

TESIS DOCTORAL

**INFLUENCIA DE LOS MODELOS DE TURBULENCIA EN EL
COMPORTAMIENTO DE REACTORES AGITADOS POR GAS
MEDIANTE EL USO DE LA DINÁMICA DE LOS FLUIDOS
COMPUTACIONAL (DFC)**

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por el Ing. (MSc) Zambrano Meza Héctor Javier
Para optar al Título
de Doctor en Ciencias de la Ingeniería.

Caracas, Septiembre de 2016.

TESIS DOCTORAL

INFLUENCIA DE LOS MODELOS DE TURBULENCIA EN EL COMPORTAMIENTO DE REACTORES AGITADOS POR GAS MEDIANTE EL USO DE LA DINÁMICA DE LOS FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)

AUTOR: Ing. (MSc) Héctor Javier Zambrano Meza

TUTOR: Ing. Prof. Dr. Alfonso Bencomo

Presentado ante la Ilustre
Universidad Central de Venezuela
Por el Ing. (MSc) Zambrano Meza Héctor Javier
Para optar al Título
de Doctor en Ciencias de la Ingeniería.

Caracas, Septiembre de 2016.

DEDICATORIA

Debo comenzar por agradecerles y dedicarles este trabajo a mis padres y hermanos por las enseñanzas, el amor y la dedicación que siempre tuvieron para darme lo mejor.

AGRADECIMIENTO

A Dios por protegerme, acompañarme, iluminarme y guiarme siempre en el logro de todas mis metas.

A mi tutor Prof. Dr. Alfonso Bencomo por todo su aporte en la realización de este trabajo.

A la Universidad Central de Venezuela (UCV) por permitirme formarme en mis estudios doctorales.

A todas esas personas que siempre de una u otra forma han estado conmigo.

Muchas gracias.

Ing. (MSc). Zambrano Meza Héctor Javier

**INFLUENCIA DE LOS MODELOS DE TURBULENCIA EN EL
COMPORTAMIENTO DE REACTORES AGITADOS POR GAS MEDIANTE
EL USO DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)**

Tutor Académico: Prof. Dr. Alfonso Bencomo, Tesis Doctoral. Caracas, U.C.V.
Facultad de Ingeniería. Doctorado en Ciencias de la Ingeniería.
Año 2016, 164 p.

Palabras Claves: Flujo bifásico, Dinámica de fluidos, Reactor, Turbulencia, simulación numérica, DFC.

RESUMEN: En la industria metalúrgica el acero líquido es agitado para promover la homogenización por percolación a través del gas argón que es inyectado por un tapón poroso ubicado en el fondo del reactor o cuchara metalúrgica, En estos procesos la calidad del acero se obtiene ajustando condiciones de operación en el reactor metalúrgico. El presente trabajo se realiza con el fin de profundizar el estudio de la influencia de la energía cinética turbulenta en el comportamiento de la mezcla gas-acero líquido, así como el estudio de otras variables que influyen en el diseño, desempeño y eficiencia del reactor metalúrgico (horno-olla). Para el estudio y análisis se utilizaron diferentes modelos de turbulencia entre ellos k-épsilon Standard, k-épsilon Realizable y k-épsilon RNG, con diferentes tratamiento en la pared, donde se evalúa cuál de estos modelos de turbulencia describe mejor la física del problema (proceso de refinado secundario del acero), para ello se analiza el comportamiento de estos reactores agitando con gas el acero líquido y comparando los resultados numéricos obtenidos con datos experimentales de la literatura abierta; la agitación se realizó inyectando gas por el fondo del recipiente utilizando para ello un tapón poroso céntrico y un tapón poroso excéntrico. Estas simulaciones fueron realizadas a través de Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) utilizando el software Fluent en su versión 6.3 y para las mallas se utilizó el software GAMBIT en su versión 2.0.

TABLA DE CONTENIDO

LISTA DE FIGURAS	I
LISTA DE TABLAS	I
LISTA DE SIMBOLOS.....	I
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA.....	7
1.2 OBJETIVOS.....	9
1.2.1 Objetivo General.....	9
1.2.2 Objetivos Específicos	9
1.3 ALCANCES	10
2.1 ANTECEDENTES DE LA INVESTIGACIÓN	11
2.2 REACTOR METALÚRGICO (OLLA O HORNO-CUCHARA).....	15
2.3 PRINCIPALES OPERACIONES EN LA REFINACIÓN SECUNDARIA DE ACERO.....	16
2.4 MEDIOS DE AGITACIÓN DEL METAL LÍQUIDO EN EL REACTOR METALÚRGICO (OLLA).....	16
2.4.1 Inyección de gas argón a través de una lanza	17
2.4.2 Inyección de gas argón a través de un tapón poroso	17
2.5 TIPOS DE TAPONES POROSOS	18
2.6 COMPORTAMIENTO DEL FLUIDO DENTRO DEL REACTOR METALÚRGICO.....	19
2.6.1 Energía de agitación	25
2.6.2 Tiempo de mezclado	25
2.7 DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC).....	26
2.8. APLICACIONES DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC).....	27
2.9. PROGRAMA DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (FLUENT 6.3).....	28
2.10. FORMA DE TRABAJAR LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)	29

2.11. VERIFICACIÓN DE LA MALLA	29
2.11.1. Método Estándar.....	30
2.11.2. Método GCI (Grid Convergence Index).....	30
2.12. MODELADO NUMÉRICO DE REACTORES AGITADOS CON GAS ..	33
2.12.1 Modelo cuasi – homogéneo (monofásico).....	33
2.12.2. Modelo Euler-Lagrange	35
2.12.3. Modelo Euler-Euler (Dos fluidos):	40
2.13. ECUACIONES QUE GOBIERNAN EL FLUJO DE FLUIDOS Y LA TRANSFERENCIA DE CALOR	42
2.14. ECUACIONES DE NAVIER-STOKES PARA UN FLUIDO NEWTONIANO	48
2.15. TURBULENCIA	51
2.15.1. Naturaleza de la turbulencia.....	51
2.15.2. Ubicación de la turbulencia	52
2.15.3. Origen de la turbulencia: Inestabilidades	53
2.16. TRATAMIENTO DE FLUJO EN LA CERCANIA DE LAS PAREDES..	55
2.17. TRATAMIENTO EN LA PROXIMIDAD DE LA PARED Y FUNCIONES DE PARED	59
2.17.1. Funciones de pared de no-equilibrio (Non-Equilibrium wall functions, NWF)	64
2.17.2. Tratamiento mejorado de la pared (Enhanced Wall Treatment, EWT) 66	
2.18. MODELOS DE TURBULENCIA	67
2.18.1. Modelo kappa-épsilon ($\kappa - \varepsilon$) Standard	68
2.18.2. Modelo kappa-epsilon ($\kappa - \varepsilon$) RNG (Renormalization-group).....	70
2.18.3. Modelo kappa-épsilon ($\kappa - \varepsilon$) Realizable.....	70
2.19. FLUJO BIFÁSICO	73
2.20. PATRONES DE FLUJO HORIZONTAL	74
2.20.1. Flujo estratificado	74
2.20.2. Flujo intermitente	74
2.20.3. Flujo anular	74
2.20.4. Flujo burbuja dispersa	75
2.21. PATRONES DE FLUJO VERTICALES.....	75
2.21.1. Flujo burbuja.....	76
2.21.2. Flujo Slug.....	76

2.21.3.	Flujo transición o churn	76
2.21.4.	Flujo anular	76
2.22	SQUEMAS NUMERICOS EN DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	77
<u>2.22.1</u>	<u>Solver segregado</u>	<u>78</u>
<u>2.22.2</u>	<u>Solver acoplado</u>	<u>79</u>
2.23.	FORMULACIÓN IMPLÍCITA Y EXPLICITA	80
<u>2.23.1.</u>	<u>Formulación implícita:</u>	<u>80</u>
<u>2.23.2.</u>	<u>Formulación explícita:</u>	<u>81</u>
2.24.	ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN	81
2.24.1.	Esquemas <i>upwing</i> de primer Orden.....	83
2.24.2.	Esquemas <i>Upwing</i> de segundo orden.....	83
<u>2.24.3</u>	<u>Ley exponencial</u>	<u>84</u>
2.24.4.	Esquema Quadratic Upwind Interpolation (QUICK).....	85
2.25.	FORMA LINEALIZADA DE LAS ECUACIONES DISCRETIZADAS 86	
2.26.	FACTOR DE SUBRELAJACIÓN.....	86
2.27.	EVALUACIÓN DE LAS DERIVADAS PARCIALES DE SEGUNDO ORDEN	87
2.28.	ELECCIÓN DE LOS SISTEMAS DE DISCRETIZACIÓN	88
<u>2.29</u>	<u>ESQUEMAS DE INTERPOLACIÓN</u>	<u>89</u>
<u>2.29.1.</u>	<u>Esquemas de interpolación en el solver segregado</u>	<u>89</u>
<u>2.29.2.</u>	<u>Esquemas de interpolación de la presión</u>	<u>90</u>
<u>2.29.3.</u>	<u>Esquemas de interpolación de la densidad</u>	<u>92</u>
2.30	COPLAMIENTO PRESIÓN-VELOCIDAD	92
2.31	CONVERGENCIA ITERATIVA.....	93
2.32	RESIDUOS	93
2.32.1.	Residuos para el solver segregado.....	94
2.32.2.	Residuos para el solver acoplado.....	95
2.33	PROPIEDADES DE UN MÉTODO DE SOLUCIÓN NUMÉRICA	96
2.33.1.	Consistencia.....	96
2.33.2.	Estabilidad.....	97
2.25.3.	Convergencia	97
2.25.4.	Conservación	97
2.25.5.	Precisión	98
3.1.	TIPO DE INVESTIGACIÓN	99

3.2. DATOS EXPERIMENTALES Y DE DISEÑO Y PARA EL ANÁLISIS DE LOS REACTORES PARA EL REFINO SECUNDARIO DEL ACERO	99
3.3. CONSTRUCCIÓN DEL MODELO GEOMÉTRICO A SIMULAR	100
3.4. CONDICIONES DE LA SIMULACIÓN DEL FLUJO DE FLUIDOS EN EL REACTOR METALURGICO.....	101
3.5. VALIDACIÓN DE RESULTADOS.....	102
3.6. APORTE AL CONOCIMIENTO	103
4. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	104
_4.1. RESULTADO DEL ESTUDIO DE INDEPENDENCIA E ÍNDICE DE CONVERGENCIA DE MALLA PARA APLICACION DE METODO DE VOLUMENES FINITOS.....	105
_4.1.1. MALLADO.....	106
4.2. ANALISIS DE RESULTADOS MEDIANTE EL USO DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC) UTILIZANDO DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA.	112
_4.2.1. REACTOR CON INYECCIÓN DE GAS CENTRICA	112
_4.2.2. REACTOR CON INYECCIÓN DE GAS EXCÉNTRICA.....	129
<u>5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES</u>	
<u>ANEXOS</u>	
ANEXO 1. ARTICULO INTERNACIONAL PRAISE WORTHY PRIZE (2011)	151
ANEXO 2. ARTICULO INTERNACIONAL (SCIENCE CITATION INDEX)	151
ANEXO 3. ARTICULO INTERNACIONAL (SCIENCE CITATION INDEX)	151
ANEXO 4. ARTICULO INTERNACIONAL (SCIENCE CITATION INDEX)	151

ANEXO 5. <i>PRESENTACIÓN EN CONGRESO INTERNACIONAL: 3RA INTERNATIONAL CONFERENCE ON CHEMICAL ENGINEERING AND ADVANCED MATERIALS (CEAM), 2011</i>.....	151
ANEXO 6. <i>PRESENTACIÓN EN CONGRESO NACIONAL(JIFI-2010)</i>.....	151
<u>ANEXO 7. <i>PRESENTACIÓN EN CONGRESO NACIONAL(JIFI-2014)</i>.....</u>	151

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1. REACTOR METALÚRGICO (OLLA-CUCHARA)	15
FIGURA 2. INYECCIÓN DE GAS ARGÓN A TRAVÉS DE UNA LANZA	17
FIGURA 3. INYECCIÓN DE GAS ARGÓN A TRAVÉS DE TAPÓN POROSO CÉNTRICO Y EXCÉNTRICO	18
FIGURA 4. A) TAPÓN POROSO, B) Y C) TAPONES POROSOS CON CANALES DIRECCIONALES	19
FIGURA 5. TAPONES POROSOS CON CANALES DIRECCIONALES	19
FIGURA 6. PATRONES DE FLUJO DE LA INYECCIÓN DE GAS A TRAVÉS DE UN TAPÓN POROSO CÉNTRICO	21
FIGURA 7. A) BURBUJEJO, B) CHORRO (PLUMA)	22
FIGURA 8. CLASIFICACIÓN DEL CAMPO DE FLUJO CON INYECCIÓN DE GAS POR EL FONDO DE UN REACTOR	23
FIGURA 9. DESPLAZAMIENTO RADIAL DEL CHORRO DE BURBUJA	24
FIGURA 10. ÁREAS DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	27
FIGURA 11. APLICACIÓN DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL	28
FIGURA 12. VERIFICACIÓN DE MALLA DE MANERA ESTÁNDAR	30
FIGURA 13. DIAGRAMA SIMPLE PARA EL PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO CUASI- HOMOGÉNEO	34
FIGURA 14. DIAGRAMA SIMPLE PARA EL PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO LAGRANGIANO	39
FIGURA 15. DIAGRAMA SIMPLE PARA EL PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO EULERIANO ...	41
FIGURA 16. ELEMENTO DE FLUIDO PARA LEYES DE CONSERVACIÓN	42
FIGURA 17. FLUJO DE MASA EN ELEMENTO DE FLUIDO	44
FIGURA 18. COMPONENTE DE LOS ESFUERZOS EN LAS TRES CARAS DEL ELEMENTO DE FLUIDO	45
FIGURA 19. COMPONENTES DE LOS ESFUERZOS EN LA DIRECCIÓN X	46
FIGURA 20. FLUJO DE CALOR	48
FIGURA 21. PERFIL DE VELOCIDAD EN RÉGIMEN LAMINAR, CHORRO LAMINAR	54
FIGURA 22. PERFIL DE VELOCIDAD EN RÉGIMEN TURBULENTO, CHORRO TURBULENTO	55
FIGURA 23. ESQUEMAS DE DISTRIBUCIÓN A) ESFUERZOS CORTANTES Y B) VELOCIDAD CERCA DE UNA PARED EN FLUJO TURBULENTO	56
FIGURA 24. TRATAMIENTO DE LA PARED EN FUNCIÓN DE LA DENSIDAD DE LA MALLA	60
FIGURA 25. PATRONES DE FLUJO HORIZONTAL	75
FIGURA 26. PATRONES DE FLUJO VERTICAL	77
FIGURA 27. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO DEL SOLVER SEGREGADO	78
FIGURA 28. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO DEL SOLVER ACOPLADO	79
FIGURA 29. CELDA TRIANGULAR	82
FIGURA 30. VOLUMEN DE CONTROL UNIDIMENSIONAL	85

FIGURA 31. A) REACTOR METALÚRGICO CON INYECCIÓN CENTRICA, B) REACTOR METALÚRGICO CON INYECCIÓN EXCÉNTRICA UBICADA A $\frac{1}{2}$ DEL RADIO.....	101
FIGURA 32. DIAGRAMA DE FLUJO DEL ALGORITMO NUMÉRICO DE SOLUCIÓN	102
FIGURA 33. DIFERENTES MALLADOS PARA EL REACTOR CON INYECCIÓN CÉNTRICA DE GAS.....	107
FIGURA 34. DIFERENTES MALLADOS PARA EL REACTOR CON INYECCIÓN EXCÉNTRICA DE GAS.....	107
FIGURA 35. ESTUDIO DE LA INDEPENDENCIA DE MALLA PARA REACTOR CON INYECCIÓN CÉNTRICA DE GAS, BARRAS.....	109
FIGURA 36. ESTUDIO DE LA INDEPENDENCIA DE MALLA PARA REACTOR CON INYECCIÓN EXCÉNTRICA DE GAS, BARRAS	111
FIGURA 37. COMPORTAMIENTO DE LA PLUMA EN EL ASCENSO DEL GAS DENTRO DEL REACTOR A) ESTUDIO EXPERIMENTAL (ANAGBO. ET AL, 1990) , B) Y C) SIMULACIÓN NUMÉRICA HÉCTOR Z.....	113
FIGURA 38. VELOCIDAD AXIAL PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992A) A 0.05 M DE ALTURA	114
FIGURA 39. VELOCIDAD AXIAL PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992A) A 0.10 M DE ALTURA	115
FIGURA 40. VELOCIDAD AXIAL PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992A) A 0.15 M DE ALTURA	116
FIGURA 41. VELOCIDAD AXIAL PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992A) A 0.20 M DE ALTURA	117
FIGURA 42. VELOCIDAD AXIAL PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992A) A 0.25 M DE ALTURA	117
FIGURA 43. VELOCIDAD AXIAL PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992A) A 0.3 M DE ALTURA	118
FIGURA 44. VELOCIDAD AXIAL PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992A) A 0.35 M DE ALTURA	118
FIGURA 45. DESVIACIÓN ESTÁNDAR DE LOS PERFILES DE LA VELOCIDAD AXIAL DE LAS OBSERVACIONES EXPERIMENTALES.	119
FIGURA 46. VOLUMEN DE FRACCIÓN DE GAS SUPERFICIE GAUSSIANA	120
FIGURA 47. VOLUMEN DE FRACCIÓN DE GAS DISTRIBUIDAS RADIALMENTE A UNA ALTURA DE 0.1 M.....	121
FIGURA 48. VOLUMEN DE FRACCIÓN DE GAS DISTRIBUIDAS RADIALMENTE A UNA ALTURA DE 0.2 M.....	122

FIGURA 49. VOLUMEN DE FRACCIÓN DE GAS DISTRIBUIDAS RADIALMENTE A UNA ALTURA DE 0.3 M.....	122
FIGURA 50. DESVIACIÓN ESTÁNDAR DE LOS PERFILES DEL VOLUMEN DE FRACCIÓN DE GAS DE LAS OBSERVACIONES EXPERIMENTALES	123
FIGURA 51. A) VOLUMEN DE FRACCIÓN DE LÍQUIDO, B) VELOCIDAD DEL LÍQUIDO ...	124
FIGURA 52. VELOCIDAD TANGENCIAL DE LA MEZCLA GAS-METAL LÍQUIDO PARA UN CAUDAL.....	124
FIGURA 53. HOLDUP DE GAS PARA UN CAUDAL DEL 100 NCM ³ /S Y DIÁMETRO.....	125
FIGURA 54. VELOCIDAD RADIAL DEL LÍQUIDO PARA UN CAUDAL DEL 100 NCM ³ /S Y DIÁMETRO DE ORIFICIO DE ENTRADA 3MM	126
FIGURA 55. ENERGÍA CINÉTICA TURBULENTO PARA EL MODELO 3A A DIFERENTES ALTURAS DEL REACTOR PARA UN CAUDAL DEL 200 NCM ³ /S Y DIÁMETRO DE ORIFICIO DE ENTRADA 3MM.....	127
FIGURA 56. ENERGÍA CINÉTICA TURBULENTO PARA LOS DIFERENTES MODELOS NUMÉRICOS DE TURBULENCIA ESTUDIADOS.....	129
FIGURA 57. A) MODELO FÍSICO DE AGUA (ANAGBO Y BRIMACOMBE, 1990), B) VOLUMEN DE FRACCIÓN DE GAS (SIMULACIONES HÉCTOR ZAMBRANO, 2016), C) LÍNEAS DE TRAYECTORIA DEL GAS A UN CAUDAL DE 200NCM ³ /S PARA INYECCIÓN DE GAS EXCÉNTRICA (SIMULACIONES HÉCTOR ZAMBRANO,2016).....	131
FIGURA 58. A) MODELO DE PLUMA (ZAMBRANO H., BENCOMO A., ET AL, 2015), B) PRESIÓN DINÁMICA CON UN CAUDAL DE 200NCM ³ /S PARA INYECCIÓN DE GAS EXCÉNTRICA	132
FIGURA 59. DISTRIBUCIÓN DE LA FRACCIÓN DE GAS PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA Y COMPARADOS CON LA DATA EXPERIMENTAL DE (XIE ET AL, 1992B) A 0.20 M DE ALTURA Y CAUDAL DE 200NCM ³ /S PARA INYECCIÓN DE GAS EXCÉNTRICA	133
FIGURA 60. DESVIACIÓN ESTÁNDAR DE LA FRACCIÓN DE GAS PARA DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA.....	134
FIGURA 61. CONTORNOS DE LA VELOCIDAD DEL GAS EN CUATRO SECCIONES TRANSVERSALES DIFERENTES	135
FIGURA 62. CONTORNOS DE LA PRESIÓN TOTAL A UN CAUDAL DE 500 NCM ³ /S PARA INYECCIÓN EXCÉNTRICA UTILIZANDO EL MODELO DE TURBULENCIA 1B	135
FIGURA 63. VELOCIDAD RADIAL DEL LÍQUIDO A UN CAUDAL DE 500 NCM ³ /S PARA INYECCIÓN EXCÉNTRICA.....	136
FIGURA 64. VELOCIDAD AXIAL DEL LÍQUIDO A UN CAUDAL DE 500 NCM ³ /S PARA INYECCIÓN EXCÉNTRICA.....	137
FIGURA 65. ENERGÍA CINÉTICA TURBULENTO (M ² /S ²) UN CAUDAL DE 500 NCM ³ /S PARA INYECCIÓN EXCÉNTRICA.....	137

LISTA DE TABLAS

TABLA 1. FLUIDOS	100
TABLA 2. MODELOS NUMÉRICOS.....	103
TABLA 3. ESTUDIO DE INDEPENDENCIA DE MALLA PARA REACTOR CON INYECCIÓN CÉNTRICA DE GAS	108
TABLA 4. ESTUDIO DE ÍNDICE DE CONVERGENCIA DE MALLA (GCI) PARA REACTOR CON INYECCIÓN CÉNTRICA DE GAS	110
TABLA 5. ESTUDIO DE INDEPENDENCIA DE MALLA PARA REACTOR CON INYECCIÓN EXCÉNTRICA DE GAS	110
TABLA 6. ESTUDIO DE INDEPENDENCIA DE MALLA PARA REACTOR CON INYECCIÓN EXCÉNTRICA DE GAS	112

LISTA DE SIMBOLOS

A	área
c	capacidad calórica específica
C_D	coeficiente de arrastre
C_{VM}	coeficiente de masa virtual
C_L	coeficiente de sustentación
C_f	coeficiente de fricción en la interfase
C_s	constante de Smagorinsky
C_{TD}	coeficiente de dispersión turbulenta
$C_{k1}, C_{\varepsilon1}$	constantes del modelo $k - \varepsilon$
C_1, C_2, C_μ	constantes del modelo $k - \varepsilon$
d_b	diámetro de burbuja
d, D	diámetro
$D_{l,g} / D_t$	derivada sustancial
$\partial / \partial x_i$	derivada parcial espacial
$\partial / \partial t$	derivada parcial temporal
F	fuerzas interfaciales
\dot{Q}	flujo volumétrico
g	aceleración de la gravedad
dt	intervalo de tiempo
N	número de burbujas
Pr	Número de Prandtl
p	presión
P_l	término de producción en el modelo $k - \varepsilon$

r	radio
Re	número de Reynolds
Re_b	número de Reynolds de las burbujas
T	temperatura
t	tiempo
u, v, w	Velocidades en 3D en coordenadas cartesianas
x, y, z	coordenadas espaciales
V	volumen
F_D	fuerza motriz o de arrastre
H_L	Fracción volumétrica de líquido (Holdup)
i	Caída de presión de la mezcla en las correlaciones
i_L	Caída de presión de la fase líquida en las correlaciones
U_s	Velocidad de mezcla
U_{SL}	Velocidad superficial de líquido

Letras Griegas

α	fracción volumétrica
α_t	difusividad turbulenta
Δt	paso de tiempo
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	tamaño de la malla
ε	disipación turbulenta
ε_{ijk}	tensor Levi-Civita
k	energía cinética turbulenta
λ	conductividad térmica
μ	viscosidad dinámica
μ_t	viscosidad dinámica turbulenta

ν	viscosidad cinemática
ν_t	viscosidad cinemática turbulenta
ω_i	componentes de la vorticidad
Ω	dominio de integración
ρ	densidad
σ	tensión superficial
σ_t	Numero de Prandtl turbulento
σ_{ij}	tensor de esfuerzo
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	Constantes en el modelo $k - \varepsilon$
μ_a	Viscosidad aparente
μ_r	viscosidad relativa
μ_L	viscosidad del liquido

INTRODUCCIÓN

En la industria metalúrgica el acero líquido es agitado para promover la homogenización por percolación a través del gas argón que es inyectado por un tapón poroso ubicado en el fondo del reactor o cuchara metalúrgica. Por ejemplo, la inyección de gas es usada para mejorar la velocidad de las reacciones químicas, disminuir los gradientes térmicos, disminuir incrustaciones (Bird et al, 1960). La inyección de gas también juega un papel importante en procesos de refinación del aluminio, sin embargo, observaciones experimentales de la dinámica de procesamiento del metal líquido es limitado debido a las altas temperaturas, el tamaño de las unidades de procesamiento y la opacidad visual. Consecuentemente la mayor cantidad de estudios de cucharas agitadas por gas han sido restringidos a modelos numéricos y experimentales de una configuración simple de inyección de gas en un reactor de agua utilizando similitud geométrica para el escalamiento.

Los modelos matemáticos que describen el movimiento del sistema de cucharas agitadas por gas pueden ser clasificados en dos grandes grupos: a) modelos de fase simple basado en el enfoque de la continuidad (Grvet, JH, 1982; Sahai y Guthrie 1982; Woo et al. 1990; Balaji y Mazundar 1991; Sheng y Irons 1992; Goldschmit y Coppola Owen 2001; Taniguchi et al. 2002), donde la combinación bicomponente gas-líquido es tratado como una mezcla y la forma de las ecuaciones de conservación se reducen a la de un fluido homogéneo en términos de densidad de la mezcla y la velocidad y b) modelo de dos fluidos (Schwarz y Turner 1988; Xia et al. 1999 , 2002; Ramírez-Argáez 2007; De Felice et al. 2012), donde hay una solución separada para cada fase y los términos de transferencia en la interface es empleado para simular la interacción entre las dos fases, en esencia el modelo de dos fluidos está basado en el modelo de velocidades de fase distintas, sin embargo, ellas muestran una tendencia a igualarse por las fuerzas de interacción en las interface, por ejemplo, cuando la interacción entre las fases está dada por las fuerzas de arrastre la cual actúa en la dirección opuesta al movimiento relativo, otras fuerzas pueden influir también en el

flujo como las fuerzas de sustentación, las fuerzas de masa virtual y la fuerza de dispersión turbulenta. Se han realizado estudios de modelos en 2D y 3D de los reactores agitados con gas (Pan et al. 1997; Zhang 2000; Aoki et al. 2004; Olsen y Cloete 2009; Cloete et al. 2009).

Los modelos de simulación mediante Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) proporcionan un medio económico para la comprensión de la compleja dinámica de flujo y pueden utilizarse estos cálculos en un amplio rango de flujos reduciendo la necesidad de pruebas experimentales, permitiendo realizar predicciones en el proceso de diseño y en la evaluación de procesos industriales, disminuyendo factores como costos, riesgos y tiempo, (Ranade, 2001), logrando así fundamentar la toma de decisiones que conducen al diseño de sistemas con un mejor desempeño.

La metodología numérica de solución para los modelos de DFC es subdividir el dominio en un gran número de volúmenes de control y convertir las ecuaciones diferenciales parciales por integración sobre estos volúmenes de control, en sus equivalentes algebraicos (Patankar, 1980). El resultado es un conjunto de ecuaciones algebraicas simultáneas que pueden ser resueltas empleando métodos iterativos para obtener el campo de distribuciones de variables dependientes relativas a las condiciones de frontera que definen el problema específico, tales como velocidades y presiones.

En este trabajo se simula y evalúa el comportamiento e interacción de un gas inyectado para proceso de refinado del acero, con la ayuda del software especializado *FLUENT*® en su versión 6.3, que resuelve sistemas de ecuaciones diferenciales parciales mediante el método de discretización de volúmenes finitos, y permite observar el comportamiento del gas en el interior de un reactor y comparar estos resultados con datos experimentales de la literatura abierta; así como el cálculo de la presión y compararlos con modelos empíricos.

CAPÍTULO I

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

1.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En la primera etapa de la fabricación del acero líquido existe una fase de fusión en hornos eléctricos de arco y otra de refinación en hornos cuchara; en esta última el acero sufre un tratamiento secundario donde se practica la desulfuración, la desoxidación, ajuste de la composición química y se homogeniza la temperatura, este proceso es llamado metalurgia secundaria o metalurgia del horno cuchara; lo que se requiere con este proceso es alcanzar un baño homogéneo en temperatura y composición, el procedimiento que se sigue es la agitación del acero líquido dentro del reactor llamado también cuchara por medio de un gas inerte cuyo objetivo principal es homogenizar química y térmicamente el baño, mejorar la transferencia de calor durante el recalentamiento y remover las inclusiones no metálicas; la agitación del baño por medio del gas inerte permite un aumento del rendimiento de las ferroaleaciones utilizadas, disminuyendo el tiempo total entre coladas, también permite disminuir el contenido de gases disueltos como el hidrógeno (H_2) y el nitrógeno (N_2), homogenizando la temperatura y a su vez la composición química en tiempos más cortos. El baño líquido de acero al ser agitado por el gas inerte permite que todos los fenómenos anteriormente discutidos estén estrechamente relacionados, esto principalmente ocurre por la turbulencia que se genera, y aunado a esto los procesos difusivos y convectivos

La importancia del estudio de los reactores utilizados para el procesamiento del acero de manera numérica permite obtener información relevante sobre los fenómenos hidrodinámicos tales como transferencia de masa, mezclado, interacciones entre las fases, etc, esto debido a la dificultad que implica el estudio de un modelo de reactor a escala real que debido a las dimensiones y tamaños de los reactores, a las altas

temperaturas y la opacidad del acero que dificulta la observación y medición experimentales directas.

El estudio está enfocado en determinar la solución numérica mediante simulación computacional del proceso de mezclado de dos fluidos dentro de un reactor, con viscosidades y densidades diferentes, utilizando para ello diferentes modelos de turbulencia, logrando determinar los parámetros más importantes a la hora de caracterizar un proceso de mezclado para el refino del acero como son: caída de presión, campos de presión, velocidad, transferencia de calor, transferencia de masa, mezclado del baño líquido, ascenso de burbujas, formación de pluma de flujo turbulento entre otras.

Hasta ahora según, (Mazumbar et.al, 1995), los estudios realizados para cucharones de refinación se dividen en tres grandes grupos:

- Estudios realizados basados en modelado físico
- Estudios de modelado matemático
- Estudios combinados de modelación matemática y física

Para los estudios basados en modelado físicos se basan principalmente en criterios de similitud geométrica, dinámica y cinemática para ello se utilizan modelos de acrílico como reactores y para los fluidos se utiliza agua (simulando el acero) y aire (simulando el argón), se estudia la fluidodinámica del horno cuchara agitado por gas.

Para el estudio del modelado matemático se resuelven las ecuaciones de conservación de masa, cantidad de movimiento y energía para flujos bifásicos utilizando dos enfoques numéricos, el primero es un enfoque Euleriano que se resuelven las ecuaciones de conservación tanto de la fase de gas dispersa como para la fase líquida continua, y en la interfase se unen estas dos fases donde se intercambia cantidad de movimiento (fricción), calor y masa; el segundo es el enfoque Euler-Lagrange, donde los fenómenos de transporte en fase líquida se considera bajo el enfoque Euleriano mientras que las burbujas se consideran como partículas individuales y su movimiento se asocia a la solución de una ecuación de trayectoria mediante un marco de referencia Lagrangiano.

Para estudios de modelado físico y matemático se combinan ambos para evaluar y validar modelos matemáticos y correlaciones numéricas que permiten estudiar los fenómenos físicos inherentes al refinado secundario del acero líquido.

Las dificultades que se presentan en experimentar con acero líquido desde el punto de vista operativo y de costos, así como la medición de variables de procesos, como fracción volumétrica de gas, velocidad de ascenso de burbujas, tamaño de las burbujas entre otras, se plantea la necesidad de estudios de modelado físicos y matemáticos que permitan darnos información valiosa de la fenomenología presente en el estudio de cucharones agitados por gas utilizando como herramienta la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC).

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo General

Analizar el comportamiento fluidodinámico de la mezcla multifásica acero líquido-nitrógeno en reactores inyectados con gas mediante el uso de la Dinámica de Fluidos Computacional para diferentes modelos de turbulencia.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Creación de la geometría y generación de la malla para el problema planteado.
- Realizar un estudio de convergencia e independencia de mallas para geometrías del reactor, considerando tapón poroso céntrico y excéntrico.
- Aplicar el método de los volúmenes finitos mediante análisis con Dinámica de Fluidos Computacional (DFC).

- Utilizar tres modelos de turbulencia con diferentes tratamientos en la pared, para el estudio numérico y seleccionar el que mejor se adapte a la data experimental seleccionada.
- Obtener una solución numérica para los campos de velocidad, energía cinética turbulenta y presión dentro del reactor para la mezcla multifásicas acero líquido-nitrógeno.
- Comparar y validar las simulaciones numéricas realizadas mediante Dinámica de Fluidos Computacional con estudios experimentales de la literatura abierta.

1.3 ALCANCES

- Simular numéricamente mediante el uso Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) y analizar cual modelo de turbulencia representa mejor la física del problema inherente al refino secundario del acero.
- Evaluar la evolución del patrón de flujo dentro del reactor.
- Comparar los resultados de la dinámica de fluidos computacional con resultados experimentales de la literatura abierta.

CAPITULO II

MARCO TEÓRICO

2.1 ANTECEDENTES DE LA INVESTIGACIÓN

Durante muchos años y hasta el día de hoy se siguen desarrollando investigaciones sobre el funcionamiento de los reactores agitados con gas para el refino secundario del acero, con la finalidad de lograr una mejor comprensión de los fenómenos físicos en el interior de estos dispositivos, el estudio de la mezcla y la fluidodinámica involucrada.

Con el fin de realizar una optimización en el diseño de los reactores agitados con gas, varias investigaciones se han llevado a cabo en años recientes acerca de los efectos en el proceso de mezcla para mejorar la homogenización de la composición química y la temperatura en los reactores, utilizando tanto modelos físicos así como modelos computacionales.

Olsen, J. y Cloete, S. (2009). En su trabajo titulado “Coupled DPM and VOF model for analyses of gas stirred ladles at higher gas rates” realizaron un estudio mediante dinámica de fluidos computacional para una geometría tridimensional y en estado transitorio usando un acoplamiento entre el método de volumen de fluido (VOF) y el método de fase discreta (DPM) para estudiar el comportamiento de un reactor (cuchara metalúrgica) en la cual se le inyecta gas por el fondo y observar el comportamiento dinámico de la mezcla agua-aire y validarlo con data experimental.

Entre las conclusiones más relevantes establece que el acoplamiento entre el modelo DPM y el modelo VOF es numéricamente robusto y eficiente y que las fuerzas de sustentación no son influenciadas hidrodinámicamente por las altas tasas de gas.

Este trabajo se relaciona con la investigación en curso, ya que proporciona información valiosa sobre técnicas de simulación de Dinámica de Fluidos Computacional que permite realizar un enfoque numérico a través de metodologías utilizadas para obtener resultados más precisos.

Geng, D. y Lei, H. (2010). En su investigación “Optimization of mixing time in a ladle with dual plugs” realizaron un estudio utilizando modelos matemáticos para el flujo de dos fases (Euler-Euler), el modelo matemático se usó para investigar el comportamiento de la mezcla gas-líquido y analizar el efecto de la utilización de dos tapones porosos. Para la simulación numérica realizada consideraron ambos fluidos como Newtonianos, viscosos e incompresibles y el flujo de fluidos fue en estado estable e isotérmico, las burbujas de gas se asumieron esféricas y su deformación no se tomó en cuenta. Para realizar las simulaciones se utilizó el método de los volúmenes finitos, utilizando para ello el paquete computacional CFX 5.7.

Entre las conclusiones más resaltantes se tiene que hay dos tipos de recirculación en la zona interna de la cuchara, una se da en el medio de las dos plumas y la otra se presenta entre la cara de la pared y la pluma. El tiempo de mezcla tiene una relación complicada con respecto al ángulo de posición de los dos tapones porosos.

Este trabajo se relaciona con la investigación en curso, ya que proporciona información valiosa sobre las condiciones de simulación y el efecto de la posición de los tapones porosos.

Liu, H. y Qi, Z. (2011). En el artículo “Numerical simulation of fluid flow and interfacial behavior in three-phase argon-stirred ladles with one plug and dual plugs” se realizó un estudio de la inyección de gas argón con la configuración de uno y dos tapones porosos por el fondo de reactor metalúrgico y se obtuvo información del comportamiento de las interfaces escoria-acero, escoria-gas y acero-gas. El flujo de fluidos se resuelve bajo una referencia Euleriana junto con el movimiento de partículas individuales de burbujas de argón (referencia Lagrangiana) y el método del

volumen de fluido (VOF) para estudiar la interface entre dos o más fases fluidos inmiscibles. Para el cálculo de la fase multifásica utilizo el método de los volúmenes finitos mediante el uso de la herramienta computacional FLUENT 6.3; las condiciones para la simulación que utilizaron fue de no deslizamiento en la pared (no slip) con el fin de capturar gradientes que mejoren el comportamiento de la malla utilizada, las burbujas de gas se asumieron esféricas y que escapan por el tope y son reflejadas por las otras paredes, el modelo de turbulencia utilizado es el Kappa-Épsilon ($\kappa - \varepsilon$), el criterio de convergencia utilizado es de 10^{-3} para los residuales de todas las variables dependientes.

Entre los resultados importantes de la investigación presenta la deformación que sufre la capa de escoria y la formación o apertura de un ojo en la capa de escoria a diferentes tasas de flujo de gas, esto permitió analizar el comportamiento de la interface entre el acero y la escoria para el sistema de con uno y dos tapones porosos.

Este trabajo es pertinente con la investigación aquí planteada, ya que aborda la importancia de una buena selección de las condiciones de borde y de contorno, así como de las técnicas numéricas que permitan simular el fenómeno físico considerando.

Olsen, J. y Popescu, M. (2012). En su trabajo de investigación titulado “On the effect of lift forces in bubble plumes” estudian si la influencia de las fuerzas de sustentación tienen o no importancia en el flujo de ascenso de burbujas en la pluma turbulenta. Para el estudio consideraron el acoplamiento de volumen de fluido (VOF) y el modelo de fase discreta (DPM) para un modelo agua-aire, se usa el modelo VOF para describir el comportamiento del líquido en el reactor, la fase de gas sobre el líquido y la interface entre ellas, las burbujas de gas son modeladas como discretas sin la interacción partícula-partícula, para esto se utiliza el modelo de fase discreta (DPM), esta metodología se aplicó con el software para volúmenes finitos FLUENT 6.3.

Los estudios arrojaron conclusiones interesantes referentes a como las fuerzas de sustentación pueden tener influencia sobre la hidrodinámica del reactor y que los

coeficientes de sustentación son función del tamaño de la burbuja y del volumen de fracción, sin embargo, existen incertidumbres sobre la expresión de los coeficientes de sustentación y que deben realizarse más trabajos que permitan aclarar por qué la expresión dada por (Tomiyama,2002) refleja que las fuerzas de sustentación tienen un pequeño efecto en la hidrodinámica de los reactores.

Este trabajo se relaciona con la investigación en curso, ya que propone una visión importante a la hora de considerar la influencia de las fuerzas de sustentación (lift force) en el ascenso de burbujas y en la formación de la pluma para configuraciones del reactor con un tapón poroso céntrico y excéntrico.

Zambrano, H. y Bencomo, A. (2015). En su trabajo de investigación titulado “Numerical Simulation of a Gas-Stirred Ladle” realizaron una simulación numérica mediante Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) para investigar el comportamiento de la recirculación y el desarrollo de la pluma en reactores agitados con gas; el estudio se realizó con el modelo físico de un reactor para gas-aire con un tapón poroso excéntrico ubicado en el fondo del reactor, el modelo a estudiar representa una séptima parte de un reactor industrial real, el modelado numérico utilizado fue Euler-Euler mediante dinámica de fluidos computacional, con el uso del paquete computacional FLUENT 6.3, apreciándose una buena aproximación a la data experimental.

Entre las conclusiones más importantes se comprobó que el incremento de la intensidad de agitación y la turbulencia en el reactor incrementan cuando incrementa la tasa de flujo, y se espera que con la colocación de un tapón poroso excéntrico mejora el mezclado y reduce las regiones de flujo inactiva o zonas muertas y que el cambio de diámetro del tapón poroso casi no afecta los patrones de flujo en el ascenso de las burbujas que es dominado por las fuerzas inerciales cerca del tapón de salida y por las fuerzas gravitacionales para el peso del líquido.

2.2 REACTOR METALÚRGICO (OLLA / HORNO-CUCHARA)

Durante los últimos años la refinación secundaria del acero que consiste en realizar operaciones para ajustar la composición química, homogenizar la composición y la temperatura, desulfurar y desgasificar el acero, ha tenido un tratamiento especial debido a su importancia en el proceso final de refinación del acero fundido. En el horno cuchara, una de las funciones principales es contener el acero en estado líquido durante las operaciones de refinación y además entregar el acero limpio al distribuidor de colada continua para ello se necesita mantener una temperatura adecuada con pérdidas mínimas de calor (Peters,1987).

La olla cuchara es un reactor metalúrgico de gran importancia dentro del proceso de refinación del acero, en ella se controlan la mayor parte de las variables de proceso físicas, térmicas, termodinámicas y químicas, como se mencionó anteriormente, básicamente está diseñada de acero con recubrimiento de ladrillo que sirve de aislante y de refractario para la superficie de trabajo que se encuentra expuesta al acero.

En la cuchara o reactor metalúrgico, figura 1, se agita el baño metálico por medio de un gas inerte (argón), se adicionan elementos aleantes y microaleantes, logrando así la homogenización de la composición química y la temperatura, además de la flotación y modificación de inclusiones no metálicas a través del uso de una escoria apropiadas que las retenga (Szekely, 1988).

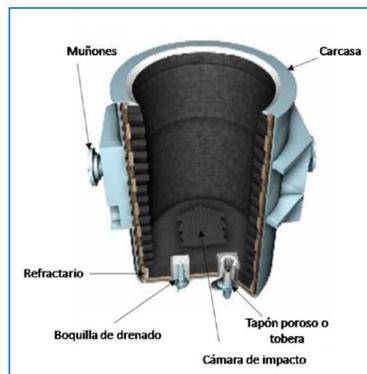


Figura 1. Reactor metalúrgico (horno-cuchara)

2.3 PRINCIPALES OPERACIONES EN LA REFINACIÓN SECUNDARIA DE ACERO

Como se mencionó anteriormente, en el proceso de refinación secundaria se llevan a cabo diferentes operaciones con la finalidad de mejorar la fabricación del acero adicionando ferroaleaciones, ajustando y controlando las reacciones químicas, las funciones principales de dichas operaciones son:

- Control de gases (oxígeno, hidrógeno y nitrógeno).
- Reducción del número de inclusiones no metálicas.
- Modificar la morfología de las inclusiones, que aunque no se pueden eliminar completamente, se pueden modificar en tamaño y forma para hacerlas compatibles con las propiedades mecánicas del acero final.
- Desulfuración, desoxidación y descarburación.
- Control y homogenización de la composición química final.
- Homogenización del baño y el control de la temperatura de vaciado.

2.4 MEDIOS DE AGITACIÓN DEL METAL LÍQUIDO EN EL REACTOR METALÚRGICO (OLLA)

Se pueden emplear varias técnicas de agitación del acero líquido, unas por medio de lanzas rotatorias cuya agitación se realiza por la parte superior del reactor, otras por medio de toberas ubicadas en el fondo del reactor y por último la agitación que se realiza de manera electromagnética.

El gas que es inyectado va realizando el mezclado durante su recorrido hacia la superficie promoviendo las reacciones químicas, homogenizando la temperatura y la generación de turbulencia ayuda significativamente a la aglomeración de las inclusiones metálicas más pequeñas y su flotación hasta la escoria.

2.4.1 Inyección de gas argón a través de una lanza

Una forma simple de inyección de gas es a través de una lanza sumergida, se promueve una buena eliminación de azufre y fósforo, se protege el revestimiento del reactor (olla) y requiere poca inversión comparada con otros métodos, sin embargo, se tiene una mala eliminación de oxígeno y nitrógeno, la capa superficial se vuelve muy turbulenta y se crean importantes zonas dentro del baño de acero, donde la circulación es casi nula llamadas zonas muertas (Jauhiainen et al, 2001), figura 2.

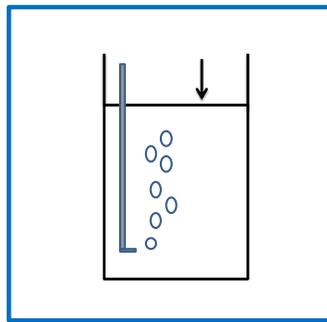


Figura 2. Inyección de gas argón a través de una lanza

2.4.2 Inyección de gas argón a través de un tapón poroso

La inyección de gas argón a través de un tapón poroso por la parte inferior del reactor metalúrgico proporciona un mejor mezclado disminuyendo las zonas muertas, logrando una agitación más uniforme del baño, la agitación se puede hacer continuamente y desde cualquier parte, posee bajos costos de inversión y operación, sin embargo, ocasiona un fuerte desgaste en el material refractario de las paredes y esto trae como consecuencias riesgos de fractura (Jauhiainen et al, 2001; Zambrano et al, 2011).

Los patrones de agitación que se logran a través de la inyección de gas por medio de tapones porosos sean céntricos o excéntricos variaran significativamente debido a que la energía de agitación que se promueve como función de varios factores tales como: flujo de gas, diámetro del tapón de entrada de gas, número y posición del tapón

poroso, ángulo de la entrada de gas y cantidad de metal a agitar, así como la relación del diámetro del reactor con respecto a la altura que alcanza el metal dentro del reactor; esto produce una variación en el tiempo de mezclado según la configuración que se tenga.

También la influencia de factores en el proceso de operación son importantes, como es el caso del área expuesta durante la fase de inyección de gas, ya que al incrementar la energía de agitación se tienen tiempos de mezclado más cortos e incrementa la exposición del gas a la acción oxidante del medio ambiente.

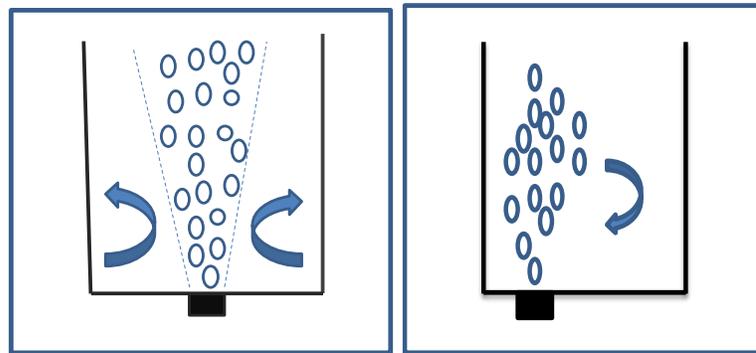


Figura 3. Inyección de gas argón a través de tapón poroso céntrico y excéntrico

2.5 TIPOS DE TAPONES POROSOS

El tapón poroso es un dispositivo a través del cual se inyecta gas argón por el fondo del reactor (horno-olla), existen dos tipos de tapones porosos: toberas porosas y toberas porosas con canales direccionales de flujo, figura 4 y 5.

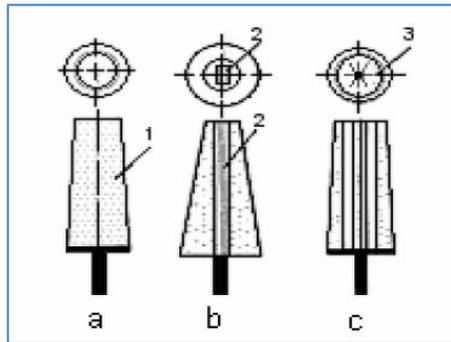


Figura 4. a) Tapón poroso, b) y c) Tapones porosos con canales direccionales
(Fuente: Lovanov, 2005)

TAPÓN POROSO	TAPÓN DE UN SOLO COMPONENTE			TAPÓN MULTICOMPONENTE	
	DE RANURA	DE LABERINTO	DE ESTRELLA	DE SEGMENTO	HÍBRIDO
Estructura porosa alterna	Estructura porosa dirigida			Estructura porosa dirigida y alterna	
Alta porosidad	Ranuras separadas	Canales entrecruzados	Ranuras continuas		
Prensado	Fundido			Fundido y prensado	

Figura 5. Tapones porosos con canales direccionales
(Fuente: Pan, 1999)

2.6 COMPORTAMIENTO DEL FLUIDO DENTRO DEL REACTOR METALÚRGICO

Durante la operación de agitación del reactor metalúrgico (olla) ocurren una gran variedad de fenómenos físicos que involucra directamente una gran cantidad de variables que necesitan ser estudiadas con el fin de obtener un proceso óptimo en el refinado secundario del acero, el proceso de inyección de un gas inerte con la finalidad de mejorar las características del flujo durante la operación de refinación del acero,

representa uno de los retos más grandes en la investigación científica por lo complejo del estudio ya que de ahí depende en gran medida el desempeño del acero como producto.

El patrón de flujo de fluidos dependerá fundamentalmente de la posición de la inyección, lo que se busca es obtener el menor volumen muerto, con lo cual es importante conocer cuál es la posición más adecuada para lograr el mejor patrón de flujo, en la figura 6, se puede observar un patrón de flujo típico para un tapón colocado en el centro del reactor, se pueden apreciar algunas zonas muertas en las esquinas.

Para coladas de acero grandes (300 toneladas) es necesario colocarles dos tapones porosos a un tercio y dos tercios del diámetro del reactor; cuando se hacen adiciones durante la inyección se recomienda que se realicen en la zona donde el fluido va descendiendo para lograr un mayor tiempo de residencia.

Durante la inyección se forma un cono invertido dentro del baño de acero, constituido por una mezcla gas-líquido, a lo cual se conoce como pluma; la velocidad dentro de la pluma y la recirculación del metal son proporcionales a $(\text{flujo de gas})^{1/3}$, $(\text{profundidad del acero})^{1/4}$ y $(\text{radio de la olla})^{-1/3}$, con lo que la recirculación del metal no solamente depende del flujo de gas, sino que es necesario considerar estos otros parámetros. Dos funciones principales de la inyección son: alcanzar una gran área de contacto metal-escoria para que las reacciones de refinación se lleven a cabo, y la otra, la transferencia de los productos de refinación del metal hacia la escoria. Para la primera se requiere altas velocidades de recirculación, es decir, altos flujos de gas, y para la segunda un flujo suave (El-Kaddah, 1984).

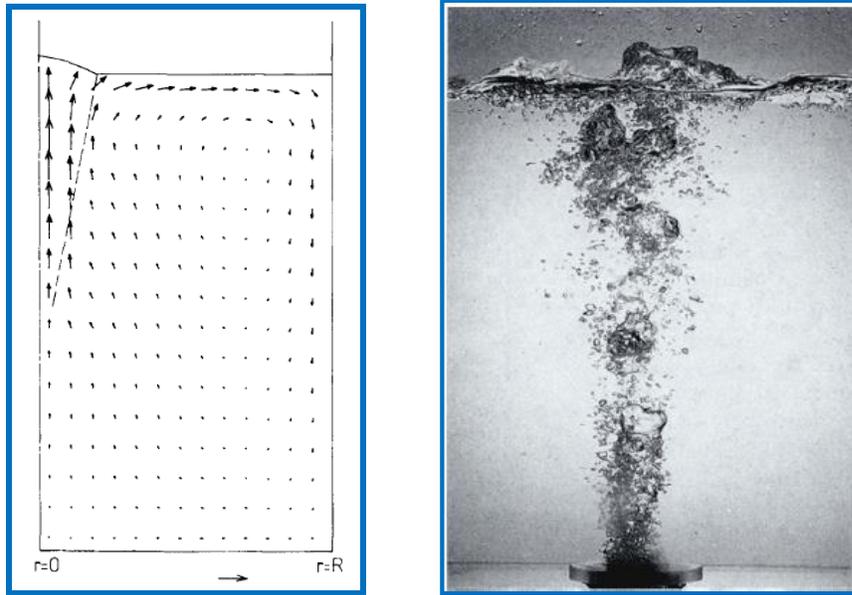


Figura 6. Patrones de flujo de la inyección de gas a través de un tapón poroso céntrico
(Fuente: Mazumdar, 1985, Anagbo,1990)

En la figura 7, se pueden apreciar dos comportamientos cuando es inyectado el gas en un reactor metalúrgico: Chorro (pluma) y el burbujeo. El chorro es controlado principalmente por las fuerzas inerciales del gas, formando una columna de gas en el baño de acero. Muchas burbujas pequeñas son formadas en la interface gas-líquido y el baño líquido es forzado a moverse debido a las fuerzas cortantes en la interface. Bajo las condiciones de burbujeo, las burbujas son generadas sucesivamente a la salida del tapón, y el flujo del baño líquido es afectado por las fuerzas inerciales del gas inyectado, así por las fuerzas de flotación que actúa sobre las burbujas en el baño (Ogawa, 1989).

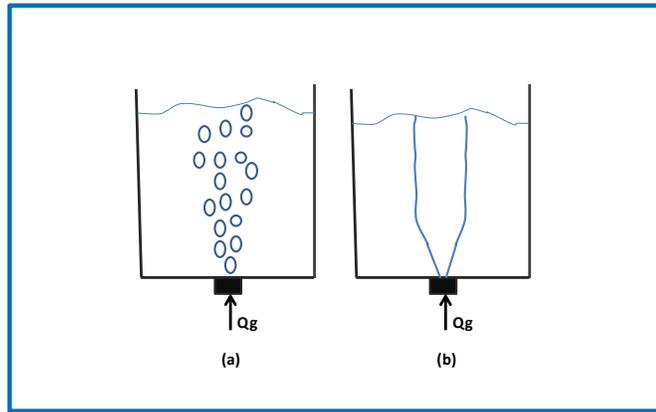


Figura 7. a) Burbujeo, b) Chorro (pluma)

La condición crítica entre los dos patrones puede ser descrita por las ecuaciones:

$$M = \frac{u_n}{c} = 1 \quad (1)$$

$$u_n = Q_g / \pi r_{ni}^2 \quad (2)$$

Donde M es el número de Mach a la salida del tapón, u_n es la velocidad del gas a la salida del tapón y r_{ni} es el radio del tapón.

