



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE
MÉXICO**

FACULTAD DE QUÍMICA

**“ESTUDIO DE UNA NUEVA TÉCNICA DE
DESGASIFICACIÓN CON ROTOR-INYECTOR ASISTIDO
POR MODELADO FÍSICO Y MATEMÁTICO”**

T E S I S

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

P R E S E N T A :

IVAN DANIEL TORRES PATIÑO



MÉXICO, D.F.

2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO

PRESIDENTE: Prof. Eusebio Cándido Atlatenco Tlapanco

VOCAL: Prof. Carlos González Rivera

SECRETARIO: Prof. Marco Aurelio Ramírez Argáez

1er SUPLENTE: Prof. Arturo Alejandro Sánchez Santiago

2do SUPLENTE: Prof. Adrian Manuel Amaro Villeda

Sitio donde se desarrolló el tema:

Edificio "D"
Departamento de Ingeniería Metalúrgica,
Laboratorio de Solidificación y Simulación Matemática,
Facultad de Química, UNAM.

Asesor del Tema: Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez _____

Supervisor Técnico: M. en M. Juan Solórzano López _____

Sustentante: Ivan Daniel Torres Patiño _____

AGRADECIMIENTOS

Dedico este trabajo especialmente a mi madre, quien a lo largo de mi vida a sido mi orgullo y que ha formado al hombre que soy con su infinito amor.

A mi padre por su gran cariño, protección y por su compañía en todo momento.

A mis hermanos Javier, Gaby y Lili por su apoyo incondicional y confianza en mi. Además de ser mis mejores amigos y que con sus consejos me han ayudado a ser una mejor persona día con día. Y a mis sobrinas Karla, Liz y mi sobrino Andres.

A ustedes les dedico este trabajo como la culminación de mi desarrollo académico.

Agradezco a la casa máxima de estudios, la UNAM, por darme la oportunidad de pertenecer a esta gran comunidad universitaria y que con orgullo siempre llevaré sus colores, poniendo muy en alto su nombre.

A todos mis profesores que con su magnifica enseñanza y consejos me dieron las herramientas necesarias para enfrentar cualquier problema.

A mi asesor el Dr. Marco Ramírez Argáez, por ser un excelente guía y por su constante apoyo en la realización de este trabajo.

A mi asesor técnico el M. en C. Juan Solórzano por su compañerismo y buenos consejos.

A mis compañeros del cubículo Eudoxio, Ivan Robles, Eduardo quienes además de ser mis compañeros de la carrera son excelentes personas y estoy orgulloso de contar con su amistad.

Con mucho agradecimiento al Técnico en Fabricación de Aparatos y Equipos, Pedro Cabrera Juárez por su indispensable apoyo en el desarrollo de este trabajo.

A mis amigos desde la infancia, Gustavo, Paco, Javier, Cristian, Rafael, Luis, Daniel, Enrique, Cesar, Ismael y el Pelón.

A mis familiares, Abuelita Julia, Tía Malena, Tío Gil, Julia, Chela, Nora, Karina, Abril, Carla, Tío Toño, Vane, Liz, Lupe, Oscar, Alejandro, Tío Luis, Tía Josefina.

A la memoria de mi Tía Maru (q.e.p.d)

A mis compañeros del Básquetbol de la Facultad, Angelote, Mamer, Angel ½, Pelón, Memo, Mitzy, Sandra, Angel Alejandro, Emmanuel, Mario, Zenen, Peter, Moisés, Pablo, Cesar, Morro, etc...

A mis hermanos de la Facultad, Miguel, Ivan Rocha, Hugo, Ricardo, Gustavo, Isaac, Mirna, Valeria, Mara, Mónica, Irais, Andrea, Octavio, Gabriela.

A mis compañeros de la carrera, Jon, Pepe, Lalo, Tulio, Mauricio, Chino, Lilia, Diana, Abril, Lorena, Luz, Llerri, Diego, Gerardo, Guerra, Carolina, Paola, Montse, Zucoso y a los Coplittsburgh Steelers.

A mis amigos de la ENP 9, Oswaldo, Darta, Alan, Beto, Diego, Flavio, Fernando, Chucho's, Ismael, Gato, Javier, Lencho, Carlos, Roberto, David (q.e.p.d), Betty, Viry, Mónica, Diana, Erandi, Mayela, Enrique, Yaz, Claudia, Mayo.

A mis compañeros de la ENTS, Sarai Restori por su compañía y cariño, Wendy y Gabriel.

También dedico esto con mucho cariño y admiración a una de las mejores mujeres que he conocido, Cecilia Martínez por su cariño, apoyo y compañía en todo momento que lo necesité.

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

Índice General

Lista de símbolos.	VII
Índice de Tablas.	X
Índice de Figuras.	XI

Capítulo 1 Antecedentes.	1
1.1 Antecedentes.	1
1.2 Propiedades del Aluminio	2
1.2.1 Propiedades Físicas.	2
1.2.2 Propiedades Químicas.	3
1.3 Historia del Aluminio.	3
1.4 Importancia Económica y Comercial del Aluminio.	4
1.4.1 Producción del Aluminio.	5
1.4.2 Aleaciones de Aluminio.	8
1.4.3 Aplicaciones de las Aleaciones de Aluminio.	11
1.4.3.1 Industria automotriz.	11
1.4.3.2 Industria de Aviación.	12
1.5 Problemas en la fundición de Aluminio.	13
1.5.1 Solubilidad del Hidrógeno en el Aluminio y aleaciones de Aluminio.	13
1.5.1.1 Solubilidad en Aluminio Puro.	13
1.5.1.2 Solubilidad en Aleaciones de Aluminio.	14
1.5.2 Fuentes de Hidrógeno.	15
1.5.3 Porosidad.	16
1.5.4 Efectos del Hidrogeno Disuelto sobre las Propiedades Mecánicas.	19
1.5.5 Técnicas de Medición de Hidrógeno Disuelto.	20

1.6	Métodos de Desgasificado de Aluminio.	22
1.6.1	Desgasificado Natural.	22
1.6.2	Desgasificado al Vacío.	23
1.6.3	Vibración Ultrasónica.	23
1.6.4	Desgasificado con Purga de Gases.	23
1.6.4.1	Formas de introducir el gas inerte dentro del aluminio líquido.	24
1.7	Resumen de Estado del Arte en la Modelación Física y Matemática para el Proceso de Desgasificado de Aluminio.	27
1.8	Justificación y planteamiento del problema.	31
1.8.1	Objetivo.	32
1.8.2	Hipótesis.	32
Capítulo 2 Modelación Física y Matemática.		33
2.1	Descripción del problema.	33
2.2	Modelado Físico.	34
2.2.1	Construcción del Modelo Físico.	35
2.3	Modelado Matemático.	38
2.3.1	Simplificaciones.	39
2.3.2	Ecuaciones Gobernantes.	39
2.3.2.1	Ecuación de Continuidad para cada fase.	40
2.3.2.2	Ecuación de conservación de momentum para ambas fases.	40
2.3.2.3	Ecuaciones del Modelo de Turbulencia k-ε (solo para la fase líquida).	41
2.3.2.4	Ecuaciones de conservación de especies oxígeno para ambas fases.	42
2.3.3	Condiciones iniciales y de frontera.	42
2.3.4	Descripción del Software PHOENICS 3.4.	44
2.3.5	Método de Solución: Volumen de Control (VC).	46
2.3.5.1	Discretización o generación de malla en PHOENICS.	46
2.3.5.2	Integración de las Ecuaciones Gobernantes en cada Volumen.	47
2.3.5.3	Solución Numérica del Sistema de Ecuaciones Algebraicas.	48

2.4	Diseño Experimental.	48
2.4.1	Diseño experimental en el Modelo Físico.	48
2.5	Diseño Experimental en PHOENICS del Modelo Matemático.	51
Capítulo 3	Resultados y Discusión.	53
3.1	Resultados del Modelado Físico.	53
3.1.1.	Visualizaciones del vórtice formado, distribución y tamaño de burbujas de forma cualitativa.	53
3.1.2	Cinéticas de Desgasificación.	56
3.2	Resultados del Modelo Matemático.	56
3.2.1	Resultados Gráficos de Patrón de Flujo y Fracción Gaseosa.	57
3.2.2	Cinética de Desgasificación.	59
3.3	Validación	60
3.4	Discusión y Análisis de Resultados del Modelo Físico	62
3.4.1	Visualizaciones hidrodinámicas.	62
3.4.2	Cinéticas de desgasificación	63
3.4.3	Efecto de la velocidad de rotación.	65
3.4.4	Efecto del Flujo de Gas	66
3.4.5	Efecto de la Técnica de Inyección.	67
3.5	Discusión de los Resultados del Modelo Matemático.	69
Capítulo 4	Conclusiones.	72
Referencias.	75
Apéndice.	77

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
A	Área superficial de la burbuja (m^2)
a_i	Coefficiente de la variable en cualquier nodo vecino
a_p	Coefficiente de la propiedad respecto la cual se integra en el nodo P
b	Constante que representa al término fuente
C_1	Constantes empíricas convencionales del modelo matemático
C_2	Constantes empíricas convencionales del modelo matemático
C_μ	Constantes empíricas convencionales del modelo matemático
C_f	Coefficiente de fricción
D_{olla}	Diámetro de la olla (m)
$D_{O_2-H_2O}$	Coefficiente de difusión de oxígeno en agua (m^2/s)
d_b	Diámetro de burbuja (m)
e	Eficiencia
e_F	Eficiencia con la inyección del gas por el fondo
e_c	Eficiencia con la técnica convencional
F_{fricc}	Fuerza de fricción (N)
F_b	Fuerza boyante (N)
G	Efecto principal del flujo de gas
G^*	Término fuente de energía cinética (cal)
g	Aceleración de la gravedad (m/s^2)
K	Coefficiente global de transporte de masa
k_F	Coefficiente de transporte de masa en la inyección por el fondo
k_c	Coefficiente de transporte de masa en la técnica convencional
k	Energía cinética turbulenta
k_{in}	Energía cinética en la entrada de gas
k_L	Coefficiente de transporte de masa
P_i	Presión interna de la burbuja (atm)
P_{atm}	Presión atmosférica (atm)

P_H	Presión metalostática (atm)
ΔP	Gradiente de presión (atm)
R	Efecto principal de la velocidad de rotación
R_i	Fracción de la fase i
R_g	Fracción de la fase gaseosa
R_l	Fracción de la fase líquida
S	Solubilidad de hidrógeno en aluminio (mL/100 g Al)
T	Efecto principal de la técnica de inyección
t	Tiempo (seg)
V	Velocidad (m/s)
V_{N_2}	Volumen de nitrógeno consumido total (L)
Vel_{slip}	Velocidad de deslizamiento (m/s)
V_{Rl}	Velocidad de rotación de la lanza (m/s)
V_{RR}	Velocidad de rotación del rotor (m/s)
V_{RE}	Velocidad de rotación en la entrada (m/s)
Vol	Volumen de líquido tratado (m ³)
V_i	Velocidad en dirección i (m/s)
V_j	Velocidad en dirección j (m/s)
$V_{\theta,l}$	Velocidad en dirección θ del líquido (m/s)
$V_{\theta,g}$	Velocidad en dirección θ del gas (m/s)
$V_{r,l}$	Velocidad en dirección r del líquido (m/s)
$V_{r,g}$	Velocidad en dirección r del gas (m/s)
$V_{z,l}$	Velocidad en dirección z del líquido (m/s)
$V_{z,g}$	Velocidad en dirección z del gas (m/s)
X_{O_2}	Fracción masa de oxígeno
ε	Disipación de energía cinética turbulenta
ε_{in}	Disipación de energía cinética en la entrada del gas
σ	Tensión superficial (N/m)
σ_K	Constantes empíricas convencionales del modelo matemático
σ_ε	Constantes empíricas convencionales del modelo matemático
ρ_g	Densidad del Gas (kg/m ³)

ρ_l	Densidad del líquido (kg/m^3)
ρ_i	Densidad de la fase i (kg/m^3)
φ_p	Propiedad de transporte en el nodo P
φ_i	Propiedad de transporte en el nodo i
μ	Viscosidad (kg/ms)
μ_{ef}	Viscosidad efectiva (kg/ms)
μ_t	Viscosidad turbulenta (kg/ms)
ν	Viscosidad cinemática (m^2/s)
$\tau_{i,j}$	Esfuerzo de corte en dirección i sobre j (N/m^2)

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Solubilidad máxima de los elementos en el aluminio.....	8
Tabla 1.2 Designación Internacional para aleaciones forjadas.....	9
Tabla 1.3 Designación de aluminios colados.....	10
Tabla 1.4 Propiedades de algunas aleaciones de aluminio.....	10
Tabla 2.1 Propiedades físicas del aluminio líquido, agua, nitrógeno y argón.....	35
Tabla 2.2 Constantes empíricas utilizadas en el modelo k-ε.....	42
Tabla 2.3 Condiciones de Frontera aplicadas al modelo matemático.....	44
Tabla 2.4 Unidades codificadas de las variables.....	49
Tabla 2.5 Matriz de diseño experimental a dos niveles.....	49
Tabla 2.6 Resumen de correlaciones utilizadas en la simulación.....	52
Tabla 2.7 Datos necesarios para la simulación de desgasificación.....	52
Tabla 3.1 Matriz de diseño con la respuesta del coeficiente de transporte.....	64
Tabla 3.2 Cálculo de efectos de las variables mediante el algoritmo de Yates.....	64
Tabla 3.3 Efectos calculados típicos para el diseño factorial.....	65
Tabla 3.4 Efecto de la Técnica de inyección en los experimentos análogos 1-5 y 3-7, correspondientes al nivel bajo de RPM.....	68
Tabla 3.5 Porcentaje del efecto de la técnica de inyección por el fondo respecto de la técnica convencional y porcentaje de la eficiencia de la inyección por el fondo relativa a la convencional.....	69

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Producción mundial de aluminio primario.....	7
Figura 1.2. Producción mundial de aluminio primario en los últimos 10 años.....	7
Figura 1.3 Chasis fabricado completamente de aleación de Al.....	11
Figura 1.4 Avión comercial (Un Jumbo Jet estándar Boeing 747 contiene alrededor de 75,000kg de aluminio).....	12
Figura 1.5 Solubilidad estimada de hidrógeno en aleaciones 356 y 319 comparada con la solubilidad en aluminio puro.....	14
Figura 1.6. Micro-rechufe entre los brazos dendríticos de una aleación de Al-Si.....	17
Figura 1.7. Poro de gas en una aleación Al-8% Si.....	18
Figura 1.8 Ejemplos de microporosidad debido a contracción y gas hidrógeno atrapado.....	18
Figura 1.9 Algunas propiedades obtenidas en un ensayo tensión de una aleación 356 en función de la velocidad de solidificación con diferentes niveles de hidrógeno.....	20
Figura 1.10 Nivel de porosidad en una muestra de la prueba de presión reducida (RPT) ^[6]	21
Figura 1.11. Esquema del sistema de desgasificado con rotor-inyector.....	26
Figura 1.12 Burbujas grandes producidas por el uso de la lanza de grafito.....	26
Figura 1.13 Dispersión de burbujas finas obtenidas en modelo de agua usando rotor-inyector.....	26
Figura 1.14. Comparación de la cinética de desgasificación de los tres métodos de inyección de gas: lanza, tapón poroso y rotor.....	27
Figura 2.1 Plano general para la construcción del modelo.....	36
Figura 2.2 Etapas de Construcción del modelo físico.....	37
Figura 2.3 a) Rotor de grafito de FOSECO, b) Rotor de Nylamid modelado.....	37
Figura 2.4 Junta Rotativa.....	38
Figura 2.5. Modelo Físico.....	38
Figura 2.6 Condiciones de frontera aplicadas al modelado matemático.....	43
Figura 2.7. Principales funciones en PHOENICS.....	45
Figura 2.8. Funciones de PHOENICS y los archivos de intercomunicación.....	45
Figura 2.9. Representación gráfica de la nomenclatura utilizada para realizar el balance de las ecuaciones de conservación sobre el nodo <i>P</i>	47

Figura 2.10. Discretización en θ , r z. a) Plano r-z y b) Plano r- θ	47
Figura 2.11. Instrumento de medición de oxígeno disuelto HANNA HI 9146.....	50
Figura 2.12. Arreglo experimental a) técnica convencional y b) técnica propuesta.....	50
Figura 3.1. Fotos del vórtice formado en a) 290 RPM-convencional, b) 573 RPM-convencional, c) 290 RPM-inyección por el fondo y d) 573 RPM-inyección por el fondo.....	53
Figura 3.2. Distribución y tamaño de burbujas (cualitativo) de a) 10 L/min-290 rpm-conv. b) 10 L/min-573 rpm-conv, c) 40 L/min-290 rpm-conv. y d) 40 L/min-573 rpm-conv.....	54
Figura 3.3. Distribución y tamaño de burbuja, bajo el efecto combinado de las variables de proceso, RPM y Flujo de Gas. a) Experimento 5, b) Experimento 6, c) Experimento 7 y d) Exp. 8.....	55
Figura 3.4. Cinéticas de desgasificación del promedio de los ocho experimentos replicados.....	56
Figura 3.5 a) Vectores de velocidad y b) Contornos de fracción gaseosa en un plano r-z, del caso: 573 rpm , 40 l/min de inyección convencional.....	57
Figura 3.6 a) Vectores de velocidad en un plano r-z, b) Contornos de fracción de gas.....	58
Figura 3.7 Isolíneas de fracción de gas dentro del contenedor para a) Técnica convencional de inyección y b) Inyección por el fondo.....	58
Figura 3.8 Contornos de viscosidad cinemática turbulenta, a) Inyección convencional, b) Inyección por el fondo.....	59
Figura 3.9 Curva cinética de desgasificación del experimento 4.....	59
Figura 3.10 Curva cinética de desgasificación del experimento 8.....	60
Figura 3.11 Validación del Modelo Matemático de la Técnica Convencional.....	61
Figura 3.12 Validación del Modelo Matemático de la Técnica de Inyección por el Fondo.....	61
Figura 3.13 Interacción de RPM y Flujo de Gas. Los valores están del orden de $k \times 10^3$	67

Capítulo 1

Antecedentes

1.1 Generalidades del Aluminio

La sociedad global hace frente al gran reto de trasladar la actividad económica y estilos de vida hacia un sustentable siglo 21, incluyendo los conocimientos necesarios no solo para prevenir el deterioro del medio ambiente sino para fomentar su protección. Para que la industria del aluminio cumpla con su parte, necesita minimizar las negativas económicas, sociales y de medio ambiente, maximizando los procesos de obtención del metal y la producción de objetos de alto valor agregado.

El aluminio es el tercer elemento mas abundante en la corteza terrestre, después del oxígeno y el silicio, y sus compuestos conforman aproximadamente el 8 % de esta. Sin embargo, solo existe en la naturaleza en combinaciones muy estables con otros elementos (principalmente como silicatos y óxidos). Debido a la estabilidad de estos compuestos, tomó varias décadas desarrollar procesos para obtener aluminio de forma relativamente pura.

El aluminio es un metal con excelente resistencia a la corrosión, tiene buena resistencia mecánica, es muy ligero y es 100 % reciclable. Casi tres cuartas partes del aluminio producido en la historia permanecen en uso actualmente.

El aluminio tiene una densidad muy baja comparada con otros metales: cerca de una tercera parte de la densidad del hierro y el acero, poco mas de una tercera parte de la densidad del cobre y una cuarta parte de la densidad de la plata. El uso de componentes ligeros de aluminio en un vehículo puede ahorrar de 6 a 12 veces la energía tomada para producir el aluminio primario utilizado en su construcción. Los ahorros del combustible de hasta ocho por ciento se pueden observar por cada reducción del 10 % en el peso de los vehículos. Un kilogramo de aluminio, usado para sustituir materiales más pesados dentro de un coche o un carro ligero, tiene el potencial de eliminar 20 kg del CO₂

producido sobre tiempo de vida del vehículo. Para otros vehículos tales como trenes, transbordadores y aviones, los ahorros potenciales son incluso mayores.

1.2 Propiedades del Aluminio

1.2.1 Propiedades Físicas

El aluminio, cuyo número atómico es 13, se encuentra en la familia III-A de la Tabla periódica, junto con el Boro, Galio e Indio, está en el segundo periodo después del Sodio y del Magnesio y es seguido por el Silicio.

La densidad del aluminio es de 2.7 g/cm^3 . Decrece a 2.55 g/cm^3 para el sólido a $660 \text{ }^\circ\text{C}$, justo por debajo de la temperatura de fusión y a 2.38 g/cm^3 para el metal líquido a esta temperatura. La fusión está acompañada por un aumento en el volumen de un 6.5 a 6.7 por ciento, lo que depende de la pureza del metal.

La conductividad térmica del aluminio es de 209 W/mK y es alrededor de 52.5 % de la del cobre puro, que es de 399 W/mK .

La conductividad eléctrica del aluminio se expresa normalmente como un porcentaje del *International Annealed Copper Standard*, IACS, (norma internacional del cobre recocido), adoptada en 1913. La norma del cobre de 100 % de conductividad es equivalente a una resistividad eléctrica de $1.7241 \text{ } \Omega\text{cm}$. El aluminio puro tiene una resistividad de $2.630 \text{ } \Omega\text{cm}$ que equivale a una conductividad de 63.8 % IACS.

Es un buen conductor de corriente: un kilogramo de cable de aluminio puede conducir hasta dos veces más corriente que un kilogramo de cobre. Su punto de fusión y ebullición son de $660 \text{ }^\circ\text{C}$ y $2467 \text{ }^\circ\text{C}$ respectivamente. Su estructura cristalina es cúbica centrada en las caras. El aluminio es un metal plateado y por lo general, las aleaciones de aluminio tienen una coloración similar, con alta reflectividad para la luz (refleja de 80 a 85 % de radiación visible incidente) y del calor, por lo que es usado para fabricar utensilios de cocina, intercambiadores de calor como radiadores.

En resumen, las propiedades del aluminio que lo hacen un material tan provechoso son: su ligereza (un tercio del peso del cobre y el acero), buena resistencia a la corrosión (característica muy útil para aquellos productos que requieren protección y conservación), buena resistencia mecánica, es un buen conductor de la corriente eléctrica, no es magnético ni tóxico y es muy dúctil.

1.2.2 Propiedades Químicas

De acuerdo a su posición en la serie electromotriz de los elementos y al calor de formación de su óxido de 1.606×10^6 J/mol (383 900 cal/mol), el aluminio se considera como un elemento muy reactivo que se oxida con facilidad. Es muy resistente a la corrosión, tanto el metal puro como sus aleaciones. La resistencia química se debe a la formación de una película de óxido muy delgada, compacta que se adhiere con firmeza, la cual es insoluble en agua y en muchos otros disolventes. Esta película protege al metal que está debajo, de otros ataques, aun cuando la capa de óxido tiene solo un espesor de 4 a 5×10^{-6} mm. Los disolventes más poderosos del aluminio son los ácidos halogenados (ácido clorhídrico y ácido fluorhídrico), el ácido sulfúrico concentrado y las soluciones acuosas de hidróxidos alcalinos y carbonatados de sodio y potasio.

1.3 Historia del Aluminio

El aluminio se produce del mineral (aluminio primario) y del desecho (aluminio secundario o reciclado). El mineral de aluminio más común es la bauxita llamado así debido a que fue encontrado en 1821 en la región de Baux, al sur de Francia. La bauxita es resultado de descomposición e intemperismo de las rocas que contienen aluminio bajo condiciones tropicales, por ello los depósitos importantes de este mineral se encuentran en zonas tropicales y subtropicales como Brasil, Venezuela, África del Norte, Australia, Jamaica, Sudáfrica, Guinea y al Noroeste de la India, como los más importantes, aunque también hay depósitos en Europa y Norte América.

La bauxita entonces se procesa y se obtiene la alúmina mediante el proceso Bayer, que ha cambiado muy poco desde que se abrió la primera planta hace más de 100 años.

La alúmina es principalmente óxido de aluminio hidratado ($\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$) y que por lo general tiene impurezas de óxidos de hierro, compuestos de fósforo y titanio. La alúmina posteriormente se reduce por un proceso electrolítico en sales fundidas para obtener aluminio metálico.

