



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

**“MODELADO FÍSICO Y MATEMÁTICO DE INTERCAMBIOS METAL/ESCORIA EN OLLAS
DE ACERO AGITADAS CON GAS”**

TESIS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA:

ING. EN MATLES. JUAN ANTONIO LÓPEZ GUTIÉRREZ

TUTOR PRINCIPAL

DR. MARCO AURELIO RAMÍREZ ARGÁEZ, FACULTAD DE QUÍMICA UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTORAL

DR. CARLOS GONZÁLEZ RIVERA, FACULTAD DE QUÍMICA UNAM

**DR JOSÉ ROBERTO ZENIT CAMACHO, INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN
MATERIALES UNAM**

MÉXICO, D.F.

ENERO, 2016



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.

Dedicatoria

A Dios.

Por haberme permitido llegar hasta este punto y brindarme salud para lograr cada uno de mis objetivos.

A mis padres.

A mi papá José Jaime y a mi mamá Lucila quienes son mi mas grande orgullo. Por haberme apoyado incondicionalmente en todo momento, por sus consejos y valores transmitidos que me han permitido ser una persona de bien, pero más que nada por su amor.

A mis hermanos

A Jaime, Karina, Dulce y César, que sin duda mi vida sin ellos no sería vida. Siempre estarán presentes en mi vida.

Agradecimientos

Proyecto PAPIIT Clave: I114815 "Análisis del mezclado metal/escoria en ollas agitadas con gas mediante modelación asistida por PIV (Particle Image Velocimetry)"

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por la beca otorgada para la maestría en el Posgrado de Ciencia e Ingeniería de Materiales (PCeIM) con CVU 555449.

A la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) máxima casa de estudios por haber permitido mis estudios de maestría. Particularmente al Instituto de Investigaciones en Materiales y a la Facultad de Química.

El presente trabajo de investigación fue realizado bajo la dirección del Dr. Marco Aurelio Ramírez Argáez, a quien me gustaría expresar mi más profundo agradecimiento, por todo su apoyo brindado, su paciencia, tiempo y dedicación que tuvo para que el trabajo saliera adelante. Sin olvidar sus consejos y regaños que me han encaminado a ser una mejor persona.

Al Dr. Carlos González Rivera y al Dr. José Roberto Zenit Camacho, quienes formaron parte de mi comité tutor durante los estudios de maestría.

A mis compañeros de Ingeniería de Procesos de la Facultad de Química, Alfredo Delgado, Marco Romero, Wiener Cruz, Enrique Jardón, Diego González y Diego Abreu, quienes me apoyaron con sus conocimientos y consejos durante el desarrollo de la tesis.

A Susana quien siempre me ha animado en los momentos más complicados durante el desarrollo de la tesis.

A mis compañeros del PCeIM Alejandro Báez, Héctor Martínez, Juan Carlos y Ricardo Pérez, gracias por su valiosa amistad.

A mi familia Torres Rodríguez quienes me abrieron las puertas de su casa, con su hospitalidad y apoyo me han hecho sentir como en casa, resultándome más fácil mi estadía lejos de mi casa durante esta etapa de mi vida.

Al técnico académico Canseco Martínez Miguel Ángel del IIM-UNAM por su apoyo en el análisis de las muestras en el equipo UV-Visible.

A la Dra. Nayeli Rodríguez Fuentes, Laboratorio de Biomateriales, IIM-UNAM por su asesoría en el análisis de los resultados de las muestras en el equipo UV-Visible.

Al Dr. Adrián Manuel Amaro Villeda de la Facultad de Química – UNAM por su apoyo técnico en el desarrollo y preparación del modelo físico.

Índice de contenido

1.	Introducción	7
1.1.	Procesos de fabricación de acero.....	7
1.2.	Proceso de refinación secundaria	8
1.2.1.	Desoxidación	8
1.2.2.	Desulfuración	8
1.2.3.	Defosforación	8
1.2.4.	Adición de aleaciones.....	8
1.2.5.	Eliminación o modificación de inclusiones no metálicas	9
1.3.	Desgasificado.....	9
1.4.	Horno Olla	10
1.5.	Capacidad de Sulfuro	11
1.6.	Revisión de la literatura en el modelado físico y matemático de ollas agitadas con gas. 12	
1.6.1.	Modelado físico del Horno Olla.....	12
1.6.2.	Modelado matemático del Horno Olla.....	18
1.7.	Planteamiento del problema	20
1.8.	Justificación	20
1.9.	Hipótesis.....	20
1.10.	Objetivo.....	21
1.10.1.	Objetivos particulares	21
2.	Metodología	22
2.1.	Modelo Físico	22
2.1.1.	Similitud Geométrica.....	22
2.1.2.	Similitud Dinámica.....	23
2.1.3.	Similitud Cinemática.....	25
2.2.	Velocimetría de imágenes de partículas (PIV)	25
2.3.	Arreglo experimental	26
2.4.	Metodología para uso del equipo PIV.....	27
2.4.1.	Calibración.....	27
2.4.2.	Procedimiento con software del PIV.....	27
2.5.	Propiedades físicas.....	30

2.6.	Diseño experimental de transferencia de masa	30
2.7.	Modelo Numérico	32
2.7.1.	Suposiciones.....	34
2.7.2.	Ecuaciones Gobernantes.....	35
2.7.2.1.	Ecuación de fracción de volumen	35
2.7.2.2.	Ecuación de conservación de masa.....	35
2.7.2.3.	Ecuación de conservación de momentum	36
2.7.2.4.	Ecuación de transporte de especies.....	36
2.7.2.5.	Ecuaciones de transporte para el modelo de turbulencia estándar $k - \epsilon$ (Modelo de dispersión turbulenta).....	37
2.8.	Condiciones iniciales y de frontera	38
2.8.1.	Condiciones de Frontera	38
2.8.2.	Condiciones Iniciales para el cálculo de fluidodinámica y turbulencia	39
2.8.3.	Condiciones iniciales para el cálculo de transferencia de masa	39
2.9.	Solución numérica.....	40
3.	Resultados y Discusión	41
3.1.	Patrones de Flujo.....	41
3.2.	Perfiles de velocidad	43
3.2.1.	Perfiles de velocidad Axial.....	43
3.2.2.	Perfiles de Velocidad Radial	45
3.3.	Contornos de velocidad	48
3.4.	Contornos de energía cinética turbulenta	49
3.5.	Curvas de transferencia de masa	51
3.6.	Análisis del proceso.....	52
4.	Conclusiones.....	55
	Trabajo Futuro.....	55
5.	Referencias Bibliográficas	56
	ANEXO I Tabla de Unidades.....	63
	ANEXO II Constancia de participación en el XXIV International Materials Research Congress (IMRC) 2015.....	65
	ANEXO III Carta de aceptación del artículo presentado en el IMRC 2015.	66
	ANEXO IV Pasos para la solución numérica utilizando ANSYS Fluent 14.5.	67
1.	Solution Setup	67
1.1.	General.....	67
1.2.	Models.....	67

1.3.	Materials	68
1.4.	Phases.....	69
1.5.	Boundary Conditions.....	69
2.	Solution	70
2.1.	Solution Methods.....	70
2.2.	Solution Initialization.....	70
2.3.	Run Calculation.....	71

Índice de Figuras

Figura 1 Esquema del proceso de fabricación de acero.(1)	7
Figura 2 Esquemas de diferentes técnicas de desgasificado.(7)	9
Figura 3 Esquema de un horno olla.(6)	11
Figura 4 Regiones de la fase gas-líquido.(18)	13
Figura 5 Velocidades axiales de la fase gas y líquido a lo largo del eje axial. (32)	14
Figura 6 Esquema de la fluidodinámica en una olla agitada con gas por el centro en presencia de escoria.(17).....	14
Figura 7 Esquema de la interacción metal escoria en una olla agitada con gas. (36).....	15
Figura 8 Gráfica de la energía cinética total contenida en el líquido vs energía de entrada referenciada para unidades de masa del líquido, y varias condiciones de fase superior de escoria (sin escoria, sólido y fluido). (33)	15
Figura 9 Relación entre la constante de transferencia de masa k_A y el flujo de gas.(54)	17
Figura 10 Esquema del Horno Olla utilizado en Tenaris TAMSA.....	23
Figura 11 Esquema del funcionamiento de la técnica PIV.(88).....	25
Figura 12 Arreglo experimental utilizando la técnica de PIV. Los nombres de los componentes se enlistan en la Tabla 7.	26
Figura 13 Calibración del sistema.....	27
Figura 14 Fluido sembrado con partículas trazadoras.	28
Figura 15 Vista 45 grados - Plano de interés.....	28
Figura 16 Mapa vectorial resultante después del procesamiento estadístico en el <i>software Dynamic Studio</i>	29
Figura 17 Sistema bifásico a), Sistema trifásico b.1) y b.2) capa de aceite al inicio de la inyección y emulsificación de la capa de aceite una vez desarrollado el flujo respectivamente.	29
Figura 18 Vista desde el fondo del modelo físico. Inyección de aire y toma de muestras A y B respectivamente.	30
Figura 19 Espectrofotómetro UV-Vis utilizado para determinar la concentración de cada muestra.	31
Figura 20 Curva de calibración - Absorbancia vs Concentración Timol (mg/L).....	31
Figura 21 Patrones de flujo de simulación numérica en Fluent 14.5. Modelo a) VOF, b) Mixture, c) Eulerian.....	32
Figura 22 Resultados de los modelos del "Coeficiente de Arrastre" mediante simulación numérica en Fluent 14.5. a) <i>Schiller-Naumann</i> , b) <i>Morsi Alexander</i> , c) <i>Symmetric</i> , d) <i>Universal Drag</i> , e) <i>Grace</i> y f) <i>Tomiyama</i>	33
Figura 23 Esquema del dominio en 2D de la olla agitada con gas, sistema bifásico a) y sistema trifásico b).	34
Figura 24 Geometría y malla de la olla agitada con gas.....	38
Figura 25 Comparación del patrón de flujo del líquido (agua) entre el experimento realizado sin capa de aceite (1 y 2) y con capa de aceite (3 y 4) medidos con PIV (imágenes de la izquierda) y CFD (imágenes de la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.	42
Figura 26 Apertura de la capa de aceite debido al escape de las burbujas de aire.....	43
Figura 27 Perfiles radiales de velocidad axial del líquido (agua) a diferentes alturas del fondo 4 cm (a) y a'), 8 cm (b) y b'), 12 cm (c) y c') y 16 cm (d) y d') sin capa de aceite (a la izquierda) y con capa de aceite (a la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.	45

Figura 28 Perfiles radiales de velocidad radial del líquido (agua) a diferentes alturas del fondo de 4 cm (a) y a'), de 8 cm (b) y b'), de 12 cm (c) y c') y de 16 cm (d) y d')) sin capa de aceite (a la izquierda) y con capa de aceite (a la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.....	47
Figura 29 Comparación de contornos de velocidad del líquido (agua) entre el experimento realizado sin capa de aceite (a y a') y con capa de aceite (b y b') obtenidos con MATLAB (imágenes de la izquierda) y CFD (imágenes de la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.	49
Figura 30 Comparación de contornos de energía cinética turbulenta del líquido (agua) entre el experimento realizado sin capa de aceite (a y a') y con capa de aceite (b y b') obtenidos con MATLAB (imágenes de la izquierda) y predichos con CFD (imágenes de la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.	50
Figura 31 Comparación de la curva de eliminación de timol de agua numérica y experimental con un flujo de 2.85 l/min. Concentración inicial de timol de 125 ppm. Tiempo de eliminación es de 150 min.	52
Figura 32 Gráfica de barras que muestra la velocidad promedio obtenida contra cada una de las variables del diseño experimental.	53
Figura 33 Efectos medios de los factores e interacciones en la velocidad promedio del agua..	54
Figura 34 Opciones seleccionadas en el menú <i>General</i>	67
Figura 35 Menú <i>Multiphase Model</i>	68
Figura 36 Menú <i>Viscous Model</i>	68
Figura 37 Menú <i>Species Model</i>	68
Figura 38 Ventana para crear o editar materiales.	68
Figura 39 Materiales utilizados en el sistema.	68
Figura 40 Ventana <i>Phases</i>	69
Figura 41 Ventana <i>Phase Interaction</i>	69
Figura 42 Menú <i>Boundary Conditions</i>	69
Figura 43 Ventana <i>Velocity Inlet</i>	69
Figura 44 Ventana <i>Solution Methods</i>	70
Figura 45 Ventana <i>Solution Initialization</i>	70
Figura 46 Ventana <i>Adaption Regions</i>	71
Figura 47 Ventana <i>Run Calculation</i>	71

Índice de Tablas

Tabla 1 Sistemas trifásicos de estudios de modelos físicos utilizados para el estudio de transferencia de masa en diferentes reactores metalúrgicos.	16
Tabla 2 Medidas reales de un Horno Olla utilizado en TENARIS TAMSA.	22
Tabla 3 Dimensiones del modelo físico.	23
Tabla 4 Fuerzas relevantes en el movimiento del fluido.(6)	24
Tabla 5 Grupos adimensionales importantes en el modelo físico.(6).....	24
Tabla 6 Similitud cinemática entre el acero y el agua.....	25
Tabla 7 Nombre de los componentes utilizados en el arreglo experimental.	26
Tabla 8 Propiedades físicas de las partículas trazadoras utilizadas.	27
Tabla 9 Secuencia de análisis de la técnica PIV.....	28
Tabla 10 Propiedades físicas de las sustancias utilizadas.	30
Tabla 11 Dimensiones del modelo numérico.....	32
Tabla 12 Mediciones tiempo vs concentración - Transferencia de masa.	51
Tabla 13 Diseño de experimentos para el análisis del proceso.	52
Tabla 14 Análisis de varianza para el diseño experimental de la Tabla 13, midiendo el efecto de las variables de flujo de gas y capa de aceite sobre la velocidad promedio del agua.	53
Tabla 15 Tabla de unidades.....	63

1. Introducción

1.1. Procesos de fabricación de acero

En el proceso de fabricación de acero existen dos vías: la vía integrada y la vía horno de arco eléctrico (Electric Arc Furnace (EAF)). La vía integrada implica reducir carbotérmicamente mineral de hierro con fundentes (caliza) en el alto horno (Blast Furnace (BF)). Por esta vía se produce hierro líquido con alto contenido de carbono. Posteriormente se utilizará un convertidor básico al oxígeno (Basic Oxygen Furnace (BOF)) para disminuir su contenido de carbono. La vía EAF implica el uso de chatarra de acero junto con hierro metálico proveniente del proceso de reducción directa (Direct Reduction Iron (DRI)) para producir acero líquido. La Figura 1 muestra un diagrama de flujo de las vías del proceso de fabricación de acero.

El proceso de refinación secundaria en el horno olla (Ladle Furnace (LF)) es una etapa clave del proceso de fabricación de acero y es posterior a cualquiera de los dos procesos primarios EAF o BOF. Durante esta etapa se eliminan impurezas (N, O, S, C y H), se modifican inclusiones no metálicas, las cuales son nocivas para las propiedades mecánicas del acero, se realiza un ajuste de composición química mediante la adición de aleantes y se homogeniza química y térmicamente el baño de acero apoyado con la inyección de gas (Ar/N).

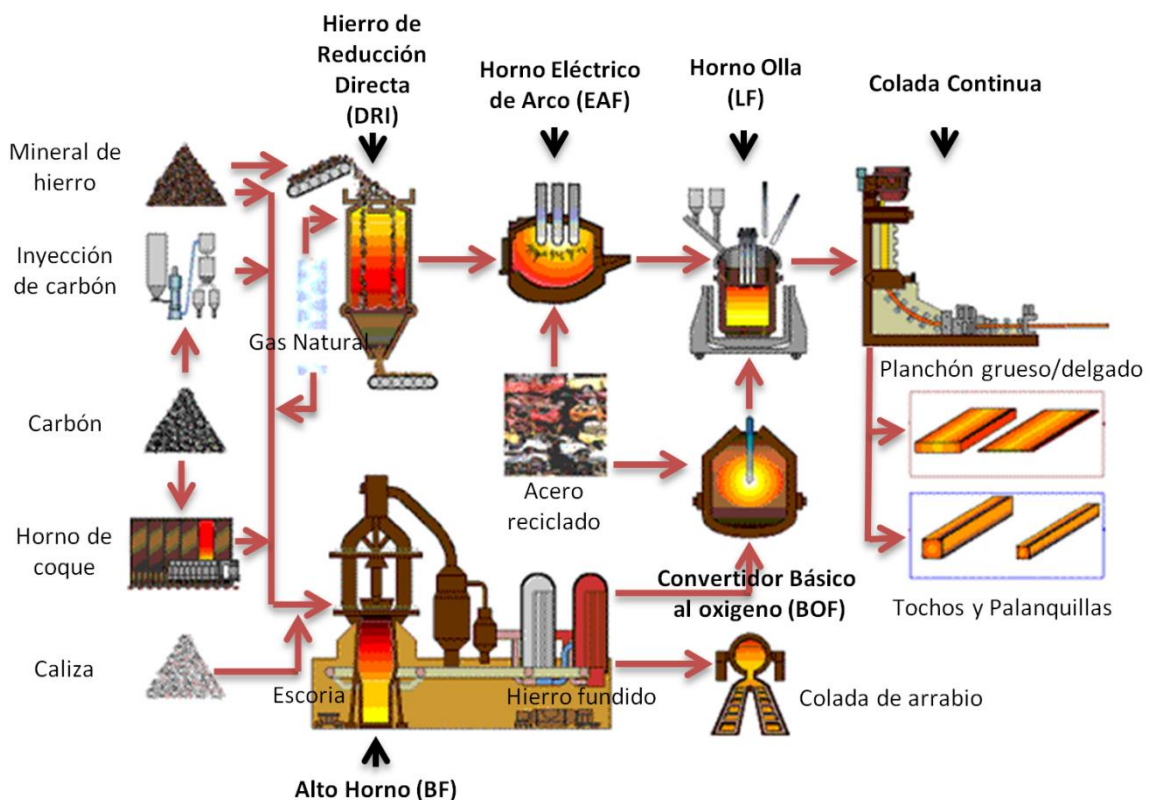


Figura 1 Esquema del proceso de fabricación de acero.(1)

1.2. Proceso de refinación secundaria

El objetivo principal de la refinación secundaria es acondicionar el acero líquido para conseguir una composición homogénea, una temperatura exacta de colada y un alto nivel de limpieza en el acero. (2)

La refinación secundaria en el horno olla (LF) comprende la siguiente secuencia de operaciones: desoxidación, desulfuración, adiciones controladas de elementos de aleación y eliminación o modificación de inclusiones. (3)

1.2.1. Desoxidación

El acero proveniente de la vía integrada o EAF tiene un alto contenido de oxígeno, generalmente en el intervalo de 200-800 ppm. (4) La desoxidación es el primer paso en la refinación secundaria del horno olla, y se utiliza ferromanganeso, ferrosilicio, silicomanganeso o aluminio, dependiendo del grado de desoxidación que se quiera alcanzar. Existen 3 grados de desoxidación en el acero (3)

- a) Aceros efervescentes (100-200 ppm de oxígeno disuelto).
- b) Aceros semicalmados (20-100 ppm de oxígeno disuelto).
- c) Aceros calmados (< 20 ppm de oxígeno disuelto).

1.2.2. Desulfuración

La desulfuración en el horno olla es posterior a la operación de desoxidación y se realiza mediante la inyección de calcio, aleaciones de calcio o en presencia de escorias sintéticas basadas en óxidos de calcio, fluoruros de calcio y alúmina. (2)

Para que la operación de desulfuración pueda tener una duración práctica, es esencial que exista una alta interacción metal escoria, además de que existan condiciones termodinámicas como alta temperatura y una alta "capacidad de sulfuro" de la escoria, esta última es la capacidad de la escoria para absorber azufre proveniente del acero líquido. Ver sección 1.5 para más detalles.

1.2.3. Defosforación

La defosforación debe ser completada en gran medida al final del proceso de fusión del acero en el proceso vía integrada o EAF (los cuales producen aceros con alto nivel de oxígeno y altos contenidos de FeO en la escoria, condición necesaria para eliminar el fósforo del acero). Al vaciar el acero de cualquiera de estas dos vías al horno olla, es crucial la retención de la escoria para evitar refosforación. (5)

1.2.4. Adición de aleaciones

La adición de aleaciones se realiza para hacer ajustes en la composición química del acero. Se pueden definir dos categorías de ferroaleaciones: Categoría I, con puntos de fusión por debajo del punto de fusión del acero líquido (Ferromanganeso, Silicomanganeso, Ferrosilicio, Ferrocromo), y Categoría II, con puntos de fusión por encima del punto de fusión del acero líquido (Molibdeno, Vanadio, Niobio, Tungsteno). Algunas técnicas para realizar la adición de

aleaciones son: la alimentación con alambre (polvo encapsulado), inyección de polvos mediante lanzas, disparos de cápsulas hacia el acero, entre otros. (3)

1.2.5. Eliminación o modificación de inclusiones no metálicas

Para eliminar o modificar las inclusiones no metálicas de sulfuros, alúminas, sílice, entre otros, se inyecta calcio en forma de CaSi y CaFe en aceros calmados con aluminio (para evitar la obstrucción de la boquilla durante las operaciones de colada continua). El resultado de este tratamiento con calcio es que las inclusiones no metálicas ya mencionadas modifiquen su tamaño, forma y condición (de estado sólido a líquido). (6)

1.3. Desgasificado

Durante la refinación secundaria se encuentra la etapa de desgasificado de hidrógeno y nitrógeno en un proceso al vacío (1 mbar o menos). Cabe mencionar que este proceso se realiza en el mismo horno olla y es posterior al tratamiento de refinación secundaria, con la finalidad de disminuir las concentraciones de estos gases en el acero líquido a niveles aceptables que no afecten el producto final. Algunas técnicas de desgasificación se muestran en la Figura 2. Existen dos diferentes técnicas de desgasificación, sin recirculación (a) y b)) y con recirculación (c) y d)).

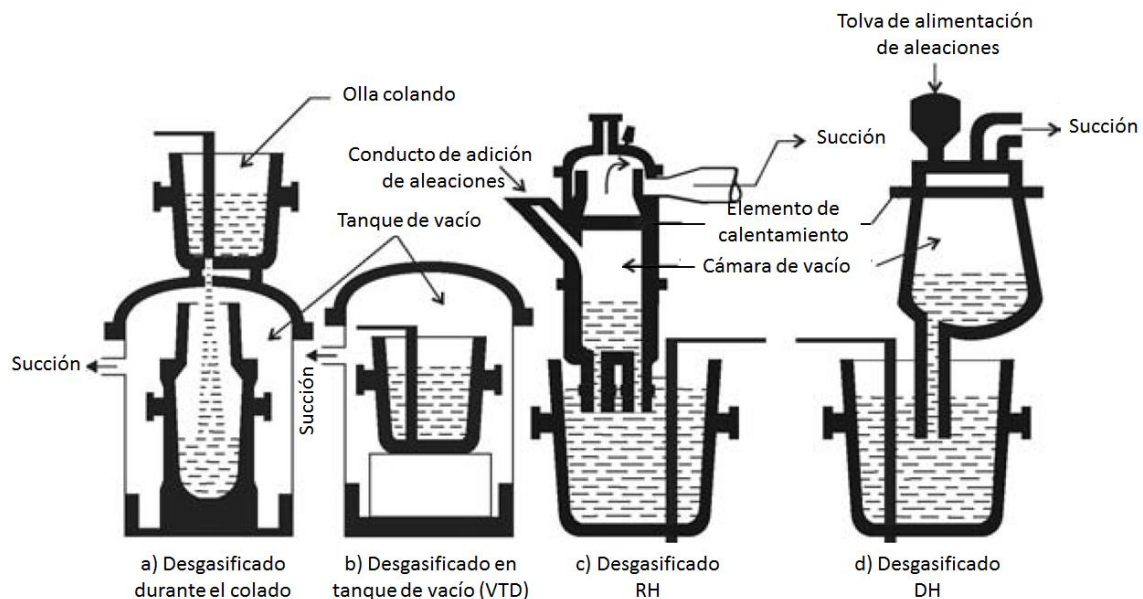


Figura 2 Esquemas de diferentes técnicas de desgasificado.(7)

A continuación se describen brevemente las técnicas de la Figura 2.

Desgasificado durante el colado.- Esta técnica se realiza colando el acero por el fondo del horno olla a una lingotera que está dentro de un tanque de vacío. El acero que cae en forma de chorro queda expuesto a la cámara de vacío y se dispersa en forma de gotas, lo que crea una mayor área de superficie entre el acero líquido y el tanque de vacío, lo que permite una rápida desgasificación.

Desgasificado en tanque de vacío (VTD).- Esta técnica utiliza un tanque hermético donde se coloca el horno olla. El tanque se conecta a un equipo de vacío que, apoyado con la inyección de gas argón, mantiene en constante circulación el acero líquido y es posible el desgasificado.

Desgasificación RH.- Esta técnica utiliza una cámara al vacío que tiene dos *snorkels* en la parte inferior de la misma. El horno olla es movido mediante un carro de transporte y se ubica debajo de la cámara de vacío (RH). La cámara de vacío baja para introducir los *snorkels* dentro del acero líquido, al introducirse en la olla, desplazan a la escoria a un lado y la parte inferior de cada *snorkel* queda en contacto sólo con el acero líquido. Debido a la diferencia de presión y gravedad, el acero sube por el primer *snorkel* y baja por el segundo, iniciando una recirculación. El acero al estar expuesto a la cámara de vacío hace posible el desgasificado.

Desgasificación DH.- Esta técnica utiliza una cámara al vacío que tiene un solo *snorkel* en la parte inferior de la misma. El horno olla es movido mediante un carro de transporte y se ubica debajo de la cámara de vacío (DH). La cámara de vacío baja y para introducir el *snorkel* dentro del acero líquido, el *snorkel* desplaza a la escoria a un lado y la parte inferior del *snorkel* queda en contacto sólo con el acero líquido, éste, por diferencia de presiones, sube de 10 al 15 % del volumen total del acero líquido, al quedar expuesto a la cámara de vacío es posible el desgasificado. La cámara, al subir por gravedad, expulsa el acero líquido al horno olla y esta operación se repite durante 10-15 minutos.