Debido a la complejidad de los movimientos cinéticos presentes en el reactor (mecánico, térmico o natural), la turbulencia es difícil de definir para este tipo de sistemas, a pesar de la información existente sobre el tema.

El campo de flujo de un jet de burbujas vertical en un baño puede ser dividido en cuatro regiones con respecto a la distancia axial desde la salida de la tobera como se muestra en la figura 8, estas son a) movimiento, b) transición, c) flotación y d) región superficial.

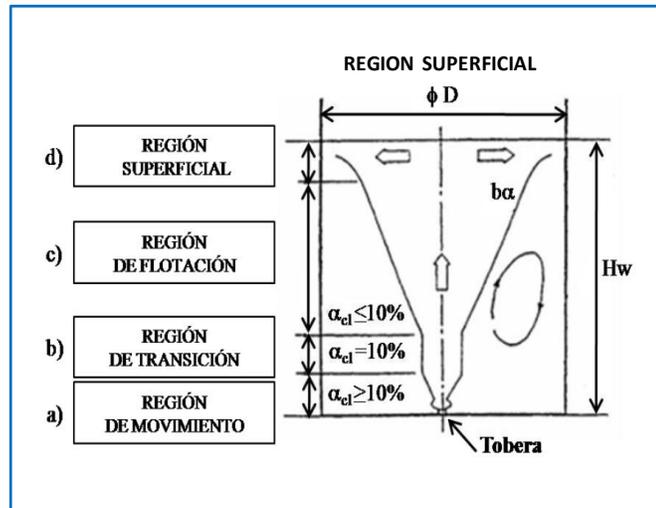


Figura 8. Clasificación del campo de flujo con inyección de gas por el fondo de un reactor
(Fuente: Bird,1993)

El flujo en la región de movimiento está gobernado por las fuerzas inerciales del gas inyectado, mientras que las fuerzas de flotación son mayores en la región de flotación tomando el papel principal. La razón entre las fuerzas inerciales y las fuerzas de flotación son conocidas como el número modificado de Froude (Fr_m). Conforme el número (Fr_m) es mayor, la región de movimiento aumenta (González D., 2011).

Un esquema del desplazamiento radial de chorro de burbuja se muestra en la figura 9. Cerca del tapón de jet de burbujas está influenciado principalmente por las fuerzas inerciales hasta alcanzar una altura vertical H_0 . Conforme la influencia de las fuerzas inerciales se debilita el jet de burbuja comienza a desplazarse alrededor del eje del reactor (horno-olla).

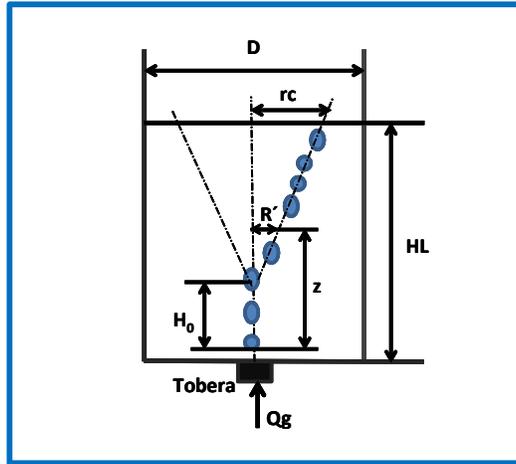


Figura 9. Desplazamiento radial del chorro de burbuja

Este desplazamiento radial se va incrementando conforme el chorro de burbuja se acerca a la superficie. De acuerdo a la propuesta de Ishibashi para calcular la altura de penetración del chorro de gas inyectado horizontalmente, H_0 es correlacionado como una función del número modificado de Froude. Éste representa la relación de las fuerzas inerciales del gas inyectado y las fuerzas de flotación de las burbujas.

$$\frac{H_0}{d_n} = 2Fr_m^{0.25} \quad (3)$$

$$Fr_m = \frac{\rho_g Q_g^2}{\rho_l g d_{ni}^5} \quad (4)$$

Donde ρ_g es la densidad del gas y ρ_l es la densidad del líquido.

El desplazamiento radial tipo jet está dado por las siguientes ecuaciones:

$$R' = \frac{(z - H_0)r_c}{(H_L - H_0)} \quad z \geq H_0 \quad (5)$$

$$r_c = 0.37R \quad (6)$$

Donde R es el radio del reactor (olla).

2.6.1 Energía de agitación

Un factor de gran importancia y que debe ser tomado muy en cuenta en cualquier sistema de agitación con inyección de gases es la energía de agitación o de mezclado el cual está íntimamente relacionado con el tiempo de mezclado. La energía de agitación no es otra cosa que la energía cinética y potencial que es inducida en el baño metálico ya sea por la inyección de un gas o por la simple acción del vaciado del acero líquido. La energía de agitación o de mezclado se puede medir en términos de $Watts/m^3$ o en $Watts/T$ del metal. La energía generada durante el vaciado es muy limitada así que la única manera de hacerlo eficientemente es mediante la inyección de un gas inerte. La siguiente ecuación es utilizada para calcular la energía de agitación.

$$E = 14.23 \left(\frac{VT}{M} \right) \log \left(\frac{1+H}{148 P_0} \right) \quad (7)$$

Donde E es la energía de agitación ($Wton^{-1}$), V es la velocidad del flujo de gas ($Nm^3 \min^{-1}$), T es la temperatura del baño (K), M es el peso del baño (*Toneladas metricas*), H es la profundidad de la inyección de gas (m) y P_0 es la presión del gas en la superficie del baño (atm).

2.6.2 Tiempo de mezclado

En la actualidad se han investigado los fenómenos de transporte que ocurren durante las operaciones de refinación y agitación de la olla de acero, basándose en su mayoría en la modelación de prototipos a escala, usando agua y aceite como líquidos de referencia. En estos modelos los fenómenos de flujo de fluidos tienen un papel muy importante, de hecho en la mayoría de operaciones de extracción y refinación de metales, debido a que estos se encuentran comúnmente en estado líquido. Durante los

últimos años, se han obtenido grandes avances sobre la química y la termodinámica de las operaciones en los procesamientos de metales, sin embargo, el conocimiento de la cinética de refinación no ha progresado tan rápidamente, quizás uno de los grandes obstáculos es la escasa información acerca de los fenómenos de flujo de fluidos para estos sistemas.

A pesar de la poca información existente se presenta un crecimiento progresivo en el interés de estudiar los conceptos del flujo de fluidos en las operaciones del procesamiento de los metales.

En el presente estudio se pretende analizar y comprender principalmente los procesos de transporte de cantidad de movimiento y masa por diferentes mecanismos de turbulencia, que tiene lugar dentro del sistema durante el proceso de agitado del reactor (olla).

2.7 DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)

Según Fernández (2012), La Mecánica de Fluidos denominada Computacional Fluid Dynamics, traducida normalmente al castellano como Fluidodinámica Computacional o Dinámica de Fluidos Computacional, y que consiste en el empleo de computadores y de técnicas numéricas para resolver todos aquellos problemas físicos que están relacionados con el movimiento de los fluidos y, en ocasiones, de otros fenómenos asociados como la transferencia de calor, las reacciones químicas, el arrastre de sólidos, etc.

La dinámica de fluido computacional (DFC) es la ciencia que trata de predecir el comportamiento de un flujo, la transferencia de calor y masa, reacciones químicas y fenómenos relacionados, mediante la resolución numérica del conjunto de ecuaciones que gobiernan los fluidos y con la interrelación de diferentes áreas del conocimiento, figura 10. Los resultados de la resolución numérica son relevantes en el desarrollo de nuevos productos, solución de problemas y rediseño. El análisis computacional es un complemento a los estudios experimentales, reduciendo el esfuerzo requerido en la evaluación de diseños y la adquisición de los datos.

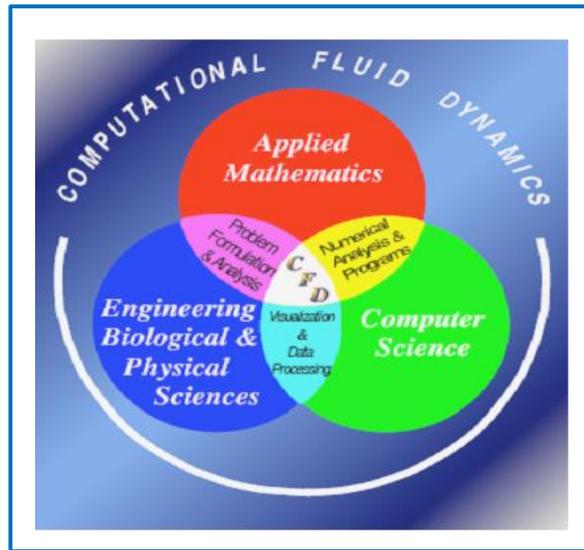


Figura 10. Áreas de la dinámica de fluidos computacional
(Fuente: Zambrano, 2014)

2.8. APLICACIONES DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)

La dinámica de fluidos computacional hoy día es una herramienta poderosa para la simulación de flujo de fluidos, su utilización se ha extendido a una gran cantidad de procesos en una infinidad de aplicaciones, cabe destacar, según (Fernandez,2012), la industria automovilística, en el estudio de la aerodinámica de vehículos; la industria aeroespacial, en el estudio de aviones supersónicos, cohetes y transbordadores; la industria aeronáutica, en el estudio de perfiles aerodinámicos en los aviones comerciales; la industria naval, enfocadas en las características de las hélices de propulsión y diseño de carenas de barcos y submarinos; la industria de generación eléctrica, enfocadas en el diseño de turbinas de vapor y turbinas hidráulicas y el flujo en calderas; la industria química, en el estudio de deposición de vapores químicos y flujos reactivos complejos; la industria nuclear, con el estudio del flujo en conductos de sustancias originadas en las reacciones nucleares, flujo y enfriamiento en reactores; industria biomédica y farmacéutica, figura 11; para el estudio de los

distintos fluidos vitales en arterias y venas; industria alimentaria, en el estudio de pasteurización, ciclones y precipitadores, entre otras aplicaciones de la dinámica de fluidos computacional contempla impacto eólico en puentes, torres y edificios, ventilación de edificios, simulación de incendios y dispersión de humos y contaminantes, redes de tuberías, transporte de sedimentos, flujo en turbomáquinas, máquinas de desplazamiento positivo; etc.

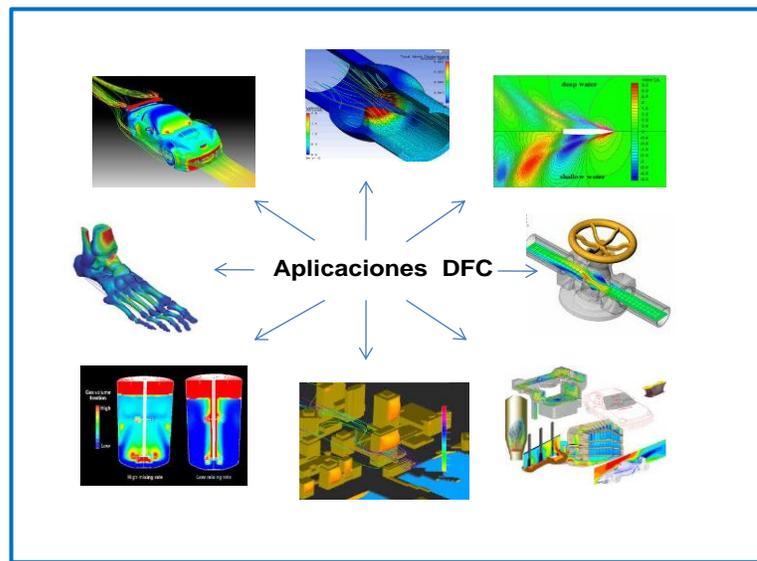


Figura 11. Aplicación de la dinámica de fluidos computacional
(Fuente: Zambrano, 2015)

2.9. PROGRAMA DE DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (FLUENT 6.3)

Para la realización de este trabajo, se utilizó el software Fluent en su versión 6.3, que es un conjunto de programas para la simulación de fluidos. Es una herramienta de Dinámica de Fluidos Computacional (DFC), su uso es muy versátil y permite la simulación de innumerables casos de la industria. Es un programa comercial con muy buena aceptación y continuamente están saliendo nuevas versiones mejoradas.

Fluent provee múltiples opciones de solución, que combinado con métodos Multigrid para mejorar la convergencia, se obtiene soluciones eficientes y precisas para un

amplio régimen de flujos. La variedad de modelos físicos en Fluent permite predecir con gran exactitud flujos laminares y turbulentos, transferencia de calor (radiación, convección, conducción), reacciones químicas, flujos multifásico y otros fenómenos involucrados; teniendo Fluent una gran capacidad de flexibilidad de mallas, siendo capaz de que automáticamente cambie la malla durante el proceso de resolución.

2.10. FORMA DE TRABAJAR LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)

En primer lugar es preciso crear una malla en cuyos nodos se van a resolver las ecuaciones de Navier-Stokes (**pre-procesamiento**). A partir de unas dimensiones calculadas previamente se realiza el mallado con el programa Gambit en su versión 2.0. Una vez creada la malla, el modelo se corre con el programa Fluent. Éste, se basa en el método de resolución de volúmenes finitos, tomando como geometría de partida la generada en Gambit. Fluent calcula la solución de las ecuaciones de manera iterativa hasta que encuentra una solución con los criterios de convergencia fijados (**procesamiento**). La precisión de la solución depende del modelo utilizado, de las condiciones de contorno que hayamos especificado y de la discretización, es decir, de la malla creada para un posterior análisis en el **post-procesamiento**.

2.11. VERIFICACIÓN DE LA MALLA

Los resultados obtenidos en un estudios numéricos pueden verse afectados por errores de discretización del dominio, para reducir este error se realiza una verificación de la malla. Para realizar la verificación de la malla se pueden utilizar dos metodologías aceptadas y referenciadas en las normas *ASTM V&V 20-2009 “Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer”*

2.11.1. Método Estándar

Este método consiste en seleccionar una variable de control considerada de importancia para el estudio en particular y se realizan varias simulaciones manteniendo las mismas condiciones de borde para todos los casos, pero aumentando el número de elementos de la malla hasta que se observe que el valor de la variable seleccionada no varía significativamente al seguir refinando la malla. Esta variación se considera aceptable en un rango de 1% hasta 3% del valor obtenido para la variable de importancia en la malla seleccionada con respecto a la más refinada. Un comportamiento esperado se muestra de forma sencilla en la figura 12.

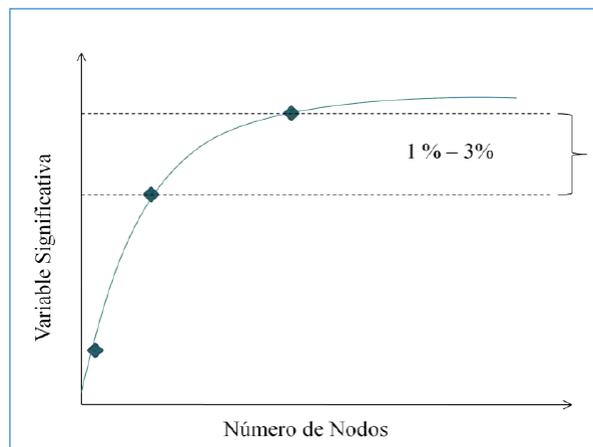


Figura 12. Verificación de malla de manera estándar
(Fuente: Mendonca, 2012)

2.11.2. Método GCI (Grid Convergence Index)

El método GCI, denotado de esta manera por sus siglas en inglés (Grid Convergence Index) o Índice de Convergencia de Malla es una metodología que permite evaluar el nivel de convergencia e independencia de los resultados obtenidos a través de técnicas numéricas y el nivel de discretización de la malla (Roache, 1994) especialmente diseñado para facilitar la evaluación de los investigadores en el área de dinámica de fluidos computacional y elementos finitos.

El GCI representa la medida en la cual el porcentaje del valor calculado está lejos del valor numérico asintótico, indica cuanto cambiaría la solución con un mayor refinamiento de la malla. Un valor pequeño de GCI indica que el cálculo está dentro del rango asintótico.

El procedimiento recomendado está bien referenciado en (Roache, 1994) el cual se basa en la interpolación de Richardson (Richardson, 1927) y en la norma ASTM, los pasos se presentan a continuación:

✓ **Paso 1:** definir un tamaño representativo de la malla h

Para dos dimensiones

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta A_i \right]^{1/2} \quad (8)$$

Para tres dimensiones

$$h = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta V_i \right]^{1/3} \quad (9)$$

Para estas ecuaciones, h es el tamaño representativo de la malla, N es el número total de elementos de la malla, i es el elemento correspondiente, ΔA es el área del elemento i y ΔV es el elemento de volumen del elemento i .

✓ **Paso 2:** seleccionar tres grupos de mallas y ejecutar simulaciones para determinar los valores de las variables significativas ϕ consideradas importantes para el estudio en particular. Se calcula el factor de refinamiento r de la siguiente forma:

$$r = \frac{h_{grueso}}{h_{refinado}} \quad (10)$$

Se recomienda que el valor del factor de refinamiento sea $r > 1,3$

- ✓ **Paso 3:** denote $h_1 < h_2 < h_3$, $r_{21} = h_2/h_1$, $r_{32} = h_3/h_2$ y calcule el orden aparente p del método de la siguiente manera:

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} * |\ln|\varepsilon_{32}/\varepsilon_{21}| + q(p)| \quad (11)$$

$$q(p) = \ln\left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s}\right) \quad (12)$$

$$s = 1 * \text{sign}(\varepsilon_{32}/\varepsilon_{21}) \quad (13)$$

$$\varepsilon_{32} = \phi_3 - \phi_2 \quad (14)$$

$$\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1 \quad (15)$$

En estas ecuaciones, $q(p)$ es una ecuación en función de p , s es la función de signo, ε_{ij} es la desviación entre los resultados de las mallas comparadas.

- ✓ **Paso 4:** Calcule la extrapolación de los resultados de las variables significativas, utilizando la siguiente expresión

$$\phi_{ext}^{21} = (r_{21}^p - \phi_2)/(r_{21}^p - \phi_1) \quad (16)$$

$$\phi_{ext}^{32} = (r_{32}^p - \phi_2)/(r_{32}^p - \phi_1) \quad (17)$$

- ✓ **Paso 5:** Calcule y reporte los valores de los siguientes errores estimados

Error Relativo Aproximado:

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \quad (18)$$

Error Relativo Extrapolado

$$e_{ext}^{21} = \left| \frac{\phi_{ext}^{21} - \phi_1}{\phi_{ext}^{21}} \right| \quad (19)$$

Índice de Convergencia de Malla

$$GCI_{refinada}^{21} = \frac{1,25 * e_a^{21}}{r_{21}^p - 1} \quad (20)$$

2.12. MODELADO NUMÉRICO DE REACTORES AGITADOS CON GAS

Hay tres categorías diferentes para el modelado de reactores agitados con gas

- Modelo cuasi-homogeneo, en el cual el ascenso de la mezcla gas-líquido es asumida como un líquido homogéneo de densidad reducida, aquí, la geometría de la pluma y la fracción volumétrica de gas son especificadas como condición de entrada en el esquema numérico.
- Modelo de dos fases Euler-Lagrange, en el cual el líquido se considera el continuo (Euler) y las ecuaciones de momento son resueltas al mismo tiempo que la ecuación para las trayectorias de burbujas (Lagrange), el volumen de fracción de gas y la geometría de la pluma son determinadas de la solución de las ecuaciones.
- Modelo de dos fases Euler-Euler, en la cual las ecuaciones de continuidad y momento son resueltas juntas para ambas fases, todas las variables son derivadas de la solución de las ecuaciones, esta se conoce como el modelo de dos fluidos y es la utilizada en este trabajo.

2.12.1 Modelo cuasi – homogéneo (monofásico)

Este modelo describe la mezcla de gas/líquido dentro de la región de dos fases como un fluido homogéneo que tiene la densidad de la mezcla, según la ecuación

$$\rho_{mix} = \alpha_g \rho_g + (1 - \alpha_g) \rho_l \quad (21)$$

dónde:

α_g es la fracción volumétrica del gas.

ρ_g es la densidad del gas.

ρ_l es la densidad del líquido.

ρ_{mix} es la densidad de la mezcla.

Para modelar la fuerza de flotación creada por la diferencia de densidad entre la pluma y la región de una sola fase, el término $\rho_l g \alpha_g$ debe ser adicionado en la componente axial de la ecuación de momentum; la ventaja de este modelo es su simplicidad, pero el inconveniente principal radica en el hecho de que debe usarse una correlación experimental para el volumen de fracción de las fases, esto introduce coeficientes empíricos adicionales. La turbulencia se puede considerar utilizando los modelos apropiados como $k-\varepsilon$, (Grevet et al. 1982, Mazumdar 1995, Zhu et al. 1995)

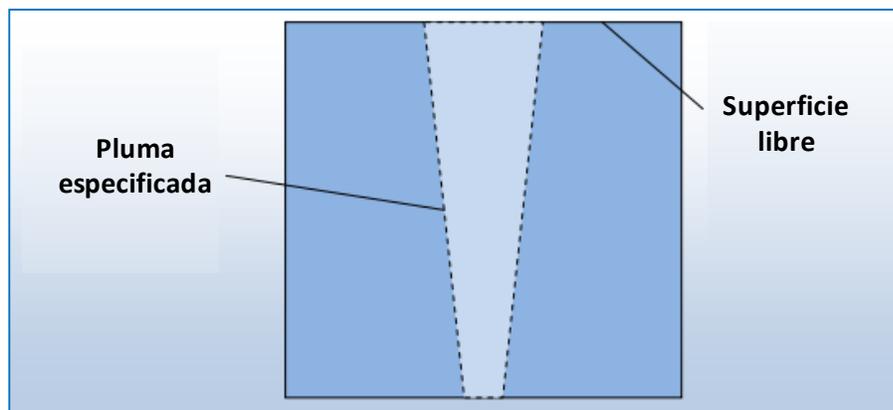


Figura 13. Diagrama simple para el procedimiento de cálculo cuasi-homogéneo

(Fuente: Adaptado de Cloete, 2008)

2.12.2. Modelo Euler-Lagrange

Este enfoque (a veces llamado el enfoque de trayectoria) fue introducido por primera vez por (Crowe et al.,1977). En este caso, el movimiento de la burbuja se calcula, en un sentido de Lagrange, mediante la integración de la ecuación de balance de fuerzas. Esta ecuación de balance de fuerzas equilibra la inercia de las burbujas producida por las fuerzas que actúan sobre la burbuja y puede escribirse como, (Sheng y Irons, 1992, Johansen y col. 1987, Parque y Yang 1996, Kuo et al. 1997).

$$\begin{aligned} \frac{\rho_b du_b^i}{dt} = \frac{3\mu_l}{4d_b^2} C_D \text{Re}_b (u_l^i - u_b^i) + g^i (\rho_b - \rho_l) + \frac{1}{2} \rho_l \frac{d}{dt} (u_l^i - u_b^i) + \\ \rho_l u_l^i \frac{\partial u_l^i}{\partial x^i} + C_L \rho_b \varepsilon_{ijk} (u_b^j - u_l^j) \omega^k \end{aligned} \quad (22)$$

Donde u_b^i y u_l^i son las velocidades de las burbujas y del líquido en la dirección x^i respectivamente, t es el tiempo, ρ_b es la densidad del gas, ρ_l es la densidad del líquido, d_b es el diámetro de una esfera de volumen equivalente, μ_l es la viscosidad dinámica del líquido, C_D es el coeficiente de arrastre, g^i es la aceleración de la gravedad, ω^k es la vorticidad del líquido, ε_{ijk} es el tensor de Levi-Civita, Re_b es el número de Reynolds de la burbuja.

El volumen de fracción de la distribución de burbujas puede ser obtenida por la medida de la distribución de los tiempos de residencia de la distribución como:

$$\alpha_g = \frac{\dot{Q}}{N\Delta V} \sum_{m=1}^N t_{R_m} \quad (23)$$

En el cual \dot{Q} es el flujo volumétrico del gas, N es el número de burbujas en el volumen de control y t_R es el tiempo de residencia.

El término de interacción del momentum F_i en el líquido puede ser deducido de manera similar pero en la dirección opuesta, este puede ser expresado en la dirección x como:

$$F^i = \frac{\dot{Q}}{N\Delta V} \sum_{m=1}^N \int_0^{t_{R_m}} \frac{\rho_b du_b^i}{dt} dt \quad (24)$$

La trayectoria de la burbuja y su correspondiente cambio de momentum se incorpora al cálculo de la fase continua, la dispersión y la fase continua son resueltas alternadamente hasta que el resultado de ambas fases cambia solamente dentro de ciertos límites establecidos.

Shen y Irons (1995), intentaron incluir el fenómeno de rompimiento de burbujas, donde burbujas más grandes se subdividen en burbujas más pequeñas, el tamaño crítico para el diámetro de burbuja fue determinado por una combinación de la teoría de inestabilidad de Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor, (Kitscha y Kocamustafaogullari, 1989).

$$d_b = 6.45 u_g * \left[\frac{\sigma}{\rho_l g^3} \right]^{0.25} \quad (25)$$

Donde d_b es el diámetro de burbuja, σ es la tensión superficial y u_g es la velocidad de ascenso de las burbujas. La probabilidad de rupturas locales se asume que tiene una distribución Gausiana.

Xie et al. (1992a,b) Sugieren la correlación dada por la ecuación 26, para determinar el diámetro de la burbuja esférica media a una altura de 10 cm por encima de la posición de la boquilla de entrada.

$$d_b = 1.46 * \left[\frac{Q_g}{z + H} \right]^{0.1} \quad (26)$$

Donde d_b es el diámetro de burbuja en (cm), Q_g es el caudal de gas en (cm^3/s) y z y H son la posición vertical y la altura del metal en el reactor respectivamente.

Mori et al (1979), presenta una correlación empírica dada por la ecuación 27, para determinar el tamaño de burbuja inmediatamente sobre el tapón poroso en el reactor de acero.

$$d_b = \left\{ \left(\frac{6\sigma_l D_{i,n}}{\rho_l g} \right) + 0.0242 (q_g^2 D_{i,n})^{0.867} \right\}^{1/6} \quad (27)$$

Donde σ_l y ρ_l son la tensión superficial y la densidad del líquido respectivamente, q_g es el flujo de gas, y $D_{i,n}$ es el diámetro interno de la boquilla de entrada de gas.

Wang et al. (1996), informó sobre el concepto de tamaño de la burbuja de gas estable en un flujo turbulento. El tamaño de las burbujas depende de la intensidad del flujo turbulento dada por la siguiente fórmula empírica.

$$d_{b,max} = \left(\frac{W_e \sigma_l}{\rho_l} \right)^{0.6} \left(\frac{1}{\varepsilon^{0.4}} \right) \quad (28)$$

Donde σ_l y ρ_l son la tensión superficial y la densidad del líquido respectivamente, y W_e es el número de Weber crítico, y ε es la tasa de disipación de la energía cinética turbulenta, En la región turbulenta, las burbujas más grandes se divide en burbujas más pequeñas debido a la fluctuación de alta velocidad que crea una fuerza de corte en la superficie de la burbuja, Por lo tanto, el tamaño de la burbuja disminuye con el aumento de la intensidad de la energía turbulencia del flujo. El tamaño máximo de burbuja estable para una intensidad turbulenta se puede estimar usando la ecuación (28).

Oeters (1994), propuso una relación para determinar el tamaño de las burbujas de gas como una función del coeficiente de resistencia aerodinámica en el dominio completo del flujo, excepto la región inmediatamente por encima del tapón poroso.

$$d_b = \left\{ 2 \left(\frac{6}{C_D} \right)^{1/3} \left(\frac{\sigma_l}{0.52 g (\rho_g \rho_l)^{1/3}} \right) \right\}^{1/2} \quad (29)$$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre, σ_l es la tensión superficial del líquido, ρ_l y ρ_g son la densidad del líquido y gas respectivamente.

Las burbujas de gas más grandes que se encuentran en movimiento relativo están sujetas a la deformación permanente lo que producen una ruptura de esta en otras pequeñas burbujas. La fuerza de arrastre aplicada por el líquido sobre las burbujas que se mueven promueve la rotación y lo más probable un movimiento turbulento del gas dentro del reactor. Este movimiento forma una presión dinámica en la superficie de la burbuja provocando la ruptura de la misma cuando esta fuerza es superior a la tensión superficial de la burbuja.

Turkdogan (1996), estableció que la energía asociada con la fuerza de arrastre es mucho mayor que la energía cinética de las burbujas de gas, esto se debe a la gran diferencia que existe entre la densidad del gas y la densidad del líquido, Por lo tanto, la velocidad del gas dentro de la burbuja será similar a la velocidad de la burbuja. Sobre la base de este análisis teórico, se propone la siguiente ecuación para el tamaño de la burbuja crítico como una función de la velocidad de la burbuja.

$$d_{b,\max} = \left(\frac{3}{C_D \rho_g \rho_l^2} \right)^{1/3} \left(\frac{2\sigma}{u_b^2} \right) \quad (30)$$

Donde C_D es el coeficiente de arrastre, σ es la tensión superficial, y u_b es la velocidad de ascenso de las burbujas.

Ilegbusi y Szekely (1990), implementan la expresión tamaño de las burbujas en la ecuación (31) con la suposición de que es aplicable al sistema de gas agitado.

$$d_b = 0.091 \left(\frac{\sigma}{\rho_l} \right)^{0.5} (u_g^{0.44}) \quad (31)$$

Donde σ es la tensión superficial entre las dos fases (gas-líquido), y u_b es la velocidad de ascenso de las burbujas.

El esquema de Lagrange es simple y fácil de implementar en los códigos de dinámica de fluido, sin embargo, el nivel de descripción de la fase dispersa depende del número de "partículas o burbujas" utilizado para representar el campo de flujo; si se incluyera cada partícula física (o burbuja), el modelo sería exacto (siempre que los coeficientes implicados sean conocidos), pero la necesidad de almacenamiento de información y la velocidad de cálculo es muy alta.

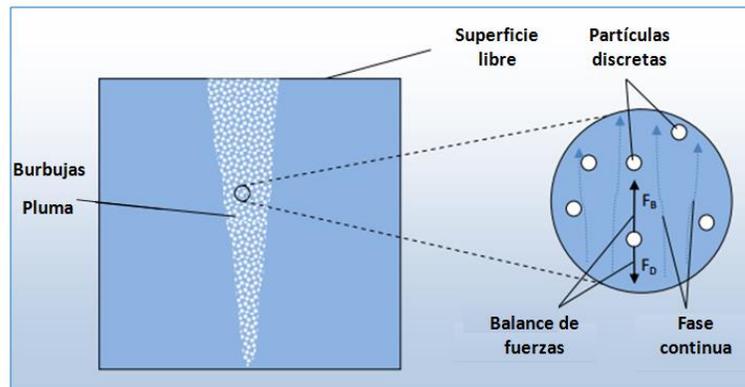


Figura 14. Diagrama simple para el procedimiento de cálculo Lagrangiano
(Fuente: Adaptado de Cloete, 2008)

2.12.3. Modelo Euler-Euler (Dos fluidos):

En este enfoque, se consideran tanto las fases continua y dispersa con interacción continua. El modelo de dos fluidos se ha desarrollado para describir el movimiento para cada fase en un sentido macroscópico. Desde el punto de vista matemático, la descripción macroscópica de las dos fases se deriva por conjunto un promedio de las ecuaciones de conservación microscópicas fundamentales para cada fase, como lo muestra (Drew 1983, Drew y Passmann 1999). La descripción de flujo consta de ecuaciones diferenciales que describen la conservación de la masa, cantidad de movimiento y energía para cada fase por separado, sin embargo, el caso de estudio de este trabajo se considera el flujo isotérmico y la ecuación de energía no es necesaria.

El balance de masa está dada por (en ausencia de cambio en la interface):

$$\frac{D_l}{D_t}(\alpha_l \rho_l) + \alpha_l \rho_l \frac{\partial u_l^i}{\partial x^i} = 0 \quad (32)$$

$$\frac{D_g}{D_t}(\alpha_g \rho_g) + \alpha_g \rho_g \frac{\partial u_g^i}{\partial x^i} = 0 \quad (33)$$

$$\frac{D_l}{D_t}(\alpha_l \rho_l u_l^i) - \frac{\partial}{\partial x^j} \left[\alpha_l \mu_l \left(\frac{\partial u_l^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u_l^j}{\partial x^i} \right) - \alpha_l \rho_l (\overline{u_l^i u_l^j}) \right] = -\alpha_l \frac{\partial p}{\partial x^i} + F_l^i \quad (34)$$

$$\frac{D_g}{D_t}(\alpha_g \rho_g u_g^i) - \frac{\partial}{\partial x^j} \left[\alpha_g \mu_g \left(\frac{\partial u_g^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u_g^j}{\partial x^i} \right) \right] = -\alpha_g \frac{\partial p}{\partial x^i} + F_g^i \quad (35)$$

En el cual tenemos que:

$$\frac{D_l}{D_t} = \frac{\partial}{\partial t} + u_l^j \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (36)$$

$$\frac{D_g}{D_t} = \frac{\partial}{\partial t} + u_g^j \frac{\partial}{\partial x^j} \quad (37)$$

Donde se cumple que:

$$F_l^i = -F_g^i \quad (38)$$

Los subíndices l y g se refieren a las fases de líquido y gas respectivamente, y x^j es el espacio coordenado.

El tiempo computacional y de almacenamiento no es excesivo en este enfoque, pero se requieren modelos de cierre o clausura, como la transferencia de momentum interfacial, F_k^i , que toma en cuenta la fuerza de flotación, la fuerza de arrastre, la fuerza de sustentación, el efecto de masas virtual, la fuerza de dispersión turbulenta entre otras, como el esfuerzo de Reynolds que frecuentemente es modelado usando la hipótesis de Boussinesq dado por la ecuación

$$-\rho_l \overline{(u_l^i u_l^j)} = \mu_t \left(\frac{\partial u_l^i}{\partial x^j} + \frac{\partial u_l^j}{\partial x^i} \right) - \frac{2}{3} \rho_l k_t \delta^{ij} \quad (39)$$

Donde μ_t es la viscosidad turbulenta.

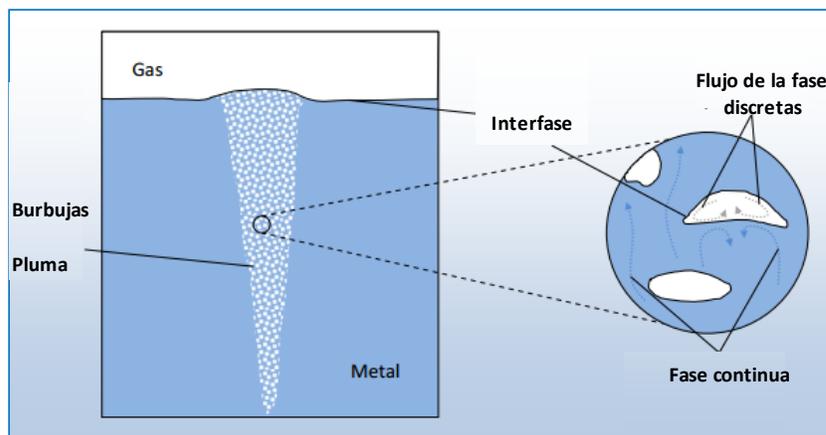


Figura 15. Diagrama simple para el procedimiento de cálculo Euleriano

(Fuente: Adaptado de Cloete, 2008)

2.13. ECUACIONES QUE GOBIERNAN EL FLUJO DE FLUIDOS Y LA TRANSFERENCIA DE CALOR

Las ecuaciones que gobiernan el flujo de fluidos representan matemáticamente las **leyes de conservación de la física**:

- ✓ Conservación de la masa del fluido
- ✓ La tasa de cambio de momentum que es igual a la suma de las fuerzas en la partícula del fluido (segunda ley de Newton)
- ✓ La tasa de cambio de la energía que es igual a la suma de la tasa de adición de calor y trabajo en la partícula del fluido (primera ley de la termodinámica)

El fluido será considerado como un continuo. El análisis del flujo de fluidos será macroscópico por lo tanto la estructura molecular y el movimiento molecular no serán considerados, es decir, se describe el comportamiento del fluido con propiedades macroscópicas, la velocidad, presión, densidad y temperatura son derivadas en el espacio y tiempo.

Una partícula o punto de fluido es un pequeño elemento con propiedades macroscópicas y estas propiedades no están influenciadas por moléculas individuales.

Si se consideran un pequeño elemento de fluido con caras δ_x , δ_y y δ_z , figura 13.

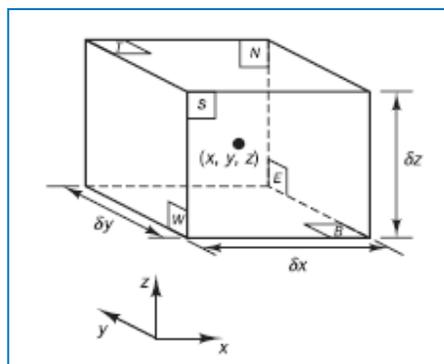


Figura 16. Elemento de fluido para leyes de conservación

Fuente (Versteeg, 2007)

El centro del elemento es localizado en la posición (x, y, z) . Los cambios sistemáticos en la masa, momentum y energía así como el flujo de fluidos se realizan a través de los bordes.

Todas las propiedades del fluido son función del espacio y del tiempo donde se escriben $\rho(x, y, z, t)$, $p(x, y, z, t)$, $T(x, y, z, t)$ y $u(x, y, z, t)$ para la densidad, presión, temperatura y el vector velocidad respectivamente

- CONSERVACION DE LA MASA EN TRES DIMENSIONES

La derivación de la ecuación de la conservación de la masa se escribe como un balance de masa para el movimiento del fluido.

La tasa de incremento de masa del elemento del fluido es:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \delta_x \delta_y \delta_z) = \frac{\partial \rho}{\partial t} \delta_x \delta_y \delta_z \quad (40)$$

La tasa del flujo de masa a través de la cara del elemento está dada por el producto de la densidad y la velocidad normal a la cara, la figura 17, muestra la tasa de flujo de masa a través del borde del elemento.

$$\begin{aligned} & \left(\rho u - \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta_x \right) \delta_y \delta_z - \left(\rho u + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} \frac{1}{2} \delta_x \right) \delta_x \delta_z \\ & + \left(\rho v - \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta_y \right) \delta_x \delta_z - \left(\rho v + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} \frac{1}{2} \delta_y \right) \delta_x \delta_z \\ & + \left(\rho w - \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \delta_z \right) \delta_x \delta_y - \left(\rho w + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} \frac{1}{2} \delta_z \right) \delta_x \delta_y \end{aligned} \quad (41)$$

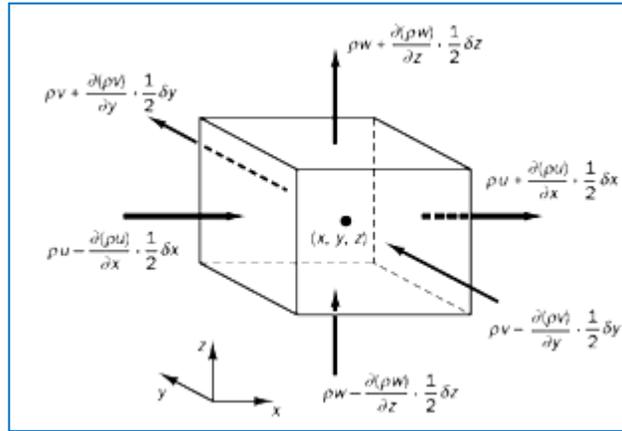


Figura 17. Flujo de masa en elemento de fluido

Fuente (Versteeg, 2007)

Todos los términos se reacomodan y dividiendo por el elemento de volumen $\delta_x \delta_y \delta_z$, tenemos:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0 \quad (42)$$

En una notación vectorial más compacta

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (43)$$

La ecuación 43 es la ecuación de continuidad o conservación de la masa tridimensional y transitoria para un fluido compresible.

Para un fluido incompresible la densidad ρ es constante y la ecuación viene dada por:

$$\text{div}(\rho \mathbf{u}) = 0 \quad (44)$$

Es decir

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (45)$$

- CONSERVACION DEL MOMENTUM

La segunda ley de Newton permite obtener la tasa de cambio de momentum en la partícula de fluido es igual a la suma de las fuerzas sobre las partículas, en las partículas se definen dos tipos de fuerzas

- Fuerzas de superficie
 - ✓ Fuerzas de presión
 - ✓ Fuerzas viscosas
 - ✓ Fuerzas de gravedad
- Fuerzas sobre el cuerpo
 - ✓ Fuerzas centrifugas
 - ✓ Fuerza de Coriolis
 - ✓ Fuerzas electromagnéticas

El estado de esfuerzos de un elemento de fluido es definido en términos de la presión y de nueve componentes de los esfuerzos viscosos, como se muestra en la figura 18. La presión es denotado por p , y los esfuerzos viscosos son denotados por τ_{ij} donde el subíndice i indica la dirección normal y el subíndice j indica la dirección de acción del esfuerzo.

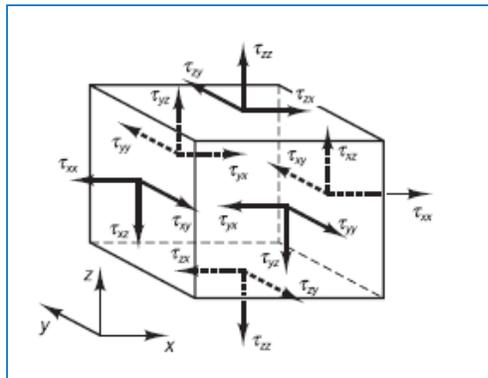


Figura 18. Componente de los esfuerzos en las tres caras del elemento de fluido

Fuente (Versteeg, 2007)

Se considera la componente x donde actúa las fuerzas de presión y las componentes de esfuerzos τ_{xx} , τ_{yx} y τ_{zx} como lo muestra la figura 19. La magnitud de la fuerza resultante de los esfuerzos en la superficie es el producto del esfuerzo por el área.

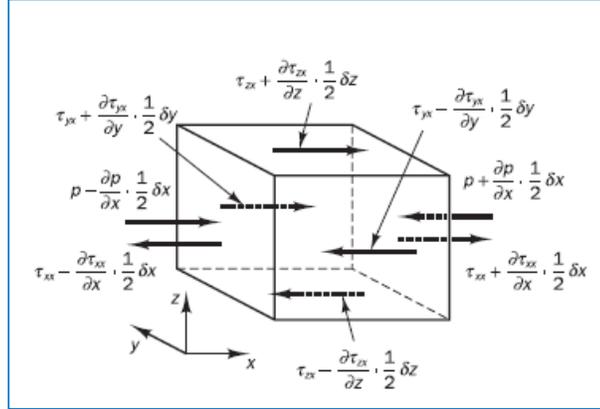


Figura 19. Componentes de los esfuerzos en la dirección x
Fuente (Versteeg, 2007)

Las ecuaciones que obtenemos en la dirección Este-Oeste tenemos:

$$\left[\left(p - \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \delta_x \right) - \left(\tau_{xx} - \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \frac{1}{2} \delta_x \right) \right] \delta_y \delta_z + \left[- \left(p + \frac{\partial p}{\partial x} \frac{1}{2} \delta_x \right) + \left(\tau_{xx} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \frac{1}{2} \delta_x \right) \right] \delta_y \delta_z = \left(- \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} \right) \delta_x \delta_y \delta_z \quad (46)$$

La fuerza neta en la dirección x , dirección de Norte-Sur

$$- \left(\tau_{yz} - \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} \frac{1}{2} \delta_y \right) \delta_x \delta_z + \left(\tau_{yx} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \frac{1}{2} \delta_y \right) \delta_x \delta_z = \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} \delta_x \delta_y \delta_z \quad (47)$$

Las fuerzas en la dirección en x , en la dirección de las caras de tope-fondo

$$- \left(\tau_{zx} - \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \delta_z \right) \delta_x \delta_y + \left(\tau_{zx} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \frac{1}{2} \delta_z \right) \delta_x \delta_y = \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \delta_x \delta_y \delta_z \quad (48)$$

La fuerza total por unidad de volumen en el fluido es igual a la suma de las ecuaciones 46,47 y 48 divididas por el volumen $\delta_x \delta_y \delta_z$.

$$\frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \quad (49)$$

Sin considerar las fuerzas de cuerpo, podemos incluir el término fuente S_{Mx} de la ecuación del momento en x por unidad de tiempo y unidad de volumen.

- **Ecuación de momento en x**

$$\rho \frac{Du}{Dt} = \frac{\partial(-p + \tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} + S_{Mx} \quad (50)$$

- **Ecuación de momento en y**

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial(-p + \tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} + S_{My} \quad (51)$$

- **Ecuación de momento en z**

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial(-p + \tau_{zz})}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + S_{Mz} \quad (52)$$

Los efectos de las tensiones superficiales se contabilizan de forma explícita, las fuentes S_{Mx} , S_{My} y S_{Mz} incluyen las contribuciones debidas a las fuerzas de cuerpo, por ejemplo las fuerzas debida a la gravedad, $S_{Mx} = 0$, $S_{My} = 0$ y $S_{Mz} = -\rho g$.

- **CONSERVACION DE LA ENERGÍA**

La ecuación de la energía se deriva da la primera ley de la termodinámica que establece que la velocidad de cambio de la energía de una partícula de fluido es igual

a la velocidad de adición de calor a la partícula de fluido más la tasa de trabajo realizado en la partícula.

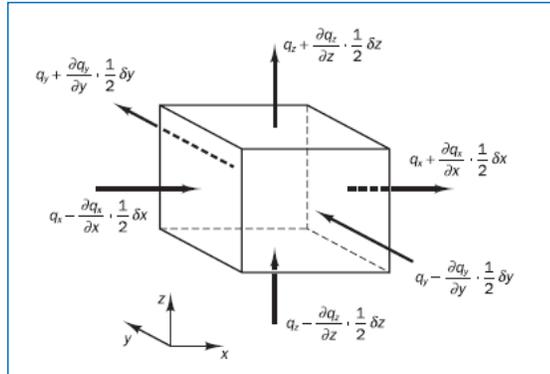


Figura 20. Flujo de calor

Fuente (Versteeg, 2007)

Realizando un balance del flujo de calor, figura 20, podemos obtener la ecuación de la energía

$$\rho \frac{DE}{Dt} = -div(pu) + \left[\begin{array}{l} \frac{\partial(u\tau_{xx})}{\partial x} + \frac{\partial(u\tau_{yx})}{\partial y} + \frac{\partial(u\tau_{zx})}{\partial z} + \frac{\partial(v\tau_{xy})}{\partial x} \\ \frac{\partial(v\tau_{yy})}{\partial y} + \frac{\partial(v\tau_{zy})}{\partial z} + \frac{\partial(w\tau_{xz})}{\partial x} + \frac{\partial(w\tau_{yz})}{\partial y} \\ \frac{\partial(w\tau_{zz})}{\partial z} + div(\kappa grad T) + S_E \end{array} \right] \quad (53)$$

En la ecuación 53, se tiene que $E = i + 1/2(u^2 + v^2 + w^2)$

2.14. ECUACIONES DE NAVIER-STOKES PARA UN FLUIDO NEWTONIANO

Las ecuaciones que rigen el comportamiento del fluido contienen como incógnitas el esfuerzo viscoso de componentes τ_{ij} . Las formas más útiles de las ecuaciones de conservación de flujos de fluidos se obtienen mediante la introducción de un modelo adecuado para la viscosidad de las tensiones τ_{ij} . En muchos fluidos los esfuerzos

viscosos pueden expresarse como funciones de la tasa de velocidad de deformación o de la tensión local. En los flujos tridimensionales la tasa local de deformación se compone de la velocidad de deformación lineal y de la tasa de deformación volumétrica.

En un fluido newtoniano las tensiones viscosas son proporcionales a las tasas de deformación. La forma tridimensional de la ley de la viscosidad de Newton para flujos compresibles implica dos constantes de proporcionalidad: la primera la viscosidad dinámica (μ), para relacionar las tensiones a las deformaciones lineales, y la segunda viscosidad cinemática (λ), para relacionar las tensiones a la deformación volumétrica. Los nueve componentes de tensión viscosa, de los cuales seis son independientes tenemos:

$$\tau_{xx} = 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \operatorname{div} u \quad (54)$$

$$\tau_{yy} = 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \operatorname{div} u \quad (55)$$

$$\tau_{zz} = 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \operatorname{div} u \quad (56)$$

Si consideramos que:

$$\tau_{xy} = \tau_{yx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \quad (57)$$

$$\tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \quad (58)$$

$$\tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \quad (59)$$

El efecto de la viscosidad cinemática (λ) es pequeño en la práctica. Para los gases una buena aproximación de trabajo puede obtenerse a través de ($\lambda = -2 - 3\mu$)

(Schlichting, 1979). Los líquidos son incompresibles y en la ecuación de conservación de la masa $div u = 0$, y los esfuerzos viscosos son sólo el doble de la tasa local de tiempos de deformación lineal la viscosidad dinámica.

Sustituyendo las ecuaciones de 57-59 en las ecuaciones de momentum de 50-52 y tomando las consideraciones presentadas obtenemos las ecuaciones de Navier-Stokes.

$$\begin{aligned} \rho \frac{Du}{Dt} = & -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left[2\mu \frac{\partial u}{\partial x} + \lambda \operatorname{div} u \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + S_{M_x} \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dv}{Dt} = & -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[2\mu \frac{\partial v}{\partial y} + \lambda \operatorname{div} u \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + S_{M_y} \end{aligned} \quad (61)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{Dw}{Dt} = & -\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[2\mu \frac{\partial w}{\partial z} + \lambda \operatorname{div} u \right] \\ & + \frac{\partial}{\partial y} \left[\mu \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) \right] + S_{M_z} \end{aligned} \quad (62)$$

Las ecuaciones de Navier-Stokes se pueden escribir en la forma más útil para el desarrollo del método de volúmenes finitos de la forma siguiente:

$$\rho \frac{Du}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} u) + S_{M_x} \quad (63)$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} v) + S_{M_y} \quad (64)$$

$$\rho \frac{Dw}{Dt} = -\frac{\partial p}{\partial z} + \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} w) + S_{M_z} \quad (65)$$

2.15. TURBULENCIA

La turbulencia es un estado caótico e irregular del movimiento de un fluido (Fernández, 2012) que se establece a partir de la aparición de irregularidades en las condiciones iniciales o de contorno de la corriente fluida. Estas inestabilidades se amplifican y se retroalimentan de forma cíclica, vórtices (eddies) turbulentos que se crean y se destruyen.

La turbulencia es una característica de los flujos, no de los fluidos como tales. Su aparición exige de la existencia de un fluido en movimiento, en el que los fenómenos de convección (inerciales) asociados a la velocidad sean varios órdenes de magnitud superiores a los efectos difusivos (disipativos) relacionados con la viscosidad del fluido. Esta relación es el conocido número de Reynolds que establece la frontera (aproximada) entre las condiciones de flujo laminar y flujo turbulento.

2.15.1. Naturaleza de la turbulencia

Las propiedades más destacadas de los movimientos turbulentos:

- **Aleatoriedad o irregularidad.** Se manifiesta por aparición de fluctuaciones de las variables fluidodinámicas (velocidad, presión, temperatura, concentración) con tamaños y tiempos muy dispares (diferentes escalas). Estas fluctuaciones instantáneas no estacionarias se desarrollan incluso en flujos estacionarios (promediados temporalmente), lo cual da idea que las propiedades estadísticas de los flujos si son invariantes. Por esta razón se utilizan métodos estadísticos para su estudio y predicción.
- **Vorticidad.** Es imprescindible que exista vorticidad para que un flujo pueda ser turbulento. De hecho todo flujo turbulento es rotacional ($\nabla \times \vec{v} \neq 0$). Con importantes niveles de vorticidad que fluctúan en el tiempo y en el espacio de forma coherente (estructuras o vórtices coherentes) y en los que la deformación de los vórtices supone la esencia de la dinámica de la turbulencia.

- **Difusividad** (mixing). Los fenómenos turbulentos intensifican el transporte de masa, momento y energía, debido a las fluctuaciones en las diversas escalas turbulentas. En particular, las fluctuaciones a escalas macroscópicas producen efectos de mezcla similares a los de carácter molecular (puramente difusivos), si bien con longitudes de mezcla similares a las de los fenómenos convectivos.
- **Tridimensionalidad.** Las escalas más pequeñas de la turbulencia tienen un carácter muy isotrópico, lo cual implica la necesidad de tener flujos tridimensionales. Las escalas más grandes, asociadas a las longitudes características del flujo analizado, pueden presentar un comportamiento bidimensional o plano, pero éste se va generalizando a tridimensional según se avanza en la cascada de energía.
- **Disipación.** Los flujos turbulentos son siempre disipativos. Necesariamente han de disipar energía en las escalas más pequeñas, energía que se obtiene del flujo principal y que se va redistribuyendo en forma de cascada mediante procesos de deformación. Una vez desarrollado el flujo turbulento, la turbulencia tiende a mantenerse (se retroalimenta) mediante un aporte continuo de energía. Si no existe ese suministro de energía, la turbulencia decae rápidamente.
- **Altos números de Reynolds.** La turbulencia se origina por inestabilidades en el flujo alaminar. A partir de ciertos números de Reynolds, dependiendo del tipo de aplicación, las irregularidades en las capa de cortaduras se vuelven inestables, amplificándose y activando los mecanismos turbulentos. El flujo se desordena y deja de ser laminar.

2.15.2. Ubicación de la turbulencia

En la naturaleza los fluidos presentan en su mayoría movimientos turbulentos: el aire, la convección natural del aire, en aplicaciones tecnológicas como movimientos de fluidos en tuberías, la transmisión de calor en calderas y en cámaras de combustión y

en una gran cantidad de fenómenos ya que la turbulencia modifica significativamente parámetros como la resistencia a la fricción, la transmisión de calor o la capacidad de mezcla que hace imprescindible su comprensión, caracterización y estudio.

2.15.3. Origen de la turbulencia: Inestabilidades

Un fenómeno físico es estable cuando una perturbación razonablemente pequeña de las condiciones iniciales no altera significativamente la situación de equilibrio, es decir, ante pequeñas perturbaciones éste permanece invariante e imperturbable en el tiempo.