Los primeros intentos para separar el metal de sus compuestos estables fueron hechos por Sir Humphrey Davy, quién en 1807 utilizó una batería galvánica de mil celdas, pero no con buenos resultados.

En 1825, Orested, informó que redujo cloruro de aluminio con una amalgama de Potasio; mas tarde Wohler utilizó el potasio metálico como reductor. Estos procesos eran muy caros y al aluminio metálico no se le daba otra utilidad que la decorativa.

El aluminio es un metal joven, comenzó a producirse de manera comercial hace 155 años cuando en 1854 el francés Henri Saint-Claire DeVile mejoró el método de Wohler para crear el primer proceso comercial. En 1885, Hamilton Y. Cassner (USA) mejoró el proceso de Deville con una producción anual de 15 toneladas. Pero no fue, sino hasta que en 1886 el francés Paul Louis Hèroult en Francia y Charles Martín Hall en Estados Unidos patentaron simultáneamente la invención de su proceso electrolítico para la reducción del óxido de aluminio (alúmina) que abrió la posibilidad de reducir costos y así convertir el aluminio en un metal comercial de uso masivo. Las patentes tanto de Hall como de Hèroult incluían la electrólisis del óxido de aluminio en un baño de sales de haluros fundidos y desde entonces, la alúmina extraída de la bauxita en un baño de criolita, se ha convertido en la fuente más importante de aluminio, de hecho la única^[1].

1.4 Importancia Económica y Comercial del Aluminio

Durante los periodos correspondientes a las dos guerras mundiales hubo un gran aumento en la demanda del aluminio, la cual, fue seguida por un abatimiento en las ventas. Al contar ya con la capacidad de reducción instalada para solventar los requerimientos en tiempo de guerra, se recurrió a toda clase de incentivos para hallar salida a la capacidad de producción de estas plantas. Grandes tonelajes de metal recuperado de los aviones destruidos u obsoletos se usaron para la fabricación de viviendas temporales prefabricadas y al mismo tiempo hubo una creciente demanda de material laminado para

los utensilios domésticos y de aleaciones para los vehículos de transporte, la ingeniería estructural y de edificación, la distribución de energía eléctrica y las aplicaciones marinas.

El aluminio es un metal que ha incrementado su demanda año con año, y que en poco más de un siglo se ha convertido en el segundo metal más usado por la humanidad solo después de las aleaciones base hierro.

1.4.1 Producción del Aluminio

Como ya se mencionó, el aluminio es el tercer elemento más abundante en la corteza terrestre después del oxígeno y el silicio, es el elemento metálico más común y es extraído de la bauxita.

La bauxita se lava y se tritura para dar un polvo fino. La bauxita triturada se alimenta a grandes recipientes digestores de acero, que contienen una solución de hidróxido de sodio y se calienta a una temperatura de 165 °C y una presión cercana a 6 atmósferas. El Al_2O_3 pasa a la solución como aluminato de sodio y la sílice se convierte en aluminosilicato de sodio, gran parte del cual precipita junto con el “barro rojo” residual que contiene bauxita sin disolver, hierro, silicio y titanio. La solución se filtra y el filtrado se bombea a tanques altos y cilíndricos de acero y se deja enfriar. El $\text{Al}(\text{OH})_3$ se precipita al inocular la solución filtrada con cristales iniciadores de alúmina y se agita. El precipitado se elimina mediante filtración y se calcina a temperaturas entre 1200 y 1300 °C en grandes hornos rotatorios para secar y dejar la alúmina como un polvo blanco.

La alúmina se disuelve en un baño electrolítico de criolita fundida (Na_3AlF_6) a 950 °C en un crisol. Se hace pasar una corriente eléctrica de aproximadamente 200,000 A, a un bajo potencial. Como resultado de la electrólisis, el aluminio fundido se deposita en el fondo del contenedor. El aluminio producido por la electrólisis de la alúmina en un baño de criolita fundida tiene una pureza entre 99.5 y 99.7%, en donde las principales impurezas son el hierro y el silicio. Con una adecuada selección de materias primas y optimizando la operación de la planta de reducción, es posible obtener purezas en el

rango de 99.8-99.9%. Se han diseñado procesos de refinación electrolítica por medio de los cuales se produce aluminio con una pureza mayor del 99.99%.

Se necesitan de dos a tres toneladas de bauxita para producir una tonelada de alúmina y dos toneladas de alúmina se necesitan para producir una tonelada de aluminio metálico.

Las fundidoras de aluminio consisten en una o más líneas de fundición, cada una cuenta típicamente con 300 crisoles y producen aproximadamente 150,000 toneladas al año. Sin embargo, algunas fundidoras de última generación tienen producciones que van de las 200,000 a las 300,000 toneladas anuales. El consumo de energía por cada kilogramo de aluminio reducido considerando eficiencias y caídas de potencial, está entre 15 y 18 Kilowatts-hora. El aluminio reciclado requiere solamente el 5% de la energía necesaria para hacer aluminio primario. El metal reciclado que se mezcla con el aluminio “nuevo” permite un considerable ahorro de energía y también mejora la eficiencia térmica. No hay diferencias entre el aluminio primario y el reciclado en términos de calidad o propiedades mecánicas.

El aluminio es el metal no ferroso más consumido en el mundo con una producción anual de 42 millones de toneladas, de las cuales 26 millones de toneladas son aluminio primario producido desde el mineral y las restantes 16 millones de toneladas provienen del metal reciclado ^[2]. A pesar de que el cobre, plomo y estaño han sido usados desde hace cientos de años, hoy el aluminio se produce en mayor cantidad que estos metales no ferrosos juntos. La combinación única de sus propiedades lo hacen conveniente para un sin número de aplicaciones.

En la Figura 1.1 se muestra la producción mundial de aluminio primario en las zonas productoras más importantes. El Instituto Internacional del Aluminio reporta que la producción de aluminio primario ascendió de 13.501 a 25.989 millones de toneladas en los últimos diez años. El aumento en la producción del aluminio primario fue de un 92.5% ^[2].

En la Figura 1.2 se observa que en Norte América no hay un incremento representativo en la producción de aluminio, mientras que en Europa y Asia existe un notable aumento de 10.27 y 21.9% respectivamente en los últimos dos años.

Producción Mundial de Aluminio Primario

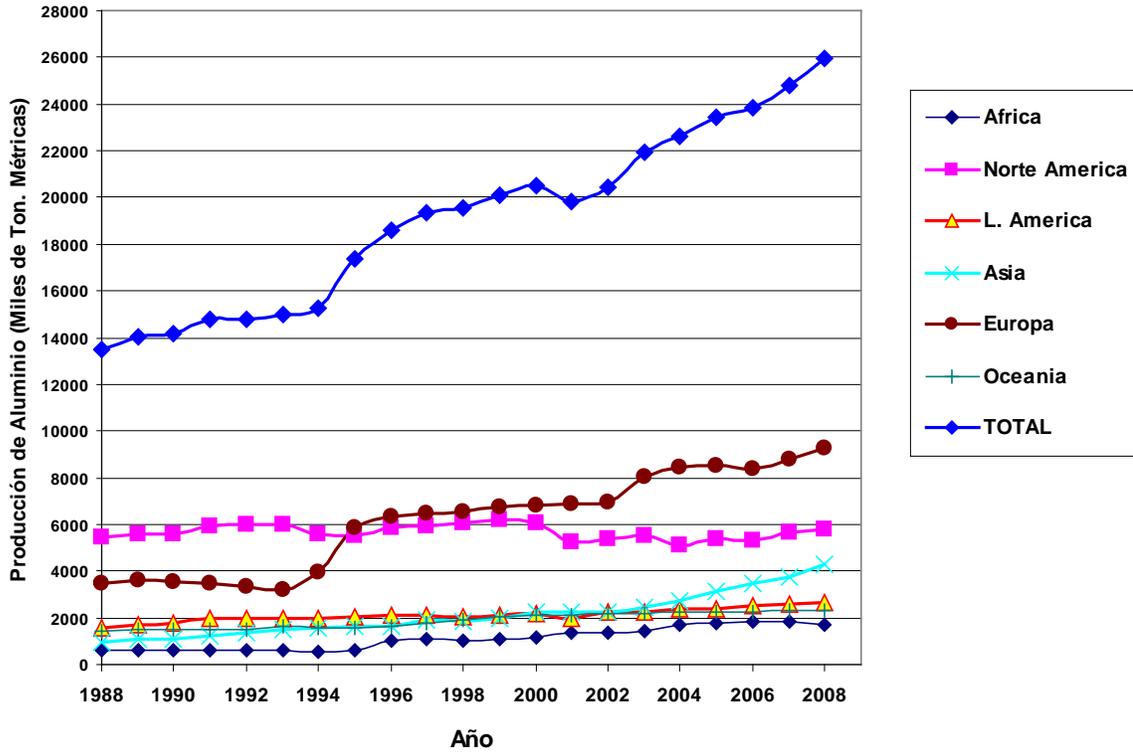


Figura 1.1. Producción mundial de aluminio primario [2].

Producción Mundial de aluminio primario

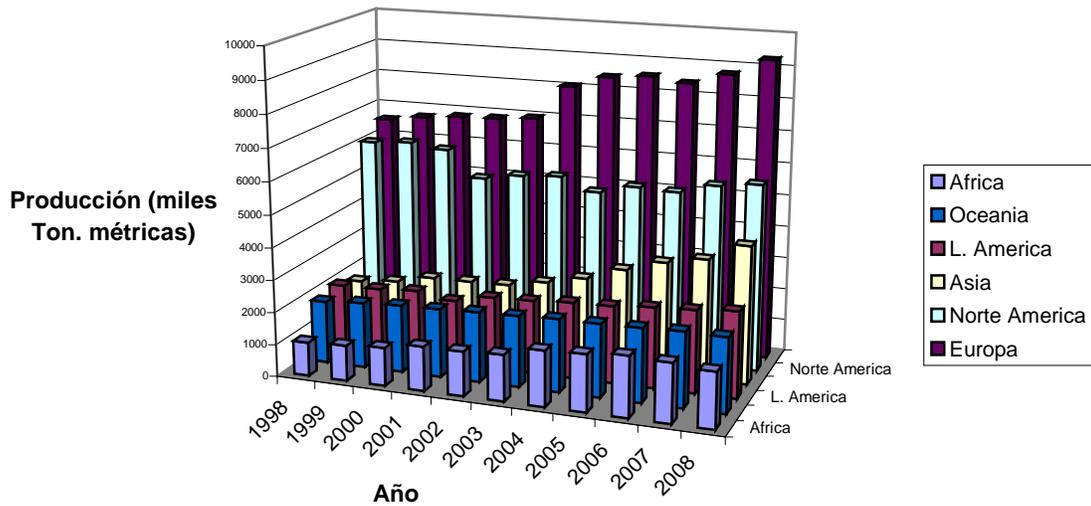


Figura 1.2. Producción mundial de aluminio primario en los últimos 10 años [2]

El líder mundial en la producción de aluminio Río Tinto Alcan produjo en 2008 cerca de 35 millones de toneladas de bauxita, 9 millones de toneladas de alúmina y 4 millones de toneladas de aluminio [2].

1.4.2 Aleaciones de Aluminio

El aluminio puro es relativamente ligero, es un metal dúctil, el cual puede ser aleado con pequeñas cantidades de otros metales para aumentar sus propiedades, mientras no pierda sus cualidades mas importantes: la ligereza y resistencia.

Los principales elementos de aleación del aluminio son: cobre, magnesio, silicio, manganeso y zinc. En la Tabla 1.1 se muestran las solubilidades máximas de distintos elementos en el aluminio.

Elemento	Temperatura (°C)	Solubilidad máxima (%peso)
Cadmio	649	0.4
Cobalto	657	<0.02
Cobre	548	5.65
Cromo	661	0.77
Estaño	228	0.06
Hierro	655	0.05
Magnesio	450	17.4
Manganeso	658	1.82
Níquel	640	0.04
Plata	566	55.6
Silicio	577	1.65
Titanio	665	1.3
Vanadio	661	0.4
Zinc	443	70.0
Zirconio	660.5	0.28

Tabla 1.1 Solubilidad máxima de los elementos en el aluminio.

Las aleaciones de aluminio se estudian en términos de sus diagramas de equilibrio y de tratamiento térmico dentro de los límites que van desde el propio metal con su baja resistencia a través de la gama de aleaciones, hasta llegar a las que son de ocho a diez veces más resistentes que el metal puro.

Las aleaciones comprendidas en las normas se pueden dividir en dos grupos principales, uno es el que se usa para la fundición de aluminio y el otro se emplea para fabricar piezas conformadas mecánicamente.

Las aleaciones conformadas mecánicamente se designan mediante un acuerdo internacional de un sistema de cuatro dígitos, de los cuales el primero de ellos indica el elemento principal de la aleación como se muestra en la Tabla 1.2.

1XXX	Aluminio de 99% pureza mínima
2XXX	Aleaciones aluminio-cobre
3XXX	Aleaciones aluminio-manganeso
4XXX	Aleaciones aluminio-silicio
5XXX	Aleaciones aluminio-magnesio
6XXX	Aleaciones aluminio-magnesio-silicio
7XXX	Aleaciones aluminio-zinc-magnesio
8XXX	Aleaciones aluminio-otros elementos

Tabla 1.2 Designación Internacional para aleaciones forjadas

El segundo dígito en estas designaciones indica las modificaciones de la aleación. Para la serie 1XXX, el 3^{er} y 4^o dígito indican las cantidades mínimas en la aleación, por ejemplo 1050 indica un mínimo de 99.5% de aluminio. En las otras series el 3er y 4^o dígito indican aleaciones diferentes en el grupo y no tienen un significado numérico.

De igual forma la designación de las fundiciones de aluminio se muestra en la Tabla 1.3.

La designación para las fundiciones de aluminio consiste principalmente en 3 dígitos, el primer dígito indica el mayor elemento de aleación como se ve en la Tabla 1.3. En la Tabla 1.4 se muestran las propiedades mecánicas de algunas aleaciones de aluminio a temperatura ambiente.

1XX	Aluminio (99.00% min.)
2XX	Aluminio-Cobre
3XX	Al-Si, con Cu y/o Mg.
4XX	Aluminio-Silicio
5XX	Aluminio-Magnesio
6XX	Serie no usada
7XX	Aluminio-Zinc
8XX	Aluminio-Estaño

Tabla 1.3 Designación de aluminios colados.

Aleación (UNS)	Tratamiento	UTS (MPa)	YS (MPa)	Elongación (%)
1100 (A91100)	O	90	35	35-45
1100	H14	125	120	9-20
2024 (A92024)	O	190	75	20-22
2024	T4	470	325	19-20
3003 (A93003)	O	110	40	30-40
3003	H14	150	145	8-16
5052 (A95052)	O	190	90	25-30
5052	H34	260	215	10-14
6061 (A96061)	O	125	55	25-30
6061	T6	310	275	12-17
7075 (A97075)	O	230	105	16-17
7075	T6	570	500	11

Tabla 1.4 Propiedades de algunas aleaciones de aluminio.

1.4.3 Aplicaciones de las Aleaciones de Aluminio

1.4.3.1 Industria automotriz

La combinación de ligereza y resistencia hacen a las aleaciones de aluminio el material ideal para cualquier uso de transporte. Estas características permiten utilizarlo en diversos componentes – monoblocks, cabeza de los cilindros, radiadores, chasis, etc- La inversión inicial en energía se compensa muchas veces por encima en ahorro de combustible y ganancias durante el reciclaje de la mayoría de los vehículos (ver Figura 1.3).

La industria automotriz Ford ha publicado un estimado de ahorro de gasolina a través del uso del aluminio. Ford ha demostrado que una reducción de 1 litro de combustible por cada 120 km es obtenido por una reducción de 200 kg en el peso. Esto asciende por encima de 1000 litros en la vida del vehículo. La producción automotriz se concentra actualmente en tres bloques económicos importantes que comprenden Norte América, Europa occidental y Japón superando los 70 millones de unidades anualmente.



Figura 1.3 Chasis fabricado completamente de aleación de Al.

1.4.3.2 Industria de Aviación

La industria comercial moderna de la aviación nunca habría tenido éxito sin aluminio. El primer aeroplano de los hermanos Wright, que voló en 1903, tenía cuatro cilindros, motor de 12 caballos de fuerza modificado con un bloque de aluminio de 67 kg para reducir el peso. El aluminio sustituyó gradualmente a la madera, al acero y a otras piezas del aeroplano en los primeros años de 1900 y el primer aeroplano construido completamente de aluminio fue en los 20's y desde entonces, los aeroplanos de todas clases y tamaños se han hecho en gran parte de aleaciones de aluminio. Muchas partes internas como los asientos se hacen de aluminio para ahorrar peso y por lo tanto combustible, para reducir emisiones y para aumentar la carga útil (ver Figura 1.4).



Figura 1.4 Avión comercial (Un Jumbo Jet estándar Boeing 747 contiene alrededor de 75,000kg de aluminio)

Cada día, hay alrededor de 5,300 vuelos comerciales de pasajeros en el mundo y muchos miles de avionetas y helicópteros en circulación diaria. Se pronostica que la demanda para el uso de la aviación comercial puede incrementarse en un 60% la próxima década.

El aluminio es el material primario del avión, abarcando cerca del 80% de su peso. Debido a su resistencia a la corrosión, algunas líneas aéreas no pintan sus aeroplanos, ahorrando varios cientos de kilogramos en peso.

Las aleaciones de aluminio con 0.5 % de Mg y 0.5 % de Si mediante extrusión pueden formar secciones delgadas muy intrincadas que posean una resistencia media. Este tipo de aleaciones se usa ampliamente en las ampliaciones arquitectónicas. Las aleaciones de Al-Cu-Mg-Mn-Si y las de Al-Zn-Mg-Cu responden al tratamiento térmico

seguido por el envejecimiento a temperatura ambiente o a una temperatura entre los 120 a 200 °C para obtener buenas propiedades mecánicas y que se utilizan en forma de láminas, extrusiones, varillas y alambres para la construcción de aviones.

1.5 Problemas en la fundición de Aluminio

La mayoría de piezas de aluminio de alto valor agregado usadas en la industria aeronáutica y automotriz son producidas vía fundición. Estas piezas requieren satisfacer estrictos controles de calidad y particularmente deben poseer excelentes propiedades mecánicas. Para lograr piezas de aluminio de alta calidad, se deben realizar tratamientos en el metal líquido que ayuden a incrementar resistencia, resolver los problemas que aparecen en su producción y que a continuación se describen a detalle.

1.5.1 Solubilidad del Hidrógeno en el Aluminio y aleaciones de Aluminio

1.5.1.1 Solubilidad en Aluminio Puro

El hidrógeno es el único gas con una significativa solubilidad en el aluminio fundido. Este gas disuelto juega el mayor rol en el desarrollo de piezas insanas debido a la porosidad presente en ellas. La solubilidad del hidrógeno en aluminio puro a una atmósfera de presión se muestra en la Figura 1.5. En la fase líquida, la solubilidad fue determinada por Opie y Grant ^[3], y está dada por la siguiente ecuación:

$$\log_{10}S = \frac{-2550}{T} + 2.62 \quad (1.1)$$

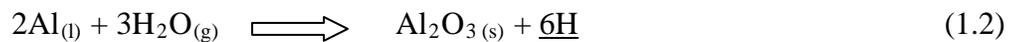
Donde S es la solubilidad y está en mililitros de hidrógeno a Temperatura y Presión estándar por cada 100 gramos de aluminio, y la temperatura T es expresada en Kelvin.

El problema reside en que la relativamente grande cantidad de hidrógeno disuelto en la fase líquida es incapaz de permanecer disuelta en la fase sólida durante la solidificación y eventualmente provoca la formación de poros. Un simple cálculo basado en la Figura 1.5 sirve para ilustrar el problema. En el punto de fusión, la solubilidad en el

Esta película sirve para aislar al baño de la atmósfera encima de él. Cualquier procedimiento diseñado para minimizar la recolección de hidrógeno debe estar dirigido a mantener esta película de óxido tan intacta como sea posible.

1.5.2 Fuentes de Hidrógeno

La mayor parte del hidrógeno que se encuentra disuelto en el aluminio fundido proviene de la disociación del vapor de agua en la superficie del líquido de acuerdo a la siguiente reacción:



Esta reacción es altamente favorecida a las temperaturas de operación y es seguro asumir que todo el vapor de agua que entra en contacto con el baño se disocia de esta forma. El contacto debe ser con el aluminio metálico no con el óxido.

La atmósfera

La atmósfera es una de las más importantes fuentes de vapor de agua, por ejemplo, aire a 26°C y 65% de humedad relativa contiene casi 16 gramos de agua por metro cúbico.

Escorificantes

Los escorificantes son, en general, sales higroscópicas las cuales naturalmente contienen agua atraída de la atmósfera. Por ello, los escorificantes deben ser cuidadosamente empaquetados, almacenados y precalentados para retirar toda el agua.

Crisoles

Los crisoles nuevos siempre contienen un poco de humedad en sus poros, y las fundiciones hechas en crisoles nuevos presentarán mayor gasificación que en crisoles viejos.

Gases de combustión

Los productos de combustión contienen de 10 a 20% de vapor de agua. El gas natural puede producir más de 2 m³ de vapor de agua por cada m³ de gas quemado. Las ventajas de usar hornos eléctricos para minimizar la cantidad de hidrógeno son obvias.

Refractarios

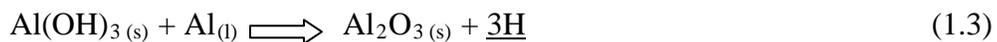
Como los crisoles, los refractarios nuevos contienen algo de humedad, la cual contribuye a la cantidad de hidrógeno en el metal hasta que se elimine totalmente con el uso.

Herramientas de fundición

Herramientas como las cucharas, insuficientemente precalentadas pueden ser una fuente importante de hidrógeno.

Materiales de carga

Los materiales de carga pueden agregar hidrógeno a través de la humedad contenida en su superficie, poros y hendiduras. También pueden introducir hidrógeno a través de otras fuentes, por ejemplo, la chatarra puede estar contaminada con grasa o aceite de corte. El aluminio parcialmente corroído puede agregar hidrógeno por la descomposición de los productos de corrosión de acuerdo a la reacción:



Evitar la disolución de hidrógeno requiere de constante vigilancia durante el manejo del metal fundido. La capa de escoria es una efectiva barrera a la recolección de hidrógeno por ello es importante procurar que esta se perturbe tan infrecuentemente como sea posible.

1.5.3 Porosidad.

La porosidad es el defecto más común en piezas de fundición y es la mayor causa de rechazos en las piezas coladas. A menudo se clasifica a este defecto como porosidad

debida a la contracción o por gases sin disolver. Esta clasificación regularmente es incorrecta ya que la porosidad encontrada es debido a la combinación de estos dos fenómenos.

Al descender la temperatura durante la solidificación la solubilidad del hidrógeno disminuye significativamente e intenta salir del baño líquido, pero si no lo logra, este queda atrapado en el interior de la pieza en forma de burbujas, llamadas porosidades.

Como ya se mencionó antes, los huecos presentes en las pieza no son a causa únicamente de los gases disueltos, también están formados por rechupes o micro-rechupes (Figura 1.6), que son ocasionados por la contracción del metal durante la solidificación, esto provoca que en ciertas zonas donde el metal no ha solidificado completamente siga contrayéndose y a su vez queda bloqueado por el metal solidificado, impidiendo la alimentación de material y formándose así los rechupes.

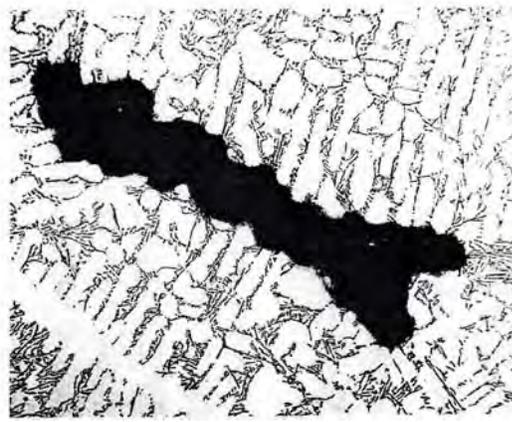


Figura 1.6. Micro-rechupado entre los brazos dendríticos de una aleación de Al-Si.

