

## **1.- Título:**

**“Modelado matemático del mezclado químico en ollas de acero agitadas con gas”**

**1a.- Tutor responsable:** Marco Aurelio Ramírez Argáez

## **2.- Introducción:**

De manera exitosa y por vez primera, nuestro grupo de trabajo hace 2 años pudo medir tiempos de mezclado en modelos físicos de ollas de acero agitadas con gas con la técnica no intrusiva PLIF (Planar Laser-Induced Fluorescence) [1], mediante la cual si se agrega un soluto fluorescente, Rodamina B, éste se mezcla y la composición del soluto es directamente proporcional a la fluorescencia que la sustancia emite. Entonces, si se cuenta con una curva de calibración que describa cuantitativamente la relación concentración-fluorescencia, y un procedimiento de medición de la luminosidad, se puede medir el tiempo de mezclado de manera precisa, sin necesidad de introducir electrodos que modifican y alteran los patrones de flujo que determinan el mezclado, como en las técnicas tradicionales que se han usado por décadas para medir tiempos de mezclado (pH o conductividad eléctrica) [2].

El procedimiento de medición ha sido establecido exitosamente y éste consiste en inyectar una cantidad predeterminada de Rodamina B encima del ojo que promueve la pluma de gas en un modelo físico de una olla de acero agitada con gas ya en estado quasi estacionario del flujo de fluidos. Luego, se ilumina de manera continua un plano del modelo con luz láser de alta potencia (alejado de la zona de la pluma para evitar interferencias), y ese plano se video graba con una cámara digital convencional para captar la evolución de la fluorescencia. Una malla virtual prefabricada sobre el plano, se utiliza para realizar la medición mediante una curva de calibración concentración-fluorescencia también hecha en esa malla y que mediante un post-procesamiento en matlab® permite presentar mapas de concentración química a través del tiempo. El procedimiento se probó con éxito tanto en modelos de escala pequeña (1/17) como en modelos de escala más grande (1/6) con buena reproducibilidad.

Se debe enfatizar que hay varias ventajas asociadas a esta nueva técnica experimental en comparación con las técnicas tradicionales:

- 1) El PLIF es una técnica no intrusiva, es decir, no se agrega ningún elemento ajeno al sistema, a excepción del soluto, que contrasta positivamente con las técnicas de pH o conductimetría que introducen electrodos sólidos que modifican los patrones de flujo y por lo tanto no representan fielmente el mezclado real del sistema.
- 2) Las mediciones son más representativas de toda la olla, ya que se mide un plano completo del sistema (o varios, si se desea) en comparación con un solo punto del sistema que aportan las técnicas tradicionales con un solo electrodo. Con las técnicas tradicionales, si desean conocer el mezclado en otras zonas del sistema, se deben repetir los experimentos moviendo los electrodos.
- 3) Las concentraciones que se usan en esta técnica PLIF son del orden de partes por billón, que no alteran en casi nada las propiedades fisicoquímicas del agua, mientras que en las técnicas tradicionales a las dos o tres inyecciones del soluto el agua se modifica en su densidad y viscosidad y debe emplearse agua bidestilada nueva para realizar más experimentaciones con el gasto excesivo de agua y problemáticas asociadas a la experimentación.

Ahora, estas nueva mediciones con muchas ventajas ya señaladas y no reportadas antes del 2019, pueden ser usadas para validar modelos matemáticos que capten la transferencia de masa durante el proceso de mezclado de un soluto. Como nunca antes, se puede escoger el modelo de turbulencia que mejor describa la dispersión turbulenta de soluto y al mismo tiempo mantenga validada la fluido dinámica multifásica que ya ha sido validada en previos estudios hechos en este grupo [3-5].

Se propone en primera instancia que se use el modelo con los algoritmos Euler-Euler que ya está implementada por el grupo y entonces, partiendo de un modelo validado de la fluidodinámica, se pretende incorporar la ecuación de especies químicas para la fase agua y ajustar los parámetros semi empíricos que mejor validen las mediciones realizadas.

### **3.- Hipótesis:**

Con CFD Fluent Ansys con el algoritmo de Euler—Euler será posible implementar la física de mezclado de Rodamina B que concuerde con las mediciones experimentales ya hechas.

