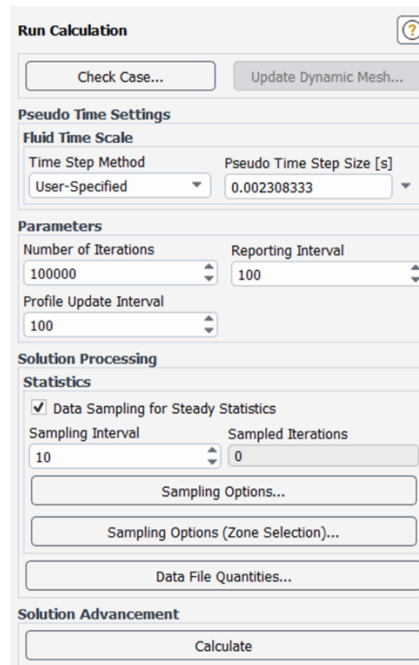


Figura 7.24. Disposición del panel para iniciar el cálculo del caso.

Post procesamiento

Para la obtención de la magnitud de velocidad de la interfase en la zona 2, que es donde se concentra el origen del fenómeno de emulsificación, se llevó a cabo un tratamiento particular para seleccionar las zonas que es conveniente detallar.

Lo primero que se realiza es obtener las coordenadas de la zona sombreada en la que el principal objetivo es que únicamente contenga la interfase agua-escoria de la zona 2 (Figura 7.25).

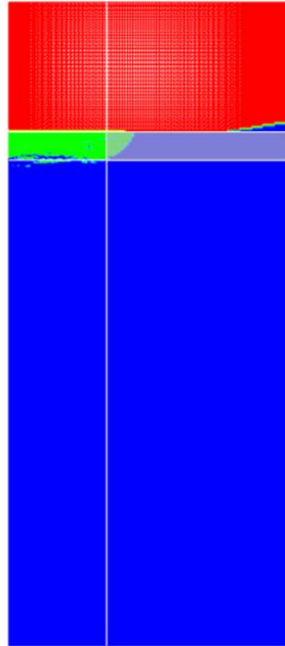


Figura 7.25. Región que comprende únicamente la interfase de la zona 2.

Con las coordenadas obtenidas, se procede a crear una nueva región para delimitar la zona de interés. Esta región es posteriormente separada del dominio para formar una nueva zona con la siguiente secuencia de instrucciones: *Domain>Separate>Cells*. La creación y separación de esta sección del dominio se encuentra ejemplificada en la Figura 7.26a y Figura 7.26b.

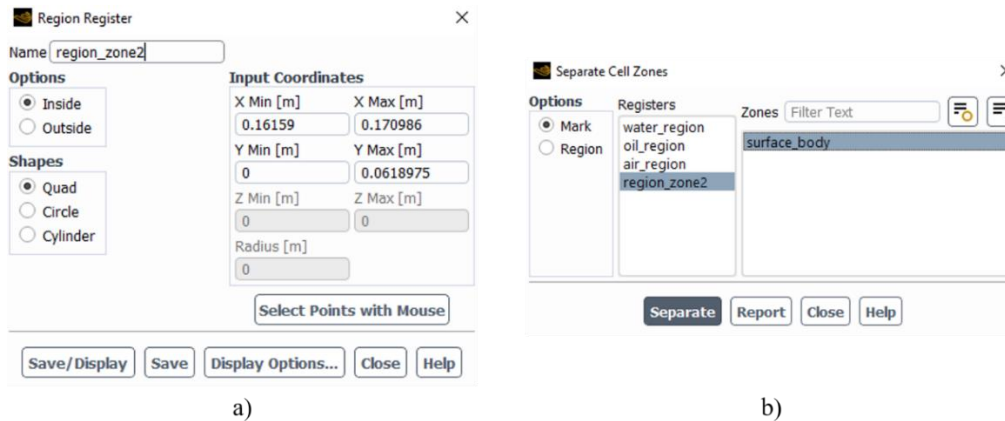
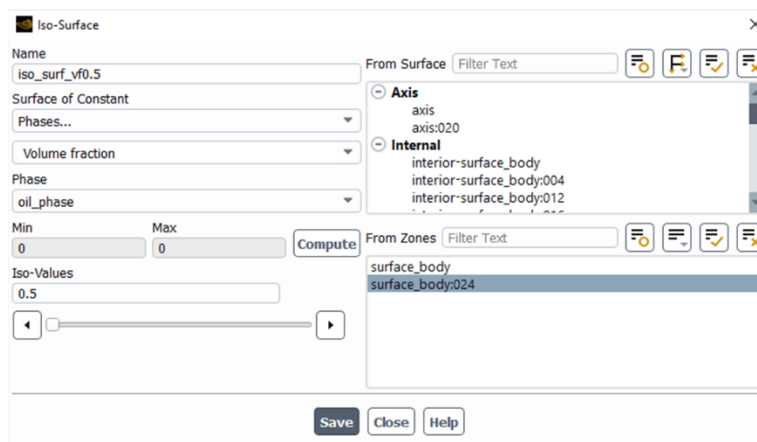