Un ejemplo de poro de gas libre encontrado en una aleación de Al-8%Si el cual contenía 0.8 ml H₂/100 g Al se muestra en la Figura 1.7.

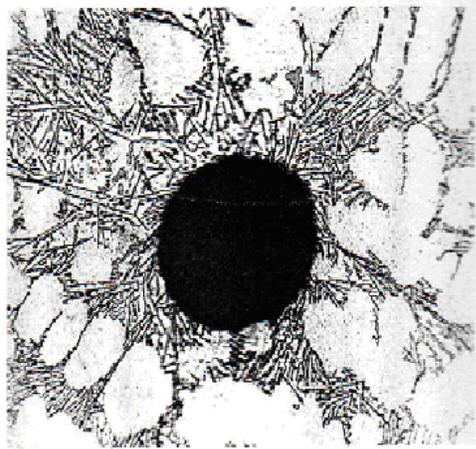


Figura 1.7. Poro de gas en una aleación Al-8% Si.

La gran mayoría de microporosidad encontrada en las piezas coladas debido a la combinación de gas y contracción, se generan típicamente en las regiones interdendríticas, ver Figuras 1.8.

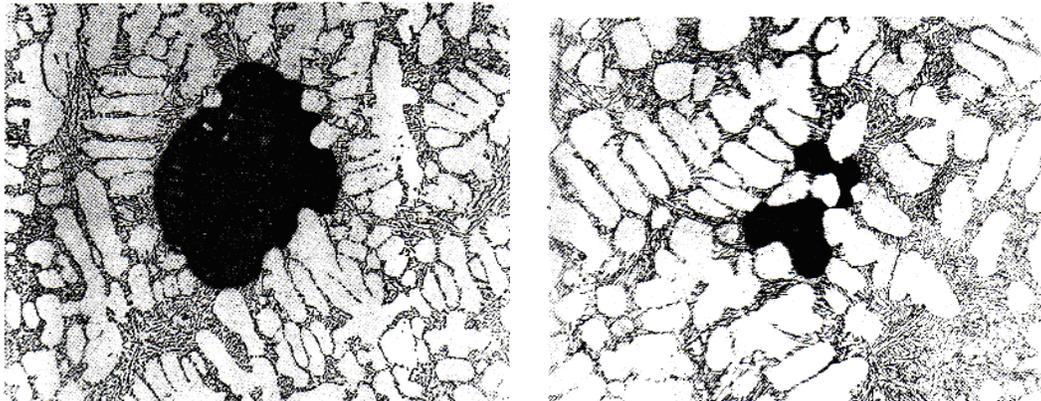


Figura 1.8 Ejemplos de microporosidad debido a contracción y gas hidrógeno atrapado.

Las razones que explican la formación de porosidad por gas atrapado al final de la solidificación pueden ser visualizadas mejor considerando una simple ecuación que describe las condiciones en las que un poro es estable. Para que un poro exista, su presión interna debe superar todas las fuerzas externas que puedan colapsarlo, como son: la presión atmosférica actuando sobre el metal líquido, la presión metalostática que ejerce el baño y las fuerzas debido a la tensión superficial de las fases sólidas o líquidas en contacto con el poro. Estas consideraciones se resumen en la siguiente expresión:

$$P_i \geq P_{\text{atm}} + P_H + \sigma(1/r_1 + 1/r_2). \quad (1.4)$$

Mientras que P_{atm} y P_H no son muy grandes en la mayoría de los casos, las tensiones superficiales suelen ser muy altas y por lo tanto se necesita de una presión interna muy alta para la formación del poro^[4].

1.5.4 Efectos del Hidrogeno Disuelto sobre las Propiedades Mecánicas

A continuación se mencionan algunas propiedades que se ven afectadas por la presencia de microporosidad.

Propiedades de resistencia a la tensión.

Existen muchos datos que demuestran el efecto negativo del hidrógeno y la resultante porosidad en las propiedades de resistencia a la tensión. Una variable importante en la fundición, es la velocidad de enfriamiento. Datos experimentales obtenidos por Frang y Gragner^[5] muestran que a incrementos en la velocidad de enfriamiento, disminuye la cantidad y el tamaño de los poros. En la Figura 1.9 se muestra el efecto de la velocidad de enfriamiento sobre las propiedades de resistencia a la tensión de una aleación de aluminio 356 con diferentes niveles de hidrógeno, colada en molde de arena.

La resistencia a la tensión y el porcentaje de elongación decrecen seriamente con el incremento de la concentración de hidrógeno.

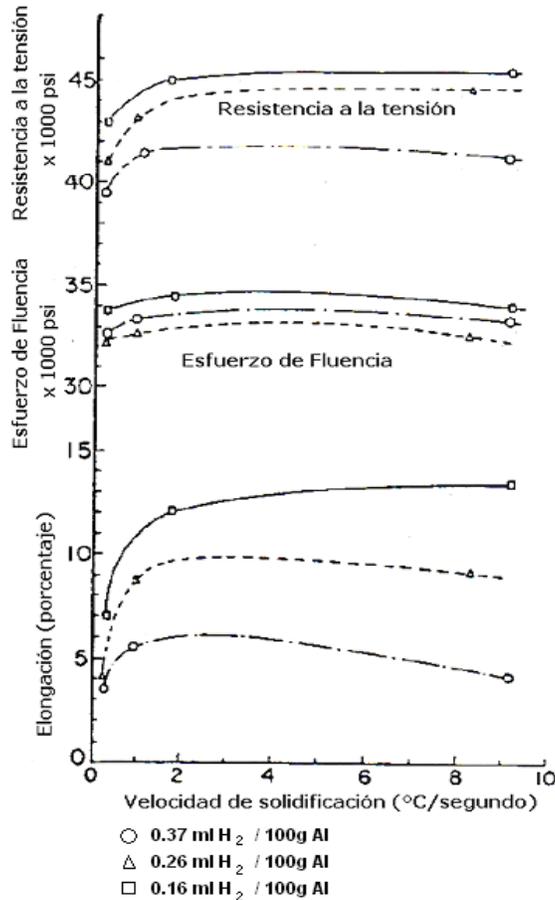


Figura 1.9 Algunas propiedades obtenidas en un ensayo de tensión de la aleación 356 en función de la velocidad de solidificación con diferentes niveles de hidrógeno^[5].

Fatiga y Propiedades de Impacto

Los poros pueden ser sitios de origen de grietas bajo ciertas condiciones de carga, y es de esperar, por lo tanto, que la porosidad disminuya la resistencia a la fatiga. Similarmente, los poros internos o superficiales pueden actuar como concentradores de esfuerzos durante una carga de impacto, disminuyendo así la resistencia al impacto de la aleación.

1.5.5 Técnicas de Medición de Hidrógeno Disuelto

El adecuado control de la concentración de hidrógeno en el aluminio líquido requiere de algún método de medición. Una de las técnicas mas ampliamente usadas en la industria de la fundición es la de “Presión Reducida”, la cual consiste en solidificar una muestra

bajo condiciones de vacío para promover la formación de los poros de hidrógeno a través de la reducción de la presión atmosférica sobre la muestra. Esta es una prueba indirecta, comparativa y no cuantitativa. En la Figura 1.10 se presenta la porosidad de una muestra con este método.

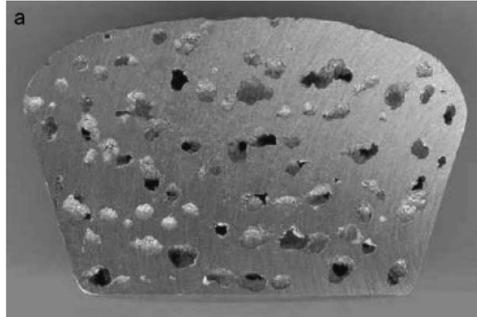


Figura 1.10 Nivel de porosidad en una muestra de la prueba de presión reducida (RPT)^[6].

Otro método comercialmente usado aunque no muy confiable por las suposiciones y la poca reproducibilidad, es la prueba de “La Primer Burbuja”. En esta técnica, la presión es gradualmente reducida mientras que la superficie queda visible. En algún momento una burbuja de hidrógeno rompe la superficie del baño líquido y la temperatura y presión se registran. Se asume que la presión a la cual surge la primera burbuja es igual a la presión parcial del hidrógeno en el aluminio. Si esto es verdad, la concentración de hidrógeno puede ser calculada con la ley de Sievert.

La recirculación de gas es un método de medición directa y que forma la base de dos tipos de equipos comerciales utilizados en planta: Telegas® y AISCAN®. El aparato recircula un pequeño volumen de gas nitrógeno dentro de la aleación fundida. Mientras que el nitrógeno entra en contacto con el baño, recoge el hidrógeno, hasta que eventualmente el hidrógeno contenido en la corriente de nitrógeno entra en equilibrio con la concentración de hidrógeno en el baño. La presión parcial del hidrógeno en el nitrógeno, la cual es igual a la presión del hidrógeno en el aluminio, se determina midiendo la conductividad térmica de la mezcla. Una vez conocida la presión parcial del hidrógeno, se utiliza la ley de Sievert para determinar la concentración.

Medición directa de hidrógeno ALSPEK H®, este es un nuevo dispositivo para la medición directa de concentración de hidrógeno en aleaciones de aluminio. Está compuesto por un innovador sensor electroquímico capaz de realizar mediciones rápidas y en tiempo real. Asimismo, aparte de mostrar calores simples de contenido de hidrógeno

y temperatura, el analizador es capaz de trazar un gráfico en tiempo real de los cambios de hidrógeno y temperatura y grabar estos datos para posibles controles de calidad.

Existen otras técnicas principalmente de laboratorio: Sub-fusión y Fusión al Vacío, estas no se utilizan en el piso de fundición debido a los altos costos, el largo tiempo de que requiere el análisis y la preparación de la muestra. Una versión comercial de “Fusión al Vacío” es la técnica Leco ®, disponible y que se encuentra en uso en muchas plantas de aluminio primario.

1.6 Métodos de Desgasificado de Aluminio

El uso del desgasificado y de la elección de la tecnología de desgasificado, dependen del nivel de hidrógeno deseado. En algunas aplicaciones, tal como las piezas aeroespaciales de alta calidad, las especificaciones de calidad de las piezas son particularmente estrictas y las propiedades mecánicas deben ser reproducibles y garantizadas. Tales especificaciones dictan niveles muy bajos de hidrógeno (menos de 0.1 ml/100 g Al) y el uso de las técnicas de desgasificado más sofisticadas. El desgasificado debe usarse siempre en conjunto con uno de los métodos de medición de concentración de hidrógeno disuelto.

Aunque existen muchos procesos de desgasificado de fundiciones de aluminio y sus aleaciones, estos caen en los tipos generales:

- Desgasificado Natural
- Desgasificado al Vacío
- Vibración Ultrasónica
- Desgasificado con Purga de Gases

Solo la purga de gases es usada ampliamente en la industria de la fundición y es en la que se concentra este trabajo, sin embargo, a continuación se hace una breve descripción de los otros métodos de forma complementaria.

1.6.1 Desgasificado Natural

Este desgasificado ocurre muy lentamente, usualmente se requiere de unas pocas horas para alcanzar un grado de desgasificación útil.

El desgasificado natural es favorecido por las bajas temperaturas y atmósferas libres de hidrógeno, es decir de humedad. Un método para favorecer el desgasificado natural es bajar la temperatura del baño de tal manera que disminuya la solubilidad y debido a esto el hidrógeno salga del baño líquido.

1.6.2 Desgasificado al Vacío

La eliminación de la presión atmosférica sobre el aluminio fundido promueve la formación de burbujas de hidrógeno, según la ley de Sieverts. El desgasificado también es promovido a través de una atmósfera completamente libre de hidrógeno. Este es un método de desgasificado no contaminante, con el cual se pueden obtener concentraciones por debajo de 0.08 ml H₂/100g Al. Sin embargo requiere de una gran inversión de capital.

1.6.3 Vibración Ultrasónica

La vibración ultrasónica es eficiente para desgasificar solamente volúmenes pequeños de aluminio fundido, es por esto que esta técnica es utilizada solamente para asistir a los otros métodos de desgasificado haciéndolos más eficientes ^[8].

1.6.4 Desgasificado con Purga de Gases

Esta técnica es históricamente la más usada en la industria para la desgasificación. Es un tratamiento con gas inerte, gas reactivo o una mezcla de ambos, en la cual se hace pasar burbujas libres de hidrógeno a través del baño metálico. El hidrógeno se encuentra en forma atómica (H) y no en su forma molecular (H₂). La diferencia de concentración de hidrógeno entre el aluminio líquido y la burbuja de gas inyectado, es la fuerza motriz que provoca el transporte del hidrógeno atómico desde el seno del baño metálico hasta la burbuja de gas inerte, permitiendo que una burbuja de hidrógeno se forme dentro, la cual asciende a través de todo el metal hasta la superficie.

La eficiencia del desgasificado es fuertemente dependiente del tamaño de burbuja, lo cual a su vez depende de cómo fueron formadas las burbujas en el baño.

El gas más comúnmente usado es el Argón, el cloro puro fue extensamente usado en el pasado, pero ahora ha sido discontinuado debido a su alta toxicidad y efectos corrosivos sobre el equipo y los ductos de ventilación.

También existen, aunque ya no se utilizan, tabletas que se basan generalmente en la descomposición del hexacloretano. En el baño metálico, la tableta forma cloruro de aluminio, una fase gaseosa metaestable e insoluble. La burbuja de gas del cloruro de aluminio sirve como colector y permite que el hidrógeno sea absorbido por la burbuja, esta se eleva hasta la superficie liberando el hidrógeno en la atmósfera.

Además, el análisis termodinámico muestra que el uso de cloro promueve la formación de cloruros de magnesio los cuales reaccionan con sodio y calcio. Estas sales también pueden provocar una barrera difusiva sobre la superficie de la burbuja, y provocando un deficiente retiro de hidrógeno.

Podemos mencionar 6 etapas cinéticas sucesivas en el proceso de remoción de hidrógeno:

1. Transporte de hidrógeno disuelto en el aluminio líquido hacia la superficie de la burbuja del gas de purga, por mecanismos de transporte difusivo y convectivo.
2. Transporte de átomos de hidrógeno por difusión a través de una capa delgada de líquido que rodea la burbuja, llamada capa límite.
3. Adsorción química de átomos de hidrógeno sobre la superficie de la burbuja.
4. Reacción de átomos de hidrógeno para formar moléculas de hidrógeno ($\underline{\text{H}} + \underline{\text{H}} \rightarrow \text{H}_2$) y su posterior desorción de la superficie de la burbuja.
5. Difusión de hidrógeno gaseoso dentro de la burbuja de gas inerte.
6. Remoción del hidrógeno contenido en la burbuja, al ser descargada en la superficie libre.

1.6.4.1 Formas de introducir el gas inerte dentro del aluminio líquido.

El gas puede ser introducido al baño metálico básicamente de tres formas.

1. El más simple pero menos efectivo, es mediante una lanza de grafito con un diámetro exterior de entre 2.5 a 5 cm y diámetro interno de 0.3 cm. La dificultad con este

método es que la burbuja resultante es grande con un cociente superficial área/volumen bajo. Por lo tanto, las burbujas de gas se elevan rápidamente con un tiempo de residencia mínimo para recoger al hidrógeno. Además, a menos que la lanza se mueva vigorosamente dentro del horno, lo cual a menudo es difícil, provocará poca cobertura del volumen del metal líquido, reduciendo la eficiencia del proceso (ver Figura 1.12).

2. Lanza con tapón poroso.

Una dispersión mucho mas fina de burbujas puede lograrse con el uso de tapones porosos sobre la lanza. Esto proporciona burbujas muy finas pero ocurre muy poco mezclado entre las burbujas y el metal.

3. Rotor Inyector.

Esta es la más sofisticada y eficiente técnica de desgasificado de aluminio. En esta técnica, el gas inerte se introduce al aluminio fundido a través de una flecha y un rotor con toberas por las cuales sale el gas. El rotor está sujeto al extremo de lanza que gira con cierta velocidad, sumergido en la olla (Figura 1.11). La acción del rotor crea un esfuerzo de corte fragmentando las burbujas haciéndolas mas finas y que salen con elevados momentos angulares y radiales, dando lugar a una mayor dispersión de burbujas en un mayor volumen del baño metálico, aumentando la relación área/volumen. Estas burbujas más finas tienen un mayor tiempo de residencia en el metal, dotando de una capacidad más alta de recoger átomos de hidrógeno presentes. Mientras que la lanza da como resultado un pobre desgasificado en alrededor de una hora, la técnica del rotor-inyector, típicamente, puede reducir el hidrógeno a niveles muy bajos en tan solo 10 minutos. En la Figura 1.13 se muestra la dispersión de burbujas lograda con esta técnica visualizada con la ayuda de un modelo de agua.

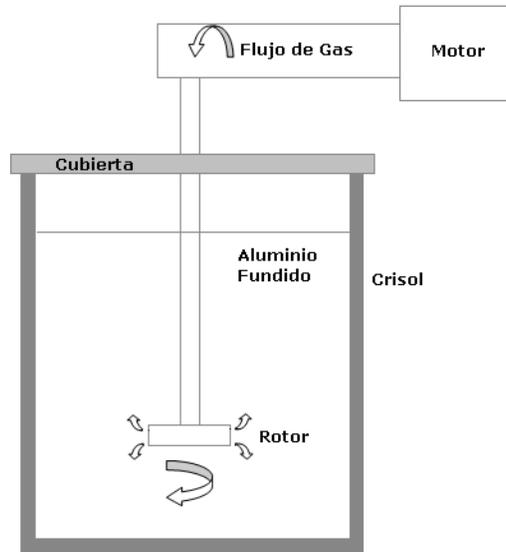


Figura 1.11. Esquema del sistema de desgasificado con rotor-inyector.

Bajo estas condiciones el tamaño de las burbujas es el factor más importante en la determinación de la eficiencia del desgasificado. Esto se puede explicar analizando el mecanismo del proceso antes mencionado y la velocidad con la que ascienden las burbujas dependiendo de su tamaño.

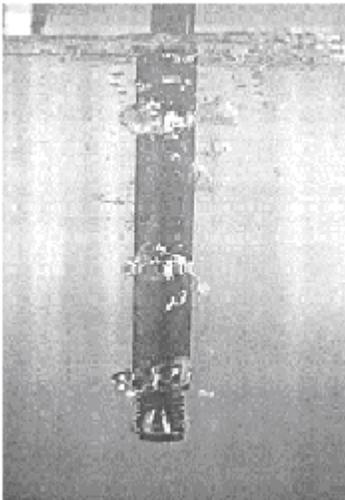


Figura 1.12 Burbujas grandes producidas por el uso de la lanza de grafito^[4].

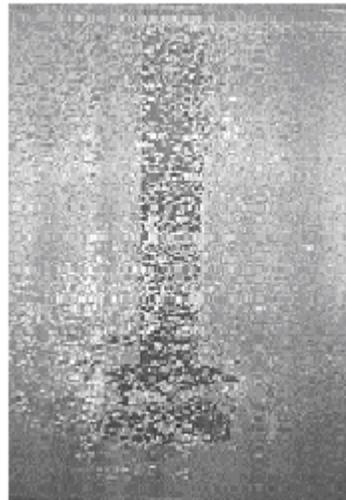


Figura 1.13 Dispersión de burbujas finas obtenidas en modelo de agua usando rotor-inyector^[4].

El funcionamiento de la desgasificación de la lanza, tapón poroso y del rotor-inyector es comparado en la Figura 1.14. Las ventajas del desgasificado con el rotor son evidentes comparadas con los otros dos métodos.

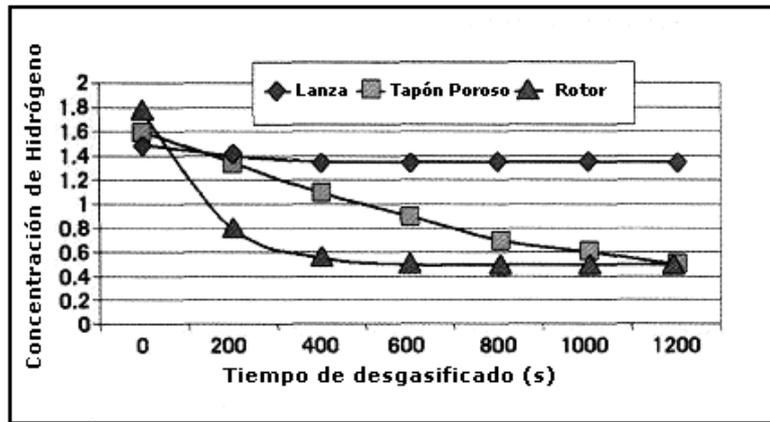


Figura 1.14. Comparación de la cinética de desgasificación de los tres métodos de inyección de gas: lanza, tapón poroso y rotor^[7].

1.7 Resumen de Estado del Arte en la Modelación Física y Matemática para el Proceso de Desgasificado de Aluminio.

Existen considerables trabajos acerca de la modelación física y matemática sobre este proceso, a continuación se hace un resumen de la revisión bibliográfica de estas investigaciones.

J. F. Grandfield en su artículo “*Mathematical and Physical Modelling of Melt Treatment Processes*”^[9], realizó el modelado físico en agua comparando distintos diseños de rotores en un tanque de escala 1:1. Se realizó la desoxigenación utilizando nitrógeno como gas de purga, controlando las velocidades de rotación y flujos de gas, encontrándose que la relación de estos dos últimos factores es el parámetro clave. Grandfield menciona que en estudios anteriores se demostró que la extracción de H₂ es controlada por el transporte de masa de hidrógeno dentro de las burbujas de gas. Por lo tanto, el tamaño de burbuja y consecuentemente el área de contacto gas-líquido son factores importantes de control en el retiro de hidrógeno. Incrementando la velocidad de rotación encontró un aumento proporcional en el área de contacto gas-líquido que corresponde a un incremento de la eficiencia. Sin embargo, incrementando el flujo de gas se reduce el área de contacto por unidad de volumen de gas consumido. La comparación de los rotores y los distintos procesos se realizó mediante la determinación

de un parámetro cinético “s” producto del ajuste de los datos experimentales, de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\left(\frac{[O_2]_t - [O_2]_\infty}{[O_2]_0 - [O_2]_\infty} \right) = e^{-st} \quad (1.5)$$

Donde $[O_2]_t$ es la concentración de oxígeno a un tiempo t, $[O_2]_\infty$ es la concentración de oxígeno a un tiempo de tratamiento, $[O_2]_0$ es la concentración al inicio del tratamiento. En este trabajo, sin embargo, no muestra resultados claros acerca de su objetivo principal que es el de comparar los diseños de rotores, debido a que diferían las condiciones de operación de uno a otro. Además de que la geometría no fue la más adecuada para un reactor tipo “batch” ya que lo fabricaron de forma cúbica y no cilíndrica y esto debe de afectar la fluidinámica y por lo tanto la cinética de desgasificado.

F. Boeuf y M. Rey ^[10] intentan demostrar como los resultados obtenidos en modelos de agua pueden ser transportados al aluminio con un número reducido de ensayos. De igual forma se propone que la cinética de remover oxígeno en agua es similar que remover hidrógeno de aluminio y estos son bien representados por la siguiente ecuación cinética de primer orden:

$$\frac{dC}{dt} = K(C - C_\infty) \quad (1.6)$$

Donde C es la concentración de oxígeno a un tiempo t, C_∞ la concentración a un tiempo ∞ de tratamiento, K es un parámetro cinético o coeficiente de transporte de masa global y t el tiempo en segundos. En donde la eficiencia de desgasificado está determinada por el parámetro cinético:

$$K = k_L \frac{A}{Vol} \quad (1.7)$$

Donde k_L es el coeficiente de transporte de masa, A el área interfacial líquido-gas y Vol el volumen de líquido tratado. Realizaron el estudio del efecto de cada uno de los parámetros involucrados en la eficiencia variando un parámetro a la vez. El arreglo experimental consiste en la comparación de dos tipos de rotor y dos contenedores, variando el flujo de gas y velocidad de rotación. Se hizo el análisis dimensional y se concluyó que, despreciando algunas variaciones, el modelado en agua a escala completa es válido para establecer el funcionamiento relativo de los rotores y de varias condiciones de operación. Para probar la validez de esta aproximación se hicieron

experimentos en agua y en aluminio con la misma configuración olla-rotor y las mismas condiciones de operación. Se encontró que el comportamiento relativo entre ambos rotores es el mismo en agua que en aluminio y que al variar un parámetro a la vez la relación entre la eficiencia del rotor en agua y en aluminio es constante, por lo tanto, se confirmó la hipótesis de que la relación entre las eficiencias en agua y en aluminio es constante para los rotores. Según lo probado con los experimentos, es posible modelar “K” en agua como función de diversos parámetros de operación. Sin embargo, es importante señalar que en su análisis no considera el efecto combinado que pueden presentar las variables.