1.4.Horno Olla

El horno olla (también conocido como cuchara de acero, olla de acero, entre otros) se utiliza en la mayoría de las plantas de fabricación de acero donde todos los procesos necesarios para la refinación secundaria incluyendo el desgasificado se pueden realizar. En la Figura 3 se muestra un esquema del horno olla con sus componentes. El horno olla es un recipiente cilíndrico que consiste de una carcasa de acero y materiales refractarios. En la zona de la escoria, contiene de ladrillos de dolomita y magnesita-carbono. La zona del acero líquido consta de magnesita con diferentes porcentajes de carbono. (3)

En el horno olla, el acero puede ser recalentado eléctricamente hasta 4.5 °C por minuto, utilizando electrodos de grafito que se introducen en la olla a la altura de la escoria. (2) Este recalentamiento se realiza debido a que durante el vaciado del acero del reactor BOF o EAF al horno olla existen pérdidas de calor considerables por radiación, además de que la adición de aleaciones para ajustar la composición química y la eliminación o modificación de inclusiones son procesos endotérmicos. La capa de escoria que contiene el acero en la parte superior, sirve tanto para proteger el revestimiento refractario de un desgaste excesivo debido a la radiación del arco eléctrico, así como para retener especies químicas disueltas y sólidas indeseables en el acero líquido.

El acero líquido es agitado mediante la inyección de gas (Ar/N) por medio de tapones porosos o toberas ubicadas en el fondo de la olla, lo cual, produce un movimiento de recirculación en el acero líquido provocando homogenización de gradientes térmicos y químicos, aceleración de reacciones metal-escoria, remoción de especies gaseosas y flotación/precipitación de inclusiones no metálicas.

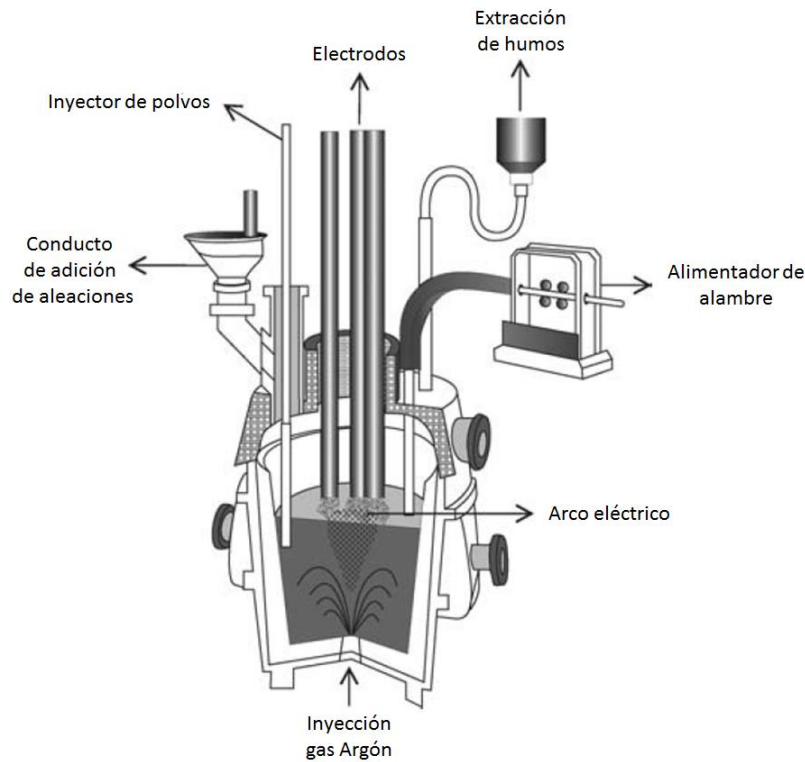


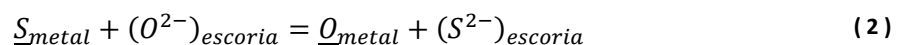
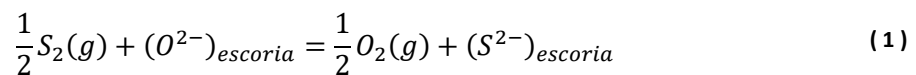
Figura 3 Esquema de un horno olla.(6)

Es importante comentar que la palabra “intercambio” en esta tesis se puede referir a intercambio de momentum, masa o energía entre las diversas fases presentes en el horno olla.

1.5.Capacidad de Sulfuro

La capacidad de sulfuro de una escoria es un parámetro químico que permite conocerla capacidad de desulfuración de diferentes escorias. Si se llega a determinar esta capacidad de sulfuro, se puede realizar una medición cuantitativa de la desulfuración. Además, se podría diseñar una escoria con una composición apropiada para alcanzar un grado de desulfuración óptimo. (8)

En la fabricación de acero, cuando se realiza la refinación de Azufre, se tienen 2 reacciones de intercambio relevantes (9):



La reacción 1 describe el equilibrio favorable entre la fase escoria y la fase gaseosa con respecto a las presiones parciales de azufre y oxígeno, mientras que la reacción 2 describe el equilibrio entre la fase escoria y la fase metálica.

La constante de equilibrio para la reacción 1 puede expresarse como

$$K_1 = \frac{a_{S^{2-}}}{a_{O^{2-}}} \cdot \sqrt{\frac{P_{O_2}}{P_{S_2}}} = \frac{f_{S^{2-}} \cdot (\%S)_{escoria}}{a_{O^{2-}}} \cdot \sqrt{\frac{P_{O_2}}{P_{S_2}}} \quad (3)$$

donde $a_{S^{2-}}$ y $a_{O^{2-}}$ son las actividades de azufre y oxígeno en la fase escoria, P_{S_2} y P_{O_2} son las presiones parciales de $S_2(g)$ y $O_2(g)$ respectivamente, $f_{S^{2-}}$ es el coeficiente de actividad del azufre en la fase escoria y $(\%S)_{escoria}$ es el contenido de azufre en la escoria en porcentaje en peso.

La capacidad de sulfuro C_s fue definida por Richardson y Fincham (10) mediante la ecuación 4

$$C_s = \frac{K_1 \cdot a_{O^{2-}}}{f_{S^{2-}}} = (\%S)_{escoria} \cdot \sqrt{\frac{P_{O_2}}{P_{S_2}}} \quad (4)$$

donde K_1 es la constante de equilibrio de la reacción 1.

Nzotta y cols. (11)(12) realizaron estudios de sistemas binarios, ternarios y multicomponentes de diferentes escorias metalúrgicas para evaluar la capacidad de sulfuro. Las mediciones resultantes muestran que la capacidad de sulfuro aumenta con la basicidad de las escoria. La basicidad de la escoria puede definirse en su forma más general como la razón de $\%CaO/\%SiO_2$. Es conocido que la desulfuración del acero líquido mejora con escorias con una alta basicidad. Las escorias básicas tienen un alto contenido de óxidos básicos, los cuales tienen la capacidad de liberar iones de oxígeno (O^{2-}) a cambio del azufre disuelto en el acero.

1.6.Revisión de la literatura en el modelado físico y matemático de ollas agitadas con gas.

Diversos fenómenos físicos y químicos se derivan de la operación de inyección de gas en una olla metalúrgica. De éstos, cientos de trabajos han sido publicados utilizando modelado físico y matemático. Investigadores como Mazumdar y Guthrie(13), Pär Jönsson y Lage Jonsson (14), Mazumdar y Evans (15), Irons y Senguttuvan (16)los han señalado en sus revisiones del horno olla en los últimos 20 años. Todos los estudios reportados hasta ahora pueden clasificarse en: a) Modelos físicos, b) Modelos matemáticos, c) Combinación entre los modelos físicos y matemáticos.

1.6.1. Modelado físico del Horno Olla

La dinámica de las interacciones gas-líquido en un horno olla son de gran complejidad, ya que el proceso comprende un sistema multifásico (acero, escoria, gas, entre otros) y tridimensional.

La mayoría de los estudios de modelado físico han estudiado sistemas bifásicos para simplificar el estudio, por lo que los estudios de un sistema trifásico que implican el sistema completo son muy limitados. Generalmente, los modelos físicos han sido construidos utilizando un sistema a escala del prototipo, utilizando agua y aire para representar al acero y al gas (Ar/N)de inyección respectivamente, y en ocasiones una fase orgánica para representar a la escoria, además de satisfacer criterios de similitud, tal como la similitud dinámica a través del número de Froude

modificado y la similitud cinemática, ya que se conoce que las viscosidades cinemáticas del agua a 20 °C y la del acero líquido a 1600°C son las mismas. (13)

1.6.1.1. Flujo de fluidos

Los modelos físicos de flujo de fluidos en el horno olla comprenden estudios principalmente de patrones de flujo, mezclado, la velocidad del fluido y la turbulencia, éstos dependen de diferentes condiciones experimentales, tal como la posición de la(s) boquilla(s) de inyección de gas, el flujo de gas inyectado, las propiedades físicas de las sustancias líquidas y gaseosas utilizadas en el modelo y recientemente reconocido por Mazumdar y cols. (17), la influencia de la fase escoria en la parte superior del agua.

La inyección de gas resulta en diferentes fenómenos físicos, tal como el desarrollo de la pluma de gas (región bifásica burbujas de aire en el agua), el flujo del fluido en el seno líquido con su “ojo toroidal”, la turbulencia generada por las burbujas de gas durante su ascenso a la superficie libre, la zona de escape de las burbujas de gas en la superficie libre (*spout*), y cuando se tiene un sistema trifásico la apertura de la capa de escoria (aceite en el modelo físico), mejor conocido como “ojo de la escoria”, entre otros.

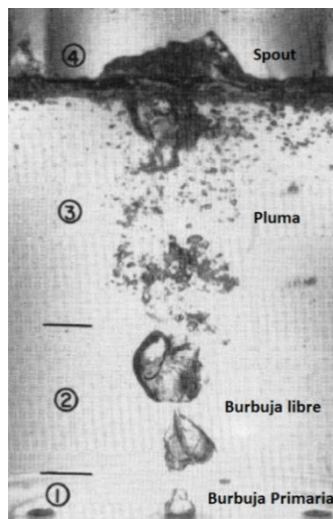


Figura 4 Regiones de la fase gas-líquido.(18)

La Figura 4 muestra la inyección de gas a través de una tobera (céntrica) en un modelo físico a escala de un horno olla donde se forma una región de dos fases, la cual puede dividirse en cuatro regiones diferentes nombradas: 1) burbuja primaria, 2) burbuja libre, 3) pluma de gas y 4) spout. (19) (20) (21) Otros investigadores (22) (23) dividen esta región de dos fases en región de momentum, de transición y boyante.

Se ha usado diferentes técnicas para estudiar el flujo del fluidos generados a partir de la inyección de gas, tales como, grabaciones con video (24) (25), LDV (Laser Doppler Velocimetry) (26) (27), PIV (Particle Image Velocimetry) (28) (29) entre otros. Actualmente es aceptado (18) que durante la refinación del acero en el horno olla, la energía cinética de entrada del gas, así como su modo de inyección, son variables importantes en la región de la burbuja primaria, mientras que en la región totalmente desarrollada, el tamaño de la burbuja, su distribución en el líquido y la velocidad de ascenso de ésta, son independientes de las

condiciones de entrada del gas. La Figura 5 muestra cómo la velocidad del gas disminuye rápidamente en una distancia corta de la boquilla de inyección, lo que muestra que el gas pierde energía cinética alrededor de la boquilla y la flotabilidad (o fuerza boyante) domina el flujo. (30) Recientemente Krishnapisharody e Irons (31) concluyeron en su revisión, que el número de Froude modificado no es apropiado para caracterizar la dinámica de las plumas gas-líquido en el horno olla. También indican que una aproximación basada en el número de Froude derivado de la flotabilidad de la pluma es más útil, tanto en el modelado de la pluma como en la hidrodinámica de la olla.

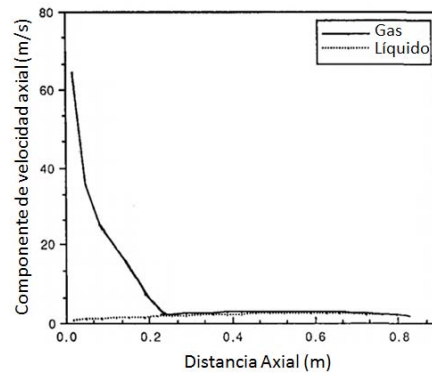


Figura 5 Velocidades axiales de la fase gas y líquido a lo largo del eje axial. (32)

La Figura 6 muestra un esquema de la fluidodinámica en una olla agitada con gas por el centro en presencia de escoria, en donde adyacente al *spout* se encuentra la capa de escoria, la cual previene el flujo del fluido radial en la superficie como normalmente se encuentra en la ausencia de cualquier escoria y redirecciona el líquido de la zona del *spout* hacia la pluma de gas con un ángulo descendente generando la recirculación en una zona estrecha. (17)

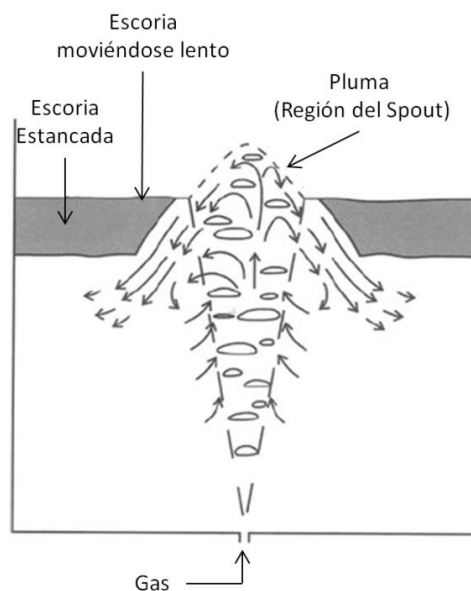


Figura 6 Esquema de la fluidodinámica en una olla agitada con gas por el centro en presencia de escoria. (17)

Se ha indicado en algunos estudios (33) (34) (35) durante la visualización del flujo de sistemas agua-aceite agitados con gas que la interfase agua-aceite puede sobrellevar diferentes

perturbaciones y por lo tanto, se producen diferentes fenómenos físicos complejos, tal como una extensa deformación de la interfase (Ver Figura 7). Por lo tanto, a velocidades de flujo de gas relativamente bajas, la interfase agua-aceite no se ve perturbada, pero con un aumento en el flujo de gas, tienden a formarse ligamentos de aceite y gotas en la interfase agua-aceite, esto puede resultar en la descomposición total de la capa de aceite formándose una emulsión de agua-aceite, lo que aumenta el área interfacial entre las fase de agua y de aceite.

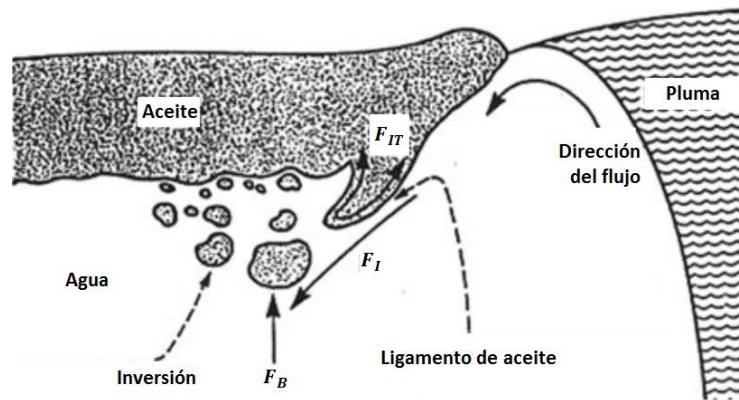


Figura 7 Esquema de la interacción metal escoria en una olla agitada con gas. (36)

Recientemente ha sido reconocido que la fase de la escoria debe ser considerada para una representación realista del sistema de flujo de fluidos, ya que esta fase afecta al fenómeno de flujo de fluidos mediante la disipación de alrededor de 10-20% de la energía de agitación en el horno olla. (17)Mazumdar y cols.(33), Iguchi y cols. (37)(38) e Ilegbusi y cols. (39) también encontraron resultados similares. La Figura 8 muestra diferentes energías cinéticas medidas con diferentes condiciones de la fase escoria. Se puede notar la disminución de energía cinética en presencia de la fase líquida de aceite. (33)

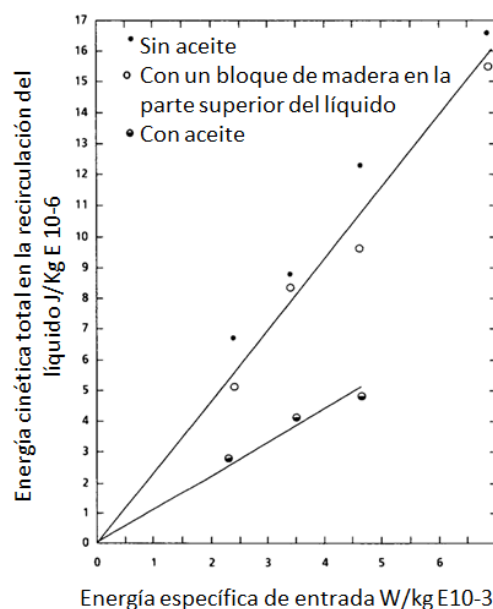


Figura 8 Gráfica de la energía cinética total contenida en el líquido vs energía de entrada referenciada para unidades de masa del líquido, y varias condiciones de fase superior de escoria (sin escoria, sólido y fluido). (33)

1.6.1.2. *Transferencia de masa*

El modelado físico de transferencia de masa emplea dos líquidos inmiscibles, generalmente una fase acuosa, una fase orgánica y un trazador (con un coeficiente de partición entre la fase acuosa y la orgánica), éstos representan la fase del acero, la escoria y el soluto (azufre u otro soluto) a ser transferido del acero a la escoria respectivamente. En la Tabla 1. Se muestran diferentes sistemas trifásicos para el estudio de transferencia de masa.

Tabla 1 Sistemas trifásicos de estudios de modelos físicos utilizados para el estudio de transferencia de masa en diferentes reactores metalúrgicos.

Investigador	Escoria	Metal	Sóluto transferido	Reactor
Clinton y Perona (40)	Agua	Mercurio	Quinona	Reactor Metalúrgico
Nakanishi y cols. (41)	Aceite de Parafina	Agua	B-naftol	Q-BOP
Lei y Ping (42)	Aceite	agua	Acido benzoico	Horno Olla
Ogawa y Onoue (43)	Espuma de partículas de poli- estireno recubiertas con KCl Espuma de partículas de alúmina recubiertas con ácido benzoico	Agua	KCl	Horno Olla
Matway y cols. (44)	Aceite de parafina	Agua	B-naftol	BOF
Matway y cols. (45)	-Aceite de parafina -Aceite de parafina y algodón	Agua	B-naftol Y Timol	
Schlarb y Frohberg (46)	Aceite blanco	Agua	Ácido caprílico	BOF
Paul y Ghosh (47)	Benceno	Agua	Yodo (disuelto con benceno)	LD y Q-BOP
Koria y Shamsi (48)	Aceite de parafina	Agua	Ácido benzoico	Horno Olla
Koria y George (49)	Aceite de parafina	Agua	Ácido benzoico	BOF
Koria y Pal (50)	Aceite de parafina	agua	Ácido benzoico	Convertidor LD
Ajmani y Chatterjee (51)	Aceite de parafina	Agua	Ácido benzoico	Convertidor LD
Singh y Ghosh (52)	Benceno	Agua	Yodo (disuelto en benceno)	Convertidor BOS
Kim y Fruehan(53)	Aceite de parafina ligero+ aceite de algodón Aceite de parafina pesado+ Aceite de algodón	Agua	Timol	Horno Olla
Mietz y cols. (54)	Ciclohexano	Agua	Yodo (Mezcla de yodo y yoduro de potasio)	Horno Olla

En el modelo físico, la turbulencia causada por la pluma de gas durante su ascenso crea una emulsión de la fase orgánica en la fase acuosa, comportamiento común en un sistema de dos líquidos inmiscibles. Es bien aceptado que la emulsificación de la escoria en cualquier grado favorece la rapidez de las reacciones de transferencia de masa entre la escoria y el metal. En estas condiciones, la rapidez de las reacciones entre las dos fases está estrechamente relacionada con el comportamiento de su interfase, específicamente con el área interfacial, y ésta es necesario conocerla para poder determinar la cinética de transferencia de masa. Algunos investigadores han estudiado el mecanismo de emulsión a través de modelos físicos (55)(56), y recientemente (57) se ha realizado un estudio tanto de la emulsión como para conocer el área interfacial asociada al mismo.

En general, la rapidez de transferencia de masa \dot{m} , definida como los moles de soluto eliminado del acero por segundo, puede describirse mediante la ecuación 5.

$$\dot{m} = kA(C_i - C_M) \quad (5)$$

donde k es el coeficiente de transferencia de masa, A es el área interfacial, $(C_i - C_M)$ es el gradiente de concentración de soluto (azufre u otros) entre la interfase y el seno líquido de la fase acero (o agua en el caso de modelo físico).

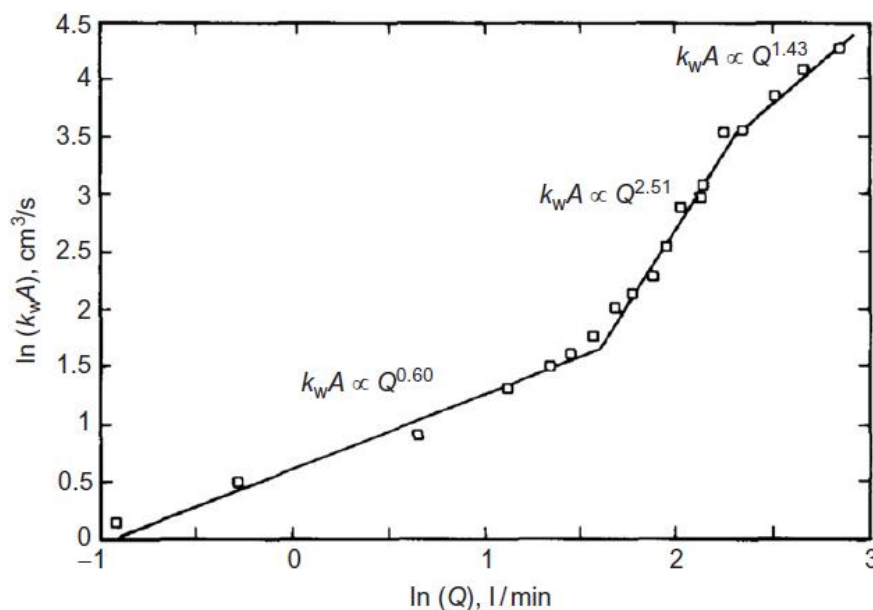


Figura 9 Relación entre la constante de transferencia de masa kA y el flujo de gas.(54)

La rapidez de transferencia de masa entre dos líquidos inmiscibles ha sido medida como un índice del área interfacial en la emulsión. La mayoría de los estudios en esta área han obtenido información sobre un coeficiente de transferencia de masa volumétrico, en algunas ocasiones referido como parámetro de transferencia de masa, lo que es equivalente a kA en la Ecuación 5. kA ha sido expresado en términos de la tasa de flujo de gas (Q) como $kA \propto Q^n$.(58) Con la finalidad de explicar la relación del flujo de gas (Q) y el coeficiente de transferencia de masa, Asai y cols. (59) revisaron estudios previos obteniendo un intervalo de exponentes para Q entre 0.25 a 3.0.

Mediciones físicas en un modelo acuoso (54) muestran que kA cambia su pendiente rápidamente arriba de cierto flujo Q , como se observa en la Figura 9. Este incremento ha sido asociado con la emulsificación del aceite en el agua en la región de la interfase agua-aceite.

Son pocos los estudios que comprenden modelos físicos de tres fases, por ejemplo, el trabajo realizado por Amaro y cols. (60) donde obtuvieron una correlación de mezclado en presencia de una capa de escoria, Peranandhanthan y Mazumdar(61) obtuvieron una correlación para predecir la apertura de la escoria (ojo de la escoria) durante la inyección de gas, utilizando diferentes sustancias orgánicas para representar a la escoria, Mazumdar y Guthrie (17) determinaron que es fundamental modelar la capa de escoria ya que existe disipación de energía debido al intercambio de momentum entre la fase de agua y la capa de aceite, encontrando que la variable más importante es el espesor de la misma.

1.6.2. Modelado matemático del Horno Olla

En los últimos 30 años el modelado matemático ha sido de gran importancia para estudiar diferentes fenómenos de transporte que ocurren en el horno olla bajo la inyección de gas. Szekely y cols. (62)(63) son los pioneros en el modelado matemático de procesos metalúrgicos.

Los modelos multifásicos, casi todos ellos bifásicos, de ollas agitadas con gas pueden clasificarse en: Modelo Cuasi-Monofásico (quasi single phase model), Modelo Lagrangiano-Euleriano y Modelo Euleriano-Euleriano. De éstos, en términos de esfuerzo computacional el modelo Cuasi-Monofásico, es por mucho el que menos tiempo de cómputo requiere; y en contraste, el modelo Euleriano-Euleriano es el que requiere mayor esfuerzo computacional.

La complejidad de los fenómenos de transporte que ocurren en el horno olla, requieren del uso de diferentes paquetes comerciales de dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés) para su estudio, por mencionar algunos, PHOENICS, FLUENT, CFX, COMSOL entre otros.

1.6.2.1. Modelo Cuasi-Monofásico

El modelo Cuasi-Monofásico se utilizó para simular el flujo de fluido en una olla agitada con gas; sin embargo, se desarrolló cuando el poder de cómputo en los noventa era muy limitado.(64) Se ha utilizado el modelo Cuasi-Monofásico para estudiar mezclado(65)(66) y transferencia de calor (67) (68) en sistemas bifásicos.