La transición a la turbulencia puede seguir diferentes mecanismos, en todos ellos sin embargo, comienzan en un punto de inestabilidad que inicia el proceso de amplificación de inestabilidades que desembocan en la estructura caótica final. Además, dicha inestabilidad puede estar relacionada con la presencia de un punto de inflexión en el perfil de velocidad que desencadena el proceso de formación de vórtices (Fernández, 2010).

El número de Reynolds es un parámetro adimensional de referencia para analizar el régimen de flujo, donde este depende principalmente de la razón de fuerzas inerciales a fuerzas viscosas en el fluido.

$$\text{Re} = \frac{\text{Fuerzas inerciales}}{\text{Fuerzas viscosas}} = \frac{V_{prom} D}{\nu} = \frac{\rho V_{prom} D}{\mu} \quad (66)$$

Donde V_{prom} es la velocidad del flujo promedio en (m/s) , D es la longitud característica de la tubería (diámetro en este caso, en m) y $\nu = \mu/\rho$ es la viscosidad cinemática de la tubería en (m^2/s) .

Los valores de referencia para determinar el régimen de flujo de un fluido se establece de la siguiente manera:

$Re \leq 2300$	Flujo laminar
$2300 \leq Re \leq 4000$	Flujo transicional
$Re \geq 4000$	Flujo turbulento

El flujo transicional es el que cambia de laminar a turbulento de manera aleatoria.

- **Flujo laminar**

Las características de los esfuerzos cortantes son muy distintas según el flujo sea laminar o turbulento. En el caso de *flujo laminar*, las diferentes capas del fluido discurren ordenadamente, siempre en orden paralela al eje de la tubería y sin mezclarse, siendo la viscosidad el factor dominante en el intercambio de la cantidad de movimiento (esfuerzo cortante).

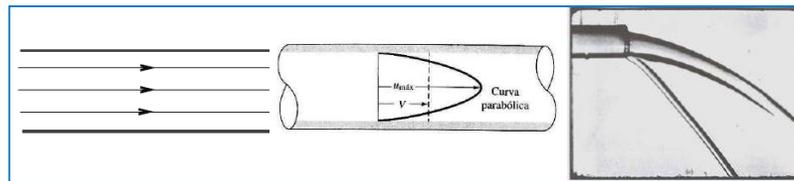


Figura 21. Perfil de velocidad en régimen laminar, chorro laminar

(Fuente: White, 2003)

- **Flujo turbulento**

En *flujo turbulento*, existen unas continuas fluctuaciones tridimensionales de la velocidad de las partículas (también en otras magnitudes intensivas, como la presión y la temperatura), que se superponen a las componentes de la velocidad, este es el fenómeno de turbulencia, que origina un fuerte intercambio de cantidad de movimiento entre las distintas capas del fluido, lo que da unas características especiales a este tipo de flujo.

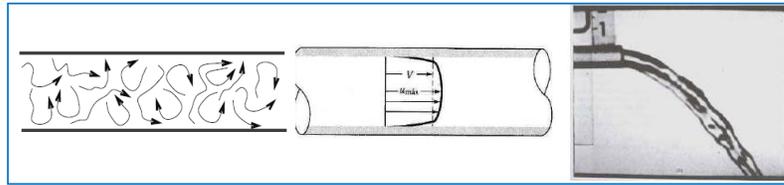


Figura 22. Perfil de velocidad en régimen turbulento, chorro turbulento

(Fuente: White, 2004)

2.16. TRATAMIENTO DE FLUJO EN LA CERCANÍA DE LAS PAREDES

Los flujos turbulentos en las cercanías de las paredes se ven afectados por la presencia de las mismas. En primer lugar, la velocidad principal se ve afectada por la condición de no deslizamiento que tiene que ser satisfecha en la pared. Por otro lado, muy cerca de la pared la turbulencia es amortiguada, sin embargo, en la parte externa de la región cercana a la pared la turbulencia se ve rápidamente afectada por la producción de energía cinética turbulenta debido a los esfuerzos de Reynolds y el gradiente de la velocidad principal.

Debido a que las paredes son la principal fuente de vorticidad y turbulencia, el modelado en las cercanías de las paredes influye muy significativamente en los resultados de las simulaciones numéricas, ya que en estas regiones donde las variables cambian con amplios gradientes y el transporte de momentum y otros escalares, tiene lugar de forma más robusta. Por tanto, una representación precisa del flujo en las cercanías de las paredes determina unas predicciones acertadas para los flujos turbulentos.

Numerosos experimentos han demostrado que la región próxima a la pared los efectos de la viscosidad son dominantes en una pequeña zona, muy próxima al contorno denominada *capa limite*. En condiciones de flujo turbulento completamente desarrollado, esta capa limite se divide a su vez en tres capas o regiones diferenciadas: La subcapa viscosa o laminar (viscous sublayer), donde el flujo es prácticamente laminar y la viscosidad molecular juega un papel dominante en

el transporte de momentum, calor y masa. En la capa externa (outer layer), llamada capa turbulenta, la turbulencia es la que juega el papel más importante. En la región intermedia entre estas dos capas esta la subcapa logarítmica (log-law region) los efectos de la viscosidad molecular y la turbulenta son prácticamente igual de importantes. En la figura 23 se aprecian estas tres divisiones de la región cercana a la pared, dibujada en escala logarítmica.

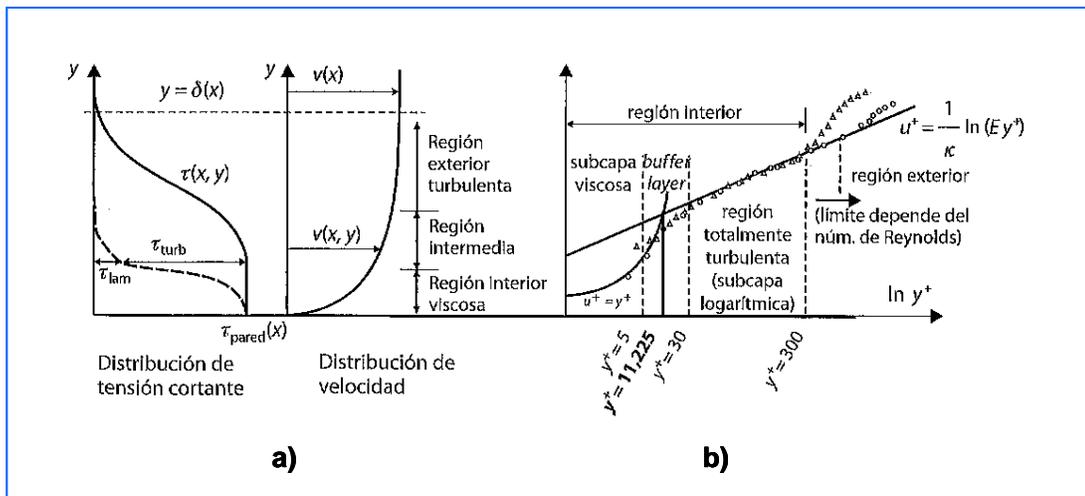


Figura 23. Esquemas de distribución a) esfuerzos cortantes y b) velocidad cerca de una pared en flujo turbulento

(Fuente: Fernández, 2012)

La figura 23 muestra como para calcular la resistencia al transporte convectivo de materia entre una interfase y un fluido que circula en régimen turbulento, se supone que dicha resistencia está concentrada en una película laminar de espesor adyacente a la interfase. Este modelo no es más que una simplificación drástica de la realidad para poder calcular la transferencia convectiva de materia en situaciones de interés industrial.

Para diferenciar cada una de las subcapas se utiliza el parámetro adimensional y^+ que se define como:

$$y^+ = \frac{\rho u_\tau y}{\mu} \quad (67)$$

Donde u_τ es la denominada velocidad de fricción. Esta velocidad se determina por:

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_{pared}}{\rho}} \quad (68)$$

Siendo τ_{pared} la tensión cortante en la pared. La velocidad de fricción se usa también para adimensionar la velocidad, fijándose así el parámetro adimensional u^+ definido como:

$$u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad (69)$$

- La **Subcapa viscosa** es extremadamente fina, quedando delimitada por la condición $y^+ < 5$. En esta subcapa se supone que la tensión cortante es constante e igual al valor que corresponde justo con el de la pared (ver figura 20). En esta zona, los efectos viscosos predominan sobre los inerciales, por lo que en ella subyace un comportamiento laminar como se mencionó anteriormente, de este modo se cumple que:

$$\tau(y) = \mu \frac{\partial u}{\partial y} \approx \tau_{pared} \quad (70)$$

Puesto que las tensiones viscosas dominan a las de Reynolds, integrando y utilizando las ecuaciones 67,68 y 69, es inmediato llegar a que en esa zona se cumple que:

$$u^+ = y^+ \quad (71)$$

En condiciones de flujo laminar no se produce transición a la turbulencia, por lo que únicamente se contempla esta capa (Fernández, 2012).

- La Subcapa logarítmica se desarrolla en el intervalo comprendido aproximadamente entre $30 < y^+ < 300$. En el límite inferior hay una transición difusa entre la supcapa viscosa y esta logarítmica, que se denomina *buffer layer*, en las que las tensiones viscosas y de Reynolds son similares. Es habitual utilizar el valor intermedio $y^+ = 11,225$, para establecer un límite de separación estricto entre ambas zonas, figura 20. Además este límite coincide con el corte entre la ley lineal $u^+ = y^+$ de la subcapa viscosa y la nueva ley logarítmica que se ajusta a esta zona según la expresión:

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(Ey^+) \quad (72)$$

Donde $\kappa = 0,41$ y $E = 9,793$ son las constantes de Von Kármann válidas para todo el flujo turbulento sobre la superficie lisa a altos números de Reynolds. En esta subcapa dominan las tensiones de Reynolds sobre las tensiones viscosas.

- La **capa externa** se desarrolla a partir de $y^+ > 300$ o 500 , que normalmente se corresponde con la zona comprendida entre el 20% y el final de la capa límite. se dice que la capa límite termina cuando el valor de la velocidad alcanza el 99% del valor en la zona no viscosa. En esta región exterior dominan los efectos de inercia de la zona central de flujo (alejada de la pared), quedando libre de los efectos viscosos de la pared.

2.17. TRATAMIENTO EN LA PROXIMIDAD DE LA PARED Y FUNCIONES DE PARED

La compleja estructura del flujo en la capa límite próxima a la pared implica un serio desafío para cualquier tipo de modelado de turbulencia (Fernández, 2002). Ya se ha visto, a raíz de las serias limitaciones de las técnicas DNS, que la raíz del problema es la necesidad de tener un número extraordinario de puntos en la subcapa viscosa. De otra forma, es imposible capturar la dinámica de las escalas turbulentas que allí se desarrollan. Por esta razón las técnicas LES, fundamentadas en la resolución de los torbellinos de escalas características (en este caso la subcapa), también sufrían de extraordinarias restricciones, y necesitaban modelos adicionales de pared o modelos híbridos para aplicar aproximaciones RANS en la zona de la pared.

Las funciones de la pared son un conjunto de ecuaciones semi-empíricas utilizadas para satisfacer la física del flujo en la zona cercana a la pared. La turbulencia se ve afectada en gran medida por la presencia de la pared a través de la condición de no deslizamiento que debe ser satisfecha en la pared.

Un tratamiento de la pared es el conjunto de hipótesis de modelado próxima a la pared que se utilizan para cada modelo de turbulencia. Existen Tres tipos de tratamiento de la pared que se le proporcionan en un fluido, figura 21, aunque los tres no siempre pueden estar disponibles, dependiendo del modelo de turbulencia que se utilice.

- El tratamiento de pared con alto valor de y^+ , implica que el tipo de función que se utiliza se supone que está cerca de la celda adyacente a la pared dentro de la región logarítmica de la capa límite.
- El tratamiento de pared con bajo valor de y^+ , es adecuado sólo para los modelos de turbulencia con bajo número de Reynolds en los que se supone que la subcapa viscosa se resuelve correctamente.

- El tratamiento de pared con todos los valores de y^+ , es un tratamiento híbrido que intenta emular el tratamiento de alta pared para mallas gruesas y el tratamiento de pared con bajo valor de y^+ para mallas finas. También se formula con la característica deseable de producir respuestas razonables para las mallas de resolución intermedia (es decir, cuando el centro de gravedad de las celdas de la pared cae dentro de la región intermedia de la capa límite).

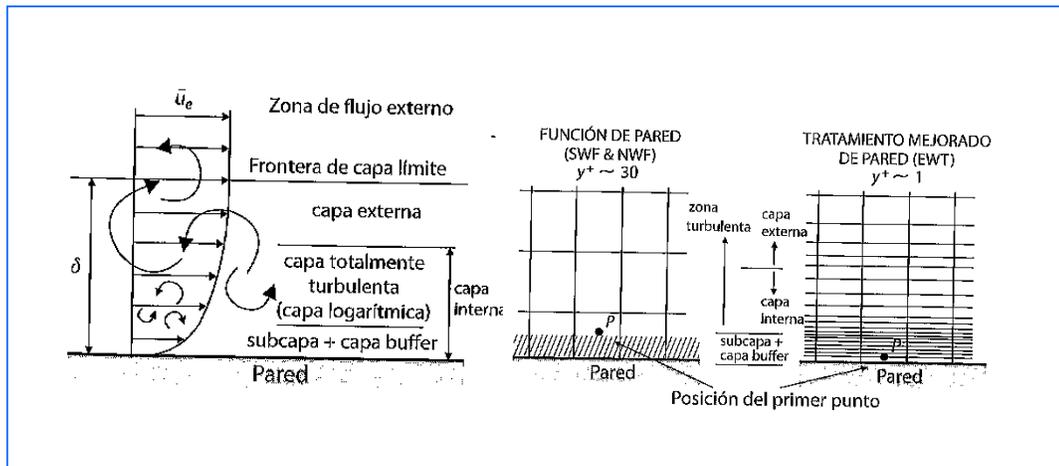


Figura 24. Tratamiento de la pared en función de la densidad de la malla
(Fuente: Adaptado de Fluent 6.3 guía de usuario)

2.17.1. Funciones de pared (Wall Functions, WF)

Se basa en la ley logarítmica que se produce en la zona turbulenta de la región interna en la capa límite, figura 23, y que tiene validades en el rango $y^+ \approx 30$ a 300 . A su vez se define como de tipo estándar (SWF) o como de no equilibrio (NWF), que presentan correcciones a la ley logarítmica original cuando la capa no está completamente desarrollada. En este caso el mallado a emplear debe ser relativamente basto, puesto su aplicación es correcta a partir de $y^+ > 11,225$.

2.17.2 Función estándar de pared (Standard Wall Function-SWF)

Las funciones estándar de pared proporcionan una precisión razonable para la mayoría de flujos con alto número de Reynolds, pero los flujos delimitada por pared Tienen su limitación cuando la condición de flujo difiere mucho de las condiciones ideales utilizadas para definir las funciones. Los casos en los que se podría alcanzar este límite son:

- Flujos con bajo número Reynolds (por ejemplo, flujos altamente viscosos que fluyen a través de un pequeño orificios o hueco a baja velocidad).
- Transpiración masiva a través de la pared (succión/soplado).
- Altos gradientes de presión que conducen a separaciones en la capa límite.
- fuerzas de cuerpo elevadas (por ejemplo, flujos cerca de discos giratorios, flujos de flotabilidad impulsada).
- Alta tridimensionalidad en la región próxima a la pared (por ejemplo, el flujo espiral de Ekman el cual representa el modelo teórico que explica el movimiento de las capas de un fluido por la acción del efecto de Coriolis, que es fuertemente sesgada de la capa límite 3D).

Las funciones estándar de pared están hechos de la ecuación de momentum lo que conduce a la ley de la pared para la temperatura depende de la y^* .

$$T^* = \frac{(T_w - T_p)\rho C_p k_p^{1/2}}{\dot{q}} = \left\{ \begin{array}{l} \Pr y^* + \frac{1}{2} \rho P_r \frac{C_p^{1/4} k_p^{1/2}}{\dot{q}} U_p^2 \quad (y^* < y_T^*) \\ P_r \left[\frac{1}{k} \ln(Ey^*) + P \right] + \\ \frac{1}{2} \rho \frac{C_p^{1/4} k_p^{1/2}}{\dot{q}} \{ P_r U_p^2 + (P_r - P_r) U_c^2 \} \quad (y^* > y_T^*) \end{array} \right\} \quad (73)$$

$y^* < y_T^*$: Ley lineal para la conducción en la subcapa donde la conducción es importante.

$y^* > y_T^*$: Ley logarítmica para la región turbulenta donde los efectos de la turbulencia son dominantes en la conducción.

La presión P es calculada dada por la formula de Jayatillete

$$P = 9.24 \left[\left(\frac{P_r}{P_r^*} \right)^{3/4} - 1 \right] \left[1 + 0.28 e^{-0.007 P_r / P_r^*} \right] \quad (74)$$

Él y_T^* es calculado como y^* en la intersección de la ley lineal y la ley logarítmica dependiendo del valor de y^* en la celda cerca de la pared, el perfil lineal o logarítmico se aplica para calcular la temperatura en la pared T_w o el flujo de calor q .

La ley para la velocidad principal es:

$$U^* = \frac{1}{k} \ln(Ey^*) \quad (75)$$

$$U^* = \frac{U_p C_\mu^{1/4} k^{1/2}}{\tau_w / \rho} \quad (76)$$

$$y^* = \frac{\rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/2} y_p}{\mu} \quad (77)$$

donde k es la constante de Von Karman cuyo valor es de (0.4187), E es una constante empírica cuyo valor es de (9.81), U_p es la velocidad principal del fluido en el punto P, k_p es la energía cinética turbulenta en el punto P, τ_w es el tensor de

esfuerzo en la pared, μ es la viscosidad dinámica del fluido, C_μ es una constante que tiene en cuenta el efecto de rotación del flujo cuyo valor es (0.0845) y y_p es la distancia desde el punto P a la pared.

Si el modelo de turbulencia es $k - \varepsilon$ donde la ecuación de k es calculada sobre todo el dominio incluyendo la región adyacente a la pared con una condición de borde definida de la manera siguiente:

$$\frac{\partial k}{\partial n} = 0 \quad (78)$$

Donde n es la coordenada local normal a la pared

La producción de energía cinética, G_k , y su radio de disipación, ε , en las celdas adyacentes a la pared, que son termino fuente en la ecuación de k , son calculados sobre la base de la hipótesis de equilibrio local. Bajo este supuesto, la producción de k y su radio de disipación se asume que son iguales en el volumen de control adyacente a la pared.

Así la producción de k se calcula a partir de

$$G_k \approx \tau_w \frac{\partial U}{\partial y} = \tau_w \frac{\tau_w}{k \rho C_\mu^{1/4} k_P^{1/2} y_p} \quad (79)$$

Y el valor de ε se calcula de la siguiente manera:

$$\varepsilon_P = \frac{C_\mu^{3/4} k_P^{3/2}}{k y_p} \quad (80)$$

La ecuación de ε no se resuelve en las celdas adyacentes a la pared y en su lugar se usa la ecuación 80.

Las funciones de pared estándar trabajan razonablemente bien para un amplio rango de flujos. De igual manera, tienden a ser menos confiables cuando los flujos se separan mucho de las condiciones ideales que son asumidas en su derivación. Cuando los flujos cercanos a la pared están sometidos a altos gradientes de presión y cuando sean de fuerte no equilibrio, la calidad de las predicciones probablemente quedaran comprometida.

Para ofrecer mejores resultados en situaciones como estas tenemos la opción de las funciones de pared de no equilibrio.

2.17.3. Funciones de pared de no-equilibrio (Non-Equilibrium wall functions, NWF)

Se aplican cuando los flujos que están cercanos a la pared son sometidos a altos gradientes de presión, y cuando los flujos no están en equilibrio, lo que significa que el término de producción turbulenta y el término de disipación no son iguales, la función de no equilibrio en la pared permiten obtener mejores resultados ya que las funciones estándar no son lo suficientemente satisfactorio para los cálculos. Las ecuaciones utilizadas son:

- La ley logarítmica de Launder y Spalding's para la velocidad media que es sensible a los efectos de los gradientes de presión

$$\frac{U_p C_\mu^{1/4} k^{1/2}}{\tau_w / \rho} = \frac{1}{k} \ln \left(E \frac{\rho C_\mu^{1/4} k^{1/2} y_p}{\mu} \right) \quad (81)$$

donde k es la constante de Von Karman cuyo valor es de (0.4187), E es una constante empírica cuyo valor es de (9.81), U_p es la velocidad principal del fluido en

el punto P, k_p es la energía cinética turbulenta en el punto P, τ_w es el tensor de esfuerzo en la pared, μ es la viscosidad dinámica del fluido, C_μ es una constante que tiene en cuenta el efecto de rotación del flujo cuyo valor es (0.0845) y y_p es la distancia desde el punto P a la pared.

- **Concepto basado en las dos capas** (celdas de pared adyacente en una subcapa viscosa y una capa totalmente turbulenta) es adoptada para calcular la energía cinética turbulenta

Para la región interior, Prandtl que u debía ser independiente del espesor de la capa límite:

$$u = f(\mu, \tau_w, \rho, y) \quad (82)$$

Por análisis dimensional la ecuación 4, es equivalente a

$$u^+ = \frac{\mu}{u^*} = F\left(\frac{yu^*}{\nu}\right) \quad (83)$$

$$u^* = \left(\frac{\tau_w}{\rho}\right)^{1/2} \quad (84)$$

La ecuación 83, se denomina *ley de pared*, la magnitud u^* recibe el nombre de *velocidad de fricción*, ecuación 84, y τ_w es el esfuerzo cortante en la pared.

Von Kármán en 1993, dedujo que en la región exterior u debía ser independiente de la viscosidad y su diferencia con la velocidad de la corriente libre U debía depender del espesor δ y de las otras propiedades

$$(U - u)_{\text{exterior}} = g(\delta, \tau_w, \rho, y) \quad (85)$$

Nuevamente por análisis dimensional, se puede reescribir la ecuación 85 de la forma

$$\frac{U - u}{u^*} = G\left(\frac{y}{\delta}\right) \quad (86)$$

Donde u^* tiene el mismo significado de la ecuación 84, la ecuación 86, recibe el nombre de *ley del defecto de la velocidad* para la región exterior (White, 2000).

Tanto al ecuación 85,86 y 87 se cumplen con una buena aproximación en una amplia gama de flujos turbulentos en conductos y capa limite, las dos son diferentes aunque deben acoplarse suavemente en la región intermedia, en el año 1937, C. B. Milikan demostró que esto solo podía ocurrir si la velocidad en esta zona variaba de forma logarítmica con y :

$$\frac{u}{u^*} = \frac{1}{\kappa} \ln\left(\frac{yu^*}{\nu}\right) + B \quad \text{región intermedia} \quad (87)$$

La ecuación 87, corresponde a la llamada *capa logarítmica*, para una amplia gama de flujos, las constantes adimensionales κ y B valen aproximadamente

$$\kappa = 0.41 \quad \text{y} \quad B = 5.0 .$$

La ley de pared es única y obedece a la relación lineal y viscosa, ecuación 83

$$u^+ = \frac{u}{u^*} = \frac{yu^*}{\nu} = y^+ \quad (88)$$

2.17.4. Tratamiento mejorado de la pared (Enhanced Wall Treatment, EWT)

Este tratamiento combina el uso de la ley logarítmica (como un ajuste blando a las condiciones de la subcapa viscosa laminar) con el uso de un modelo de dos zonas para resolver la distribución de la velocidad en toda la capa interna (inner Layer),

para usar esta opción es imprescindible tener un mallado muy fino, del orden de $y^+ \approx 1$, con lo cual exige entre 10 a 15 celdas en la subcapa viscosa.

2.18 MODELOS DE TURBULENCIA

Los flujos turbulentos como se mencionó anteriormente se caracterizan por tener campos de velocidades fluctuantes. Estas fluctuaciones provocan a su vez cambios constantes en cantidades transportadas tales como cantidad de movimiento, energía, concentración de especies, etc. Este fenómeno de pequeña escala y alta frecuencia es muy costoso de simular computacionalmente hablando por lo que es necesario hacer algunas simplificaciones para reducir el tiempo de cálculo (Zambrano, et al, 2015). Las ecuaciones manipuladas contienen variables desconocidas que necesitan de modelos de turbulencia para determinar éstas en términos de cantidades conocidas.

Fluent ofrece las siguientes opciones de modelos de turbulencia:

- Spalart-Allamaras model
- **k- ϵ models**
 - Standard k- ϵ models
 - Renormalization-group (RNG) k- ϵ models
 - Realizable k- ϵ models
- **k- ω models**
 - Standard k- ω models
 - Shear-stress transport (SST) k- ω models
 - v2-f model (addon)
- **Reynolds stress model (RSM)**
 - Linear pressure-strain RSM model
 - Quadratic pressure-strain RSM model

- **Detached eddy simulation (DES) model**

- Spalart-Allmaras RANS model
- Realizable k- ϵ RANS model
- SST k- ω RANS model

- **Large eddy simulation (LES) model**

- Smagorinsky-Lilly subgrid-scale model
- WALE subgrid-scale model
- Kinetic-Energy transport subgrid-scale model

Como se puede apreciar, Fluent cuenta con una amplia variedad de modelos de turbulencia, varias versiones de modelos muy conocidos como el k- ϵ , el k- ω y el de esfuerzos de Reynolds (RSM). Los avances en la capacidad de las computadoras, junto al decremento en su coste, han hecho posible simulaciones con modelos demandantes de grandes recursos como el modelos LES y el DES, siendo opciones atractivas para algunas simulaciones.

Es un hecho lamentable que ningún modelo de turbulencia sea universalmente aceptado como superior de todas las clases de problemas. La elección del modelo de turbulencia dependerá de consideraciones tales como la física dentro de la corriente, la práctica establecida para una determinada clase de problema, el nivel de exactitud requerida, la disposición computacional y la cantidad de tiempo disponible para la simulación. Para hacer más adecuada la elección del modelo para su aplicación, es necesario comprender las capacidades y limitaciones de las diferentes opciones.

En el presente trabajo de investigación se utilizaron los siguientes modelos de turbulencia:

2.18.1. Modelo kappa- ϵ ($\kappa-\epsilon$) Standard

Es un modelo semi-empírico basado en las ecuaciones de transporte para la energía turbulenta (κ) y para la disipación de energía turbulenta ϵ . En la derivación del modelo, se asume que el flujo es totalmente turbulento y que los efectos de la

viscosidad molecular son despreciables. Por lo tanto, el modelo $(\kappa - \varepsilon)$ es solamente valido para los flujos totalmente turbulentos. (Lauder y Spalding, 1972; Zambrano, et al, 2016).

- **Energía cinética turbulenta (κ)**

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\bar{u}\kappa)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v}\kappa)}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{u_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + \\ \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{u_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] &+ P_k + G_k - \rho\varepsilon - Y_M \end{aligned} \quad (89)$$

- **Disipación de la energía cinética turbulenta (ε)**

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\bar{u}\varepsilon)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v}\varepsilon)}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{u_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right] + \\ \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{u_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right] &+ C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} [P_k + C_{3\varepsilon} G_k] - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa} \end{aligned} \quad (90)$$

$$P_k = -\rho\mu_t \left[2 \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial \bar{v}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x} \right)^2 \right] \quad (91)$$

$$G_k = -\beta g_i \frac{\mu_t}{\sigma_\theta} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (92)$$

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{\kappa^2}{\varepsilon} \quad (93)$$

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2 \quad (94)$$

$$M_t = \sqrt{\frac{\kappa}{a^2}} \quad (95)$$

$$a = \sqrt{\gamma RT} \quad (96)$$

2.18.2. Modelo kappa-epsilon ($\kappa - \varepsilon$) RNG (Renormalization-group)

Es similar al modelo ($\kappa - \varepsilon$) Standard pero incluye algunas modificaciones

- El modelo RNG tiene un término adicional en la ecuación de (ε).
- El efecto de los remolinos en la turbulencia está incluido en este modelo.
- La teoría RNG mejora la formula analítica de los números de Prandtl (Yakhot et al. 1992; Yakhot y Smith, 1992; Pope, 2000), mientras que el modelo estándar usa constantes especificadas por el usuario.
- Mientras el modelo estándar funciona en la región del flujo con turbulencia plenamente desarrollada, la teoría RNG consta de una formula diferencial derivada analíticamente que tiene en cuenta los efectos de la región donde predomina bajos números de Reynolds turbulentos. el uso efectivo de esto, sin embargo, depende del tratamiento que se le de a la malla cerca de la pared.

2.18.3 Modelo kappa-epsilon ($\kappa - \varepsilon$) Realizable

El término realizable, significa que el modelo satisface ciertas limitaciones en el término de los esfuerzos normales Consistentemente con la física de los flujos turbulentos, para comprenderlo se debe considerar que se combina la aproximación de **Boussinesq** y la definición de la viscosidad turbulenta para obtener la siguiente expresión para el esfuerzo normal de Reynolds en un flujo incompresible:

$$\overline{u_i' u_i'} = \frac{2}{3} \kappa - 2\nu_t \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} \quad (97)$$

El modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable se diferencia de los modelos k-epsilon tradicional por lo siguiente:

- Una nueva ecuación para la viscosidad turbulenta involucrando la variable C_μ , originalmente propuesta por Reynolds.

- Una ecuación nueva para la disipación de la energía cinética turbulenta. Basada en la ecuación raíz media de la fluctuación de la vorticidad.

Utilizando la ecuación de de la viscosidad turbulenta ecuación 97, para obtener una relación para la viscosidad cinemática turbulenta dada por la ecuación 98.

$$\nu_t \equiv \frac{\mu_t}{\rho} \quad (98)$$

Se tiene que el esfuerzo normal $\overline{u'_i u'_i}$, que es por definición una cantidad positiva, se vuelve negativo, por lo tanto “no realizable” cuando se cumple lo siguiente:

$$\frac{\kappa}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} > \frac{1}{3C_\mu} \approx 3.7 \quad (99)$$

El modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable, fue propuesto por (Shih et al. 1995), para hacer frente a deficiencias de los modelos $\kappa - \varepsilon$ tradicionalmente utilizados, adoptando una ecuación nueva para la viscosidad turbulenta involucrando la variable C_μ originalmente propuesto por Reynolds como se mencionó anteriormente y una ecuación para la disipación (ε) basada en la ecuación dinámica da la fluctuación de la vorticidad, por lo tanto, las ecuaciones para el modelo $\kappa - \varepsilon$ realizable son:

- **Energía cinética turbulenta (κ)**

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \bar{u} \kappa)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \bar{v} \kappa)}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{u_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x} \right] + \\ \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{u_k}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial y} \right] &+ P_k + G_k - \rho \varepsilon - Y_M \end{aligned} \quad (100)$$

- **Disipación de la energía cinética turbulenta (ε)**

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\bar{u}\varepsilon)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho\bar{v}\varepsilon)}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\mu + \frac{u_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} \right] + \\ \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\mu + \frac{u_\varepsilon}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial y} \right] &+ \rho C_1 - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{\kappa + \sqrt{\nu \varepsilon}} + \\ C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{\kappa} C_{3\varepsilon} G_b & \end{aligned} \quad (101)$$

Donde tenemos que:

$$C_1 = \text{Max} \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad (102)$$

$$\eta = S \frac{\kappa}{\varepsilon} \quad (103)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (104)$$

La diferencia entre el modelo $\kappa - \varepsilon$ y el $\kappa - \varepsilon$ realizable, es que C_μ no es constante, su forma ahora es:

$$C_\mu = \frac{1}{\left(4.04 + \sqrt{6} \cos \phi \frac{\kappa U^*}{\varepsilon} \right)} \quad (105)$$

Donde

$$U^* = \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \Omega_{ij}\Omega_{ij}} \quad (106)$$

$$\Omega_{ij} = \bar{\Omega}_{ij} - \varepsilon_{ijk} w_k \quad (107)$$

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1}(\sqrt{6W}) \quad (108)$$

$$W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{ki}}{\bar{S}} \quad (109)$$

$$\bar{S} = \sqrt{S_{ij}S_{ij}} \quad (110)$$

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (111)$$

En todas las ecuaciones anteriores tenemos que, a es la velocidad del sonido, ρ es la densidad, P_k representa la generación de energía cinética turbulenta debido al gradiente de velocidad, G_k es la generación de la energía cinética turbulenta debida a las fuerzas de flotación, μ_t es la viscosidad turbulenta, los términos $C_{1\varepsilon}$ y $C_{2\varepsilon}$ son constantes, σ_k y σ_ε son los números de Prandtl turbulentos para las ecuaciones de kappa y épsilon respectivamente, Y_M representa la contribución de fluctuaciones de la dilatación en la turbulencia compresible, debido a la tasa de disipación, S_h son los términos fuentes los cuales incluyen las contribuciones debido solo a las fuerzas del cuerpo, M_t es el número de Mach turbulento y $\overline{\Omega_{ij}}$ que es el tensor de rotación visto desde el punto de referencia de la velocidad angular (w_κ),

2.19 FLUJO BIFÁSICO

Las consideraciones del flujo no pueden ser determinadas directamente de los datos de entrada, y la topología de la interfaz determina la fracción de vacío o el retraso del líquido, los cuales no se conocen a priori. Dichas configuraciones se llaman patrones de flujo.

Existen varias técnicas para determinar los patrones de flujo, que van desde la observación visual directa, hasta el uso de rayos X (Mubayed, 2004), pasando por las técnicas fotográficas.

Cada investigador, dan nombre a los patrones de flujo observados, por eso es tan subjetivo, existen en la literatura abierta una gran cantidad de terminologías que describen una posible distribución de fases, a continuación se dará un enfoque de los patrones de flujo que son reconocidos por investigadores (Beggs y Brill, 1973; Taitel et al. 1980; Barnea, 1987; Taitel, 1990; Alarcon et al., 1998). La determinación de los patrones de flujo existente en un flujo de dos fases no es obvia y generalmente depende de una Interpretación visual del observador.

En flujo horizontal, la descripción de los patrones de flujo propuesta por (Barnea et al., 1986) es una de las más aceptadas, este propone clasificar los patrones de flujo en tubería horizontal en flujo estratificado, flujo intermitente, flujo burbuja y flujo anular.

2.20 PATRONES DE FLUJO HORIZONTAL

Los patrones a regímenes de flujo encontrados frecuentemente en tuberías horizontales en dos fases son:

2.20.1. Flujo estratificado

Las fases están separadas por la acción de la gravedad, donde la fase líquida fluye en el fondo de la tubería y el gas en el tope, el flujo estratificado se subdivide en estratificado liso y estratificado ondulado de acuerdo a la forma que presente la superficie del líquido.

2.20.2. Flujo intermitente

En este patrón de flujo, tapones de líquido fluyen alternadamente a lo largo de la tubería seguidos por una burbuja de gas que fluye sobre una película de líquido. El flujo intermitente se subdivide en flujo tapón y flujo de burbuja alargada. Cuando el flujo no presenta perturbaciones y no existen burbujas de gas en el tapón del líquido, el patrón de flujo se denomina burbuja alargada, para altas ratas de flujo, cuando el tapón de líquido presenta burbujas de gas el patrón de flujo se denomina tapón.

2.20.3. Flujo anular

Una película de líquido rodea un núcleo de gas que fluye a alta velocidad y el cual puede contener gotas de líquido. Cuando el flujo de gas es relativamente bajo, la

mayoría del líquido fluye como una película en el fondo de la tubería. Mientras ondas inestables del líquido fluyen alrededor de la tubería, humedeciendo su periferia. Este patrón de flujo se conoce como flujo anular ondulado.

2.20.4. Flujo burbuja dispersa

La fase gaseosa está distribuida en burbujas discretas dentro de la fase líquida continua. Normalmente existe mayor concentración de burbujas hacia la parte superior de la tubería que hacia la parte inferior.

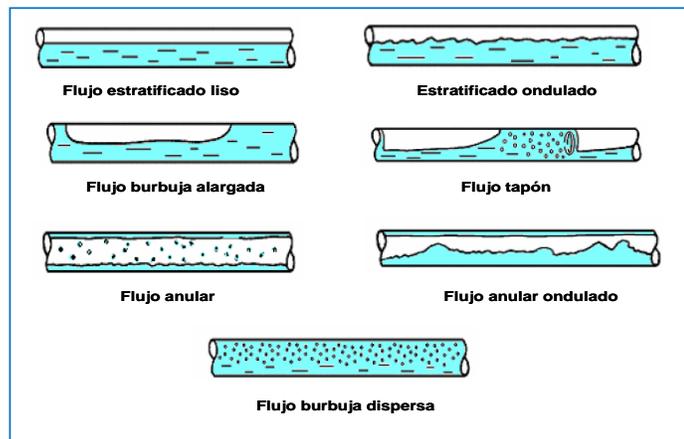


Figura 25. Patrones de flujo horizontal

(Fuente: Zambrano, 2015)

2.21 PATRONES DE FLUJO VERTICALES

Los patrones o regímenes de flujo encontrados frecuentemente en tuberías verticales en dos fases son:

2.21.1. Flujo burbuja

La tubería se encuentra prácticamente llena de líquido y la fase de gas libre se presenta en pequeñas burbujas las cuales se mueven a diferentes velocidades exceptuando aquellas que por su densidad tienen pequeños efectos en el gradiente de presión. La pared de la tubería esta siempre en contacto con la fase líquida (Beggs y Brill, 1991).

2.21.2 . Flujo Slug

La fase gaseosa es más significativa, sin embargo, la fase líquida sigue siendo continua, las burbujas de gas coalescen y forman tapones o slugs los cuales ocupan prácticamente toda la sección transversal de la tubería. El líquido que rodea la burbuja puede moverse a bajas velocidades en forma descendente. El gas y el líquido tienen efectos significativos en la caída de presión (Beggs y Brill, 1991).

2.21.3 Flujo transición o churn

Es cuando ocurre el cambio de fase líquida continua a la fase de gas continua. Las burbujas de gas pueden unirse y el líquido puede entrar en la burbuja. Aunque los efectos del líquido son importantes, dominan los de la fase gaseosa.

2.21.4 Flujo anular

La fase gaseosa es continua y la mayor parte del líquido se introduce en ésta en forma de gotitas. La pared de la tubería está cubierta por una película de líquido y la fase gaseosa controla la caída de presión.

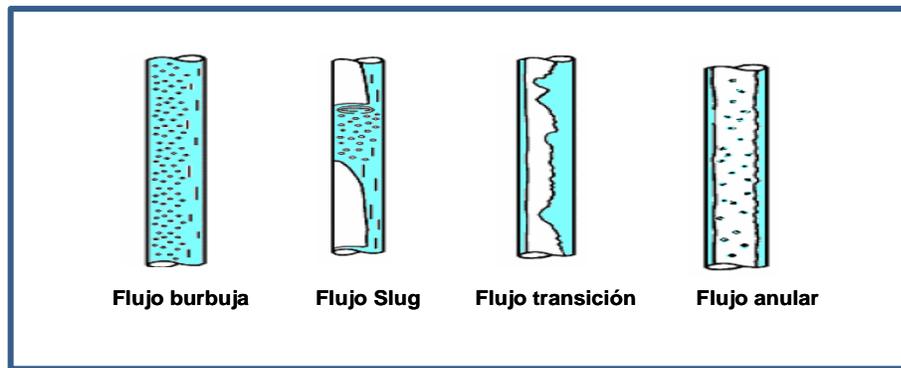


Figura 26. Patrones de flujo vertical

(Fuente: Zambrano, 2015)

2.22 ESQUEMAS NUMERICOS EN DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL

Para el desarrollo del trabajo se utilizó el programa basado en el método de los volúmenes finitos Fluent 6.3, donde los esquemas numéricos utilizados, se basan en la técnica del volumen de control consistiendo en lo siguiente:

- Se divide el dominio computacional en volúmenes de control discretos según la malla empleada.
- Se integra las ecuaciones de dominio sobre los volúmenes de control individuales para construir un sistema de ecuaciones algebraicas para las variables incógnitas discretizadas (velocidad, presión, temperatura, etc).
- Linealizar las ecuaciones discretizadas y resolver el sistema de ecuaciones resultante para obtener las variables incógnitas del problema.

Existen dos métodos numéricos que emplean un sistema de discretización similar el solver segregado y el solver acoplado para volúmenes finitos. Pero las ecuación empleada para linealizar y resolver las ecuaciones discretizadas es diferente.

2.22.1 Solver segregado

El solver segregado es un algoritmo numérico que resuelve las ecuaciones de gobierno de forma secuencial. Dado que las ecuaciones de gobierno son no-lineales y acopladas que necesitan de un proceso iterativo para que el código converja a la solución final, cada iteración consta de los pasos que se muestran en la figura 27.

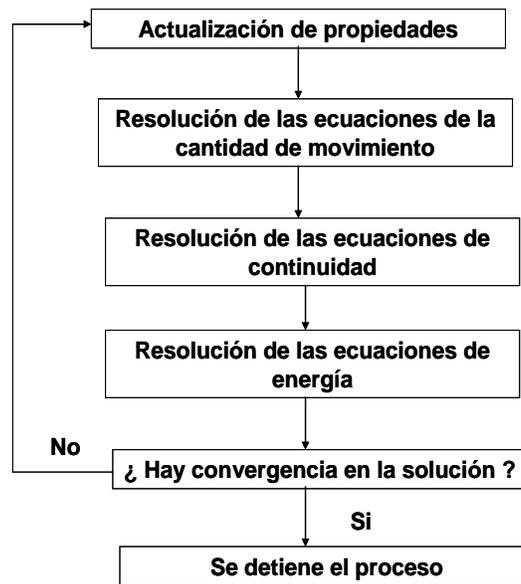


Figura 27. Procedimiento de cálculo del solver segregado

Fuente: (Fluent 2009)

- La actualización de las propiedades del fluido en base a la solución actual y para la primera iteración, estos valores coinciden con los valores iniciales.
- La resolución de las ecuaciones de la cantidad de movimiento, utilizando los valores actualizados de la presión y los flujos máxicos en las caras de los volúmenes de control, lo cual, actualiza el campo de velocidades.
- Si los valores del campo de velocidades obtenidos en el paso anterior no satisfacen la ecuación de continuidad de modo local para cada volumen de control, se deriva una ecuación tipo Poisson para la corrección de la presión de la ecuación de continuidad y se linealiza la ecuación de la cantidad de

movimiento; esta corrección se resuelve para obtener los campos de velocidades y presión y los flujos másicos corregidos, hasta que se satisfaga la ecuación de continuidad.

- Para los casos que sean necesarios, se resuelven las ecuaciones escalares para magnitudes como la energía, turbulencia, especies químicas y radiación, empleándose los valores previamente obtenidos.
- Se hace un chequeo de la convergencia, si el proceso ha convergido no se realizan más iteraciones y si no lo ha hecho, se sigue iterando hasta obtener la convergencia deseada. En general, se necesitan un gran número de iteraciones para conseguir un nivel aceptable de convergencia.

2.22.2. Solver acoplado

El solver acoplado es un algoritmo que resuelve las ecuaciones de gobierno de forma simultánea (Fluent, 2009), salvo que las ecuaciones de gobierno son no lineales y acopladas, se necesita de un proceso iterativo para que el código converja a la solución final. Cada iteración consta de los pasos que se muestran de manera esquemática en la figura 28.

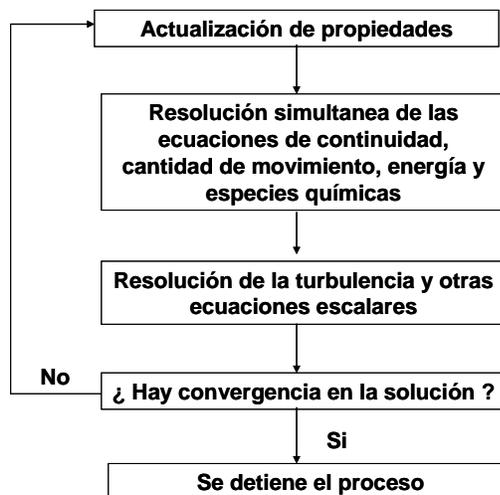


Figura 28. Procedimiento de cálculo del solver acoplado

Fuente: (Fluent 2009)

- La actualización de las propiedades del fluido en base a la solución actual, para la primera iteración donde estos valores coinciden con los valores iniciales.
- La resolución simultánea de las ecuaciones de continuidad, cantidad de movimiento y energía y especies químicas en caso de ser necesarios.
- En el caso de ser necesario se resuelven las ecuaciones escalares para turbulencia y radiación, utilizándose los valores obtenidos previamente.
- Se hace un chequeo de la convergencia. Si el proceso ha convergido, no se realizan más iteraciones, y si no lo ha hecho, se sigue iterando hasta obtener la convergencia deseada. En general, se necesita un gran número de iteraciones para conseguir un nivel aceptable de convergencia.

2.23 FORMULACIÓN IMPLÍCITA Y EXPLÍCITA

Independientemente del método que se emplee para resolver las ecuaciones de gobierno discretizadas, estas deben ser linealizadas para obtener un sistema de ecuaciones para las variables dependientes en cada celda del dominio computacional. Entonces, el sistema de ecuaciones linealizadas es resuelto para obtener los valores de dichas variables dependientes.

Dependiendo de la forma en que se linealiza las ecuaciones se puede tener una formulación implícita o explícita del problema.

2.23.1. Formulación implícita:

Para una variable del problema, el valor desconocido de esta, en cada celda es calculado usando una relación que incluye los valores conocidos de las variables en otras celdas, los cuales no se conocen con anterioridad, por lo tanto cada incógnita

aparecerá en más de una ecuación del sistema y esas ecuaciones deben ser resueltas simultáneamente para obtener el valor de todas las incógnitas.

2.23.2. Formulación explícita:

Para una variable del problema, el valor desconocido de esta en cada celda es calculado usando solamente una relación que incluye solamente los valores conocidos de esa variable en otras celdas. Por lo tanto cada incógnita aparecerá en una única ecuación del sistema, y esas ecuaciones pueden ser resueltas independientemente para cada una de las celdas.

2.24 ESQUEMAS DE DISCRETIZACIÓN

Se emplea el método de los volúmenes finitos para convertir las ecuaciones de gobierno de un fluido en ecuaciones algebraicas que pueden ser resueltas numéricamente. Este método consiste en integrar las ecuaciones de gobierno sobre cada volumen de control (celda). Dando lugar a un sistema de ecuaciones discretas que representan la conservación de las magnitudes fluidas en cada volumen de control.

Si se discretiza la ecuación de transporte, para el caso estacionario mediante el método de los volúmenes finitos obtenemos la ecuación 112.

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{V_c} \rho \phi dV \right) + \int_{S_c} \vec{n} \cdot (\rho \phi \mathbf{u}) dA = \int_{S_c} \vec{n} \cdot (\Gamma \cdot \nabla \phi) dA + \int_{V_c} S_\phi dV \quad (112)$$

Tomando como volumen de control una celda triangular (bidimensional), figura 29, se obtiene la ecuación 113.

$$\sum_f^N \rho_f \vec{v}_f \phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_f^N \Gamma_\phi (\nabla \phi)_n \cdot \vec{A}_f + S_\phi V \quad (113)$$

Siendo N el número de caras del contorno de la celda o volumen de control, ϕ_f es el flujo de ϕ a través de la cara f debido a la convección, $\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$ el flujo másico a través de la cara f, \vec{A}_f es el área de la cara f, $(\nabla \phi)_n$ es una magnitud del $\nabla \phi$ en la dirección normal a la cara f y V es el volumen de la celda.

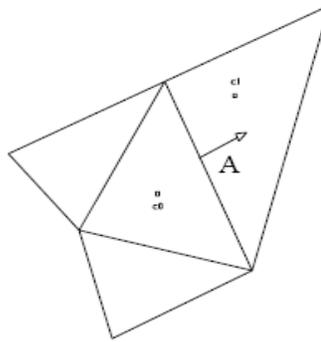


Figura 29. Celda triangular
(Fuente: Fluent 2009)

Un esquema *Upwind* (aguas arriba), es aquel mediante el cual se obtiene el valor de ϕ_f a partir de los valores de las celdas que se encuentran por arriba, en la dirección del vector normal a la cara, se implementan distintos tipos de esquemas *Upwind*, *Upwind* de primer orden, *Upwind* de segundo orden, ley exponencial y QUICK

Para los métodos de discretización a emplear, cuando se utiliza el solver segregado, se resuelven todas las ecuaciones empleando por defecto en esquema *upwind* de primer orden para discretizar los términos convectivos. Si se emplea solver acoplado, se emplean por defecto un esquema de segundo orden para las ecuaciones de flujo, mientras que el resto de las ecuaciones se resuelven empleando un esquema de primer orden, por defecto.

2.24.1. Esquemas *upwing* de primer Orden

Cuando se trabaja con una precisión de primer orden, los valores de las variables en las caras de la celda se obtienen suponiendo que los valores del centro de la celda para todas las magnitudes físicas representan el valor medio de la celda, es decir, los valores de las magnitudes en la cara de la celda ϕ_f se toman iguales a los de las celdas ϕ que se encuentra aguas arriba de ella.

2.24.2. Esquemas Upwing de segundo orden

Cuando se trabaja con precisión de segundo orden, los valores de las variables en las caras de la celda se obtienen empleando una reconstrucción lineal multidimensional. Con esta aproximación, se consigue una precisión de orden elevado en los valores de las caras de las celdas a través de la expansión de Taylor centrada en el centroide de la celda. De esta manera, cuando se emplea un esquema de segundo orden el valor de ϕ en la cara de la celda f se obtiene mediante la ecuación.

$$\phi_f = \phi + \nabla \phi \cdot \Delta \vec{s} \quad (114)$$

Donde los términos ϕ y $\nabla \phi$ son los valores obtenidos en el centro de la celda y su gradiente respecto a las celdas ubicadas arriba de ellas, y $\Delta \vec{s}$ es el vector desplazamiento del centroide de la celda arriba del centroide de las caras, esta formulación requiere determinar el gradiente de ϕ en cada celda y se obtiene a partir del teorema de divergencia, que de manera discreta se expresa como

$$\nabla \phi = \frac{1}{V} \sum \tilde{\phi}_f \vec{A} \quad (115)$$

Siendo $\tilde{\phi}_f$ calculado empleando el valor medio de ϕ entre dos celdas adyacentes a la cara.

2.24.3 Ley exponencial

La ley exponencial es un esquema de discretización que interpola los valores de una variable ϕ en una cara utilizando la solución exacta de la ecuación unidimensional de convección-difusión

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) = \frac{\partial}{\partial x}(\Gamma) \frac{\partial \Phi}{\partial x} \quad (116)$$

Donde Γ y ρu son constantes del intervalo ∂x . La ecuación 101, puede ser integrada obteniéndose la siguiente solución, ecuación 117

$$\frac{\phi(x) - \phi_0}{\phi_L - \phi_0} = \frac{e^{(Pe \frac{x}{L})} - 1}{e^{Pe} - 1} \quad (117)$$

Siendo ϕ_0 y ϕ_L los valores de ϕ en $x=0$ y $x=L$ respectivamente, y Pe es el número adimensional de Péclet, definido como

$$Pe = \frac{\rho u L}{\Gamma} \quad (118)$$

Para valores elevados del número de Péclet, el valor de ϕ en $x=L/2$, es aproximadamente igual al valor aguas arriba (ϕ_L). Cuando $Pe=0$, es decir, no hay flujo convectivos y, por lo tanto, el problema es de difusión pura, el valor de ϕ puede ser interpolado usando un esquema lineal entre los valores de ϕ entre $x=0$ y $x=L$,

Si el número de Péclet tiene un valor intermedio, hay que aplicar la ley exponencial de la ecuación 116, para obtener el valor de ϕ en $x = L/2$.

2.24.4. Esquema Quadratic Upwind Interpolation (QUICK)

Para mallas formadas por elementos cuadrangulares y hexaédricos, se dispone de un esquema QUICK, este esquema de discretización permite realizar un cálculo con precisión de orden elevado del valor de ϕ en la cara de las celdas, este esquema está basado en una media ponderada sobre un esquema *upwing* de segundo orden e interpolaciones sobre los valores centrados de la celda.

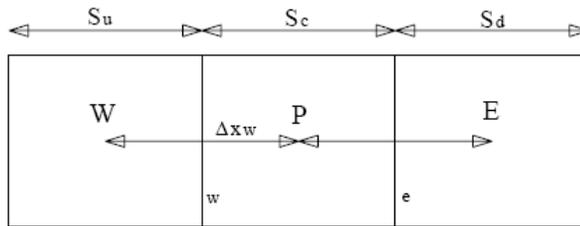


Figura 30. Volumen de control unidimensional

(Fuente: Fluent 2009)

Para la cara e de la figura anterior, el flujo va de izquierda a derecha y el valor de ϕ se obtiene según:

$$\phi = \theta \left[\frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_p + \frac{S_d}{S_c + S_d} \phi_L \right] + (1 - \theta) \left[\frac{S_u + 2S_d}{S_u + S_d} \phi_p + \frac{S_c}{S_u + S_c} \phi_w \right] \quad (119)$$

Haciendo $\theta = 1$, la ecuación 119 se transforma en una interpolación centrada de segundo orden, mientras que si se hace $\theta = 0$, se obtiene una interpolación *Upwing* de segundo orden.

El QUICK más comúnmente empleado es aquel que adopta el valor de $\theta = 1/8$

El esquema QUICK generalmente proporciona resultados más precisos si se tienen mallas estructuradas alineadas con la dirección de flujo.

2.25 FORMA LINEALIZADA DE LAS ECUACIONES DISCRETIZADAS

La forma discretizada de la ecuación de transporte, contiene la incógnita ϕ en el centro de la celda y en las celdas adyacentes, siendo esta ecuación, por lo general no lineal respecto a dichas variables, la forma linealizada de la ecuación 119, viene dada por

$$a_p \phi = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (120)$$

Donde el subíndice nb hace referencia a las celdas adyacentes a_p y a_{nb} son los coeficientes de linealización de ϕ y ϕ_{nb} , respectivamente.

El número de celdas adyacentes depende del tipo de malla utilizada, por lo general, este número suele ser constante en el caso de mallas estructuradas. Se pueden escribir ecuaciones semejantes para cada celda. Lo que derivará un sistema de ecuaciones algebraicas que se resuelven empleando el método de Gauss-Seidel combinado con un método AMG.

2.26 FACTOR DE SUBRELAJACIÓN

Como la mayoría de las ecuaciones a resolver son no lineales, es necesario controlar como va cambiando el valor ϕ durante cada iteración, este valor depende de la magnitud de la iteración anterior y se define como

$$\phi = \phi_{old} + \alpha \Delta\phi \quad (121)$$

Siendo ϕ_{old} el valor de ϕ en la iteración anterior, $\Delta\phi$ es la variación que experimenta ϕ en dos iteraciones consecutivas y α es el factor de subrelajación.