El desgaseado con rotor-inyector es muy difícil de modelar matemáticamente puesto que abarca un sistema de flujo con múltiples fases interactuando, incluyendo la fase líquida, 2 fases gaseosas y una o más fases sólidas. La dificultad en el modelado matemático de tal sistema proviene de la inhabilidad del hardware actual de manejar los modelos matemáticos que proporcionan una descripción detallada del campo de flujo. De tal manera que para simplificar el análisis, últimos esfuerzos se centraron en el campo de flujo inducido por las burbujas de gas inyectadas y por el efecto del rotor.

Por ejemplo, M.A. Ramírez Argáez, C. González Rivera y F. Contreras ^[11], desarrollaron un modelo matemático bifásico Euleriano-Euleriano para estudiar el flujo de fluidos en ollas de tratamiento de aluminio equipadas con rotor-inyector variando parámetros de proceso como velocidad de rotación, flujo de gas, profundidad de inmersión y comparando 3 diseños de rotor. El modelo fue creado utilizando el código comercial PHOENICS 3.4 CFD, el cual resuelve todas las ecuaciones de conservación que gobiernan el proceso, es decir, de continuidad, N-S en 3D y del modelo cinético de turbulencia k-ε y se utilizó el algoritmo IPSA (Inter-Phase Slip Algorithm) para simular la fase gaseosa dentro de la fase líquida. En este trabajo se menciona que los factores más importantes del proceso son la velocidad de rotación, tipo de rotor y profundidad de inmersión de la flecha, las conclusiones fueron en relación a las mejores condiciones de operación de esa olla modelada en particular. Es importante mencionar que la frontera cíclica descrita no cumple del todo con esa condición, tal y como se observa en sus resultados numéricos reportados en cuanto a los perfiles de velocidad.

Maniruzzaman y Makhlouf ^[12], desarrollaron un modelo matemático para simular el flujo multifásico turbulento en un horno tipo “batch” (intermitente) equipado con rotor-

inyector, para demostrar el efecto de varios parámetros de proceso, con un marco de referencia Euleriano-Euleriano para las fases, utilizando la técnica de Volumen de Fluido (VOF) para resolver la fluidinámica en las distintas fases y la turbulencia se describió con el modelo de turbulencia $k-\epsilon$, usando el código comercial FLUENT V4.4. Con este modelo se determinó el patrón de flujo dentro de la olla, la distribución de burbujas y la disipación de la energía turbulenta. Se realizó un diseño de experimentos a dos niveles de las variables y posteriormente un análisis estadístico para conocer el efecto de cada parámetro. Los resultados de la simulación indican que la velocidad de rotación tiene el efecto más significativo en la disipación de la turbulencia, consecuentemente es el parámetro más importante. La simulación también indica que el hacer girar el rotor periódicamente en reversa tiene efectos positivos aunque no muy significativos. Sin embargo, este modelo se desarrolló con una geometría axisimétrica en dos dimensiones para reducir el tiempo de cómputo, lo que le resta realismo a la simulación. Por otra parte, en este modelo no se contempla la remoción de hidrógeno disuelto.

V. Warke and M. Makhlouf^[13 y 14] de igual manera crearon un modelo matemático para simular el patrón de flujo multifásico turbulento que se genera durante el desgasificado en una olla con rotor inyector. Este modelo permite el cálculo de la disipación de la energía turbulenta y la distribución de burbujas. Estos resultados son después introducidos en otros modelos matemáticos para simular el retiro de partículas sólidas y del hidrógeno disuelto. El estudio lo dividen en tres subsistemas: el primero determina el campo de flujo turbulento, el segundo se ocupa de la dinámica de la partícula y el tercero trata acerca de la remoción de hidrógeno. En este modelo se resuelven los dos sistemas de ecuaciones, uno para cada fase y después se acoplan con coeficientes de intercambio. Este modelo fue generado y resuelto con el código comercial FLUENT 6.0.2. La extracción de hidrógeno la basan en un balance global y determina los coeficientes de transferencia de forma experimental. Y finalmente validan el modelo con datos experimentales obteniendo buenas aproximaciones.

1.8 Justificación y planteamiento del problema

La industria del aluminio se apoya en las actividades básicas de investigación, las cuales abarcan una amplia temática, tanto para ayudar en la producción óptima del metal como para innovar en su aplicación industrial.

Para que el aluminio se mantenga con un crecimiento sostenido en su demanda incrementando sus aplicaciones, debe cumplir con los estrictos criterios de calidad que involucran tratamientos del metal líquido, de desgasificación, remoción de impurezas e inclusiones. Para obtener piezas con mayor calidad, es fundamental seguir con el desarrollo riguroso de la ciencia básica y aplicada, así como buscar permanentemente traspasar el actual estado del arte. Una adecuada desgasificación es vital en la obtención de piezas de aleaciones de aluminio con buenas propiedades mecánicas y la mejor técnica para desgasificar las aleaciones de aluminio es la inyección o purga de gases con la técnica del rotor-inyector. Sin embargo, es muy difícil realizar un estudio experimental en planta o incluso en laboratorio para el procesamiento de metales fundidos, debido a las condiciones agresivas del medio (alta temperatura) y a la opacidad del metal líquido. Entonces, la modelación física con modelos de agua y la modelación matemática son en general herramientas de análisis de procesos muy útiles en el procesamiento de materiales para entender, controlar, optimizar y diseñar procesos metalúrgicos como es el caso del desgasificador de aluminio por la técnica de rotor inyector.

Esta ruta de análisis es la que se siguió en este trabajo para realizar un profundo análisis del efecto de las principales variables del proceso sobre la cinética de desgasificación y para diseñar una variante de la inyección de gas midiendo la cinética de desoxigenación de agua a través del purgado con nitrógeno, Este último punto (realizar la inyección del gas de purga por el centro del fondo de la olla), es una contribución original de este trabajo y que se complementa con la determinación de la importancia relativa del flujo de gas y de la velocidad de rotación sobre la cinética de desgasificación, empleando modelado físico y modelado matemático preliminar.

1.8.1 Objetivo

Comparar la cinética de desgasificación con inyección de gas convencional a través del rotor, contra la inyección de gas por el centro del fondo de la olla con la técnica manteniendo el rotor girando en su posición pero sin inyección de gas a través de él. Este análisis es asistido por dos herramientas ingenieriles básicas, la modelación física de la cinética de deshidrogenación del aluminio, a través de la desgasificación de agua saturada con oxígeno con purga de gas nitrógeno. De igual manera se empleará el modelado matemático desarrollado de manera preliminar para el mismo proceso de desgasificación en agua.

Realizar, con la ayuda de la modelación física, el análisis de proceso para evaluar cuantitativamente el efecto de las principales variables de diseño y de operación sobre la cinética de desgasificación.

1.8.2 Hipótesis

En este trabajo se hizo un modelo físico y matemático de la fluidinámica y remoción de gas para el desgasificado de aluminio con la técnica del rotor inyector, pero a diferencia de la técnica convencional donde se inyecta el gas a través del rotor, en este trabajo se propone a manera de hipótesis que la inyección de gas por el fondo de la olla mejora la cinética de remoción de gas. Entonces, esta tesis compara la cinética de remoción de oxígeno con nitrógeno usando la inyección convencional contra la inyección por el fondo, por medio de la cual se propone una mejora en la remoción de oxígeno. Esta comparación se hizo a través de la modelación física y se apoya también en la modelación matemática de flujos bifásicos.

Capítulo 2

Modelación Física y Matemática

2.1 Descripción del problema

Como ya se mencionó, el hidrógeno es el único gas con solubilidad en el aluminio líquido y este afecta de forma negativa las propiedades mecánicas. Para cumplir con los estrictos estándares y normas de calidad que exigen ciertos sectores, como son la industria automotriz y aeronáutica, es necesario un buen tratamiento de desgasificación. La técnica más ampliamente utilizada hoy en día es la de desgasificación con rotor inyector, en la cual se introduce gas argón a través de una lanza de grafito equipada con un rotor en el extremo, estos rotores varían en diseño, sin embargo, en general están contruidos con salidas de gas a los costados de tal manera que el gas que sale por la flecha es canalizado a estas toberas y el esfuerzo de corte debido al giro del rotor provoca que el chorro de gas se rompa y salga como burbujas muy finas y con grandes momentos angulares y radiales, esparciéndolas así a todo el baño líquido.

El objetivo principal de este trabajo es comparar esta técnica con una nueva propuesta, la cual se basa en inyectar el gas por el centro del fondo de la olla y manteniendo el rotor girando en su posición pero sin inyección a través de él, teniendo como hipótesis que esta nueva forma de inyección de gas mejorara la cinética de desgasificado. Para ello se construyó un modelo físico con agua y nitrógeno el cual pretende simular el sistema aluminio-argón. Además, se desarrolló de manera preliminar un modelo matemático que simula ambas técnicas de inyección y que se puede comparar con los resultados experimentales. A continuación se describe brevemente la construcción del modelo físico y el desarrollo del modelo matemático.

2.2 Modelado Físico

Debido a las condiciones agresivas y a la opacidad de los metales, es difícil de realizar mediciones en sistemas reales, por lo que es común recurrir a los modelos físicos. Un modelo físico es una representación del sistema real de estudio pero que usa materiales distintos. El modelo en agua permite una excelente visualización, el oxígeno disuelto purgado con nitrógeno puede usarse para simular la cinética de desgasificación. Para que esta representación sea buena, el modelo tiene que satisfacer criterios de similitud geométrica, cinemática y dinámica. Partiendo de las ecuaciones de continuidad y de movimiento, identificamos las variables involucradas, con estas se puede aplicar el teorema de Buckingham para obtener un grupo de números adimensionales que nos permiten establecer los criterios de semejanza.

Realizando el análisis dimensional se obtienen los siguientes cinco parámetros de similitud (números adimensionales) más importantes:

$$\text{Núm. de Froude Mod: } Fr = \frac{\rho_g V^2}{(\rho_l - \rho_g)gd_b} = \frac{\text{fuerzas inerciales}}{\text{fuerza de gravedad}} \quad (2.1)$$

$$\text{Número de Reynolds: } Re = \frac{\rho V d_b}{\mu} = \frac{\text{fuerzas inerciales}}{\text{fuerzas viscosas}} \quad (2.2)$$

$$\text{Número de Weber: } We = \frac{\rho V^2 d_b}{\sigma} = \frac{\text{fuerzas inerciales}}{\text{fuerzas de tensión superficial}} \quad (2.3)$$

$$\text{Número de Schmidt: } Sc = \frac{\nu}{D_{O_2-H_2O}} = \frac{\text{difusividad de momento}}{\text{difusividad de masa}} \quad (2.4)$$

$$\text{Número de Sherwood: } Sh = \frac{k_L d_b}{D_{O_2-H_2O}} = \frac{\text{Coeficiente de transporte de masa}}{\text{Coeficiente de difusión}} \quad (2.5)$$

Por lo tanto, si tenemos dos sistemas con estos números adimensionales iguales o muy cercanos, se dice que son sistemas similares. Basado en los criterios de similitud

geométrica, dinámica y cinemática, se construyó el modelo físico, aunque este último criterio se ha afirmado como imposible de satisfacer por las diferencias en las viscosidades cinemáticas entre el aluminio y el agua, aunque estos valores no son tan disimilares (ver Tabla 2.1). Otra diferencia notable es la que existe en la tensión superficial entre el agua y el aluminio. La gran tensión superficial del aluminio dificulta la fragmentación debido a la agitación y la separación del gas en la salida del rotor. Estos efectos, junto con la expansión térmica del gas, pueden producir burbujas más grandes en el aluminio fundido que en el modelo de agua. A pesar de estas deficiencias en el modelo físico, este sigue siendo válido y útil para establecer la influencia de los parámetros de operación sobre el tiempo de desgasificado. En la Tabla 2.1 se muestran las propiedades físicas del aluminio, agua y los gases.

Propiedad	Aluminio (670°C)	Agua (20 °C)	Argón (20°C)	Nitrógeno (20°C)
Viscosidad (μ) (kg/m*s)	1.34×10^{-3}	1.0×10^{-3}	2.0×10^{-5}	1.6×10^{-5}
Densidad (ρ) (kg/m ³)	2380	1000	1.67	1.185
Visc. cinemática (ν) (m ² /s)	0.563×10^{-6}	1.0×10^{-6}	1.19×10^{-5}	1.3×10^{-5}
Tensión sup. (σ) (N/m)	914×10^{-3}	72.75×10^{-3}	-----	-----

Tabla 2.1 Propiedades físicas del aluminio líquido, agua, nitrógeno y argón.^[15,16]

2.2.1 Construcción del Modelo Físico

Para este trabajo, se construyó el modelo físico del proceso de desgasificación con rotor inyector, utilizando agua saturada con oxígeno y nitrógeno como gas de purga. La construcción del modelo físico fue publicada en una tesis anterior y por lo tanto, los detalles en el escalamiento y la construcción del modelo, se dan en este trabajo previo^[17]. Sin embargo, para la realización de este proyecto, el autor de este trabajo colaboró

activamente con la construcción del modelo físico, por lo que a continuación se describe brevemente.

El modelo físico básicamente consiste en una estructura de acero que soporta el motor y el sistema de inyección de gas con el rotor, el cual cabe mencionar, puede utilizarse dentro de diferentes reactores. El modelo fue diseñado en el departamento de Ingeniería Metalúrgica de la Facultad de Química, UNAM, con la colaboración del CIATEQ A.C. y el apoyo del CONACYT. Figura 2.1.

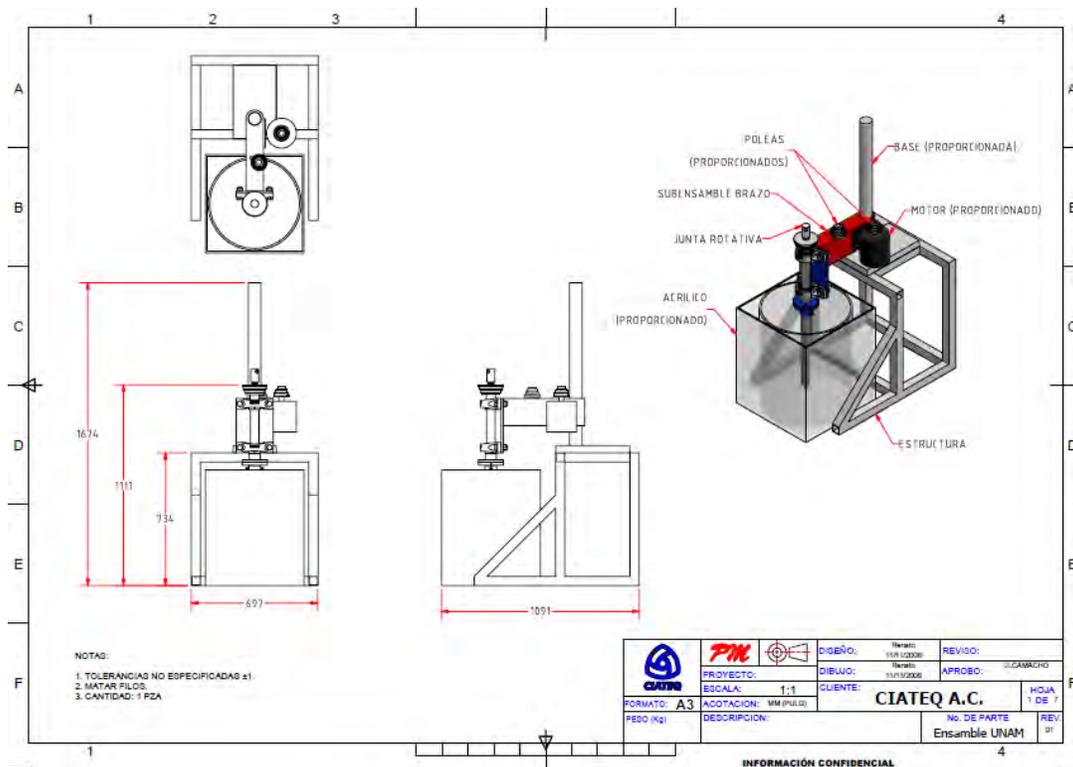


Figura 2.1 Plano general para la construcción del modelo.

El modelo se construyó en escala 1:1 de un horno industrial tipo batch. Las etapas de construcción se muestran en la Figura 2.2. El rotor es un diseño de FOSECO y tanto flecha como rotor se fabricaron de Nylamid, Figura 2.3. El motor es de ¾ HP de fuerza de revoluciones variables marca SURTEK®. Las RPM se midieron con un tacómetro digital. La saturación de oxígeno se realizó inyectando aire con un compresor de aire, la inyección de nitrógeno es regulada con un rotámetro a la salida del tanque de gas. La inyección de los gases se realiza a través de la flecha soportada por dos chumaceras sujetas a la estructura de acero, en la parte superior de la flecha se encuentra una junta rotativa marca Deublin®

(Figura 2.4) por la cual se introduce el gas y se mantiene estática mientras la flecha esta girando. Para la nueva forma de inyección de gas se colocó una conexión rápida en el fondo de la olla justo en el centro. La concentración de oxígeno disuelto se determinó con un oxímetro Hanna Instruments modelo HI 9146. El modelo terminado se muestra en la Figura 2.5.



Figura 2.2 Etapas de Construcción del modelo físico.

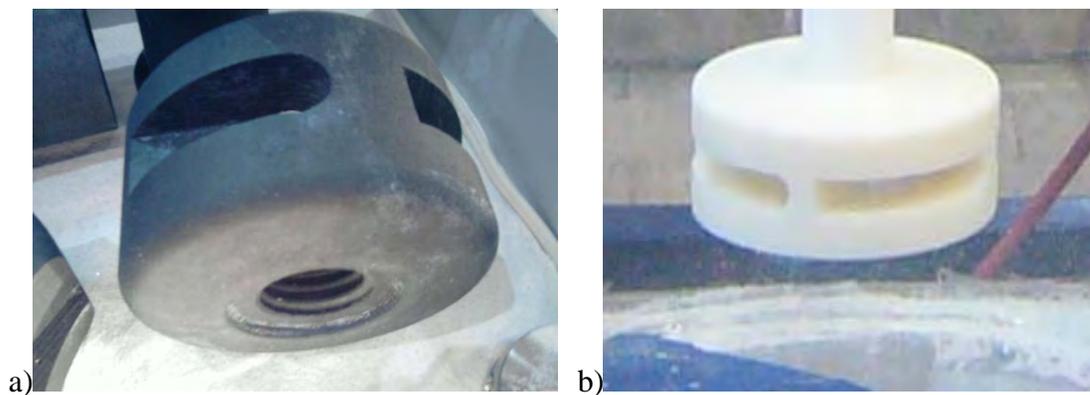


Figura 2.3 a) Rotor de grafito de FOSECO, b) Rotor de Nylamid modelado.



Figura 2.4 Junta Rotativa



Figura 2.5. Modelo Físico.

2.3 Modelado Matemático

En este trabajo se desarrolló un modelo matemático bifásico Euleriano-Euleriano para analizar la fluidinámica y la cinética de desgasificación, basado en las ecuaciones fundamentales de conservación de masa y de cantidad de movimiento que gobiernan el flujo de fluidos y el transporte de masa en la olla. El modelo desarrollado pretende representar realísimamente las condiciones de operación encontradas en el modelo físico construido previamente. Se resolvieron las ecuaciones de continuidad para ambas fases

líquida y gaseosa, las ecuaciones turbulentas de Navier-Stokes tanto para la fase gas como la líquida, dado que el flujo es completamente turbulento es necesario incorporar un modelo de turbulencia, para este efecto se utilizó el modelo cinético $k-\varepsilon$ [18,19]. Además se resolvió la ecuación de conservación de especies químicas para simular la desoxigenación del agua. Las ecuaciones del modelo matemático se resolvieron numéricamente empleando el código comercial PHOENICS 3.4.

2.3.1 Simplificaciones

Las siguientes suposiciones se plantean con el fin de simplificar el problema y facilitar su solución:

- 1) Propiedades físicas constantes para ambas fases.
- 2) Representación de burbujas por esferas rígidas de tamaño constante (5mm) en todo el volumen de control. Esto es, no se consideran cambios de presión metalostática, coalescencia o desintegración de burbujas.
- 3) Baño isotérmico.
- 4) Turbulencia representada por el modelo $k-\varepsilon$ en 3D. Este modelo es aplicado únicamente a la fase líquida.
- 5) Se usa un coeficiente interfacial de fricción para describir la fuerza de arrastre que ejercen las burbujas sobre el líquido.
- 6) Condiciones de no deslizamiento en las paredes y fondo de la olla.
- 7) El líquido que está en contacto con la flecha y el rotor tiene la misma velocidad de estos por condición de no deslizamiento.

2.3.2 Ecuaciones Gobernantes

Las ecuaciones fundamentales de transporte que gobiernan el flujo de fluidos y el transporte de masa en la olla se resuelven en un marco de referencia Euleriano-Euleriano para flujos bifásicos usando el algoritmo IPSA (Interphase Slip Algorithm)^[18].

Las velocidades de las fases son ligadas por transferencia de momento interfacial, así como las concentraciones son ligadas por transferencia de masa interfacial.

2.3.2.1 Ecuación de Continuidad para cada fase

$$\frac{\partial(\rho_i R_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i V R_i) - \nabla \cdot (\rho_i D_t \nabla R_i) = 0 \quad (2.6)$$

El primer término es el transitorio y representa la acumulación de masa, el segundo es el término convectivo y el último es el término difusivo, el cual representa la dispersión de burbujas en el líquido debido a la turbulencia. Como las fases llenan completamente el espacio disponible, se debe cumplir en todo el dominio que:

$$R_l + R_g = 1 \quad (2.7)$$

2.3.2.2 Ecuación de conservación de momentum para ambas fases.

$$\frac{\partial \rho V}{\partial t} = -\rho(\nabla \cdot VV) + \nabla \cdot \tau_{i,j} + \rho F_b - \nabla P - F_{fricc} \quad (2.8)$$

La ecuación 2.8 es una ecuación tensorial y existe una particular para cada dirección en el espacio. El primer término de derecha a izquierda es el término transitorio, el siguiente es el término de transporte convectivo, seguido del término difusivo o de transporte viscoso, el cuarto es el relacionado a las fuerza boyante debido a la diferencia de densidades, el gradiente de presión y la fuerza de fricción entre ambas fases, está última representa el intercambio de momento entre la fase gaseosa y la fase líquida, contribuyendo al movimiento recirculatorio en el líquido. El término difusivo debe incluir los esfuerzos turbulentos de Reynolds, los cuales se describen mediante una relación semejante a la de Newton de la viscosidad, con la diferencia de que la viscosidad en estos tensores es la viscosidad turbulenta y es función de la posición y el tiempo. La viscosidad empleada aquí es la viscosidad efectiva, función de la viscosidad propia del material y la viscosidad turbulenta:

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_t \quad (2.9)$$

donde μ_{ef} es la viscosidad efectiva, μ la viscosidad dinámica y μ_t la viscosidad turbulenta y se determina con el modelo de turbulencia k- ϵ .

La fuerza de fricción entre ambas fases esta dada por la siguiente ecuacion:

$$F_{fricc} = C_f (V_j - V_i) \quad (2.10)$$

donde C_f es el coeficiente de fricción en unidades de Ns/m. El coeficiente de fricción C_f (determinado en PHOENICS por una variable llamada CFIPS) con el cual se determina el transporte de la cantidad de movimiento en la interfase queda establecido así:

$$C_f = \sigma \cdot \rho_l \cdot Vol_l \cdot R_l \cdot Vel_{slip} \quad (2.11)$$

donde σ es la tensión superficial del líquido, ρ_l y Vol_l la densidad y el volumen del líquido respectivamente, R_l la fracción del líquido y Vel_{slip} la velocidad de deslizamiento entre ambas fases, dada por la diferencia de velocidades entre ambas fases.

