

1.- Título: Mezclado químico y térmico en modelo DPM-VOF en ollas agitadas con gas

1a.- Tutor responsable: Marco Aurelio Ramírez Argáez

2.- Introducción:

Nuestro grupo de trabajo desde hace 5 años ha podido validar de manera exitosa la fluido dinámica en sistemas de inyección de gas en líquidos en 3D tanto en las velocidades como en la turbulencia, cosa que no es tan frecuente sobre todo en sistema de inyección excéntrica y con escoria incluida [1-3]. Nuestra aproximación usa el modelo Euleriano o Euler-Euler, en el que las tres fases simuladas (Acero-Escoria-Argón) se representan en un sistema de referencias de Euler y que implica resolver un set de ecuaciones de conservación de masa, momentum, energía, etc. para cada fase con la suposición de que en las interfaces se intercambia momentum, masa y energía y de que la turbulencia solo aplica a las fases líquidas continuas como el acero y la escoria y que esta representación se puede lograr con el modelo k-épsilon realizable como mejor opción con términos de generación turbulenta en la pluma y esquemas numéricos de solución optimizados. Sin embargo, y a pesar de la validación detallada y que comprende velocidades y parámetros turbulentos, es de reconocerse que la validación no es tan adecuada cuando se comparan predicciones contra mediciones cerca de la interfase acero-escoria (agua-aceite en modelado físico). Hemos detectado en particular, la imposibilidad de predecir numéricamente con certeza el tamaño del ojo de escoria que se crea en la escoria cuando el gas inyectado escapa hacia la atmósfera y la inhabilidad de predecir el fenómeno de emulsión que se ve confundido con lo que se denomina difusión “falsa” o difusión “numérica”.

En los últimos 3 años se ha publicado en la literatura [4-7] una novedosa aproximación para describir la fluido dinámica en ollas de acero agitadas con gas que implica la descripción adecuada de la turbulencia cerca de la intercara acero-escoria y una detallada interacción entre las fases con una aproximación Euler-Lagrange para describir las fases líquidas inmiscibles con el modelo VOF (Volume Of Fluid) y el gas con el modelo DPM (Discrete Phase Model) y la turbulencia con el modelo LES (Large Eddy Simulation). Por lo tanto, en un trabajo de tesis que se está desarrollando en el semestre 2021-2, se está trabajando esta alternativa de modelado con resultados muy prometedores, mejorando la descripción de las interacciones acero-escoria y hasta se ha podido simular la emulsión de escoria.

Luego de esta positiva experiencia con las técnicas DPM-VOF (aunque no se descarta el uso de LES que aún no se ha probado hasta el momento), en este proyecto se propone estudiar mediante modelado numérico con los algoritmos DPM-VOF los fenómenos, no solo fluido dinámicos, sino también los mezclados químico y térmico.

3.- Hipótesis:

Usando los algoritmos DPM-VOF se puede mejorar la descripción realista del mezclado químico y térmico al encontrar una mayor concordancia entre los resultados numéricos y las mediciones experimentales ya hechas en nuestro grupo.

4.- Objetivo(s):

- Objetivo General: Implementar el mezclado químico y térmico en ollas de acero agitadas con gas empleando modelación matemática y los algoritmos DPM-VOF usando el software Fluent-Ansys.
- Objetivo Particular 1: Implementar el mezclado químico en ollas de acero agitadas con gas empleando el algoritmo DPM-VOF.
- Objetivo particular 2: Implementar el mezclado térmico en ollas de acero agitadas con gas empleando el algoritmo DPM-VOF
- Objetivo particular 3: Validar el modelo matemático contrastando los resultados que arrojará el modelo con las mediciones ya hechas en modelos físicos del mezclado químico y térmico.

5.- Metas:

- Desarrollar un modelo matemático de una olla agitada con gas usando los algoritmos VOF-DPM para describir el mezclado químico y el mezclado térmico.
- Validar el modelo al comparar los resultados calculados, con resultados experimentales reportados en la literatura y obtenidos en nuestro grupo en trabajos previos.
- Escritura de un reporte que represente un avance de al menos el 70% de una 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 trabajos previos de simulación matemática para simular ollas agitadas con gas y de las distintas aproximaciones numéricas para simular una olla agitada con gas.
- Capacitación en el uso del software CFD ANSYS Fluent.
- Desarrollo de un modelo matemático para describir los mezclados químico y térmico de ollas con inyección de gas.
- Comparación entre los resultados calculados y resultados experimentales previamente obtenidos por el grupo de trabajo para los mezclados químico y térmico en modelos físicos de ollas agitadas con gas.
- 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, además de algunas computadoras portátiles (3). Se cuenta con licencias del software Fluent ANSYS 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 de trabajos previos reportados en 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				X	X	X	X	X								
4	Comparación con resultados experimentales previos y análisis de los resultados									X	X	X	X	X	X		
6	Escritura del reporte													X	X	X	X

9.- Cometarios adicionales:

N/A

10.- Referencias:

[1].- Hoang, Q. N., Ramírez-Argáez, M. A., Conejo, A. N., Blanpain, B., & Dutta, A. (2018). Numerical Modeling of Liquid–Liquid Mass Transfer and the Influence of Mixing in Gas-Stirred Ladles. *JOM*, 70(10), 2109-2118.

- [2].- Ramírez-Argáez, M. A., Dutta, A., Amaro-Villeda, A., González-Rivera, C., & Conejo, A. N. (2019). A novel multiphase methodology simulating three phase flows in a steel ladle. *Processes*, 7(3), 175.
- [3].- Jardón-Pérez, L. E., González-Rivera, C., Ramirez-Argaez, M. A., & Dutta, A. (2020). Numerical Modeling of Equal and Differentiated Gas Injection in Ladles: Effect on Mixing Time and Slag Eye. *Processes*, 8(8), 917.
- [4].- Olsen, J. E., & Cloete, S. (2009, December). Coupled DPM and VOF model for analyses of gas stirred ladles at higher gas rates. In *Proceedings of the seventh international conference on CFD in the minerals and process industries, CSIRO, Melbourne* (pp. 9-11).
- [5].- Li, L., Liu, Z., Li, B., Matsuura, H., & Tsukihashi, F. (2015). Water model and CFD-PBM coupled model of gas-liquid-slag three-phase flow in ladle metallurgy. *ISIJ International*, 55(7), 1337-1346.
- [6].- Huang, A., Harmuth, H., Doletschek, M., Vollmann, S., & Feng, X. (2015). Toward CFD modeling of slag entrainment in gas stirred ladles. *steel research international*, 86(12), 1447-1454.
- [7].- Liu, W., Tang, H., Yang, S., Wang, M., Li, J., Liu, Q., & Liu, J. (2018). Numerical simulation of slag eye formation and slag entrapment in a bottom-blown argon-stirred ladle. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 49(5), 2681-2691.