2.27 EVALUACIÓN DE LAS DERIVADAS PARCIALES DE SEGUNDO ORDEN

El gradiente de ϕ se emplea para discretizar los términos convectivos y de difusión que aparecen en las ecuaciones de gobierno, esto se calcula empleando el teorema de Gauss.

$$(\nabla\phi)_{c0} = \frac{1}{V} \sum_f \bar{\phi}_f \bar{A}_f \quad (122)$$

Donde $\bar{\phi}_f$ es el valor de ϕ en el centro de la cara f y la sumatoria está extendida a todas las caras que forman el conjunto de la celda

En función de la forma de calcular el valor de $\bar{\phi}_f$ se tienen dos formulaciones

- *Formulación basada en la celda*

El valor de $\bar{\phi}_f$ se calcula realizando una media aritmética entre los valores de ϕ en los centros de las celdas adyacentes.

$$\bar{\phi}_f = \frac{\bar{\phi}_{c0} + \bar{\phi}_{c1}}{2} \quad (123)$$

- *Formulación basada en los nodos*

El valor de $\bar{\phi}_f$ se calcula realizando una media aritmética entre los valores de ϕ en los nodos que conforman la cara.

$$\bar{\phi}_f = \frac{1}{N_f} \sum_n^N \bar{\phi}_n \quad (124)$$

Donde $\bar{\phi}_n$ se obtiene realizando la media ponderada entre los valores de los nodos vecinos.

En el caso de mallas estructuradas la formula basada en la celda, proporciona mejores resultados, mientras que para mallas no estructuradas o hibridas se recomienda emplear la formulación basada en nodos.

2.28 ELECCIÓN DE LOS SISTEMAS DE DISCRETIZACIÓN

Para los diferentes sistemas de discretización, es importante tener presente en caso es convenientes tener unos u otros.

Cuando el flujo esta alineados con las mallas, emplear una discretización de primer orden puede ser aceptable, pero si no ocurre, una discretización de primer orden en los términos convectivos incrementa el error numérico de la discretización.

Para mallas triangulares y tetraédricas, dado que el flujo no se encuentra alineado con la malla, se obtendrá mejores resultados si se emplea una discretización de segundo orden.

Para mallas cuadrangulares y hexaédricas también se obtendrán resultados más precisos, especialmente, en casos de flujos complejos.

Con lo anterior se puede decir, que los esquemas de primer orden obtienen una mejor convergencia que los de segundo orden, pero en general, los resultados son menos exactos.

El esquema QUICK puede dar resultados más precisos que un esquema de segundo orden para flujos con componentes de giro o azimutal importante en mallas estructuradas compuestas por elementos cuadriláteros o hexaédricos en general, sin embargo, un esquema QUICK no proporciona resultados significativamente más precisos.

2.29 ESQUEMAS DE INTERPOLACIÓN

2.29.1. Esquemas de interpolación en el solver segregado

Los esquemas de interpolación que se implementan en la discretización de las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento en el solver segregado, estos esquemas se pueden entender tomando como referencia las ecuaciones integrales y estacionarias de la continuidad y cantidad de movimiento

$$\oint \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = 0 \quad (125)$$

$$\oint \rho \vec{v} \vec{v} \cdot d\vec{A} = -\oint p I \cdot d\vec{A} + \oint \bar{\tau} \cdot d\vec{A} + \int_V \vec{F} dV \quad (126)$$

Siendo I la matriz identidad, $\bar{\tau}$ el tensor de esfuerzos viscosos y \vec{F} el vector de fuerzas.

- Discretización de la ecuación de la cantidad de movimiento

Aplicando el mismo procedimiento que se aplicó anteriormente para discretizar las ecuaciones de transporte. Se obtiene la forma discretizada de la ecuación de cantidad de movimiento, que para su componente x viene dada por

$$a_p u = \sum a_{mb} u_{nb} + \sum P_f \cdot A \cdot \hat{i} + S \quad (127)$$

Si el campo de presiones y los flujos másicos a través de las caras fueran conocidos, la ecuación 127, podrá ser resuelta, obteniéndose como solución el campo de velocidades. Sin embargo, el campo de presiones y de los flujos másicos a través de las caras no es conocido a priori, y deben ser obtenidos como parte de la solución,

Además, Los valores del campo de presiones a almacenar así como la discretización del gradiente de presiones son de gran importancia.

Fluent emplea un proceso mediante el cual se almacenan los valores de la presión y la velocidad en el centro de la celda, sin embargo, necesita el valor de la presión que está entre las caras c_0 y c_1 de la figura 30, por lo tanto es necesario emplear un sistema de interpolación que permita tener los valores de la presión en las caras a partir de los valores en el centro de la celda.

2.29.2. Esquemas de interpolación de la presión

Fluent, por defecto, interpola los valores de la presión en las caras utilizando los coeficientes de la ecuación de la cantidad de movimiento. Este método funciona correctamente con la variación de la presión entre los centros de la celda contigua es pequeña, en caso de existir grandes gradientes en el perfil de presiones, no se puede emplear este esquema de interpolación y en el caso de emplearse, aparecerán discrepancias entre los valores de la velocidad en la celdas.

Los flujos en lo que no se podrán emplear este esquema son:

- Flujos que ejercen grandes fuerzas sobre los cuerpos
- Flujos con movimientos ciclónicos o elevada verticidad (swirl)
- Flujos con elevado número de Rayleigh en convección natural

En todos estos casos, es necesario, es necesario refinar la malla en las zonas donde aparezcan gradientes importantes, de modo que el salto de presión entre las mismas sea lo más suave posible.

Otra fuente de errores en Fluent, asume que el gradiente de presión normal a la pared es cero. Esto es válido en la capa límite, pero no en flujos con grandes fuerzas sobre la superficie ni en geometrías curvas.

Por lo anteriormente expuesto, Fluent implementa una serie de esquemas de interpolación alternativos al estándar (o esquemas por defecto) a emplear, cuando este último carece de validez.

- **Esquema lineal:** Calcula el valor de la presión en la cara como medida de la presión en las celdas adyacentes
- **Esquema de segundo orden:** Calcula el valor de la presión en la cara de la misma forma que un esquema Upwind de segundo orden. Este esquema suele ofrecer mejores resultados que los esquemas estándar y lineal, pero podría dar problemas si se utiliza desde el principio y/o con una malla de baja calidad, el esquema de segundo orden no es aplicable en flujos con gradientes de presión discontinuos impuestos, como consecuencia de un medio poroso en dominio computacional.
- **Esquema body-force-Weighted:** calcula el valor de la presión en la cara, asumiendo que el gradiente de la diferencia entre presión y la fuerza ejercida por el cuerpo es constante, esto es cierto cuando se conocen a priori las fuerzas sobre el cuerpo en la ecuación de cantidad de movimiento (por ejemplo, flujos con flotación, flujo con torbellino axisimétrico).
- Discretización de la ecuación de continuidad

La ecuación de continuidad viene dada por la ecuación 128.

$$\oint \rho \vec{v} \cdot dA = 0 \quad (128)$$

Esta ecuación, la podemos discretizar sobre el volumen de control, obteniendo la siguiente ecuación

$$\sum_f^N J_f A_f = 0 \quad (129)$$

Donde J_f es el flujo másico a través de la cara $f(\rho v_n)$

El solver segregado resuelve las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento secuencialmente. En este proceso secuencial, la ecuación de continuidad se usa como medio para obtener el valor de la presión

2.29.3. Esquemas de interpolación de la densidad

Para casos de flujos compresibles, Fluent aplica una interpolación tipo Upwind para obtener la densidad en las caras (para flujos incompresibles se emplea una media aritmética). Esta interpolación se puede realizar mediante tres esquemas: Upwind de primer orden, Upwind de segundo orden y QUICK.

- El esquema Upwind de primer orden asigna el valor de la densidad en la celda aguas arriba al valor de la densidad en la cara. Este esquema propicia la estabilidad de la discretización de la ecuación de corrección de la presión y ofrece buenos resultados para muchas clases de flujos. Es el esquema que se implementa por defecto en flujos compresibles.
- El esquema Upwind de segundo orden propicia estabilidad en flujos supersónicos y capta los efectos de las ondas de choque mejor que el esquema de primer orden.
- El esquema QUICK empleado para la densidad es similar al empleado en otras variables.

2.30 ACOPLAMIENTO PRESIÓN-VELOCIDAD

En el software Fluent 6, se tienen disponibles los algoritmos SIMPLE, SIMPLEC y PISO. El algoritmo SIMPLE es el que se aplica por defecto, pero en algunos

problemas, es preferible emplear el algoritmo SIMPLEC, particularmente cuando se puede aplicar factores de subrelajación de mayor magnitud.

Para flujos relativamente no muy complejos (laminares) en los que la convergencia está limitada por el acoplamiento entre la presión y la velocidad, con el algoritmo SIMPLEC, se puede fijar el factor de subrelajación para la presión en la unidad, lo cual ayuda a la mejor velocidad en la convergencia. Sin embargo, en algunos problemas, el incrementar el valor de este factor de subrelajación puede traer problemas de inestabilidades en la convergencia. En estos casos se hace necesario el empleo de un valor menor para el factor de relajación asociado o emplear el algoritmo SIMPLE.

2.31 CONVERGENCIA ITERATIVA

Para resolver las ecuaciones de gobierno del flujo se tiene que realizar un proceso de cálculos iterativos. Durante el proceso de iteración para obtener la solución del problema, es necesario controlar que el algoritmo de cálculo converge hacia la solución final (es decir, obtiene cada vez soluciones más aproximadas a la solución final cuando se incrementa el número de iteraciones), ya que el código puede o no converger, y por lo tanto, no estabilizarse en ningún valor aunque continúe iterando de manera infinita.

2.32 RESIDUOS

Los residuos son una de las herramientas más importantes a la hora de controlar la convergencia durante el proceso iterativo. Estos, de modo general, representan la diferencia entre los valores de las variables a resolver entre dos iteraciones. Si un código converge, estas diferencias tienen a reducirse hasta alcanzar un valor muy pequeño en el que se estabilizan. En un caso ideal debería hacerse cero, pero las computadoras tienen precisión finita por lo que se puede conseguir que los residuos

se estabilicen entorno a seis ordenes de magnitud respecto a los valores iniciales 10^{-6} (precisión simple) o incluso valores próximos a los doce órdenes de magnitud 10^{-12} (doble precisión) pero nunca se conseguirá que se haga cero.

En función del solver que se emplee, los residuos se definen de diferente forma. En Fluent 6, se emplean el solver segregado y el solver acoplado.

2.32.1. Residuos para el solver segregado

Después del proceso de discretización de las ecuaciones, las ecuaciones de transporte linealizadas y particularizadas para la celda P queda de la siguiente forma

$$a_p \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b \quad (130)$$

Donde a_p es el coeficiente central de la celda P, a_{nb} son los coeficientes de la celda vecina y b es la contribución constante del término de la fuente S_c

$$S = S_c + S_p \phi \quad (131)$$

Por lo tanto en la ecuación 130, puede expresarse como

$$a_p = \sum_{nb} a_{nb} - S_p \quad (132)$$

El residuo calculado por Fluent 6 en el solver segregado es la suma de las diferencias entre los términos de la ecuación 132, para todas las celdas P del dominio computacional, como residuos no escalados

$$R^\phi = \sum_{Celdas} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_P \right| \quad (133)$$

En general, es difícil evaluar la convergencia basándose en los resultados obtenidos para los residuos definidos según la ecuación 133, ya que es difícil saber a priori, cual puede ser un valor aceptable de estos residuos para considerar que el código ha convergido

Para solucionar este problema, se emplean los residuos escalados, definidos como

$$R^\phi = \frac{\sum_{Celdas} \left| \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + b - a_p \phi_p \right|}{\sum_{Celdas} a_p \phi_p} \quad (134)$$

Donde el valor de ϕ_p que aparece en el denominador se sustituye por v_p para poder obtener los residuos de la ecuación de cantidad de movimiento.

Para la ecuación de continuidad los residuos no escalados se definen como

$$R^\phi = \sum_{Celdas} | \text{generación de masa en la celda } P | \quad (135)$$

Mientras en los residuos escalados se obtienen mediante

$$\frac{R_{IteraciónN}^C}{R_{Iteración5}^C} \quad (136)$$

Siendo el denominador el mayor de los residuos de continuidad en valor absoluto obtenido durante las cinco primeras iteraciones.

2.32.2. Residuos para el solver acoplado

Los residuos para el solver acoplado se define como la variación con el tiempo de una magnitud a conservar (W). el valor RSM de los residuos es la raíz cuadrada de la media de los cuadrados de los valores de los residuos en cada celda del dominio, es decir:

$$R_{W,RMS} = \sqrt{\sum \left(\frac{\partial W}{\partial t} \right)^2} \quad (137)$$

Donde la variación de W con el tiempo hace referencia a la evolución de la magnitud a conservar con el número de iteraciones. La ecuación 137, es la expresión de los residuos no escalados para el solver acoplado.

Los valores de los residuos para las ecuaciones que el solver segregado resuelve de forma secuencial (turbulencia y radiación) son los mismos que los descritos para el solver segregado.

2.33 PROPIEDADES DE UN MÉTODO DE SOLUCIÓN NUMÉRICA

2.33.1. Consistencia

La consistencia de un método numérico hace referencia a la coherencia de la aproximación de la ecuación diferencial. Este concepto en pocas palabras trata de verificar si el esquema numérico aproxima la ecuación diferencial deseada de manera razonable o no. Normalmente la discretización será una solución exacta cuando el espaciamiento de la malla tienda a cero, pero debido a la simplificación de la solución realizamos una discretización la cual es un compromiso entre precisión y tiempo de simulación, por lo que tenemos un espaciamiento de malla diferente de cero, esto genera una diferencia entre la solución numérica y la solución exacta la cual se denomina error de truncamiento. Si este error tiende a cero cuando el espaciamiento de la malla tiende a cero, se dice que el método es consistente. Hay que destacar que el error de truncamiento proviene del truncamiento de las expansiones de las series de Taylor las cuales son aproximaciones discretas de los valores nodales de la malla. Pero aún, si una aproximación es consistente no implica que la misma sea convergente, para esto se necesita de otro concepto que junto al concepto llamado estabilidad, hacen posible convergencia de una aproximación.

2.33.2. Estabilidad

Esta propiedad está relacionada con la atenuación de los errores iniciales, a medida que pasan las iteraciones; el comportamiento del error para definir si un sistema es estable es que sea descendente y de manera controlada (no comportamientos erráticos o aleatorios). Para métodos iterativos se define como método estable aquel que no diverge. La estabilidad puede ser difícil de investigar, especialmente cuando las condiciones de borde y las no linealidades están presentes.

2.33.3 Convergencia

Un método numérico se dice que es convergente si la solución de la ecuación discretizada tiende a la solución exacta de la ecuación diferencial cuando el espaciamiento del mallado tiende a cero. Además de cumplir con la condición de estabilidad. Para problemas no lineales los cuales son influenciados por las condiciones de borde, la estabilidad y convergencia es difícil de demostrar, por lo cual se utilizan experimentos numéricos para chequear la convergencia (repetiendo de manera metódica los cálculos, en una serie de refinamientos sucesivos de malla).

2.33.4 Conservación

Esta propiedad es de vital importancia para conservar el modelo físico, ya que las ecuaciones matemáticas deben representar un fenómeno físico, por esta razón muchas de las ecuaciones resultantes son ecuaciones de conservación (leyes de conservación) para esquemas conservativos. En el caso de volumen finito, si se respetan las leyes de conservación para cada volumen de control, se garantiza que dichas leyes se respetaran en el dominio total. Esta propiedad pone restricciones sobre el error de la solución, si la conservación de masa, momento y energía es asegurada, el error es distribuido entre estas cantidades sobre el dominio total.

En esquemas no conservativos se pueden producir fuentes o sumideros artificiales, cambiando las ecuaciones de balance. Sin embargo, los esquemas no conservativos pueden llevar a soluciones estables, consistentes y soluciones correctas en el caso de que el mallado sea lo suficientemente fino. Los errores debido a la no conservación

se dan en mallas bastas, pero la dificultad radica en el hecho de conocer cuándo estos errores son lo suficientemente pequeños; por esta razón normalmente se prefieren utilizar esquemas conservativos.

2.33.5 Precisión

En muchos problemas concernientes al flujo de fluidos y transferencia de calor las soluciones numéricas son soluciones aproximadas, en las cuales están involucrados una serie de errores, los cuales se pueden catalogar de la siguiente manera:

Errores de modelado: Se define como la diferencia entre la solución numérica y la solución exacta del modelo matemático.

Errores de discretización: Se define como la diferencia entre la solución exacta de las ecuaciones de conservación y la solución exacta del sistema algebraico de las ecuaciones obtenidas por la discretización de esas ecuaciones.

Errores de Iteración: Se define como la diferencia entre la solución iterativa y la solución exacta del sistema de ecuaciones algebraico.

Es importante reconocer este tipo de errores, además de otros errores existentes no nombrados. En algunos casos algunos errores disminuyen la influencia de otros, por ejemplo, normalmente al afinar las mallas se consiguen soluciones más precisas, pero se dan casos en los cuales no es así, y esto es debido a que cuando se afina la malla también se magnifica algún error en el modelaje del problema y se consiguen mejores resultados con mallas un poco más robustas, esto comparando el problema con soluciones experimentales.

La precisión como concepto requiere el minimizar las fuentes de errores para obtener una buena solución numérica, esto dentro del campo de la ingeniería como ya ha sido referido es un compromiso entre precisión y practicidad.

CAPITULO III

MARCO METODOLÓGICO

3.1. TIPO DE INVESTIGACIÓN

El estudio tendrá por finalidad evaluar el desempeño de un reactor metalúrgico agitado con gas, utilizando para el análisis dos formas distintas de inyección de gas, una céntrica y otra excéntrica; para esto se realizará un estudio paramétrico de diferentes variables mediante la aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC), utilizando datos experimentales y geométricos de la literatura abierta de (Xie et al, 1991a,b).

Esta investigación se basa en un estudio *experimental de campo*; al respecto (Fidias, 2006) establece que “La investigación experimental es un proceso que consiste en someter a un objeto o grupo de individuos a determinadas condiciones, estímulos y tratamientos (variable independiente), para observar los efectos o reacciones que se producen (variable dependiente)”, Pag 33, y referente a la investigación de campo define que “Es aquella que consiste en la recolección de datos directamente de los sujetos investigados, o de la realidad donde ocurre los hechos (datos primarios), sin manipular o controlar variable alguna, es decir, el investigador obtiene la información pero no altera las condiciones existentes. De allí su carácter no experimental”, Pag 31.

3.2. DATOS EXPERIMENTALES Y DE DISEÑO PARA EL ANÁLISIS DE LOS REACTORES PARA EL REFINO SECUNDARIO DEL ACERO

En la data obtenida de la literatura abierta de (Xie et al,1991a,b). se cuenta con medidas geométricas y experimentales; los cálculos experimentales fueron realizados utilizando un reactor de plexiglás, con un diámetro de 40 cm y altura de 100 cm, el cual fue llenado con un metal líquido (Wood's metal) hasta una altura de 37 cm las velocidades de flujo fueron determinadas por dos tapones porosos de entrada de

diámetros 3 y 5 mm respectivamente, y de cuatro caudales de flujo 100, 200, 500 y 800 $cm^3(S.T.P)/s$, donde se midieron los valores de la velocidad axial y tangencial a diferentes alturas del reactor (horno-olla), estas medidas experimentales servirán para contrastar los resultados numéricos de la simulación.

Los fluido de trabajo considerado son: gas (nitrógeno) y un metal líquido llamado (Wood's metal) compuesto principalmente de 50 % de bismuto, 25% plomo, 12.5 % estaño y 12.5% de cadmio y un punto de fusión de 70 °C.

Tabla 1. Fluidos

Fluidos	Densidad (Kg/m ³)	Viscosidad (Kg/ms)
Wood's Metal	9400	4.2x10 ⁻³
Nitrógeno	1.138	1.663x10 ⁻⁵

Para la simulación numérica realizada se consideraron ambos fluidos como Newtonianos, viscosos e incompresibles y el flujo de fluidos fue en estado estable e isotérmico, las burbujas de gas se asumieron esféricas y su deformación no se tomó en cuenta.

3.3. CONSTRUCCIÓN DEL MODELO GEOMÉTRICO A SIMULAR

Uno de los pasos importantes para el estudio a realizar, consistió en crear la geometría (3D) del reactor metalúrgico (olla), así como el mallado y las condiciones de borde que corresponden al preprocesamiento, para ello se utilizó el software GAMBIT 2.0 (Geometry And Mesh Building Intelligent Toolkit). Se le realizaron diferentes mallados al modelo geométrico del reactor considerándolos (muy amplio, amplio, medio, fino y muy fino), con la finalidad de afinar y minimizar los errores en

los cálculos iterativos, realizando el estudio de la independencia de malla y del índice de convergencia de malla.

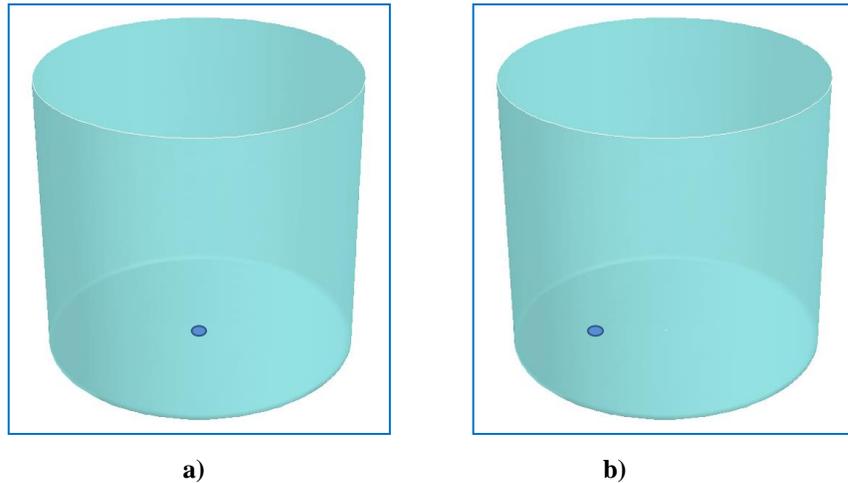


Figura 31. a) Reactor metálgico con inyección centrada, b) Reactor metálgico con inyección excéntrica ubicada a $\frac{1}{2}$ del radio

3.4. CONDICIONES DE LA SIMULACIÓN DEL FLUJO DE FLUIDOS EN EL REACTOR METALURGICO

Para el procesamiento y postprocesamiento se utilizó el software de dinámica de fluidos computacional FLUENT en su versión 6.3, mediante el método de los volúmenes finitos, la solución matemática se llevó a cabo directamente con esta herramienta computacional. En la solución numérica se transforman las ecuaciones de flujo de fluidos que vienen dadas en ecuaciones diferenciales en derivadas parciales en ecuaciones algebraicas de una manera eficiente y efectiva, para hacer frente a la complejidad numérica inherente de la mayoría de los estudios de dinámica de fluidos computacional (DFC).

El algoritmo numérico de simulación (DFC) para el preprocesamiento, procesamiento y postprocesamiento se presenta en la figura 32.

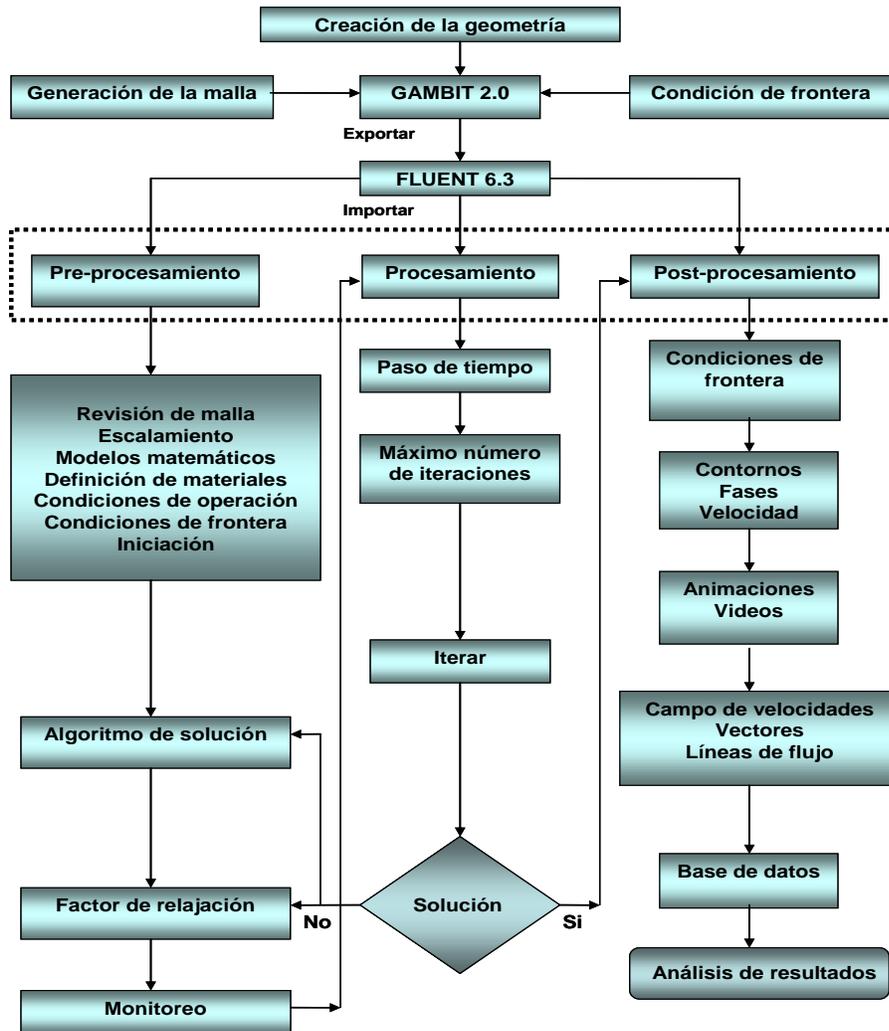


Figura 32. Diagrama de flujo del algoritmo numérico de solución

(Fuente: Zambrano, 2015)

Las simulaciones numéricas se realizaron en un computador IBM Works Station con un procesador Intel (R), Xeon (R) IV dual-core, de 3 Ghz, de 8 GB de memoria RAM, CPU 5160 @3.00 GHz.

3.5. VALIDACIÓN DE RESULTADOS

Se validaron los resultados obtenidos mediante Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) con las predicciones experimentales para el cálculo de la velocidad axial,

fracción volumétrica del gas y energía cinética turbulenta para diferentes modelos de turbulencia, esto se realizó para los dos reactores, uno con entrada de gas céntrica y el otro con entrada de gas excéntrica, luego se analizó y se seleccionó el mejor modelo de turbulencia que representa mejor el fenómeno físico inherente a la data experimental.

Para este estudio se utilizaron tres modelos diferentes de turbulencia ellos son: $(\kappa - \varepsilon)$ Standard, $(\kappa - \varepsilon)$ RNG y $(\kappa - \varepsilon)$ Realizable, para todos estos modelos de turbulencia fueron considerados tratamientos especiales en la paredes como el Standard Wall Functions (SWF) y Enhanced Wall Treatment (EWT), seleccionándose diferentes modelos como se puede apreciar en la tabla 2.

Tabla 2. Modelos numéricos

Standard $k - \varepsilon$		Realizable $k - \varepsilon$		RNG $k - \varepsilon$	
SWF	EWT	SWF	EWT	SWF	EWT
Modelo 1A	Modelo 1B	Modelo 2A	Modelo 2B	Modelo 3A	Modelo 3B

3.6. APORTE AL CONOCIMIENTO

El estudio realizado permitirá ser de referencia para estudios basados en la fluidodinámica de cucharones agitados por gas para el refinado secundario del acero. Este trabajo de investigación es innovador debido a que permitirá profundizar el estudio de la influencia de la energía cinética turbulenta en el comportamiento de la mezcla gas-acero líquido, así como el estudio de otras variables que influyen en el diseño, desempeño y eficiencia del reactor metalúrgico (horno-olla), donde estos estudios son escasos o tratados muy superficialmente sirviendo de enfoque cuando se necesite examinar su utilidad en cualquier planta industrial donde los procesos de fabricación del acero son de vital importancia impactando positivamente en la disminución de los costos y optimización de los diseños.

3.7. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Se analizaron y discutieron los resultados obtenidos, permitiendo optimizar el funcionamiento de reactores agitados por gas para el refinado secundario del acero para futuras aplicaciones industriales.

CAPÍTULO IV

ANÁLISIS DE RESULTADOS

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos y su análisis correspondiente. Estos resultados se presentan con gráficos e imágenes para facilitar su comprensión.

4.1. RESULTADO DEL ESTUDIO DE INDEPENDENCIA E ÍNDICE DE CONVERGENCIA DE MALLA PARA APLICACION DE METODO DE VOLUMENES FINITOS

Con el fin de corroborar que la solución es independiente de la resolución de la malla, se hizo un estudio de convergencia de malla. Con este estudio, como se mencionó en la sección 2.11, el error de truncamiento se reduce y se define el mejor grado de resolución de la malla. Este método consiste en comenzar con una malla inicial y luego se hacen refinamientos consecutivos para observar el efecto de la resolución de la malla. (Ismail, 2008).

El método recomendado para la estimación del error de discretización es el índice de convergencia de malla (GCI) por sus siglas en inglés, basado en el método de extrapolación de Richardson, que implica comparaciones entre dos tamaños de mallas diferentes (Roache, 1997). Este método es actualmente el más robusto disponible para la predicción de la incertidumbre numérica, a pesar de que está lejos de ser perfecto. El método GCI muestra un buen rendimiento para numerosas y diferentes casos de estudio mediante la dinámica de fluidos computacional (Ismail, 2008). Las tablas y gráficos que se presentan a continuación muestran los resultados obtenidos para el estudio de independencia de la malla y para el índice de convergencia de las mallas calculadas para los reactores con inyección de gas céntrica y excéntrica respectivamente. Para el análisis se utilizó el modelo de turbulencia $k-\varepsilon$ con tratamiento estándar de la pared y un caudal de 200 Ncm³/s.

4.1.1. MALLADO

El método de los volúmenes finitos tiene como objetivo principal desarrollar una metodología numérica para resolver las ecuaciones de transporte, que parte principalmente del concepto de discretización, esto se consigue generando una malla que permite dividir el dominio de interés en una serie de celdas o (volumen de control) en la cual se transforman las ecuaciones diferenciales en un conjunto de ecuaciones algebraicas que relacionan el valor de una variable en un punto con el valor en un punto vecino; por lo tanto, el método se basa en valores discretos que están promediados en la celda; las mallas pueden ser estructuradas, no estructuradas y/o híbridas, una malla estructurada consta de celdas planas con cuatro lados (2-D) o celdas volumétricas con seis caras (3-D), en la cual pueden estar distorsionadas la forma rectangular de las caras; la malla no estructurada consta de celdas de varias formas, pero es común utilizar para (2-D) triángulos o cuadriláteros y para (3-D) tetraedros o hexaedros y las mallas híbridas es una combinación de las mallas estructuradas y no estructuradas. En el presente trabajo, para el análisis numérico de los reactores con inyección de gas mediante el uso de la dinámica de fluidos computacional, se generaron mallas no estructuradas (3-D), en las cuales se realizaron ciertas consideraciones importantes:

- ✓ Las mallas se generaron en función del tipo de flujo.
- ✓ Hubo una mayor resolución en las zonas de interés donde el flujo presenta importantes gradientes.
- ✓ Los elementos que conforman el mallado fueron distribuidos de la forma más regular posible, con la intención de que no hayan variaciones importantes en la malla.
- ✓ La resolución de la malla en la pared esta en concordancia con el modelo de turbulencia y el modelo de pared que se utilizó.
- ✓ Se evitaron elementos muy deformados o singulares.
- ✓ El tamaño de la malla se ajustó a las posibilidades y potencia de cálculo de los equipos computacionales utilizados.

Las mallas no estructuradas, donde la geometría puede ser reducida progresivamente a un conjunto de elementos triangulares y cuadriláteros, tiene una gran ventaja de permitir un refinamiento local sin afectar la distribución de celdas fuera de esa zona, esto permite introducir estrategias de mallas adaptativas, bien para refinar localmente o bien para reducir el número de elementos de la celda, que es basado en el gradiente de flujo o en estimación de errores.

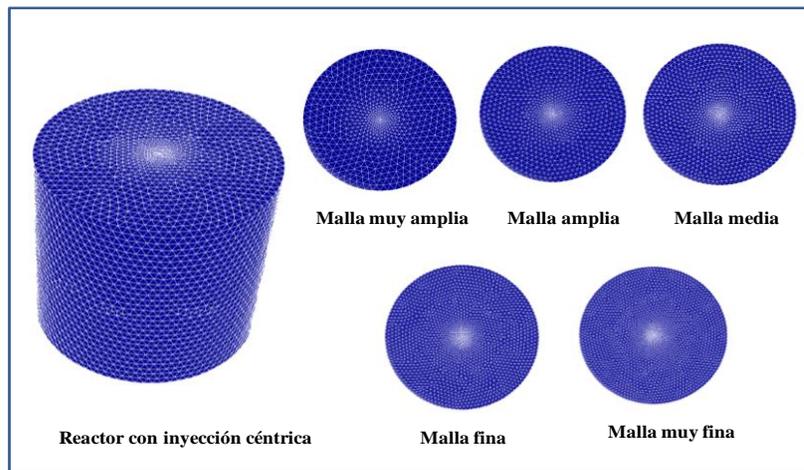


Figura 33. Diferentes mallados para el reactor con inyección céntrica de gas

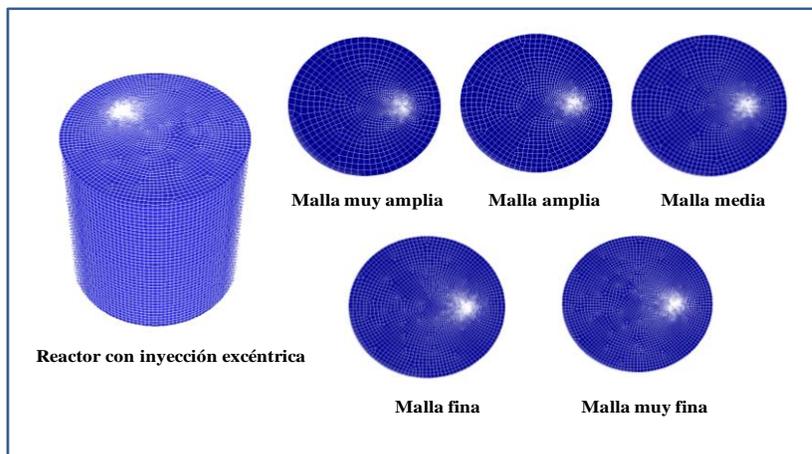


Figura 34. Diferentes mallados para el reactor con inyección excéntrica de gas

Las figuras 33 y 34 muestran los diferentes mallados no estructurados con diferentes niveles de refinación o resolución que discretiza la geometría del reactor con inyección céntrica y excéntrica respectivamente; con la intención de seleccionar cuál de las mallas es la que representa mejor el fenómeno físico del problema a investigar, se realiza un estudio mediante dos vías, el estudio de la independencia de la malla, así como el estudio del índice de convergencia de la malla (GCI), cuya técnica de aplicación se explicó anteriormente.

Tabla 3. Estudio de independencia de malla para reactor con inyección céntrica de gas

#	Mallas	Número de Nodos	Número de Elementos	ΔP (kPa)	y^+ máximo
1	Muy amplia	10318	54366	193	336.32
2	Amplia	18386	97685	190	209.98
3	Media	30903	168496	139	170.76
4	Fina	57178	316431	50	125.85
5	Muy fina	81469	456378	48	105.57

La tabla 3, muestra los resultados de la caída de presión para diferentes resoluciones de las diferentes mallas en el análisis del reactor con inyección céntrica de gas, se puede observar que la diferencia entre la caída de presión en el caso de la malla con celdas finas y el caso de la malla con celdas muy finas, es menor al 10 por ciento; la malla fina podría ser adecuada para el análisis, sin embargo, como es necesaria una mayor precisión, se utilizará la malla muy fina para los cálculos a realizar.

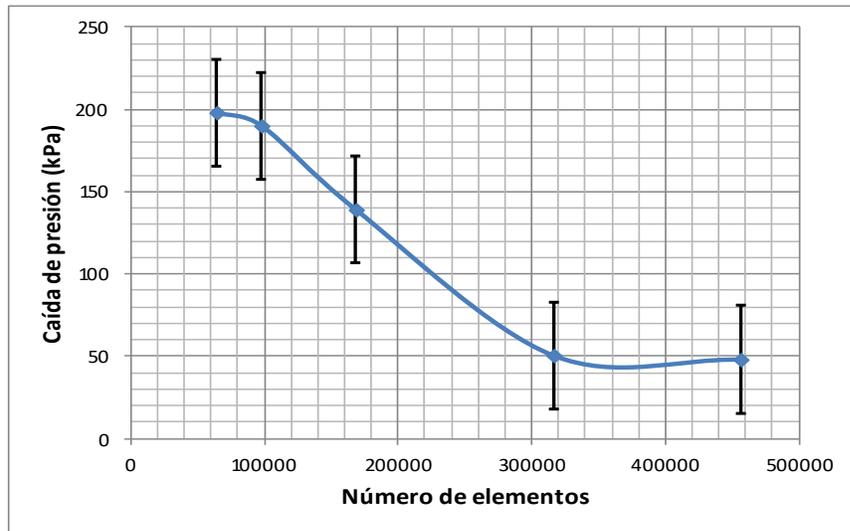


Figura 35. Estudio de la independencia de malla para reactor con inyección céntrica de gas, barras de incertidumbre de $\pm 1\%$

En la figura 35, muestra la curva de la caída de presión para diferentes resoluciones de la malla, se puede apreciar que para una malla con más de 316×10^3 elementos y una con más de 456×10^3 la caída de presión no presenta una variación importante, como se mencionó anteriormente. Es importante destacar, que el mallado cerca de la pared debe ser dimensionado adecuadamente para garantizar una simulación precisa del campo de flujo; Para los modelos $k-\varepsilon$ (usados para el flujo totalmente turbulento) con tratamiento estándar de la pared, el valor de Y^+ debe estar entre 30-300 que corresponde a la zona de la subcapa logarítmica, (Maurina,2014, Fernández, 2002).

Tabla 4. Estudio de Índice de convergencia de malla (GCI) para reactor con inyección céntrica de gas

#	Mallas	Número de Nodos	Número de Elementos	GCI (%) (Índice de convergencia de malla)
1	Muy amplia	10318	54366	
2	Amplia	18386	97685	GCI ₁₂ = 0.08
3	Media	30903	168496	GCI ₂₃ = 2.23
4	Fina	57178	316431	GCI ₃₄ = 2.83
5	Muy fina	81469	456378	GCI ₄₅ = 0.69

La tabla 4 muestra los resultados del índice de convergencia de la malla (GCI) para el reactor con inyección céntrica, se puede ver que $GCI_{45} < GCI_{34}^*$ con lo cual se puede garantizar que la malla seleccionada es la adecuada ya que se ha logrado minimizar el error por discretización del dominio y se ha logrado una solución asintótica.

*GCI₄₅ significa índice de convergencia de malla entre el mallado 4 y 5.

Tabla 5. Estudio de independencia de malla para reactor con inyección excéntrica de gas

#	Mallas	Número de Nodos	Número de Elementos	ΔP (kPa)	y^+ máximo
1	Muy amplia	56034	52731	33	74.46
2	Amplia	78598	74500	32	261.52
3	Media	106710	101703	27	227.71
4	Fina	177270	170237	26	210.35
5	Muy fina	216804	208731	24	189.69

La tabla 5 muestra los resultados para el cálculo de la caída de presión utilizando diferentes resoluciones de las mallas. Para el análisis de la caída de presión en el

reactor con inyección excéntrica de gas, podemos observar que la diferencia entre la caída de presión en caso de la malla con celdas finas con respecto a las mallas con celdas muy finas, es menor al 10 por ciento; entonces, para optimizar el costo computacional, la malla fina podría ser la más adecuada para el análisis.

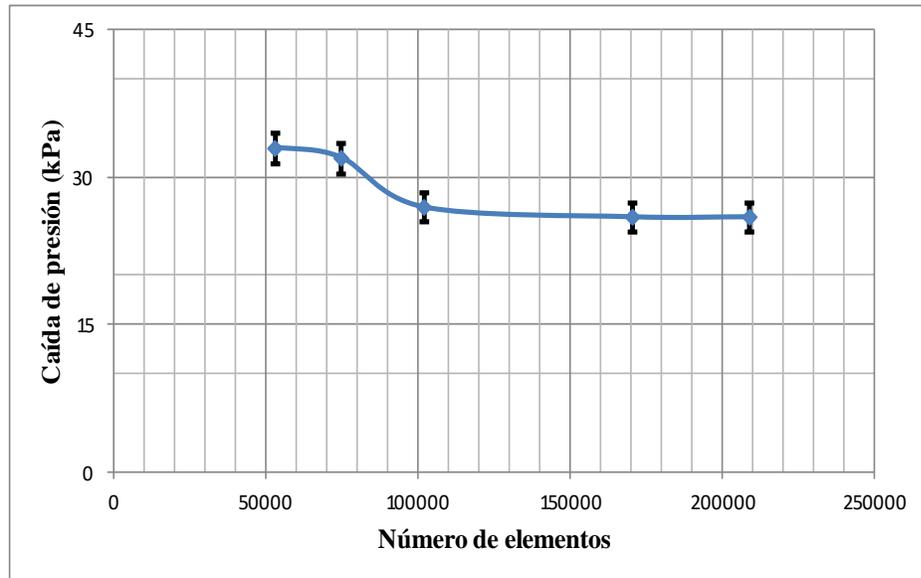


Figura 36. Estudio de la independencia de malla para reactor con inyección excéntrica de gas, barras de incertidumbre de $\pm 0.5\%$

En la figura 36 se puede apreciar la independencia de la malla para el cálculo de la caída de presión en reactores con inyección excéntrica de gas; podemos observar que para una mayor resolución de la malla por encima de los 100×10^3 elementos y cercano a los 200×10^3 elementos, la caída de presión no presenta variaciones significativas, esto permite, seleccionar la mallas adecuada para el estudio a realizar; en este caso la malla fina es una buena opción para optimizar el costo computacional. Es importante destacar que la resolución de malla fina a este punto, no afectaría los cálculos con respecto a si se hubieran realizado con la malla muy fina, ya que es independiente de la resolución de la malla.

Tabla 6. Estudio de independencia de malla para reactor con inyección excéntrica de gas

#	Mallas	Número de Nodos	Número de Elementos	GCI (%) (Índice de convergencia de malla)
1	Muy amplia	56034	52731	
2	Amplia	78598	74500	$GCI_{12} = 0.57$
3	Media	106710	101703	$GCI_{23} = 4.34$
4	Fina	177270	170237	$GCI_{34} = 0.15$
5	Muy fina	216804	208731	$GCI_{45} = 0.13$

La tabla 6 muestra los resultados del índice de convergencia de la malla (GCI) para el reactor con inyección excéntrica de gas, se puede ver que $GCI_{45} < GCI_{34}$ con lo cual se puede garantizar que la malla seleccionada cumple con la solución asintótica y además es la adecuada ya que se ha logrado minimizar el error por discretización del dominio.

4.2. ANALISIS DE RESULTADOS MEDIANTE EL USO DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC) UTILIZANDO DIFERENTES MODELOS DE TURBULENCIA.

4.2.1. REACTOR CON INYECCIÓN DE GAS CENTRICA

- **Análisis para la velocidad axial del gas**

La validación numérica mediante Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) se realizó comparando seis diferentes modelos de turbulencia (tabla 2) y los datos

experimentales informados por (Xie et al, 1992a,b) para la velocidad y la fracción volumétrica de gas. En general, las figuras 33-39, muestran que todos los modelos de turbulencia evaluados, predicen muy bien el comportamiento físico de la agitación de la columna de líquido (acero líquido) mediante inyección de gas (nitrógeno), comparados con los datos experimentales.

En los sistemas de inyección de gas, es el acoplamiento entre las fases gaseosa y líquida el responsable de crear movimiento en la mayor parte del líquido. Las burbujas suben debido a la flotabilidad y a la energía cinética en la salida de la boquilla donde la fase gaseosa se va dispersando a medida que va ascendiendo; Este ascenso de las burbujas de gas forma lo que se llama “pluma” en el medio de reactor.

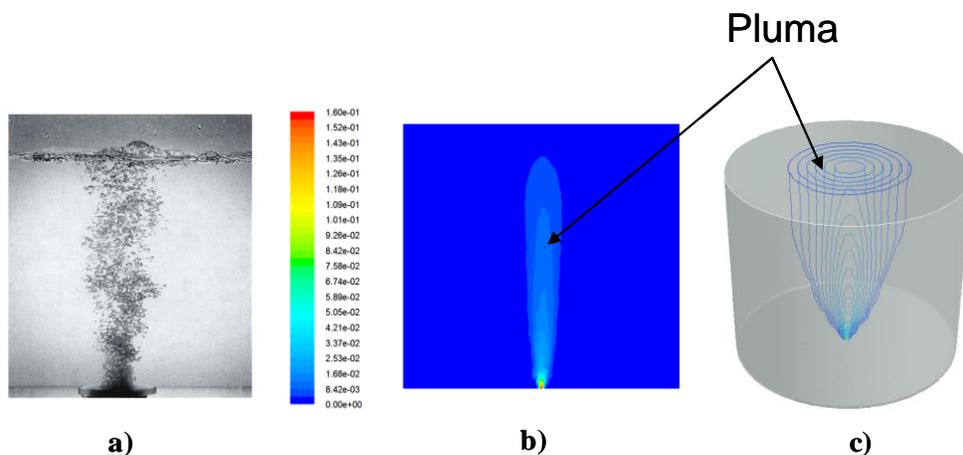


Figura 37. Comportamiento de la pluma en el ascenso del gas dentro del reactor a) Estudio experimental (Anagbo. et al, 1990) , b) y c) Simulación numérica Héctor Z.

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

En la figura 37 se presentan la visualización de la pluma y del comportamiento del gas en el ascenso de las burbujas a través del reactor para la inyección céntrica de gas; el acero líquido (Wood's metal) se mueve con mayor velocidad en la región donde asciende el gas (nitrógeno), pues es donde se lleva a cabo la transferencia de momento entre las fases, el acero líquido también experimenta una fuerza que es

igual pero de sentido opuesto a la fuerza de arrastre en las burbujas de gas, donde la velocidad es directamente proporcional al flujo de gas nitrógeno inyectado.

La comparación de los perfiles de velocidad axial del gas obtenido numéricamente mediante DFC, y comparado con la data experimental, se muestran en las figuras 34-39. Para el estudio se utilizó un caudal de gas de $200 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ y a diferentes alturas del reactor, a saber: 0.05, 0.10, 0.15, 0.20, 0.25, 0.30 y 0.35 m, respectivamente, medidas con respecto a la inyección céntrica del gas.

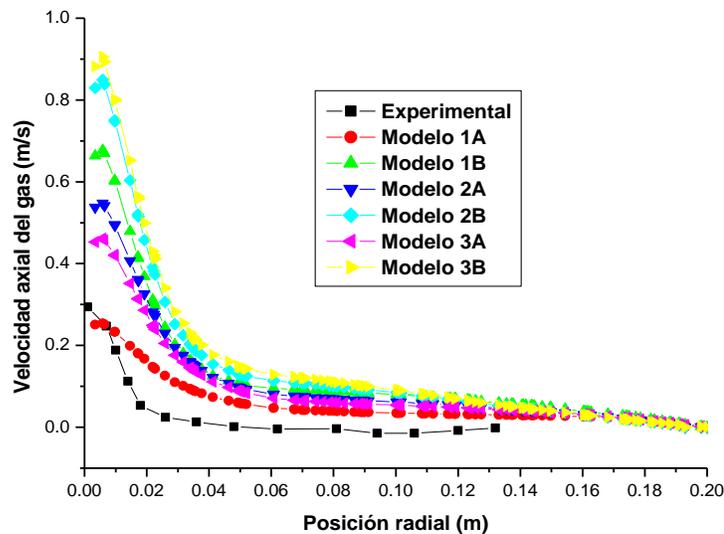


Figura 38. Velocidad axial para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992a) a 0.05 m de altura

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

Tal como se puede apreciar en la figura 38, la velocidad en la entrada es simétrica desde el tope al fondo de la pared y tiene un comportamiento semejante al estudio experimental, inmediatamente después de las entrada, los perfiles de velocidad varían significativamente; después de la entrada, la curva presenta un comportamiento Gaussiano y en el centro del reactor el campo de flujo es complejo; para los diferentes modelos de turbulencia estudiados mediante dinámica de fluidos computacional, se puede apreciar que existe una tendencia similar entre el estudio numérico y el estudio

experimental, apreciándose zonas cercanas a la pared, donde hay baja recirculación de flujo promoviendo las zonas muertas.

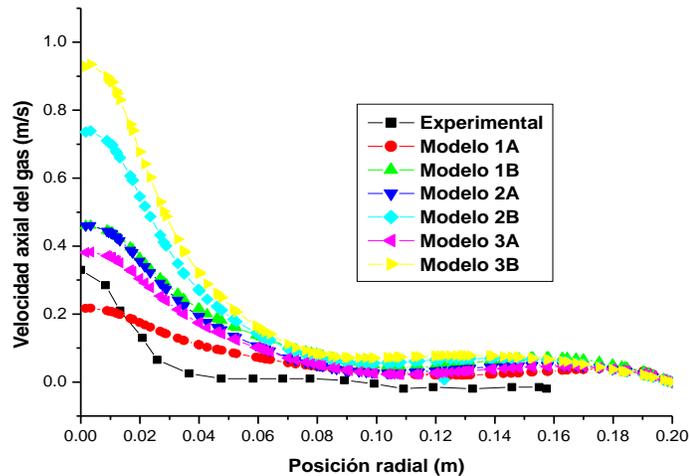


Figura 39. Velocidad axial para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992a) a 0.10 m de altura

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano,2016)

La figura 39 muestra el flujo de gas nitrógeno con un comportamiento estable en las cercanías a la pared, esto se debe a la presencia de bajas zonas de recirculación, el flujo de gas en la región de movimiento ubicada en el centro del reactor, esta principalmente gobernada por las fuerzas inerciales. A medida que estas fuerzas inerciales se debilitan a una cierta altura del cucharón o reactor, el gas comienza a desplazarse alrededor del eje en dirección radial y disminuye a medida que se acerca a la superficie, es por ello que debido a la complejidad del fenómeno físico, los modelos de turbulencia se alejan un 10 % del comportamiento experimental en el mejor de los casos.

De acuerdo a estudios experimentales realizados por (Grevet et al, 1987), (Anagbo et al, 1990), (Zhou et al, 1994) y (Johansen et al ,1988), todos coinciden en que la intensidad de agitación del líquido y la turbulencia se incrementan al aumentar el flujo de gas, lo cual favorece y mejora el mezclado del acero en el cucharón

metalúrgico; también observaron que las fuerzas gravitacionales son las que predominan en el ascenso de las burbujas, y no las fuerzas inerciales del gas en la entrada, esto trae como consecuencia que el diámetro de entrada de gas ya sea por una inyección céntrica o excéntrica, no tiene influencia significativa sobre los patrones de flujo.

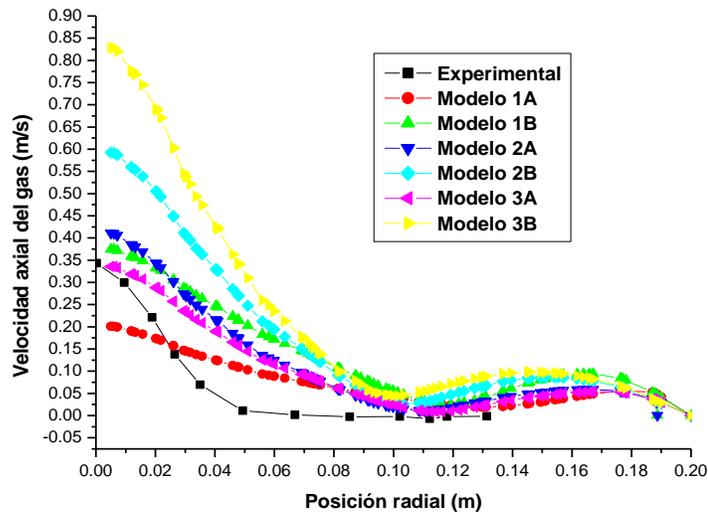


Figura 40. Velocidad axial para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992a) a 0.15 m de altura

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

La figura 40 muestra el comportamiento del flujo para un plano ubicado a 0.15 m de altura sobre la entrada de gas al reactor, en este se observa la presencia de zonas muertas en la parte inferior del cucharón, cercano a la pared, donde el líquido está prácticamente estancado y sin turbulencia, se observa una atenuación del comportamiento de los modelos de turbulencia, con una diferencia aproximada de 9 % respecto a los estudios experimentales en el mejor de los casos y de un 20 % en el peor de los casos; la velocidad del gas va disminuyendo a medida que asciende en el reactor y el perfil de velocidad cambia manteniéndose el valor máximo de la velocidad en el centro.