2.3.2.3 Ecuaciones del Modelo de Turbulencia k-ε (solo para la fase líquida).

Puesto que la turbulencia está localizada en la fase líquida, las ecuaciones de transporte modeladas para la energía cinética turbulenta (k) y su rapidez de disipación solo se resuelven para esta fase. PHOENICS proporciona para flujos turbulentos el modelo k-ε propuesto por Launder y Spalding^[19] en la sección 2.3.4 se describe este software utilizado. Para números de Reynolds turbulentos la forma estándar del modelo puede ser presentada como sigue:

$$\rho_l R_l \frac{\partial K}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l R_l V_l K) = \rho_l R_l \nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_K} \nabla K \right) + \rho_l R_l (G^* - \varepsilon) \quad (2.12)$$

$$\rho_l R_l \frac{\partial K}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_l R_l V_l K) = \rho_l R_l \nabla \cdot \left(\frac{\mu_T}{\sigma_K} \nabla K \right) + \rho_l R_l (G^* - \varepsilon) \quad (2.13)$$

$$\mu_T = \frac{C_\mu K^2}{\varepsilon} \quad (2.14)$$

Aquí la ecuación 2.12 representa la conservación de Energía Cinética Turbulenta y la ecuación 2.13 la rapidez de disipación. Donde K es la energía cinética turbulenta, ε la

rapidez de disipación, ρ_l la densidad del líquido, μ_T la viscosidad cinemática turbulenta y G^* es un término fuente de energía cinética y es definido como:

$$G^* = \mu_t \left\{ \left(\frac{\partial V_{z,l}}{\partial r} + \frac{\partial V_{r,l}}{\partial Z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{z,l}}{\partial \theta} + \frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial Z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{r,l}}{\partial \theta} + \frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial r} \right)^2 + 2 \left[\left(\frac{\partial V_{z,l}}{\partial Z} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{r,l}}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial \theta} \right)^2 \right] \right\} \quad (2.15)$$

Los valores de C_1 , C_2 , C_μ , σ_K , σ_ϵ son las constantes empíricas convencionales del modelo dadas en la Tabla 2.2 ^[19].

Constante	C_1	C_2	C_μ	σ_K	σ_ϵ
Valor	1.44	1.92	0.09	1.0	1.314

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

2.3.2.4 Ecuaciones de conservación de especies químicas (oxígeno) para ambas fases

$$\frac{\partial \rho X_{O_2}}{\partial t} = -\rho(\nabla \cdot V X_{O_2}) + \nabla \cdot D \rho (\nabla X_{O_2}) + k(X_{O_2j} - X_{O_2i}) \quad (2.16)$$

Donde X_{O_2} es la concentración de oxígeno, D es el coeficiente de difusión y k es la constante de transporte de masa, mientras que los subíndices j e i sirven para denotar las fases.

El primer término es la acumulación de masa, seguido por el transporte convectivo y difusivo de especies y el último representa el transporte de especies químicas entre las fases, siendo este término crucial para calcular la cinética de desgasificación.

2.3.3 Condiciones iniciales y de frontera

El sistema de ecuaciones generado para esta simulación consta de 12 ecuaciones diferenciales parciales acopladas, requiere para su solución particular de condiciones previamente conocidas, que caracterizan al sistema en sus fronteras, así como requiere de condiciones iniciales para las derivadas temporales. Estas condiciones son conocidas como condiciones de frontera y condiciones iniciales respectivamente.

Para la simulación de este proceso el modelo contempla las siguientes condiciones de frontera para el sistema: Condiciones de no deslizamiento e impermeabilidad en el fondo de la olla (F) y en la pared cilíndrica (P), el líquido en contacto con el rotor (R) y la lanza (L) tiene la misma velocidad que estos por condición de no deslizamiento. En la superficie libre (S) no hay corte viscoso entre el aire y el agua y por aquí el aire inyectado escapa a la atmósfera con el oxígeno removido. Por simetría solo $\frac{1}{4}$ del sistema se dibuja y las condiciones de frontera en el eje angular presentan condiciones cíclicas. Condición de entrada de gas (E_C) en la parte central del rotor a flujo constante el cual, es canalizado hacia las toberas, donde el chorro de gas se rompe formando finas burbujas que salen con momentos angulares y radiales, esto el caso de inyección convencional. En el caso de inyección por el fondo, la entrada de gas se da en los nodos centrales de la base de la olla y se denota como (E_F). Se establece una frontera cíclica (FC) en el plano Y-Z con el fin de realizar la simulación en una cuarta parte del sistema y así minimizar el tiempo de cómputo. En la Figura 2.6 se esquematizan las condiciones de frontera aplicadas al modelo.

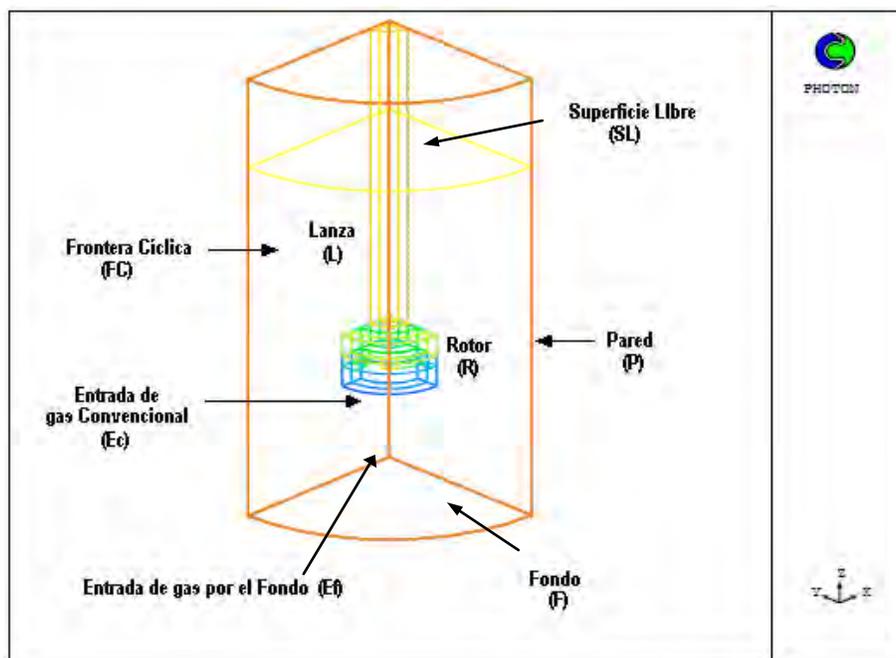


Figura 2.6 Condiciones de frontera aplicadas al modelado matemático en PHOENICS.

Los valores de estas condiciones de frontera que se requieren para resolver las ecuaciones se muestran en la Tabla 2.3.

Parámetro	L	R	P	F	E _C	E _F	SL	FC
V _{θ,l}	V _{RI}	V _{RR}	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{\theta,l}}{\partial x} = 0$
V _{θ,g}	V _{RI}	V _{RR}	0	0	V _{RE}	0	$\frac{\partial V_{\theta,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{\theta,g}}{\partial x} = 0$
V _{r,l}	0	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{r,l}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{r,l}}{\partial x} = 0$
V _{r,g}	0	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{r,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{r,g}}{\partial x} = 0$
V _{z,l}	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{\partial V_{z,l}}{\partial x} = 0$
V _{z,g}	0	0	0	0	-Velgas	Velgas	$\frac{\partial V_{z,g}}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial V_{z,g}}{\partial x} = 0$
k	0	0	0	0	k _{in}	k _{in}	$\frac{\partial k}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial k}{\partial x} = 0$
ε	0	0	0	0	ε _{in}	ε _{in}	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = 0$	$\frac{\partial \varepsilon}{\partial x} = 0$
R _l	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_l}{\partial z} = 0$	0	0	0	$\frac{\partial R_l}{\partial x} = 0$
R _g	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial R_g}{\partial z} = 0$	1	1	1	$\frac{\partial R_g}{\partial x} = 0$

Tabla 2.3 Condiciones de Frontera aplicadas al modelo matemático.

2.3.4 Descripción del Software PHOENICS 3.4.

La solución del modelo presentado en la sección anterior debe ser forzosamente numérica, y en este trabajo se empleó el software PHOENICS. PHOENICS pertenece a un grupo de paquetes de programas informáticos denominados CFD (Computational Fluid Dynamics), con el propósito general de resolver numéricamente problemas de flujo los fluidos, transporte de masa y de energía. El nombre de este software es un acrónimo de: Parabolic Hyperbolic Or Elliptic Numerical Integration Code Series. Este programa utiliza el método de volumen de control para solucionar problemas el cual, está programado en lenguaje FORTRAN.

PHOENICS se distingue de otros softwares CFD por poder manejar flujos multifásicos, reacción química, mallas estructuradas, es decir, poder cambiar lo fino de la malla en ciertas zonas de interés.

PHOENICS, al igual que cualquier otro software CFD, realiza tres funciones principales, mostradas en el esquema de la Figura 2.7



Figura 2.7. Principales funciones en PHOENICS.

Estas tres funciones o módulos, tienen asociados tres programas que se llaman SATELLITE, EARTH, PHOTON, tal y como se ilustra en la Figura 2.8.

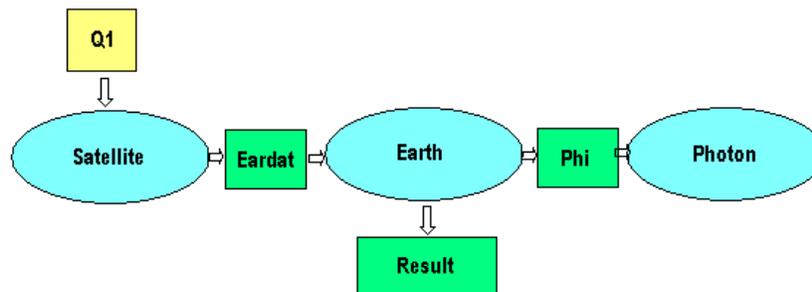


Figura 2.8. Funciones de PHOENICS y los archivos de intercomunicación.

Archivos de intercomunicación: q1 : Es un archivo de texto creado por el usuario escrito en PIL (Phoenics Input Language), siendo este la interfase entre usuario y software y en donde el usuario instruye al software a resolver un problema en particular estableciendo el dominio, la geometría, la malla, las ecuaciones a resolver, las propiedades de los fluidos, las condiciones iniciales y de frontera y los parámetros numéricos necesarios para resolver el problema. Todo esto en lenguaje PIL (Phoenics Input Language). Un ejemplo de archivo q1 creado en este trabajo se muestra en el apéndice.

Eardat : Es un archivo ASCII que traduce y expresa de forma comprensible para EARTH el q1 escrito por el usuario.

Phi : Es un archivo generado por EARTH que permite a PHOTON exhibir los resultados gráficamente.

Result : Es un archivo ASCII donde se tabulan los resultados y también es generado por EARTH.

2.3.5 Método de Solución: Volumen de Control (VC)

Las 12 ecuaciones diferenciales gobernantes acopladas que son presentadas por su complejidad no tienen solución analítica, de modo que son resueltas de forma numérica por PHOENICS 3.4 utilizando el método numérico de volumen de control.

Este método realiza las siguientes 3 etapas: 1) el dominio se discretiza en pequeños elementos de volumen sin traslape llamados nodos, 2) en cada uno de ellos se integran las ecuaciones gobernantes y como resultados de estas integraciones se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas lineales. 3) Este sistema de ecuaciones lineales se resuelven simultáneamente de forma iterativa y se obtiene una solución discreta y aproximada.

2.3.5.1 Discretización y generación de malla en PHOENICS.

Esta etapa consiste en dividir el dominio de cálculo en pequeños volúmenes de control finitos sin traslape colocando puntos nodales en todo el sistema. Las fronteras o caras de los volúmenes se encuentran entre nodos adyacentes. Consideremos un nodo cualquiera en una malla de una sola dimensión y lo llamamos P los nodos vecinos los llamamos W y E , Oeste y Este respectivamente, la intercara entre el nodo P y W se denota como w y entre P y E es e . De esta manera se establece la nomenclatura utilizada en PHOENICS para el desarrollo matemático como se muestra el la Figura 2.9.

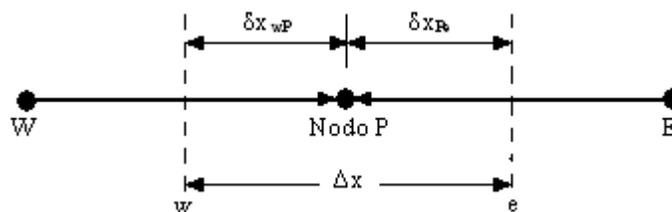


Figura 2.9. Representación gráfica de la nomenclatura utilizada para realizar el balance de las ecuaciones de conservación sobre el nodo P .

En esta simulación la geometría del modelo físico en 3D se construyó con BFC (Coordenadas Ajustadas al Cuerpo) (ver Figura 2.6) y para generar la malla se discretizó con 10 nodos en la coordenada θ , 15 en la dirección del radio r , y 48 nodos en dirección z , en solo una cuarta parte del sistema completo. La estructura de la malla se diseño de acuerdo a las zonas de más interés, esto lo permite PHOENICS haciendo la malla mas fina en donde se sabe ocurren los cambios más drásticos. En la Figura 2.10 se muestra la malla en los planos r - z y r - θ .

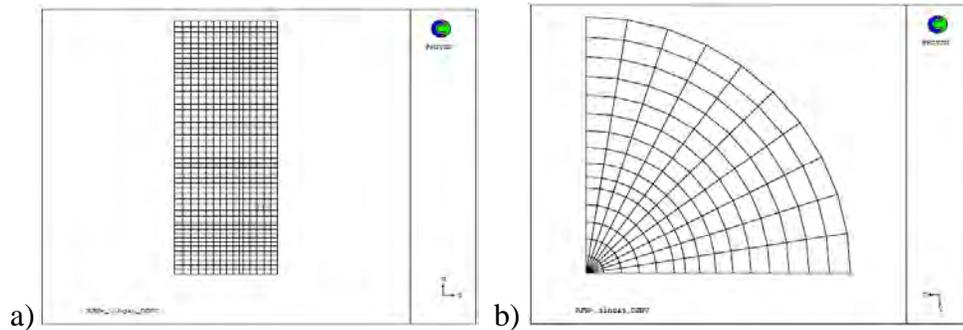


Figura 2.10. Discretización en θ , r z. a) Plano r - z y b) Plano r - θ .

2.3.5.2 Integración de las Ecuaciones Gobernantes en cada Volumen de Control.

El siguiente paso es integrar las ecuaciones de conservación sobre cada volumen de control y así generar una ecuación algebraica en el punto nodal P . Al integrar las ecuaciones diferenciales, realizando el balance para el nodo P , se obtiene una ecuación algebraica del tipo:

$$a_p \phi_p = \sum a_i \phi_i + b \quad (2.17)$$

donde a_p es el coeficiente de la propiedad respecto la cual se integra en el nodo P y es igual a $\sum a_i$, ϕ_p y ϕ_i son las propiedades de transporte en el nodo P y en los nodos vecinos respectivamente, a_i es el coeficiente de la variable en cualquier nodo vecino y b es una constante que representa al término fuente.

2.3.5.3 Solución Numérica del Sistema de Ecuaciones Algebraicas Asociadas.

Obtenidas las ecuaciones del tipo de la ecuación 2.17 para cada nodo de todo el sistema, se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas lineales, el cual es resuelto por un método numérico iterativo para obtener los valores discretos de las propiedades de transporte en cada nodo.

El hecho de que todas las ecuaciones de conservación tengan la misma forma implica que la técnica de solución sea la misma sin importar la ecuación que se requiera resolver. De esta manera PHOENICS resuelve cada ecuación dependiendo de los términos que sean activados por el usuario desde el archivo q1.

2.4 Diseño Experimental

2.4.1 Diseño experimental en el Modelo Físico

Con el objeto de evaluar el efecto de las principales variables de diseño y de proceso sobre la cinética de desgasificación, se realizó la siguiente secuencia experimental. Se saturó agua con oxígeno en el contenedor del modelo físico y este se removió mediante la inyección de gas Nitrógeno. La altura del rotor está dada por la relación $D_{\text{olla}}/3$ que corresponde a 16.7 cm respecto del fondo. Para este experimento se desarrolló un diseño factorial a dos niveles en el que hay dos variables cuantitativas - velocidad de rotación (RPM) y flujo de gas (L/min)- y una cualitativa –forma de inyección de gas-. La respuesta es el coeficiente de transporte de masa interfacial, el cual está íntimamente ligado a la eficiencia en el desgasificado. Una vez seleccionado el número de niveles para cada una de las variables se realizaron experimentos con todas las combinaciones posibles. Con estas tres variables y los dos niveles se obtiene un diseño factorial 2^3 , por lo tanto, este comprende 8 experimentos elementales. En la Tabla 2.4 se muestran el número de experimentos con los niveles codificados de manera que para las variables cuantitativas un menos representa el nivel bajo y un más el nivel alto. Para la variable cualitativa también se codifica con signos menos y más.

Experimento	Vel. de Rotación (R)	Flujo de Nitrógeno (F)	Técnica (T)
1	-	-	-

2	+	-	-
3	-	+	-
4	+	+	-
5	-	-	+
6	+	-	+
7	-	+	+
8	+	+	+

Tabla 2.4 Unidades codificadas de las variables.

Donde:	Velocidad de Rotación		Flujo de Nitrógeno		Técnica	
	-	+	-	+	-	+
	290	573	10	40	1	2

con estos niveles seleccionados y donde 1 y 2 representan las técnicas de inyección convencional y por el fondo respectivamente, la matriz de diseño resulta como se muestra en la Tabla 2.5.

No. Experimento	Vel. de Rotación (RPM)	Flujo de Nitrógeno (L/min)	Técnica (1 ó 2)
	R	F	T
1	290	10	1
2	573	10	1
3	290	40	1
4	573	40	1
5	290	10	2
6	573	10	2
7	290	40	2
8	573	40	2

Tabla 2.5 Matriz de diseño experimental a dos niveles.

Las RPM se ajustaron con la configuración de bandas en el motor y se midieron con un tacómetro digital. La saturación de oxígeno se realizó inyectando aire con un compresor de aire, el flujo de nitrógeno se reguló con un rotámetro en L/min. La inyección del gas de purga se realizó a través de la flecha para la técnica convencional y por el fondo de la olla con una conexión rápida para la nueva técnica. La concentración de oxígeno disuelto se registró cada 5 segundos a partir del tiempo cero (cuando comenzó la inyección del nitrógeno) hasta eliminar por completo el oxígeno del agua. El instrumento para este efecto

es un HANNA modelo HI 9146 (Figura 2.11). El arreglo experimental y las pruebas en marcha se presentan en las fotos de la Figura 2.12.



Figura 2.11. Instrumento de medición de oxígeno disuelto HANNA HI 9146.

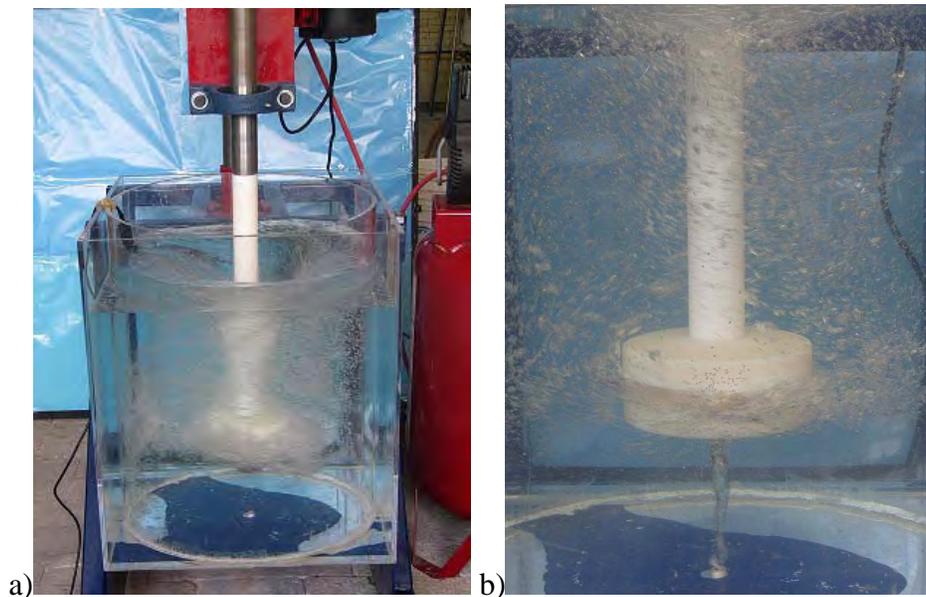


Figura 2.12. Arreglo experimental a) técnica convencional(exp. 3) y b) técnica propuesta(exp. 5)
Los ocho experimentos elementales se realizaron por duplicado. Una vez obtenidos todos los datos de concentración de oxígeno contra el tiempo, se graficaron en una hoja de cálculo y se ajustaron estas curvas con una regresión exponencial utilizando TableCurve 2D v 2.02 ®. El parámetro cinético “k” obtenido con este ajuste de datos corresponde a la eficiencia del desgasificado.

2.5 Diseño Experimental en PHOENICS del Modelo Matemático.

Se desarrollaron cálculos para solo dos de los experimentos presentados en el diseño del modelado físico para poder confrontar los resultados matemáticos y físicos, de tal manera que las condiciones de los experimentos 4 y 8 de la Tabla 2.5 se usaron para correr las simulaciones del modelado matemático. Estos experimentos son creados en un archivo de texto (q1) y subrutinas en lenguaje FORTRAN para la desgasificación que describen al problema mediante ecuaciones. En esta tesis, solo se reportan resultados preliminares del modelado matemático, ya que debido a la complejidad del problema, se estimó necesario postergar su desarrollo y conclusión del modelo a un trabajo futuro.

Para la desgasificación se considera que la etapa controlante del transporte de masa es la difusión de oxígeno en una delgada película adherida a la superficie de la burbuja. En la Tabla 2.6 se muestran algunas correlaciones probadas para la determinación del coeficiente de transporte de masa. El diámetro promedio de burbuja bajo este régimen de flujo, la constante de equilibrio de la disolución del oxígeno en agua para establecer la concentración en la intercara y el coeficiente de difusión de oxígeno en agua, se encuentran en la Tabla 2.7.

Designación	Correlación	Referencia
A	$Sh = 0.79 Re^{0.7} Sc^{0.356}$	Koria ^[20]
B	$Sh = 2 + 0.7 Re^{0.5} Sc^{0.33}$	Frossling ^[21]
C	$K_{L,A} = 0.041 \alpha \left(\frac{H}{d^{0.67} b} \right) \left(\frac{F}{B} \right)^{0.18} \left(\frac{V_G}{H} \right)$	Khudenko ^[22]
D	$Sh = 0.62 Sc^{0.5} Bo^{0.33} Fr^{0.68} \left(\frac{\rho_G}{\rho_l} \right)^{0.04}$	Ozturk ^[22]

E	$K_L = 3.5414 \times 10^{-4} \sqrt{\frac{V_G}{R2}}$	Higbie ^[22]
---	---	------------------------

Tabla 2.6 Resumen de correlaciones utilizadas en la simulación.

Diámetro de burbuja promedio ^[23]	$d_b = 0.005 \text{ m}$
Constante de equilibrio ^[24]	$K_{eq} = \exp\left(\frac{0.046T^2 + 203.35T \ln(T/298) - (299.378 + 0.092T)(T - 298) - 20.5 \times 10^3}{(8.314)T}\right)$
Coeficiente de Difusión O ₂ -H ₂ O ^[25]	$D_{O_2-H_2O} = \frac{7.4 \times 10^{-8} T (\phi_{H_2O} M_{H_2O})}{\mu V_{O_2}^{0.6}}$

Tabla 2.7 Datos necesarios para la simulación de desgasificación.