Este modelo requiere fijar parámetros *a priori*, tales como la forma de la pluma, la velocidad de la burbuja y la fracción de gas, lo que resulta en un error significativo, ya que la forma de la pluma es muy dinámica y rara vez se asemeja a la forma ideal en que es representada, y la fracción de volumen de gas puede variar significativamente. Conociendo la región bifásica, conocida como pluma, se calcula la densidad de la zona bifásica y entonces se resuelve una sola ecuación de continuidad y las ecuaciones turbulentas de Navier-Stokes para una sola fase con densidad variable en la zona de la pluma. Además, este modelo supone una superficie libre plana y sin fricción, lo que no considera el ojo de la escoria y el movimiento ondulatorio natural en la superficie libre (*spout*). (64)

1.6.2.2. Modelo Lagrangiano-Euleriano

El modelo Lagrangiano-Euleriano resuelve las ecuaciones de conservación para la fase líquida y la fase gaseosa se trata con una ecuación de trayectoria. En esta ecuación de trayectoria, las burbujas se comportan como partículas discretas, cada una sujeta a un equilibrio de fuerzas, y puede intercambiar momentum, masa y energía con el medio continuo (líquido).

Algunos modelos Lagrangianos (69)(70) han sido utilizados para estudiar ollas agitadas con gas en sistemas bifásicos.

Este modelo representa la pluma de gas de manera más realista que el modelo Cuasi-Monofásico; sin embargo, se requiere un gran número de burbujas para tener una buena aproximación del proceso industrial de la olla y esto dificulta el cálculo aún con las condiciones actuales de *software* y *hardware* disponibles. Este modelo requiere de parámetros empíricos, por ejemplo, un algoritmo de coalescencia y nucleación para las burbujas, conocer el tamaño de las burbujas y supone forma esférica de las mismas. Además, la superficie libre se asume una vez más plana y sin fricción.

1.6.2.3. Modelo Euler-Euler

El modelo Euleriano-Euleriano resuelve las ecuaciones de conservación de masa y de cantidad de movimiento tanto para la fase líquida como para la fase gaseosa, y éstas comparten el dominio de cómputo. En general se trata de dos fases, una de las cuales es continua en el espacio (líquido) y la otra (gas), está dispersa e interpenetrada en la fase continua. Este modelo es el más complejo y requiere de un mayor esfuerzo computacional comparado con los dos anteriores para realizar los cálculos numéricos; sin embargo, aún requiere de parámetros empíricos como el coeficiente de arrastre, el tamaño y forma de las burbujas, etc.

El marco de referencia Euleriano-Euleriano se ha utilizado para estudiar transferencia de calor(71) la fluidodinámica(72)(73)(74)(75)(76)transferencia de masa entre la fase gaseosa y líquida (77)y en sistemas trifásicos para estudiar turbulencia (78)y transferencia de masa (79); sin embargo, en su mayoría, predominan los modelos de dos fases. Este modelo permite estudiar el spout y el ojo de la escoria.

1.6.2.4. Modelo VOF

Mientras que los modelos Cuasi-Monofásico y Euler-Lagrange suponen superficies libres planas y sin fricción, el modelo VOF permite calcular con gran precisión la superficie entre dos fluidos y la superficie libre en el horno olla.

El modelo VOF se ha utilizado principalmente en sistemas trifásicos para estudiar el comportamiento de la interfase acero-escoria(80)(81), con énfasis en la deformación de la interfase acero-escoria, la altura del spout(82), o la apertura del ojo de la escoria(83).También se ha combinado la técnica VOF y DPM (Discrete Phase Model)(84)(85)en sistemas trifásicos para calcular movimiento de las partículas. Este modelo también es monofásico y utiliza propiedades físicas ponderadas con las fracciones de cada fase. Sin embargo, la técnica es muy exitosa para fluidos que comparten una superficie libre o intercara bien definida, pero no es adecuado para simular fases dispersas e interpenetradas en otras fases continuas como sucede

en la olla de acero. Por eso, esta técnica es la menos usada por los investigadores que han hecho modelado matemático en ollas de acero agitadas con gas.

1.7.Planteamiento del problema

La refinación secundaria en el horno olla puede mejorar su eficiencia y productividad a través de una mayor cinética de transferencia de masa entre la fase del acero y de la escoria. El proceso opera en condiciones agresivas de temperatura por lo que los estudios experimentales son muy costosos y difíciles de implementar en planta, entonces, la modelación física y matemática son dos herramientas de la ingeniería de procesos que se usan para entender los procesos de refinación en el horno olla. Por estas razones, se pretende estudiar a través de modelado físico y matemático la física de la dinámica de fluidos en un sistema trifásico acero-escoria-argón, así como la cinética de reacción de intercambios metal escoria (usando modelación física con agua y una fase orgánica y un soluto a transferirse) que representa el estado del arte en simulaciones físicas y matemáticas de estos sistemas.

1.8.Justificación

Los modelos físicos y matemáticos del horno olla agitado con gas, estudiados hasta hoy en día se han enfocado principalmente en sistemas bifásicos (acero-gas) para simplificar el fenómeno complejo de flujo de fluidos en ollas de acero agitadas con gas. (17) Sin embargo, un sistema completo del horno olla comprende al menos tres fases (acero-gas-escoria), es decir, se tiene una fase de escoria en la parte superior del metal líquido y cuya presencia de esta fase es fundamental para la refinación del acero líquido, debido a que evita pérdidas de calor por radiación, previene la reoxidación del metal líquido, absorbe elementos químicos (N, O, S, C y H) no deseados, además de captar inclusiones no metálicas, las cuales son negativas para las propiedades mecánicas del acero. Por lo tanto, la mayoría de los estudios bifásicos carecen de una representación realista de los estudios de refinación secundaria.

Este trabajo pretende establecer un modelo numérico de tres fases resuelto en un código CFD sobre la dinámica de fluidos, turbulencia y transferencia de masa de un modelo físico agua-aire-aceite validado mediante la comparación de resultados numéricos contra patrones de flujo medidos mediante la técnica PIV en el modelo físico. También se pretende establecer una comparación entre una medición experimental y una matemática para un caso de intercambios de especies químicas entre metal y escoria a nivel modelo físico. Con esta metodología, se pretende establecer un modelo numérico de tres fases robusto para el estudio de mezclado e intercambios metal-escoria de una manera realista en futuras contribuciones que se pueden extender a sistemas de inyección excéntrica tridimensional.

1.9.Hipótesis

Es posible estudiar la cinética de los intercambios metal-escoria a través de modelado físico y matemático, siempre y cuando se seleccione correctamente la sustancia que funge como escoria y a la sustancia que funge como soluto.

El flujo de gas es la variable más significativa que controla el flujo de fluidos en el sistema trifásico y que controla la cinética de los intercambios metal-escoria.

1.10. Objetivo

Estudiar la fluido dinámica, turbulencia y la transferencia de masa del soluto en la interfase metal-escoria en ollas agitadas con gas, mediante modelado físico y matemático.

1.10.1. Objetivos particulares

- Desarrollar un modelo físico de plexiglás del prototipo de un horno olla conservando estrictos criterios de similitud para simular el proceso de inyección de gas en un horno olla que considere un sistema trifásico (acero-escoria-burbujas de gas).
- Desarrollar un modelo numérico que simule la dinámica de fluidos de un sistema trifásico acero-escoria-burbujas de gas y permita estudiar intercambios metal-escoria en ollas agitadas con gas a través del uso de la dinámica de fluidos computacional (CFD por sus siglas en inglés).
- Validar las predicciones que arroje el modelo numérico con los resultados medidos en el modelo físico empleando el sistema de medición Velocimetría de Imágenes por Partículas (PIV por sus siglas en inglés).
- Validar las predicciones que arroje el modelo numérico con los resultados medidos en el modelo físico que emplea un sistema con un soluto disuelto en la fase de agua y se transfiere a la fase de aceite.
- Realizar un análisis del proceso para evaluar el efecto del flujo de gas y la capa de escoria (capa de aceite) en el proceso de inyección de gas del sistema trifásico acero-escoria-burbujas de gas.

2. Metodología

El modelado se considera una representación científica del objeto de estudio, y es una técnica científica bien establecida con capacidades demostradas y encuentra una amplia aplicación en el análisis de procesos de aceración para su diseño, control y optimización.

La metodología del presente trabajo comprende el desarrollo de un modelo físico y uno matemático por medio de los cuales se pretende estudiar la fluidodinámica y la transferencia de masa en un sistema trifásico de un horno olla agitado con gas.

2.1. Modelo Físico

En la construcción de un modelo físico, la unidad industrial se conoce como prototipo o sistema a escala completa, y su réplica física como "modelo físico" o simplemente modelo. Los modelos físicos que utilizan agua para simular el acero líquido son conocidos como "modelos acuosos" y son ampliamente aplicados para el estudio de los procesos de aceración. El modelo físico para el presente trabajo ha utilizado un sistema trifásico agua-aceite-aire para representar al acero-escoria-gas respectivamente y se ha construido respetando las siguientes similitudes, llamadas:

1. Similitud Geométrica.
2. Similitud Dinámica.
3. Similitud Cinemática.

2.1.1. Similitud Geométrica

Dos sistemas son geoméricamente similares cuando la razón entre cualquier longitud en un sistema y la longitud correspondiente en otro, es siempre la misma. Esta relación se expresa en términos del factor de escala geométrico, λ , como

$$\lambda = \frac{L_{modelo}}{L_{prototipo}} \quad (6)$$

Para nuestro estudio, el factor de escala es

$$\lambda = \frac{1}{17}$$

Es decir, el factor de escala deberá aplicarse a cada medida del prototipo, así como a la altura del acero líquido y escoria del mismo. En la Tabla 2 se indican las dimensiones y condiciones de operación de una olla industrial de 140 toneladas de la empresa TENARIS TAMSA, la que se tomó como el sistema prototipo para la construcción del modelo físico.

Tabla 2 Medidas reales de un Horno Olla utilizado en TENARIS TAMSA.

$D_{ec}(m)$	$H_{ec}(m)$	$L_{ec}(m)$	$Q_{ec}(m^3/min)$
3.226	3.736	2.802	0.2-0.6

El subíndice *ec**significa escala completa.

donde D_{ec} es el diámetro, H_{ec} es la altura, L_{ec} es la altura del acero líquido y Q_{ec} es el flujo de gas inyectado en el horno olla.

Una representación esquemática del Horno Olla se muestra en la Figura 10.

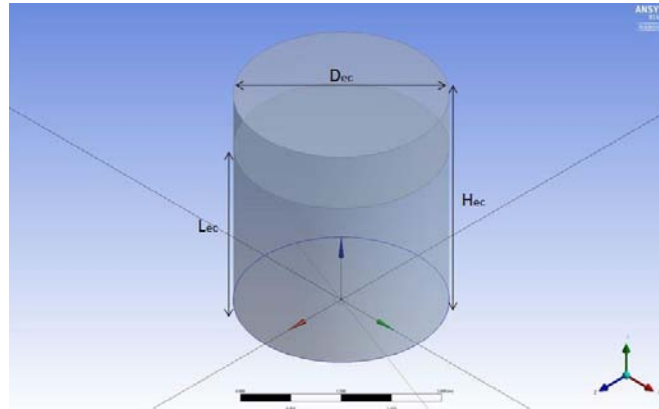


Figura 10 Esquema del Horno Olla utilizado en Tenaris TAMSA.

De acuerdo con del factor de escala y las dimensiones de la Tabla 2, tenemos

$$D_m = \lambda(D_{e.c}) = 0.189 \text{ m}$$

$$H_m = \lambda(H_{e.c}) = 0.219 \text{ m}$$

$$L_m = \lambda(L_{e.c}) = 0.164 \text{ m}$$

Y para calcular la altura de la escoria, consideramos un 4% de la altura total del líquido.

$$L_e = L_m(0.04) = 0.00652 \text{ m}$$

La Tabla 3 resume los cálculos anteriores.

Tabla 3 Dimensiones del modelo físico.

D_m (m)	H_m (m)	L_a (m)	L_e (m)
0.189	0.219	0.164	0.00652

El subíndice m *significa modelo.

donde D_m es el diámetro, H_m es la altura de la olla, L_a es la altura del acero líquido dentro de la olla y L_e es el espesor de la capa de la escoria.

El modelo físico fue construido con plexiglás y la escala del modelo se basó con fines ecológicos al utilizar poca cantidad de agua, facilitar su manejo y la visualización del flujo del fluido con la técnica de velocimetría de imágenes por partículas (PIV por sus siglas en inglés).

2.1.2. Similitud Dinámica

La similitud dinámica se refiere a la similitud de fuerzas que aceleran o retardan el movimiento del fluido, es decir, implica que las fuerzas corresponden en tiempo y espacio en el modelo y en el prototipo. En un flujo multifásico, el balance de fuerzas que actúan sobre el fluido puede describirse a través de la ecuación de Navier-Stokes, por lo que las fuerzas relevantes en el movimiento del fluido son la fuerza de inercia, viscosa, presión y gravitacional.(86)Ver descripción de las fuerzas en Tabla 4.

Tabla 4 Fuerzas relevantes en el movimiento del fluido.(6)

Fuerza	Expresión característica de la fuerza
Inercial	$\rho v^2 H_a^2$
Presión	$p H_a^2$
Viscosa	$\mu v H_a$
Gravitacional	$\rho g H_a^3$

La igualdad de diferentes números adimensionales entre el prototipo y el modelo es por medio de lo que establece la similitud dinámica. En flujos isotérmicos, la fuerza de inercia, gravitacional, viscosa y de presión son importantes, por lo tanto sólo los números de Froude, Reynolds y de Euler son significativos. La Tabla 5 presenta los números adimensionales relevantes.

Tabla 5 Grupos adimensionales importantes en el modelo físico.(6)

Número Adimensional	Definición	Interpretación
Reynolds, Re	$\frac{U_c L_c}{\nu}$	Relación entre fuerzas inerciales y viscosas.
Froude, Fr	$\frac{U_c^2}{g L_c}$	Relación entre fuerzas inerciales y gravitacionales.
Euler, Eu	$\frac{\Delta p}{0.5 \rho U_c^2}$	Relación entre fuerzas inerciales y de presión.
Weber, We	$\frac{\rho U_c^2 L_c}{\sigma}$	Relación entre fuerzas inerciales y de tensión superficial.

Por lo tanto, el criterio de similitud dinámica en un horno olla resulta de los números adimensionales que son representativos de las fuerzas que actúan en el sistema. La ecuación de Navier-Stokes tiene su equivalencia adimensional representada por(6)

$$\frac{1}{Eu} = f(Re, Fr) \quad (7)$$

La similitud dinámica entre el modelo y el prototipo de la olla agitada con gas es generalmente dominada por el número de Froude, ya que el fenómeno del flujo del fluido es esencialmente dominado por fuerzas de inercia y la gravitacional. Por lo anterior, el criterio de similitud dinámica puede ser escrito como

$$(N_{Fr})_m = (N_{Fr})_{e.c} \quad (8)$$

Y expresando la equivalencia adimensional en términos de variables de operación se obtiene

$$Q_m = \lambda^{3/2} Q_{prot} \quad (9)$$

Y utilizando el factor de escala geométrico y uno de los flujos utilizados en la olla, obtenemos

$$Q_m = \left(\frac{1}{17}\right)^{3/2} \left(0.2 \frac{m^3}{min}\right)$$

$$Q_m = 0.00285 \frac{m^3}{min}$$

$$0.00285 \frac{m^3}{min} \cdot \frac{1000 L}{1 m^3} = 2.85 \frac{L}{min}$$

2.1.3. Similitud Cinemática

Y finalmente, la similitud cinemática se establece al hacer que los patrones de flujo y las magnitudes de las velocidades sean similares entre el prototipo y el modelo físico. La Tabla 6 muestra la similitud cinemática entre el acero y el agua a través de la viscosidad cinemática.

Tabla 6 Similitud cinemática entre el acero y el agua.

Material/Propiedad Física	ρ [kg/m ³]	μ [N · s/m ²]	ν [m ² /s]
Agua 20° C	1000	0.001	1.00E(-6)
Acero 1600° C	7000	0.0068	0.97E(-6)

2.2. Velocimetría de imágenes de partículas (PIV)

La velocimetría de imágenes de partículas (PIV) es una técnica de visualización de fluidos con la cual es posible obtener mapas vectoriales en una región de interés en un fluido. El fluido se siembra con partículas trazadoras (micrométricas) que siguen con precisión el movimiento del fluido.

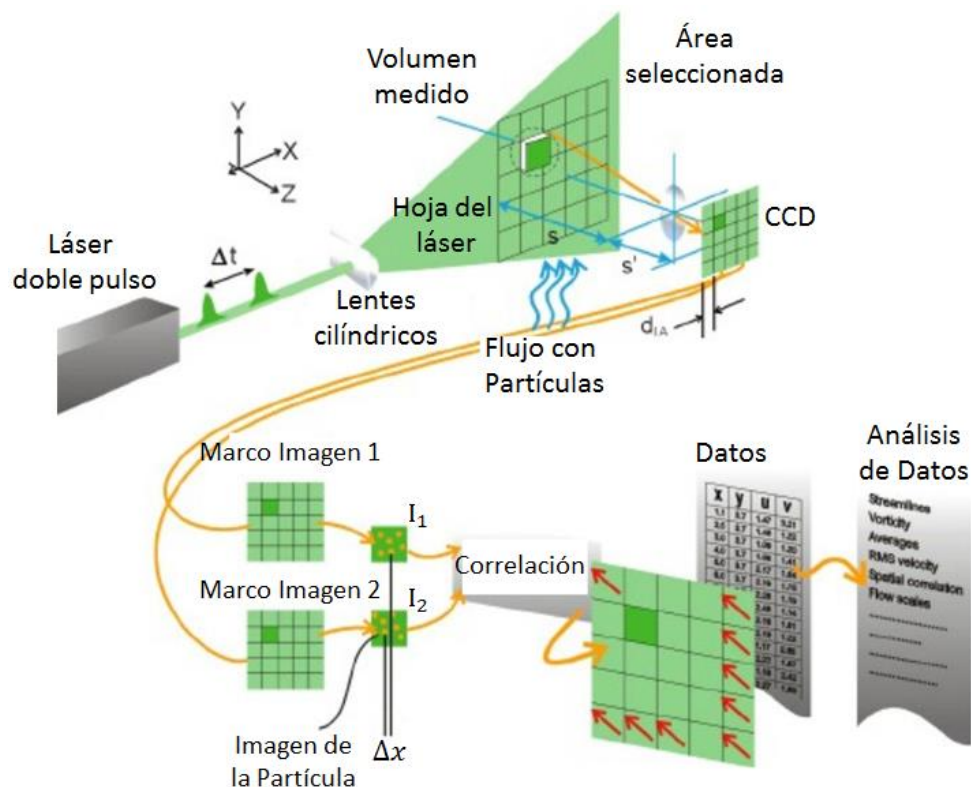


Figura 11 Esquema del funcionamiento de la técnica PIV.(88)

Una hoja de luz láser de alta intensidad se crea haciendo pasar un rayo láser a través de un arreglo de lentes cilíndricas. Las partículas sembradas en el fluido se iluminan cuando están en el plano (área seleccionada del fluido) de la hoja de luz. Una cámara CCD captura dos imágenes con un intervalo de tiempo conocido, con lo que se puede determinar las velocidades al correlacionar las partículas que aparecen entre la primera y la segunda foto. El principio del PIV está basado en medir el desplazamiento de las partículas trazadoras, es decir, determinar las cantidades utilizadas para calcular la velocidad: los diferenciales de tiempo y desplazamiento. (87) La Figura 11 muestra un esquema de la técnica PIV en 2D.

2.3.Arreglo experimental

El arreglo experimental utilizando la técnica PIV se puede observar en la Figura 12 y todos los componentes utilizados se pueden ver en la Tabla 7.



Figura 12 Arreglo experimental utilizando la técnica de PIV. Los nombres de los componentes se enlistan en la Tabla 7.

Tabla 7 Nombre de los componentes utilizados en el arreglo experimental.

Componente	Nombre
1	Transformador eléctrico (220-245V).
2	Equipo controlador de la fuente láser.
3	Flujometro - Marca ColeParmer (resaltado).
4	Fuente Láser (<i>Dual Power LDY302 Litron Laser</i>).
5	Compresor
6	Modelo físico de acrílico.
7	Cámara de alta velocidad (Speedsense M320, 2MP, AMETEK).
8	“Traverse” o equipo controlador de la posición de la cámara.
9	CPU (Dell T7600, Core Intel Xeon (R), E5-2620) y monitor (con Software Dantec Dynamics (Dynamic Studio)).
10	Conexión rápida / Entrada de aire.

2.4. Metodología para uso del equipo PIV

2.4.1. Calibración

El sistema PIV y el modelo físico se deben nivelar y alinear adecuadamente en el plano de interés. Para convertir el campo de velocidades de la imagen de pixeles a milímetros, se utiliza una regla la cual se ubica sobre el plano seleccionado para realizar un enfoque correcto con la imagen de la cámara CCD. La imagen enfocada permite indicar una longitud en milímetros y por medio del software obtener un factor de escala (de pixeles a milímetros). Una vez que se tiene el factor de escala de pixeles a milímetros los vectores de velocidad se podrán determinar en mm/s. La Figura 13 muestra una imagen de la calibración de la imagen a capturar por la cámara CCD.

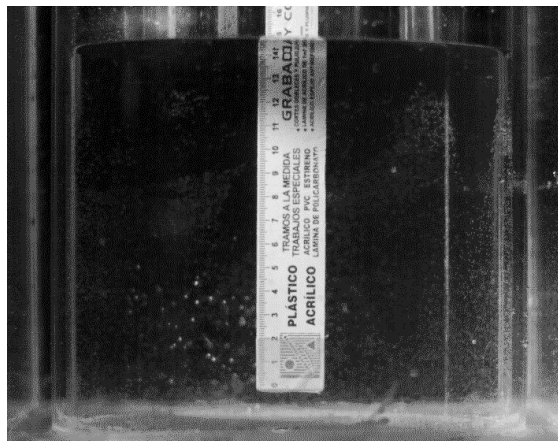


Figura 13 Calibración del sistema.

2.4.2. Procedimiento con software del PIV

La técnica PIV se trabajó en un marco *single frame* con una frecuencia de 650 Hz usando un 30 % de la potencia de la fuente Láser *Dual Power (LDY302 Litron Laser)* de 10 mJ. Las imágenes fueron capturadas con una cámara de alta velocidad (*Speedsense M320, 2MP, AMETEK*) con una resolución de 1920 x 1200 pixeles utilizando un filtro para capturar sólo la longitud de onda de entrada de 550 a 680 nm emitidas por las partículas rosas y no por las burbujas de gas. El fluido utilizado fue agua con partículas trazadoras de poliamida (teñida con rodamina), las características de las partículas trazadoras se muestran en la Tabla 8.

Tabla 8 Propiedades físicas de las partículas trazadoras utilizadas.

Material	Diámetro medio (μm)	Forma de la partícula	Densidad (g/cm^3)	Punto de Fusión ($^{\circ}\text{C}$)	Índice de Refracción
Poliamida 12	20	Esférica	1.03	175	1.5

Se tomaron un total de 500 fotos y se procesaron estadísticamente con el *software Dynamic Studio* versión 4.0. Para desarrollar el análisis de las imágenes, se utilizó el método de correlación

cruzada (*cross correlation*) con un traslape (*overlap*) de 50% y un área de interrogación de 32 x 32 píxeles, equivalente a 2.1 x 2.1 mm para obtener los patrones de flujo y las fluctuaciones turbulentas, datos que se utilizaron para calcular la energía cinética turbulenta mediante un procesamiento hecho con el software MATLAB®.

La Figura 14 muestra el plano del fluido (agua) sembrado con partículas trazadoras y la Figura 15, una vista a 45 grados aproximadamente de la normal al plano de interés.

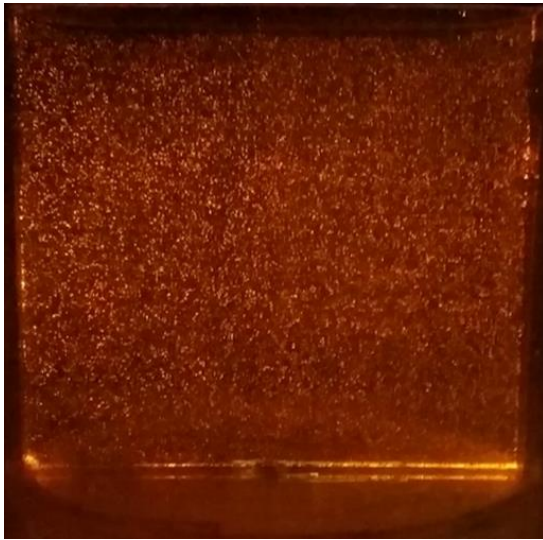


Figura 14 Fluido sembrado con partículas trazadoras.

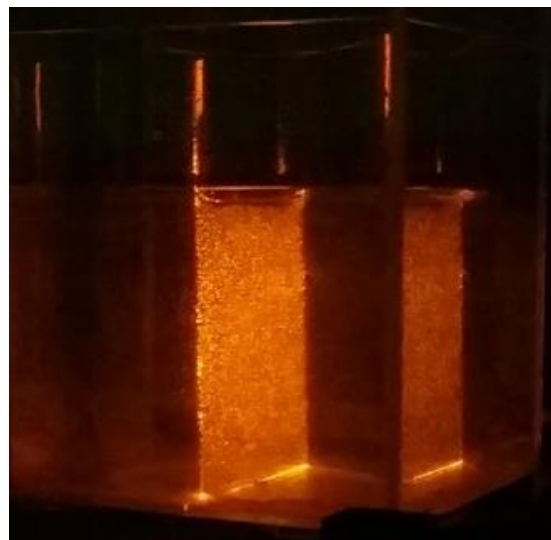


Figura 15 Vista 45 grados - Plano de interés.

El procedimiento para obtener el patrón de flujo 2D con el *software Dynamic Studio* requiere de una secuencia correcta de los métodos de análisis. Ésta se puede observar en la Tabla 9 e involucra marcar áreas donde no hay flujo de fluidos o enmascaramiento (por ejemplo, las paredes del sistema), una correlación cruzada entre pares de fotos, entre otros.