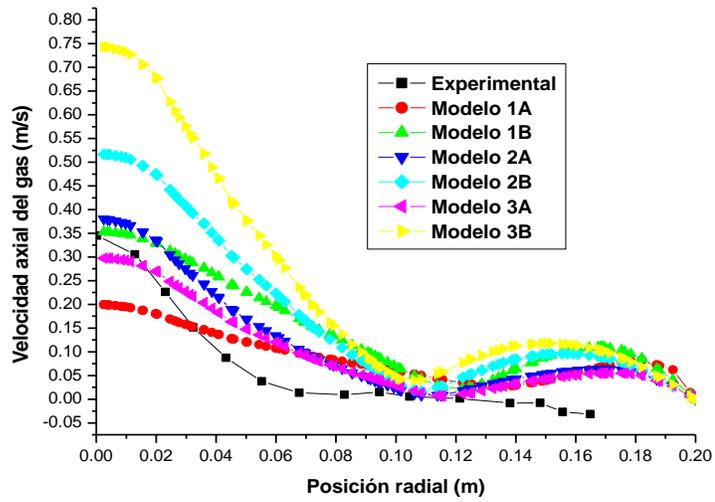


Figura 41. Velocidad axial para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992a) a 0.20 m de altura

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

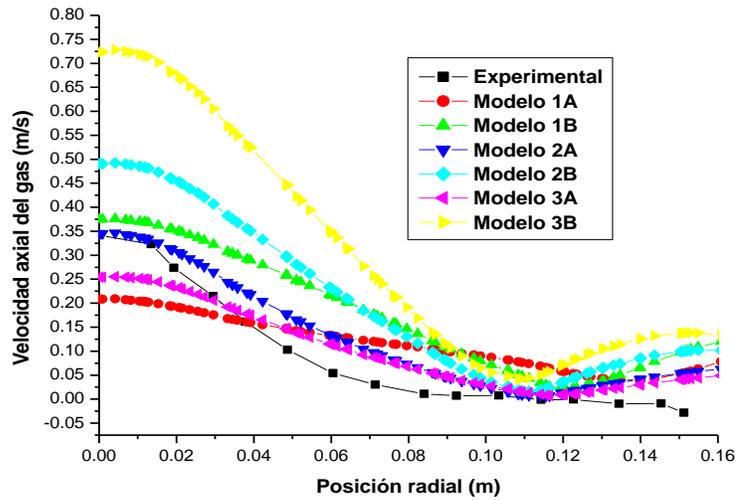


Figura 42. Velocidad axial para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992a) a 0.25 m de altura

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

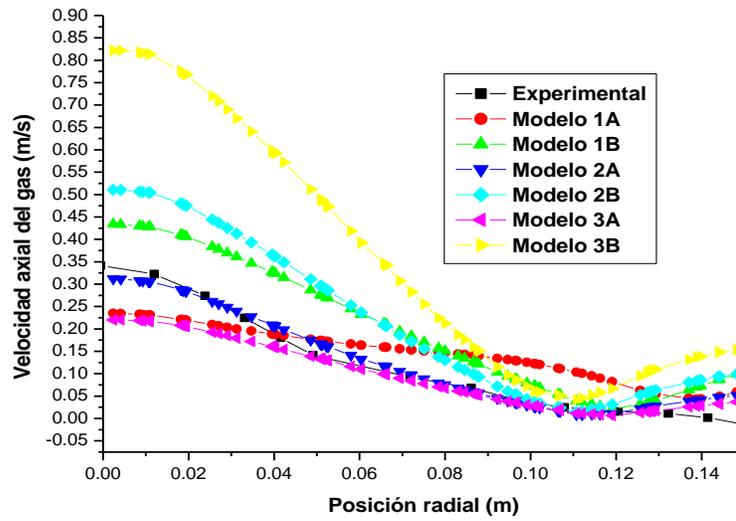


Figura 43. Velocidad axial para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992a) a 0.3 m de altura
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

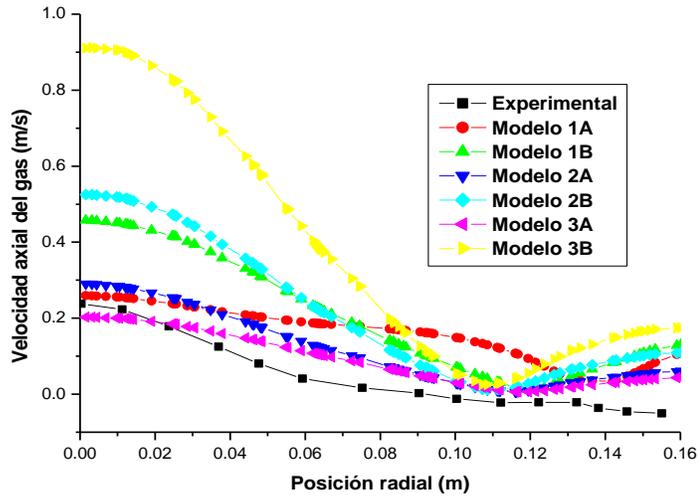


Figura 44. Velocidad axial para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992a) a 0.35 m de altura
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

Las figuras 41-44 muestran los perfiles de la velocidad para las alturas 0.20, 0.25, 0.30, y 0.35 respectivamente, medidas sobre la entrada de gas, en estas se puede

apreciar que la tendencias de las curvas generadas numéricamente mediante dinámica de fluidos computacional, se acercan sustancialmente a la tendencia experimental lo que sin duda alguna desde el punto de vista numérico representa un resultado muy satisfactorio.

Es importante destacar que en todos los casos de estudio, ocurre una singularidad, la misma radica en que la velocidad axial cambia de manera repentina de máxima en el centro y cero en la pared (condición de no deslizamiento).

La simulación numérica proporciona una poderosa herramienta para el estudio de fenómenos físicos de gran interés para el desarrollo de las mejores prácticas en el refino del acero obteniendo resultados satisfactorios comparados con experimentos y seleccionando un modelo de turbulencia que nos permite el diseño óptimo de estos equipos.

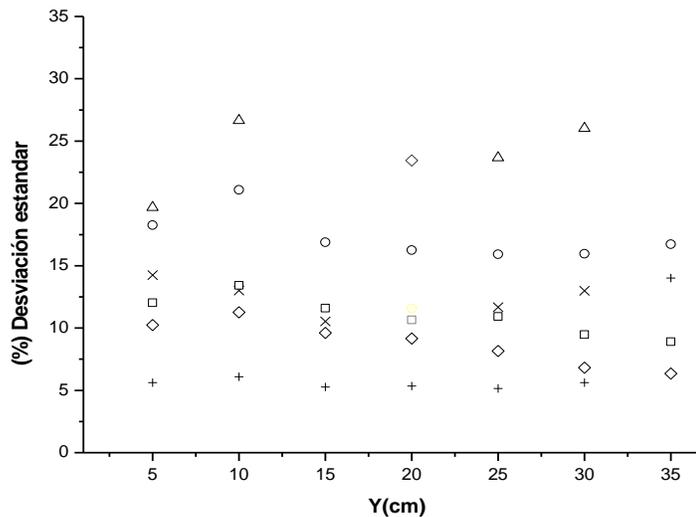


Figura 45. Desviación estándar de los perfiles de la velocidad axial de las observaciones experimentales: $\kappa - \varepsilon$ (Modelo 1A, SWF: signo más; Modelo 1B, EWT: cruces), $\kappa - \varepsilon$ Realizable (Modelo 2A, SWF: cuadrados abiertos; Modelo 2B, EWT: círculos) y $\kappa - \varepsilon$ RNG (Modelo 3A, SWF: diamantes abiertos; Modelo 3B, EWT: triángulos abiertos).

La figura 45 muestra el porcentaje de las desviaciones estándar de los perfiles de la velocidad axial, comparados con los datos experimentales presentados por (Xie et al,

1992a,b) donde el porcentaje de error más bajo son proporcionado por los modelos 1A, 2B y 3A. A pesar de estas diferencias, todos modelos de turbulencia utilizados mediante métodos numéricos concuerdan con el comportamiento experimental de la velocidad axial, podemos concluir que en el estudio numérico mediante DFC, el modelo (3A) que corresponde a $\kappa - \varepsilon$ RNG con funciones estándar de pared, presenta el menor error y sus resultados son satisfactorios.

- **Análisis para el volumen de la fracción de gas**

La distribución del volumen de fracción de gas en el ascenso de las burbujas se muestra en la Figura 47-49, donde se comparan el estudio experimental y los tres diferentes modelos de turbulencia con los respectivos mejoramiento en la pared; en general, las distribución del gas es simétrica alrededor del eje central donde está ubicada la inyección de gas en este caso la céntrica; el gas en su ascenso en el reactor-olla presenta el comportamiento de una función Gaussiana, figura 46; la velocidad de las burbujas del gas nitrógeno disminuye a medida que aumentamos la altura por encima de la zona de inyección del gas, también aumenta la distancia radial desde su centro.

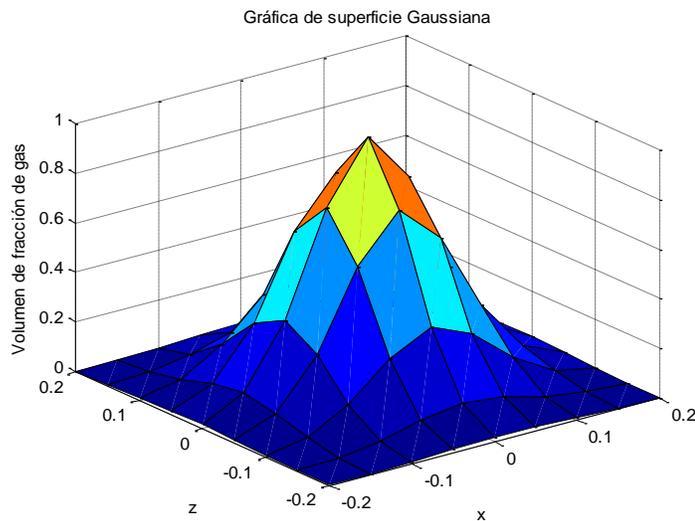


Figura 46. Volumen de fracción de gas superficie Gaussiana

$$z = \exp\left(-100 * \left[(x - 0.0025)^2 + (y - 0.0025)^2 \right] \right)$$

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

Esta disminución de la altura de ascenso del gas puede ser atribuido al aumento de la resistencia de la fase líquida al movimiento inicial, así como la pérdida de energía cinética del gas en el proceso de coalescencia de las burbujas.

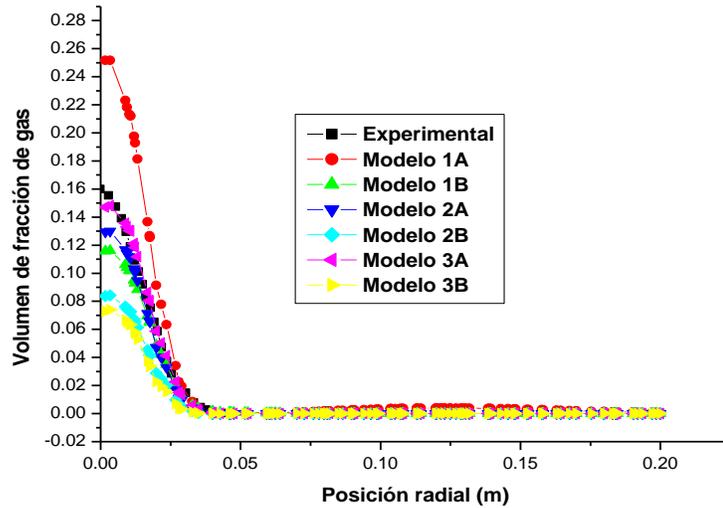


Figura 47. Volumen de fracción de gas distribuidas radialmente a una altura de 0.1 m
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

La fracción de gas presente en la columna de burbuja se acopla con velocidad de ascenso de la burbuja por las propiedades físicas de líquido, tal como la densidad y la tensión superficial, ya que tienen gran influencia en el aumento de la velocidad de la burbuja de gas en la columna de líquido, el gas se sostiene en la columna de burbujas. Los datos experimentales muestran que la retención total del gas se incrementa hasta con un aumento de la velocidad superficial del gas.

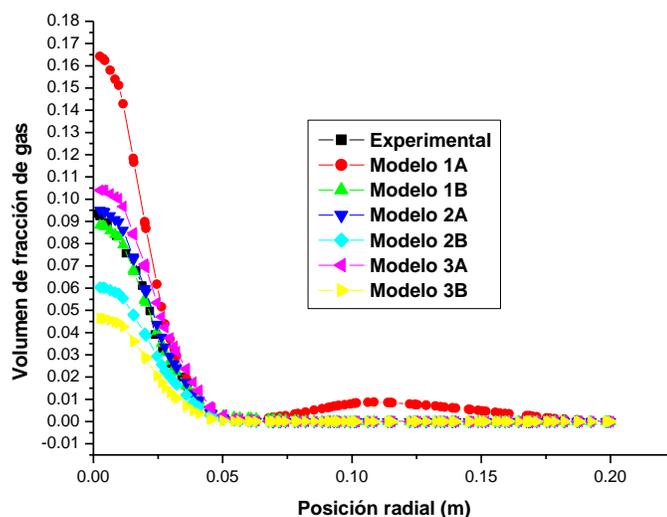


Figura 48. Volumen de fracción de gas distribuidas radialmente a una altura de 0.2 m
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano,2016)

Los efectos de la velocidad de flujo de gas, Q , en el ascenso de las burbujas dependen del modo operativo de la dispersión de gas, al aumentar el flujo de gas, la velocidad de ascenso de burbujas también aumenta.

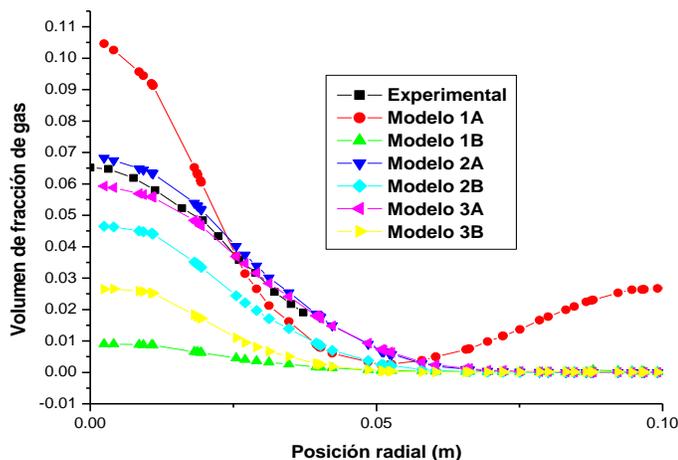


Figura 49. Volumen de fracción de gas distribuidas radialmente a una altura de 0.3 m
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

Como se puede apreciar en la figura 49 todos modelos de turbulencia utilizados, presentan un comportamiento similar a las pruebas experimentales para la fracción volumétrica de gas, con lo cual los resultados numéricos son sustancialmente satisfactorios, estos resultados coinciden con los estudios realizados por (Xia y Ahokainen, 1999). Las desviaciones estándar más bajas obtenidas de la comparación de los resultados numéricos respecto a los datos experimentales son proporcionadas por modelos 3A, 2B y 3B, según podemos apreciar en la figura 50, donde el porcentaje de error está por debajo del 5%.

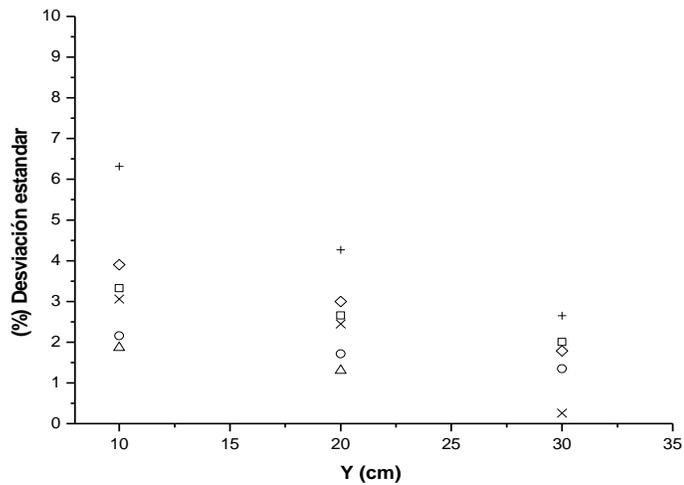


Figura 50. Desviación estándar de los perfiles del volumen de fracción de gas de las observaciones experimentales: $\kappa - \varepsilon$ (Modelo 1A, SWF: signo más; Modelo 1B, EWT: cruces), $\kappa - \varepsilon$ Realizable (Modelo 2A, SWF: cuadrados abiertos; Modelo 2B, EWT: círculos) y $\kappa - \varepsilon$ RNG (Modelo 3A, SWF: diamantes abiertos; Modelo 3B, EWT: triángulos abiertos).

La figura 51 muestra el comportamiento del líquido en la interacción con las burbujas de gas que ascienden dentro del reactor, el líquido se mueve con mayor velocidad en la región donde asciende el gas, pues es donde se lleva a cabo la transferencia de momento entre las fases, formado una pluma en la columna de líquido, como se mencionó anteriormente.

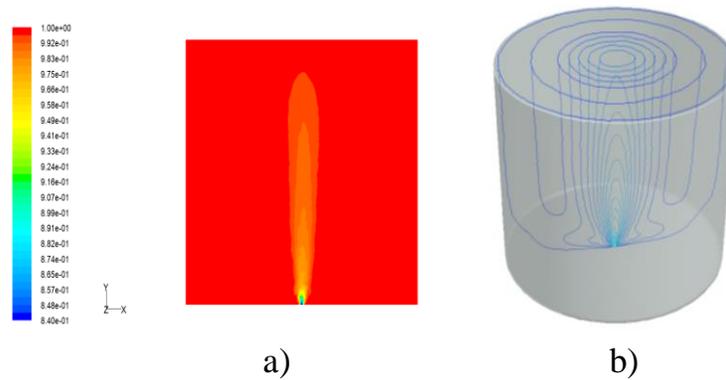


Figura 51. a) Volumen de fracción de líquido, b) Velocidad del líquido
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

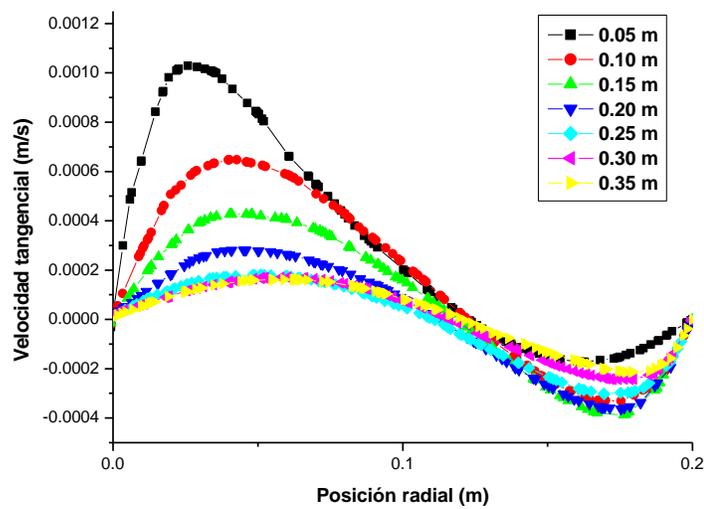


Figura 52. Velocidad tangencial de la mezcla gas-metal líquido para un caudal de $100 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ y diámetro de orificio de entrada 3mm
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano, 2016)

La variación de velocidad tangencial del líquido para diferentes alturas del reactor metalúrgico se observa en la figura 52, para un caudal de $100 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ y modelo de turbulencia 3A; se puede apreciar que la velocidad tangencial disminuye a medida que nos alejamos de la inyección del gas y nos acercamos a la superficie, se muestra

también un cambio razonable de la velocidad tangencial donde se incrementa entre 0 y 0.25 m de radio, para todas las alturas consideradas, este rango corresponde al desarrollo del patrón de burbuja discreta y al incremento de la frecuencia de las burbujas; luego entre 0.25 y 0.50 m de radio se estabiliza la frecuencia de ascenso de burbujas y después de 0.50 m de radio se reduce la frecuencia de ascenso de burbujas y por ende disminuye la velocidad tangencial, este estudio numérico concuerda con el estudio previos experimentales realizados por (Anagbo y Bricamonte, 1990).

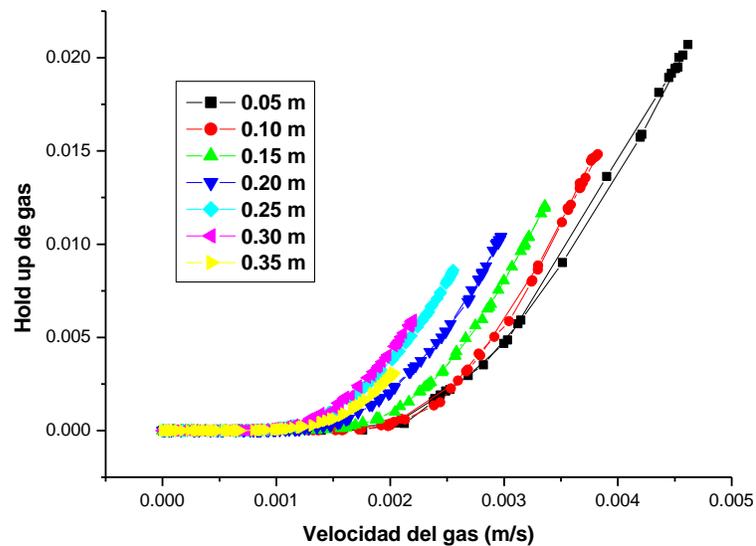


Figura 53. Holdup de gas para un caudal del $100 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ y diámetro de orificio de entrada 3mm
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano)

La figura 53 muestra el Holdup (acumulación de gas) con respecto a la velocidad, este es un parámetro crítico e importante para el diseño y escalamiento de reactores con inyección de gas e importante para mejorar las tasas de reacción, eliminar gradientes térmicos y remover partículas, proceso importante en el refinado secundario del acero (Mazumdar et al, 1995); la influencia de la velocidad superficial del gas y del tipo de inyección ya sea céntrica o excéntrica influye en la forma de agitación de la fase líquida y trae como consecuencia la transferencia de masa entre los fluidos; el

tamaño inicial de la burbuja depende del diámetro de inyección de gas, se puede apreciar que al aumentar la velocidad del gas el Holdup también aumenta, a medida que asciende el gas la energía va disminuyendo donde se aprecia que a diferentes alturas la velocidad del gas también va disminuyendo y con ella en Holdup, siendo máximo a los 0.05 m y mínimo a los 0.35 m de altura; las simulaciones realizadas mediante dinámica de fluidos computacional para el modelo de turbulencia 3A predice este comportamiento que concuerda muy bien con los resultados observados en investigaciones realizadas por (Moshtari,2009), (Yamashita et al, 1998), (Patel, 2010) mediante experimentos.

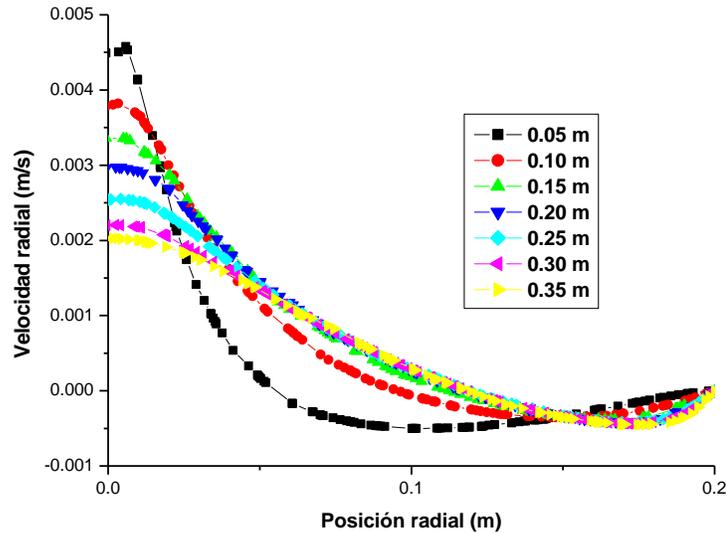


Figura 54. Velocidad radial del líquido para un caudal del $100 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ y diámetro de orificio de entrada 3mm

(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano,2015)

La figura 54 muestra los perfiles de velocidad radial del líquido para diferentes alturas del reactor y cerca del eje de la pluma; se puede apreciar que la velocidad radial va disminuyendo a medida que ascienden las burbujas de gas y se acerca a la periferia de la superficie, esto se debe a la pérdida de energía cinética debido al empuje y la interacción con la columna de acero líquido; este fenómeno está bien soportado en estudios experimentales realizados por (Davidson, 1990) quien modelo

flujo de gas en un sistema agitado de agua-aire, y (Xia, 1999) en un estudio numérico realizado.

- **Análisis para la energía cinética turbulenta**

La energía cinética turbulenta, k , está definida como la variación de las fluctuaciones en la velocidad y tiene las dimensiones de (m^2/s^2) . Las figuras 55-56 muestran gráficos comparativos de la energía cinética turbulenta calculada mediante DFC para un modelo de turbulencia 3A a diferentes alturas con un caudal de $200 \text{ Ncm}^3/s$.

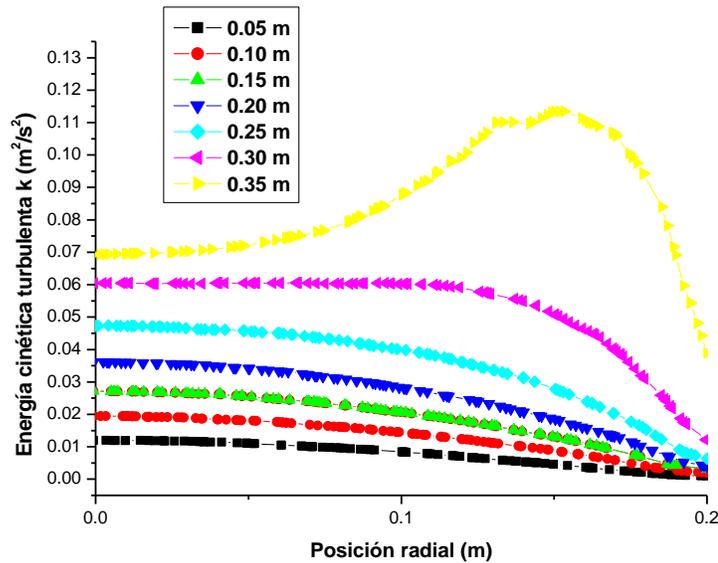


Figura 55. Energía cinética turbulenta para el modelo 3A a diferentes alturas del reactor para un caudal del $200 \text{ Ncm}^3/s$ y diámetro de orificio de entrada 3mm
(Fuente: Simulaciones numéricas de Héctor Zambrano,2016)

La figura 55 muestra el perfil de la energía cinética turbulenta en planos ubicados a diferentes alturas del reactor o cuchara metalúrgica, es claro que la intensidad turbulenta incrementa cerca de la superficie del baño al aumentar la tasa de flujo, disminuye ligeramente en la posición más baja de la pluma y es casi constante en la

zona adyacente a la pared, esto indica que la energía liberada por el gas y la interacción entre las fases (gas-líquido) llega a ser más intensa en las superficie del baño con una elevada tasa de flujo de gas, estos estudios numéricos coinciden con los estudios experimentales realizados por (Zhou y Bricamonte, 1994) y (Sahajwalla y Castillejos, 1990).

En la figura 56 muestra el contorno de la energía cinética turbulenta para el reactor completo, una sección transversal y la superficie libre; utilizando diferentes modelos de turbulencia. Se puede apreciar como incrementa la energía cinética turbulenta en la superficie libre del baño líquido promoviendo su deformación y la apertura del ojo de recirculación del baño líquido; en la superficie libre es donde coexisten el metal y la escoria; es importante destacar que la interacción entre las fases acero líquido y nitrógeno en esta zona es fundamental para comprender los fenómenos como la emulsificación de la escoria en el metal líquido y las reacciones químicas que ocurren; estudios experimentales han mostrado que la deformación de la superficie libre no modifica significativamente los resultados para la velocidad y la fracción de gas obtenidos utilizando una superficie libre plana, pero puede ser relevante cuando se incluya la escoria y se analice la interacción metal-escoria (Méndez, 2001).

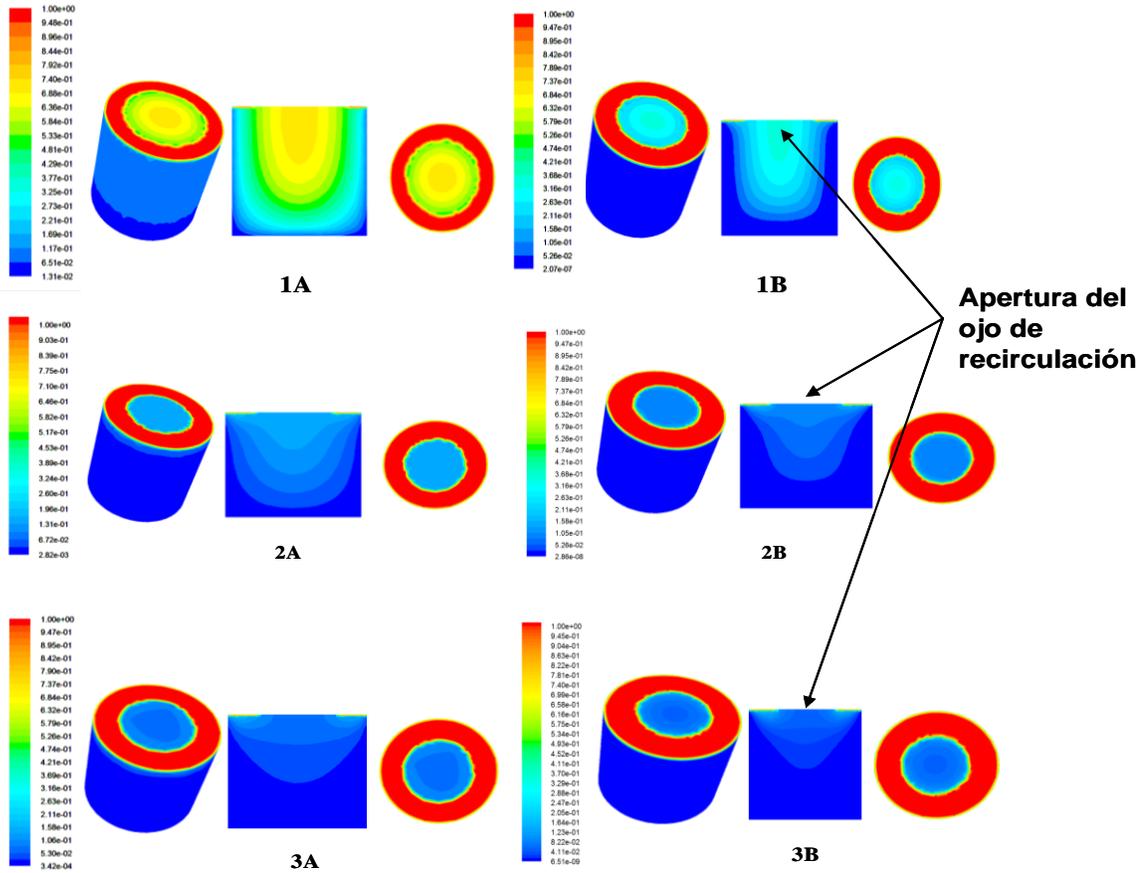


Figura 56. Energía cinética turbulenta para los diferentes modelos numéricos de turbulencia estudiados

4.2.2. REACTOR CON INYECCIÓN DE GAS EXCÉNTRICA

La mayoría de los cucharones de gas industriales son agitados por inyección de gas con tapones porosos situado fuera del centro (excéntricos), ya que debido a esta configuración produce un mejor efecto de agitación que cuando el tapón poroso se coloca en el centro; Por lo tanto, se simula la inyección de nitrógeno en un recipiente con acero líquido (Wood's metal) cuando la posición de entrada de gas está ubicada a

la mitad del radio para tres caudales de gas constante y diferentes (es decir, $Q = 100, 200$ y $500 \text{ Ncm}^3\text{s}^{-1}$), con el fin de investigar los efectos sobre el campo de flujo. En el presente estudio, las burbujas se supone que son esféricas y liberadas en la salida de la boquilla de entrada con una frecuencia constante y una distribución de tamaño uniforme.

Para el caudal de $Q = 200 \text{ Ncm}^3\text{s}^{-1}$, la figura 57b, muestra un patrón de flujo estable. El eje central de la pluma se evidencia que es casi vertical líneas de trayectoria rojas, mientras que las líneas de trayectoria amarillas coinciden con sus bordes laterales; en la parte superior de la cuchara o reactor metalúrgico, justo por encima de la región de columna que forma la pluma, no hay recirculación y las líneas de flujo llegan a la superficie plana del acero líquido (Wood's metal) casi perpendicularmente. Fuerte recirculación en la fase líquida se observa lejos de la pared del reactor cercano a la pluma, que ocupa la mayor parte del volumen del reactor. En la parte superiores de la región de recirculación, el acero líquido fluye hacia las paredes con velocidades que son casi la mitad de las velocidades máximas en el centro de la pluma (Zambrano y Bencomo, 2015). En la proximidad de la pared, la curva trayectorias y los flujos disminuyen progresivamente la velocidad. Una flexión adicional de las líneas de corriente se produce cuando el flujo llega al fondo del reactor, convergiendo hacia las partes más bajas de la región de la pluma; un pequeño volumen muerto se forma debajo de la región de recirculación en la parte inferior de la cuchara como se indica en la figura 57.

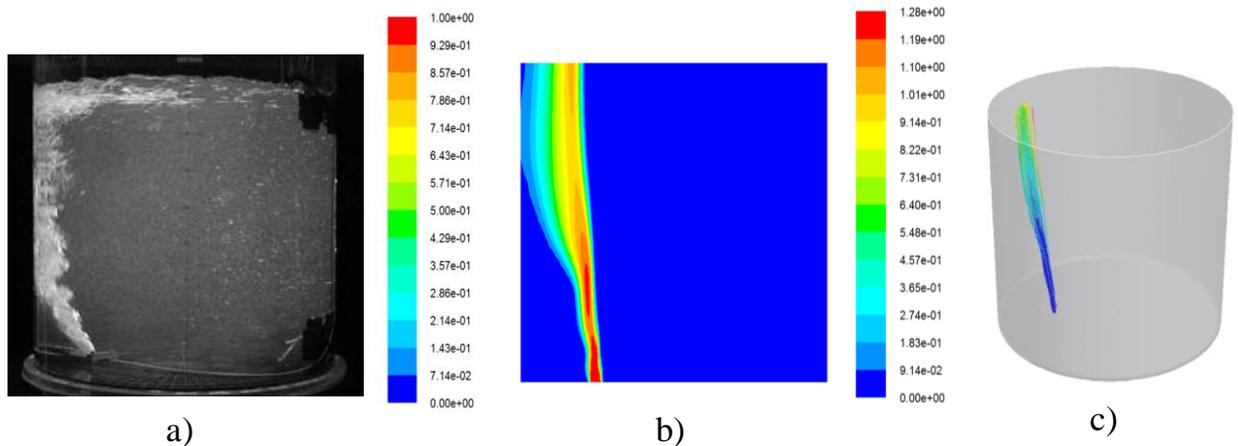


Figura 57. a) Modelo físico de agua (Anagbo y Brimacombe, 1990), b) Volumen de fracción de gas (Simulaciones Héctor Zambrano, 2016), c) Líneas de trayectoria del gas a un caudal de $200\text{Ncm}^3/\text{s}$ para inyección de gas excéntrica (Simulaciones Héctor Zambrano, 2016)

Un aspecto importante de los presentes cálculos, es la formación y apertura de un ojo en estrecho contacto con la pared, como se muestra en la Fig. 57 a, b y c justo detrás de la columna de gas, donde la línea de corriente de color azul sigue una trayectoria en forma de espiral en sentido horario. Esta característica interesante se ha observado en experimentos de aire-agua con dos tapones porosos excéntricos (Méndez CG, Nigro N., et al, 2002). Las formas de apertura de los ojos a una determinada altura de la columna en la pluma está más cerca de la pared (su parte superior) debido a que parte de la energía cinética que se transfiere para el acero líquido se pierde por la fricción viscosa y por lo que las velocidades de flujo implicadas se acerca a cero.

El volumen fracción de gas se muestra en la figura 58b, donde la parte superior de la pluma se va acercando sistemáticamente hacia la pared, Este comportamiento fue observado en los experimentos realizados para un modelo de inyección de aire excéntrico en un recipiente de sección cuadrada contenido de agua, utilizando bajos y moderados caudales para flujos de dos fases y con simulaciones en estado estable (Domgin, 1999).

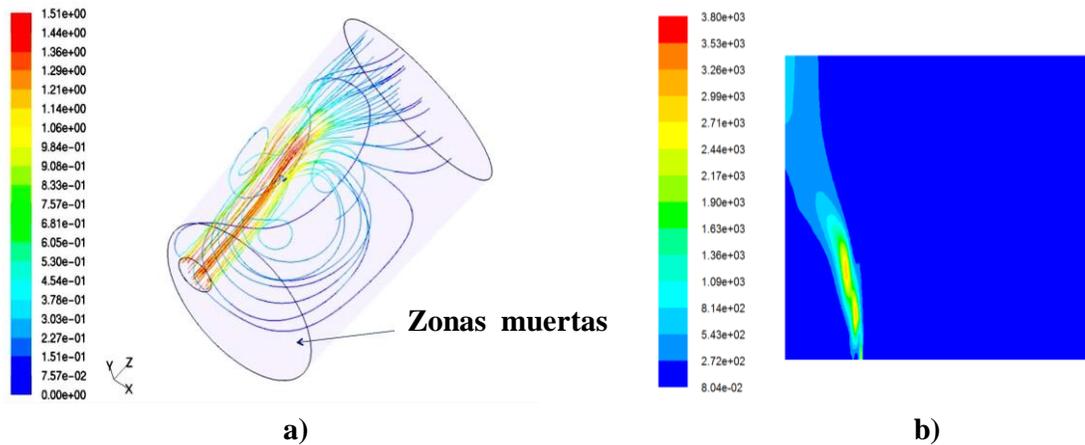


Figura 58. a) Modelo de pluma (Zambrano H., Bencomo A., et al, 2015), b) Presión dinámica con un caudal de $200 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ para inyección de gas excéntrica

La figura 58 muestra el comportamiento de la pluma en la inyección excéntrica de gas, podemos apreciar que al inyectar el gas nitrógeno, la pluma al tener contacto con la pared el líquido pierde cantidad de movimiento o de la intensidad de agitación, por perder velocidad la masa del líquido debido a la fricción con la pared dentro del reactor, este fenómeno es importante a la hora de determinar los tiempos y eficiencia de mezclado, ya que si la inyección se encuentra más cercana a la pared del reactor los tiempos de mezclado van a ser mayores y la eficiencia de mezclado disminuye.

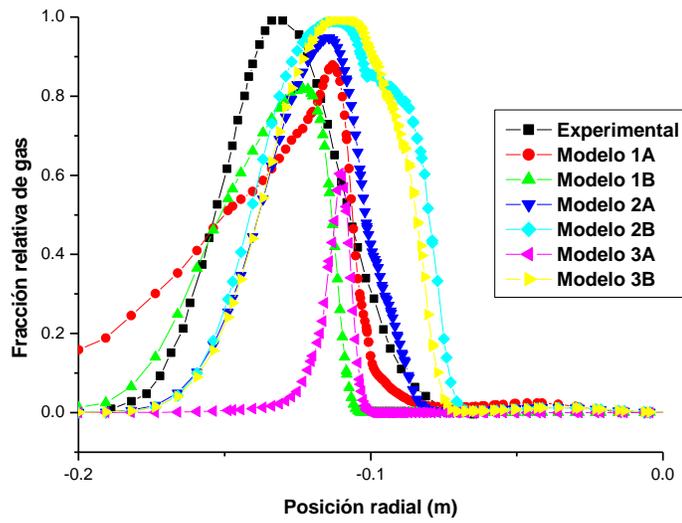


Figura 59. Distribución de la fracción de gas para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992b) a 0.20 m de altura y caudal de $200\text{Ncm}^3/\text{s}$ para inyección de gas excéntrica

La figura 59 muestra las curvas de fracción de gas nitrógeno a una altura de 0.20 m sobre la boquilla de entrada ubicada a la mitad del radio (excéntrica), las curvas numéricas fueron obtenidas mediante simulaciones con dinámica de fluidos computacional para cada modelo de turbulencia estudiado y comparadas con los datos experimental presentado por (Xie et al, 1999); podemos observar que las curvas presentan el comportamiento de una función Gaussiana, similar al estudio experimental, lo cual nos da un resultado sustancialmente satisfactorio, las curvas presentan un valor máximo desfasado de la zona de inyección que depende de la tasa de inyección, el gas obliga a redireccionar líquido, lo cual permite la apertura del ojo de recirculación y favorece al movimiento caótico del fluido por la acción de la turbulencia que se genera.

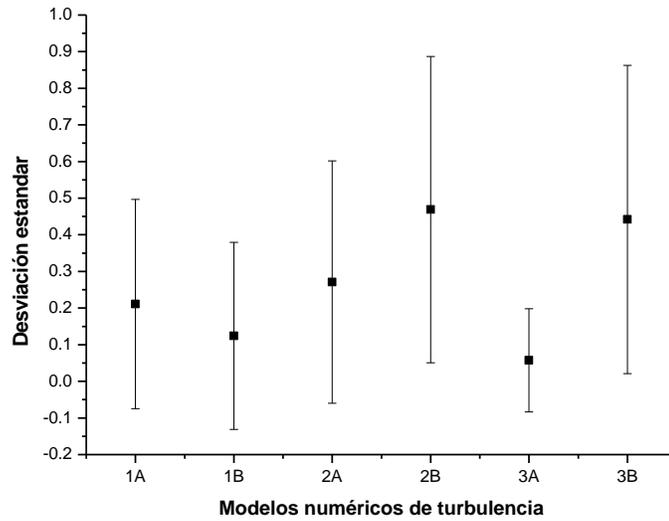


Figura 60. Desviación estándar de la fracción de gas para diferentes modelos de turbulencia y comparados con la data experimental de (Xie et al, 1992b) a 0.20 m de altura y caudal de 200Ncm³/s para inyección de gas excéntrica

La figura 60 muestra las desviaciones estándar de los perfiles de fracción de gas para inyección excéntrica, estos perfiles fueron comparados con los datos experimentales presentados por (Xie et al, 1992a,b) donde es importante destacar que todos modelos de turbulencia utilizados concuerdan satisfactoriamente con el comportamiento experimental, con lo cual es satisfactorio en la presente investigación. El modelo de turbulencia que presenta el porcentaje de error más bajo es el modelo 3A, que corresponde al modelo $k - \varepsilon$ RNG con función estándar de pared.

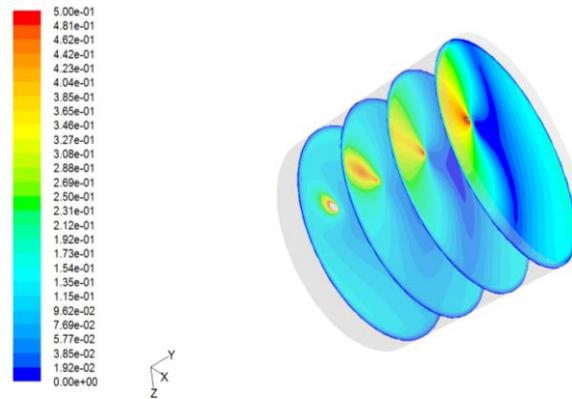


Figura 61. Contornos de la velocidad del gas en cuatro secciones transversales diferentes de la pluma a un caudal de $500 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ para inyección excéntrica

La figura 61 muestra el contorno de la velocidad del gas a diferentes planos de corte de la pluma a través de un eje, 0.20, 0.25, 0.30 y 0.35 m de altura respectivamente, en los planos se observa que a medida que asciende el gas la velocidad de la burbuja es casi constante en la mayoría de las partes internas de la columna de la pluma. Este resultado concuerda con valores medidos experimentalmente.

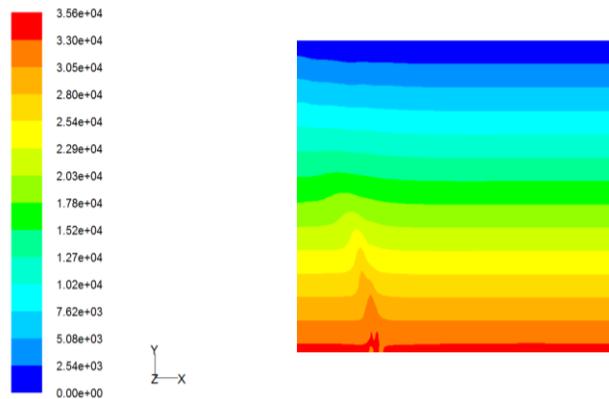


Figura 62. Contornos de la presión total a un caudal de $500 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ para inyección excéntrica utilizando el modelo de turbulencia 1B

(Fuente: Simulaciones Héctor Zambrano, 2016)

La figura 62, muestra el contorno de presión total que representa la presión estática más la dinámica dentro del reactor-olla, allí podemos observar que la más alta presión total se localiza en el fondo del reactor donde el gas debido al empuje de la columna de líquido genera la mayor energía, luego la presión va disminuyendo en el ascenso de las burbujas debido a la pérdida de energía cinética debido a la resistencia del fluido y la dispersión de las burbujas del gas.

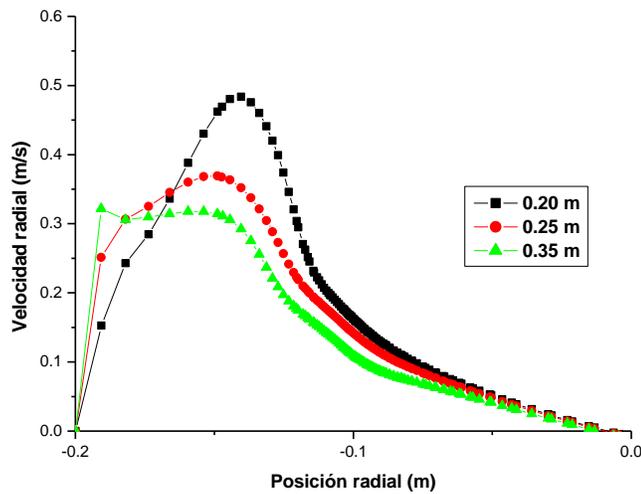


Figura 63. Velocidad radial del líquido a un caudal de $500 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ para inyección excéntrica

La figura 63 muestra la velocidad radial del líquido para las alturas 0.20, 0.25 y 0.35 m respectivamente, se puede apreciar que la velocidad radial va disminuyendo a medida que ascienden las burbujas de gas y se acerca a la superficie libre, esto se debe a la pérdida de energía cinética por la disminución de la velocidad, debido al empuje y resistencia de la columna de acero líquido (wood's Metal) y a la interacción entre las fases.

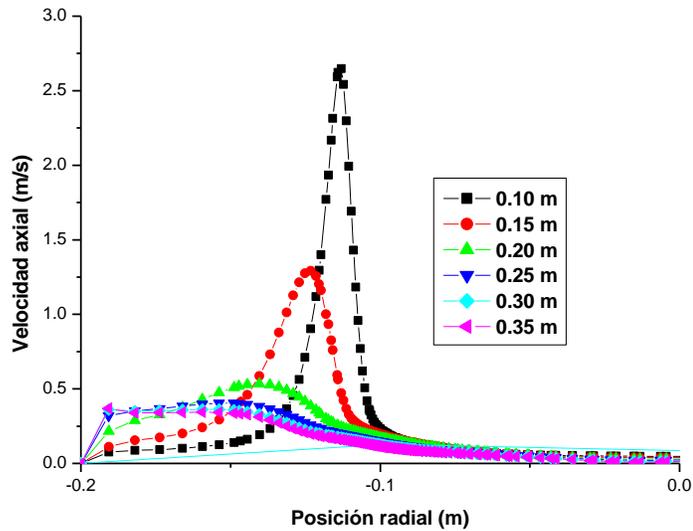


Figura 64. Velocidad axial del líquido a un caudal de $500 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ para inyección excéntrica

Se puede apreciar en la figura 64 como el líquido se mueve a mayor velocidad donde está ubicada la inyección del gas, también se puede apreciar que existe un ojo de recirculación en el sentido de las manecillas del reloj, donde la velocidad del líquido disminuye a un valor mínimo cerca de la pared y de la entrada de inyección de gas. Debido a la alta velocidad se presume que pueda ocasionar rozamiento entre el líquido y la pared y en consecuencia la pérdida de cantidad de movimiento del líquido dentro de cucharón metalúrgico.

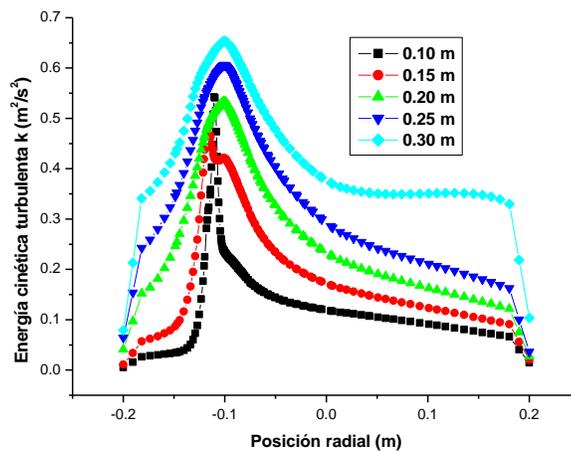


Figura 65. Energía cinética turbulenta (m^2/s^2) un caudal de $500 \text{ Ncm}^3/\text{s}$ para inyección excéntrica

La figura 65 muestra las curvas para la energía cinética turbulenta (m^2/s^2) en el caso de la inyección excéntrica, se puede apreciar que esta energía se concentra sobre la pluma de gas y es mayor cerca de la superficie libre y a lo largo del plano de inyección, pero su valor es más bajo cerca del fondo del reactor; la energía cinética turbulenta se encuentra mejor distribuida en inyección excéntrica que en la inyección céntrica, esto trae como consecuencia que en la inyección excéntrica se disminuye las zonas muertas y favorece el procesos de mezclado y agitación, así como disminuye los tiempos de mezclado (Lauder y Spalding, 1974).

CAPÍTULO V

5.1 CONCLUSIONES

El estudio realizado mediante el uso de la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) pudo reproducir con éxito el comportamiento de la inyección de gas nitrógeno a un recipiente que contiene acero líquido (Wood's metal) y comparado con datos experimentales de la literatura abierta, utilizando para el análisis diferentes modelos de turbulencia; con lo cual se puede concluir lo siguiente:

- Se crearon dos geometrías (3D) del reactor metalúrgico (olla) una con entrada de gas céntrica y otra con entrada de gas excéntrica, donde las dimensiones de los reactores fueron tomadas por estudios experimentales de (Xie. et al, 1992a,b). Así como el mallado y las condiciones de borde que corresponden al preprocesamiento, para ello se utilizó el software GAMBIT 2.0 (Geometry And Mesh Building Intelligent Toolkit). Se le realizaron diferentes mallados a los modelos geométrico del reactor, (muy amplio, amplio, medio, fino y muy fino), con la finalidad de afinar y minimizar los errores en los cálculos iterativos, realizando el estudio de la independencia de malla y del índice de convergencia de malla (GCI) por sus siglas en inglés.
- Se emplearon tres diferentes modelos de turbulencia para modelar el comportamiento de la inyección de gas dentro del reactor, a saber, k-épsilon Standard, k-épsilon RNG, y k-épsilon Realizable con diferentes tratamientos especiales en la paredes como lo son Standard Wall Functions (SWF) y Enhanced Wall Treatment (EWT). El modelo que mas se aproxima al calculo experimental para los dos reactores estudiados es el modelo k-épsilon RNG con tratamiento estándar de la pared (Standard Wall Treatment) ya que presenta el menor el error relativo porcentual como parámetro estadístico de comparación.

- Los resultados de la simulación realizada con DFC en reactores agitados con gas para inyección céntrica e inyección excéntrica en estado estacionario, son bastante aceptables y satisfactorios, debido a que el comportamiento de los modelos de turbulencia utilizados presenta resultados muy aproximados a los valores experimentales y su utilización va a depender de lo que quiere buscar en el estudio, por lo tanto, siempre es necesario realizar diferentes investigaciones en este sentido.
- En los sistemas de inyección de gas, es el acoplamiento entre las fases gaseosa y líquida el responsable de crear movimiento en la mayor parte del líquido. Las burbujas suben debido a la flotabilidad y a la energía cinética en la salida de la boquilla donde la fase gaseosa se va dispersando a medida que va ascendiendo; Este ascenso de las burbujas de gas forma lo que se llama “pluma” en el medio de reactor.
- En el reactor con inyección céntrica de gas (nitrógeno), la velocidad en la entrada es simétrica desde el tope al fondo de la pared y tiene un comportamiento semejante al estudio experimental, inmediatamente después de la entrada, los perfiles de velocidad varían significativamente; todas las curvas presentan un comportamiento Gaussiano.
- A medida que las fuerzas inerciales se debilitan a una cierta altura del cucharón o reactor metalúrgico, el gas comienza a desplazarse alrededor del eje en dirección radial y disminuye a medida que se acerca a la superficie, es por ello que debido a la complejidad del fenómeno físico, los modelos de turbulencia se alejan un 10 % del comportamiento experimental en el mejor de los casos.
- En la inyección céntrica de gas la intensidad de agitación del líquido y la turbulencia se incrementan al aumentar el flujo de gas, lo cual favorece y mejora el mezclado del acero en el cucharón metalúrgico.
- Las fuerzas gravitacionales son las que predominan en el ascenso de las burbujas, y no las fuerzas inerciales del gas en la entrada, esto trae como consecuencia que el diámetro de entrada de gas ya sea por una inyección céntrica o excéntrica, no tiene influencia significativa sobre los patrones de flujo.

- La velocidad del gas va disminuyendo a medida que asciende en el reactor y el perfil de velocidad cambia manteniéndose el valor máximo de la velocidad en el centro.
- Todos modelos de turbulencia utilizados para inyección de gas céntrica, concuerdan con el comportamiento de la velocidad axial respecto al resultado experimental, consideramos en el estudio numérico mediante DFC para inyección de gas céntrica que el modelo 3A presenta el menor error y sus resultados son satisfactorios.
- La fracción de gas presente en la columna de burbuja, se acopla con velocidad de ascenso de la burbuja por las propiedades físicas de líquido, tal como la densidad y la tensión superficial, ya que tienen gran influencia en el aumento de la velocidad de la burbuja de gas en la columna de líquido,
- La interacción con las burbujas de gas que ascienden dentro del reactor, el líquido se mueve con mayor velocidad en la región donde asciende el gas, pues es donde se lleva a cabo la transferencia de momentum entre las fases, formando una pluma en la columna de líquido.
- La velocidad tangencial del líquido disminuye a medida que nos alejamos de la inyección del gas y nos acercamos a la superficie del reactor.
- El Holdup (acumulación de gas) es un parámetro crítico e importante para el diseño y escalamiento de reactores con inyección de gas e importante para mejorar las tasas de reacción, eliminar gradientes térmicos y remover partículas, proceso importante en el refinado secundario del acero.
- La influencia de la velocidad superficial del gas y del tipo de inyección ya sea céntrica o excéntrica influye en la forma de agitación de la fase líquida y como consecuencia la transferencia de masa entre los fluidos.
- La energía cinética turbulenta se concentra sobre la pluma de gas y es mayor cerca de la superficie libre y a lo largo del plano de inyección, pero su valor es más bajo cerca del fondo del reactor; la energía cinética turbulenta se encuentra mejor distribuida en inyección excéntrica que en la inyección céntrica, esto trae como consecuencia que en la inyección excéntrica se disminuyen las zonas muertas

y favorece el proceso de mezclado y agitación, así como disminuye los tiempos de mezclado.