Capítulo 3

Resultados y Discusión.

3.1. Resultados del Modelado Físico

3.1.1. Visualizaciones del vórtice formado, distribución y tamaño de burbujas de forma cualitativa.

En la Figura 3.1 se muestran las fotografías del vórtice formado en la superficie del agua en los experimentos de bajo y alto nivel de velocidad de rotación correspondientes a 290 RPM y 573 RPM, de ambas técnicas (convencional y por el fondo), de acuerdo con los experimentos 1, 4, 5 y 8 de la Tabla 2.5.



a) 290 RPM-convencional.



c) 290 RPM-inyección por el fondo.



b) 573 RPM-convencional.



d) 573 RPM-inyección por el fondo.

Figura 3.1. Fotos del vórtice formado en a) 290 RPM-convencional, b) 573 RPM-convencional, c) 290 RPM-inyección por el fondo y d) 573 RPM-inyección por el fondo.

La distribución y el tamaño de burbujas de los niveles bajo y alto de flujo de gas y de revoluciones por minuto se muestran de forma cualitativa para la técnica de inyección de gas convencional en la Figura 3.2. Estas fotografías corresponden a los experimentos 1, 2, 3 y 4 de la Tabla 2.5.



a) 10 L/min-290 rpm-conv



b) 10 L/min-573 rpm-conv



c) 40 L/min-290 rpm-conv



d) 40 L/min-573 rpm-conv

Figura 3.2. Distribución y tamaño de burbujas (cualitativo) de a) 10 L/min-290 rpm-conv. b) 10 L/min-573 rpm-conv, c) 40 L/min-290 rpm-conv. y d) 40 L/min-573 rpm-conv.

La distribución y el tamaño de burbujas se pueden apreciar de forma cualitativa en la Figura 3.3 para la inyección por el fondo. Las condiciones de cada experimento se localizan en la Tabla 2.5.

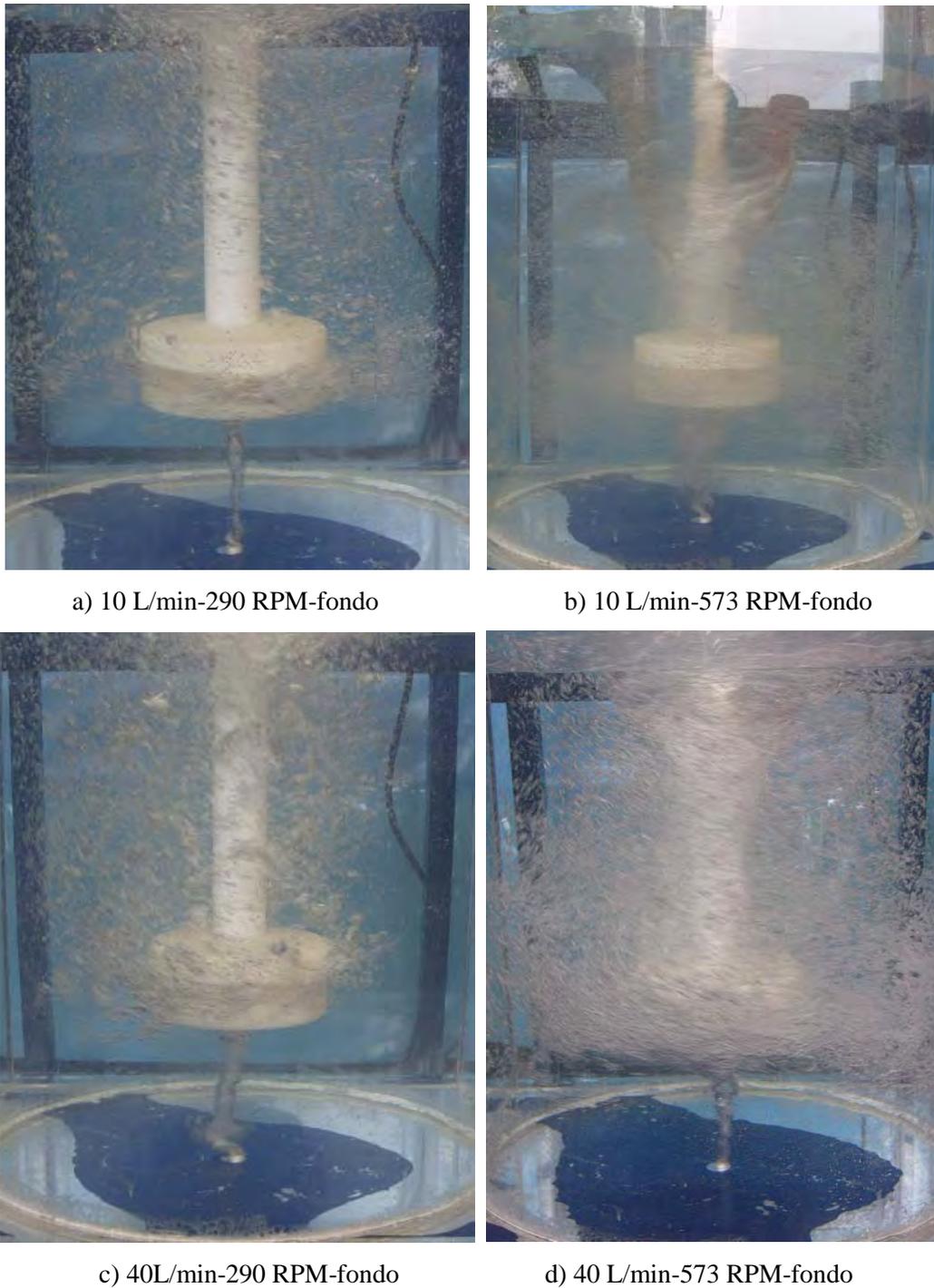


Figura 3.3. Distribución y tamaño de burbuja, bajo el efecto combinado de las variables de proceso, RPM y Flujo de Gas. a) Experimento 5, b) Experimento 6, c) Experimento 7 y d) Experimento 8.

3.1.2 Cinéticas de Desgasificación.

El promedio de las mediciones de oxígeno disuelto en los ocho experimentos replicados se graficaron y se muestran en la Figura 3.4, obteniéndose así las cinéticas de desgasificación.

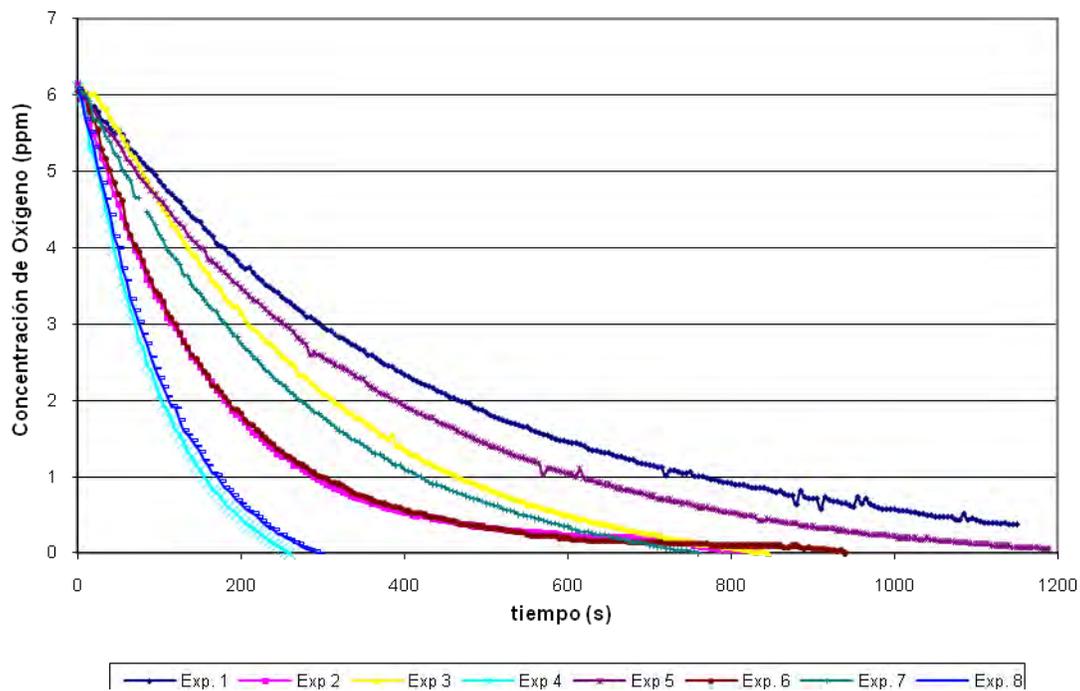


Figura 3.4. Cinéticas de desgasificación del promedio de los ocho experimentos replicados.

3.2 Resultados del Modelo Matemático.

En esta sección se presentan los resultados preliminares del modelado matemático de solo dos de los casos experimentales del modelo físico, esto debido a que se estimó necesario postergar su desarrollo y conclusión en un trabajo futuro por el grado tan alto de complejidad.

Los casos presentados abajo son los experimentos 4 y 8 correspondientes a 573 RPM-40 L/min-Técnica Convencional y 573 RPM-40 L/min-Técnica Nueva, respectivamente.

3.2.1 Resultados Gráficos de Patrón de Flujo y Fracción Gaseosa.

Se realizaron dos simulaciones, correspondientes a los experimentos 4 y 8 de la Tabla 2.5 (573 RPM-40 L/min-ambas técnicas), con el fin de comparar las técnicas de inyección de gas de los experimentos más eficientes según las curvas cinéticas experimentales. En las Figuras 3.5 y 3.6 se muestran los gráficos obtenidos de forma complementaria al objetivo de esta tesis. En la Figura 3.5a se observan los vectores de velocidad de la fase líquida en un plano r-z del experimento 4 (573 RPM-40 L/min), con inyección convencional de gas (el vector de referencia es de 1.3 m/s). La Figura 3.5b presenta la fracción de gas dentro del sistema del mismo experimento y sobre el mismo plano, en donde se ve la fase gas (rojo) arriba del líquido (azul) separados por la interface de colores que representa la superficie libre.

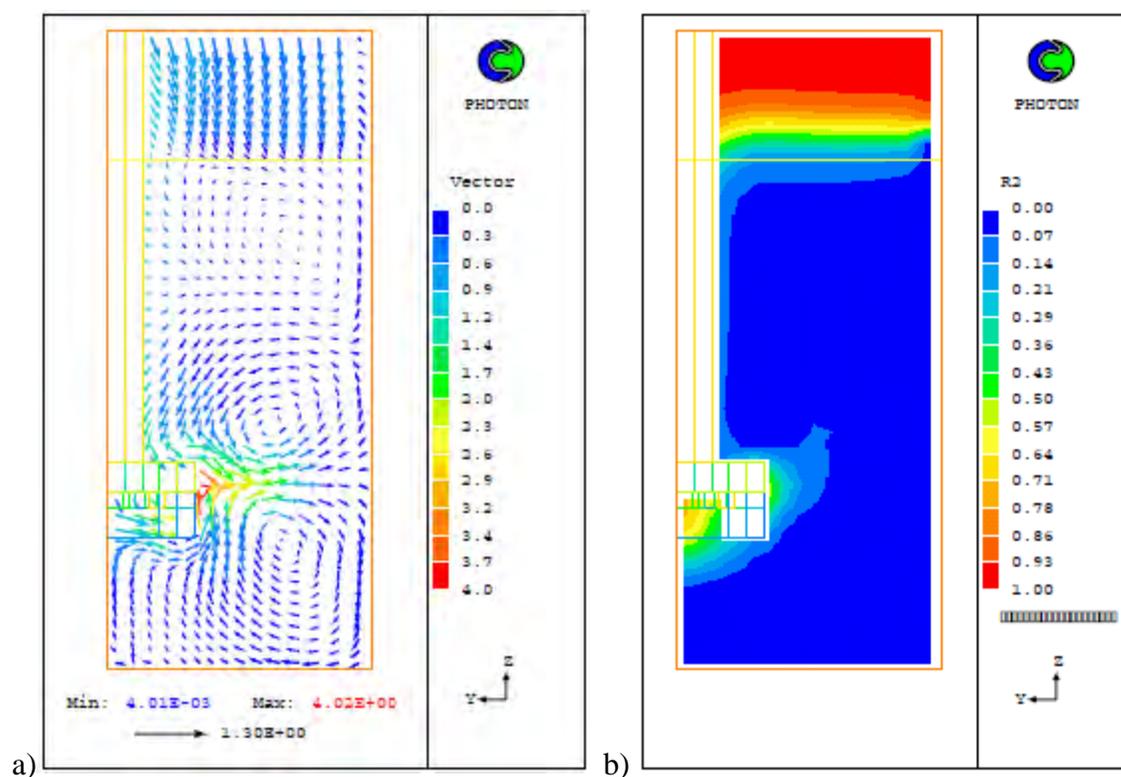


Figura 3.5 a) Vectores de velocidad y b) Contornos de fracción gaseosa en un plano r-z, del caso: 573 RPM, 40 L/min de inyección convencional.

En las Figuras 3.6a y 3.6b se observan los vectores de velocidad en un plano r-z con vector de referencia de 1.3 m/s y fracción de gas respectivamente para la inyección de gas por el

fondo de la olla. El experimento simulado es el No. 8 de la Tabla 2.5 (573 RPM y 40 L/min de la Inyección por el Fondo).

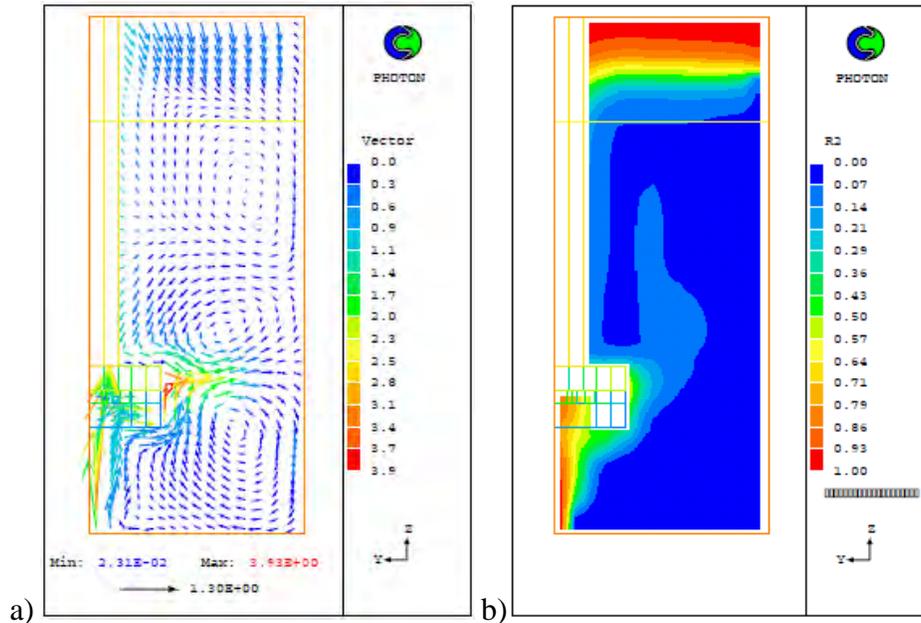


Figura 3.6 a) Vectores de velocidad en un plano r-z, b) Contornos de fracción de gas.

En la Figura 3.7 se muestran las fracciones de gas dentro del baño líquido esquematizadas como isolíneas de fracción de gas para las dos técnicas de inyección para permitir una mejor comparación.

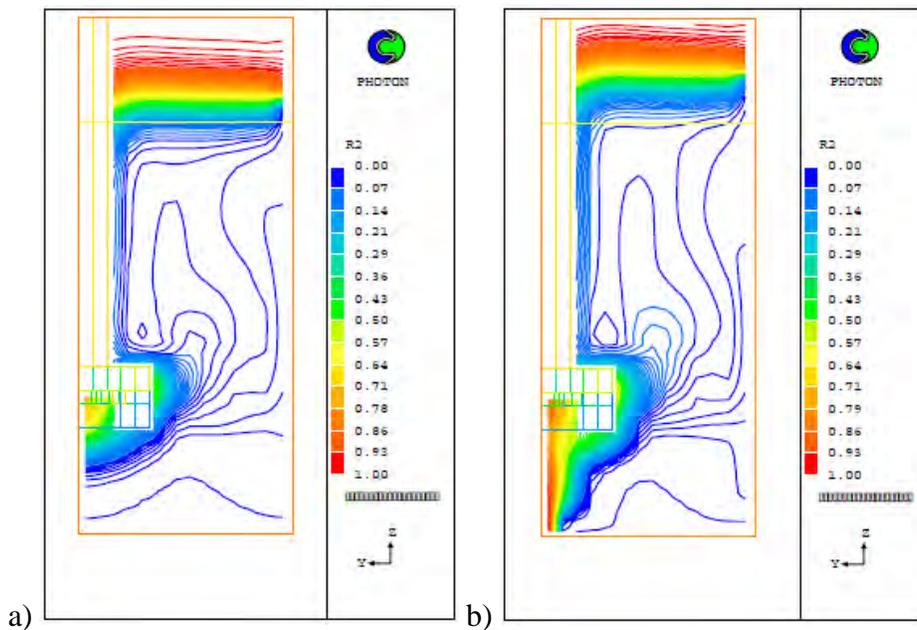


Figura 3.7 Isolíneas de fracción de gas dentro del contenedor para a) Técnica convencional de inyección y b) Inyección por el fondo.

En la Figura 3.8 se muestran los contornos de la viscosidad cinemática turbulenta en ambas técnicas, para el mismo caso con 573 rpm y 40 L/min.

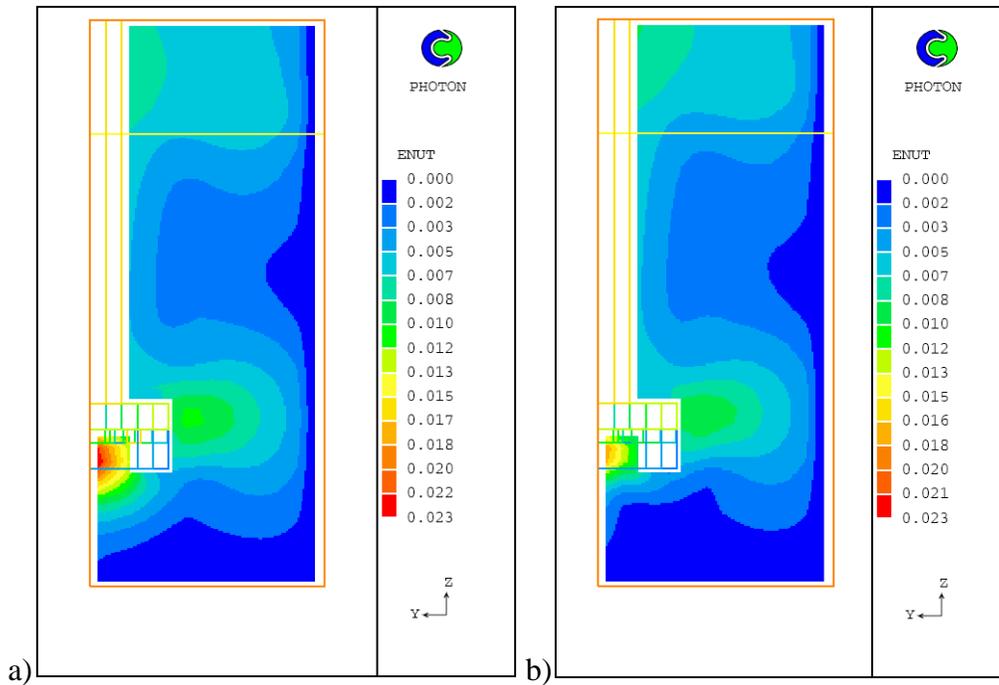


Figura 3.8 Contornos de viscosidad cinemática turbulenta, a) Inyección convencional, b) Inyección por el fondo.

3.2.2 Cinética de Desgasificación.

En la Figura 3.9 se muestra la curva cinética de desgasificación calculada numéricamente del experimento 4 (573 RPM, 40 L/min de la técnica convencional de inyección de gas).

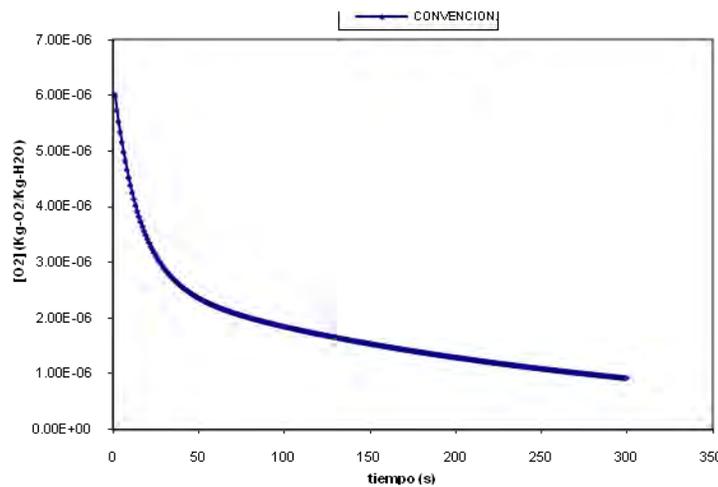


Figura 3.9 Curva cinética de desgasificación del experimento 4.

En la Figura 3.10 se muestra la curva de desgasificación calculada numéricamente del experimento 8 (573 RPM, 40 L/min) de inyección de gas por el fondo de la olla.

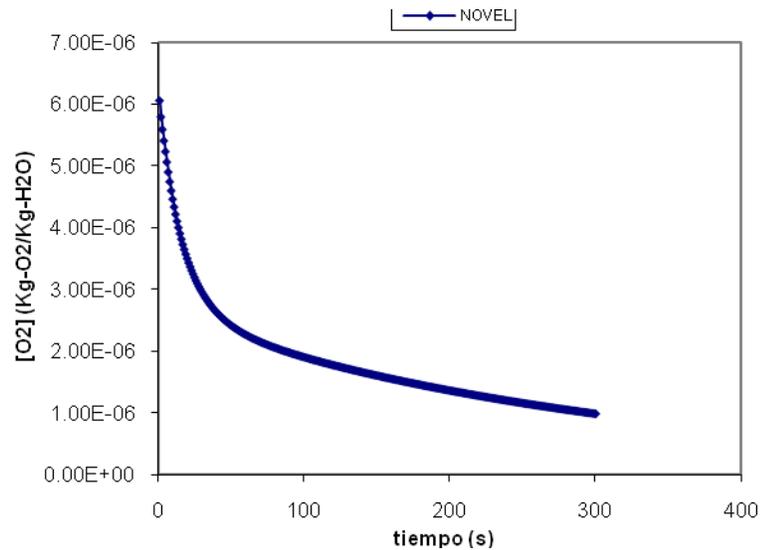


Figura 3.10 Curva cinética de desgasificación del experimento 8.

3.3 Validación.

A continuación se muestran las comparaciones entre las curvas de desgasificación obtenidas experimentalmente en el modelado físico y los resultados obtenidos con la modelación matemática.

En la Figura 3.11 se comparan los resultados obtenidos para la desgasificación del experimento 4 (573 RPM-40 L/min.-Inyección Convencional) junto con las predicciones del respectivo modelo matemático.

Validación Técnica Convencional

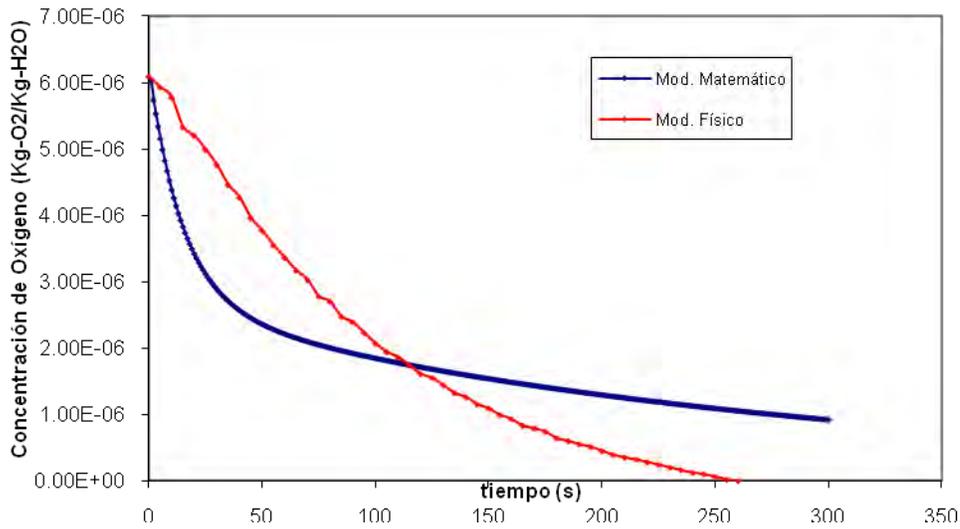


Figura 3.11 Validación del Modelo Matemático de la Técnica Convencional.