Tabla 9 Secuencia de análisis de la técnica PIV

No.	Método de Análisis	Descripción
1	<i>Define Mask</i>	Marca áreas en el mapa de la imagen que no son deseadas debido a que producen vectores erróneos, por ejemplo, la presencia de paredes del sistema.
2	<i>Image Masking</i>	Elimina las áreas no deseadas en el mapa de todas las imágenes capturadas.
3	<i>Cross-Correlation</i>	La correlación cruzada (Cross-Correlation) produce un mapa vectorial de dos imágenes en <i>single frame</i> . Es decir comparará el desplazamiento de una partícula entre la imagen 1 y 2, 2 y 3, 3 y 4 y así sucesivamente.
4	<i>Peak Validation</i>	Validación basada en relaciones de la altura del pico de intensidad detectada por la cámara.
5	<i>Average Filter</i>	Suaviza los vectores rechazados y los ajusta con sus vecinos.
6	<i>Vector Statistics</i>	Calcula el vector de velocidad media (es decir, la media para cada componente, U y V), la covarianza (correspondiente a los esfuerzos turbulentos) y el coeficiente de correlación para cada posición.

La Figura 16 muestra el mapa vectorial resultante del patrón de flujo del fluido en el plano 2D analizado al finalizar la secuencia descrita en la Tabla 9. Este plano es representativo del patrón de flujo de toda la olla al inyectar gas por el centro, debido a la simetría angular que presenta el sistema.

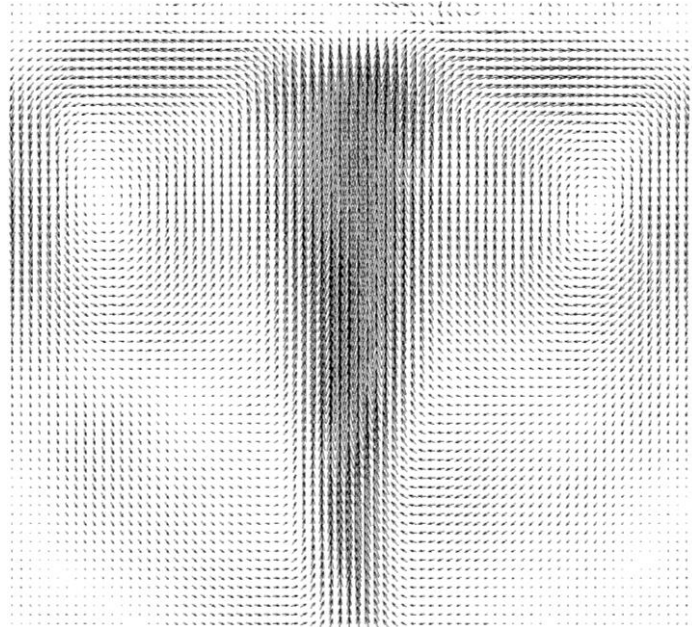


Figura 16 Mapa vectorial resultante después del procesamiento estadístico en el *software Dynamic Studio*.

Imágenes de los experimentos se muestran en la Figura 17. En la Figura 17 a) se muestra el sistema bifásico donde se estudió la fluido-dinámica y la energía cinética turbulenta.

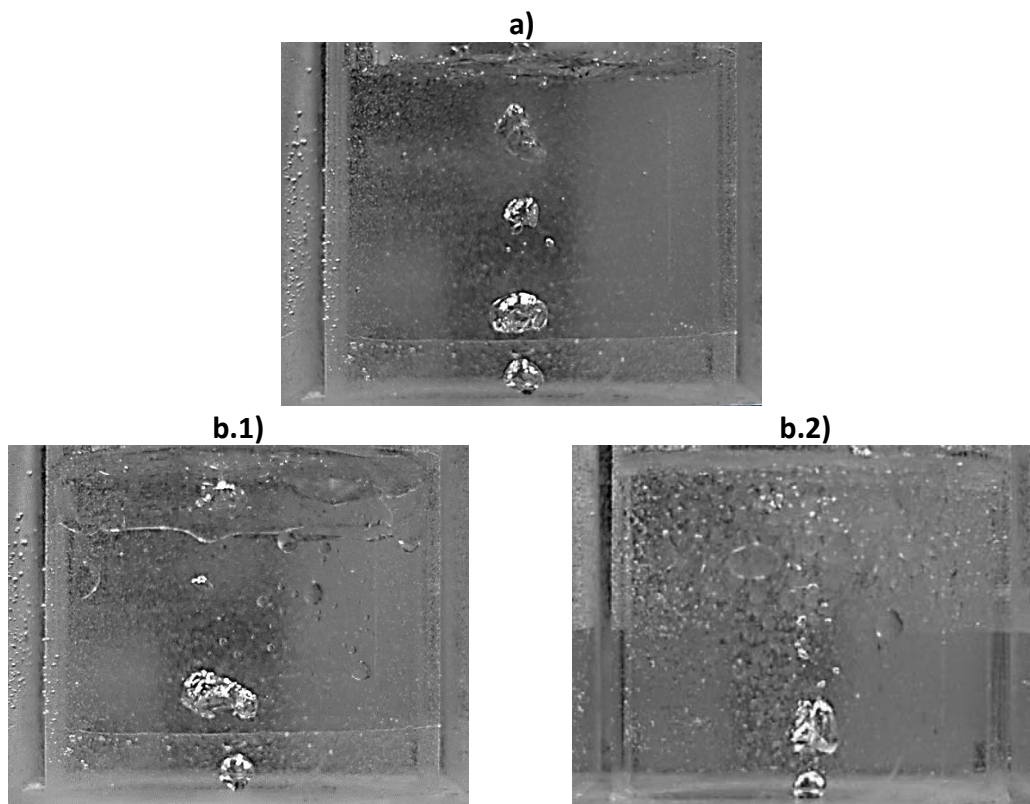


Figura 17 Sistema bifásico a), Sistema trifásico b.1) y b.2) capa de aceite al inicio de la inyección y emulsificación de la capa de aceite una vez desarrollado el flujo respectivamente.

En la Figura 17 b.1) y b.2) se muestra el sistema trifásico donde se estudió la fluidodinámica, la energía cinética turbulenta y la transferencia de masa (detalles de éste último ver sección 4.5). Se puede apreciar la capa de aceite al inicio de la inyección de aire 20 b.1) y la emulsión de la capa de aceite dentro de la fase de agua cuando se desarrolla el flujo del fluido 20 b.2), este fenómeno mejora la transferencia de masa debido al incremento de área superficial entre el aceite y el agua.

2.5. Propiedades físicas

La Tabla 10 muestra las propiedades físicas de las sustancias involucradas en el sistema de estudio y que incluye al agua, al aire, al aceite de silicón y a la sustancia usada para los experimentos de intercambio de masa metal-escoria (timol).

Tabla 10 Propiedades físicas de las sustancias utilizadas.

Propiedad /Sustancia	Agua	Aceite de Silicón	Aire	Timol
Densidad (kg/m ³)	1000.0	800.0	1.23	925
Viscosidad Cinemática (m ² /s)	1x10 ⁻⁶	1x10 ⁻⁴	1.45x10 ⁻⁵	4.29x10 ⁻⁶

La difusividad de timol en agua es 6.50×10^{-10} (89)

2.6. Diseño experimental de transferencia de masa

Un modelo físico a escala (1/17) de un horno olla de 140 toneladas se utilizó para estudiar el fenómeno de transferencia de masa de un sistema agua - aceite de silicón - timol. El agua modelando al acero líquido, el aceite de silicón modelando la escoria y el timol, la especie disuelta a ser transferida al aceite de silicón (azufre por ejemplo).

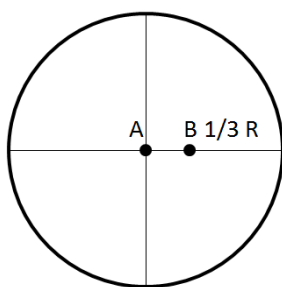


Figura 18 Vista desde el fondo del modelo físico. Inyección de aire y toma de muestras A y B respectivamente.

Para el experimento, se vertieron 4.6 L de agua desionizada con una concentración de timol de 123-125 ppm. El timol presenta forma de granos (como los granos de sal); por ello se probaron diferentes métodos para lograr su dilución en el agua, un agitador magnético, un sonicador y baño maría, teniendo una duración aproximada de 1 día, 4 horas y 30 minutos, respectivamente. Se utilizó el baño María para realizar las diluciones, tanto del experimento, como para generar la curva de calibración. Una vez lograda la dilución, se vertieron 0.15 L de aceite de silicón dentro del modelo físico, el cual, queda encima de la fase de agua por su menor densidad.

Posteriormente inició la inyección de aire a través de la boquilla ubicada en el centro del fondo del modelo (Ver Figura 18 Punto A) y se tomaron muestras con una jeringa, a través de un orificio ubicado a 1/3 de distancia radial de la boquilla (Ver Figura 18 Punto B). La cantidad por cada muestra tomada fue de 1.5 mililitros, obteniendo un total de 10 muestras, una antes de iniciar la inyección de aire, y después de iniciar la inyección de aire a los tiempos 1, 3, 5, 15, 30, 60, 90, 120 y 150 minutos. Para analizar el cambio de concentración con el paso de tiempo de cada una de las muestras, en un primer intento se utilizó un espectrofotómetro UV-Visible marca Shimadzu U160, con una longitud de onda de 190 a 1100 nm. Debido a que la longitud de onda a la que se lee el timol es de 190 nm, no se pudo realizar una lectura apropiada de la absorbancia. En un segundo intento se utilizó un espectrofotómetro marca Shimadzu modelo UV-2600 con una longitud de onda de 185 a 900 nm, el cual se puede ver en la Figura 19. Este equipo al tener la característica de leer longitudes de onda por debajo de 190 nm, determinó adecuadamente la absorbancia de cada una de las muestras.



Figura 19 Espectrofotómetro UV-Vis utilizado para determinar la concentración de cada muestra.

Paralelamente a estas mediciones, se prepararon soluciones con concentraciones conocidas (125, 100, 75, 50, 25 y 0 ppm) para realizar una curva de calibración, la cual tiene un coeficiente de correlación de 0.9971 (ver Figura 20). Utilizando esta curva de calibración y las absorbancias obtenidas experimentalmente, se obtuvieron las concentraciones de cada una de las muestras obtenidas a cada tiempo del experimento.

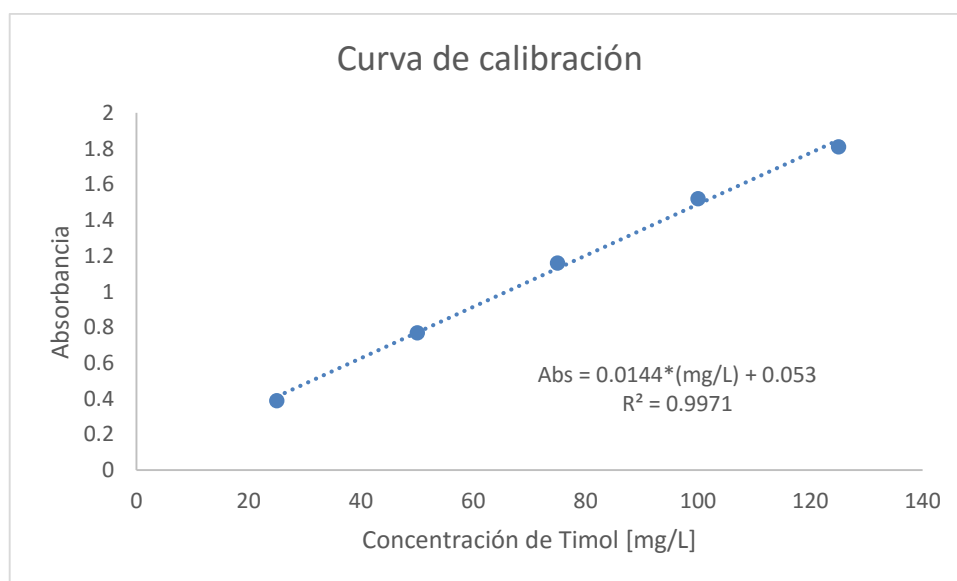


Figura 20 Curva de calibración - Absorbancia vs Concentración Timol (mg/L).

Para el uso adecuado de este equipo, tanto las muestras tomadas del experimento como las soluciones preparadas para la curva de calibración se diluyeron 15 veces, preparando una cantidad de 6 ml. Para realizar estas soluciones se utilizaron micro pipetas con una capacidad de medición de 10-100 μl y 100-1000 μl .

2.7. Modelo Numérico

En el lenguaje de modelado de procesos de aceración, es común utilizar la expresión “modelo matemático”; sin embargo, en un lenguaje formal se utiliza la expresión “modelo numérico” ya que se emplea un método numérico para resolver las ecuaciones diferenciales gobernantes que describen y son resueltas para la solución del problema de estudio.

Se desarrolló un modelo numérico para estudiar el flujo del fluido y la transferencia de masa durante la inyección céntrica por el fondo del modelo físico del horno olla desarrollado en el capítulo 2.1. Este modelo numérico se validará contra los resultados medidos en el modelo físico mediante la técnica PIV y la curva experimental de transferencia de masa.

Las dimensiones de la olla para el modelo numérico se muestran en la Tabla 11, donde debido a la simetría angular que presenta el sistema se puede utilizar un plano del cilindro, es decir, una geometría 2D. Y por la simetría que presenta el sistema al tener inyección céntrica, se puede utilizar sólo la mitad del mismo plano. Las propiedades físicas de los materiales utilizados se muestran en la Tabla 10.

Tabla 11 Dimensiones del modelo numérico.

$R_m(m)$	$H_m(m)$	$L_a(m)$	$L_e(m)$
0.945	0.219	0.164	0.00652

El subíndice m *significa modelo.

Fluent 14.5 cuenta con 3 modelos multifásicos llamados: *VOF*, *Mixture* y *Eulerian*. Cada uno de los modelos se evaluó en un sistema bifásico agua-aire (para optimizar el tiempo de cálculo) para ver cuál reflejaba de mejor manera el flujo del fluido del sistema.

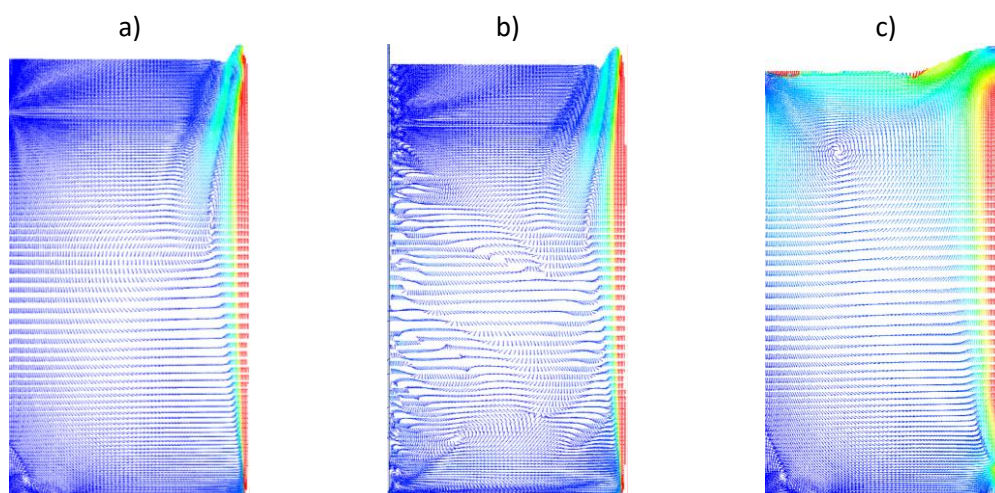


Figura 21 Patrones de flujo de simulación numérica en Fluent 14.5. Modelo a) VOF, b) Mixture, c) Eulerian.

Los resultados pueden verse en la Figura 21. Se determinó que el modelo *Eulerian* muestra un patrón de flujo más acorde con el resultado del modelo físico (Ver Figura 16). Este modelo tiene

la característica de resolver por separado las ecuaciones de conservación para cada una de las fases presentes en el sistema y permite el intercambio de momentum, calor y masa entre las fases. Además, es el único modelo multifásico que permite el transporte de especies entre las fases del sistema.

Cuando la inyección de gas inicia en el sistema, las burbujas de aire ascienden a la superficie libre intercambiando momentum con el líquido adyacente, lo cual, genera arrastre del líquido y, por ende, se produce recirculación. Para este intercambio de momentum entre la fase gaseosa y líquida Fluent 14.5 proporciona diferentes modelos de arrastre llamados: *Schiller-Naumann*(90), *Morsi Alexander*(91), *Symmetric*(92), *Universal Drag*(93), *Grace*(94) y *Tomiyama*(95). Cada uno de los modelos se evaluó utilizando un sistema bifásico (agua-aire) y los resultados pueden verse en la Figura 22. De los resultados obtenidos, el modelo *Schiller-Naumann* y *Symmetric* son los que más se asemejan a la forma de una burbuja; sin embargo, el modelo *Symmetric* muestra más clara la forma de una burbuja, y representa de mejor manera la fase gas en la fase de agua de acuerdo a la Figura 17 a) (apartado de Modelo físico), mientras que los modelos restantes se asemejan más a un jet de aire.

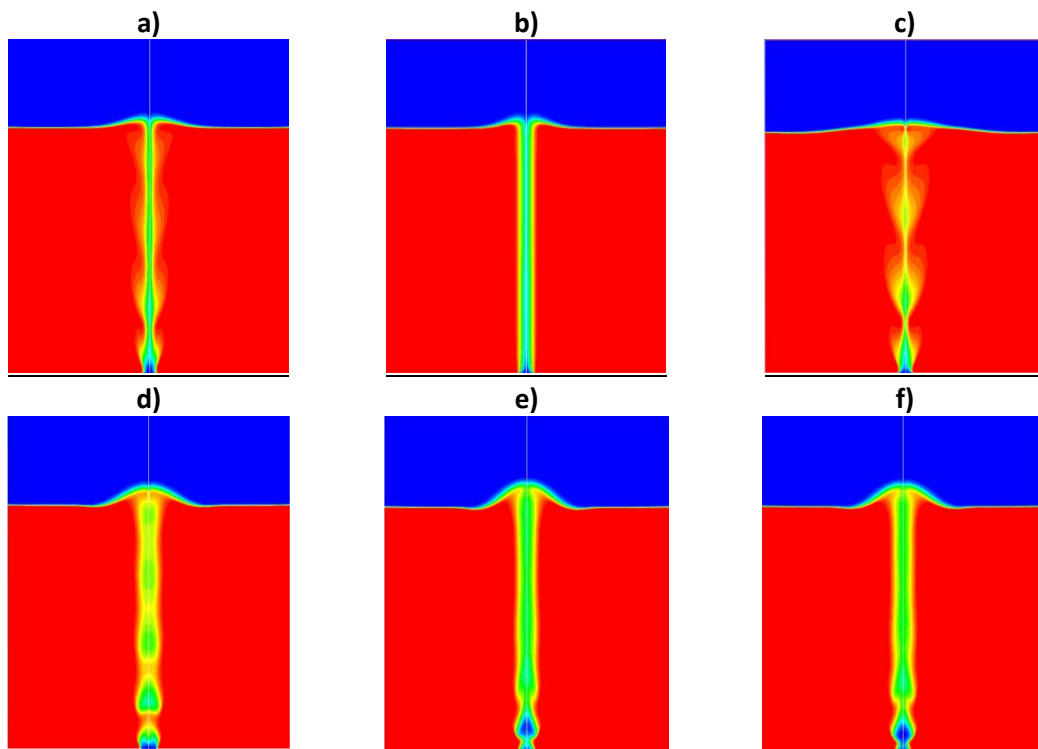


Figura 22 Resultados de los modelos del "Coeficiente de Arrastre" mediante simulación numérica en Fluent 14.5. a) *Schiller-Naumann*, b) *Morsi Alexander*, c) *Symmetric*, d) *Universal Drag*, e) *Grace* y f) *Tomiyama*.

Después de un análisis previo, se construyó un modelo numérico aplicando las ecuaciones gobernantes y condiciones iniciales y de frontera apropiadas para el estudio de la fluidodinámica y transferencia de masa en un marco de referencia Euleriano-Euleriano en un sistema bifásico y trifásico utilizando el software comercial CFD (Computational Fluid Dynamics) ANSYS Fluent 14.5.

Se consideraron 3 sistemas 2D, uno bifásico agua-aire (que resuelve 8 ecuaciones, momentum para cada fase, continuidad para cada fase, y k-epsilon) y uno trifásico agua-aceite-aire (que resuelve 10 ecuaciones, momentum para cada fase, continuidad para cada fase, y k-epsilon)

para el estudio de la fluidodinámica. Los esquemas de los sistemas bifásico y trifásico pueden verse en las Figuras 23 a) y 23 b), respectivamente. Una vez que la fluidodinámica de estos dos modelos se validó contra los resultados del modelo físico, se modeló la transferencia de masa en el sistema trifásico (que resuelve 11 ecuaciones, momentum para cada fase, continuidad para cada fase, k - ϵ y la transferencia de especies químicas) considerando la solución agua-timol y las fases de aceite de silicón y aire.

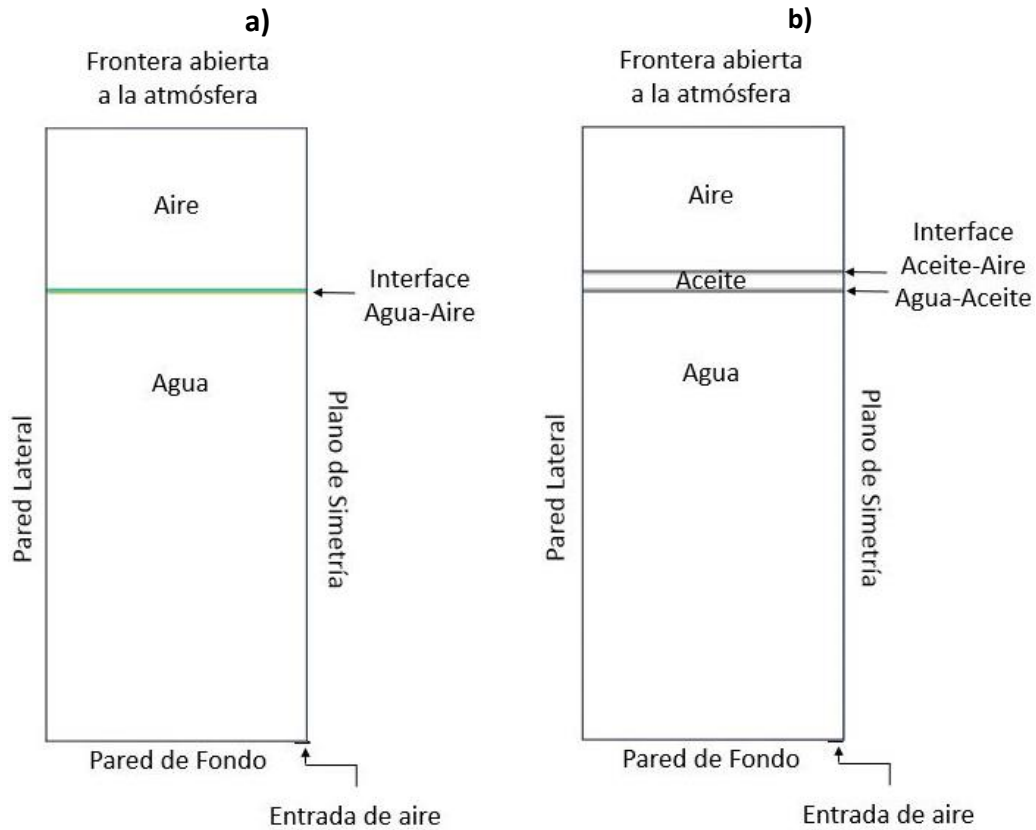


Figura 23 Esquema del dominio en 2D de la olla agitada con gas, sistema bifásico a) y sistema trifásico b).

Debido a que las ecuaciones que describen los sistemas físicos con frecuencia son muy complejos, todo modelo numérico debe hacer consideraciones o suposiciones para simplificar la complejidad matemática del mismo y hacer más sencilla su resolución numérica pero sin perder realismo. El modelo se desarrolló bajo las siguientes suposiciones

2.7.1. Suposiciones

- La olla agitada con gas por el centro es axialmente simétrica, por lo tanto, las ecuaciones gobernantes pueden ser escritas y resueltas en dos dimensiones.
- Las variables dentro del sistema dependen del tiempo.
- Las propiedades físicas del agua, del aire y del aceite son constantes.
- El sistema sólo permite la salida de aire por la superficie.
- Un coeficiente de arrastre es utilizado para describir la fuerza de arrastre entre las fases aire-agua-aceite.
- Se asume que la fase gaseosa presenta forma esférica y radio constante.

- g) El soluto se intercambia entre las fases agua y aceite y la rapidez está controlada por transporte de masa y el equilibrio termodinámico se establece instantáneamente.
- h) El sistema es isotérmico.
- i) Se considera el soluto y el agua una solución homogénea en todo el dominio de la fase acuosa inicialmente.

2.7.2. Ecuaciones Gobernantes

En la elaboración de cualquier modelo numérico se deben identificar los fenómenos que ocurren en el sistema de estudio y aplicar las ecuaciones que describen dichos fenómenos, por lo que para este sistema se utiliza un marco de referencia Euleriano-Euleriano bifásico y en el caso de nuestra propuesta un modelo Euleriano-Euleriano trifásico, donde se debe contemplar las siguientes ecuaciones gobernantes:

- Conservación de Continuidad para cada fase.
- Conservación de flujo de Momentum o de cantidad de movimiento para cada fase.
- Conservación de Especies Químicas.
- Modelo de Turbulencia $k - \varepsilon$ sólo aplicable a las fases líquidas.

2.7.2.1. Ecuación de fracción de volumen

El volumen de la fase q , V_q está definido por

$$V_q = \int_V \alpha_q dV \quad (10)$$

donde α_q representa la fracción de volumen de la fase q , donde

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (11)$$

La densidad efectiva de la fase q esta dada por

$$\hat{\rho}_q = \alpha_q \rho_q \quad (12)$$

donde ρ_q es la densidad física de la fase q .