- La intensidad de la energía cinética turbulenta se incrementa cerca de la superficie del baño al aumentar la tasa de flujo, disminuye ligeramente en la posición más baja de la pluma y es casi constante en la zona adyacente a la pared, esto indica que la energía liberada por el gas y la interacción entre las fases (gas-líquido) llega a ser más intensa en la superficie del baño con una elevada tasa de flujo de gas promoviendo su deformación y la apertura del ojo de recirculación..
- La interacción entre las fases acero líquido y nitrógeno en la superficie libre es fundamental para comprender los fenómenos como la emulsificación de la escoria en el metal líquido y las reacciones químicas que ocurren.
- La mayoría de los cucharones de gas industriales son agitados por inyección de gas con tapones porosos situado fuera del centro (excéntricos), ya que debido a esta configuración produce un mejor efecto de agitación que cuando el tapón poroso se coloca en el centro.
- En la inyección excéntrica de gas, podemos apreciar que al inyectar el gas nitrógeno, la pluma al tener contacto con la pared, el líquido pierde cantidad de movimiento o de la intensidad de agitación, por perder velocidad la masa del líquido debido a la fricción con la pared dentro del reactor, este fenómeno es importante a la hora de determinar los tiempos y eficiencia de mezclado, ya que si la inyección se encuentra más cercana a la pared del reactor los tiempos de mezclado van a ser mayores y la eficiencia de mezclado disminuye.
- Las curvas de fracción de gas (nitrógeno) presentan el comportamiento de una función Gaussiana, similar al estudio experimental, lo cual nos da un resultado sustancialmente satisfactorio; las curvas presentan un valor máximo desfasado de la zona de inyección que depende de la tasa de inyección, el gas obliga a redireccionar líquido, lo cual permite la apertura del ojo de recirculación y favorece al movimiento caótico del fluido por la acción de la turbulencia que se genera.

- La más alta presión total se localiza en el fondo del reactor donde el gas debido al empuje de la columna de líquido genera la mayor energía, luego la presión va disminuyendo en el ascenso de las burbujas debido a la pérdida de energía cinética debido a la resistencia del fluido y la dispersión de las burbujas del gas.
- La simulación numérica proporciona una poderosa herramienta para el estudio de fenómenos físicos de gran interés para el desarrollo de las mejores prácticas en el refinado del acero obteniendo resultados satisfactorios comparados con experimentos y seleccionando un modelo de turbulencia que nos permite el diseño óptimo de estos equipos disminuyendo los costos asociados y el tiempo.

5.2 RECOMENDACIONES

Para futuros trabajos de investigación es recomendable seguir estudiando y analizando otros modelos de turbulencia, debido a que ningún de estos son universalmente aceptado como superior en todas las clases de problemas, sin embargo, en el presente trabajo los resultados fueron satisfactorios de acuerdo a los modelos de turbulencia estudiados y al enfoque planteado; analizar otros modelos de turbulencia permitirá simular, visualizar y entender aun mas la compleja interacción entre los diferentes procesos físicos involucrados en el refinado secundario del acero y obtener mayor información en referencia a la interacción del gas y el acero en la pluma y en el ojo de recirculación que se genera en la superficie; también es recomendable realizar simulaciones considerando el enfoque Euler-Lagrange y hacer el estudio de las burbujas de gas en su interacción con el acero, así como considerar las tres fases, Gas, líquido y escoria. El presente trabajo puede ser considerado como un punto de partida donde se presenta una metodología numérica para el análisis de reactores agitados con gas utilizando diferentes modelos de turbulencia para entender su influencia en el comportamiento multifásico gas-acero líquido presentes en el horno-olla para el refinado secundario del acero.

REFERENCIAS

Alarcon, G. (1998). Flujo de dos fases. Facultad de Ingeniería, Escuela de Mecánica, ULA, Venezuela, 475.

Anagbo P. E. y Brimacombe J (1990). K. Plume Characteristic and Liquid Circulation in Gas Injection through a porous plug. Metallurgical Transactions, Volume 21B.

Aoki, J. ; Thomas, BG. ; Peter, J. ; Peaslee, KD. (2004). Experimental and theoretical investigation of mixing in a bottom gas-stirred ladle. Proceedings of the Association for Iron & Steel Technology (AISTech 2004), Vol. I, pp. 1045–1056.

ASTM V&V 20-2009 “Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer

Barnea, D. (1986). Transitions from annular flow and from dispersed bubble flow-unified models for the whole range of pipe inclinations. International Journal of Multiphase flow, 12(5), 733-744.

Barnea, D. (1987). A unified model for predicting flow pattern transitions for the whole range of pipe inclinations. International Journal of Multiphase flow, 13(1), 1-12.

Balaji, D.; Mazumdar, D. (1991). Numerical computation of flow phenomena in gas-stirred ladle systems. Steel Research, 62(1), 16–23.

Beggs, H. D. y Brill, J. P. (1973). A Study of Two-Phase Flow in Inclined Pipes. JPT (607); Trans. AIME; Artificial Lift, Reprint Series, SPE, Richardson, Texas, 12, 73-83.

Bird, RB. ; Stewart, WE. y Lightfoot, EN. (1960). Transport phenomena, John Wiley & Sons, New York.

Cloete, S. W. (2008). A mathematical modelling Study of Fluid Flow and Mixing in Gas Stirred Ladles, Tesis de Maestría.

Cloete, SWP. ; Eksteen, JJ. y Bradshaw SM. (2009). A mathematical modelling study of fluid flow and mixing in full-scale gas-stirred ladles. Progress in Computational Fluid Dynamics, 9(6/7), 345–356.

Crowe, C. ; Sommerfeld, M. y Tsuji Y. (1998). Multiphase flows with droplets and particles. CRC Press, Boca Raton.

De Felice, V. ; Daoud, LA. ; Dussoubs, B. ; Jardy, A. y Bellot J-P. (2012), Numerical modelling of inclusion behaviour in a gas-stirred ladle. *ISIJ International*, 52(7), 1273–1280.

Drew, DA. (1983). Mathematical modelling of two-phase flow. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 15, 261–291.

Drew, D. A. y Lahey RT (1987) The virtual mass and lift force on a sphere in rotating and straining inviscid flow. *International Journal of Multiphase Flow* 13(1): 113–121

Drew D. A. y Passman, S. L.. (1999). *Theory of Multicomponent fluid*. Springer-Verlag, New York, NY.

Domgin JF, Gardin P, Brunet M (1999) Experimental and numerical investigation of gas stirred ladles. *Proceedings of the Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, CSIRO, Melbourne, Australia, 6-8 December, 181–186.

El-Kaddah, N., Szekely, J., y Carlsson, G. (1984). Fluid flow and mass transfer in four-ton inductively stirred melt, *Met. Trans.* 15B, 63.

Fernández, J. (2012). *Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos* (1ª ed.). Barcelona, España: Reverté.

Fluent, Inc., *Fluent 6.3, Guía de usuario*, 2006.

Garcia, D. ; Alzate, H. y Quintana, G. (2009). Simulación del patrón de flujo en fase simple para diferente, Colombia, diseño de separadores. *Revista Investigaciones Aplicadas*, No 6, 11-20.

Gonzales, D. (2011). Validación de la simulación matemática de la agitación de acero mediante la inyección de un gas a través de un tapón poroso. Tesis pregrado. Universidad Michoacana de san Nicolás de Hidalgo

Goldschmit, MB. ; Coppola. y Owen, AH. (2001). Numerical modelling of gas stirred ladles. *Ironmaking & Steelmaking*, 28(4), 337–341.

Geng, D. y Lei, H. (2010). Optimization of mixing time in a ladle with dual plugs. *International Journals of Minerals, Metallurgy and Materials*, 17(6), 709-714.

Grevet, JH. ; Szekely, J. y El-Kaddah, N. (1982). An experimental and theoretical study of gas bubble driven circulation systems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 25(4), 487–497.

Ilegbusi, O. J. y Szekely. (1990). The modeling o f gas-bubble driven circulations Systems. *ISIJ International*, 30(9) 731-739.

Ismail, B. ; Celik, (2008). Procedure for Estimation and Reporting of Discretization Error in CFD Applications. *Journal of Fluids Engineering, ASME*, (130).

Jauhiainen, A.,Jonsson L., y Sheng D. (2001). Modeling of alloy mixing into steel, *Scandinavian Journal of Metallurgy*,20, pp 242-253.

Johansen, S. , et al. (1988). Fluid Dynamics in Bubble Stirred Ladles: Part I . Experiments. *Metallurgical and Materials Transctions*, 19B, 745-754.

Johansen, S. y Boysan, F. (1988). Fluid Dynamics in Bubble Stirred Ladles: Part II . Mathematical Modelling. *Metallurgical and Materials Transctions*, 19B, 755-764.

Kitscha, J. y Kocamustafaogullari, G. (1989). Breakup criteria for fluid particles, *Int. J. Multiphase Flow*, 15, 573-588.

Launder B. y Spalding D. (1972).. *Lectures in Mathematical Models of Turbulence* , Academic Press. London

Launder, B.E. y Spalding, D.B. (1974). *The Numerical Computation of Turbulent Flows. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol (3), 269-289

Liu, H. y Qi, Z. (2011). Numerical simulation of fluid flow and interfacial behavior in three-phase argon-stirred ladles with one plug and dual plugs. *Steel Research Journal*, 82, No 4.

Lovanov, S., Ovsyannikov, V. y Sarychev, A. (2005). Bottom blowing tuyeyes for 175 ton steel ladles in service at an open heart furnaceshop. *Refractories and industrial ceramics*, January.

Mazumdar D, Guthrie RIL (1985). Hydrodynamic Modeling of some Gas Injection Procedures in Ladle Metallurgy Operations. *Metallurgical Transactions*, Volume 16B.

Mazumdar, D. y Guthrie RIL. (1995). The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems. *ISIJ International*, 35(1), 1–20.

Maurina, G. Z. ; Rosa, L. M. ; Beal L. L. ; Baldasso, C. y Giménez J. R. (2014). Effect of internal recirculation velocity in an anaerobic sequencing batch reactor (asbr). *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 31(4), 895 – 903.

Manninen, M.; Taivassalo, V, y Kallio, S. (1996). On the mixture model for multiphase flow. VTT Publications 288, Technical Research Centre of Finland.

Mendonca, V. (2012). Estudio del flujo líquido-sólido y el fenómeno de erosión en boquillas, Proyecto de grado,USB.

Méndez, CG. ; Nigro, N. ; Cardona, A. ; Begnis, SS y Chiapparoli, WP. (2002). Physical and numerical modelling of a gas stirred ladle. In: Idelshon SR, Sonzogni VE, Cardona A (eds) *Mecánica Computacional*, Vol. XXI, Santa Fe-Paraná, Argentina, 2646–2654.

Mori, K. ; Sano, M. y Sato. (1979). Size of bubbles formed at single nozzle immersed in molten iron. *ISIJ*, 553-561.

Oeters, F. (1994). *Metallurgy of steelmaking*. Woodhead Publishing, Cambridge, England.

Ogawa, K.,y Onoue T. (1989). Mixing and mass transfer in ladle refining process. *ISIJ International*,(29),2,148-153.

Olsen, JE. ; Cloete S. (2009). Coupled DPM and VOF model for analyses of gas stirred ladles at higher gas rates. *Proceedings of the Seventh International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, CSIRO, Melbourne, Australia, 9-11 December, 2009, 1–6.

Olsen, J. y Popescu, M. (2012). On the effect of lift forces in bubble plumes Ninth International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries CSIRO, Melbourne, Australia.

Pan, S-M. ; Ho, Y-H. y Hwang W-S. (1997). Three-dimensional fluid flow model of gas-stirred ladles. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 6(3), 311–318.

Pan, S., Chiang, J., y Hwang, W. (1999). Simulation of large bubble/molten steel interaction for gas-injected ladle, *Journal of Materials Engineering and Performance*, 8 (2), 236.

Patankar, Suhas. (1980). *Numerical heat transfer and fluid flow*. Estados Unidos : Taylor & Francis, 197 p, (Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Sciences).

Peters, A. (1987). *Producción siderúrgica (1ra ed.)*, Limusa, 44-251.

- Pope, SB. (2000). Turbulent flows. Cambridge University Press, Cambridge
- Ranade, V. (2001). Computational Flow Modeling for Chemical reactor engineering. San Diego, California, Acedemics Press.
- Ramírez-Argaez, MA. (2007). Numerical simulation of fluid flow and mixing in gas-stirred ladles. *Materials and Manufacturing Processes*, 23(1), 59–68.
- Roache, P. J. (1994). “Perspective: A method for uniform reporting of grid refinement studies.” *Journal of Fluids Engineering*, 116(3),405-41
- Richardson, L. F. and Gaunt, J. A. (1927). “The deferred approach to the limit. Part I. Single lattice. Part II. Interpenetrating lattices.” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 226,299-361.
- Sahai, Y. y Guthrie, RIL. (1982). Hydrodynamics of gas stirred melts: Part I. Gas/liquid coupling. *Metallurgical Transactions B*, 13B, 193–202.
- Sheng YY. y Irons, GA. (1992). Measurement and modeling of turbulence in the gas/liquid two phase zone during gas injection. *Metallurgical Transactions B*, 24B, 695–705.
- Sheng YY. y Irons, GA. (1995). The Impact of Bubble Dynamics on the Flow in Plumes of Ladle Water Models. *Metallurgical Transactions B*, 26B, 625–635.
- Schwarz, MP. y Turner WJ. (1988). Applicability of the standard k-e turbulence model to gasstirred baths. *Applied Mathematical Modelling*, 12(3), 273–279.
- Schlichting. (1979). *Teoría de la capa Límite*, Madrid.
- Shih T.-H., Liou W.W., Shabbir A., YangZ. y Zhu, J. (1995). A new k-e eddy viscosity model for high reynolds number turbulent flows. *Computers & Fluids*, 24(3) 227-238.
- Szekely, J; Carlson, G. y Helle L. (1988) *Ladle Metallurgy*, Springer-Verlag, Neyork Berlin, Heidelberg, 1-26.
- Taitel, Y.; Barnea, D. y Dukler, A. E. (1980). Modelling flow pattern transitions for steady upward gas-liquid flow in vertical tubes. *The AIChE Journal*, 26(3), 345-354.
- Taitel, Y. ; Shoham, O. y Brill, J. P. (1989). Simplified transient solution and simulation of two phase flow in pipelines. *Chemical Engineering Science*, 44(6), 1353-1359.

Taniguchi, S. ; Kawaguchi, S. y Kikuchi, A. (2002). Fluid flow and gas-liquid mass transfer in gas injected vessels. *Applied Mathematical Modelling*, 26(2), 249–262.

Turkdogan, E. (1996). Rate phenomena: estimation of bubble size for uniformly dispersed bubbles in the steel bath. *Fundamentals of steelmaking: The Institute of Materials*, 74-81.

Versteeg, HK and Malalasekera, W (2007) *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*, Second Edition, Pearson Education, ISBN: 978-0-13-127498-3.

Wang, L. ; Lee, H. y Hayes, P. (1996). A new approach to molten steel refining using fine gas bubbles. *ISIJ International*, 36 (1), 17-24.

White, F. (2003). *Mecánica de fluidos*. (5a ed.). Madrid, España: Mc Graw Hill.

Woo, JS. ; Szekely, J. ; Castillejos, AH. y Brimacombe, JK. (1990). A study on the mathematical modelling of turbulent recirculating flows in gas-stirred ladles. *Metallurgical Transactions B*, 21B, 269–277.

Xia, JL. ; Ahokainen, T. y Holappa, L. (1999). Modelling of flows in a ladle with gas stirred liquid Wood's metal. *Proceedings of the Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, CSIRO, Melbourne, Australia, 6-8 December, 1999, 187–192.

Xia, JL. ; Ahokainen, T. y Holappa, L. (2002). Analysis of flows in a ladle with gas-stirred melt. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 30(2), 69–76.

Xie, Y. y Oesters, F. (1992a). Experimental studies on the flow velocity of molten metals in a ladle model at centric gas blowing. *Steel Research*, 63 (3), 93.

Xie, Y. ; Oesters, F. y Oeters, F. (1992b). behaviour of bubbles at gas blowing into liquid Wood's metal. *ISIJ Int*, 32(1), 66.

Xie, Y. y Oesters, F. (1994). Measurements of bubble plume behaviour and flow velocity in gas stirred liquid Wood's metal with an eccentric nozzle position. *Steel Research*, 63 (3), 93.

Yakhot V, Orszag SA, Thangam S, Gatski TB, Spaziale CG (1992a) Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. *Physics of Fluids A* 4(7): 1510–1520

Yakhot V, Smith LM (1992b) The renormalization group, the ϵ -expansion, and derivation of turbulence models. *Journal of Scientific Computing* 7: 35–51

Zambrano, H.; Bencomo, A. y Alén O. (2011). Computational Fluid Dynamics Study of a Gas Stirred Ladle used in the Secondary Metallurgy. 3rd International Conference on Chemical Engineering and advanced Materials (CEAM).

Zambrano, H. et al (2014) Applications of Computational Fluid Dynamics to Study: Slurry Flow in pipeline for Heavy and Extraheavy Oil. SPE, 169317-MS.

Zambrano, H.; Bencomo, A. ; Trujillo, L. y Sigalotti, L. Di G. (2015). Numerical Simulation of a Gas-Stirred Ladle. Selected Topics of Computational and Experimental Fluid Mechanics, Part of the series Environmental Science and Engineering, 271-280.

Zambrano, H. ; Sigalotti, LDG.; Klapp, J. y Bencomo, A. (2016). Heavy oil slurry transportation through horizontal pipelines: experiments and CFD simulations. International Journal of Multiphase Flow, In press.

Zambrano, H. ; Sigalotti, LDG.; (2015). Turbulent models of oil flow in a circular pipe with sudden enlargement. Applied Mathematical Modelling,

Zhu, Miao-Young. ; Inomoto, Tadeo. y Sawada Ikuo. (1995). Fluid Flow and Mixing Phenomena in the Ladle Stirred by Argon through Multi Tuyere, 472-479.

Zhang, L. (2000). Mathematical simulation of fluid flow in gas-stirred liquid systems. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 8, 463-476.

ANEXOS

ANEXO 1. Artículo Internacional **Praise Worthy Prize (2011)**

“Computational Fluid Dynamics Study of a Gas Stirred Ladle used in the Secondary Metallurgy”

ANEXO 2. Artículo Internacional (**Science Citation Index**)

Capítulo en Libro: Selected Topics of Computational and Experimental Fluid Mechanics (2015), (Springer-Verlag) “Numerical Simulation of a Gas-Stirred Ladle”

ANEXO 3. Artículo Internacional (**Science Citation Index**)

Journal: International Journal of Multiphase Flow (2016) “Heavy oil slurry transportation through horizontal pipeline: experiments and CFD simulations”

ANEXO 4. Artículo Internacional (**Science Citation Index**)

Journal: Applied Mathematical Modelling (2015). “Turbulent models of oil flow in a circular pipe with sudden enlargement”

ANEXO 5. *Presentación en Congreso Internacional* 2011:

3ra International Conference on Chemical Engineering and Advanced Materials (CEAM),

ANEXO 6. *Presentación en Congreso nacional (JIFI 2010, JIFI 2014)*

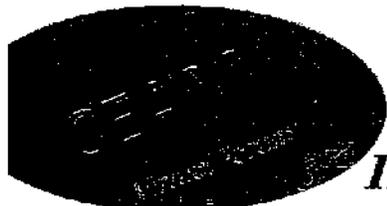
- Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-2010) (**(2) Presentaciones**)
- Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-2014) (**(4) Presentaciones**)

ANEXOS

ANEXO 1

ARTICULO INTERNACIONAL

Zambrano, H.; Bencomo, A. y Alén O. (2011). Computational Fluid Dynamics Study of a Gas Stirred Ladle used in the Secondary Metallurgy. 3rd International Conference on Chemical Engineering and advanced Materials (CEAM).



International Conference on
**2011 Chemical Engineering
and Advanced Materials**
CEAM 2011 Virtual Forum
November 14th - 28th, 2011

Contents

From the Conference Chair <i>by Jordan Hristov</i>	1
Nano Methods in Polymer Synthesis and Processing: Carboxyl/Anhydride Functionalized Copolymers for Nanoengineering Applications <i>by Zakir M. O. Rezaev</i>	2
Isolation and Purification of Fibrinolytic Enzymes from <i>Aglastodon Blomhoffi</i> Usuriensis Venom <i>by Burlova-Vasileva N. K., Sauchuk O. M., Ostapchenko L. I.</i>	61
Phenomenological and Theoretical Analysis of Phase Equilibrium in Relativity <i>by Marko Popovic</i>	65
MHPC vs. HEC as Rheological Modifiers in Coating Colors for Paper Applications: a Comparative Analysis <i>by J. Velbo</i>	69
A CFD Simulation to Study Changing Conventional Trays to Revamp Trays <i>by Ehsan Askari, Mitra Dadvar, Aliasghar Mahjoobi</i>	74
Derivation of the Discriminated Dimensionless Numbers that Rule the Forced Mass Convection <i>by M. Conesa, F. Albana, C. N. Madrid</i>	80
Diffusion Instability in Ternary Gas Mixture with Equal Molar Mass of Components <i>by V. N. Kossov, Yu. I. Zhavrin, I. V. Poyarkov, O. V. Fedorenko</i>	86
Computational Fluid Dynamics Study of Gas Stirred Ladle Used in the Secondary Metallurgy <i>by Héctor Zambrano, Alfonso Bencomo, Orlaynis Alén</i>	89
Homann Flow and Heat Transfer Through a Porous Medium with Uniform Suction or Injection <i>by Hazem A. Attia, Mohamed E. S. Ahmed, Kareem M. Enis, Ibrahim H. Abd Elmaksood</i>	93
Solid State Synthesis of Magnesium Borates at 800°C from Periclase and Sassolite <i>by A. S. Kipeak, F. T. Senberber, E. M. Derin, S. Piskin</i>	98
Estimation of Magnetic Field Intensity for the Magnetic Packed Beds Using Artificial Neural Networks <i>by T. Abbarov, M. Yuceer, Z. Yildiz</i>	103
Jerusalem Artichoke and Pea Hulls Based Substrates as Raw Material for Ethanol Production by <i>Saccharomyces cerevisiae</i> <i>by Petya Gencheva, Georgi Dobrev, Naiden Dalchev, Jordan Hristov, Viara Ivanova</i>	108

(continued)

Gas-Solid Suspension with Chemical Reaction: Evolution of Weak Perturbations	115
<i>by O. V. Sharypov, I. S. Ansfriev</i>	
Wind Energy Use to Hydrogen Storage	120
<i>by S. Urrejola, A. Sanchez, A. Cancela, R. Macéiras, J. E. Dans</i>	
Designing an Fuel Cell Autonomous Energy System for Residential Use	124
<i>by A. Cancela, A. Sanchez, R. Macéiras, D. Fernandez, S. Urrejola</i>	
Evaluation of Paper Industry Compliance with Air Quality Emissions	128
<i>by Abdulkareem A. S., Afolabi A. S., Mokoena S. N., Funguria N., Muzenda E.</i>	
Polymers as Phase Change Materials	136
<i>by Eva Günther, Stefan Hiebler</i>	
Control of Metal Dispersion, Chemical Composition and Texture of Palladium-Zinc Catalysts on Mesoporous Titania	141
<i>by Lyudmila B. Okhlopkova, Mikhail A. Korzhentsev, Zinifer R. Ismagilov</i>	
Functional Copolymer/Organo-MMT Nanoarchitectures. XII. Polypropylene/Poly(MA-<i>alt</i>-1-octadecene)/Organoclay Based Biaxially Oriented Nanofilms Through Reactive Extrusion	151
<i>by Eren Altunöz, Zakir M. O. Rzayev, Erdoğan Alper</i>	
Functional Copolymer/Organo-MMT Nanoarchitectures. XIII. EPDM Rubber/Poly[(MA-<i>alt</i>-1-octadecene)-<i>g</i>-PEO]/Organoclays Nanocomposites Through Reactive Extrusion	163
<i>by Mostafa A. Dikmani, Zakir M. O. Rzayev, Erdoğan Alper</i>	
Functional Copolymers/O-MMT Nanoarchitectures. XIV. Poly(styrene-<i>alt</i>-maleic anhydride)/Organoclay Nanocomposites Through Controlled/Living Copolymerization of Preintercalated RAFT agent...O-MMT Complexes	177
<i>by Ernur A. Söylemez, Zakir M. O. Rzayev, Emir B. Denkbaş</i>	
Functional Copolymer/Organo-MMT Nanoarchitectures. XV. Interlamellar Complex-Radical Alternating Copolymerization of α-Olefins (C₆₋₁₂) with Maleic Anhydride in the Presence of Reactive and Non-Reactive Organoclays	193
<i>by Deniz Demirkan Bozdoğan, Günay Kibarar, Zakir M. O. Rzayev</i>	
Functional Copolymers/Organo-MMT Nanoarchitectures. XVI. Design and Synthesis of Polymer/Clay Nanocomposites (PCN's) by Intercalative <i>in situ</i> Bulk Polymerization of <i>N</i>-vinyl-caprolactam with Maleic Anhydride	205
<i>by Hatice Kaplan Can, Serap Kavlak, Ali Güner, Zakir M. O. Rzayev</i>	
The Influence of pH on the Synthesis of Hyaluronic Acid Nanoparticles by Precipitation	215
<i>by Rafaela C. S. Bicudo, Maria Helena A. Santana</i>	

Computational Fluid Dynamics Study of Gas Stirred Ladle Used in the Secondary Metallurgy

Héctor Zambrano, Alfonso Bencomo, Orlaynie Alén

Abstract – The computational fluid dynamics study was developed for simulate the behavior of gas stirred ladle. In this paper, the injection of air in water was simulated, in a scale model of 1/7 of an industrial 35 ton steel ladle with a porous plug located eccentric 2/3 of the radius in order to increase the mixing process and eliminating the dead zones. For the analysis the model the multiphase Eulerian three-dimensional was used. The numerical models has been applied and compared with experiments to investigate their differences and theirs potentials of predicting the flow in gas stirred ladle 3D, transient with turbulence using standard k-epsilon in the finite volume method of the commercial program FLUENT™ 6.3. Copyright © 2011 Praise Worthy Prize S.r.l. - All rights reserved.

Keywords: Computational Fluid Dynamics, Discrete Phase Model, Stirred Ladle, Gas Stirring

Nomenclature

α	Volume fraction
ρ	Density
μ	Viscosity
p	Pressure
C_D	Drag coefficient
d_i, d_p	Particle size of the phases
Re	Reynolds Number
\bar{R}_{iq}	Interaction force between phases
\bar{F}_p	Force of interaction of gas bubbles
μ_q	Effective viscosity of phase
τ_q	Stress tensor for a Newtonian fluid

I. Introduction

In the process used for refining of steel, metallurgy ladle furnace plays an important role, which practices desulfurization, deoxidation, adjusting the chemical composition and temperature is homogenized, this operations are called as the "secondary metallurgy."

Gas injection is used to increase the speed of chemical reactions to remove particulates and eliminate thermal gradients [1], in addition, the agitation of a generally inert gas such as argon, can increase the performance of ferro-alloys used, decreasing the dissolved gas content and homogenizing the temperature and chemical composition in less time.

In the last two decades have been analyzed in various studies the behavior of gas injection in a ladle furnace steel and transport phenomena associated with fluid

flow, in order to optimize the process and minimize the mixing time.

Mathematical and numerical models used, solving the equations of momentum, the conservation equations of mass and energy using Euler-Euler approaches or Euler-Lagrange, this allows greatly to better understand and optimize current processes, as scale measures are complicated by high temperatures and visual opacity of the steel [2].

In this research studied the computational fluid dynamic behavior of steel ladle at a scale 1/7 of a furnace-scale ladle, injecting the gas through a porous plug located at the bottom of the oven at 2/3 of the radius using an Eulerian approach.

II. Mathematical Model

To describe the mixture of gas and liquid in the ladle furnace, a system of partial differential equations that govern the mixing must be solved. It is possible to handle the problem by using the Eulerian method, free surface model of RNG k- ϵ turbulence in 3D, but it do not take into account the coalescence and breakup of bubbles.

The transport equations in the process of stirring ladle with gas oven that must be addressed are:

The continuity equation for each phase

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_q \vec{v}_q) = 0 \quad (1)$$

where α_p , ρ_q and \vec{v}_q are the volume fraction, density and viscosity of phase respectively.

The momentum equation for phase:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\alpha_p \rho_q \bar{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_p \rho_q \bar{v}_q \bar{v}_q) = \\ = -\alpha_q \nabla_p + \nabla \cdot \bar{\tau}_q + \alpha_q \rho_q \bar{g} + \sum_{i=1}^n \bar{R}_{iq} + \bar{F}_p \end{aligned} \quad (2)$$

where $\bar{\tau}_q$ is the stress tensor for a Newtonian fluid, which is represented by equation (3):

$$\bar{\tau}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \bar{v}_q + \nabla \bar{v}_q^T) - \frac{2}{3} \left(\alpha_q \mu_q \nabla \cdot \bar{v}_q \bar{I} \right) \quad (3)$$

where μ_q is the effective viscosity of the phase, p is the pressure for all phases, \bar{R}_{iq} is the force of interaction between phases and \bar{F}_p is the force of interaction of gas bubbles, the turbulence model is the RNG $k-\varepsilon$.

For the Eulerian mixing model, one phase is continuous and dispersed the other, the interaction force between phases, is modeled by the following expression [3]-[4]:

$$\bar{R}_{iq} = \frac{(\alpha_p \rho_q + \alpha_i \rho_i) \alpha_i f}{\tau_{iq}} (\bar{v}_i - \bar{v}_q) \quad (4)$$

There τ_{iq} is the relaxation time of the particle:

$$\tau_{iq} = \frac{(\alpha_i \rho_i + \alpha_q \rho_q) \left(\frac{d_q + d_i}{2} \right)^2}{18(\alpha_i \mu_i + \alpha_q \mu_q)} \quad (5)$$

and f is the drag function:

$$f = \frac{C_D R_e}{24} \quad (6)$$

where C_D is the drag coefficient, R_e is the Reynolds number, d_q y d_i are particle sizes for the phase interact.

III. Turbulence Model

The fluid motion can satisfy all the equations of motion, but the flow characteristics experienced irreversible changes when a disturbance is introduced and thus within the same leads to the formation of eddies, which spreads throughout the fluid leading to the creation of a turbulent flow.

Kinematic and dynamic characteristics of turbulent flow, are related to the magnitude of the Reynolds number, because if the value increases to a certain limit the flow loses stability.

Among the most used turbulence models are:

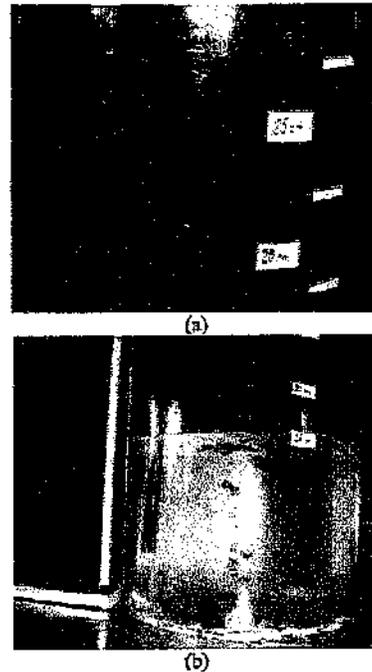
- Standard $k-\varepsilon$ Model
- Reynolds Stress Model (RSM)
- Large Eddy Simulation (LES) Model
- Spalart-Allmaras Model
- Renormalization-Group(RNG) $k-\varepsilon$ Model
- Realizable $k-\varepsilon$ Model
- Standard $k-\omega$ Model

For the selection of one of the models of turbulence, you have to take into account the type of analysis required, depending on the problem of time and computational cost.

In this study we used the model (RNG), which is derived from the Navier-Stokes equations and turbulence $k-\varepsilon$ model, which increases accuracy for very turbulent flows [6].

IV. Visualization on Water Models

Before performing calculations with Fluent CFD code, some visualizations were carried. In this paper, simulated the injection of air in water, in a scale model of 1/7 of an industrial steel ladle with a porous plug located eccentric 2/3 of the radio, Figs. 1, will promoting the mixing process and eliminating the dead zones, for the analysis was applied Eulerian approach.



Figs. 1. Plumes, behavior for different air flow rates in the stirred ladle, a and b

V. Solution Method

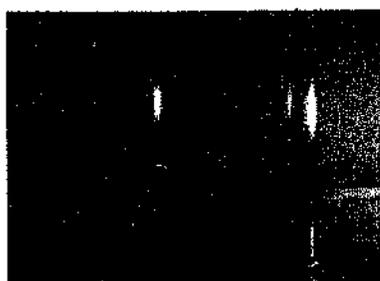
A methodology that allowed studying the hydrodynamic behavior, temperature and flow patterns of gas-liquid interaction for steel ladle eccentric porous plug 2/3 of the radius was applied.

Figs. 2 show us the plume and mixing process in a experiments with dye injection. The surfaces of the bath are deformed.

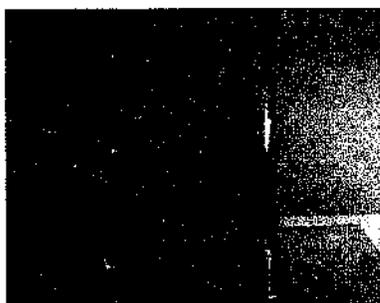
Partial differential equations governing the transport phenomena occurring in the ladle, which has no analytical solution were solved simultaneously using numerical techniques of "finite volume", with the help of two commercial software, Gambit 2.0 for geometry creation and meshing, and Fluent™ 6.3 for processing and post processing the flow of fluid, for it was made a model DFC, a ladle of steel 1/7 scale ladle.

In the preprocessing geometry was generated with tetrahedral mesh with tetrahedral elements 333.465 (see Fig. 3).

Of the assumptions that were used is the presence of free surface without coalescence of droplets, the turbulence model used is K-ε in 3D.



(a)



(b)

Figs. 2. Visualization of the flow with two bath heights and the same volumetric flow rate of $8.3 \times 10^{-5} \text{ Nm}^3/\text{s.a}$) Bath height of 0.16 m and b) bath height of 0.25 m



Fig. 3. Mesh stirred ladle (computational domain)

Preliminary simulations were carried out in transient state, using two-phase Eulerian model

VI. Results and Discussion

In this section only to see Shown are the effects of some variables, comparing the velocity profiles, temperature, internal energy and modeling of the injection.

Analyses were Performed, starting from a Fully Developed flow condition, and Achieving a stable flow patterns and turbulence.

In the Fig. 4, can be seen as the fluid moves faster the gas is injected where, There Is Also an eye recirculation in the sense of clockwise, where, the liquid velocity to a minimum Decrease. The plume of fluid is visualized.

Shows that the high velocities of the liquid are closer to the wall, which could cause friction and consequently losing the momentum of the liquid could produce refractory wear due to erosion.

In Figure 5, the vertical planes, shows that the fluid moves faster in the region where the gas rises as it is done where interfacial transfer, there is a recirculation eye where fluid movement is minimal, although the recirculation promotes turbulence. also shows that the position of the porous plug near the wall, the recirculation eye moves down and to the left in the bottom right of the vertical planes, is a small dead zone covers the entire reactor recirculation

In the Figure 4, can be seen as the fluid moves faster where the gas is injected, there is also an eye recirculation in the sense of clockwise, where the liquid velocity decreases to a minimum. The plume of fluid is visualized.

In Figure 4 also shows that the high velocities of the liquid is closer to the wall, which could cause friction and consequently losing the momentum of the liquid could produce refractory wear due to erosion.

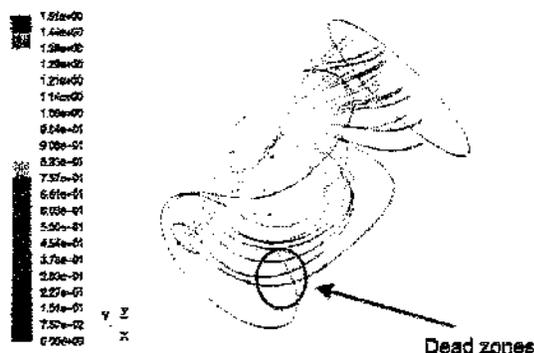


Fig. 4. Pathline curve magnitude of the velocity of the gas in the inlet (m / s)

In Figure 5, the vertical planes, shows that the fluid moves faster in the region where the gas rises as it is done where interfacial transfer, there is a recirculation

eye where fluid movement is minimal, although the recirculation promotes turbulence. Also shows that the position of the porous plug near the wall, the recirculation eye moves down and to the left in the bottom right of the vertical planes, is a small dead zone covers the entire reactor recirculation (see Figs. 4 and 5).

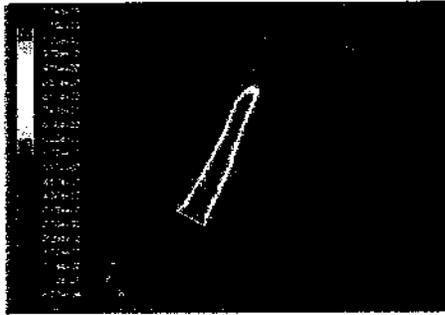


Fig. 5. Magnitude of gas velocity (m/s)

At the circular, you can see that the gas volume fraction is large near the bottom half of the reactor decreases considerably, and near the free surface is smaller due to the gas dispersion, it was observed that the plane injection is concentrated more turbulent viscosity (see Fig. 6).



Fig. 6. Contours of gas velocity (m/s) at different heights of metal ladle

VII. Conclusion

In this work was carried out the study for computational fluid dynamics simulate the gas stirred ladle Behavior of using an Eulerian framework to study fluid flow and mixing, reach the following conclusions:

- The intensity of agitation and turbulence are increased by increasing the gas flow. This enhances the mixing in the ladle.
- Injection in eccentric, being the porous wall plug near the liquid velocity decreases due to the losing momentum of the liquid to touch the walls of the reactor.
- The diameter of the porous plug hardly affects the flow patterns because gravitational forces are dominating the rise of gas bubbles and gas inertial forces at the entrance.

- The placement of a porous plug eccentric helps to improve the mixing, as it encourages the reduction or elimination of dead zones in the bottom of the ladle as this type of injection fluid moves across the ladle.

References

- [1] R.B. Bird, W.E. Stewart & E.N. Lightfoot, *Transport Phenomena* (John Wiley & Sons, 1960).
- [2] S. Cloete, J.J. Eksteen and S.M. Bradshaw, A mathematical modelling study of fluid flow and mixing in full scale gas stirred ladles, *Computational Fluid Dynamic* 9(Nº6/7) (2009)345-356.
- [3] Dipak Mazumdar and Roderick I. L. GUTHRIE., The Physical and Mathematical Modelling of Gas Stirred Ladle Systems, *ISIJ International*, 35 (1995)1-20.
- [4] Fluent 6.3 Reference of Manual. (2008).
- [5] J. L. Xia, T. Haakainen and J. Holappa., Modelling of flows in a Ladle with gas stirred liquid wood's metal, Second International conference on CFD in Minerals and Process Industries, CSIRO, Australia (1999).
- [6] B.E. Launder, D.B. Spalding, Lectures in mathematical models of turbulence . (London: Academic Press; 1972).
- [7] Y. Xie , F. OETERS, Experimental studies on the bath oscillation during gas blowing into liquid, part1: measurements using a single nozzle, *Steel research* 69 (1992)27-223.

Authors' information



MSc. Héctor Zambrano
Born in Venezuela
Mechanical Engineer
MSc in Mathematics Applied to Engineering
PhD student Central University of Venezuela
Field of interest: Transport phenomena, CFD
E-mail: hectorj.zambrano@gmail.com



Dr. Alfonso Bencomo
Born in Venezuela.
MSc in Metallurgy and Materials Science.
PhD in Engineering Science.
Field of interest: Transport phenomena, Ladle metallurgy.
E-mail: alfonso.bencomo@gmail.com



Orlynie Alén
Metallurgical Engineer
Central University of Venezuela
E-mail: orlynie86@gmail.com

ANEXO 2

PUBLICACIÓN DE ARTICULO INTERNACIONAL

Science Citation Index

Capítulo en Libro : Selected Topics of Computational and Experimental Fluid Mechanics, (Springer-Verlag)

Zambrano, H.; Bencomo, A. ; Trujillo, L. y Sigalotti, L. Di G. (2015). Numerical Simulation of a Gas-Stirred Ladle. Selected Topics of Computational and Experimental Fluid Mechanics, Part of the series Enviromental Science and Engineering, 271-280.

Environmental Science

Jaime Klapp
Gerardo Ruíz Chavarría
Abraham Medina Ovando
Abel López Villa
Leonardo Di G. Sigalotti *Editors*

Selected Topics of Computational and Experimental Fluid Mechanics

 Springer

More information about this series at <http://www.springer.com/series/3234>

Jaime Klapp · Gerardo Ruíz Chavarr
Abraham Medina Ovando
Abel López Villa · Leonardo Di G. S.
Editors

Selected Topics of Computational and Experimental Fluid Mechanics

Four-Winged Flapping Flyer in Forward Flight	147
R. Godoy-Diana, P. Jain, M. Centeno, A. Weinreb and B. Thiria	
Flows from Bins: New Results	159
D.A. Serrano, A. Medina, G. Ruiz Chavarria and F. Sanchez Silva	
Some Aspects of Turbulence Role in Oceanic Currents	179
A. Ruiz Angulo	
Alya Red CCM: HPC-Based Cardiac Computational Modelling	189
M. Vázquez, R. Arís, J. Aguado-Sierra, G. Houzeaux, A. Santiago, M. López, P. Córdoba, M. Rivero and J.C. Cajas	
Singularities in Surface Waves	209
G. Ruiz Chavarria and T. Rodriguez Luna	
Part II Multiphase Flow and Granular Media	
Isotherms of Natural and Forced Convection Around a Heated Horizontal Cylinder Embedded in a Porous Medium	229
M. Sánchez, A. Torres, F. Aragón, I. Carvajal and A. Medina	
Parameter Estimation in a Model for Tracer Transport in One-Dimensional Fractals	239
E.C. Herrera-Hernández and M. Coronado	
Mixed Convection in a Rectangular Enclosure with Temperature-Dependent Viscosity and Viscous Dissipation	253
A. Gómez López, B. Estela García Rojas, R.O. Vargas Aguilar and L.A. Martínez-Suástegui	
Characterization of a Bubble Curtain for PIV Measurements	261
R.G. Ramírez de la Torre, D.C. Vargas-Ortega, M.S. Centeno-Sierra, R. Méndez-Fragoso and C. Stern Forgach	
Numerical Simulation of a Gas-Stirred Ladle	271
H. Zambrano, A. Beacom, L. Trujillo and L. Di G. Sigalotti	
Folding of the Apolipoprotein A1 Driven by the Salt Concentration as a Possible Mechanism to Improve Cholesterol Trapping	281
M.A. Balcázar Altamirano, A. Gama Goicochea and H. Pérez	
Graphical Analysis of Fluid Flow Through Polymeric Complex Structures Using Multi-scale Simulations	
Estela Mayoral-Villa, Mario A. Rodríguez-Meza, Jaime Klapp Eduardo de la Cruz-Sánchez, César Ruiz-Ferre and Aaron Gómez-Villanueva	
Mass Flow Rate of Granular Material from an L-Valve Without Aeration	
D.A. Serrano, G. Ruiz Chavarria, S. Álvarez and A. Medina	
Part III Convection and Diffusion	
Heat Transfer in Biological Tissues	
M.E. Bravo, P. De Jesús Sánchez, R.O. Vargas Aguilar and A.E. Chávez	
Simulation of In-situ Combustion in a Matrix-Fracture System at Laboratory Scale	
O. Cazarez-Candia and C.G. Aguilar-Madera	
Numerical Simulation of In-situ Combustion in a Fracture-Porous Medium System	
O. Cazarez-Candia, P.V. Verazaluze-Barragán and J.R. Hernández-Pérez	
Mathematical Modelling of Steam Injection in Vertical Well	
F. Aguilar-Gastelum and O. Cazarez-Candia	
Oxygen Transport Under Combustion Conditions in a Fracture-Porous Medium System	
O. Cazarez-Candia, G. Rojas Altamirano and C.G. Aguilar-Madera	
Numerical Simulation of the Flow in an Open Cavity with Heat and Mass Transfer	
G.E. Ovando Chacon, S.L. Ovando Chacon, J.C. Prince Avelli and A. Servin Martínez and J.A. Hernández Zarate	
3D Numerical Simulation of Rayleigh-Bénard Convection in a Cylindrical Container	
N.Y. Sánchez Torres, E.J. López Sánchez, S. Hernández Zapata and G. Ruiz Chavarria	

Numerical Simulation of a Gas-Stirred

H. Zambrano, A. Bencomo, L. Trujillo and L. Di G. Sigalotti

Abstract In this paper we present three-dimensional, numerical turbulent recirculatory flow in a gas-stirred vessel. The physical air injected in a water cylindrical vessel, corresponding to a one-s of an industrial 35 tons steel-making ladle. Plume development investigated for air blowing through an eccentric porous plug pl of the vessel. The experimentally observed plume behaviour and due to recirculatory water motion within the ladle is qualitative by the numerical simulations. When the airflow rate is increased agitation and turbulence increases, thereby enhancing the mixing

H. Zambrano

Facultad de Ingeniería, Universidad Central de Venezuela, UCV,
(Doctorado Individualizado), Apartado Postal 47750,
Caracas 1041, Venezuela

e-mail: hectorj.zambrano@gmail.com

A. Bencomo

Escuela de Ingeniería Metalúrgica y Ciencia de los Materiales,
Facultad de Ingeniería, Universidad Central de Venezuela, UCV,
Apartado Postal 47750, Caracas 1041, Venezuela

e-mail: alfonso.bencomo@gmail.com

L. Trujillo

Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, IVIC,
Apartado Postal 20632, Caracas 1020, Venezuela

e-mail: leonardo.trujillo@gmail.com

L. Di G. Sigalotti

Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, IVIC,
Apartado Postal 20632, Caracas 1020, Venezuela

L. Di G. Sigalotti (✉)

Departamento de Ciencias Básicas,
Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Av. San Pablo 180,
0200 Mexico, D.F., Mexico

e-mail: leonardo.sigalotti@gmail.com

1 Introduction

In the metallurgical industry the liquid steel is stirred to promote homogenization by percolating argon gas through a single refractory stir plug arrangement in the bottom of the ladle. For example, gas injection is used to enhance the speed of chemical reactions, eliminate thermal and/or composition gradients, and remove inclusions among other tasks (Bird et al. 1960). Submerged gas injection also plays an important role in copper and aluminium refining processes. However, experimental observations of the dynamics of liquid metal processing operations are very limited due to the high temperatures, visual opacity, and large sizes of the processing units. Consequently, most studies of the hydrodynamics of gas stirred ladles have been restricted to numerical and experimental models of simple gas injection configurations, i.e., injection of air into a cylindrical water vessel, where the vessel is some scaled model of an industrial steel-making ladle.

The mathematical models describing fluid motion in gas-stirred ladle systems can be classified into two main groups: (a) the quasi-single phase models based on the continuum approach (Grevet et al. 1982; Sahai and Guthrie 1982; Woo et al. 1990; Balaji and Mazumdar 1991; Sheng and Irons 1992; Goldschmit and Coppola Owen 2001; Taniguchi et al. 2002), where the combined gas-liquid fluid is treated as a mixture and so the form of the mass and momentum conservation equations reduce to those of a homogeneous fluid in terms of the mixture density and velocity, and (b) the two-phase fluid models (Schwarz and Turner 1988; Xia et al. 1999, 2002; Ramírez-Argáez 2007; De Felice et al. 2012), where there is a separate solution field for each phase and inter-phase transfer terms are employed to simulate the interaction between the two phases. In essence, the two-fluid models are based on the concept of unequal phase velocities. However, they will show a tendency to equalize because of the inter-phase interaction forces. For instance, the main interaction between phases is provided by the drag forces, which act in the direction opposite to the relative motion. Other forces may also influence the flow as the lift force, the virtual mass force, and the turbulent dispersion force. While most early two-fluid scaled models of gas-stirred ladles are two-dimensional models with axial symmetry, full three-dimensional (3-D) calculations have also started to appear (Pan et al. 1997; Zhang 2000; Aoki et al. 2004; Olsen and Cloete 2009; Cloete et al. 2009), with some of them reporting model calculations of full-scale gas-stirred ladles (Aoki et al. 2004; Cloete et al. 2009).

In this paper, we report further two-fluid model calculations of a gas-stirred ladle in three-space dimensions to study the characteristics of fluid flow and the influence of the wall on plume development. The numerical results are compared with visualization experiments on water models in the literature to get an insight into the plume behaviour and the mixing process. The physical model consists of an off-centred, submerged air injection in water to simulate argon and molten steel in a cylindrical vessel, corresponding to a 1:7 scale model of an industrial 35 tons steel-making ladle. We solve the two-phase transport equations in Eulerian form using the commercial code *FLUENT* 6.3. Turbulent effects are accounted for using a

2 Two-Phase Fluid Flow Model

The gas-stirred ladle is essentially a bubble-driven recirculation: the air is released from the porous plug, the flow is governed by the injected gas and large bubbles are formed at a small height (*primary or momentum region*). As the gas loses its kinetic energy disintegrate into small ones (*transition region*) and owing to the between air and water, they will float to the top until reaching (*bubble region*). When air bubbles float, they induce the water recirculation region outside the plume-shaped, two-phase region: the recirculation region the water flows towards the vessel walls along them and finally gets the ladle bottom. Therefore, the system into two zones: the plume zone, where air bubbles (disperse (continuous phase) coexist, and the water zone, where recirculation.

If we assume isothermal conditions, the equations governing in Eulerian form are: the mass conservation equation

$$\frac{\partial (\phi_\alpha \rho_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = 0,$$

and the momentum conservation equation

$$\frac{\partial (\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha)}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha \mathbf{v}_\alpha) = -\phi_\alpha \nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T}_\alpha - \nabla \cdot (\phi_\alpha \rho_\alpha \delta \mathbf{v}_\alpha \delta \mathbf{v}_\alpha)$$

for each phase α , where $\alpha = w$ and b for the water and bubbly phases where the phase pressures have been taken to be equal, i.e., $p_\alpha = p$ is considered to be valid except in the case of expanding bubbles phase has its own intrinsic mass density ρ_α , velocity \mathbf{v}_α , volume viscous stress tensor

$$\mathbf{T}_\alpha = \phi_\alpha \mu_\alpha (\nabla \mathbf{v}_\alpha + \nabla \mathbf{v}_\alpha^T) - \frac{2}{3} \phi_\alpha \mu_\alpha (\nabla \cdot \mathbf{v}_\alpha) \mathbf{I}$$

where μ_α is the dynamic viscosity of phase α , \mathbf{I} is the identity tensor script \mathbf{T} means transposition. In addition to Eqs. (1) and (2) we have constraints

$$\sum_\alpha \phi_\alpha = 1, \quad \rho = \sum_\alpha \phi_\alpha \rho_\alpha,$$

for the volume fractions and the density of the mixture.

The third term on the right-hand side of Eq. (2) is the gravitational acceleration force directed along the negative z -axis, while the fourth and fifth terms are the Reynolds stress (accounting for turbulent effects, where $\delta v_\alpha = v_{i,\alpha} - v_\alpha$ is the fluctuating component of the velocity and $v_{i,\alpha}$ is the local instant velocity of phase α) and a force per unit volume due to phase interactions which cause the transfer of momentum between relatively moving phases. Here this term is given by the sum of three additional forces: the drag force, which represents the force on a bubble due to its velocity relative to the water, the lift force, which accounts for the effects of velocity gradients in the water flow field on the bubbles, and the virtual mass force due to the inertia of the water mass on the accelerating bubbles. We assume a steady-state drag on the bubbles so that there is no acceleration of the relative velocity between the bubbles and the conveying fluid. This force is given by (Mazumdar and Guthrie 1995; Crowe et al. 1998)

$$\mathbf{F}_{D,w} = -\mathbf{F}_{D,b} = -\frac{3}{4} \sum_{k=1}^N \frac{C_D \mu_w}{D_{b,k}^2} \text{Re}_k (\mathbf{v}_w - \mathbf{v}_{b,k}) \phi_{b,k}, \quad (5)$$

where $C_D (= 0.44$ for $\text{Re} > 1,000$) is the drag coefficient, $D_{b,k}$ is 6 mm is the mean diameter of the spherical bubbles, Re_k is the disperse phase relative Reynolds number

$$\text{Re}_k = \frac{\rho_w D_{b,k} |\mathbf{v}_w - \mathbf{v}_{b,k}|}{\mu_w}, \quad (6)$$

and the sum is taken over the total number N of bubbles contained in a unit cell (or control volume). The lift force is given by (Drew and Lahey 1987)

$$\mathbf{F}_{L,w} = -\mathbf{F}_{L,b} = -0.5 \phi_b \rho_w (\mathbf{v}_w - \mathbf{v}_b) \times (\nabla \times \mathbf{v}_w), \quad (7)$$

while the virtual mass effects of the bath on the bubble column are given by (Drew and Lahey 1987)

$$\mathbf{F}_{V,w} = -\mathbf{F}_{V,b} = 0.5 \phi_b \rho_w \left(\frac{d\mathbf{v}_w}{dt} - \frac{d\mathbf{v}_b}{dt} \right), \quad (8)$$

where d/dt denotes the phase material time derivative. We note that these forces act as sinks for the continuous (water) phase and as sources for the dispersed (bubbles) phase.

Turbulence is modelled using the Re-Normalization Group (RNG) k - ϵ model (Yakhot et al. 1992; Yakhot and Smith 1992). This method differs from the standard k - ϵ model in that it accounts for smaller scales of turbulence by means of a renormalization of the Navier-Stokes equations, thereby allowing for turbulence at high Reynolds numbers. The Reynolds stresses in Eq. (2) are defined using Boussinesq's assumption

$$-\rho_\alpha (\delta v_\alpha \delta v_\alpha) = \mu_{\alpha,t} (\nabla v_\alpha + \nabla v_\alpha^T) - \frac{2}{3} \rho_\alpha k_\alpha \mathbf{I}, \quad (9)$$

where k_α is the turbulent kinetic energy density for phase α and

$$\mu_{\alpha,t} = \frac{C_{\mu\alpha} \rho_\alpha k_\alpha^2}{\epsilon_\alpha}, \quad (10)$$

is the coefficient of the turbulent eddy viscosity, where ϵ_α is the dissipation rate of turbulence for phase α and $C_{\mu\alpha}$ is a parameter that depends on the phase volume fraction. In the actual simulations the turbulent eddy viscosity in relation (9) is replaced by an effective dynamic viscosity, which is a sum of the dynamic and eddy viscosities, i.e., $\mu_{\alpha,\text{eff}} = \mu_\alpha + \mu_{\alpha,t}$. Note that for the dispersed phase $\alpha = b$, k in relation (9) and a sum is taken, as in expression (5), over all bubbles contained in a unit cell. The transport equations for the turbulent kinetic energy k_α and its dissipation rate ϵ_α as well as the values of all constants, including $C_{\mu\alpha}$, are taken as those derived explicitly in the RNG procedure for a single phase (Yakhot and Smith 1992; Pope 2000).