En la Figura 3.12 se comparan los resultados para la desgasificación del experimento 8 (573 RPM-40 L/min.-Inyección por el Fondo) junto con las predicciones del respectivo modelo matemático.

Validación de Técnica Novel

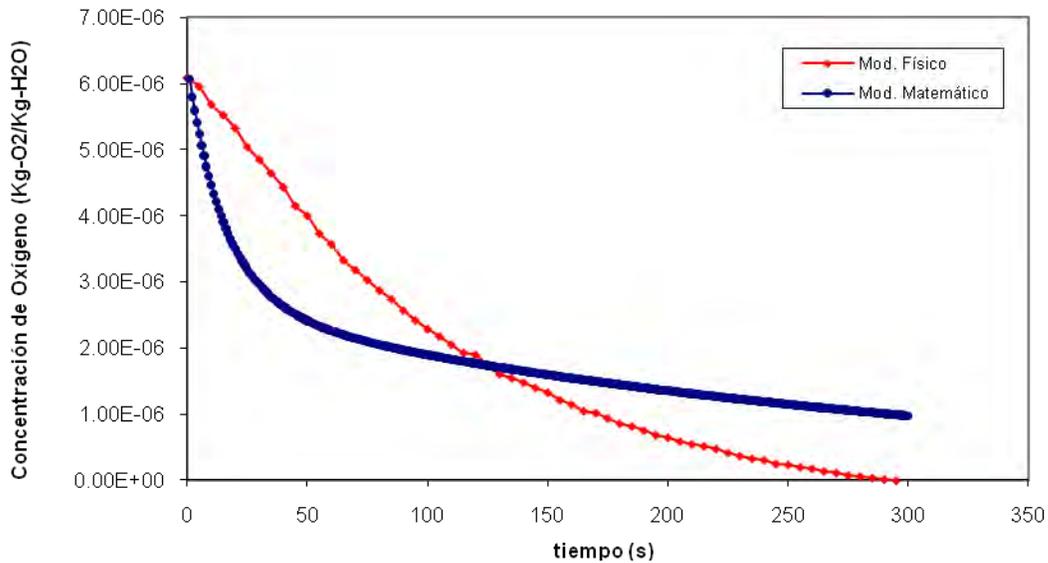


Figura 3.12 Validación del Modelo Matemático de la Técnica de Inyección por el Fondo.

3.4 Discusión y Análisis de Resultados del Modelo Físico.

En esta sección nos centraremos en el análisis de resultados del modelado físico y posteriormente una breve discusión acerca de los resultados preliminares de las dos simulaciones matemáticas.

3.4.1 Visualizaciones hidrodinámicas

La Figura 3.1 muestra la forma de los vórtices en cada experimento. Aquí es claro, el efecto de la velocidad de rotación sobre la forma de la superficie libre del agua, es decir, se presentan vórtices mucho más pronunciados a mayores velocidades de rotación. Otra observación interesante es notar que los vórtices disminuyen con la inyección por el fondo respecto a la inyección convencional. En la práctica los vórtices se eliminan colocando barreras físicas en las paredes del reactor llamados “*baffles*”, ya que el vórtice es nocivo por exponer al metal líquido a una sobreoxidación y a mayor disolución de hidrógeno. Como se puede ver en las Figuras 3.2 y 3.3, el tamaño y distribución de burbujas depende fuertemente de las RPM y del Flujo de gas. Aumentar la velocidad de rotación disminuye el tamaño de las burbujas y las distribuye mejor en toda la olla, ya que la energía mecánica del rotor sirve para crear mayor área interfacial burbuja-líquido e impartir momentum radial y angular a las burbujas. Por otro lado, al aumentar el flujo de gas aumenta la fracción de gas dentro del sistema, aunque es difícil establecer el efecto del flujo de gas sobre el tamaño de burbuja. Abajo del rotor se genera una zona de baja presión donde el gas es concentrado y expulsado por las toberas diseñadas para una mejor fragmentación del gas, por ello se postula que si se introduce el gas por el fondo se aprovechará esta zona de baja presión, mejorando la distribución de burbujas, disminuyendo su tamaño y promoviendo mayor recirculación en el fondo de la olla. La comparación entre ambas técnicas resulta interesante, pues aparentemente se mejora sustancialmente la distribución de burbujas con la inyección por el fondo aunque el efecto de la técnica sobre el tamaño de burbuja no es claro de establecer con las fotos presentadas.

3.4.2 Cinéticas de desgasificación

Engh citado por Grandfield^[9] demostró que la cinética de remover el gas disuelto es controlada por el transporte de masa en la intercara líquido-burbuja. Por lo tanto el tamaño de burbuja y consecuentemente el área de contacto son factores muy importantes. La cinética de remover oxígeno del agua es bien representada con la siguiente ecuación de primer orden:

$$\frac{dC}{dt} = K(C - C_{\infty}) \quad (3.1)$$

donde C es la concentración de oxígeno al tiempo t y K es el coeficiente de transporte de masa global, el cual, depende del área de contacto y el volumen del líquido tratado como sigue:

$$K = k_L \frac{A}{V} \quad (3.2)$$

Donde A es el área interfacial, V el volumen de líquido tratado y k_L es el coeficiente de transporte de masa. Al integrar la ecuación 3.1 se obtiene la siguiente ecuación:

$$\left(\frac{[O_2]_t - [O_2]_{\infty}}{[O_2]_0 - [O_2]_{\infty}} \right) = e^{-kt} \quad (3.3)$$

Las curvas de desgasificación experimentales se analizaron mediante un análisis estadístico con un diseño de experimentos a dos niveles de las variables (ver Tabla 2.5) para conocer el efecto de cada uno de los parámetros.

El ajuste de las curvas experimentales a la forma de la ecuación 3.3 presenta una buena correlación, de donde se obtuvo el parámetro cinético “ k ” relacionado con el coeficiente de transporte de masa y consecuentemente con la eficiencia del proceso de desgasificado. Para calcular los efectos de las variables empleamos el algoritmo estadístico de Yates^[26] descrito detalladamente en la literatura, el cual emplea la matriz de diseño mostrada en la Tabla 2.5 para este efecto. En la Tabla 3.1 se muestra nuevamente la matriz de diseño experimental junto con la respuesta obtenida a través del coeficiente de transporte de masa. Los resultados del algoritmo de Yates, utilizando el orden estándar de los datos experimentales se muestran en la Tabla 3.2.

No. Experimento	Vel. de Rotación (RPM)	Flujo de Nitrógeno (L/min)	Técnica (1 ó 2)	Coefficiente "k"
	R	F	T	
1	290	10	1	0.002333055
2	573	10	1	0.006302383
3	290	40	1	0.003273784
4	573	40	1	0.009447732
5	290	10	2	0.002724147
6	573	10	2	0.006286123
7	290	40	2	0.003618389
8	573	40	2	0.009221271

Tabla 3.1 Matriz de diseño con la respuesta del coeficiente de transporte.

Media de "k" del Exp. Elemental	-(1)	-(2)	-(3)	Media	Estimación del Efecto	Identificación*
0.002333055	0.008635438	0.021356953	0.043206883	8	0.00540086	Media
0.006302383	0.012721515	0.021849931	0.019308133	4	0.00482703	R
0.003273784	0.00901027	0.010143276	0.007915467	4	0.00197887	G
0.009447732	0.01283966	0.009164857	0.004245526	4	0.00106138	RG
0.002724147	0.003969328	0.004086078	0.000492978	4	0.00012324	T
0.006286123	0.006173948	0.00382939	-0.000978418	4	-0.0002446	RT
0.003618389	0.003561976	0.002204621	-0.000256688	4	-6.4172E-05	GT
0.009221271	0.005602882	0.002040906	-0.000163715	4	-4.0929E-05	RGT

Tabla 3.2 Cálculo de efectos de las variables mediante el algoritmo de Yates.

*Identificación: Media = media de "k" de los 8 casos. R = Efecto del Rotor. G = Efecto del Flujo de gas. T = Efecto de la Técnica. Los demás códigos son de efectos combinados de las variables.

Las columnas 1,2 y 3 de la Tabla 3.2, corresponden a la secuencia de pasos utilizados en el algoritmo y no tienen significado físico, mientras que el efecto de cada variable y los efectos combinados sobre el parámetro cinético "k" se ven en esta misma tabla. Para facilitar el análisis, en la Tabla 3.3 se presentan los resultados resumidos del análisis factorial del parámetro cinético "k" con la desviación estándar que resulta de la réplica de los experimentos. Se aprecia en letras negritas los efectos más significativos sobre "k" que en orden decreciente de importancia son: a) RPM, b) el flujo de gas y c) el efecto combinado RPM y flujo de gas, y d) el efecto combinado de RPM y técnica. Los tres primeros efectos son positivos incrementando la cinética y el último es negativo disminuyéndola.

Efecto	Estimación + Desviación
Media	$5.4008 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$
Efectos principales	
RPM (R)	$4.8270 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$
Flujo de Gas (G)	$1.9788 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$
Técnica de Inyección (T)	$0.1232 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$
Interacción de dos factores	
R x G	$1.0613 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$
R x T	$-0.2446 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$
G x T	$-0.0641 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$
Interacción de tres factores	
R x G x T	$-0.0409 \times 10^{-3} \pm 1.7 \times 10^{-4}$

Tabla 3.3 Efectos calculados típicos para el diseño factorial.

3.4.3 Efecto de la velocidad de rotación.

En las Figuras 3.2 y 3.3 se puede analizar el efecto de la velocidad de rotación. En los incisos a) y b) se observa este efecto a flujos bajos de gas y en los incisos c) y d) a flujos altos. A bajas RPM las burbujas son más grandes y tienden a subir cerca de la flecha que sujeta al rotor. Incrementando la velocidad de rotación se observan burbujas más finas con una mejor distribución en el baño líquido, esto debido a la mayor fuerza centrífuga generada por el giro del rotor y el esfuerzo de corte sobre su superficie, impulsando con mayores momentos angulares y radiales a las burbujas. De igual manera las burbujas al ser más pequeñas tienen mayor tiempo de residencia en el agua y son arrastradas con mayor facilidad por el flujo del líquido, por lo tanto, atrapan mayor cantidad de oxígeno por volumen de nitrógeno consumido en su camino a la superficie. Consecuentemente, el incremento de la velocidad de rotación corresponde a un aumento en la superficie de contacto líquido-gas, la cual está íntimamente ligada a la eficiencia. A mayores RPM hay mucha mayor área de contacto interfacial aumentando la velocidad con la que el oxígeno es removido. Definitivamente las altas velocidades de rotación promueven una mejor distribución de la pluma de gas, permitiendo que llegue hasta las paredes del contenedor, ya que la fuerza de arrastre del líquido es mayor que la fuerza boyante de las burbujas. El análisis estadístico se encuentra resumido en la Tabla 3.3, en la cual se observa que el efecto de las RPM es aumentar en casi 5×10^{-3} el valor del coeficiente de transporte de masa. Sin embargo, esta variable no puede ser interpretada individualmente ya que el efecto de la

velocidad de rotación es mayor a flujos altos de gas que a bajos y por lo tanto, se dice que estos dos parámetros interaccionan, por lo que su análisis es más fácil utilizando la Figura 3.13. El efecto de aumentar las RPM a 10 L/min es aumentar la k de 2.52×10^{-3} a 6.29×10^{-3} (diferencia de 3.77×10^{-3}) y para 40L/min es aumentar k de 3.44×10^{-3} a 9.33×10^{-3} (diferencia de 5×10^{-3}). El aumento es 1.6 veces mayor con flujo alto que con flujo bajo. Este incremento pudiera parecer pequeño, pero debido a que este factor cinético tiene una dependencia exponencial con la cinética de desgasificado, aumentar las RPM logra reducir el tiempo de desgasificado aproximadamente una tercera parte. Según los experimentos 3 y 4 (con 40L/min) de la Figura 3.4, la reducción en el tiempo de desgasificado va de 845 segundos (14 min) con altas RPM a 260 segundos (4.3 min.) con bajas RPM.

3.4.4 Efecto del Flujo de Gas.

De igual forma, en las Figuras 3.2 y 3.3 se puede apreciar este efecto sobre el tamaño y distribución de las burbujas. A bajas RPM (incisos a y c), aumentar el flujo produce burbujas grandes que ascienden cerca de la flecha y estas tienen menor tiempo de residencia en el agua. Para altas RPM (incisos b y d) el aumento del flujo de gas mejora la distribución de burbujas pequeñas y aunque estas son arrastradas por el líquido durante el ascenso, tienden a aproximarse a la flecha donde la presión es menor. Además, el arrastre que ejercen las burbujas en el ascenso provoca una disminución en el vórtice, esto es claro al observar los incisos b) y d) de las Figuras 3.2 y 3.3. También se aprecia que al aumentar el flujo de gas hay más fracción de gas en el líquido. La interpretación estadística del efecto de este parámetro se realiza con la ayuda del la Figura 3.13. Se observa que manteniendo las revoluciones del rotor a 290 RPM, el efecto de aumentar el flujo de gas es aumentar k de 2.52×10^{-3} a 3.44×10^{-3} (diferencia de 0.92×10^{-3}) y para 573 RPM k aumenta con una diferencia de 3.04×10^{-3} . También es interesante advertir que el efecto estadístico combinado de RPM con flujo de gas es significativo en la cinética, por lo que las dos variables deben ir complementadas, ya que un aumento en el flujo de gas requiere una mayor dispersión y rompimiento del gas en burbujas finas para lo que se necesita mayor RPM del rotor.

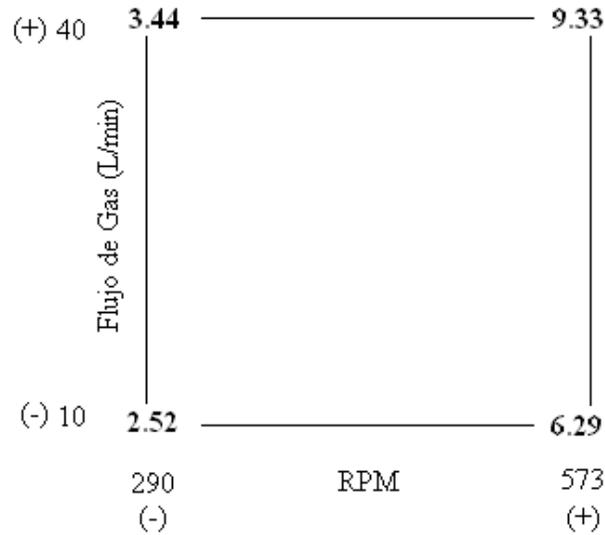


Figura 3.13 Interacción de RPM y Flujo de Gas. Los valores están del orden de $k \times 10^3$.

3.4.5 Efecto de la Técnica de Inyección.

Analizando detalladamente las Figuras 3.2 y 3.3, se observa que a 290 RPM (nivel bajo) e inyección por el fondo, hay una mejor distribución y fragmentación de las burbujas, es decir, se nota que hay una mejora con la inyección de gas por el fondo cuando se analiza sin tomar en cuenta el efecto de las revoluciones por minuto, el cual al ser mucho mayor, inhibe el efecto que pueda tener la técnica de inyección. Esto se confirma analizando las curvas cinéticas de los experimentos con las mismas bajas RPM, con el mismo flujo y variando la forma de inyección, es decir, comparando los experimentos 1-5 y el 3-7, donde las cinéticas de desgasificación de la técnica nueva son mejores que las cinéticas obtenidas con la técnica convencional (ver Figura 3.4). Sin embargo, a 573 RPM (nivel alto) la técnica nueva de inyección por el fondo propuesta en esta tesis presenta un desgasificado similar o ligeramente menor que la inyección convencional. Según al análisis estadístico de la Tabla 3.3 el efecto de la técnica cae dentro del error y por lo tanto no es significativo. Sin embargo, el efecto combinado de la técnica con las RPM del rotor parece ser importante. Por ejemplo, el efecto que tiene la técnica de inyección sobre “k” en los experimentos a bajas RPM, se muestra en la siguiente Tabla 3.4.

Experimentos	Efecto de la Técnica de Inyección
1-5	4×10^{-4}
3-7	3.4×10^{-4}

Tabla 3.4 Efecto de la Técnica de inyección en los experimentos análogos 1-5 y 3-7, correspondientes al nivel bajo de RPM.

Los cálculos de la Tabla 3.4 solo analizan una parte de los experimentos y aunque las variaciones son pequeñas caen fuera del error y por eso se observa una mejora en la cinética de estos experimentos en la Figura 3.4 con la inyección por el fondo. Es decir, con bajas RPM es mucho mejor la técnica por el fondo, mientras que a altas RPM son iguales ambas técnicas.

Para poner en argumentos cuantitativos lo anterior, la Tabla 3.5 muestra el porcentaje de mejora en cinética de desgasificación con la inyección por el fondo con relación a la técnica convencional y también la mejora en la eficiencia del gas de purga usando la inyección por el fondo respecto a la convencional, a través de las ecuaciones 3.4 y 3.5.

$$\Delta k = \frac{k_F - k_C}{k_C} * 100 \quad 3.4$$

donde k_F es el coeficiente de transporte de masa en la técnica de inyección por el fondo de la olla y k_C es el coeficiente de la técnica convencional.

$$\Delta e = \frac{e_F - e_C}{e_C} * 100 \quad 3.5$$

donde
$$e = \frac{[O_2]_0}{V_{N_2}} \quad 3.6$$

$[O_2]_0$ son los gramos de oxígeno iniciales en el contenedor de agua y V_{N_2} son los litros totales de nitrógeno consumidos en cada experimento. La inyección por el fondo se distingue con el subíndice F y la convencional con el subíndice C .

Par de experimentos con iguales RPM y flujo de gas pero con técnicas distintas de inyección	Efecto cinético de la Técnica de Inyección (% de variación en k)	Efecto en la eficiencia de gas de la inyección por el fondo respecto a la convencional (%)
1 y 5	16.76	2.18
2 y 6	-0.25	-12.32
3 y 7	10.52	11.55
4 y 8	-2.39	-11.14

Tabla 3.5 Porcentaje del efecto de la técnica de inyección por el fondo respecto de la técnica convencional y porcentaje de la eficiencia de la inyección por el fondo relativa a la convencional.

En la Tabla 3.5 nuevamente se hace notorio que la técnica de inyección por el fondo solo tiene efecto positivo sobre la cinética en los casos de RPM bajas pero es casi igual con RPM altas. En cuanto el consumo de gas, es más eficiente inyectar por el fondo con RPM bajas pero es menos eficiente con RPM altas.

Sin embargo, a pesar de que está técnica propuesta para el sistema de inyección de gas de purga no es significativo para todos los casos hablando en relación a la cinética de desgasificación, tiene implicaciones importantes en el aspecto económico sobre los equipos de desgasificación, ya que la relativa sencillez del diseño de inyección por el fondo es mucho menos costosa que el sistema de inyección convencional más complicado.

3.5 Discusión de los Resultados del Modelo Matemático.

La Figura 3.5a muestra los patrones de flujo obtenidos para condiciones de 573 RPM-40 L/min de la Inyección Convencional en un plano r-z, donde se aprecia la formación de recirculaciones por arriba y por abajo del rotor generadas por el movimiento del mismo y por la salida del gas. Estas recirculaciones se dan sobre este plano axial independientemente del movimiento angular provocado por el giro del rotor, y se explica su presencia por el bombeo de líquido por el fondo del rotor que sale expulsado por las toberas del rotor con momentum radial. Esta recirculación promueve la turbulencia y por lo tanto se favorece el transporte de masa. Se debe señalar que el movimiento principal es en dirección angular, alcanzándose la mayor velocidad del líquido en las inmediaciones del rotor por la condición de no deslizamiento, por lo que el fluido en contacto con el rotor es

el que tiene la mayor velocidad y disminuye en dirección radial hacia las paredes del contenedor hasta llegar a cero por la condición de no deslizamiento con la pared estática. Los vectores de velocidad de la fase líquida que se encuentran por encima de la superficie libre del líquido carecen de significado físico ya que ahí solo hay gas.

En la Figura 3.5b se muestran los contornos de fracción gaseosa para la técnica de inyección convencional, donde el efecto del giro del rotor sobre la formación del vórtice es claro. Se observa la concentración de gas saliendo en la parte inferior del rotor y también su dispersión dentro del contenedor. También se observa como durante el ascenso del gas este tiende a irse hacia el eje provocando poca concentración de gas en la parte superior del líquido, cerca de la pared, tal y como se observó experimentalmente en la Figura 3.2. La fluidinámica con la inyección por el fondo (ver Figura 3.6a) es similar a la fluidinámica convencional excepto por el arrastre que provoca el gas inyectado por el fondo sobre el líquido y que lo dirige hacia el rotor. Con la inyección por el fondo (Figura 3.6b) el vórtice predicho es similar que con la inyección convencional, aunque al parecer, al ser inyectado por el fondo, el gas se distribuye mejor dentro del líquido, incluso cerca de la pared lateral (ver Figura 3.3). En la Figura 3.7 se puede visualizar mejor estas distribuciones del gas con ambas técnicas como isolíneas de fracción gaseosa. En ambas inyecciones, cerca de la zona superficie libre se observa una franja de contornos y esto es debido a un error numérico en la simulación asociado a los esquemas de convección utilizados en la técnica de volumen de control y es conocido como “difusión numérica”, la cual se presentan con mucha frecuencia cuando se simulan superficies libres.

En la Figura 3.8 se muestran los contornos de viscosidad cinemática turbulenta. Esta propiedad está asociada con el grado de turbulencia del fluido y su valor se relaciona con la rapidez del mezclado o del transporte de masa. Se observa que en la técnica convencional hay un poco más de turbulencia a un costado y por abajo del rotor. Aunque hay algunas variaciones en los contornos entre una y otra técnica, básicamente presentan el mismo grado de turbulencia y por lo tanto la técnica de inyección no lo afecta.

Las Figuras 3.9 y 3.10 muestran las curvas de desgasificación para la técnica convencional y de inyección por el fondo de la olla respectivamente. Estas curvas se obtuvieron considerando que la etapa que controla el transporte de masa es la difusión a través de una delgada película de líquido en la superficie de la burbuja, fijando la

concentración en la intercara líquido-gas asociada a la constante de equilibrio de la disolución del oxígeno en agua y determinando el coeficiente de transporte de masa mediante una correlación matemática. Estos datos se encuentran en la Tabla 2.7.

En las Figuras 3.11 y 3.12 se enfrentan los resultados calculados con el modelo matemático contra los resultados medidos con el modelo físico, observando una pobre concordancia en la tendencia aunque en el mismo orden de magnitud para la cinética de desgasificación. La correlación para determinar el coeficiente de transporte de masa que mostró un comportamiento cinético más cercano a los resultados experimentales de desgasificación fue la correlación “E” de la Tabla 2.6. En esta etapa se observa la necesidad de desarrollar mayor conocimiento sobre el modelo matemático, trabajar en la construcción de nuevos modelos mejorando las mallas y los esquemas utilizados para los mecanismos de flujo de fluidos, de tal manera que los resultados puedan ser más aproximados a la realidad. Sin embargo, el avance que se ha obtenido con este modelo es bastante bueno. Aunque las curvas presentan ciertas diferencias, estos resultados preliminares pueden indicar tendencias y así determinar una dirección prometedora para futuros modelos.