2.7.2.2. Ecuación de conservación de masa

La ecuación de continuidad para la fase q es,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = \sum_{p=1}^n (\dot{m}_{pq} - \dot{m}_{qp}) \quad (13)$$

donde \vec{v}_q es la velocidad de la fase q , \dot{m}_{pq} caracteriza la transferencia de masa de la $p^{\text{ésima}}$ fase a la $q^{\text{ésima}}$ fase, y \dot{m}_{qp} caracteriza la transferencia de masa de la $q^{\text{ésima}}$ a la $p^{\text{ésima}}$ fase. En este

cálculo, no entra ni sale masa de una fase a la otra en ningún caso por lo que el término del lado derecho de la ecuación (9) es cero.

2.7.2.3. Ecuación de conservación de momentum

La ecuación de momentum para la fase q es

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) \\ = -\alpha_q \nabla p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \vec{g} + \sum_{p=1}^n (\vec{R}_{pq} + \dot{m}_{pq} \vec{v}_{pq} - \dot{m}_{qp} \vec{v}_{qp}) \end{aligned} \quad (14)$$

donde $\bar{\tau}_q$ es el tensor de esfuerzo cortante de la q^{ésima} fase, \vec{F}_q es una fuerza de cuerpo (gravitacional o boyante), \vec{v}_{pq} es la velocidad en la interfase, p es la presión compartida por todas las fases y \vec{R}_{pq} es una fuerza de interacción entre fases, la cual está relacionada con el coeficiente de arrastre entre las fases, y es calculado como

$$\sum_{p=1}^n \vec{R}_{pq} = \sum_{p=1}^n K_{pq} (\vec{v}_p - \vec{v}_q) \quad (15)$$

Donde K_{pq} es el coeficiente de intercambio de momentum y \vec{v}_p y \vec{v}_q son las velocidades de las fases.

Cuando se tiene un flujo turbulento la velocidad instantánea está definida como la suma de una velocidad media y una fluctuación de la velocidad; ésta suma modifica las ecuaciones diferenciales. Típicamente, las ecuaciones de continuidad y de movimiento se promedian en el tiempo antes de resolverse.

$$\vec{v} = \bar{v} + v' \quad (16)$$

donde \vec{v} es la velocidad instantánea, \bar{v} es la velocidad promedio y v' es la velocidad fluctuante.

2.7.2.4. Ecuación de transporte de especies

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_j) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_j) = -\nabla \cdot \vec{J}_j + R_j \quad (17)$$

donde Y_j es la fracción de masa local de cada especie j y R_j es la velocidad neta de producción de especies j mediante reacción química.

\vec{J}_j es el flujo de difusión de la especie j que surge debido a gradientes de concentración y se calcula como

$$\vec{J}_j = - \left(\rho D_{j,mez} + \frac{\mu_t}{S_{ct}} \right) \nabla Y_j \quad (18)$$

donde $D_{j,mez}$ es el coeficiente de difusión para las especies j en la mezcla y Sc_t es el número de Schmidt en flujo turbulento y se calcula como

$$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t} \quad (19)$$

donde μ_t es la viscosidad turbulenta y D_t es la difusividad turbulenta. En este cálculo se usó un número de Schmidt igual a uno que es la práctica común.

2.7.2.5. Ecuaciones de transporte para el modelo de turbulencia estándar $k - \varepsilon$ (Modelo de dispersión turbulenta)

La energía cinética turbulenta k , y su rapidez de disipación ε , son obtenidas de las siguientes ecuaciones de conservación para la energía cinética turbulenta de la fase q , k_q , y la rapidez de disipación de energía cinética turbulenta de la fase q , ε_q , respectivamente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q k_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q k_q) \\ = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_k} \right) \nabla k_q \right) + \alpha_q G_{k,q} - \alpha_q \rho_q \varepsilon_q + \alpha_q \rho_q \Pi_{k_q} \end{aligned} \quad (20)$$

Y

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q \varepsilon_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{U}_q \varepsilon_q) \\ = \nabla \cdot \left(\alpha_q \left(\mu_q + \frac{\mu_{t,q}}{\sigma_\varepsilon} \right) \nabla \varepsilon_q \right) + \alpha_q \frac{\varepsilon_q}{k_q} (C_{1\varepsilon} G_{k,q} - C_{2\varepsilon} \rho_q \varepsilon_q) \\ + \alpha_q \rho_q \Pi_{\varepsilon_q} \end{aligned} \quad (21)$$

donde, \vec{U}_q es la velocidad promedio de la fase, $G_{k,q}$ representa la generación de la energía cinética turbulenta debido a los gradientes de velocidad promedio, $\mu_{t,q}$ es la viscosidad turbulenta, que escrita en términos de la energía cinética turbulenta de la fase q es expresada como

$$\mu_{t,q} = \rho_q C_\mu \frac{k_q^2}{\varepsilon_q} \quad (22)$$

donde ε_q es la rapidez de disipación y $C_\mu = 0.09$.

Los términos Π_{k_q} y Π_{ε_q} son términos fuente que pueden ser incluidos para modelar la influencia de las fases dispersas en la fase continua. $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ y $C_{3\varepsilon}$ son constantes del modelo, y σ_k y σ_ε son los número de Prandtl para k y ε respectivamente. Las constantes del modelo $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$ y $C_{3\varepsilon}$ tienen los siguientes valores, $C_{1\varepsilon} = 1.44$, $C_{2\varepsilon} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$.

2.8. Condiciones iniciales y de frontera

2.8.1. Condiciones de Frontera

La Figura 24 muestra la geometría y la malla del modelo de la olla que representa el dominio de solución en dos dimensiones y que muestra de manera esquemática las fronteras de la olla considerando la simetría angular y la radial, por lo que solo un plano r-z es considerado, el cual parte desde el centro hasta la pared lateral y desde el fondo de la olla hasta la atmósfera gaseosa.

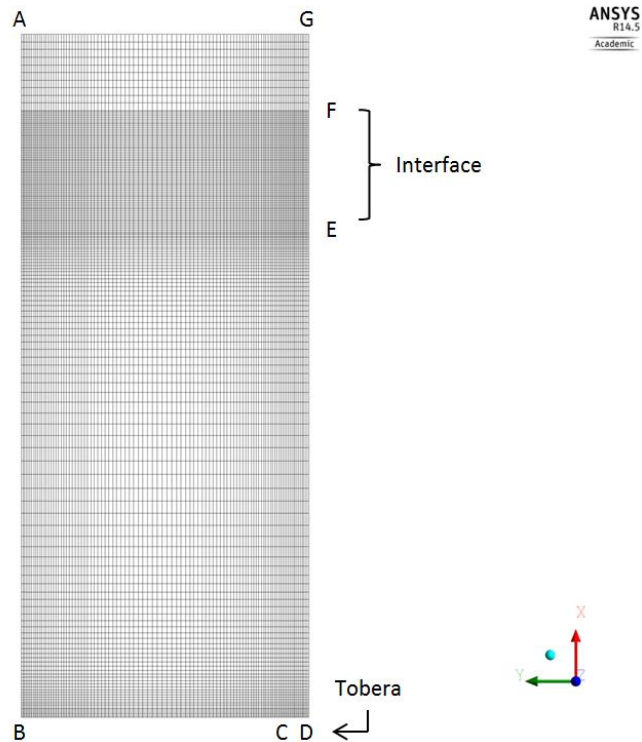


Figura 24 Geometría y malla de la olla agitada con gas.

1. Paredes.- La pared lateral de la olla AB y el fondo de la olla BC son paredes sólidas impermeables (no hay flujo de material) con condición de no deslizamiento, esto implica que las componentes de velocidad paralelas y perpendiculares a cada pared sean cero, la frontera es laminar porque su Reynolds local es cero, por lo que la conexión del núcleo turbulento a la región laminar adyacente a la pared se logra con la función pared estándar.
2. Plano de simetría.- El eje de simetría DG, representa el eje axisimétrico. La velocidad radial en el eje es cero y el flujo de todas las cantidades a través del eje es cero. Ni el líquido ni el gas tienen permitido atravesar este plano.
3. Superficie libre.- Esta frontera está en la parte superior del sistema y está abierta a la atmósfera, donde sólo la fase gaseosa tiene permitido abandonar el sistema. En la simulación se especifica una presión estática, que para este caso en particular, es de 101325 Pa.
4. Interfase.- La zona de la interfase EF es la interfase agua-aceite donde se da principalmente el transporte de masa. Y la interfase aceite-aire.

5. Entrada de aire.- La tobera CD inyecta gas solamente en dirección perpendicular a la entrada. El gas es inyectado constantemente dentro del dominio a un flujo de 2.85 l/min. Los parámetros turbulentos k y ε se determinan con el método de Intensidad Turbulenta (%) y Diámetro Hidráulico (m), calculados como:
- Porcentaje de intensidad turbulenta:

$$I = 0.16(Re)^{-\frac{1}{8}} * 100 \quad (23)$$

donde, I es la intensidad turbulenta y (Re) es el número de Reynolds el cual se define como

$$Re = \frac{\rho v_s D}{\mu} \quad (24)$$

donde ρ es la densidad del fluido, v_s velocidad característica del fluido, D diámetro de la tubería por la cual circula el fluido o longitud característica del sistema y μ viscosidad dinámica del fluido.

- Diámetro Hidráulico

$$D_h = \frac{4 \text{ Área}}{\text{Perímetro}} \quad (25)$$

2.8.2. Condiciones Iniciales para el cálculo de fluidodinámica y turbulencia

Las condiciones iniciales para el estudio de la fluidodinámica y turbulencia implican dos sistemas estáticos con diferentes estructuras en capas. En el primero, el agua está presente en la parte inferior, seguida por una capa de aire para el sistema bifásico; en el segundo, el agua está presente en la parte inferior, seguida por una capa de aceite de 0.0066 m de espesor en la parte superior del agua y, finalmente, en la parte superior del aceite, una capa de aire para el sistema trifásico como se puede observar en la Figura 23. Lo anterior implica que las componentes de la velocidad y parámetros turbulentos inician con valores de cero en todo el dominio. El sistema es isotérmico a 25° C para simular el modelo físico con el que se validó el modelo numérico.

2.8.3. Condiciones iniciales para el cálculo de transferencia de masa

El estudio de transferencia de masa se realiza una vez que el sistema agua-aceite-aire ha establecido un patrón de flujo *quasiestable* en la fluidodinámica del sistema, es decir, la recirculación y las velocidades en el líquido se mantienen constantes con el tiempo. Con el fin de optimizar el tiempo de cómputo las ecuaciones de continuidad, de conservación de momentum, así como el modelo de turbulencia k - ε dejan de resolverse y únicamente se resuelve la ecuación de conservación de especies químicas en estado transitorio, permitiendo que las especies químicas se transporten por convección y por difusión turbulenta con la turbulencia y la convección calculada en la solución de la fluido dinámica ya comentada.

La condición inicial para este cálculo inicia con una solución homogénea entre el soluto y la fase de agua con una concentración de 125 ppm de timol, y una concentración inicial en la fase de aceite de 0 ppm de timol.

2.9. Solución numérica

Debido a la complejidad que representa resolver el sistema de ecuaciones diferenciales parciales del modelo numérico, se utiliza un código CFD como herramienta para obtener las soluciones numéricas del sistema. EL CFD “ANSYS Fluent 14.5” fue utilizado para resolver las ecuaciones gobernantes sujetas a las condiciones de frontera e iniciales mencionadas anteriormente en este mismo capítulo.

La malla mostrada en la Figura 24 es el resultado de un estudio de sensibilidad de la malla. La sensibilidad de la malla consiste en generar mallas con diferente número de elementos e ir comparando una variable entre una malla y una más fina. Se fue refinando la malla desde 1600 hasta 17100 nodos, hasta obtener convergencia y no presentar una diferencia significativa (diferencia menos 5%) en el campo de patrón de velocidades (variable a comparar).

La malla final tiene 17100 nodos. Se realizó una refinación de la malla en las interfaces líquido-líquido y líquido-gas para resolver con mejor seguimiento a la deformación de la superficie y evitar difusión numérica; sin embargo, no se puede hacer uso excesivo de los elementos finos debido a que se incrementa el tiempo de cálculo computacional.

La solución numérica para el estudio de la fluidodinámica y de turbulencia para los casos bifásico y trifásico se desarrolló en forma transitoria usando un paso de tiempo de 1×10^{-4} . Cada simulación tomó 15 segundos de tiempo real para llegar a un estado *quasiestable* y cada cálculo duró alrededor de 4 días de tiempo de computadora para converger a la solución final. Una vez convergida la solución, alcanzando un estado *quasiestable* en el sistema trifásico (agua-aceite-aire) se realizó el cálculo de transferencia de masa usando un paso de tiempo de 1 segundo, tomando un tiempo de 9000 segundos, desactivando la solución de las ecuaciones de continuidad, momentum y el modelo de turbulencia $k - \varepsilon$ para optimizar el tiempo del cálculo, durando alrededor de un día para obtener la curva de eliminación de soluto del agua (acero) y llevarlo a la fase aceite (escoria). Para resolver los tres cálculos se utilizó una computadora con un procesador Intel(R) Core(TM) i7-2600 CPU con una velocidad de reloj de 3.4 GHz y con 8 GB de RAM.

3. Resultados y Discusión

3.1. Patrones de Flujo

La Figura 25 presenta comparaciones de los patrones de flujo del líquido (agua) de los experimentos realizados sin capa de aceite (en la parte superior de la figura 1) y 2)) y con capa de aceite (en la parte inferior, 3) y 4)) con un flujo de 2.85 L/min de gas, medidos por medio de Velocimetría de Imágenes por Partículas (PIV por sus siglas en inglés, imágenes de la izquierda) y con Dinámica de Fluidos Computacional (CFD por sus siglas en inglés, imágenes de la derecha).

Cada imagen presenta 4 líneas horizontales a distintas alturas del fondo de la olla, 4 cm (a y a'), 8 cm (b y b'), 12 cm (c y c') y 16 cm (d y d'), de donde se compararon los perfiles radiales de las velocidades axiales y radiales predichos con el modelo numérico y medidos en el modelo físico para propósitos de validación del modelo numérico.

En las imágenes 1 y 2 (sin capa de aceite) y 3 y 4 (con capa de aceite) se puede apreciar que las velocidades de mayor magnitud se encuentran en la parte central de la olla, promovidas por el arrastre que ejercen las burbujas de aire en el seno líquido en la zona de la pluma de gas. El aire que es inyectado por el fondo de la olla forma una región de dos fases (burbujas de aire y agua) conocida como "pluma de gas", la cual produce un patrón circulatorio en el seno líquido, en el cual se desarrolla un movimiento recirculatorio conocido como toroide (cerca de la línea c).

Aquí, el líquido sube verticalmente por el arrastre de las burbujas que asciende por fuerzas boyantes en el centro de la olla, llega a la superficie libre y al no poder salir del sistema deforma la interfase líquido-atmósfera, siendo esta deformación conocida como *spout*. El fluido se mueve radialmente sobre la superficie libre desde el centro hasta la pared lateral y baja por la pared, regresando a la pluma y completando un circuito de recirculación cuyo centro del patrón recirculatorio se encuentra cerca de la pared lateral sobre la línea horizontal (c) sin escoria tanto para las simulaciones como los experimentos y un poco arriba de esa línea (c) con escoria.

Aunque los patrones de flujo son muy parecidos entre los calculados y los medidos con y sin presencia de escoria, se puede apreciar que la capa de aceite produce una disminución en las velocidades en todo el dominio de la olla a diferencia de cuando no está dicha capa de aceite.

También se aprecia que la presencia de escoria provoca que el movimiento radial de fluido sea menos intensa sobre la superficie libre y que el ojo del toroide de recirculación esté más arriba que cuando no hay escoria y además que el *spout* sea menos pronunciado. Esto último se puede ver mejor en la Figura 26, en donde se muestran las fracciones de cada fase con colores (Aceite-Rojo, Agua-Azul, Aire-Blanco) predichas con el modelo numérico, indicando el dominio del acero, la escoria y el gas y en donde se observa que el aceite se abre en la superficie libre y el agua queda expuesta a la atmósfera (acero expuesto), lo que constituye un aspecto indeseable a nivel industrial porque el acero expuesto a la atmósfera pierde calor por radiación y absorbe oxígeno del aire.

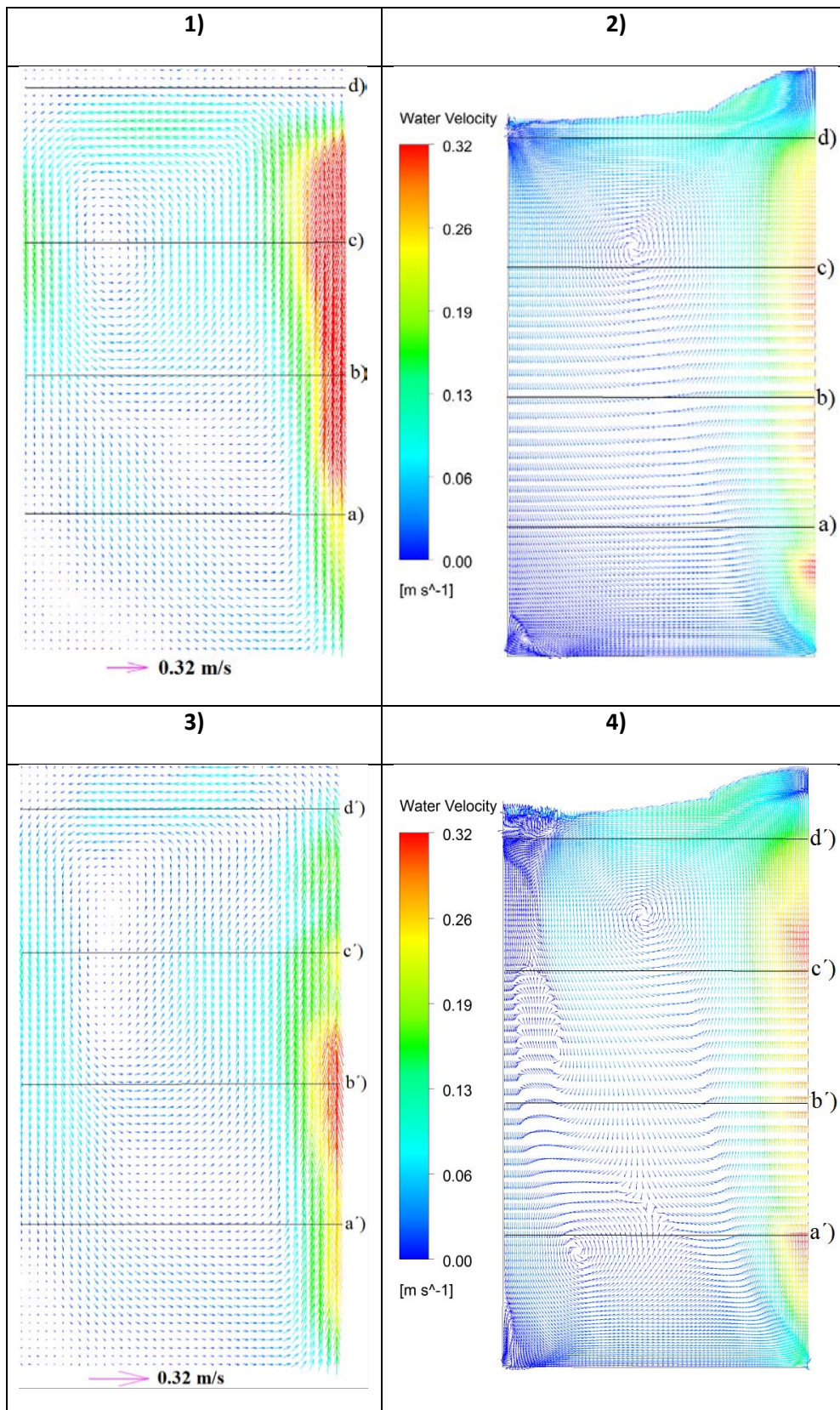


Figura 25 Comparación del patrón de flujo del líquido (agua) entre el experimento realizado sin capa de aceite (1 y 2) y con capa de aceite (3 y 4) medidos con PIV (imágenes de la izquierda) y CFD (imágenes de la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.

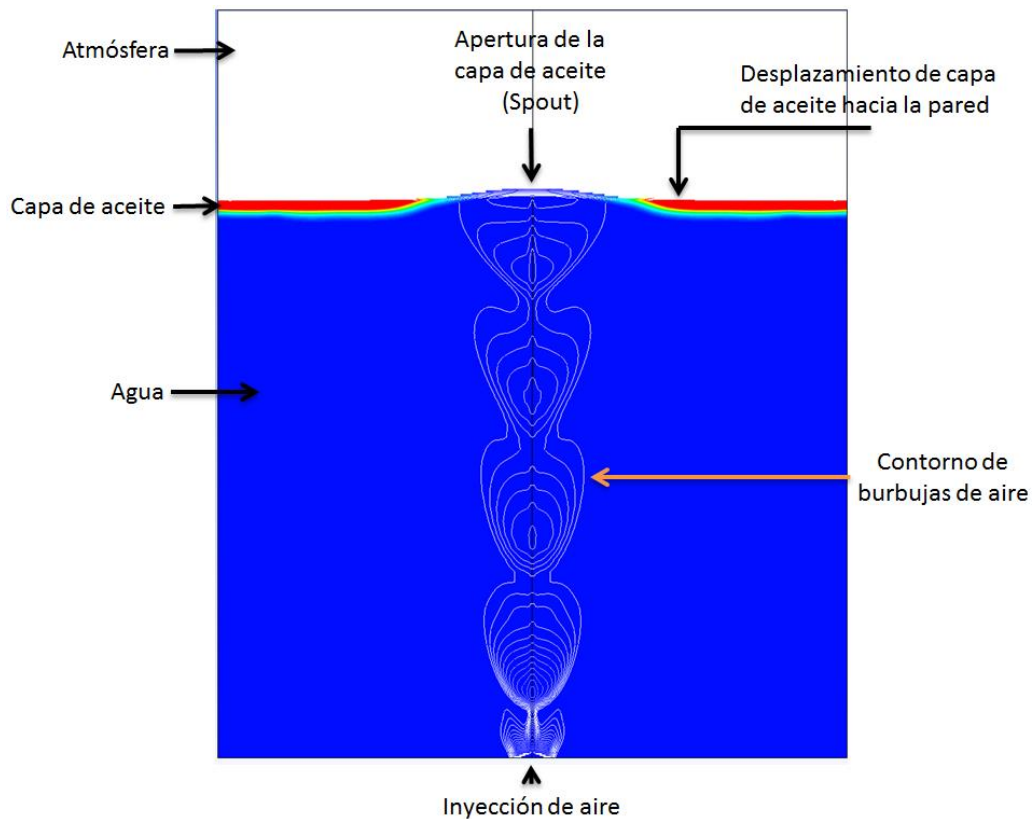


Figura 26 Apertura de la capa de aceite debido al escape de las burbujas de aire.

3.2. Perfiles de velocidad

3.2.1. Perfiles de velocidad Axial

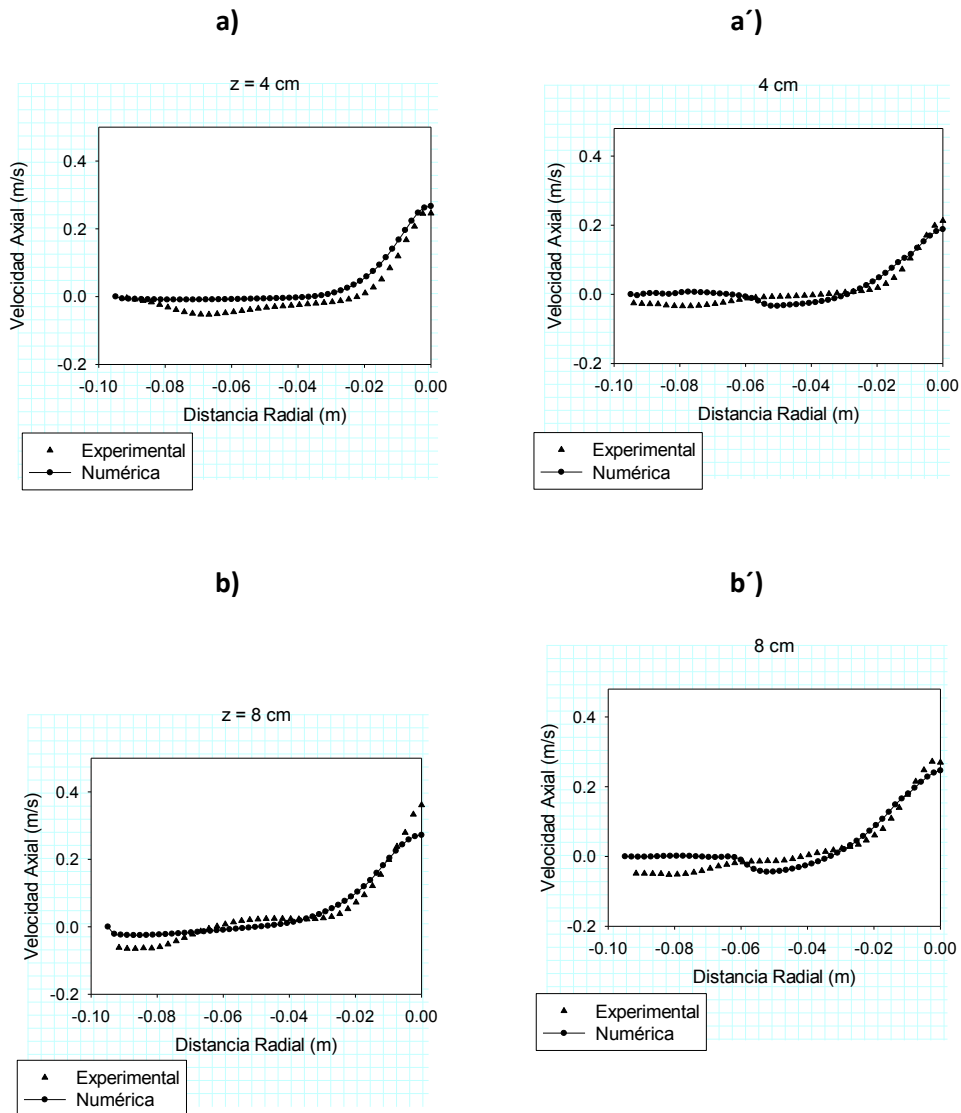
La Figura 27 presenta gráficas de perfiles radiales de velocidad axial del líquido (agua), comparando los perfiles calculados con el modelo numérico CFD (círculos) con las mediciones hechas con PIV (triángulos). Se presentan perfiles radiales de la velocidad axial del líquido a distintas alturas del fondo de la olla (líneas horizontales de las imágenes de la Figura 25), de 4 cm (a y a'), de 8 cm (b y b'), de 12 cm (c y c') y de 16 cm (d y d') de los experimentos realizados sin capa de aceite (a la izquierda) y con capa de aceite (a la derecha con letras primas).