### **4.- Objetivo(s):**

- Objetivo General: Implementar el mezclado químico mediante la inclusión de una ecuación de conservación de especies químicas, al modelo fluido dinámica de la olla de acero agitada con gas.
- Objetivo Particular 1: Encontrar todos los datos e implementar modelos, materiales, condiciones de frontera e iniciales para simular el mezclado de Rodamina B.
- Objetivo particular 2: Ajustar los parámetros semiempíricos que mejor simulen el comportamiento del mezclado de la Rodamina B.
- Objetivo particular 3: Validar los resultados del modelo con las mediciones experimentales de tiempo de mezclado usando pH y sobretodo con los resultados que arroja la técnica PLIF.

### **5.- Metas:**

Meta 1: Modelo de transporte de masa desarrollado, implementado y validado.

Meta 2: Reporte completo y que corresponderá al menos al 70% de tesis de licenciatura.

### **6.- Metodología:**

El estudiante realizará las siguientes actividades para cumplir con los objetivos y metas del proyecto:

- Revisión de la literatura de modelado físico y matemático de ollas de acero agitadas con gas. En particular buscar trabajos de modelado matemático de mezclado de soluto en ollas agitadas con gas.
- Capacitación en el uso del software CFD Fluent ANSYS.
- Desarrollo de un modelo matemático para ollas con inyección de gas, implementando el transporte de masa de especies químicas.
- Comparación entre los resultados calculados y resultados experimentales previamente obtenidos por el grupo de trabajo para la evolución de Rodamina B en el tiempo.
- Escritura del reporte final.

### **7.- Infraestructura:**

El grupo de trabajo cuenta con varios equipos de cómputo fijos (8) a los cuales se puede tener acceso de manera remota y de algunas computadoras portátiles (3). Además, se cuenta con licencias académicas y comerciales del software ANSYS Fluent y herramientas de procesamiento de texto. Es deseable que el alumno cuente con un equipo de cómputo donde pueda alojar la versión estudiantil del software Fluent ANSYS para trabajar desde casa.

## 8.- Cronograma de actividades:

En el siguiente cronograma se presentan de forma resumida las actividades a realizar y los tiempos estimados para las mismas.

| No. | Actividad  | Semana |   |   |   |   |   |   |   |   |    |    |    |    |    |    |    |
|-----|--|--------|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|----|----|----|----|
|     |  | 1      | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 |
| 1   | Revisión la literatura   | X      | X | X |   |   |   |   |   |   |    |    |    |    |    |    |    |
| 2   | Capacitación en el uso del software CFD Fluent ANSYS                                     | X      | X | X | X | X | X |   |   |   |    |    |    |    |    |    |    |
| 3   | Desarrollo del modelo matemático de transporte de masa                                   |        |   |   | X | X | X | X | X |   |    |    |    |    |    |    |    |
| 4   | validación del modelo con resultados experimentales previos y análisis de los resultados |        |   |   |   |   |   |   |   | X | X  | X  | X  | X  | X  |    |    |
| 6   | Escritura del reporte y preparación de la presentación                                   |        |   |   |   |   |   |   |   |   |    |    |    | X  | X  | X  | X  |

## 9.- Cometarios adicionales:

N/A

## 10.- Referencias:

[1] Jardón-Pérez, Luis E., et al. "Introducing the Planar Laser-Induced Fluorescence technique (PLIF) to measure mixing time in gas-stirred ladles." Metallurgical and Materials Transactions B, 50.5 (2019): 2121-2133.

[2] Mazumdar, Dipak, and Roderick IL Guthrie. "The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems." ISIJ international 35.1 (1995): 1-20.

[3] Jardón Pérez, Luis Enrique, et al. "Optimizing gas stirred ladles by physical modeling and PIV measurements." Materials and Manufacturing Processes 33.8 (2018): 882-890.

[4] Jardón-Pérez, Luis E., et al. "Effect of differentiated injection ratio, gas flow rate, and slag thickness on mixing time and open eye area in gas-stirred ladle assisted by physical modeling." Metals 9.5 (2019): 555.

[5] Jardón-Pérez, Luis E., et al. "Numerical modeling of equal and differentiated gas injection in ladles: Effect on mixing time and slag eye." Processes 8.8 (2020): 917.