The transport equations are solved using the *FLUENT* 6.3 code for a cylindrical water vessel of diameter 27.5 cm and height 40 cm, with its axis of symmetry aligned along the z -axis. An eccentric nozzle exit of 6 cm diameter is placed at the bottom of the vessel at one-third of its radius away from the wall, through which air is allowed to flow at a constant velocity. At the beginning of the calculations, the water volume fraction $\phi_w = 1$, while the air volume fraction ϕ_b is set to zero. No-slip boundary conditions for the fluid velocities apply along the wall of the vessel and the water free surface is assumed to remain flat. However, air bubbles reaching the free surface are allowed to flow out. To do so a sink term is added to Eq. (1) for the dispersed phase for those control volumes at the free surface. A tetrahedral mesh covering the full cylindrical domain was created with the help of the commercial software *Garbit* 2.0 and trial calculations were conducted to determine convergence of the solutions. True convergence is guaranteed using a tetrahedral mesh with 333,465 elements.

3. Results and Discussion

Most industrial gas-stirred ladles have their porous plugs located off-centre because it is believed that this configuration produces a better stirring effect than when the porous plug is placed at the centre. Therefore, we simulate the injection of air into a water vessel when the plug position is one-third of the vessel radius away from the wall for two different constant airflow rates (i.e., $Q = 9.01 \times 10^{-6}$ and $1.03 \times 10^{-5} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$) in order to investigate the effects on the flow field. In the present model, the bubbles are assumed to be spherical with a uniform size distribution and released from the nozzle exit with constant frequency.

For $Q = 9.01 \times 10^{-6} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$ ($\approx 0.0091 \text{ s}^{-1}$), Fig. 1 shows the resulting stable flow pattern. The central axis of the plume is evidenced by the nearly vertical red pathlines, while the yellow ones closely coincide with its lateral borders. In the upper portion of the ladle, just above the plume region, there is no recirculation and the flow pathlines

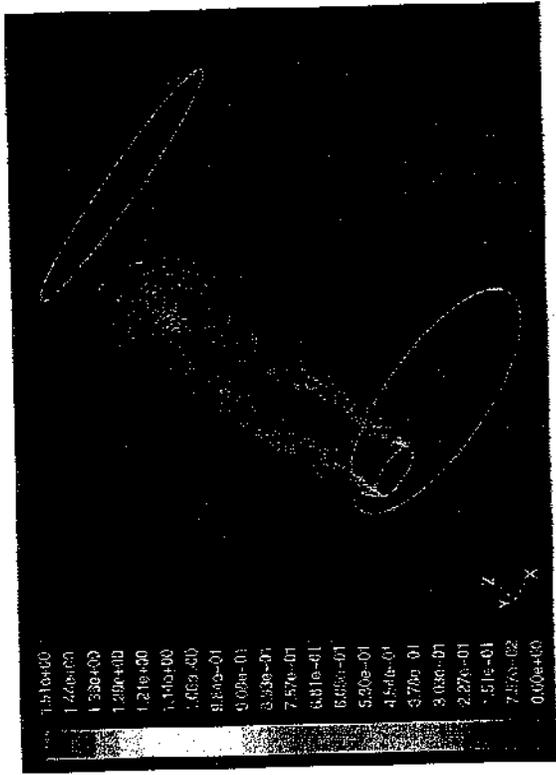


Fig. 3 Isocontour of the gas velocity in a section plane of the plume through its axis for the same model of previous figures. The colour-scale bar and numbers on the left border indicate the magnitude of the velocity in units of $m\ s^{-1}$

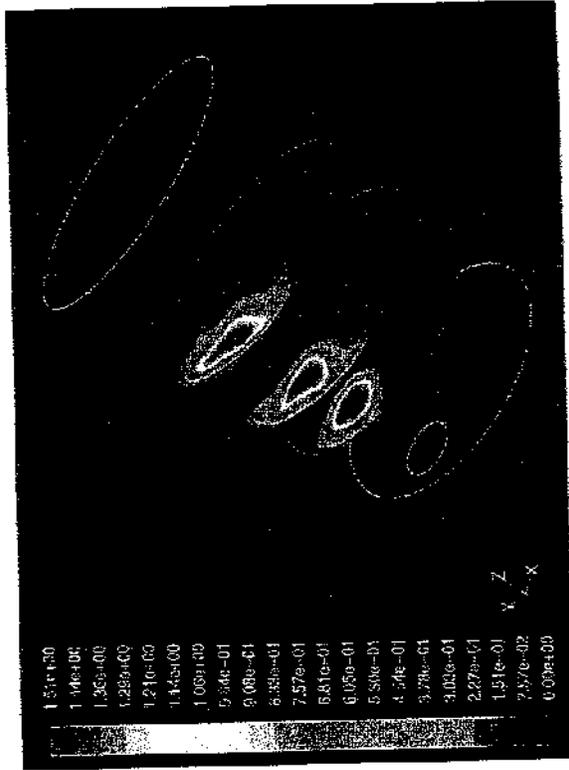


Fig. 4 Contours of the gas velocity showing the cross-sectional structure of the plume at three different heights for the same model of previous figures. The colour-scale bar and numbers on the left border indicate the magnitude of the velocity in units of $m\ s^{-1}$

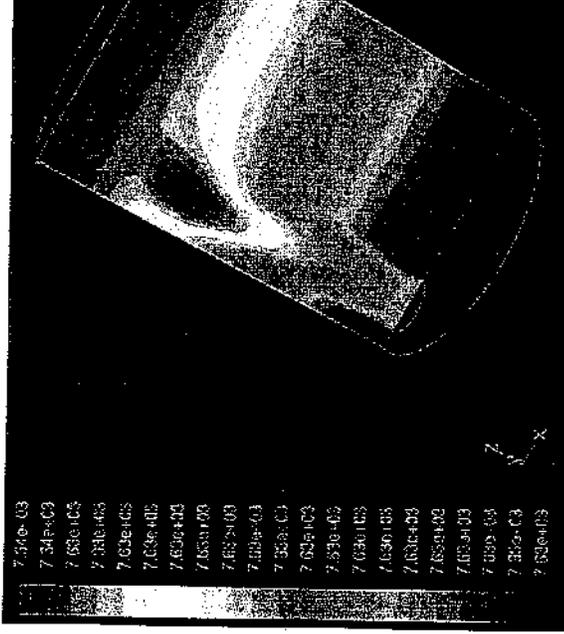


Fig. 5 Distribution of the kinetic energy in the entire ladle system for the same model of previous figures. The colour-scale bar and numbers on the left border indicate the value in units of $g\ m^2\ s^{-2}$

4 Conclusions

In this paper, we have presented numerical simulations of two-phases air-water model of an industrial gas-stirred ladle using the FLUENT software. We find that the intensity of agitation and turbulence in the ladle increases with the gas flow rate at the nozzle exit. As expected, an eccentric gas flow at the bottom of the ladle enforces the reduction of inactive flow regions, and the mixing as it enforces the recirculating liquid flow at the bottom of the ladle. In a porous plug hardly affects the flow pattern as the diameter of the porous plug hardly affects the flow pattern as gas bubbles is dominated by inertial forces near the nozzle exit and forces at higher heights. The results are in excellent agreement with observations of eccentric gas injection models as well as observational calculations of plume development and behaviour.

References

Ahdi J, Thomas BG, Peter J, Peaselee KD (2004) Experimental and theoretical investigation of a bottom gas-stirred ladle. In: Proceedings of the association for iron and steel technology (AISTech 2004), vol I, pp 1045-1056

Salih D, Mazumdar D (1991) Numerical computation of flow phenomena in ladle systems. Steel Res 62(1):16-23

- Bird RB, Stewart WE, Lightfoot EN (1960) Transport phenomena. Wiley, New York
- Cloete SWP, Eksteen JJ, Bradshaw SM (2009) A mathematical modelling study of fluid flow and mixing in full-scale gas-stirred ladles. *Prog Comput Fluid Dyn* 9(6/7):345–356
- Crowe C, Sommerfeld M, Tsuji Y (1998) Multiphase flows with droplets and particles. CRC Press, Boca Raton
- De Felice V, Daoud ILA, Dussoubs B, Jardy A, Bellot J-P (2012) Numerical modelling of inclusion behaviour in a gas-stirred ladle. *ISIJ Int* 52(7):1273–1280
- Domingin JF, Gardin P, Brunet M (1999) Experimental and numerical investigation of gas stirred ladles. In: Proceedings of the second international conference on CFD in the minerals and process industries, CSIRO, Melbourne, 6–8 December 1999, pp 181–186
- Drew DA (1983) Mathematical modelling of two-phase flow. *Annu Rev Fluid Mech* 15:261–291
- Drew DA, Lahey RT (1987) The virtual mass and lift force on a sphere in rotating and straining inviscid flow. *Int J Multiph Flow* 13(1):113–121
- Goldschmidt MB, Coppola Owen AH (2001) Numerical modelling of gas stirred ladles. *Ironmak Steelmak* 28(4):337–341
- Grever JH, Szekely J, El-Kaddah N (1982) An experimental and theoretical study of gas bubble driven circulation systems. *Int J Heat Mass Transf* 25(4):487–497
- Mazumdar D, Guthrie RIL (1995) The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems. *ISIJ Int* 35(1):1–20
- Méndez CG, Nigro N, Cardona A, Begnis SS, Chiapporoli WP (2002) Physical and numerical modelling of a gas stirred ladle. In: Idelshon SR, Sonzogni VE, Cardona A (eds) *Mecánica computacional*, vol XXI. Sanja Fe-Paraná, Argentina, pp 2646–2654
- Olsen JB, Cloete S (2009) 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, 9–11 December 2009, pp 1–6
- Pan S-M, Ho Y-H, Hwang W-S (1997) Three-dimensional fluid flow model of gas-stirred ladles. *J Mater Eng Perform* 6(3):311–318
- Pope SB (2000) Turbulent flows. Cambridge University Press, Cambridge
- Ramírez-Argáez MA (2007) Numerical simulation of fluid flow and mixing in gas-stirred ladles. *Mater Manuf Process* 23(1):59–68
- Sahai Y, Guthrie RIL (1982) Hydrodynamics of gas stirred melts: part I. Gas/liquid coupling. *Metal Trans B* 13B:193–202
- Schwarz MP, Turner WJ (1988) Applicability of the standard $k-\epsilon$ turbulence model to gas-stirred baths. *Appl Math Model* 12(3):273–279
- Sheng YY, Irons GA (1992) Measurement and modeling of turbulence in the gas/liquid two-phase zone during gas injection. *Metal Trans B* 24B:695–705
- Taniguchi S, Kawaguchi S, Kikuchi A (2002) Fluid flow and gas-liquid mass transfer in gas-injected vessels. *Appl Math Model* 26(2):249–262
- Woo JS, Szekely J, Casillas AH, Brinacombe JK (1990) A study on the mathematical modelling of turbulent recirculating flows in gas-stirred ladles. *Metal Trans B* 21B:269–277
- Xia JL, Ahokainen T, Holappa L (1999) Modelling of flows in a ladle with gas stirred liquid Wood's metal. In: Proceedings of the second international conference on CFD in the minerals and process industries, CSIRO, Melbourne, 6–8 December 1999, pp 187–192
- Xia JL, Ahokainen T, Holappa L (2002) Analysis of flows in a ladle with gas-stirred melt. *Scand J Metall* 30(2):69–76
- Xie Y, Oeters F (1992) Experimental studies on the flow velocity of molten metals in a ladle model at centric gas blowing. *Steel Res* 63:93–104
- Yakhot V, Orszag SA, Thangam S, Gatski TB, Spaziale CG (1992) Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique. *Phys Fluids A* 4(7):1510–1520
- Yakhot V, Smith LM (1992) The renormalization group, the ϵ -expansion, and derivation of turbulence models. *J Sci Comput* 7:35–51
- Zhang L (2000) Mathematical simulation of fluid flow in gas-stirred liquid systems. *Model Simul Mater Sci Eng* 8:463–476

Folding of the Apolipoprotein A1 Driven by the Salt Concentration as a Possible Mechanism to Improve Cholesterol Trapping

M.A. Balderas Altamirano, A. Gama Goicochea and E. Pérez

Abstract The folding of the cholesterol—trapping apolipoprotein solution at increasing ionic strength—is studied using atomical dynamics simulations. We calculate various structural properties conformation of the protein, such as the radius of gyration, function and the end-to-end distance. Additionally we report in specifically tailored for the characterization of proteins, such distance matrix and the Ramachandran plot. We find that two configurations of this protein are preferred: one where the protein one where it forms loops or closed structures. It is argued that association of the protein with cholesterol and other fatty acid

1 Introduction

The apolipoprotein A1 (APOA1) is the main component of high and has an important role in lipid metabolism. APOA1 is found stream and promotes fatty acid efflux, including cholesterol liver for excretion. Its study is important because of its pro atherosclerosis (Breslow 1996) and its function as a cholesterol blood cells within artery walls (Glomset 1968). APOA1 contains chain of 243 amino acid residues (Brewer et al. 1978) with 11 or residues in the sequence (McLachlan 1977). These multiple proposed to form amphipathic helices with distinct hydrophobic faces (Segrest et al. 1974). The fat transport is then expected the hydrophilic and hydrophobic residues along APOA1, but t conditions like pH and ionic strength in the blood or physiologi

M.A. Balderas Altamirano (✉) · A. Gama Goicochea · E. Pérez
 Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí,
 Álvaro Obregón 64, Luis Potosí, 78000 México, San Luis Potosí, México
 e-mail: miguelangel.balderas@gmail.com

ANEXO 3

PUBLICACIÓN DE ARTICULO INTERNACIONAL

Science Citation Index

JOURNAL: International Journal of Multiphase Flow.

Zambrano, H. ; Sigalotti, LDG.; Klapp, J. y Bencomo, A. (2016). Heavy oil slurry transportation through horizontal pipelines: experiments and CFD simulations. International Journal of Multiphase Flow, In press.



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

International Journal of Multiphase Flow

journal homepage: www.elsevier.com/locate/ijmultiphaseflow



Heavy oil slurry transportation through horizontal pipelines: Experiments and CFD simulations

Héctor Zambrano^a, Leonardo Di G. Sigalotti^{b,c,*}, Jaime Klapp^{d,e}, Franklin Peña-Polo^f, Alfonso Bencomo^f

^aFacultad de Ingeniería, Doctorado en Ciencias de la Ingeniería, Universidad Central de Venezuela (UCV), Apartado Postal 47750, Caracas 1041-A, Venezuela

^bÁrea de Física de Procesos Irreversibles, Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco (UAM-A), Av. San Pablo 180, México D.F. 02200, Mexico

^cCentro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, IVC, Apartado Postal 20632, Caracas 1020-A, Venezuela

^dDepartamento de Física, Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares (ININ), Carretera México-Toluca S/N, La Marquesa, Ocoyoacac 52750, Estado de México, Mexico

^eABACUS-Centro de Matemáticas Aplicadas y Cómputo de Alto Rendimiento, Departamento de Matemáticas, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados (CINVESTAV-IPN), Carretera México-Toluca km. 38.5, La Marquesa, Ocoyoacac 52740, Estado de México, Mexico

^fFacultad de Ingeniería, Escuela de Metalurgia y Ciencia de los Materiales, Universidad Central de Venezuela (UCV), Apartado Postal 47750, Caracas 1041-A, Venezuela

ARTICLE INFO

Article history:

Received 14 December 2015

Revised 12 April 2016

Accepted 16 April 2016

Available online xxx

Keywords:

Multiphase flows

Particle-laden flows

Laminar flows

Flow in pipes

Pressure drop

Computational methods in fluid dynamics

ABSTRACT

The pressure-driven slurry flow of heavy oil in a horizontal pipe is investigated experimentally and numerically for Reynolds numbers in the range 44–805, solid concentrations by weight between 1 and 12%, and mean slurry velocities of ~ 0.2 – 2.3 m s^{-1} . A three-dimensional, algebraic slip mixture (ASM) model is used as part of the CFD software FLUENT 6.3 to obtain the numerical solutions. The results for the pressure drop are compared with experimental data of slurry prepared with de-asphalted oil as the liquid phase and asphaltic residues as the solid phase with mean particle sizes of $500 \mu\text{m}$. Based on the experimental measurements, the critical deposition velocity for these slurries was estimated to vary from 0.171 m s^{-1} (for 1% solid concentration and mean slurry velocity of 0.22 m s^{-1}) to 0.66 m s^{-1} (for 12% concentration and mean slurry velocity of 2.3 m s^{-1}). However, for the full range of mean velocities tested, the flow of these highly viscous mixtures was found to be in a homogeneous regime. The numerically predicted pressure drops are in good agreement with the experimental data with relative deviations of ~ 0.8 – 13% . In contrast, errors of ~ 3 – 24% are obtained when comparing the experimental results with the Fanning friction factor correlation. While the temperature of the circulating slurry rises with the flow rate due to viscous heating and friction of the solid particles with the pipe walls, we find that at the moderate flow velocities and efflux concentrations considered the slurry morphology is not affected by the gradual dissolution of the solid particles (asphaltenes) into the liquid phase. Other important slurry flow characteristics, such as the mean slurry friction coefficient and slurry velocity distribution, are also analyzed, which predict the homogeneous, symmetric character of the flow.

© 2016 Published by Elsevier Ltd.

1. Introduction

The transportation of heavy oil through pipelines is an important operation that requires conveying fluids that are weighty loaded with solid particles. These mixtures are called slurries and

their apparent viscosity is well above the viscosities of the carrier fluids themselves (Falcimaigne, 2011). In the chemical, mining, and petroleum industries, horizontal slurry pipelines are commonly used for long distance transportation of particulate materials from the production sites to the processing plants, and due to their low operation and maintenance costs they have been found to be economically more viable than other conventional transportation modes.

A major difficulty with heavy oil is its high viscosity. For example, single-phase flow of heavy oil in a tube may lead to huge pressure drops that make the fluid impossible to pump, even through pipes of large diameters (Bensakhria et al., 2004). The slurry flow

* Corresponding author at: Área de Física de Procesos Irreversibles, Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco (UAM-A), Av. San Pablo 180, 02200 México D.F. Mexico. Tel.: +584143743293.

E-mail addresses: hectorj.zambrano@gmail.com (H. Zambrano), leonardo.sigalotti@gmail.com (L.D.G. Sigalotti), jaim.klapp@inm.gob.mx (J. Klapp), franklin.pena@gmail.com (F. Peña-Polo), alfonso.bencomo@gmail.com (A. Bencomo).

of heavy oil is even more complex since the solid material is usually polydisperse, having a range of particle sizes that can span several orders of magnitude. In addition, the rather slow rates associated with this type of flows may lead to high concentration of solids at the bottom of the pipe, eventually forming a stationary bed, which may in turn lead to wear and possible blockage of the pipe. Considerable experimental work and efforts in deriving empirical correlations that fit the experimental data for a wide variety of systems have been performed over the past years to predict the pressure drop, concentration profile, deposition velocity, and transitional flow regimes for solid–liquid slurry flow through pipes (Turian and Yuan, 1977; Doron et al., 1987; Turian et al., 1987; Doron and Barnea, 1996; Kaushal et al., 2002; Kaushal and Tomita, 2002; Skudarnov et al., 2004; Kaushal et al., 2005; Gillies and Shook, 2009; Danish et al., 2011; Swamee and Aggarwal, 2011; Vlasak and Chara, 2011; Assefa and Kaushal, 2015; Carravetta et al., 2016). In particular, models based on empirical correlations have long been used for slurry pipeline design and pump selection purposes.

For most particulate two-phase flows, i.e., liquid–solid or gas–solid flows, the fluid phase is continuously interconnected (continuous phase), while the solid phase exists in the form of discrete particles (dispersed phase). In general, these flows behave quite differently from single-phase flows. The physical characteristics of the former depend on many factors, such as the particle size distribution, the solid concentration, the size of the pipe, the level of turbulence, and the temperature and viscosity of the carrier fluid. One important parameter in slurry flow through a pipe is the critical deposition velocity, which is the minimum velocity at which the particles form a bed at the bottom of the pipe. In operational terms, it is the lowest velocity at which slurry pipelines can work and corresponds to the lowest pressure drop. Despite the efforts to develop accurate models based on correlations regarding pressure drop, critical deposition velocity, and flow regime identification, tests with experimental data from different systems have shown that these models yield on average prediction errors larger than 25% (Puri, 2014). However, a recent comparative study of friction factor correlations for laminar slurry flow of Bingham fluids in smooth pipes have reported errors that can be less than 14% as compared with the experimental results (Assefa and Kaushal, 2015).

As an alternative to existing correlation models, which provide only information of the flow on a global scale, computational fluid dynamics (CFD) simulations are being increasingly used to investigate in detail the local dynamics of slurry flows in pipes and open channels. However, due to the inherent physical and numerical complexity of multiphase flow models, general applicable CFD computer codes are still missing. Even for liquid–solid multiphase flows, the physics and the mathematical treatment of liquid–solid interactions are largely underdeveloped. In spite of these difficulties, CFD simulations of laminar slurry flow in horizontal pipes based on an Eulerian approach have started to appear (Eesa and Barigou, 2008; 2009). In Eulerian models both the liquid and solid phases are treated as interpenetrating continua and separate sets of hydrodynamic equations are required for each phase, which are coupled through the pressure and interphase exchange terms. Multiphase models of laminar slurry flow based on the mixture approach are much less abundant. The mixture model is a simplified version of the Eulerian multiphase approach, where the presence of two or more phases is described by solving the hydrodynamic equations for the mixture, which largely resemble those for a single-phase flow, except that now they are represented in terms of the mixture density and velocity (Manninen et al., 1996). However, compared to the Eulerian model, the mixture approach was found to fail in predicting the pressure drop correctly at particle concentrations higher than ~30%

(Kaushal et al., 2012). Since most common methods of transporting heavy oil in pipeline systems are via dispersed flow of oil in water or using the oil–water annular-core flow technique (Bannwart, 2001), existing numerical simulations have been mostly applied to study this kind of flows (Crivellaro et al., 2009; Burlutskiy, 2012; Gadeiha et al., 2013; Beerens et al., 2014).

Particle-laden flows are also of great importance in the transportation of heavy oil in pipes. Due to the strong interactions between the fluid carrier phase and the solid particles, numerical simulations are often needed for this class of flows (Lakehal, 2013). On the other hand, heavy crude oils can be described as a colloidal suspension composed of asphaltenes as the solid phase and maltenes as the liquid phase. It has been shown that the asphaltenes tend to overlap, thereby strongly contributing to the high viscosity of heavy oils (Sanjere et al., 2004). One way to suppress the effects of overlapping is by preparing samples of maltenes into which precipitated asphaltenes are added after sieving, thus converting the original crude into a slurry with detectable solid particles. In this paper, we apply this procedure as an alternative method to lower the viscosity of heavy oil, and study experimentally and numerically the pressure-driven slurry flow of de-asphalted oil at low Reynolds numbers (44–805) and varied solid concentrations by weight in a horizontal pipe. For the numerical simulations we use the commercial CFD software FLUENT 6.3. A two-phase flow algebraic slip mixture (ASM) model is employed to obtain the numerical solutions (Manninen et al., 1996). The numerical results for pressure drop are compared with the experimental data for efflux concentrations $\leq 12\%$. The critical deposition velocity for these slurries was estimated experimentally to vary between 0.171 m s^{-1} (for 1% efflux concentrations) to 0.66 m s^{-1} (for 12% efflux concentrations). However, the flow of these highly viscous mixtures was found to be in a homogeneous regime for all tested mean velocities. The numerically predicted pressure drops are in good agreement with the experimental data with relative deviations of ~ 0.8–13%. More importantly, we find that at the moderate flow velocities and efflux concentrations considered the slurry morphology is not affected by the gradual dissolution of the solid particles into the liquid phase due to increased viscous heating and friction with the pipe walls for increasing flow rate of the circulating slurry.

The paper is structured as follows. The experimental setup and results are described in Section 2. The mixture equations and the details of the numerical modeling are given in Section 3 and 4, respectively. Section 5 describes the results of the numerical calculations and Section 6 contains the main conclusions.

2. Experiments

2.1. Experimental setup

An experimental investigation of the pressure drop in liquid–solid slurry flows, representing the transportation of heavy oil through a horizontal pipe, was performed using the pilot plant loop facilities installed in the Laboratory of Thermal Processes of PDVSA, Intevep, Venezuela. A schematic of the closed-loop pipeline is shown in Fig. 1. The experimental rig consists of two horizontal, straight carbon steel pipes of 3.0 m long, internal diameter of 0.0243 m, and absolute roughness of 0.046 mm each, connected by a U-shape bending at their left extremes of 0.3 m internal curvature radius, and at their right ends to a 20 L mixing tank (MT) for preparing the slurry. The mixing tank is equipped with an axial stirrer to homogenize the slurry. The slurry flowing from the mixing tank is pumped into one section of the pipe loop by a 3.0 hp gear pump (GP) with a variable speed control valve to regulate the flow rate. Pressure (PT) and temperature (TT) transmitters are placed at various locations along the loop line to provide

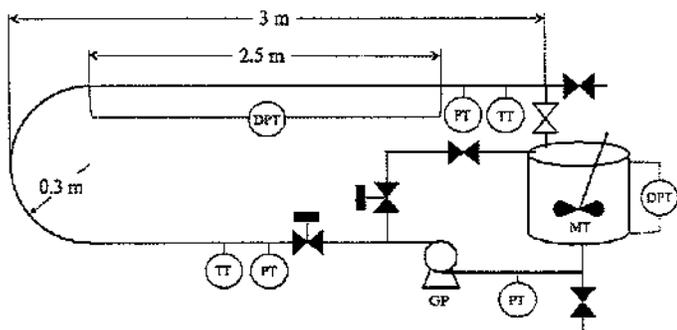


Fig. 1. Schematic layout of the experimental pilot plant facility.

on-line measurements of pressure and temperature, as shown in Fig. 1. The pressure drop is measured by means of a differential pressure transducer (DPT), which is placed in the middle of the measurement pipe section upstream of the mixing tank. Pressure drops within the pipeline are measured across a test section of 2.5 m long. A recording system coupled to a computer allows the recovery of the DPT signals and the control of the pressure evolution across the test section in real time. Accurate values of the volumetric flow rate are determined by placing a flow diverter at the exit of the pipe loop, which serves to deviate the slurry flowing out of the pipe loop for a given time interval into a small, Plexiglas tank provided with a level transmitter sensor. From the stabilized level of slurry and the cross-sectional area of the measuring tank, the slurry flow rate is determined within a $\pm 1.0\%$ error.

The slurry was prepared using de-asphalted oil as the liquid phase and asphaltic residues as the solid phase, both pertaining to conventional heavy oil from the Orinoco Petroleum Belt. The solvent de-asphalting process was conducted at relatively low pressure and temperature, leading to a S.A.R.A. composition of 15% saturates, 29% resins, and 56% aromatics for the liquid and 14% saturates, 15.4% aromatics, 31.6% resins, and 39% asphaltenes for the solid phase. Solid particles of average size $500 \mu\text{m}$ were separated from finer and coarser particles using a vibrating sieving system, and incorporated into the liquid phase under mechanical stirring for 20 min in the mixing tank to produce a pseudo-homogeneous mixture. Optical microscopy ($\times 10$) of a sample of the prepared slurry at different concentrations showed that in all cases the slurry was effectively composed of amorphous particles of size around $500 \mu\text{m}$. The reference density of the de-asphalted oil at 15°C is 907.1 kg m^{-3} , while its reference kinematic viscosity at 135°C is $2.057 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$. Solid concentrations by weight $C_w = 1, 3, 6, 8,$ and 12% were considered, corresponding to a mean particle density of 1120 kg m^{-3} . A set of six experiments with increasing mean slurry velocities from ≈ 0.2 to $\approx 2.3 \text{ m s}^{-1}$ were conducted for each solid concentration.

2.2. The effects of temperature

During each experimental test, the density and viscosity of the mixture were measured at three different stages, namely at the beginning immediately after mixing in the tank, during circulation of the mixture in the pipeline system after a stationary flow is established, and then 24 h after switching off the system when the mixture is at rest. During this final stage, the slurry was mixed again before measurement of the density and viscosity. The mixture viscosity was measured using an Anton Paar, Physica MCR 301 rheometer equipped with a concentric-cylinder Peltier temperature control, following the adaptive standard test method for determination of dynamic viscosity and derived kinematic viscosity of liquids by oscillating piston viscometer (ASTM D7438-13), while the density was measured using an Anton Paar, DMA 4500 M densito-

meter with a measuring density range of $0\text{--}3 \text{ g cm}^{-3}$, according to the ASTM D4052-15 method.

For all concentrations, the temperature of the circulating mixture is seen to increase with increasing flow rate, giving rise to a correlated decrease of the density and viscosity. Between the minimum and maximum flow rates the temperature rises from $\sim 20^\circ\text{C}$ to $\sim 26^\circ\text{C}$ for a fixed efflux concentration. Fig. 2 shows the resulting dependence of the mixture density (left) and dynamic viscosity (right) with the temperature after a steady-state flow is established. The mixture density exhibits variations with temperature between $\sim 0.12\%$ (for $C_w = 1\%$) and $\sim 0.35\%$ (for $C_w = 12\%$), while the dynamic viscosity varies by less than 10% for $C_w = 1\%$ to $\sim 24\%$ for $C_w = 12\%$. The change in slope for the density variation at a 6% efflux concentration means that the slurry mixture for this case was prepared at a slightly higher ambient temperature (22.2°C) compared to the other cases, which were prepared at about 21°C . At higher concentrations, heat generation by viscous dissipation and friction of the solid particles with the pipe walls during flow pumping become increasingly more important, thereby increasing the mixture temperature and causing larger deviations from the initial density and viscosity as the flow rate is increased.

Experiments under static conditions at ambient temperature (21°C) have also shown that the suspended particles, which are composed of 39% asphaltenes and 31.6% resins, dissolve slowly into the liquid phase in the course of time, reducing gradually their size. For instance, monitoring of the stability of a slurry sample containing 10% asphaltenes with time has shown that the transformation from a precipitated state to a colloidal one took approximately 146 days under stationary conditions (Sanjere et al., 2004). Since the viscosity of heavy oil depends mostly on its combined asphaltene and resin concentration (Hinkle et al., 2010), partial dissolution of the solid particles into the liquid phase under flow conditions is another factor that contributes to enhance the differences in mixture viscosity between the minimum and maximum flow rates. The evolution of the slurry state to the colloidal state is then accelerated by a high temperature and hence, by a high flow rate. However, measurements of the density and viscosity immediately after mixing in the tank and during circulation of the mixture in the pipeline system indicate variations of the density between $\sim 0.08\%$ (for $C_w = 1\%$) and $\sim 0.6\%$ (for $C_w = 12\%$), and the viscosity between $\sim 1\%$ (for $C_w = 1\%$) and $\sim 11\%$ (for $C_w = 12\%$) for a fixed flow rate.

2.3. Measured pressure drop

The experimental pressure drop, Δp_m , as a function of the mixture volumetric flow rate, Q_m , for different initial solid concentrations (symbols) is shown in Fig. 3. The solid lines depict the pressure drop as predicted by Darcy's law

$$\frac{\Delta p}{2L} = f \frac{\rho_m v_m^2}{D} \tag{1}$$

where $L = 2.5 \text{ m}$ is the length of the measurement pipe section, D is the diameter of the pipe section, ρ_m and v_m are the density and mean velocity of the mixture, and f is the Fanning friction factor of the liquid, which for laminar flow ($Re_l < 2100$) in smooth, round pipes is given by

$$f = \frac{16}{Re_l} \tag{2}$$

where Re_l is the Reynolds number of the liquid flow defined as

$$Re_l = \frac{v_m D \rho_l}{\mu_l} \tag{3}$$

ρ_l is the liquid density, and μ_l is the liquid shear viscosity. The choice of Eq. (2) allows the construction of a Moody chart for

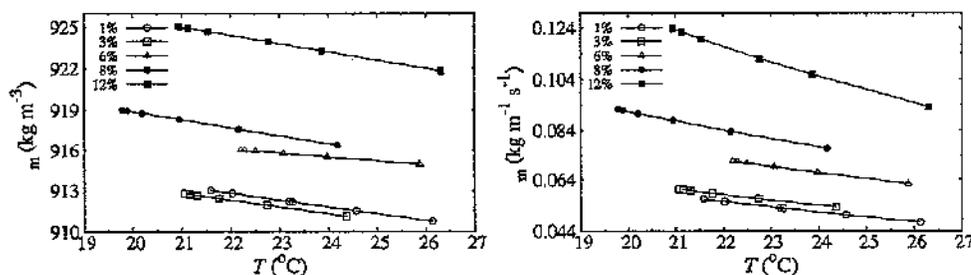


Fig. 2. Measured mixture density (left) and dynamic viscosity (right) during circulation of the slurry after a steady-state flow was reached as a function of temperature for all tested concentrations and flow rates. The data are marked with open circles for $C_w = 1\%$, open squares for 3%, open triangles for 6%, filled dots for 8%, and filled squares for 12%. For a given concentration, the temperature increases with the slurry flow rate.

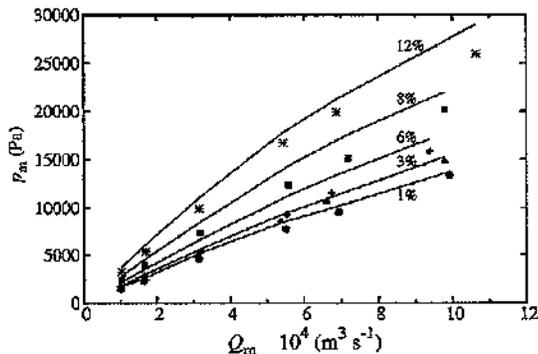


Fig. 3. Experimentally measured pressure drop, Δp_m , as a function of the mixture volumetric flow rate, Q_m , for solid concentrations by weight of $C_w = 1\%$ (dots), 3% (triangles), 6% (rhombi), 8% (squares), and 12% (asterisks). The solid lines depict the corresponding pressure drops as predicted by Eq. (1).

this laminar flow (Moody, 1944; Bird et al., 2002). Based on a recent comparative study of friction factor correlations by Assefa and Kaushal (2015), a more accurate prediction for smooth pipes can be obtained using the explicit relation (Morrison, 2013)

$$f = \frac{16}{Re_1} + \frac{0.0076 \left(\frac{3170}{Re_1}\right)^{0.165}}{1 + \left(\frac{3170}{Re_1}\right)^{7.0}} \quad (4)$$

This correlation describes the pressure drop in slurry flow over the entire Reynolds-number range, i.e., from laminar to transitional to turbulent flow up to $Re_1 \sim 10^6$ (Morrison, 2013). For small Re_1 , it essentially reduces to Eq. (2). That is, even when $Re_1 = 2100$, the second term on the right-hand side of Eq. (4) contributes with $\approx 4.31 \times 10^{-4}$, which corresponds to relative deviations of only $\sim 5\%$ compared to Eq. (2). In addition, earlier correlations by Turian and Yuan (1977) and Turian et al. (1987) predict deviations as high as $\sim 239\%$ and $\sim 2590\%$, respectively, compared to the experimental results and therefore they have not been depicted in Fig. 3.

We see from Fig. 3 that the measured pressure drop at any given flow rate increases with increasing solid concentration. At higher concentrations, the increasing number of solid suspensions results in higher mixture viscosities and therefore in larger friction losses near the pipe walls, causing larger pressure drops. Compared to the experimental data, Eq. (2) overestimates the pressure drop for all efflux concentrations and flow rates, with errors that can be as large as $\sim 24\%$ (see Table 2). The deviations implied by Eq. (2) are understandable because it assumes the flow to be strictly homogeneous and single-phase, while the experimental slurry is at best a pseudo-homogeneous mixture composed of suspended particles. On the other hand, the increase of the mixture viscosity caused by partial dissolution of the solid particles into the liquid is also responsible for the bigger discrepancy at

higher efflux concentrations between the pressure drops predicted by Eq. (2) and the experimental data.

Now, calculating the particle's terminal velocity, or free settling velocity, v_t , at which a particle settles in a fluid at rest by the action of gravity (Jacobs, 1991), which for spherical particles in a viscous laminar flow is given by Stokes law

$$v_t = \frac{\rho_l g d_p^2 (s - 1)}{18 \mu_1} \quad (5)$$

where d_p is the diameter of the particle, g is the gravitational acceleration, and $s = \rho_s / \rho_l$ is the ratio of solid to liquid density, and then defining the particle's Reynolds number as (Jacobs, 1991)

$$Re_p = \frac{v_t d_p \rho_l}{\mu_1} \quad (6)$$

we may see that for the prepared mixtures at the various solid concentrations, the settling velocities are in the range 6.26×10^{-4} – 7.67×10^{-4} m s⁻¹, corresponding to $Re_p < 0.2$. At these low values of Re_p , the mixture is Newtonian and the slurry flow is homogeneous (Thomas, 1962; Shook and Roco, 1991), i.e., only very little turbulence is needed to keep the particles homogeneously suspended and therefore mean slurry velocities can be low in this regime.

2.4. Critical deposition velocity

A number of correlations for prediction of the critical velocity in slurry flow also exists in the literature. In slurry transport, the critical deposition velocity is often defined as the velocity below which the first particles start to settle and a bed forms at the bottom of the pipe (Oroskar and Turian, 1980). Here we estimate the critical velocity from the experimentally measured mixture properties using the following correlation (Zandi and Covatos, 1967)

$$v_c^2 = 40 \frac{\rho_m C_w g D (s - 1)}{\rho_s \sqrt{C_d}} \quad (7)$$

where C_d is the drag coefficient given by Haider and Levenspiel (1989)

$$C_d = \frac{24}{Re_p} \left(1 + 0.1806 Re_p^{0.6459}\right) + \frac{0.4251 Re_p}{Re_p + 6880.95} \quad (8)$$

The critical deposition velocities determined this way were found to be in the range between 0.171 m s⁻¹ and 0.66 m s⁻¹. Fig. 4 shows the estimated dependence of the critical deposition velocity on solid concentration by weight. The critical velocity increases slowly with increasing efflux concentration and flow rate. For $C_w = 1\%$, it is just below the minimum slurry flow velocity tested experimentally, while at higher concentrations it increases slightly with the flow rate, as we may see by the gradually increasing separation of the curves toward higher values of C_w . For $C_w \geq 3\%$, the critical deposition velocity is always larger than the

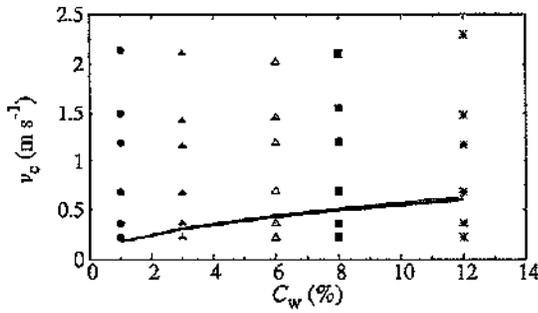


Fig. 4. Estimated critical deposition velocity (solid lines) as a function of the solid concentration per weight for the experimental tests. For comparison, the symbols mark the values of the mean slurry velocity for $C_w = 1\%$ (dots), 3% (filled triangles), 6% (open triangles), 8% (filled squares), and 12% (asterisks).

316 mixture velocity corresponding to the lowest flow rates, meaning
317 that some particles may have deposited at the bottom of the pipe
318 at such slow flows.

319 3. Mixture model equations

320 A two-phase flow algebraic slip mixture (ASM) model
321 (Manninen et al., 1996) is used to describe the isothermal,
322 steady-state, laminar flow of heavy oil slurry through a horizontal
323 pipe. Since for a given flow rate, the properties of the slurry
324 do not change appreciably due to viscous heating and friction
325 with the pipe walls, we may assume that the mixture remains
326 approximately isothermal.

327 In the ASM model the continuity and momentum equations are
328 solved for the mixture of the continuous (liquid) and dispersed
329 (solid) phases. In addition, the volume fraction of the solid parti-
330 cles is obtained by solving the continuity equation for the dis-
331 persed phase, while the momentum equation for the dispersed
332 phase is replaced by an algebraic equation relating the diffusion
333 velocity to the slip velocity under the assumption that the phases
334 achieve local equilibrium over short length scales. The steady-state
335 continuity and momentum equations for the mixture are

$$\nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = 0, \quad (9)$$

336 and

$$\nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \mathbf{v}_m) = -\nabla p_m + \nabla \cdot \mathbf{T}_m + \rho_m \mathbf{g} + \nabla \cdot \left(\sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_{D,\alpha} \mathbf{v}_{D,\alpha} \right), \quad (10)$$

337 respectively, where the subscript m is used to label a mixture
338 quantity, the subscript α represents phase 1 (liquid, $\alpha = 1$) or s
339 (solid, $\alpha = 2$), $n = 2$ is the number of phases, ϕ_α is the volume
340 fraction occupied by each phase, satisfying the saturation condi-
341 tion

$$\sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha = 1, \quad (11)$$

342 ρ_m is the mixture density given by

$$\rho_m = \sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha \rho_\alpha. \quad (12)$$

343 and \mathbf{v}_m is the mass-average velocity defined as

$$\mathbf{v}_m = \frac{1}{\rho_m} \sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_\alpha, \quad (13)$$

344 which represents the velocity of the center of mass. In Eq. (10),
345 $\mathbf{g} = (0, 0, -9.807 \text{ m s}^{-2})$ is the gravitational acceleration vector, p_m is

the pressure of the mixture defined by the relation

$$\nabla p_m = \sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha \nabla p_\alpha, \quad (14)$$

\mathbf{T}_m is the mixture viscous stress tensor defined as

$$\mathbf{T}_m = \mu_m (\nabla \mathbf{v}_m + \nabla \mathbf{v}_m^T), \quad (15)$$

where

$$\mu_m = \sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha \mu_\alpha. \quad (16)$$

is the mixture viscosity, and $\mathbf{v}_{D,\alpha}$ is the diffusion velocity defined
349 as the velocity of phase α relative to the mixture center of mass,
350 i.e.,
351

$$\mathbf{v}_{D,\alpha} = \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_m. \quad (17)$$

352 In practice, the diffusion velocity of the dispersed phase has to be
353 determined from the slip velocity, \mathbf{v}_{sl} , which is defined as the ve-
354 locity of the dispersed (s) phase relative to the velocity of the con-
355 tinuous (i) phase, i.e.,

$$\mathbf{v}_{sl} = \mathbf{v}_s - \mathbf{v}_i. \quad (18)$$

so that

$$\mathbf{v}_{D,s} = \left(1 - \frac{\phi_s \rho_s}{\rho_m} \right) \mathbf{v}_{sl}. \quad (19)$$

357 In the ASM model, the following algebraic relation is prescribed for
358 the slip velocity (Manninen et al., 1996)

$$\mathbf{v}_{sl} = \frac{\tau_s}{f_{drag}} \frac{(\rho_s - \rho_m)}{\rho_s} \mathbf{g}, \quad (20)$$

359 where $\tau_s = \rho_s d_p^2 / (18 \mu_s)$ is the particle relaxation time, d_p is the di-
360 ameter of the particles, μ_s is the viscosity of the solid phase, and
361 f_{drag} is the drag function, which for $Re < 0.2$ is $24/Re$ and for 0.2
362 $< Re \leq 1000$ is given by $24(1 + 0.15Re^{0.687})/Re$ (Shook and Roco,
363 1991), where

$$Re = \frac{\rho_l d_p |\mathbf{v}_{sl}|}{\mu_l}, \quad (21)$$

is the relative Reynolds number.

364 Eqs. (9) and (10) are complemented with the continuity equa-
365 tion for the dispersed phase, which under steady-state conditions
366 can be written as
367

$$\nabla \cdot (\phi_s \rho_s \mathbf{v}_m) = -\nabla \cdot (\phi_s \rho_s \mathbf{v}_{D,s}). \quad (22)$$

368 The diffusion velocity in Eq. (22) must satisfy the kinematic closure
369 relation

$$\sum_{\alpha=1}^n \phi_\alpha \rho_\alpha \mathbf{v}_{D,\alpha} = 0. \quad (23)$$

370 In addition, we assume that the same pressure is shared by
371 the continuous and dispersed phases so that from Eqs. (11) and
372 (14) we have that $p_m = p_\alpha = p$.

4. Numerical modeling

4.1. Numerical methods

375 The governing Eqs. (9) and (10) can be written in the form of
376 the general stationary transport equation

$$\nabla \cdot (\rho_m \psi \mathbf{v}_m - \Gamma \nabla \psi) = \mathbf{G}, \quad (24)$$

377 where ψ may be either 1 or \mathbf{v}_m . For the continuity Eq. (9), $\Gamma = \mathbf{G} =$
378 0, while for the momentum Eq. (10), $\Gamma = \mu_m$ and \mathbf{G} is the sum of

all sources, including the pressure gradient, the gravitational acceleration, and the diffusion stress due to phase slip. These represent a coupled system of four nonlinear equations for the mixture density and velocity that must be solved simultaneously with Eq. (22) for the volume fraction of the dispersed phase. These constitute a final system of five nonlinear equations that are solved using finite-volume techniques (Eymard et al., 2000). As a starting point, the problem domain is decomposed into a finite number of small hexahedral control volumes, each having eight corner nodes and bounded by six quadrilateral cell faces. A cell-centered arrangement is employed where quantities are defined at the center of control volumes.

After having defined the control volumes, the balance Eqs. (22) and (24) are integrated over an arbitrary control volume, V , which after application of the Gauss theorem become

$$\int_S [\phi_s \rho_s (\mathbf{v}_m + \mathbf{v}_{D,s})] \cdot \mathbf{n} dS = 0, \quad (25)$$

$$\int_S (\rho_m \psi \mathbf{v}_m - \Gamma \nabla \psi) \cdot \mathbf{n} dS = \int_V \mathbf{G} dV, \quad (26)$$

respectively, where the surface integrals are over the faces of the control volume, V , and \mathbf{n} is the outward unit vector normal to the cell faces. Since each control volume has $q = 6$ faces, Eqs. (25) and (26) can be written in discrete form as

$$\sum_{q=1}^6 [\phi_{s,q} \rho_{s,q} (\mathbf{v}_{m,q} + \mathbf{v}_{D,s,q})] \cdot \mathbf{n}_q \Delta S_q = 0, \quad (27)$$

$$\sum_{q=1}^6 [\rho_m \psi_q \mathbf{v}_{m,q} - (\Gamma \nabla \psi)_q] \cdot \mathbf{n}_q \Delta S_q = \bar{\mathbf{G}} \Delta V, \quad (28)$$

where the source term on the right-hand side of Eq. (28) is evaluated at cell centers and calculated as volume-weighted averages over the cells. The fluxes of ψ in Eq. (28) are convected through the centers of cell faces by the mixture mass flow rate using a second-order upwind scheme, while those of ϕ_s in Eq. (27) are advected according to relation Eq. (17) by the particle's mass flow rate using the quadratic upstream interpolation scheme for convective kinematics (QUICK) with a $1/8$ factor (Leonard, 1995). In this latter scheme, face values of ϕ_s are estimated by means of a 3-point upstream weighted quadratic interpolation, which results in upwind-biased fluxes that ensure overall second-order accuracy for Eq. (27). Moreover, the spatial derivatives at the faces of control volumes are evaluated using the gradient theorem

$$\int_V \nabla \psi dV = \int_S \psi \mathbf{n} dS, \quad (29)$$

which in discrete form reduces to

$$\bar{\nabla} \psi = \frac{1}{\Delta V} \sum_{q=1}^6 \psi_q \mathbf{n}_q \Delta S_q, \quad (30)$$

where the face values ψ_q are calculated at the centers of cell faces as arithmetic means of the ψ values defined at the centers of adjacent control volumes.

Eqs. (27) and (28) define a set of five algebraic equations for the mixture density, the three components of the mixture velocity, and the volume fraction of the dispersed phase, which connect the information of a single cell to that of its six adjacent cells through their common faces. The resulting system of linear equations can therefore be cast into a matrix equation of the form

$$\mathbf{A} \cdot \Psi = \mathbf{B}, \quad (31)$$

where \mathbf{A} is a sparse, band-diagonal matrix containing the linearization coefficients resulting from the discretization described above,

while Ψ and \mathbf{B} are column vectors containing the solution (ψ and ϕ_s) and the source terms evaluated at the centers of control volumes, respectively. Since the coefficients in Eq. (31) depend on the solution itself, this band diagonal system is solved iteratively using a block Gauss–Seidel iteration based on a coupled algebraic multigrid (AMG) solver (Shu et al., 2002; Huang and Chang, 2003). At each iteration step the coefficients are re-calculated using the current estimates of the solution $\Psi = \Psi_{ijk}$, where the subscripts i, j , and k label the coordinates of the cell centers (x_i, y_j, z_k). To avoid divergent values of the solution after consecutive iterations, an under-relaxation procedure is applied for all dependent variables.

The mixture pressure, p_m , in Eq. (10) must be adjusted such that the mixture velocity, \mathbf{v}_m , satisfies the discrete form of the continuity Eq. (9). The semi-implicit method for pressure-linked equations (SIMPLE) described by Dornaaal and Raithby (1984) was used to resolve the coupling between the mixture pressure and the velocity field. In this method, intermediate mixture velocities are first obtained from Eq. (31) using a guess, $p_{m,ijk}^*$, for the mixture pressure. Corrected values of the mixture pressure and velocity components follow from

$$p_{m,ijk} = p_{m,ijk}^* + p'_{m,ijk}, \quad (32)$$

$$v_{l,m,ijk} = v_{l,m,ijk}^* + v'_{l,m,ijk}, \quad (33)$$

where the subscript l stands for any of the three components of the velocity field. These improved values are then used into the discretized momentum equation to derive the velocity-corrected equations for $v'_{l,m,ijk}$, while substitution of the improved mixture velocities into the discretized continuity equation yields an equation for the corrected pressure $p'_{m,ijk}$. Using the corrected values as new guesses, the procedure is repeated until convergence. The SIMPLE algorithm is implemented within the Gauss–Seidel iteration scheme to get mixture velocities that satisfy the discrete continuity equation every single iteration. The coupled algorithm available as an option in *FLUENT* 6.3 is used to improve the convergence speed. Convergence of the numerical solution after the n th iteration step is achieved when the sum of the residuals over all control volumes is less than 1.0×10^{-4} times the maximum residual.

4.2. Initial parameters

The model consists of a horizontal straight pipe of circular cross-section of diameter $D = 0.0243$ m and length $L = 2.5$ m + L_E , corresponding to the experimentally defined values specified in Section 2. Here L_E is the entrance length of the pipe for which a steady-state laminar flow is fully developed. While, L_E is not well defined for multiphase mixtures, here we estimate it using the correlation formula

$$L_E = 0.065 \text{Re}_1 D, \quad (34)$$

which is valid for laminar, single-phase flows. The resulting values of L_E as employed in the calculations are listed in the last column of Table 2. The densities of de-asphalted oil and asphaltic residues are $\rho_1 = 906.59$ kg m $^{-3}$ and $\rho_s = 1120$ kg m $^{-3}$, respectively, corresponding to a ratio of solid to liquid density $s \approx 1.235$. For solid concentrations in the range 3–25%, Table 1 lists the resulting mixture densities (ρ_m) and mixture viscosities (μ_m) employed in the model simulations. Comparison with the experimental results of Section 2 is provided for solid concentrations of 3, 6, 8, and 12%. For each of these concentrations, the mixture density and viscosity correspond to the experimental values as obtained immediately after mechanical stirring of the slurry at an ambient temperature of about 21°C.

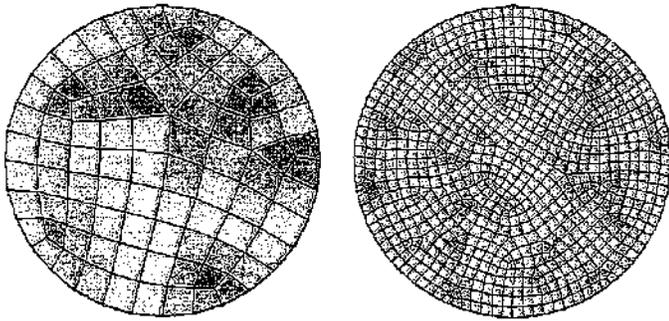


Fig. 5. Cross-sectional view of the multi-block, unstructured mesh filling the horizontal pipe for the lowest ($N_c = 16128$; left) and highest spatial resolutions ($N_c = 1519242$; right).

Table 1
Initial parameters for the slurry model simulations.

C_w (%)	ρ_m (kg m^{-3})	μ_m ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)
3	912.265	0.0581
6	915.705	0.0687
8	918.185	0.0873
12	923.950	0.1130
15	927.290	0.1236
20	933.055	0.1493
25	938.320	0.1750

Table 2
Comparison of the ASM model with the experimental data for varying mean slurry velocities and solid concentrations.