En general, se observa buena concordancia entre predicciones numéricas y mediciones experimentales para todas las alturas, tanto con capa de aceite como sin ella, lo que indica que el modelo predice razonablemente bien la fluidodinámica real del modelo bifásico, y constituye la validación exitosa del modelo numérico. A la altura axial de 4, 8 y 12 cm (a, a', b, b', c, c') se aprecian las velocidades axiales de mayor magnitud por el centro, promovidas por la pluma de gas y van disminuyendo conforme se acercan a la pared. Es conocido que las ollas agitadas con gas por el centro tienen una tendencia en su distribución de velocidad axial similar a una curva gaussiana. A estas mismas alturas 4, 8 y 12 cm (a, a', b, b', c, c'), las mediciones experimentales muestran velocidades axiales ligeramente más negativas cerca de la pared de la olla, a diferencia de las simulaciones que muestran velocidades axiales cercanas a cero y que representan una pequeña discrepancia entre las mediciones y las simulaciones.

Se nota claramente que la mayor discrepancia entre las curvas la presentan las gráficas c) y c'), lo que puede explicarse mediante la observación del patrón de flujo, donde se aprecia que la línea de donde se toman las velocidades axiales atraviesan diferentes puntos del toroide.

Finalmente, a 16 cm del fondo (muy cerca de la superficie libre), la velocidad axial es casi cero por la cercanía con la superficie libre excepto cerca de la pared donde se aprecian, tanto en las simulaciones como en las mediciones, velocidades axiales del líquido ligeramente positivas cerca de la pared.

En las gráficas donde se comparan las curvas del experimento con aceite, podemos notar que las velocidades medidas cerca de la pared de la olla medidas con CFD, tienden a cero, debido a que el *spout* formado en la capa de aceite, hace que la fase de aceite se desplace hacia las paredes y estas medidas son sobre la fase de aceite y no sobre la fase acuosa.



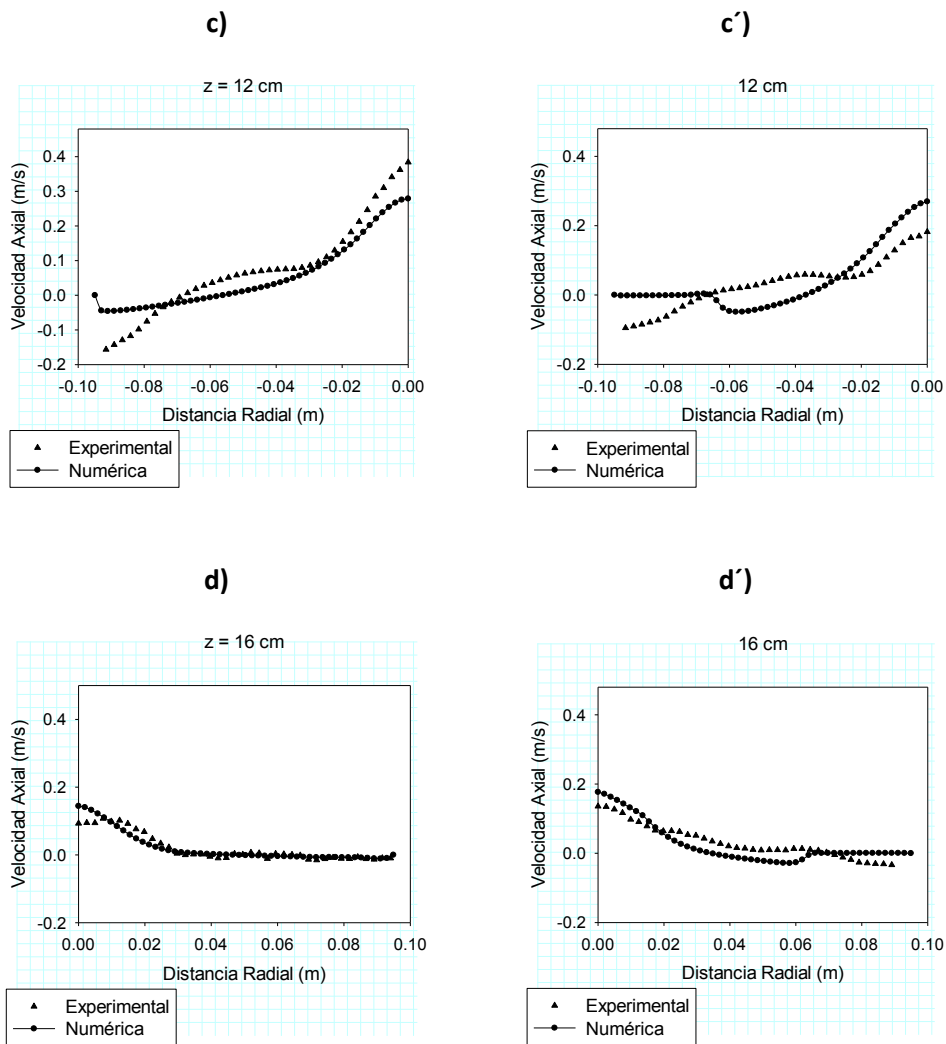


Figura 27 Perfiles radiales de velocidad axial del líquido (agua) a diferentes alturas del fondo 4 cm (a) y a'), 8 cm (b) y b'), 12 cm (c) y c') y 16 cm (d) y d') sin capa de aceite (a la izquierda) y con capa de aceite (a la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.

Pese a pequeñas diferencias, se puede afirmar la muy buena concordancia entre las mediciones físicas obtenidas y las simulaciones numéricas, lo cual indica que el modelo numérico representa de manera realista y describe las características esenciales de la fluidodinámica del sistema.

3.2.2. Perfiles de Velocidad Radial

La Figura 28 presenta gráficas de perfiles radiales de velocidad del líquido (agua), comparando los perfiles calculados con el modelo numérico CFD (círculos) con las mediciones hechas por PIV (triángulos). Se presentan perfiles de la componente radial de velocidad del líquido a distintas alturas del fondo de la olla: a 4 cm (a y a'), a 8 cm (b y b'), a 12 cm (c y c') y a 16 cm (d y d') de los experimentos realizados sin capa de aceite (a la izquierda) y con capa de aceite (a la derecha con letras primas).

Esta componente de la velocidad no es relevante en la olla y sobretodo en la región de la pluma, donde el arrastre del gas es axial debido al movimiento vertical promovido por la fuerza boyante. Sin embargo, en la superficie libre esta componente es importante y consecuentemente, se

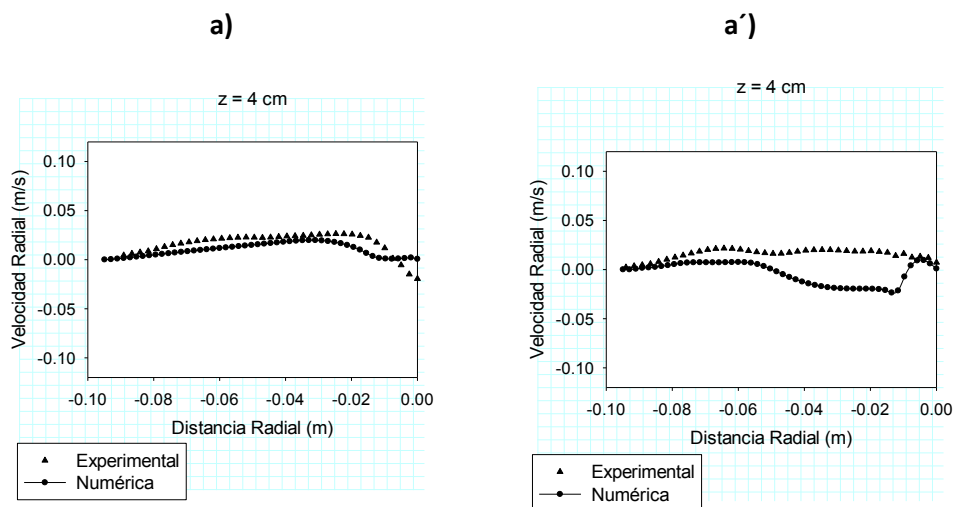
puede observar que en cada curva de distribución de velocidad radial, los valores medidos son mucho más pequeños comparados con los de velocidad axial.

Las gráficas a 4 y 12 cm (a y a', c y c') muestran una tendencia similar, cerca del eje de simetría (radio cero) muestran velocidades negativas y conforme empiezan a acercarse a la pared de la olla, se muestran velocidades positivas, lo cual concuerda con el sentido del movimiento circulatorio generado en el seno líquido por la pluma de gas, las velocidades medidas en dirección de la pared son negativas y en dirección a la pluma son positivas.

La mayor discrepancia la presentan las gráficas a 8 cm (b y b'), lo que puede explicarse mediante la observación del patrón de flujo (Ver Figura 25), donde se aprecia que la línea de donde se toman las velocidades radiales, ya que los vectores del modelo físico tiene dirección hacia el eje de simetría, mientras que los vectores del modelo matemático tienen dirección hacia el fondo de la olla.

Finalmente a 16 cm (d y d') (muy cerca de la superficie libre), se notan las velocidades radiales máximas en ambos experimentos, donde se puede apreciar una buena aproximación o representación del movimiento radial predominante y característico de la superficie libre en ollas agitadas con gas inyectado en el centro y por el fondo de la olla.

En las gráficas donde se comparan las curvas del experimento con aceite, podemos notar que las velocidades medidas cerca de la pared de la olla calculadas con CFD, tienden a cero, debido a que el "ojo de la escoria" (apertura en la fase de aceite generada por el aire inyectado) formado en la parte superior de la olla en la capa de aceite, hace que la fase de aceite se desplace hacia las paredes y estas medidas son sobre la fase de aceite y no sobre la fase acuosa. Por lo anterior se puede afirmar la muy buena concordancia entre las mediciones físicas obtenidas y las simulaciones numéricas, lo cual nuevamente indica que el modelo numérico representa de manera realista la fluido dinámica del sistema y está validado en ambas componentes de la velocidad del líquido.



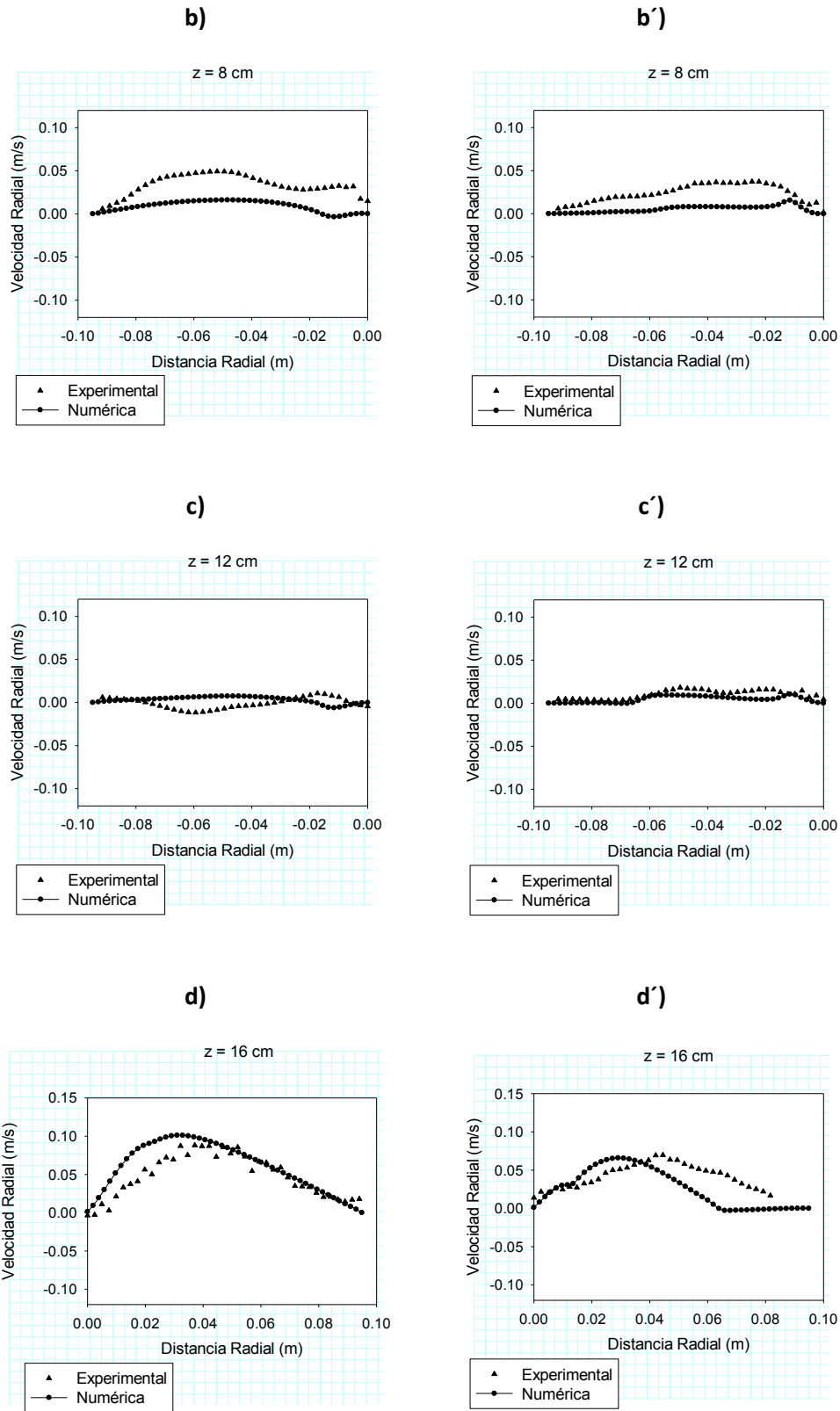
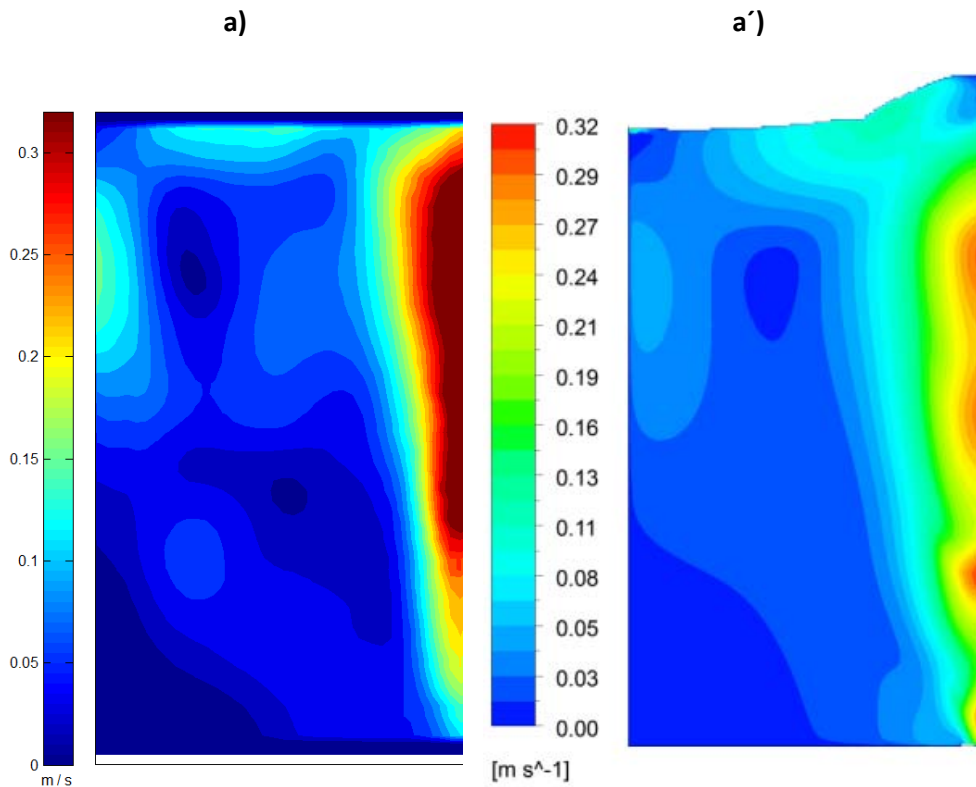


Figura 28 Perfiles radiales de velocidad radial del líquido (agua) a diferentes alturas del fondo de 4 cm (a) y a'), de 8 cm (b) y b'), de 12 cm (c) y c') y de 16 cm (d) y d') sin capa de aceite (a la izquierda) y con capa de aceite (a la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.

3.3. Contornos de velocidad

La Figura 29 presenta la comparación de los patrones de velocidad del líquido (agua) mediante una gráfica de contornos de los experimentos realizados sin capa de aceite (en la parte superior imagen a y a') y con capa de aceite (en la parte inferior imagen b y b') obtenidos con el *software* MATLAB a partir de los resultados experimentales (lado izquierdo) y para comparación se presentan los mismos contornos de la velocidad del líquido predichos con CFD (Fluent 14.5 lado derecho).

Existe buena concordancia en magnitud y en tendencia entre las predicciones del modelo y las mediciones experimentales con y sin aceite. Los contornos de velocidad muestran de manera más clara las zonas de máxima y mínima velocidad en la olla mediante una escala de colores. El contorno de máxima velocidad se puede observar en la región de la pluma, mientras que la de menor velocidad se puede observar en el centro del toroide, como también en la esquina inferior izquierda de la olla (zona muerta). Con capa de aceite, tanto las predicciones como las mediciones muestran una disminución de las magnitudes de las velocidades, lo que se debe a que el aceite viscoso (escoria) fricciona al agua (acero) y lo detiene absorbiendo una parte de la energía de agitación y por lo tanto reduciendo el movimiento o la agitación del agua. También con capa de aceite, en el modelo numérico (inciso b') se observa una zona azul pegada a la pared de la olla (lado izquierdo), la que es ocupada por la fase de aceite debido al desplazamiento que genera la pluma de gas una vez que se desarrolla en la olla generando el "ojo de la escoria".



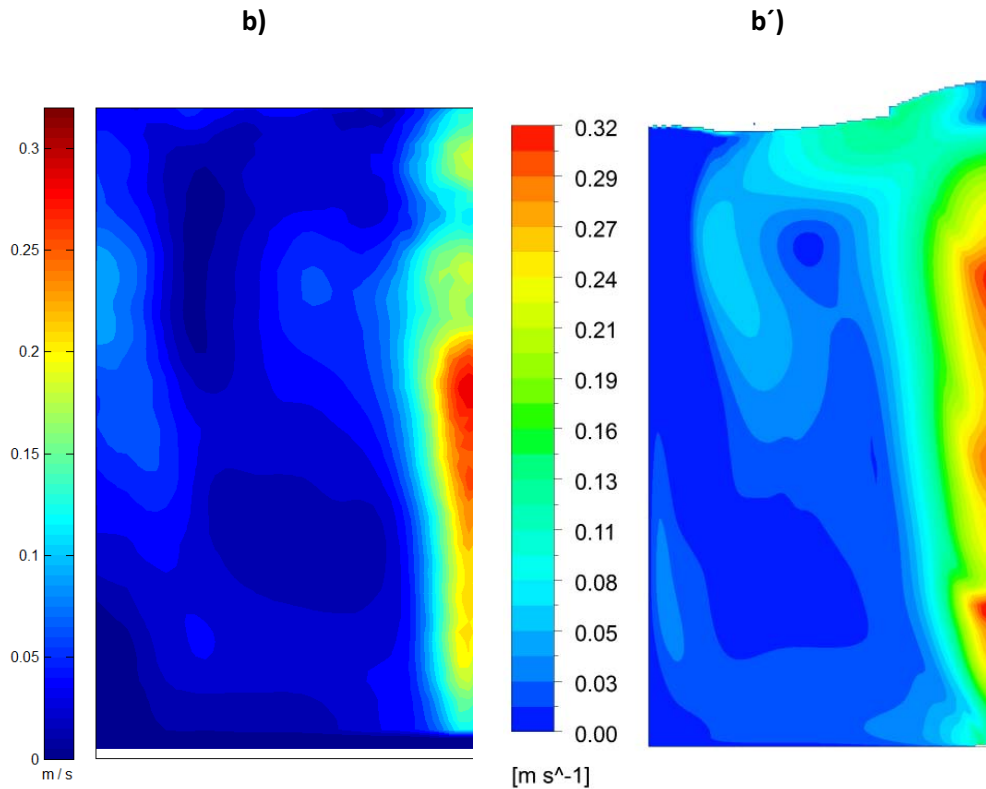


Figura 29 Comparación de contornos de velocidad del líquido (agua) entre el experimento realizado sin capa de aceite (a y a') y con capa de aceite (b y b') obtenidos con MATLAB (imágenes de la izquierda) y CFD (imágenes de la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.

Se observa que el contorno de velocidad del experimento con aceite, el toroide se encuentra más cercano a la pluma de gas debido a que la fase de aceite ocupa un espacio en la zona izquierda de la olla, razón principal por la que el flujo del agua se ve modificado. Sin embargo, hay buena concordancia entre los contornos de velocidad experimentales y numéricos. Quizás el modelo predice un poco más de dispersión de la pluma radialmente que lo que se obtuvo experimentalmente, lo que puede deberse a una sobreestimación de la turbulencia que produce el modelo k-epsilon, por lo que el análisis de la estructura turbulenta se presenta a detalle en la siguiente sección.

3.4. Contornos de energía cinética turbulenta

La Figura 30 presenta la comparación de los contornos de energía cinética turbulenta del líquido (agua) de los experimentos realizados sin capa de aceite (en la parte superior imagen a y a') y con capa de aceite (en la parte inferior imagen b y b') graficados mediante MATLAB (lado izquierdo) y los mismos contornos de energía cinética turbulenta predichos con el modelo numérico CFD (Fluent 14.5 lado derecho).

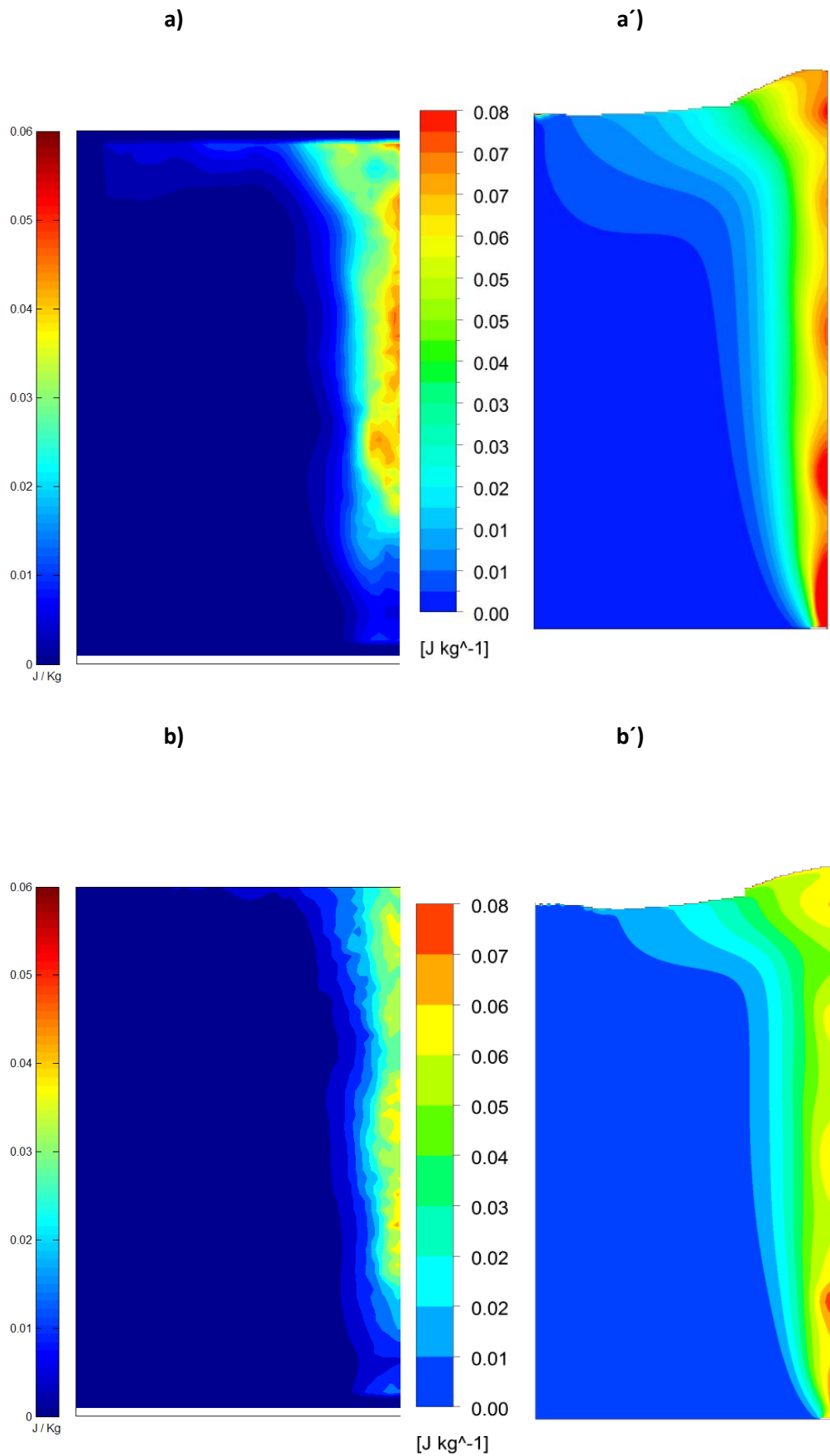


Figura 30 Comparación de contornos de energía cinética turbulenta del líquido (agua) entre el experimento realizado sin capa de aceite (a y a') y con capa de aceite (b y b') obtenidos con MATLAB (imágenes de la izquierda) y predichos con CFD (imágenes de la derecha) a un flujo de 2.85 l/min.