Capítulo 4

Conclusiones

En este trabajo se desarrollaron un modelo físico de agua y su modelo matemático de una olla de desgasificado de aluminio equipado con el rotor inyector, para comparar la cinética de desoxigenación cuando se inyecta el gas de purga de manera convencional y con una técnica novedosa de inyección por el fondo de la olla.

Modelado Físico

- Efecto de la técnica de inyección: La hipótesis del trabajo sugería una mejora en la cinética de inyección con la inyección del gas de purga por el fondo. Sin embargo, estadísticamente esta hipótesis resultó falsa. Lo que si se mejora con la inyección por el fondo es la distribución de burbujas dentro del líquido. Aunque la técnica de inyección sí es significativa combinada con la velocidad angular del rotor, mejorándose la eficiencia del gas y la cinética de desgasificación a bajas revoluciones del rotor.

Se analizaron los efectos de variables de proceso como las revoluciones por minuto del rotor y el flujo de gas de purga sobre la hidrodinámica del sistema bifásico (agua-burbujas) y la cinética de desgasificación, encontrando las siguientes conclusiones:

- Efecto de las revoluciones por minuto: Un aumento en esta variable incrementa el tamaño del vórtice, disminuye el tamaño de las burbujas y mejora la distribución de estas en la olla, aumenta la agitación del líquido, mejora la cinética de desgasificado hasta valores máximos de $k=5 \times 10^{-3}$, y también mejora la eficiencia del gas de purga en el desgasificado. Esta variable es la más significativa en la cinética de desgasificado. Aumentar las RPM del rotor es asociada a una mayor energía mecánica que se disipa en romper las burbujas en menor tamaño creando mayor superficie interfacial burbuja-líquido. Además, el momentum angular y radial debido al efecto de bombeo del rotor imparten a las burbujas momentos angulares y radiales

que las distribuyen mejor en la olla. Estas burbujas finas, que se arrastran fácilmente por el líquido que posee momento angular tienen mayor tiempo de residencia y mayor superficie por unidad de volumen de gas inyectado, lo que explica la mejora sustancial en la cinética de desgasificado y eficiencia en el uso del gas.

- Efecto del flujo de gas: Un aumento en el flujo de gas disminuye el tamaño del vórtice, aumenta la fracción de gas en el sistema bifásico y mejora la cinética de desgasificado con valores máximos de $k = 1.978 \times 10^{-3}$. Esta variable es la segunda variable estadísticamente significativa en la cinética de desgasificado. Al haber mayor fracción de gas se mejora la cinética de desgasificación ya que hay más sitios de intercambio de masa, aunque no necesariamente se mejore la eficiencia del gas de purga.
- Efecto combinado de la técnica de inyección y las revoluciones del rotor: El efecto que tiene la técnica de inyección depende de las revoluciones por minuto del rotor. Solo a bajas RPM la técnica novedosa de inyección por el fondo tiene un efecto positivo en la cinética de desgasificado, mejorando la k hasta en un 10.52% y la eficiencia del gas en un 11.55% para flujo alto de gas de purga. Sin embargo a altas RPM el efecto que tiene es incluso negativo disminuyendo la k hasta 2.39% para flujos altos de gas. No obstante, la técnica propuesta es atractiva desde el punto de vista económico, debido a que la implementación del nuevo diseño de inyección evitaría tener las fugas de gas presentes en el sistema de inyección convencional, además de que la sencillez del nuevo diseño se traduce en equipos de desgasificado más económicos.
- Efecto combinado de las revoluciones por minuto y el flujo de gas: El efecto de aumentar las RPM a flujo bajo de gas incrementa el coeficiente de transporte de masa k , hasta en 3.77×10^{-3} , y al aumentarlo teniendo flujo alto de gas el incremento en la k es de hasta 5×10^{-3} . La mejora en el coeficiente de transporte es 1.6 veces mayor a flujo alto que a flujo bajo.

Modelado Matemático

- El efecto que tiene el giro del rotor combinado con el flujo de gases de generar patrones de recirculación en el plano r-z, por arriba del rotor en sentido contrario a las manecillas del reloj y por abajo en sentido de las manecillas del reloj, sin embargo el movimiento predominante en el baño es en sentido angular generado por el transporte de momentum desde el rotor.
- El grado de turbulencia en las dos técnicas de inyección de gas es muy similar, por lo tanto no hay influencia de la técnica en esta característica del fluido y entonces el grado de agitación es similar con ambas técnicas de inyección.
- La representación matemática de la hidrodinámica del proceso de desgasificado es bastante buena, la formación del vórtice simulado es muy parecido al generado bajo condiciones reales vistas en el modelado físico. Sin embargo no se logró obtener una buena representación de la cinética de desgasificado, aunque estos resultados preliminares pueden indicar tendencias y así de terminar una dirección prometedora para futuros modelos.

Referencias:

- [1] Frank King, El aluminio y sus aleaciones. 1ª Edición 1992. Ed. Limusa.
- [2] International Aluminium Institute.
<http://www.world-aluminium.org>, Noviembre 2009.
- [3] Opie, W.R. and N.J. Grant. “*Hydrogen Solubility in Aluminum and Some Aluminum Alloys*”, Trans. AIME, 188, (1950) pp. 1273-41.
- [4] J. E Gruzleski and B.M. Closset (1990) The Treatment of Liquid Aluminium-Silicon Alloys
- [5] Fang, Q.T. and D.A. Gragner. “*Porosity Formation in Modified and Unmodified A356 Alloys Casting*” AFS Transactions, 97 (1989) pp. 989-1000.
- [6] Hanbing Xua, “*Degassing of Molten Aluminium A356 using ultrasonic vibration*” Materials Letters, (2004), 3669-3673.
- [7] David E. Neff, “*Understanding Aluminum Degassing*” Modern Casting (2002), pp. 24.
- [8] Hanbing Xua,b, Qingyou Hanb, Thomas T. Meeka. “*Effects of ultrasonic vibration on degassing of aluminum alloys*” Materials Science and Engineering A 473 (2008) 96–104.
- [9] J.F. Grandfield, D. W. Irwin “*Mathematical and Physical Modelling of Melt Treatment Processes*” Light Metals 1990, p.p. 737-746.
- [10] F. Boeuf, M. Rey and E. Wuilloud “*Metal Batch Treatment Optimisation of Rotor Running Conditions*” Light Metals 1993, p.p. 927-932.
- [11] M. Ramirez Argáez, F. Contreras and C. González: “*On the Fluid Flow and Mixing Phenomena in Ladles Equipped with Impeller and Gas Purging for Degassing of Al-Based Alloys*” Materials Science Forum Vol. 560 (2007) pp. 145-150.
- [12] M. Maniruzzaman and M. Makhlof: “*Mathematical Modeling and Computer Simulation of the Rotating Impeller Particle Flotation Process*” Metall. Trans. B. Vol. 33 (2002), pp. 297-303.
- [13] V.S. Warke, G. Tryggvason, M.M. Makhlof, “*Mathematical modeling and computer simulation of molten metal cleansing by the rotating impeller degasser*” Journal of Materials Processing Technology 168 (2005) 112–118

- [14] V.S. Warke, S. Shankar, M.M. Makhlof, “*Mathematical modeling and computer simulation of molten aluminum cleansing by the rotating impeller degasser Part II. Removal of hydrogen gas and solid particles*” *Journal of Materials Processing Technology* 168 (2005) 119–126
- [15] A T Dinsdale and P N Qusted, NPL Materials Centre, National Physical Laboratory, Teddington, UK TW11 0LW
- [16] <http://encyclopedia.airliquide.com/encyclopedia>, Noviembre 2009.
- [17] Robles Flores Ivan, *Modelado físico de la fluidinámica durante la desgasificación de Al por la técnica del rotor-inyector*, Tesis de Licenciatura, UNAM, Facultad de Química, México 2009.
- [18] PHOENICS On-Line Information System (POLIS) PHOENICS 3.4. CHAM Company. 2000.
- [19] B.E.Launder and D.B.Spalding, '*The numerical computation of turbulent flows*', *Comp. Meth. in Appl. Mech. & Eng.*, Vol.3, pp269, (1974).
- [20] S.C. Korla, “*Mass Transfer Between solid and liquid in a gas-stirred vessel*” *Steel Res.*,1988, Vol. 59, pp 484-91
- [21] Hines, Anthony. “*Mass Transfer*” Ed. Prentice-Hall (1985) pp. 194.
- [22] Dudley, J. “*Mass Transfer in bubble columns: A comparison of Correlations*” *Wat. Res.* Vol. 29 No. 4 pp. 1129-1138, 1995.
- [23] Nahra, Henry and Kamotani, “*Prediction of bubble diameter at detachment from a wall orifice in liquid cross-flow under reduced and normal gravity conditions*” *J. Chemical Engineering Science* 58(2003) 55-69.
- [24] Desmond Tromans, *Hidrometallurgy*, 48 (1998) 327-342
- [25] Wilke, C.R., and P. Chang. “*Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions*” 1955. *A.E.C.H.E. Journal* 1: 264-270
- [26] G. Box. *Estadística Para Investigadores*. 1ª Edición, 1999. Ed. Reverté. pp. 317-335.

Apéndice

Archivo Q1

TALK=F;RUN(1, 1)

GROUP 1. Run title
TEXT(RPM+_Q+_CONV_MASA)
TITLE

REAL(DENLIQ,DENGAS,VELGAS,PI,QGAS,RBOQUI)
REAL(EPIN,TEKIN,DP,DIFTE1,DIFTE2,ENULAR)
REAL(HTOR,RTOR,HOLLA,HCONO,RUP,RDOWN,H1EJE)
REAL(H2EJE,R1EJE,R2EJE,HSUPLI)
REAL(VELTO1,VELTO2,VELTO3,VELTO4,VELTO5,VE
LTO6)
REAL(RADIO,AREBOQ)
HTOR=.073;RTOR=.0835;HOLLA=.63;HCONO=.24
RUP=.25;RDOWN=.25;HSUPLI=.503
H1EJE=.1305;H2EJE=.2035
R1EJE=.25;R2EJE=.25

PI=3.1415926535898
RADIO=.0065
AREBOQ=PI*RADIO**2
BOOLEAN(RESTT)
RESTT=f
NAMFI=news
DP=.005
DENLIQ=1000
DENGAS=1.18
QGAS=6.666666666667E-4
VELGAS=QGAS/(AREBOQ)
VELTO1=0.501036904;VELTO2=1.503110713;VELT
O3=2.505184521788
VELTO4=3.5072583305;VELTO5=4.5093321392199

GROUP 2. Transience; time-step
specification
STEADY=F
GRDPWR(T,540,180,1.0)

Groups 3 X-direction grid
specification

NX=10
NY=15
NZ=48
BFC=T
NONORT=T

***BLOQUE1

GSET(P,A,0.0,0.0,0.0)
GSET(P,B,0.0,RTOR,0.0)
GSET(P,BB,0.0,RTOR,H1EJE)
GSET(P,CC,0.0,RTOR,H2EJE)
GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO)
GSET(P,D,0.0,0.0,HCONO)
GSET(P,DD,0.0,0.0,H2EJE)
GSET(P,AA,0.0,0.0,H1EJE)
GSET(L,L1,A,B,5,1.0)
GSET(L,L2,B,BB,12,1.0)
GSET(L,L3,BB,CC,5,1.0)
GSET(L,L4,CC,C,3,1.0)
GSET(L,L5,C,D,5,1.0)
GSET(L,L6,D,DD,3,1.0)
GSET(L,L7,DD,AA,5,1.0)

GSET(L,L8,AA,A,12,1.0)

GSET(F,F1,A,-,B,BB,CC,C,-,D,DD,AA)
GSET(M,F1,+J+K,1,1,1)
***BLOQUE 2
GSET(I)

GSET(P,B,0.0,RTOR,0.0)
GSET(P,E,0.0,RDOWN,0.0)
GSET(P,EE,0.0,R1EJE,H1EJE)
GSET(P,FF,0.0,R2EJE,H2EJE)
GSET(P,F,0.0,RUP,HCONO)
GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO)
GSET(P,CC,0.0,RTOR,H2EJE)
GSET(P,BB,0.0,RTOR,H1EJE)

GSET(L,L9,B,E,10,1.2)
GSET(L,L10,E,EE,12,1.0)
GSET(L,L11,EE,FF,5,1.0)
GSET(L,L12,FF,F,3,1.0)
GSET(L,L13,F,C,10,-1.2)
GSET(L,L14,C,CC,3,1.0)
GSET(L,L15,CC,BB,5,1.0)
GSET(L,L16,BB,B,12,1.0)
GSET(F,F2,B,-,E,EE,FF,F,-,C,CC,BB)
GSET(M,F2,+J+K,1,6,1)

***BLOQUE3

GSET(I)
GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO)
GSET(P,F,0.0,RUP,HCONO)
GSET(P,GG,0.0,RUP,HSUPLI)
GSET(P,G,0.0,RUP,HOLLA)
GSET(P,H,0.0,RTOR,HOLLA)
GSET(P,HH,0.0,RTOR,HSUPLI)

GSET(L,L17,C,F,10,1.2)
GSET(L,L18,F,GG,18,1.0)
GSET(L,L19,GG,G,10,1.0)
GSET(L,L20,G,H,10,-1.2)
GSET(L,L21,H,HH,10,1.0)
GSET(L,L22,HH,C,18,1.0)

GSET(F,F3,C,-,F,GG,G,-,H,HH)
GSET(M,F3,+J+K,1,6,21)

***BLOQUE4

GSET(I)
GSET(P,D,0.0,0.0,HCONO)
GSET(P,C,0.0,RTOR,HCONO)
GSET(P,HH,0.0,RTOR,HSUPLI)
GSET(P,H,0.0,RTOR,HOLLA)
GSET(P,I,0.0,0.0,HOLLA)
GSET(P,II,0.0,0.0,HSUPLI)

GSET(L,L23,D,C,5,1.0)
GSET(L,L24,C,HH,18,1.0)
GSET(L,L25,HH,H,10,1.0)
GSET(L,L26,H,I,5,1.0)
GSET(L,L27,I,II,10,1.0)
GSET(L,L28,II,D,18,1.0)

```

GSET(F,F4,D,-,C,HH,H,-,I,II)
GSET(M,F4,+J+K,1,1,21)

GSET(T,K13,F,K1,1,1,1,NY,-1.1)

GSET(C,INX+1,F,I1,RZ,PI/2,0,0,INC,1)
  GSET(B,1,NX,1,NY,1,NZ,LAP10)

  Grupo 6.

XCYZ(1,NZ,T)

  Group 7. Variables: STOREd,SOLVEd,NAMED

ONEPHS=F
SOLVE(P1,U1,V1,W1,U2,V2,W2,R1,R2)
SOLUTN(P1,Y,Y,N,N,N,Y)
SOLUTN(U1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(V1,Y,Y,Y,N,N,Y)
SOLUTN(W1,Y,Y,Y,N,N,Y)
TURMOD(KEMODL)
SOLVE(H1,H2)
STORE(CFIPS,ENUT,REYN,VREL,CD,APRJ,WEB,T1,
T2)
STORE(PRPS,CP1,CP2)

  Group 8. Terms & Devices
scheme(supbee,r1,r2,u1,u2,v1,v2,w1,w2)
TERMS(R1,N,Y,Y,Y,N)
TERMS(R2,N,Y,Y,Y,N)
TERMS(H1,N,Y,Y,Y,Y)
TERMS(H2,N,Y,Y,Y,N)

  Group 9. Properties

RHO1=DENLIQ
RHO2=DENGAS
ENUL=1.0E-6
PRT(U2)=1.E+10;PRT(W2)=1.E+10;PRT(V2)=1.E+
10
PRNDTL(U2)=71.05;PRNDTL(V2)=71.05;PRNDTL(W
2)=71.05

  $$$$$$VALORES
PRNDTL(H1)=0.6853;PRNDTL(H2)=3.377e-2
CFIPS=GRND2
CFIPC=0.914
CFIPA=0.0
CP1=1.0
CP2=1.0
CINT(H2)=GRND
CINT(H1)=GRND
  CFIPB=Dp
PHINT(H1)=GRND
PHINT(H2)=GRND

  Group 11. Initialise Var/Porosity
Fields
PATCH(EJE,INIVAL,1,NX,1,2,18,NZ,1,1)
INIT(EJE,PRPS,0.,1.150000E+02)

PATCH(TORTA,INIVAL,1,nx,1,5,16,17,1,1)
INIT(TORTA,PRPS,0.,1.150000E+02)

PATCH(TORTA1,INIVAL,1,nx,4,5,13,14,1,1)
INIT(TORTA1,PRPS,0.,1.150000E+02)

PATCH(TORTA2,INIVAL,1,1,5,5,15,15,1,1)
INIT(TORTA2,PRPS,0.,1.150000E+02)

GSET(T,K21,F,K18,1,1,1,NY,1.1)
GSET(T,K39,F,K21,1,1,1,NY,1.1)
GSET(T,KNZ+1,F,K39,1,1,1,NY,1.1)

PATCH(TORTA3,INIVAL,9,10,5,5,15,15,1,1)
INIT(TORTA3,PRPS,0.,1.150000E+02)

PATCH(TORTA4,INIVAL,1,5,4,4,15,15,1,1)
INIT(TORTA4,PRPS,0.,1.150000E+02)

PATCH(TORTA5,INIVAL,9,10,4,4,15,15,1,1)
INIT(TORTA5,PRPS,0.,1.150000E+02)

IF(RESTT) THEN
INIADD=F
FIINIT(P1)=READFI
FIINIT(U1)=READFI
FIINIT(V1)=READFI
FIINIT(W1)=READFI
FIINIT(U2)=READFI
FIINIT(V2)=READFI
FIINIT(W2)=READFI
FIINIT(R1)=READFI
FIINIT(R2)=READFI
FIINIT(KE)=READFI
FIINIT(EP)=READFI
FIINIT(CFIPS)=READFI
FIINIT(H1)=CP1*2.7E-5
FIINIT(H2)=CP2*0.0

ELSE
INIADD=F
FIINIT(KE)=0.05
FIINIT(EP)=0.1
FIINIT(P1)=0.0
FIINIT(U1)=0.0
FIINIT(V1)=0.0
FIINIT(W1)=0.0

PATCH(GAS,INIVAL,1,NX,1,NY,1,38,1,1)
INIT(GAS,R2,0.0,0.0)
INIT(GAS,R1,0.0,1.0)

PATCH(GASS,INIVAL,1,NX,1,NY,39,NZ,1,1)
INIT(GASS,R2,0.0,1.0)
INIT(GASS,R1,0.0,0.0)

ENDIF

  GROUP 13. Boundary & special sources

  ***CF DE LA TORTA

PATCH(BUGER,VOLUME,1,nx,5,5,13,15,1,LSTEP)
COVAL(BUGER,U1,FIXVAL,VELTO5)

PATCH(BUG,VOLUME,1,nx,4,4,13,15,1,LSTEP)
COVAL(BUG,U1,FIXVAL,VELTO4)

PATCH(BUGER1,VOLUME,1,NX,1,1,16,17,1,LSTEP)
COVAL(BUGER1,U1,FIXVAL,VELTO1)

PATCH(BUGER2,VOLUME,1,NX,2,2,16,17,1,LSTEP)
COVAL(BUGER2,U1,FIXVAL,VELTO1)

```

```

COVAL(BUGER2,U1 ,FIXVAL, VELTO2)

PATCH(BUGER3,VOLUME,1,NX,3,3,16,17,1,LSTEP
)
COVAL(BUGER3,U1 ,FIXVAL, VELTO3)

PATCH(BUGER4,VOLUME,1,NX,4,4,16,17,1,LSTEP
)
PATCH(AXE1,VOLUME,1,NX,1,1,18,NZ,1,LSTEP)
COVAL(AXE1,U1 ,FIXVAL,VELTO1)

PATCH(AXE2,VOLUME,1,NX,2,2,18,NZ,1,LSTEP)
COVAL(AXE2,U1 ,FIXVAL,VELTO2)

```

**** FRONTERAS PAREDES

```

WALL(PARED,NORTH,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,LSTEP)
WALL(FONDO,LOW,1,NX,1,NY,1,1,1,LSTEP)

```

***** GRAVEDAD Y BUOYANCY

```

PATCH(GRAVITY,PHASEM,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTE
P)
COVAL(GRAVITY,W1 ,FIXFLU,-9.81)
COVAL(GRAVITY,W2 ,FIXFLU,-9.81)

```

**** ENTRADAS DE GAS

```

INLET(ENTGAS1,NORTH,5,6,4,4,15,15,1,LSTEP)
VALUE(ENTGAS1,P2,VELGAS*RHO2)
VALUE(ENTGAS1,V2,VELGAS)
VALUE(ENTGAS1,U2,VELTO4)

```

```

VALUE(ENTGAS1,H2,CP2*0.0)

```

```

COVAL(SUPERF,H2,ONLYMS,SAME)

```

```

PATCH(SUPERF,HIGH,1,NX,1,NY,NZ,NZ,1,LSTEP)
COVAL(SUPERF,P2,FXIP,0.0)
COVAL(SUPERF,W2,ONLYMS,0.0)
COVAL(SUPERF,V2,ONLYMS,0.0)
COVAL(SUPERF,U2,ONLYMS,0.0)
COVAL(SUPERF,W1 ,FIXVAL,0.0)
COVAL(SUPERF,V1 ,ONLYMS,0.0)
COVAL(SUPERF,KE,ONLYMS,0.0)
COVAL(SUPERF,EP,ONLYMS,0.0)

```

***** EXTRA SOURCES FOR TURBULENCE

```

PATCH(KEDI,CELL,1,NX,1,NY,1,NZ,1,LSTEP)
EL1A=0.05
COVAL(KEDI,EP, FIXFLU,GRND3)
COVAL(KEDI,KE, FIXFLU,GRND3)

```

GROUP 15. Termination of sweeps

```

LSWEEP=100
LITHYD=10
IDISPA=30
CSG1=H

```

Group 17. Relaxation

```

RELAX(P1,LINRLX,0.05)
RELAX(V1,FALSDT,0.0001)
RELAX(W1,FALSDT,0.0001)
RELAX(U1,FALSDT,0.0001)

```

```

COVAL(BUGER4,U1 ,FIXVAL, VELTO4)

PATCH(BUGER5,VOLUME,1,NX,5,5,16,17,1,LSTEP
)
COVAL(BUGER5,U1 ,FIXVAL, VELTO5)

```

***CF DEL EJE

```

RELAX(KE,linrlx,0.01)
RELAX(EP,linrlx,0.01)
RELAX(V2,FALSDT,0.00001)
RELAX(W2,FALSDT,0.00001)
RELAX(U2,FALSDT,0.00001)
RELAX(R1,LINRLX,0.05)
RELAX(R2,LINRLX,0.05)
RELAX(H1,LINRLX,0.4)
RELAX(H2,LINRLX,0.4)

```

Group 21. Print-out of Variables

```

OUTPUT(P1 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(U1 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(U2 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(V1 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(V2 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(W1 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(W2 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(R1 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(R2 ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(KE ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(EP ,Y,N,Y,Y,Y,Y)
OUTPUT(W2CM,N,N,Y,Y,N,N)
OUTPUT(WCMP,N,N,Y,Y,N,N)
OUTPUT(V2CM,N,N,Y,Y,N,N)
OUTPUT(VCMP,N,N,Y,Y,N,N)
OUTPUT(U2CM,N,N,Y,Y,N,N)
OUTPUT(UCMP,N,N,Y,Y,N,N)
OUTPUT(PRPS,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(WEB ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(APRJ ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(CD ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(VREL,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(REYN,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(ENUT ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(CFIP ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(W2CR ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(V2CR ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(U2CR ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(WCRT ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(VCRT ,Y,N,Y,N,N,N)
OUTPUT(UCRT ,Y,N,Y,N,N,N)

```

Group 23.Field Print-Out & Plot Control

```

NPRINT= LSWEEP ;NUMCLS = 5
NTPRIN= 20 ;ISTPRF = 1 ;ISTPRL=10000
NXPRIN= 2 ;IXPRF = 1 ;IXPRL = NX
NYPRIN= 2 ;IYPRF = 1 ;IYPRL = NY
NZPRIN= 5 ;IZPRF = 1 ;IZPRL = NZ

```

Group 24. Dumps For Restarts

```

IXMON=5
IYMON=6
IZMON=17
TSTSWP=-1
STOP

```