Figura 7.26. Tratamiento de región de interés a) Creación b) Separación.

Posteriormente, sobre la nueva zona creada se crea una iso superficie en la cual la fracción volumen del aceite es de 0.5 [Figura 7.27a]. En la Figura 7.27b, el contorno remarcado en gris sobre la zona 2 representa la iso superficie creada; siendo sobre esta superficie donde se obtendrán los resultados.



a)



b)

Figura 7.27. Tratamiento de iso superficie a) Creación b) Comprobación.

Finalizando, se abre el panel de integrales de superficie para calcular la magnitud de velocidad promediada en el tiempo y en toda la interfase seleccionada en la iso superficie previa (Figura 7.28).

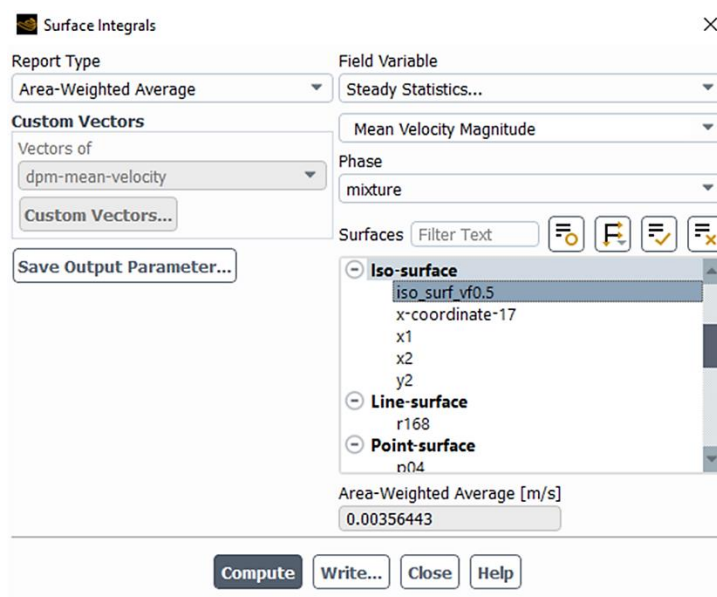


Figura 7.28. Cálculo de magnitud velocidad promedio en la interfase.

8. ANEXO C: UDF para remover partículas

```
/*UDF para remover partículas del modelo*/
#include "udf.h"
DEFINE_DPM_SCALAR_UPDATE (mass_neg, c, t, initialize, p)
{
    Thread *phase_air=THREAD_SUB_THREAD(t,2);
    if (C_VOF(c,phase_air)>=0.5)
    {
        MARK_PARTICLE(p, P_FL_REMOVED);
    }
}
/*UDF para remover partículas del modelo*/
```

9. ANEXO D: Teorema de π -Buckingham

El análisis dimensional es útil para estudiar fenómenos a través de la correlación de términos adimensionales en función de los parámetros del proceso. Uno de los métodos para ejecutar este análisis es el teorema de π -Buckingham, el cual fue utilizado en el presente trabajo y a continuación se detalla su implementación.

Con base en los variables de los principales números adimensionales con los que se estudia la dinámica de fluidos, se determinaron las variables independientes a tomar en cuenta para el método. La expresión completa contemplando 6 variables de las que depende el área interfacial se observa en la Ecuación 9.1.