Existe una muy buena concordancia tanto en magnitudes como en tendencias entre los contornos predichos con el modelo y los medidos experimentalmente para la energía cinética turbulenta con y sin escoria. Sin embargo, se confirma que el modelo sí sobreestima la intensidad turbulenta en la pluma y sobretodo en la región del *spout*, cercana a la boquilla y ligeramente sobre la pluma. Esto indica que existe un área de oportunidad en cuanto al modelado de la turbulencia que puede mejorar la predicción. En este sentido se pueden explorar en trabajos futuros el desempeño de otros modelos de turbulencia que pueden refinar la estimación de la fluidodinámica en las regiones cercana a la tobera y a la superficie libre.

Se nota que con capa de aceite se presenta una reducción de la energía cinética turbulenta tanto en las predicciones como en las mediciones, lo que confirma que la presencia de aceite reduce la agitación en el líquido. El sistema disipa energía debido a la deformación y arrastre de la fase de aceite dentro del seno líquido, lo que resulta en una disminución de movimiento en la mayor parte de la fase acuosa. Se puede decir por lo anterior que la presencia de una fase de aceite en el sistema resulta en una clara disminución de energía cinética turbulenta.

3.5. Curvas de transferencia de masa

La Figura 31 muestra curvas de cambios de concentración medidas en función del tiempo a un flujo de 2.85 l/min. Se muestran tres curvas en la gráfica, una experimental con timol (puntos cuadrados aislados), una numérica calculada con el *software* CFD Fluent Ansys 14.5 (puntos de rombos unidos), y una calculada mediante la línea de tendencia de la curva experimental (curva lineal) obtenida ajustando los puntos experimentales a una ecuación de eliminación de la impureza mediante una cinética de primer orden. Además de mostrar la ecuación exponencial del ajuste de la curva experimental, este comportamiento que exhibe la remoción de timol es la de una curva típica de experimentos de eliminación de impurezas con un control por transporte de masa, donde la concentración en el seno líquido de la fase primaria va disminuyendo en función del tiempo debido a que el soluto tiene una mayor afinidad con la fase orgánica. Tanto el experimento físico como matemático parte de una concentración inicial de 125 ppm. Los datos de la curva experimental se muestran en la Tabla 12, obtenidos utilizando las absorbancias medidas de cada muestra, y leyendo la concentración utilizando la curva de calibración.

Tabla 12 Mediciones tiempo vs concentración - Transferencia de masa.

No.	Tiempo(min)	Concentración (ppm)
1	0	121
2	1	118
3	3	125
4	5	120
5	15	107
6	30	102
7	60	80.8
8	90	80.1
9	120	71.7
10	150	65.5

De acuerdo a los resultados obtenidos, se observa que la transferencia de masa en este sistema agua-aceite de silicón-timol, es lento, ya que de la medición 1-5 y de la 6-10 en un tiempo de 30 minutos, en cada intervalo se tiene una disminución de 20-25 ppm. Después de este lapso de tiempo se puede llegar a apreciar un comportamiento asintótico al disminuir en tan solo hora y media de 15 a 18 ppm aproximadamente.

En el perfil obtenido con CFD se obtuvo una buena aproximación utilizando una rapidez de transferencia de masa constante igual a $0.004\text{Kg/m}^3/\text{s}$.

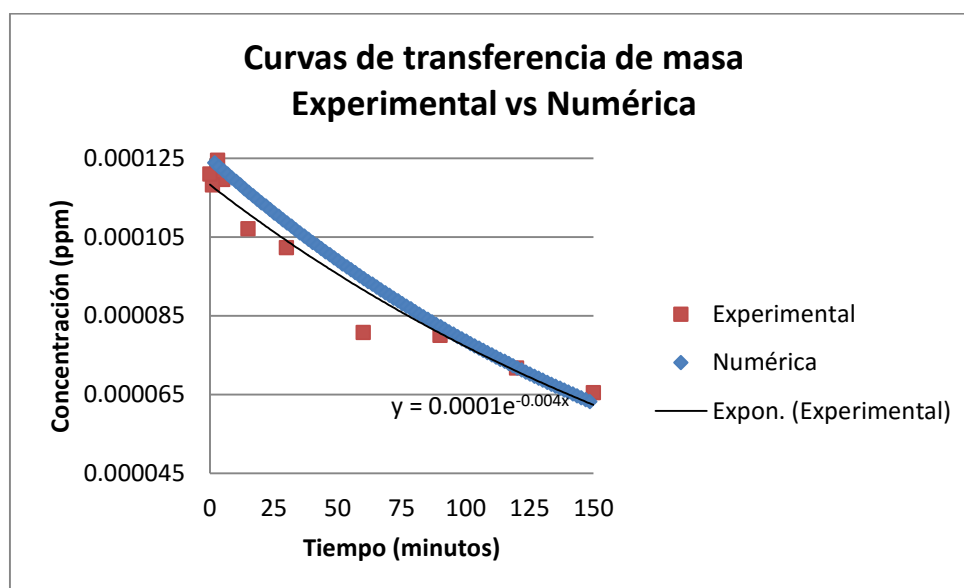


Figura 31 Comparación de la curva de eliminación de timol de agua numérica y experimental con un flujo de 2.85 l/min. Concentración inicial de timol de 125 ppm. Tiempo de eliminación es de 150 min.

3.6. Análisis del proceso

Una vez validado el modelo numérico, se decidió utilizarlo para realizar un análisis del proceso, para determinar cuál de las variables empleadas es la más significativa y su efecto sobre la velocidad del agua en el sistema. Para lo anterior se realizó un diseño experimental 2^2 el cuál se presenta en la Tabla 13 y que contempla el flujo de gas inyectado y la presencia o ausencia de escoria como variables.

Tabla 13 Diseño de experimentos para el análisis del proceso.

Flujo de Gas	Capa de aceite
2.85 L/min	No
2.85 L/min	Si
5.71 L/min	No
5.71 L/min	Sí

El análisis de la varianza para el diseño experimental de la Tabla 13 se realizó utilizando el software Minitab 17, para lo que se consideraron el flujo de gas y la capa de aceite, siendo las

variables de mayor importancia en la velocidad del agua. Los resultados se presentan en la Tabla 14.

Tabla 14 Análisis de varianza para el diseño experimental de la Tabla 13, midiendo el efecto de las variables de flujo de gas y capa de aceite sobre la velocidad promedio del agua.

Factor	Suma de Cuadrados	Grados de Libertad	Cuadrados Medios	Efectos Medios
Capa de Aceite	0.000000	1	0.000000	-0.000655
Flujo de Gas	0.000237	1	0.000237	0.015386
Capa de Aceite*Flujo de Gas	0.000000	1	0.000000	-0.000096

De este análisis de varianza se obtuvo una ecuación de regresión, la cual se puede ver en la Ecuación 25.

$$\begin{aligned}
 \text{Velocidad} = & 0.02964 - 0.000184 \text{ Capa de Aceite} + 0.005380 \text{ Flujo de Gas} \\
 & - 0.000034 \text{ Capa de Aceite} * \text{Flujo de Gas}
 \end{aligned}
 \quad (26)$$

Esta ecuación que resulta del análisis estadístico se validó contra resultados medidos en el modelo numérico mediante una gráfica de barras que se presenta en la Figura 32. Mediante esta gráfica se puede notar que la capa de aceite no tiene un efecto tan significativo en la velocidad promedio del agua; sin embargo, el flujo de gas sí tiene un efecto notable sobre la velocidad promedio del líquido.

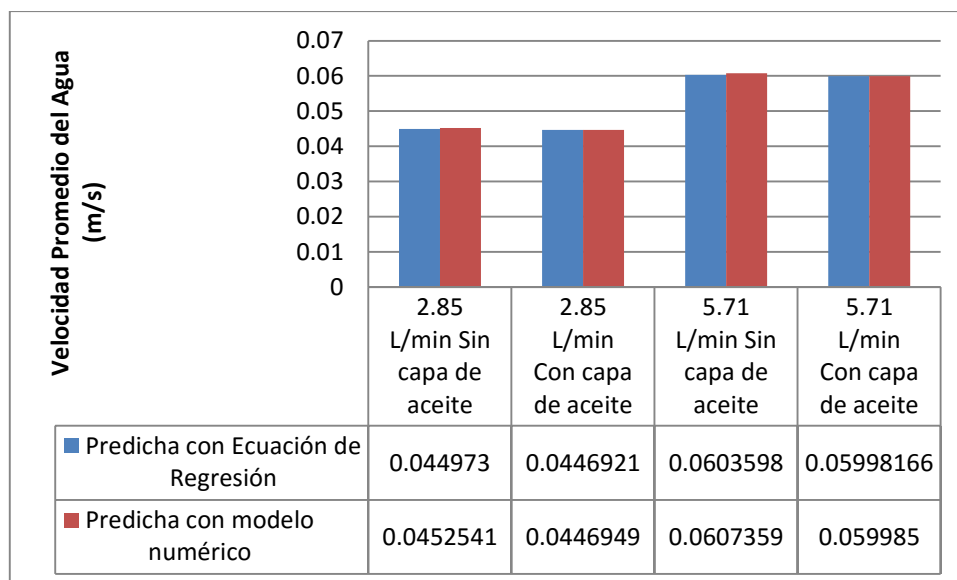


Figura 32 Gráfica de barras que muestra la velocidad promedio obtenida contra cada una de las variables del diseño experimental.

Con la finalidad de mostrar los efectos medios de cada variable sobre la velocidad del agua se realizó la gráfica de la Figura 33, que muestra de manera clara, los efectos que tienen el flujo de gas, la capa de aceite y la combinación de las dos. Se observa que la capa de aceite y la

interacción entre ambas disminuyen la velocidad del agua, mientras que el flujo de gas la incrementa, aunque también se aprecia que el efecto del flujo de gas es mucho más significativo.

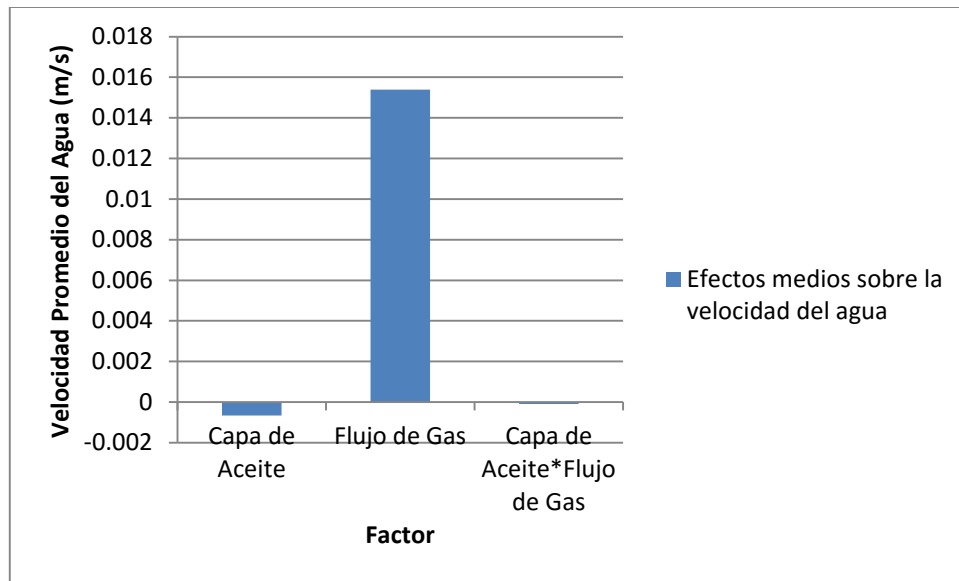


Figura 33 Efectos medios de los factores e interacciones en la velocidad promedio del agua.

Mediante gráficas y resultados estadísticos se puede comentar que la variable más importante en el sistema bajo estudio es el flujo de gas. El aumento en el flujo de gas aumenta la cantidad de burbujas y el arrastre que ejercen sobre el líquido y por lo tanto provocan mayor agitación en el líquido, lo que sin duda es benéfico para acelerar los intercambios metal escoria. No obstante, puede ser que una apertura excesiva del acero y emulsificación excesiva de la escoria que se promueve con un aumento en el flujo de gas sean efectos negativos en la limpieza del acero al aumentar el flujo de gas. Por lo tanto, no es adecuado aumentar en forma indiscriminada el flujo de gas. Por otro lado, y para las condiciones exploradas en este estudio, la capa de escoria reduce ligeramente la agitación del líquido al absorber parte de la energía de agitación que promueve la inyección de gas.

4. Conclusiones

1. Se desarrolló un modelo numérico Euleriano-Euleriano, de una olla agitada con gas por el fondo utilizando el software Fluent 14.5 para simular la fluidodinámica y turbulencia para un sistema bifásico (agua-aire) y trifásico (agua-aire-aceite), además de simular la transferencia de masa para el sistema trifásico. El modelo numérico se validó mediante la comparación de resultados de velocidades axiales y radiales, energía cinética turbulenta y transferencia de masa, con los resultados medidos físicamente utilizando la técnica PIV y las concentraciones medidas mediante UV-Vis, observando una buena concordancia tanto en tendencia como en magnitud.
2. Se ha demostrado mediante contornos de velocidad y turbulencia, que la capa de aceite es relevante si se requiere realizar un estudio adecuado y completo del sistema horno olla, ya que sí existen diferencias notables en estas variables cuando no está dicha fase, y es imprescindible si se quieren estudiar adecuadamente fenómenos de transporte como transferencia de masa, remoción de inclusiones y transporte de energía, entre otros.
3. El modelo de turbulencia estándar k-épsilon incluyó un término extra capaz de reproducir razonablemente la estructura turbulenta medida en el sistema físico; sin embargo, la medición numérica muestra una ligera sobreestimación, por lo que es necesario estudiar cuál de los modelos turbulentos disponibles coincide mejor a las mediciones experimentales.
4. El sistema agua-timol-aceite de silicón utilizado en el estudio de transferencia de masa aunque es factible para modelar la transferencia de una especie química (azufre), no es práctico debido al tiempo que tarda en transportarse a la fase de aceite de silicón.
5. Este modelo numérico puede ser utilizado para estudiar de una manera realista otros fenómenos de interés en el horno olla, como mezclado, transferencia de calor, dinámica de inclusiones, entre otros.
6. De las dos variables flujo de gas y capa de aceite evaluadas en el sistema, se determinó que el flujo de gas, es la variable más significativa sobre la velocidad del agua.

Trabajo Futuro

- Evaluar los diferentes modelos de turbulencia disponibles en el CFD Fluent 14.5 en el modelo numérico del horno olla, para determinar cual resulta en una mejor aproximación contra los resultados medidos en el modelo físico.
- Extender el modelo numérico hecho en este trabajo 2D a sistemas de inyección excéntrica en 3D.
- Estudiar otros fenómenos de transporte de interés en la refinación secundaria como mezclado, eliminación de inclusiones no metálicas, transferencia de masa, transporte de energía entre otros.

5. Referencias Bibliográficas

1. **Institute, American Iron and Steel.** SteelWorks. *SteelWorks*. [En línea] 2015. [Citado el: 15 de Junio de 2015.] <http://www.steel.org/>.
2. *Actual review on secondary metallurgy.* **Fandrich, R., Lüngen, H. B. y Wuppermann, C. D.** 2008, *Revue de Métallurgie*, Vol. 105, págs. 364-374.
3. *Ladle refining and vacuum degassing.* **Kor, G. J. W. y Glaws, P. C.** . Pittsburgh : s.n., 1998, *The Making, Shaping and Treating of Steel*, págs. 661-713.
4. **Holappa, L.** Secondary Steelmaking. *Treatise on Process Metallurgy, Volume 3: Industrial Processes*. s.l. : Elsevier, 2014.
5. *Metallurgische Reaktionskinetik zur Einstellung niedrigster Gehalte an C, P, S und N im Stahl.* **Pluschell, W.** 1990, *Stahl und Eisen*, Vol. 110, págs. 61-70.
6. **Mazumdar, D y Evans, J.** *Modeling of steelmaking processes*. s.l. : CRC Press, 2010.
7. **Association, Worldsteel.** <http://www.worldsteel.org>. [En línea]
8. **Yang, Y. D. y McLean, A.** Some metallurgical considerations pertaining to the development of steel quality. *Treatise on Process Metallurgy, Volume 2: Process Phenomena*. s.l. : Elsevier, 2014, Vol. Volume 2, págs. 251-282.
9. **Richardson, F. D.** *Physical chemistry of melts in metallurgy*. s.l. : Academic Press (Elsevier), 1974.
10. *The behaviour of sulphur in silicate and aluminate melts.* **Fincham, C. J. B. y Richardson, F. D.** 1152, 1954, In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol. 223, págs. 40-62.
11. *Sulphide capacities in some multi component slag systems.* **Nzotta, M. M., Sichen, D. y Seetharaman, S.** . 11, *ISIJ international*, Vol. 38, págs. 1170-1179.
12. *Sulphide capacities in MgO-SiO₂ and CaO-MgO-SiO₂ slags.* **Nzotta, M. M., y otros, y otros.** 4, 1997, *Ironmaking & steelmaking*, Vol. 24, págs. 300-305.
13. *The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems.* **Mazumdar, D. y Guthrie, R. I.** 1, 1995, *ISIJ international*, Vol. 35, págs. 1-20.
14. *The use of fundamental process models in studying ladle refining operations.* **Jönsson, P. G. y Jonsson, L. T.** 11, 2001, *ISIJ international*, Vol. 41, págs. 1289-1302.
15. *Macroscopic models for gas stirred ladles.* **Mazumdar, D. y Evans, J. W.** 3, 2004, *ISIJ International*, Vol. 44, págs. 447-461.
16. *Recent Advances in the Fluid Dynamics of Ladle Metallurgy.* **Irons, G., Senguttuvan, A. y Krishnapisharody, K.** 1, 2015, *ISIJ International*, Vol. 55, págs. 1-6.

17. *Modeling Energy Dissipation in Slag-Covered Steel Baths in Steelmaking Ladles.* **Mazumdar, D. y Guthrie, R. I.** . 5, 2010, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 41, págs. 976-989.
18. *A unified representation of gas dispersion in upwardly injected submerged gas jets.* **Anagbo, P. E., Brimacombe, J. K. y Castillejos, A. H.** 4, 1989, Canadian Metallurgical Quarterly, Vol. 28, págs. 323-330.
19. *The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems.* **Mazumdar, D y Guthrie, R.** 1995, ISIJ International, Vol. 35, págs. 1-20.
20. *Critical review of the modified froude number in ladle metallurgy.* **K., Krishnapisharody y Irons, G.** 2013, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 44 B.
21. **P.E., Anagbo, Brimacombe, J.K. y Castillejos, A. H.** 28, 1989, Can. Metall. Q, pág. 323.
22. *Flow field in air-water vertical bubbling jets in a cylindrical vessel.* **M., Iguchi, Takeuchi, H. y Morita, I.** 1991, ISIJ International, Vol. 31, págs. 246-53.
23. *Bubble characteristics in the momentum region of air-water vertical bubbling jet.* **I., Manabu, Nozawa, K. y Morita, I. Z.** 1991, ISIJ International, Vol. 31, págs. 246-53.
24. *Effects of pore diameter, bath surface pressure, and nozzle diameter on the bubble formation from a porous nozzle.* **Iguchi, M., Kaji, M. y Morita, Z. I.** 6, 1998, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 29, págs. 1209-1218.
25. *Measurement of physical characteristics of bubbles in gas-liquid plumes: Part II. Local properties of turbulent air-water plumes in vertically injected jets.* **Castillejos, A. H. y Brimacombe, J. K.** . 4, 1987, Metallurgical Transactions B, Vol. 18, págs. 659-671.
26. *Plume characteristics and liquid circulation in gas injection through a porous plug.* **Anagbo, P. E. y Brimacombe, J. K.** 4, 1990, Metallurgical Transactions B, Vol. 21, págs. 637-648.
27. *Measurements of the internal structure of gas-liquid plumes.* **Sheng, Y. Y. y Irons, G. A.** 6, 1992, Metallurgical Transactions B, Vol. 23, págs. 779-788.
28. *Modeling of mixing in ladles fitted with dual plugs.* **Madan, M., Satish, D. y Mazumdar, D.** 5, 2005, ISIJ international, Vol. 45, págs. 677-685.
29. *Experimental and numerical investigation of fluid flow and mixing in pachuca tanks.* **Rodríguez, M, E., Castillejos, E, A. H y Acosta, G, F. A.** . 2007, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 38, págs. 641-656.
30. *Numerical computations of fluid flow and heat transfer in gas iron baths.* **Türkoğlu, H. y Farouk, B.** 4, 1990, Metallurgical Transactions B, Vol. 21, págs. 771-781.
31. *A Critical Review of the Modified Froude Number in Ladle Metallurgy.* **Krishnapisharody, K. y Irons, G. A.** 6, 2013, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 44, págs. 1486-1498.
32. *Numerical computations of fluid flow and heat transfer in gas iron baths.* **H., Turkoglu y Farouk, Bakhtier.** 11, 1990, ISIJ International, Vol. 30, págs. 961-970.

33. *Possible roles of upper slag phases on the fluid dynamics of gas stirred ladles.* **Mazumdar, D., Nakajima, H. y Guthrie, R. I.** 3, 1988, *Materials Transactions B*, Vol. 19, págs. 507-511.
34. *Physical modeling of liquid/liquid mass transfer in gas stirred ladles.* **Kim, S. H. y Fruehan, R. J.** 2, 1987, *Metallurgical Transactions B*, Vol. 18, págs. 381-390.
35. *Emulsification and mass transfer in ladle metallurgy.* **Mietz, J., Schneider, S. y Oeters, F.** 1, 1991, *Steel Research*, Vol. 62, págs. 10-15.
36. *Proceedings Steelmaking Conference.* **Kim, S. H., Fruehan, R. J. y Guthrie, R.** 1986. págs. 107-18.
37. *Mixing time and fluid flow phenomena in liquids of varying kinematic viscosities agitated by bottom gas injection.* **Iguchi, M., Nakamura, K. I. y Tsujino, R.** . 3, 1998, *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 29, págs. 569-575.
38. *Effects of the Physical Properties of Top Oil Layer on Bubble and Liquid Flow Characteristics in a Bottom Blown Water Bath.* **Iguchi, M., y otros, y otros.** 9, 1998, *ISIJ international*, Vol. 38, págs. 1032-1034.
39. *Modeling mean flow and turbulence characteristics in gas agitated bath with top layer.* **Ilegbusi, O. J., y otros, y otros.** 1, 1998, *Metallurgical and Materials Transactions B*, Vol. 29, págs. 211-222.
40. *Mass transfer in a bubble agitated liquid liquid system.* **Clinton, S y Perona, J.** 1982, *American Chemical Society*, págs. 269-271.
41. *Cold model study on the mixing rates of slag and metal bath in Q-BOP.* **Nakanishi, K., y otros, y otros.** 9, 1980, *etsu-to-Hagane (Journal of the Iron and Steel Institute of Japan)*, Vol. 66, págs. 1307-1316.
42. *Physical Simulation of MetalSlag Mass Transfer in Gas Stirred Ladles [J].* **Lei, G. y Ping, H.** 2008, *Iron Steel Vanadium Titanium*, Vol. 2, págs. 1-11.
43. *Mixing and mass transfer in ladle refining process.* **Ogawa, K. y Onoue, T.** 2, 1989, *ISIJ International*, Vol. 29, págs. 148-153.
44. *Physical Modeling of Gas Injection in a Steelmaking Vessel--Mixing Times and Liquid/Liquid Mass Transfer Rates.* **Matway, R. J., Fruehan, R. J. y Henein, H.** 9, 1989, *Iron Steelmaker*, Vol. 16, págs. 51-58.
45. *Physical modeling of slag/metal reactions in combined blowing—Effect of tuyere location, tuyere size and gas flowrate.* **Matway, R. J., Henein, H. y Fruehan, R. J.** 12, 1991, *Iron & steelmaker*, Vol. 18, págs. 43-50.
46. *Experiments of the Mass Transfer Between Two Immiscible Phases by a Top and Bottom Blown Converter Model.* **Schlarb, H. y Frohberg, M. G.** 1, 1985, *Steel Research*, Vol. 56, págs. 15-18.

47. *Model study of mixing and mass transfer rates of slag-metal in top and bottom blown converters.* **Paul, S. y Ghosh, D. N.** 3, 1986, Metallurgical Transactions B, Vol. 17.
48. *Simulation of Mass Transfer from Metal to Slag in Gas Stirred Ladles.* **Koria, S. C. y Shamsi, M. R. R. I.** 6, 1990, Ironmaking and Steelmaking, Vol. 17, págs. 401-409.
49. *Selection of bottom injection parameters in combined blown steelmaking.* **Koria, S. C. y George, A.** 3, 1988, Ironmaking and Steelmaking, Vol. 15, págs. 127-133.
50. *Model Study on Mixing Condition in Combined Blown Steelmaking Bath.* **Koria, S. C. y Pal, S.** 5, 1990, Ironmaking and Steelmaking, Vol. 17, págs. 325-332.
51. *Cold model study of mixing and mass transfer in LD converters at Tata Steel.* **Ajmani, S. K. y Chatterjee, A.** 4, 1996, Ironmaking and Steelmaking, Vol. 23, págs. 335-345.
52. *Cold Model Study of Liquid-Liquid Mass Transfer in a Combined Blowing BOS Converter.* **Singh, R. P. y Ghosh, D. N.** 5, 1990, Ironmaking and Steelmaking, Vol. 17, págs. 333-342.
53. *Physical modeling of liquid/liquid mass transfer in gas stirred ladles.* **Kim, S. H. y Fruehan, R. J.** 2, 1987, Metallurgical Transactions B, Vol. 18, págs. 381-390.
54. *Model experiments on mass transfer in ladle metallurgy.* **Mietz, J., Schneider, S. y Oeters, F.** 1, 1991, Steel Research, Vol. 62, págs. 1-9.
55. *Modeling of metallurgical emulsions.* **Lin, Z. y Guthrie, R. I.** 6, 1994, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 25, págs. 855-864.
56. *Study of slag/metal interface in ladle treatment.* **Dayal, P, y otros, y otros.** 6, 2006, Ironmaking & steelmaking, Vol. 33, págs. 454-464.
57. *Cold model study of emulsification behavior in bottom blown metallurgical baths covered with thick slag.* **Khajavi, L. T. y Barati, M.** 5, 2010, ISIJ International, Vol. 50, págs. 654-662.
58. *Physical model studies of slag/metal reactions in gas stirred ladles. Determination of critical gas flow rate.* **Kim, S. H., Fruehan, R. J. y Guthrie, R. I.** 11, 1993, Iron & steelmaker, Vol. 20, págs. 71-76.
59. *Fluid flow and mass transfer in gas stirred ladles.* **Asai, S., Muchi, I. y Kawachi, M.** s.l. : Springer US., 1988. In Foundry Processes . págs. 261-292.
60. *Effect of Slag Properties on Mixing Phenomena in Gas-stirred Ladles by Physical Modeling.* **Amaro-Villeda, A. M., Ramirez-Argaez, M. A. y Conejo, A. N.** 1, 2014, ISIJ international, Vol. 54, págs. 1-8.
61. *Mixing models for slag covered, argon stirred ladles.* **Patil, S. P., y otros, y otros.** 8, 2010, ISIJ international, Vol. 50, págs. 1117-1124.
62. *The mathematical and physical modeling of turbulent recirculating flows.* **Szekely, J., Dilawari, A. H. y Metz, R.** 1, 1979, Metallurgical Transactions B, Vol. 10, págs. 33-41.

63. *Flow pattern velocity and turbulence energy measurements and predictions in a water model of an argon-stirred ladle.* **Szekely, J., Wang, H. J. y Kiser, K. M.** 2, 1976, Metallurgical Transactions B, Vol. 7, págs. 287-295.
64. **Cloete, S. W. P.** *A mathematical modelling study of fluid flow and mixing in gas stirred ladles (Doctoral dissertation, Stellenbosch: Stellenbosch University).* 2008.
65. *Modeling of mixing in ladles fitted with dual plugs.* **Madan, M., Satish, D. y Mazumdar, D.** 5, 2005, ISIJ international, Vol. 45, págs. 677-685.
66. *Modeling flows and mixing in steelmaking ladles designed for single-and dual-plug bubbling operations.* **Joo, S. y Guthrie, R. I. L.** 6, 1992, Metallurgical Transactions B, Vol. 23, págs. 765-778.
67. *Fluid flow and bath temperature destratification in gas-stirred ladles.* **Castillejos, A. H., Salcudean, M. E. y Brimacombe, J. K.** 5, 1989, Metallurgical Transactions B, Vol. 20, págs. 603-611.
68. *Numerical investigation on role of bottom gas stirring in controlling thermal stratification in steel ladles.* **Ganguly, S. y Chakraborty, S.** 3, 2004, ISIJ international, Vol. 44, págs. 537-546.
69. *Fluid dynamics in bubble stirred ladles: Part II. Mathematical modeling.* **Johansen, S. T. y Boysan, F.** 5, 1988, Metallurgical Transactions B, Vol. 19, págs. 755-764.
70. *An assessment of a two phase calculation procedure for hydrodynamic modelling of submerged gas injection in ladles.* **Mazumdar, D. y Guthrie, R. I.** 5, 1994, ISIJ international, Vol. 34, págs. 384-392.
71. *Homogenization of temperature field in a steelmaking ladle with gas injection.* **Xia, J. L. y Ahokainen, T.** 4, 2003, Scandinavian journal of metallurgy, Vol. 32, págs. 211-217.
72. *Transient flow and heat transfer in a steelmaking ladle during the holding period.* **Xia, J. L. y Ahokainen, T.** 4, 2001, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 32, págs. 733-741.
73. *Analysis of flows in a ladle with gas-stirred melt.* **Xia, J. L., Ahokainen, T. y Holappa, L.** 2, 2001, Scandinavian journal of metallurgy, Vol. 30, págs. 69-76.
74. *Numerical computations of fluid flow and heat transfer in a gas-stirred liquid bath.* **Türkoğlu, H. y Farouk, B.** 4, 1990, Metallurgical Transactions B, Vol. 21, págs. 771-781.
75. *Modelling of flows in a ladle with gas stirred liquid Wood's metal.* **Xia, J. L., Ahokainen, T. y Holappa, L.** 1999. In Proceedings Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries. Melbourne, Australia. págs. 6-8.
76. *Numerical Simulation of Gas and Liquid Two-Phase Flow in Gas-Stirred Systems Based on Euler–Euler Approach.* **Lou, W. y Zhu, M.** 5, 2013, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 44, págs. 1251-1263.
77. *Gas-liquid reaction model in gas-stirred systems: Part 1. Numerical model.* **Venturini, G. y Goldschmit, M. B.** 3, 2007, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 38, págs. 461-475.

78. *Modeling mean flow and turbulence characteristics in gas-agitated bath with top layer.* **Ilegbusi, O. J., y otros, y otros.** 1, 1998, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 29, págs. 211-222.
79. *Simulation of molten steel refining in a gas-stirred ladle using a coupled CFD and thermodynamic model.* **Al-Harbi, M., Atkinson, H. V. y Gao, S.** 2006.
80. *Numerical Simulation of Fluid Flow and Interfacial Behavior in Three-phase Argon-Stirred Ladles with One Plug and Dual Plugs.* **Liu, H., Qi, Z. y Xu, M.** 4, 2011, Steel research international, Vol. 82, págs. 440-458.
81. *Large Eddy Simulation of Bubbly Flow and Slag Layer Behavior in Ladle with Discrete Phase Model (DPM)–Volume of Fluid (VOF) Coupled Model.* **Li, L., y otros, y otros.** 2015, The Minerals, Metals & Materials Society.
82. *Modeling of three-phase flows and behavior of slag/steel interface in an argon gas stirred ladle.* **Li, B., y otros, y otros.** 12, 2008, ISIJ international, Vol. 48, págs. 1704-1711.
83. *Numerical Investigations on the Slag Eye in Steel Ladles.* **Liu, Y. H., He, Z. y Pan, L. P.** 2014, Advances in Mechanical Engineering, Vol. 6.
84. *Water Model and CFD-PBM Coupled Model of Gas-Liquid-Slag Three-Phase Flow in Ladle Metallurgy.* **Li, L., y otros, y otros.** 7, 2015, ISIJ International, Vol. 55, págs. 1337-1346.
85. *Transient fluid flow phenomena in a gas stirred liquid bath with top oil layer—Approach by numerical simulation and water model Experiments.* **Han, J. W., y otros, y otros.** 10, 2001, ISIJ international, Vol. 41, págs. 1165-1172.
86. *Dynamic similarity considerations in gas-stirred ladle systems.* **Mazumdar, D.** 5, 1990, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 21, págs. 925-928.
87. **Hunt, A. y Listak, P. D. M.** *Development and Characterization of a Hydrodynamic Test Bed and a Digital Particle Image Velocimetry System.* 2010.
88. **A/S, Dantec Dynamics.** <http://www.Dantecdynamics.com>. [En línea] 2015.
89. **Lide, D. R.** CRC handbook of chemistry and physics. s.l. : CRC press, 2004.
90. **Schiller, L. y Naumann, A.** 1993, VDI Zeits, Vol. 77, pág. 318.
91. *An Investigation of Particle Trajectories in Two-Phase Flow Systems.* **Morsi, S. A. y Alexander, A. J.** 2, 1972, Journal of Fluid Mechanics, Vol. 55, págs. 193-208.
92. **Help, ANSYS 14.5.** Chapter 17. Multiphase Flows "Interphase Exchange Coefficients". *Theory Guide.*
93. **Kolev, N. I.** *Multiphase flow dynamics (Vol. 1).* s.l. : New York, Heidelberg, Berlin: Springer., 2005.
94. *Bubbles, Drops, and Particles.* **Clift, Grace y Weber.** 1978, Technical Report.

95. *Three-dimensional gas–liquid two-phase bubbly flow in a C-shaped tube.* **Takamasa, T. y Tomiyama, A.** 1999, In Proceedings of the 1999 NURETH-9 Conference.
96. *Modeling of slag eye area in argon stirred ladles.* **Peranandhanthan, M. y Mazumdar, D.** 11, 2010, ISIJ international, Vol. 50, págs. 1622-1631.
97. *A water model and numerical study of the spout height in a gas-stirred vessel.* **Guo, D. y Irons, G. A.** . 3, 2002, Metallurgical and Materials Transactions B, Vol. 33, págs. 377-384.

ANEXO I Tabla de Unidades.

Tabla 15 Tabla de unidades

Símbolo	Significado	Unidades
A	Área Interfacial entre fases	m^2
C	Concentración del soluto	Kg/m^3
C_s	Capacidad de sulfuro	Adimensional
D	Diámetro	M
D_h	Diámetro hidráulico	M
D_t	Difusividad turbulenta	m^2/s
D	Coefficiente de difusión	m^2/s
f	Coefficiente de actividad	Adimensional
$G_{k,q}$	Generación de la energía cinética turbulenta	N/m^2s
g	Aceleración debido a la fuerza de gravedad	m/s^2
H	Altura	M
I	Intensidad turbulenta	Adimensional
\vec{j}	Densidad de flujo	Kg/m^2s
k	Coefficiente de transferencia de masa	m/s
K_1	Constante de equilibrio	Adimensional
K	Coefficiente de intercambio de momentum	Adimensional
L_c	Longitud característica	M
\dot{m}	Moles de soluto	mol/s
p	Presión	Pa
P_{S_2}	Presión parcial del azufre	Pa
P_{O_2}	Presión parcial del oxígeno	Pa
Q	Flujo de gas volumétrico	m^3/s
R_m	Radio	m
R_j	Rapidez neta de producción de especies j	Kg_j/s
U_c	Velocidad característica del fluido	m/s
\vec{U}	Velocidad promedio	m/s
\vec{v}	Vector de velocidad	m/s
V	Volumen de la fase	m^3

Símbolos griegos	Significado	Unidades
α	Fracción de volumen	Adimensional
ε	Rapidez de disipación de la energía cinética turbulenta	m^2/s^3
κ	Energía cinética turbulenta	m^2/s^2
λ	Factor de escala	Adimensional
μ	Viscosidad	Kg/ms
ρ	Densidad	Kg/m^3
$\bar{\tau}$	Tensor de esfuerzos	Adimensional
ν	Viscosidad cinemática	m^2/s

Números Adimensionales

Número Adimensional	Definición
Reynolds, Re	$\frac{U_c L_c}{\nu}$
Froude, Fr	$\frac{U_c^2}{g L_c}$
Euler, Eu	$\frac{\Delta p}{0.5 \rho U_c^2}$
Schmidt, Sc	$\frac{\nu}{D}$

Lista de Subíndices

Subíndice	Significado
a	Acero Líquido
e	Escoria
ec	Escala Completa
i	Interfase
j	Especie j
M	Metal
m	Modelo
j, mez	Especie j en la mezcla
p	Fase p
q	Fase q
t	Turbulento

ANEXO II Constancia de participación en el XXIV International Materials Research Congress (IMRC) 2015.



August 2015

TO WHOM IT MAY CONCERN
P r e s e n t

This is to certify that *Marco Aurelio Ramírez Argáez, Juan Antonio López Gutierrez, Adrian Manuel Amaro Villeda* presented the contribution: **MATHEMATICAL AND PHYSICAL MODELING OF THREE-PHASE GAS-STIRRED LADLES**, in the Advanced Structural Materials Symposium at the XXIV International Materials Research Congress held in Cancun, Mexico from August 16th to 20th, 2015.

Sincerely,



José Gerardo Cabañas Moreno
President



ANEXO III Carta de aceptación del artículo presentado en el IMRC 2015.



Sociedad Mexicana
de Materiales A.C.

September 21, 2015

MARCO A. RAMÍREZ-ARGÁEZ

School of Chemistry, National Autonomous University of Mexico, México D.F.,
México

Dear Mr. Ramírez-Argáez,

We are pleased to inform you that your manuscript titled "*Mathematical and Physical Modeling of Three-Phase Gas-Stirred Ladles*" has been accepted for publication in the proceedings of Symposium 6B: Advanced Structural Materials, held during the XXIV International Materials Research Congress (IMRC 2015) at Cancun, Quintana Roo, Mexico, August 15-20, 2015.

This symposium is a joint effort between Sociedad Mexicana de Materiales (Mexico) and Materials Research Society (USA). We will inform you soon about further submission details.

We thank you in advance for considering this opportunity as a key event to share your latest results and findings with other colleagues in the structural materials field.

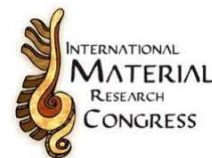
With our Best Regards,

Symposium Organizers

Dr. Jorge López-Cuevas
jlc667@gmail.com

Dr. José Martín Herrera-Ramírez
martin.herrera@cimav.edu.mx

Dr. Francisco C. Robles-Hernández
fcrubles@uh.edu



ANEXO IV Pasos para la solución numérica utilizando ANSYS Fluent 14.5.

Se utilizó el software comercial CFD ANSYS Fluent 14.5, el cual consta de las siguientes secciones:

1. Solution Setup

1.1. General

El menú *General* permite seleccionar el método de solución (*solver*) a utilizar. Ver Figura 34. Se indica una solución basada en presión, estado transitorio, axisimétrico 2D y la gravedad en el eje x. En la opción *Scale* asegurarse que se está trabajando en SI.

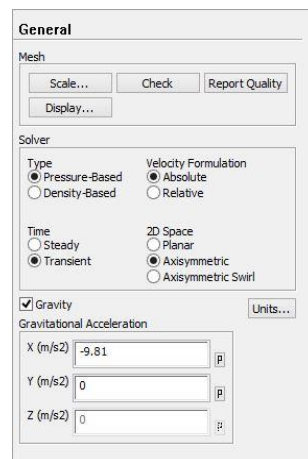


Figura 34 Opciones seleccionadas en el menú *General*.

1.2. Models

En la sección *Models* se selecciona el modelo multifásico a utilizar, la opción *Multiphase Model* tiene los siguientes métodos: *Eulerian*, *Mixture* y *VOF*. Se selecciona el modelo *Eulerian* en un esquema explícito y se indica la cantidad de fases en el sistema, para este caso tres. Ver Figura 35. Este modelo se selecciona ya que resuelve las ecuaciones de conservación para cada una de las fases por separado y es el único que permite el intercambio de masa, energía y momentum entre cada una de las fases.

La opción *Viscous Model* permite seleccionar entre cuatro modelos de turbulencia llamados: *Laminar*, *k-epsilon*, *k-omega* y *Reynolds Stress*. El modelo utilizado fue el modelo Estándar *k-epsilon* con un tratamiento cerca de las paredes *Standar Wall Functions* y el modelo multifásico de turbulencia *Dispersed*, utilizando las constantes predeterminadas por el modelo. Ver Figura 36.

El modelo *Species* se utiliza para modelar el transporte de masa entre las fases del sistema, para este estudio el transporte del soluto presente en la fase acuosa hacia el aceite de silicón. Se selecciona la opción *species transport* (Ver Figura 37). En la opción *phase properties* seleccionar *set* e indicar *mixture-template*, el cual permitirá tener una mezcla cuya fase primaria sea el agua con el soluto a definir en el menú materiales.

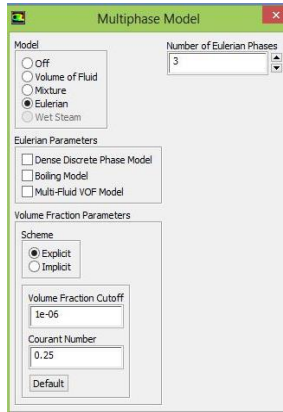


Figura 35 Menú *Multiphase Model*.

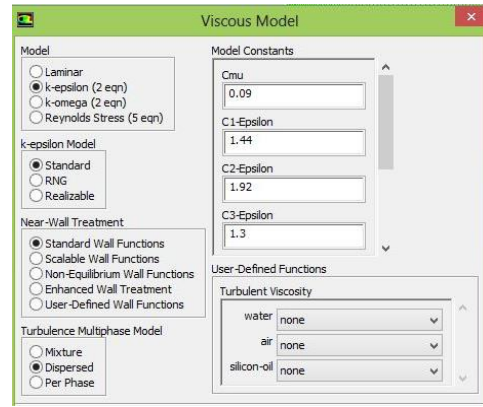


Figura 36 Menú *Viscous Model*.

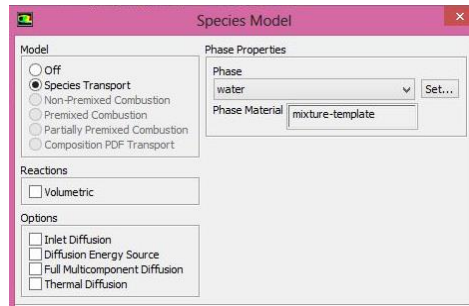


Figura 37 Menú *Species Model*.

1.3. Materials

En esta sección se pueden crear materiales con propiedades físicas y químicas específicas, o bien, utilizar los materiales con los que cuenta la base de datos de Fluent 14.5. Ver Figura 38.

Esta opción se utilizó para crear y definir las propiedades físicas del soluto y del aceite de silicón. La plantilla de mezcla definida en el menú *Species Model* fue utilizada para crear la mezcla agua-soluto. Detalles de las propiedades físicas de las sustancias utilizadas se muestran en la Sección 2.5. Los materiales utilizados en el sistema y la mezcla se muestran en la Figura 39.

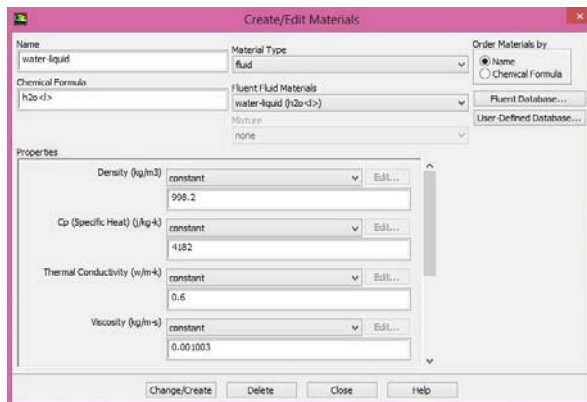


Figura 38 Ventana para crear o editar materiales.

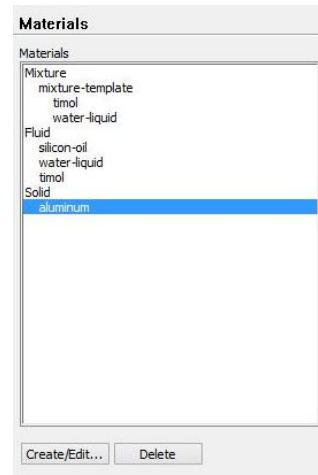


Figura 39 Materiales utilizados en el sistema.

1.4. Phases

Se indica la fase primaria y las fases secundarias del sistema. Ver Figura 40. Al indicar la fase secundaria del aire, se define el tamaño de burbuja (0.01m) a utilizar. En esta ventana se encuentra la opción *Interaction* en la cual se define el modelo de arrastre (Ver Sección 2.7), el mecanismo de transferencia de masa y la tensión superficial entre las fases del sistema (Mezcla agua-soluto, aceite de silicón, aire). Ver Figura 41.

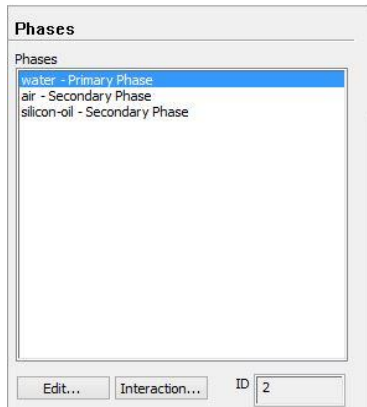


Figura 40 Ventana Phases.

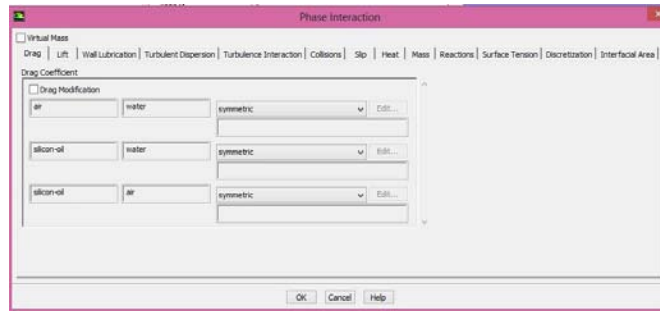


Figura 41 Ventana Phase Interaction.

1.5. Boundary Conditions

En la Figura 42 se definen las condiciones de cada una de las fronteras del sistema (Ver Sección 2.8.2.). La frontera a editar se selecciona en *Zone*, y en *Phase* se selecciona el fluido a editar respecto a la frontera. En *Edit* se fijan parámetros de cada frontera, por ejemplo, en la frontera *Inlet* se especifica la velocidad de entrada y la fracción de volumen, para el aire el flujo de gas fue 0.61 m/s y la fracción de volumen que entra o abandona el sistema tiene una fracción de 1 (escala del 0 al 1). Ver Figura 43.



Figura 42 Menú Boundary Conditions.

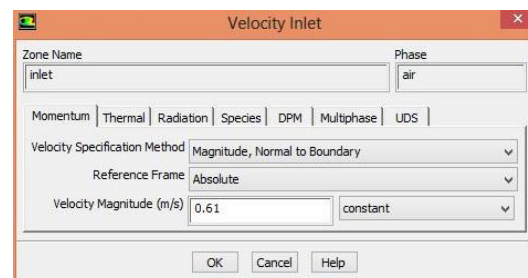


Figura 43 Ventana Velocity Inlet.

2. Solution

2.1. Solution Methods

En la ventana *Solutions Methods* en Scheme seleccionar *Phase Coupled SIMPLE*. En *Spatial Discretization* utilizar *Least Squares Cell Based* y los valores predeterminados por el esquema utilizado, a excepción de Momentum, cambiar a *Second Order Upwind*. Como se muestra en la Figura 44.

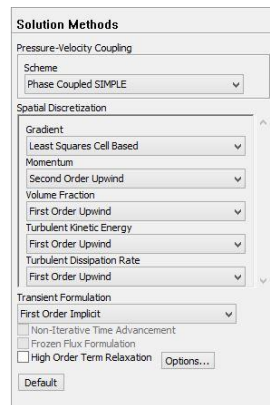


Figura 44 Ventana *Solution Methods*.

Para conocer más detalles de esta y las otras secciones se pueden consultar en manuales de ayuda de ANSYS Fluent 14.5.

2.2. Solution Initialization

La sección *Solution Initialization* permite definir los valores para las variables de flujo e inicializar el campo de flujo a los valores especificados, como se muestra en la Figura 45. En *Initialization Methods* seleccionar la opción *Standard Initialization* y seleccionar *Initialize*.

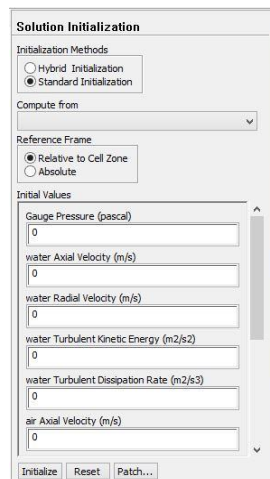


Figura 45 Ventana *Solution Initialization*.

La opción *Patch* permite indicar que fase ocupara dentro del sistema, la fracción de volumen y la fracción inicial de soluto en el agua, posterior a que se divide el dominio del sistema utilizando la opción *Adaption Regions* para cada una de las tres fases del sistema (mezcla (agua-soluto)-

aceite-aire). La Figura 46 muestra un ejemplo donde se define el dominio de la mezcla (agua-soluto).

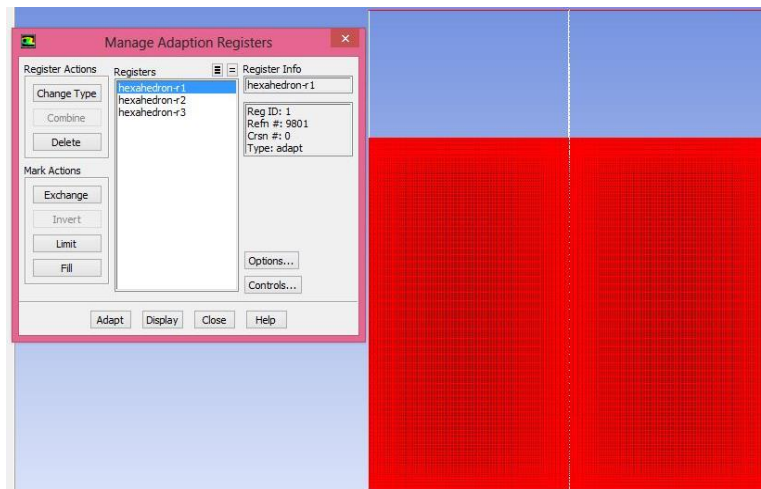


Figura 46 Ventana *Adaption Regions*.

2.3. Run Calculation

Al llegar a esta opción se ha terminado de fijar los parámetros utilizados en el modelo matemático. Se indica el paso de tiempo bajo el cual se resolverán las ecuaciones, utilizando un paso de tiempo de 1×10^{-5} segundos para obtener convergencia en la solución. *En Max Iterations/Time Step* fijar un valor de 20. E indicar 15000000 *Number of Time Steps* (15 segundos totales), tiempo de cálculo necesario bajo el cual el sistema llega a un estado cuasi-estable en el campo de velocidades del dominio. Ver Figura 47. Finalmente se obtienen, analizan y reportan resultados.

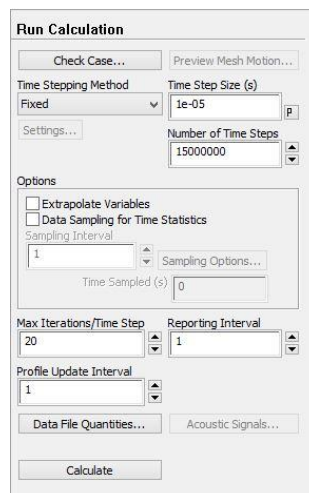


Figura 47 Ventana *Run Calculation*.