Ecuación 9.1

$$A_i = f(v_{zona2}, \Delta\varepsilon, \rho_{escoria}, \sigma_{agua-aceite}, g, \Delta\rho)$$

Donde A_i es el área interfacial aceite-escoria, v es la velocidad en la interfase de la zona 2, $\Delta\varepsilon$ es el espesor inicial de la escoria, $\rho_{escoria}$ es la densidad de la escoria, $\sigma_{agua-aceite}$ es la tensión interfacial entre el agua y el aceite, g es la gravedad y $\Delta\rho$ es la diferencia de densidad entre el agua y el aceite.

$$f(A_i, v, \Delta\varepsilon, \rho_{escoria}, \sigma_{agua-aceite}, g, \Delta\rho) = 0$$

Se toman en cuenta las dimensiones primarias con base en las unidades de cada variable de la siguiente forma:

$$\begin{array}{lll} A_i \equiv [L^2] & v \equiv [LT^{-2}] & \Delta\varepsilon \equiv [L] \\ \rho_{escoria} \equiv [ML^{-3}] & \sigma_{agua-aceite} \equiv [MT^{-2}] & g \equiv [LT^{-2}] \\ \Delta\rho \equiv [ML^{-3}] & & \end{array}$$

De las expresiones anteriores se observa que son tres las unidades de medición primarias (k), las cuales son L, M y T (longitud, masa y tiempo respectivamente), por lo que $k=3$.

El número de grupos adimensionales π a formar se estima conforme a la expresión de la Ecuación 9.2

Ecuación 9.2

$$\#\pi = n - k$$

Donde $\#\pi$ es el número de grupos adimensionales a formar, n es el número de variables de las que depende la variable de interés (el área interfacial) y k es el número de unidades fundamentales presentes en las variables independientes.

En este caso, el número de variables independientes es 7 y el número de unidades fundamentales es 3, por lo que la cantidad de números π a calcular es de 4. Seguido de esto, es necesario determinar una base donde se encuentren las variables con las que se va a adimensionalizar el resto de las variables (variables repetidas). El número de elementos de esta base es igual al número de unidades fundamental diferentes que conforman las variables independientes, en este caso 3. Algunas de las características de estas variables es que deben contener información de la dimensión del sistema, la propiedad de los materiales y la interacción entre fases, por este motivo se seleccionó al espesor de

escoria inicial, la densidad de escoria y el coeficiente de tensión interfacial agua-aceite como las variables repetidas.

Consecuentemente se procedió con la formación de cada número π como se aprecia en el siguiente desarrollo.

$$\pi_1 = A_i \sigma^a \rho_{esc}^b \Delta \varepsilon^c$$

Poniendo la anterior expresión en término de unidades fundamentales

$$\pi_1 = L^2 (MT^{-2})^a (ML^{-3})^b L^c$$

Obteniendo el sistema de ecuaciones conforme a cada unidad fundamental

$$L: 2 - 3b + c = 0$$

$$M: a - 3b = 0$$

$$T: -2a = 0$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones se obtiene la siguiente solución

$$a = 0$$

$$b = 0$$

$$c = -2$$

Sustituyendo en la expresión inicial

$$\pi_1 = A_i \sigma^0 \rho_{esc}^0 \Delta \varepsilon^{-2} = A_i \Delta \varepsilon^{-2}$$

$$\pi_1 = \frac{A_i}{\Delta \varepsilon^2}$$

Del mismo modo, se repitió esta metodología para el resto de las variables, obteniendo los siguientes grupos π :

$$\pi_2 = \frac{v_{zona2}^2 \rho_{escoria} \Delta \varepsilon^2}{\sigma}$$

$$\pi_2 = \frac{g \rho_{escoria} \Delta \varepsilon^3}{\sigma}$$

$$\pi_3 = \frac{\Delta \rho}{\rho_{escoria}}$$

De tal modo que el área interfacial se puede expresar de la siguiente forma

$$\pi_1 = f(\pi_2^x, \pi_3^y, \pi_4^z)$$

Mediante posterior análisis se encontró que la siguiente expresión describe de buena manera el área interfacial adimensional.

$$\pi_1 = f(\pi_2^1, \pi_3^{-1}, \pi_4^1)$$

$$\pi_1 = f\left(\frac{v_{zona2}^2 \Delta \rho}{g \Delta \rho \Delta \varepsilon}\right)$$

Del mismo modo fue necesario, obtener una forma de calcular la velocidad de la zona 2, dado que es una variable crítica para el inicio de la emulsión. Siguiendo la metodología del teorema de π -

Buckingham, fue obtenida de igual forma la correlación para estimar la magnitud de velocidad en la zona 2.