C_w (%)	v_m (m s^{-1})	Re_m	$E(\Delta p_m)_{num}$ (%)	$E(\Delta p_m)_{Darcy}$ (%)	L_E (m)
3	0.218	83	6.84	14.15	0.192
	0.362	138	3.48	14.24	0.319
	0.673	257	2.87	10.72	0.593
	1.160	443	2.72	7.91	1.022
	1.423	543	3.39	2.05	1.253
	2.111	805	5.98	3.12	1.860
6	0.216	70	1.46	23.89	0.190
	0.358	116	4.33	23.88	0.315
	0.688	223	6.55	23.44	0.606
	1.192	386	8.41	20.64	1.050
	1.453	471	7.06	14.25	1.280
	2.023	655	4.48	7.96	1.782
8	0.222	57	8.69	16.95	0.195
	0.360	92	5.02	15.40	0.317
	0.686	175	2.69	15.39	0.604
	1.201	294	2.61	15.92	1.058
	1.550	396	9.24	16.33	1.365
	2.109	539	8.31	9.04	1.860
12	0.222	44	12.80	15.50	0.195
	0.364	72	11.09	13.46	0.321
	0.681	135	8.95	11.84	0.600
	1.173	233	5.68	6.72	1.033
	1.481	294	0.77	6.76	1.305
	2.294	456	2.98	11.74	2.021

483 Mixture velocities of the slurry flow in Table 2 correspond to
 484 the experimentally measured values. For solid concentrations of
 485 15–25% there are no available experimental data, and so the slurry
 486 flow was calculated for mixture velocities between 0.2 and 1.93 m
 487 s^{-1} , which are well within the experimental range. In all model
 488 calculations, the mean particle diameter is set to $d_p = 500 \mu\text{m}$
 489 and a multi-block, unstructured mesh consisting of hexahedral el-
 490 ements is used to discretize the computational pipeline, as shown
 491 in Fig. 5 for the lowest and highest spatial resolutions tried. The

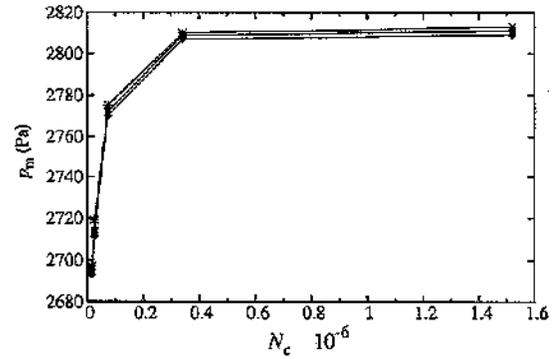


Fig. 6. Dependence of the pressure drop, Δp_m , on the number of mesh elements, N_c , for solid concentrations of 6% (rhombi), 8% (squares), and 12% (asterisks) at a mean slurry velocity of 0.2 m s^{-1} .

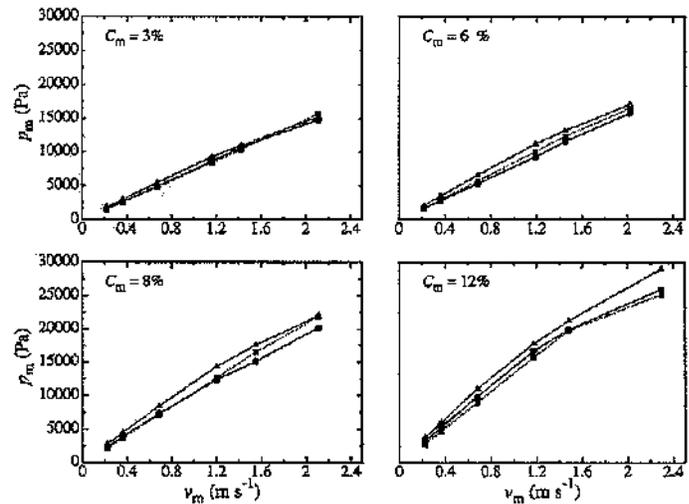


Fig. 7. Comparison of the numerically predicted pressure drops (squares) as a function of the mean slurry velocity with the experimental data (dots) and the predictions from Darcy's law (triangles) for different solid concentrations.

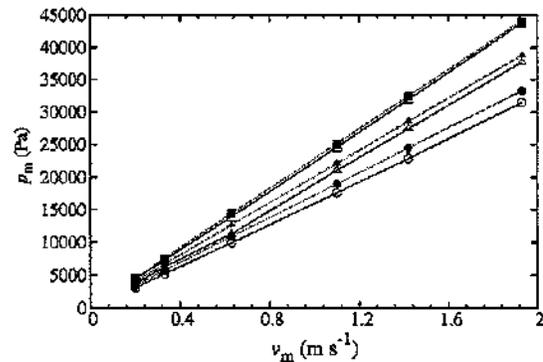


Fig. 8. Numerically predicted pressure drops at solid concentrations per weight of 15% (open circles), 20% (open triangles), and 25% (open squares) compared with the predictions of Eq. (1) for the same concentrations (15% filled dots; 20% filled triangles, 25% filled squares).

492 *Cambit* 2.3 software was used as a preprocessor to generate the
 493 unstructured meshes.

494 **4.3. Boundary conditions**

495 No-slip boundary conditions are imposed on the pipe wall,
 496 while the flow at the inlet section corresponds to a uniform, flat

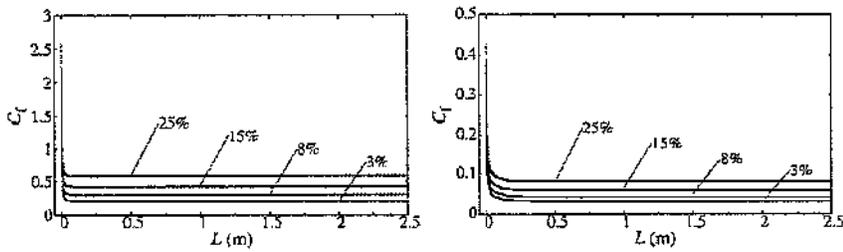


Fig. 9. Slurry skin friction coefficient distribution along the pipe section from the entrance to the fully developed laminar flow at different mean slurry velocities: 0.218 m s⁻¹ for C_w = 3%, 0.222 m s⁻¹ for C_w = 8%, and 0.2 m s⁻¹ for C_w = 15 and 25% (left) and 1.423 m s⁻¹ for C_w = 3%, 1.550 m s⁻¹ for C_w = 8%, and 1.42 m s⁻¹ for C_w = 15 and 25% (right). In each case, only the first 2.5 m of the total pipe length L = 2.5 m + L_d is represented.

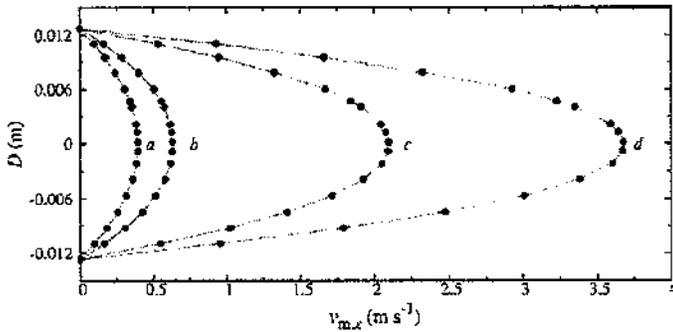


Fig. 10. Axial velocity profiles along the vertical diameter of the pipe at 1 m from the pipe entrance for a solid concentration of 8% and mean slurry velocities of: (a) 0.222 m s⁻¹; (b) 0.360 m s⁻¹; (c) 1.201 m s⁻¹; and (d) 2.109 m s⁻¹.

5. Results and discussion

527

5.1. Comparison with the experimental data

528

To evaluate the performance of the ASM model against the experimental data of Fig. 3, a set of calculations was performed with the same pipeline geometry, solid concentration, particle density, particle diameter, and range of mean velocities. Fig. 7 shows the predicted dependence of the mean pressure drop on the magnitude of the mean slurry velocity as compared with the experimental data for C_w = 3–12%. The pressure drop as calculated using Eq. (1) is also plotted for comparison. The data are now expressed in terms of the mean slurry velocity, v_m, calculated as

529
530
531
532
533
534
535
536
537

$$v_m = \frac{Q_m}{A} \tag{35}$$

where A = πD²/4 is the pipeline cross-sectional area.

538

Although the numerical results are in good agreement with the experimental data, they result in little over-prediction for solid concentrations less than about 8%. The converse occurs for C_w = 12%, where now the ASM model results in under-prediction for all mean slurry velocities. However, in this case the numerical model is seen to fit better the experimental trends. According to Fig. 4, the estimated critical deposition velocities for C_w ≥ 3% are larger than the minimum mean slurry velocity tested experimentally, suggesting that at this flow velocity some particles may have settled at the bottom of the pipe. However, there is no evidence from Fig. 7 of the existence of a transition region for which the slurry distribution becomes heterogeneous as the mean slurry velocity is decreased. In fact, for these highly viscous mixtures, the change of pressure drop with respect to the mean flow velocity appears to exhibit a rather monotonic behavior as indeed occurs for a pure liquid.

539
540
541
542
543
544
545
546
547
548
549
550
551
552
553
554

On the other hand, Darcy's law predicts pressure drops that are larger for all efflux concentrations and flow rates compared to the numerical and experimental results. We evaluate the performance of the ASM model and the Darcy's law in terms of the relative error between the predicted and experimental data. The errors are listed in Table 2 along with the mean velocities, the Reynolds numbers for the mixture, defined as

555
556
557
558
559
560
561

$$Re_m = \frac{v_m D \rho_m}{\mu_m} \tag{36}$$

and the entrance length.

562

Darcy's law produces relative errors compared to the experimental measurements of ~ 2–24%, with the largest deviations generally occurring at lower and moderate mean slurry velocities. For comparison, the ASM model predicts pressure drops that are much closer to the experimental data with relative errors of ~ 0.8–13%. In general, the largest deviations occur for low flow rates and high solid concentrations. A bigger discrepancy between the numerical results and the experimental data may take place when

563
564
565
566
567
568
569
570

profile with prescribed values of the inlet mixture velocities in the above specified range. Outflow boundary conditions are applied at the exit of the pipe, where the pressure is held fixed at a constant value at the outlet.

4.4. Convergence testing

501

Test calculations with varying solid concentrations were conducted at different spatial resolutions to determine convergence of the numerical solutions. As a test case, we choose slurry transportation models with a mean velocity of 0.2 m s⁻¹ and efflux concentrations of 6, 8, and 12%. Fig. 6 shows the dependence of the pressure drop on mesh resolution for all three concentrations. The same pipe geometry and initial parameters of Section 4.2 are used for the test simulations.

502
503
504
505
506
507
508
509

With the coarser (N_c = 16,128 and 25,160 elements) and medium (N_c = 73,836 elements) meshes, the pressure drop rises steeply with increasing N_c. As the resolution is further increased, the pressure drop grows at a progressively slower rate until convergence of the solution is achieved at a mesh resolution of 341,606 elements. At even higher resolutions, the rate of convergence reaches a plateau. In fact, the relative difference between the pressure drop with N_c = 3,41606 and 1,519,242 cells is less than about 0.1% for all concentrations at such low Reynolds numbers, meaning that converged solutions can be achieved using a mesh with a minimum of 341,606 elements. Further test calculations at higher mean slurry velocities (v_m = 1.42 m s⁻¹ for C_w = 12 and 20%, respectively) have also produced converged solutions with 341,606 cells, with relative differences less than ~ 0.2% compared to identical runs using 1519242 cells. Based on this observation, the calculations of next section were carried out using a mesh consisting of 341,606 elements.

510
511
512
513
514
515
516
517
518
519
520
521
522
523
524
525
526

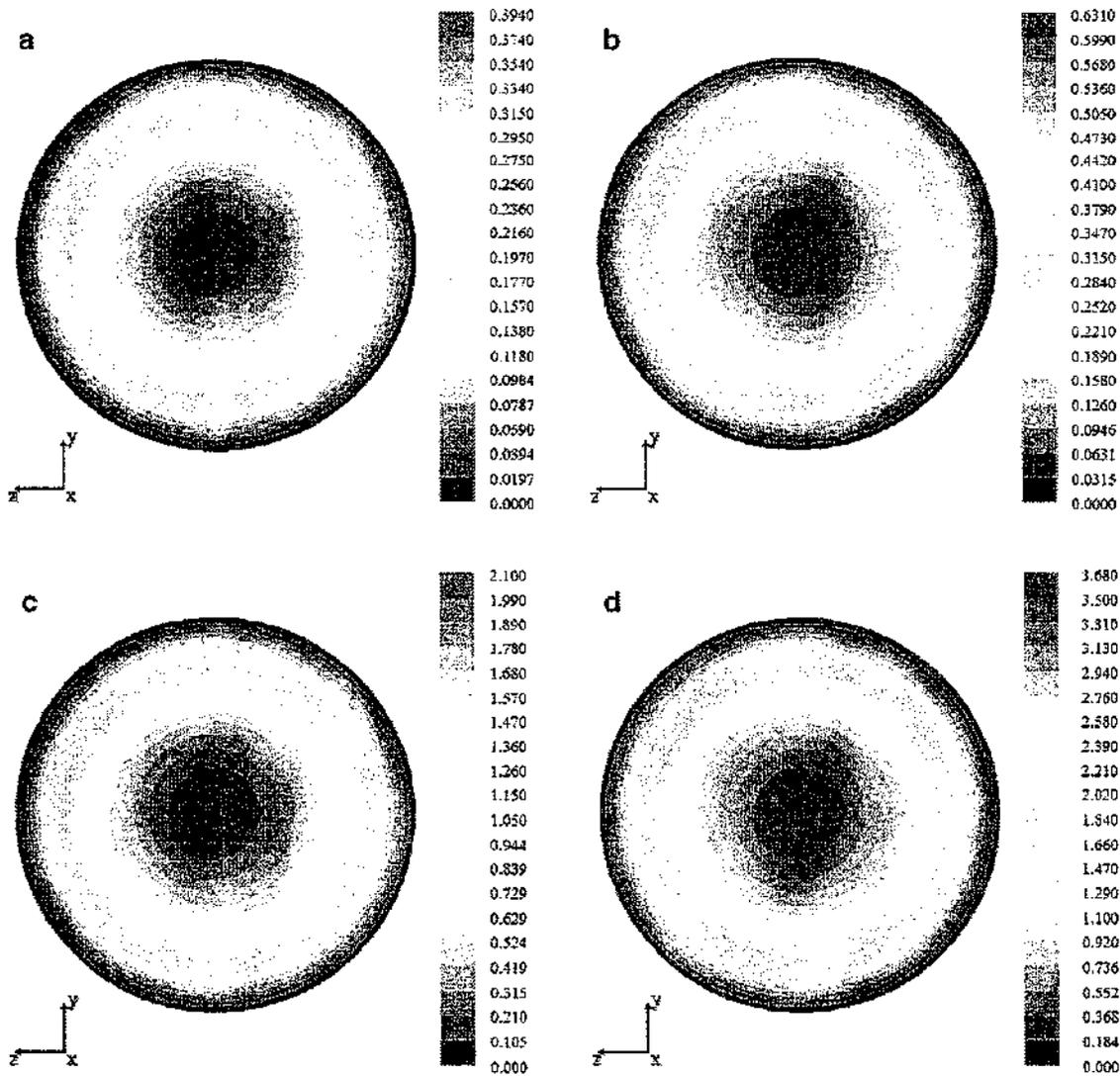


Fig. 11. Velocity contours over the entire cross-sectional area of the pipe at 1 m from the inlet for a solid concentration of 8% and mean slurry velocities of: (a) 0.222 m s⁻¹; (b) 0.360 m s⁻¹; (c) 1.201 m s⁻¹; and (d) 2.109 m s⁻¹. The color scale bars on the left of each isogram indicate the magnitude of the axial slurry velocity in m s⁻¹.

571 the mean slurry velocities are close to the critical deposition velocity. Because of the effects of gravity, the slurry mean velocity may increase gradually from the top to the bottom of the pipe for low mean slurry velocities. This would reduce the available flow area in the pipe. Since the ASM model has no way to account for this change, a larger error would occur, which in general will increase with increasing solid concentrations. However, at higher mean slurry velocities, the density distribution would be more symmetrical and so the central area of the slurry flow would become correspondingly larger, resulting in better agreement with the experiment. On the other hand, at higher solid concentrations the gradual dissolution of particles increases the viscosity of the liquid phase, which also affects the pressure drop. Therefore, strict fitting between the experimental data and the numerical predictions may also be affected by the ASM model having no way to account for the reduction of the particle size by dissolution into the liquid phase.

588 5.2. Pressure drop at higher solid concentrations

589 We extend the numerical analysis to solid concentrations of
590 15, 20, and 25%. Since there are no experimental data avail-

able for these concentrations, we have arbitrarily chosen the
591 range of mean slurry velocities between 0.2 and 1.93 m s⁻¹.
592 According to Eq. (36), by increasing the solid concentration the
593 slurry viscosity also increases (see Table 1), resulting in even
594 lower values of the Reynolds number for the mixture (i.e., 27 ≤
595 Re_m ≤ 368). The entrance length for these models was estimated
596 to range from L_E = 0.176 (for ν = 0.2 m s⁻¹) to 1.70 m (for
597 ν = 1.93 m s⁻¹).
598

The variation of the pressure drop with the mean slurry velocity for these concentrations is depicted in Fig. 8, where the predicted pressure gradients from Eq. (1) are also plotted for comparison. As in Figs. 3 and 7, the use of Darcy's law correlation overpredicts the pressure gradients compared to the numerical solution for all concentrations and flow velocities, with relative deviations of ~ 11–6% (C_w = 15%), ~ 8–3% (C_w = 20%), and ~ 5–1% (C_w = 25%). These results are consistent with the general trends observed by inspection of Table 2, where the relative deviations of the ASM model and the Darcy's law from the experimental data become comparable toward higher solid concentrations. At concentrations as high as 15–25%, the ASM model and Darcy's law still predict a homogeneous, symmetric flow even for mean slurry velocities as low as 0.2 m s⁻¹.

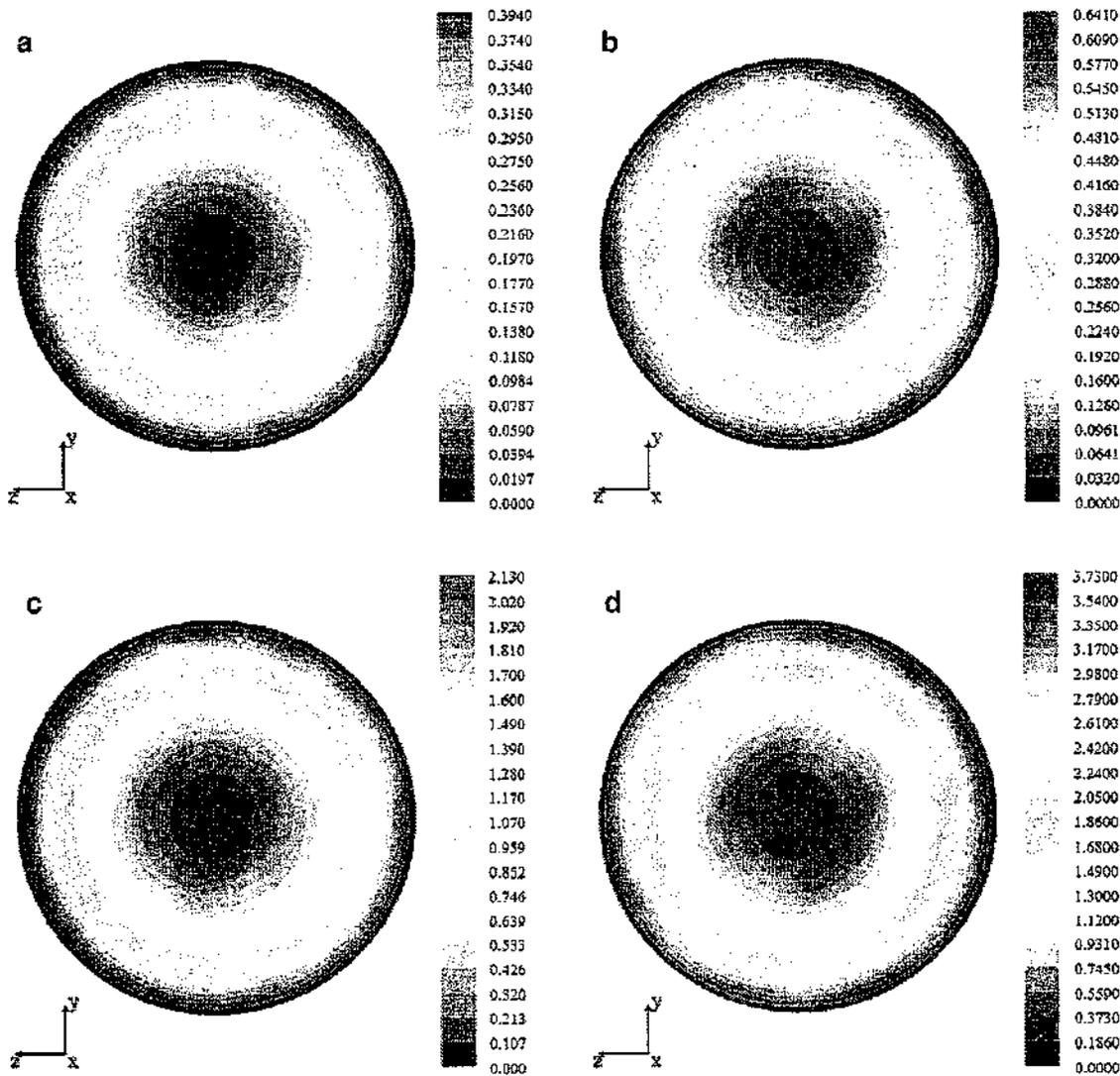


Fig. 12. Same of Fig. 11 but for a solid concentration of 20%. The mean slurry velocity is 0.20 m s⁻¹ in (a), 0.33 m s⁻¹ in (b), 1.10 m s⁻¹ in (c), and 1.93 m s⁻¹ in (d). The color scale bars on the left of each isogram indicates the magnitude of the axial slurry velocity in m s⁻¹.

613 5.3. Skin friction coefficient and slurry velocity profiles

614 The skin friction coefficient is another important parameter be-
 615 cause its accurate estimation is required to determine the skin fric-
 616 tion drag when a body moves relative to a fluid, which in turn
 617 is known to have a negative impact on the performance and effi-
 618 ciency of pipeline devices in the transportation of liquid–solid slur-
 619 ries. In analogy to a single-phase flow, the mean slurry skin friction
 620 coefficient can be calculated as the ratio of the stress wall force per
 621 unit area over the dynamic pressure:

$$C_f = \frac{2\tau_w}{\rho_m v_m^2} \tag{37}$$

622 where τ_w is the wall shear stress written as Peet and Sagaut
 623 (2009)

$$\tau_w = -\mu_m \left(\frac{\partial u_m}{\partial n} \right)_w \tag{38}$$

624 and $(\partial u_m / \partial n)_w$ is the normal derivative of the streamwise mixture
 625 velocity at the pipe wall. For laminar flow, the streamwise veloc-
 626 ity decreases linearly to zero at the wall boundary and so τ_w is
 627 always a positive quantity. For all solid concentrations, the mean
 628 slurry skin friction coefficient drops sharply from the pipe inlet to

a constant value in the fully developed laminar flow region. The
 mean slurry skin friction coefficient distribution along the first 2.5
 m of the pipe section is shown in Fig. 9 for solid concentrations of
 3–25%. By comparing both sequences of plots, we see that the skin
 friction coefficient decreases with increasing mean velocity of the
 slurry. For low mean slurry velocities, the mixture Reynolds num-
 ber is correspondingly low, leading to larger friction. In the fully
 developed laminar flow, the friction coefficient is always less than
 one, meaning that the stress wall force per unit area is smaller
 than the dynamic pressure for this highly viscous mixtures. More-
 over, the mean slurry skin friction coefficient increases with in-
 creasing solid concentration. Hence, higher solid concentrations re-
 sult in larger flow losses and pressure drops in slurry pipeline
 transportation.

The axial slurry velocity profiles along the vertical diameter of
 the pipe are shown in Fig. 10 for an 8% solid concentration at dif-
 ferent reference mean slurry velocities. All profiles were taken at
 a distance of 1 m from the pipe entrance. Similar distributions are
 also obtained for all other concentrations. The profiles look quite
 symmetric about the horizontal centerline of the pipe independ-
 ently of the mean flow rate. Since there is no a significant differ-
 ence between the densities of the solid and liquid phases for the
 slurry flow studied in this paper, gravity plays no role in producing

a concentration gradient between the top and bottom of the pipe. Hence, no distortion of the velocity profiles are produced and the slurry velocity distributions are almost identical along the vertical and horizontal diameters, resembling the axial velocity profiles encountered in the fully developed laminar flow of a pure liquid. This is confirmed by the contour velocity plots of Figs. 11 and 12 for 8% and 20% solid concentrations, respectively, which displays velocity isograms over the pipe cross-sectional area at 1 m from the pipe entrance. Velocity contours around the pipe centerline are not perfectly circular, showing small perimetric asymmetries. However, their almost round shape is indicative of a homogeneous slurry flow.

6. Conclusions

In this paper, we have investigated the slurry flow of heavy oil in a horizontal pipe experimentally and numerically for varying flow velocities of the slurry and efflux concentrations of the solids. Experimental data for the pressure drop as a function of the volumetric flow rate were collected for mean slurry velocities in the interval $\sim 0.2\text{--}2.3\text{ m s}^{-1}$ and five efflux concentrations by weight ranging from 1 to 12%. The slurry employed in the experiments was prepared with de-asphalted oil as the liquid phase and asphaltic residues as the solid phase with mean particle diameters of $500\text{ }\mu\text{m}$. Based on the experimental measurements, the critical deposition velocity for these slurry mixtures was estimated to range from $\approx 0.171\text{ m s}^{-1}$ for $C_w = 1\%$ and $v_m = 0.220\text{ m s}^{-1}$ to $\approx 0.66\text{ m s}^{-1}$ for $C_w = 12\%$ and $v_m = 2.294\text{ m s}^{-1}$. However, for all mean slurry velocities considered, including those which were either close or just below the estimated critical deposition velocity, the flow of these highly viscous mixtures was found to be in a homogeneous regime where the particles are transported with the liquid flow as a suspended load.

Numerical simulations corresponding to the experimentally defined parameters were conducted for efflux concentrations between 3 and 25% and mean slurry velocities coinciding with the experimental values, using an algebraic slip mixture (ASM) model as part of the *FLUENT 6.3* CFD software. The numerically predicted flow pattern and pressure drop are found to be in good agreement with the experimental data. The change of pressure drop with the mean slurry velocity exhibits a rather monotonic behavior and closely follows the experimental trends for all mean slurry velocities, with little over-predictions at concentrations less than 8% and under-predictions for the 12% concentration case. The numerical pressure drops differ from the experimental data by relative errors of $\sim 0.8\text{--}13\%$, with the largest deviations occurring toward low mean slurry velocities and high solid concentrations. At higher efflux concentrations between 15 and 25% no available experimental data exist for comparison. However, the ASM model still predicts a monotonic (almost linear) increase of the pressure drop with the slurry velocity and efflux concentration.

The experimental results have shown that for efflux concentrations $\leq 12\%$, moderate flow rates as the ones tested experimentally do not affect the slurry morphology due to dissolution of the solid particles (asphaltenes) into the liquid phase. This experimental observation is confirmed by the qualitatively fairly good matching between the experimental and numerically predicted pressure drops, where the effects of particle dissolution were not accounted for. Also, the slurry method for transportation of heavy oil in horizontal pipes needs to be further investigated for the interplay between the effects of the temperature increase with increasing flow rate, which acts to lower the viscosity of the mixture, and the transformation of the slurry state into a colloidal state by dissolution of the particles into the liquid phase, which is accelerated by a high temperature, and hence with an increased flow rate, this time causing an increase of the mixture viscosity.

For all solid concentrations considered, the mean slurry skin friction coefficient drops sharply from the pipe inlet to a constant value in the fully developed laminar flow region. In addition, it was found to increase with decreasing slurry velocity and increasing efflux concentration, implying larger flow losses in the pipeline transportation of heavy oil slurries at lower flow velocities and higher solid concentrations. For these homogeneous mixtures, the predicted slurry velocity profiles are quite symmetric about the pipe centerline independently of the mean slurry velocity and concentration, implying that no distortions due to gravity are induced in this type of flows even at low mean slurry velocities of $\sim 0.2\text{ m s}^{-1}$. The homogeneous character of the flow was further assessed by depicting the velocity contours over the cross-sectional area of the pipe, which resulted in circular velocity isograms about the pipe centerline as for the fully developed laminar flow of a pure liquid. While these predictions are difficult to obtain by experimental means, the numerical investigation based on CFD models can provide valuable information on some important characteristics of the slurry flow for this type of slurries.

Acknowledgement

This work is partially supported by ABACUS, CONACYT grant EDOMEX-2011-C01-165873 and by the Departamento de Ciencias Básicas e Ingeniería (CBI) of the Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco (UAM-A) through internal funds. The authors are grateful to the reviewers who have provided a lot of suggestions and recommendations that have improved the content and style of the manuscript.

References

- Assefa, K.M., Kaushal, D.R., 2015. A comparative study of friction factor correlations for high concentrate slurry flow in smooth pipes. *J. Hydrol. Hydromech.* 63, 13–20. 744–745
- Bannwart, A.C., 2001. Modeling aspects of oil–water core annular flows. *J. Petrol. Sci. Eng.* 32, 127–143. 746–748
- Beerens, J.C., Ooms, G., Pourquie, M.J.B.M., Westerweel, J., 2014. A comparison between numerical predictions and theoretical and experimental results for laminar core-annular flow. *AIChE J.* 60, 3046–3056. 749–750
- Bensakhria, A., Peysson, Y., Antonini, G., 2004. Experimental study of the pipeline lubrication for heavy oil transport. *Oil Gas Sci. Technol.—Rev. IFP* 59, 523–533. 751–752
- Bird, R.B., Stewart, W.E., Lightfoot, E.N., 2002. *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons, New York, USA. 753–754
- Burlutskiy, E., 2012. Numerical analysis of oil–water transport in horizontal pipes using 1D transient mathematical model of thermal two-phase flows. *Int. J. Math. Comput. Phys. Electr. Comput. Eng.* 6, 241–245. 755–756
- Carravetta, A., Conte, M.C., Pecarotta, O., Martino, R., 2016. Performance of slurry flow models in pressure pipe tests. *J. Hydraul. Eng.* 142, 06015020. 757–758
- Crivelaro, K.C.O., Damascena, Y.T., Andrade, T.H.F., Lima, A.G.B., Neto, S.R.F., 2009. Numerical Simulation of Heavy Oil Flows in Pipes Using the Core-annular Flow Technique. *WIT Transactions on Engineering Sciences*, Vol. 63. WIT Press, Southampton, UK, pp. 193–203. 759–760
- Danish, M., Kumar, S., Kumar, S., 2011. Approximate explicit analytical expressions of friction factor for flow of Bingham fluids in smooth pipes using Adomian decomposition method. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.* 16, 239–251. 761–762
- Dormaal, J., Raithby, G.D., 1984. Enhancement of the simple method for predicting incompressible flow problems. *J. Numer. Heat Transf.* 7, 147–158. 763–764
- Doron, P., Barnea, D., 1996. Flow pattern maps for solid–liquid flow in pipes. *Int. J. Multiphase Flow* 22, 273–283. 765–766
- Doron, P., Granica, D., Barnea, D., 1987. Slurry flow in horizontal pipes—experimental and modeling. *Int. J. Multiphase Flow* 13, 535–547. 767–768
- Eesa, M., Barigou, M., 2008. Horizontal laminar flow of coarse nearly-neutrally buoyant particles in non-Newtonian conveying fluids: CFD and PEPT experiments compared. *Int. J. Multiphase Flow* 34, 997–1007. 769–770
- Eesa, M., Barigou, M., 2009. CFD investigation of the pipe transport of coarse solids in laminar power law fluids. *Chem. Eng. Sci.* 64, 322–333. 771–772
- Eymard, R., Gallouët, T., Herbin, R., 2000. Finite volume methods. *Handbook of Numerical Analysis* vol. 7, 713–1018. *Solution of Equation in \mathbb{R}^n (Part 3)*, Techniques of Scientific Computing (Part 3). 773–774
- Falcimaigne, J., 2011. Surface Pumps for Transport: Selection and Limitations. In: Huc, A.-Y. (Ed.), *Heavy Crude Oils: From Geology to Upgrading: An Overview* chapter 14. Editions Technip, Paris, France, pp. 215–223. 775–776
- Gadelha, A.J.F., de Farias Neto, S.R., Swarnakar, R., de Lima, A.G.B., 2013. Thermohydrodynamics of core-annular flow of water, heavy oil and air using cfx. *Adv. Chem. Eng. Sci.* 3, 37–45. 777–778

- 788 Gillies, R.G., Shook, C.A., 2009. Deposition velocity correlation for water slurries. 818
 789 Can. J. Chem. Eng. 69, 1225–1227. 819
- 790 Haider, A., Levenspiel, O., 1989. Drag coefficient and terminal velocity of spherical 820
 791 and nonspherical particles. Powder Technol. 58, 63–70. 821
- 792 Hinkle, A., Shin, E.-J., Liberatore, M.W., Herring, A.H., Batzle, M., 2010. Correlat- 822
 793 ing the Chemical and Physical Properties of a Set of Heavy Oils from Around 823
 794 the World. SEG Geophysical Developments Series No. 13. Society of Exploration 824
 795 Geophysicists, Tulsa, OK, USA, pp. 89–97. 825
- 796 Huang, Z., Chang, Q., 2003. Gauss–Seidel-type multigrid methods. J. Comput. Math. 826
 797 21, 421–434. 827
- 798 Jacobs, B.E.A., 1991. Design of Slurry Transport Systems. Elsevier Science Publishers, 828
 799 Barking, England. 829
- 800 Kaushal, D.R., Sato, K., Toyota, T., Funatsu, K., Tomita, Y., 2005. Effect of particle 830
 801 size distribution on pressure drop and concentration profile in pipeline flow of 831
 802 highly concentrated slurry. Int. J. Multiphase Flow 31, 809–823. 832
- 803 Kaushal, D.R., Thingas, T., Tomita, Y., Kuchii, S., Tsukamoto, H., 2012. CFD modeling 833
 804 for pipeline flow of fine particles at high concentration. Int. J. Multiphase Flow 834
 805 43, 85–100. 835
- 806 Kaushal, D.R., Tomita, Y., 2002. Solids concentration profiles and pressure drop in 836
 807 pipeline of multisized particulate slurries. Int. J. Multiphase Flow 28, 1697–1717. 837
- 808 Kaushal, D.R., Tomita, Y., Dighade, R.R., 2002. Concentration at the pipe bottom at 838
 809 deposition velocity for transportation of commercial slurries through pipeline. 839
 810 Powder Technol. 125, 89–101. 840
- 811 Lakehal, D., 2013. Advanced simulation of transient multiphase flow & flow assur- 841
 812 ance in the oil & gas industry. Can. J. Chem. Eng. 9999, 1–14. 842
- 813 Leonard, B.P., 1995. Order of accuracy of quick and related convection–diffusion 843
 814 schemes. Appl. Math. Model. 19, 640–653. 844
- 815 Manninen, M., Taivassalo, V., Kallio, S., 1996. On the Mixture Model for Multiphase 845
 816 Flow. VTT Publications 288, Espoo, Finland. 846
- 817 Moody, L.F., 1944. Friction factors for pipe flow. Trans. ASME 66, 671–684. 847
- Morrison, F.A., 2013. An Introduction to Fluid Mechanics. Cambridge University 818
 Press, New York, USA. 819
- Oroskar, A.R., Turian, R.M., 1980. The critical velocity in pipeline flow of slurries. 820
 AIChE J. 26, 550–558. 821
- Peet, Y., Sagaut, P., 2009. Theoretical prediction of turbulent skin friction on geo- 822
 metrically complex surfaces. Phys. Fluids 21, 105105. 823
- Puri, K., 2014. An investigation of solid–liquid flow distribution through slurry 824
 pipeline. Thapar University, Patiala, India (M. Eng. thesis). See also URL http://cid.mace.manchester.ac.uk/sph/SPH_PhDs. 825
- Saniere, A., Hénaut, I., Argillier, J.F., 2004. Pipeline transportation of heavy oils, a 826
 strategic, economic and technological challenge. Oil Gas Sci. Technol.–Rev. IFP 827
 59, 455–466. 828
- Shook, C.A., Roco, M.C., 1991. Slurry Flow: Principles and Practice. Butterworth- 829
 Heinemann, Boston. 830
- Shu, S., Xu, J., Xiao, Y., Zikatanov, L., 2002. Algebraic Multigrid Method on Lattice 832
 Block Materials. Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, USA, pp. 289– 833
 307. 834
- Skudarnov, P.V., Lin, C.X., Ebadian, M.A., 2004. Double-species slurry flow in a hori- 835
 zontal pipeline. J. Fluids Eng. 126, 125–132. 836
- Swamee, P.K., Aggarwal, N., 2011. Explicit equations for laminar flow of Bingham 837
 plastic fluids. J. Petrol. Sci. Eng. 76, 178–184. 838
- Thomas, D.G., 1962. Transport characteristics of suspensions: part VI. Friction loss 839
 of concentrated–floculated suspensions in turbulent flow. AIChE J. 8, 266–271. 840
- Turian, R.M., Hsu, F.-L., Ma, T.-W., 1987. Estimation of the critical velocity in pipeline 841
 flow of slurries. Powder Technol. 51, 35–47. 842
- Turian, R.M., Yuan, T.-F., 1977. Flow of slurries in pipelines. AIChE J. 23, 232–243. 843
- Vlasak, P., Chara, Z., 2011. Effect of particle size distribution and concentration on 844
 flow behavior of dense slurries. Particulate Sci. Technol.: Int. J. 29, 53–65. 845
- Zandi, I., Govatos, G., 1967. Heterogeneous flow of solids in pipelines. J. Hydraul. Div. 846
 ASCE 93 (HY3), 145–159. 847

ANEXO 4

PUBLICACIÓN DE ARTICULO INTERNACIONAL

Science Citation Index

JOURNAL: Applied Mathematical Modelling.

Zambrano, H. ; Sigalotti, LDG., Peña-Polo, F. y Trujillo, L. (2015). Turbulent models of oil flow in a circular pipe with sudden enlargement. Applied Mathematical Modelling, 39(21), 6711-6724.



Contents lists available at ScienceDirect

Applied Mathematical Modelling

journal homepage: www.elsevier.com/locate/apm



Turbulent models of oil flow in a circular pipe with sudden enlargement

Héctor Zambrano^a, Leonardo Di G. Sigalotti^{b,c,*}, Franklin Peña-Polo^c, Leonardo Trujillo^c

^a Instituto Venezolano Tecnológico del Petróleo, PDVSA-Intevep, Urbanización El Tambor, Los Teques 1201, Estado Miranda, Venezuela

^b Área de Física de Procesos Irreversibles, Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco (UAM-A), Av. San Pablo 180, 02200 México D.F., Mexico

^c Centro de Física, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, IVIC, Apartado Postal 20632, Caracas 1020-A, Venezuela

ARTICLE INFO

Article history:

Received 30 June 2014

Received in revised form 20 January 2015

Accepted 5 February 2015

Available online xxx

Keywords:

Computational fluid dynamics

k - ϵ model

Sudden-expansion flow

Turbulent flow

ABSTRACT

We describe three-dimensional calculations of oil flow in a circular pipe with an abrupt expansion, using the commercial code *Fluent* 6.3, to evaluate the performance of three turbulence closures: the standard k - ϵ , the Realizable k - ϵ , and the RNG-based k - ϵ models. The effect of near-wall modelling in any of these closures is also investigated using the Standard Wall Functions (SWF) and the Enhanced Wall Treatment (EWT) approaches. The axial mean velocity, the turbulence kinetic energy, and the reattachment length are compared among the different models and with experimental measurements of oil flow through a 90° diffuser. Based on the standard deviation of the numerical profiles from the experimental data, we find that on average the RNG k - ϵ model gives slightly better results regardless of the near-wall treatment. However, the Realizable k - ϵ closure gives standard deviations comparable to the RNG k - ϵ model when the EWT approach is implemented. Concerning the reattachment length, the standard k - ϵ and the RNG k - ϵ models match very well the experimental value when used in combination with the SWF approach, while the best prediction with the EWT method is provided by the RNG k - ϵ closure.

© 2015 Elsevier Inc. All rights reserved.

1. Introduction

The turbulent flow that develops when a liquid (or gas) passes through an abrupt enlargement in a piping system is a common occurrence in numerous engineering and industrial applications. This geometry is typical of piping junctions and expansion joints. However, it also appears in many other practical settings and devices, ranging from air-conditioning ducts [1] to dump combustors [2,3]. In biomedical applications, it is relevant as a model of flow through arterial stenoses [4–6]. At a more fundamental level, this primitive geometry has served as a prototype for understanding the dynamics of flow separation. As the fluid flows through the expansion, it gives rise to an increase in static pressure at the expense of a drop in the flow kinetic energy. At the expanded section, a core forms with a relatively flat velocity profile, which spreads out behind the expansion and separates from the remaining fluid by a surface of separation. At moderate to high Reynolds numbers (Re), the surface of separation becomes unstable and generates turbulent eddies in a recirculation or free-mixing stall region, with

* Corresponding author at: Área de Física de Procesos Irreversibles, Departamento de Ciencias Básicas, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco (UAM-A), Av. San Pablo 180, 02200 México D.F., Mexico.

E-mail addresses: hectorj.zambrano@gmail.com (H. Zambrano), leonardo.sigalotti@gmail.com (L.D.G. Sigalotti), franklin.pena@gmail.com (F. Peña-Polo), leonardo.trujillo@gmail.com (L. Trujillo).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.apm.2015.02.028>

0307-904X/© 2015 Elsevier Inc. All rights reserved.

the eddies developing and gradually disappearing. This essentially occurs because the fluid flows against an adverse pressure gradient, which constrains the fluid particles to follow a reverse path near the wall of the larger pipe just ahead of the step height. Therefore, immediately downstream of the expansion, the flow can be considered as a jet within an annular recirculation region, which expands radially over the larger pipe section until reattachment to the pipe wall occurs. In particular, for incompressible, fully developed turbulent flow in circular pipes, flow reattachment takes place at lengths from the enlargement of 6 to 9 times its step height [7], from which turbulent pipe flow is recovered [8].

Previous experimental and computational work on sudden-expansion flows have focused primarily on the steady, laminar flow regime and the determination of the separation and subsequent reattachment [9–14]. The main conclusion drawn from these studies is that the reattachment length is a linear function of Re in the steady regime, with the proportionality factor depending on whether the flow at the inlet corresponds to a flat or a fully developed parabolic velocity profile [15]. Flow separation and reattachment at high Re in the turbulent regime have also been investigated experimentally in a flow through an axisymmetric sudden expansion [16]. In addition, experimental measurements of the velocity field for moderate and relatively high Re have been carried out by a number of authors [10,17–22]. These measurements have shown that the separation region contains large velocity gradients and correspondingly high shear coupled with an adverse pressure gradient, while back flow velocities in the recirculation region are on the order of 10% of the mean velocity at the expanding section. The presence of the solid boundary inhibits entrainment of the fluid, so that an unsteady eddy structure is established further downstream. In general, it is difficult to obtain accurate quantitative turbulence measurements in this region because the mean velocities are usually small and the turbulence intensities are large.

It is well-known that plane sudden expansions of high aspect ratios ($\chi = W/H > 10$, with W being the external duct width and H being the step height) and expansion ratios, $D_2/D_1 > 1.5$ (with D_2 and D_1 being the inner outlet and inlet pipe diameters) produce asymmetric flows in which the pair of recirculating eddies are no longer symmetrically disposed about the central plane of the flow [23,24]. The midplane symmetry of the flow is known to be broken at a pitchfork bifurcation as Re is increased above a critical value [25,26]. Further experimental evidence indicates that steady-state breaking of the symmetry occurs at a critical $Re = 1139 \pm 10$ for flow through a 1:2 sudden axisymmetric expansion [27]. Recent numerical simulations of flow in open channels with sudden expansions show that the numerical model does not reproduce the experimentally observed asymmetry at supercritical Re unless the wall roughness coefficient in the inlet is set to 50% higher than in the outlet [28]. It has been suggested that the onset of asymmetry is likely to be driven by small imperfections in the experiments. This possibility has begun to be explored numerically by perturbing either the incoming flow or the geometry [29]. For example, a transient linear growth analysis of flow through a sudden expansion in a circular pipe has shown that the flow is sensitive to small perturbations in the range of Re covered in the experiments [30]. On the other hand, recent numerical bifurcation studies predict the onset of a steady symmetry-breaking bifurcation at $Re \sim 5000$, far beyond the experimental estimate of $Re \sim 1139$ [31].

Most recent numerical simulations of sudden-expansion flows have mainly focused on examining the accuracy of different turbulence-closure models to predict the experimental observations on the velocity field, the turbulence kinetic energy, the recirculation length, and the pressure variation [32–38]. Here we perform three-dimensional calculations of oil flow through an abrupt expansion in a circular pipe with the aid of the commercial CFD code *Fluent 6.3*. In order to offer a basis for the choice of a type of turbulence model for industrial and engineering purposes, we consider three different turbulence closures: the standard $k-\epsilon$ [39], the Realizable $k-\epsilon$ [40], and the RNG $k-\epsilon$ models [41] with two different near-wall treatments available in *Fluent*: the Standard Wall Functions (SWF) and the Enhanced Wall Treatment (EWT). The performance of these three turbulence models is investigated and their predictions for the axial mean velocity and the turbulence kinetic energy are compared among themselves and with experimental data of oil flow through a 90° diffuser [21]. The structure of the paper is as follows. The basic equations and flow geometry are given in Section 2. Section 3 describes the computational details and the validation of the calculations against a mesh-convergence test. The results are discussed in Section 4 and the conclusions are given in Section 5.

2. Governing equations and flow geometry

In this paper, we analyze numerically the three-dimensional, turbulent flow that is generated when an oily fluid passes through an abrupt pipe enlargement. We consider stationary turbulence and assume that the flow remains isothermal and incompressible. This type of flow can be described by the well-known Reynolds averaged Navier–Stokes (RANS) equations, which in tensor notation can be written as

$$\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\rho \bar{v}_j \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \overline{v'_i v'_j}), \quad (2)$$

where \bar{v}_i is the mean velocity component in the x_i -direction, \bar{p} is the mean static pressure, ρ is the fluid density, g_i is the gravitational acceleration component in the x_i -direction, μ is the fluid dynamic viscosity, and the time-averaged product $\overline{v'_i v'_j}$ is the Reynolds stress, where v'_i denotes the fluctuating velocity in the x_i -direction. We solve the above equations in

Cartesian coordinates, where $x_i = (x, y, z)$ and $g_i = (0, 0, -g)$, for a horizontal pipe of circular cross-section aligned with the x -direction, as shown in Fig. 1. The Reynolds stress tensor is linked to the characteristics of the mean flow by means of the Boussinesq eddy viscosity approximation

$$-\rho \overline{v_i v_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho k \delta_{ij}, \quad (3)$$

where k is the turbulence kinetic energy, δ_{ij} is the Kronecker delta, and μ_t is the eddy viscosity defined by the relation

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon}, \quad (4)$$

where C_μ is a model constant for the estimation of the eddy viscosity and ϵ is the dissipation rate of the turbulence kinetic energy. Inserting the approximation (3) into Eq. (2), we obtain the more compact form of the RANS equations

$$\rho \bar{v}_j \frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{p} + \frac{2}{3} \rho k \right) + \rho g_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) \right], \quad (5)$$

where $\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t$ is the effective viscosity.

Eqs. (1) and (5) must be coupled with a suitable two-equation, turbulence-closure model to determine k and ϵ . Here we examine three different closures: the standard k - ϵ [39], the Realizable k - ϵ [40], and the RNG k - ϵ models [41].

2.1. The standard k - ϵ model

The standard k - ϵ model is valid when the flow is fully turbulent and the effects of molecular viscosity are negligible. It is based on the following transport equations [39]:

$$\frac{\partial(\rho k \bar{v}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + G_k + G_b - \rho \epsilon - Y, \quad (6)$$

$$\frac{\partial(\rho \epsilon \bar{v}_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right] + \Gamma, \quad (7)$$

where

$$\Gamma = C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} (G_k + C_{3\epsilon} G_b) - C_{2\epsilon} \rho \frac{\epsilon^2}{k}. \quad (8)$$

In these equations, G_k is the turbulence production rate due to the mean velocity gradients, G_b is the turbulence production rate due to buoyancy, and Y is the dilatation dissipation term accounting for the effects of compressibility on turbulence, defined as

$$G_k = \frac{1}{2} \mu_t \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right)^2, \quad G_b = -g_i \frac{\mu_t}{\rho \text{Pr}_t} \frac{\partial \rho}{\partial x_i}, \quad Y = 2 \rho c \frac{k}{c_s^2}, \quad (9)$$

respectively, where Pr_t is the turbulence Prandtl number, which is set to 0.85, and $c_s^2 = \gamma RT$ is the speed of sound, where γ is the compressibility factor, R is the specific gas constant, and T is the temperature. The parameter $C_{3\epsilon}$ is given by $C_{3\epsilon} = \tanh[\bar{v}_x/\bar{v}_\perp]$, where \bar{v}_\perp is the component of the mean flow velocity perpendicular to the gravitational acceleration. The default values of the other empirical constants in Eqs. (4) and (6)–(8) are: $C_\mu = 0.09$, $C_{1\epsilon} = 1.44$, $C_{2\epsilon} = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, and $\sigma_\epsilon = 1.3$.

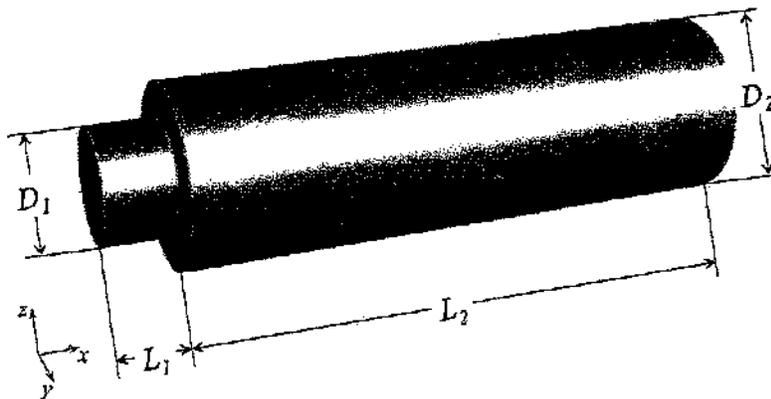


Fig. 1. Geometry of the expanding pipe. The diameters and lengths of the inlet and outlet sections of the pipe are indicated.

2.2. The Realizable k - ϵ model

This model differs from the standard k - ϵ model in that the transport equation for the dissipation rate ϵ is derived from an exact equation for the transport of the mean-square vorticity fluctuation and that C_μ in Eq. (4) is no longer a constant [40]. Compared with other closure models, this method is likely to provide a superior performance for flows involving rotation, boundary layers under strong adverse pressure gradients, separation, and recirculation as occurs in a sudden expansion.

The transport equations have the same form of Eqs. (6) and (7), except that now the source term Γ is given by

$$\Gamma = \rho C_1 S \epsilon - \rho C_2 \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} + C_{1\epsilon} \frac{\epsilon}{k} C_{3\epsilon} G_b, \quad (10)$$

where $\nu = \mu/\rho$ is the fluid kinematic viscosity and

$$C_1 = \max\left(0.43, \frac{\eta}{\eta + 5}\right), \quad \eta = S \frac{k}{\epsilon}, \quad S = (2S_{ij}S_{ij})^{1/2}, \quad (11)$$

where η is the expansion parameter (i.e., the ratio of the turbulent to the mean-strain time scales) and S_{ij} is the mean strain rate of the flow given by

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right). \quad (12)$$

The parameter C_μ in Eq. (4) is now defined according to

$$C_\mu = \left(4.04 + \frac{kU}{\epsilon} \sqrt{6} \cos \phi \right)^{-1}, \quad (13)$$

where

$$U = (S_{ij}S_{ij} + \Omega_{ij}\Omega_{ij})^{1/2}, \quad (14)$$

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{v}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \bar{v}_j}{\partial x_i} \right) - \epsilon_{ijk} \omega_k, \quad (15)$$

$$\phi = \frac{1}{3} \cos^{-1} \left(\sqrt{6W} \right), \quad (16)$$

$$W = \frac{S_{ij}S_{jk}S_{kd}}{(S_{ij}S_{ij})^{3/2}}, \quad (17)$$

with Ω_{ij} being the mean vorticity tensor in an inertial frame with respect to one rotating with an angular velocity ω_k and ϵ_{ijk} is the Levi-Civita symbol in three dimensions. The constants involved in the Realizable k - ϵ model are: $C_{1\epsilon} = 1.44$, $C_2 = 1.9$, $\sigma_k = 1.0$, and $\sigma_\epsilon = 1.2$.

2.3. The RNG k - ϵ model

The RNG-based k - ϵ model is derived from the instantaneous Navier-Stokes equations, using renormalization group theory [41]. However, it has a similar form to Eqs. (6)–(8) except that now

$$\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \rightarrow \alpha_k \mu_{\text{eff}}, \quad \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \rightarrow \alpha_\epsilon \mu_{\text{eff}}, \quad C_{2\epsilon} \rightarrow 1.68 + \frac{C_\mu \eta^3 (1 - \eta/\eta_0)}{1 + \beta \eta^3}, \quad (18)$$

where $\eta = Sk/\epsilon$, $\eta_0 = 4.38$, and $\beta = 0.012$. The inverse effective Prandtl numbers, α_k and α_ϵ , are calculated by solving the analytically derived equation

$$\left| \frac{\alpha - 1.3929}{0.3929} \right|^{0.6321} \left| \frac{\alpha + 2.3929}{3.3929} \right|^{0.3679} = \frac{\mu}{\mu_{\text{eff}}}, \quad (19)$$

while the effective viscosity, μ_{eff} , is calculated by integrating the differential equation

$$d \left(\frac{\rho^2 k}{\sqrt{\epsilon \mu}} \right) = \frac{1.72 (\mu_{\text{eff}}/\mu)}{\sqrt{(\mu_{\text{eff}}/\mu)^3 - 1 + C}} d \left(\frac{\mu_{\text{eff}}}{\mu} \right), \quad (20)$$

where $C \approx 100$. This gives a more accurate description of how the effective turbulent transport varies with the eddy scale, thus allowing the model to better handling low-Re and near-wall flows than the standard and Realizable k - ϵ closures. Another difference between the RNG k - ϵ and the standard k - ϵ model is in the definition of $C_{2\epsilon}$ [42], which improves the

accuracy for rapidly strained flows. The constant $C_{1\epsilon}$ is set equal to 1.42, while $C_{3\epsilon}$ is determined as in the standard $k-\epsilon$ and the Realizable $k-\epsilon$ models.

2.4. Boundary conditions

The sudden expansion geometry consists of a circular pipe of length L_1 and diameter D_1 connected to a larger pipe of length L_2 and diameter D_2 , as depicted in Fig. 1. A uniform velocity and values of k and ϵ are prescribed at the inlet according to [43]

$$v_{in} = (v_{0,x}, 0, 0), \quad k_{in} = 0.003|v_{in}|^2, \quad \epsilon_{in} = C_\mu \frac{k_{in}^{3/2}}{0.003R_1}, \quad (21)$$

where R_1 is the radius of the inlet pipe. At the outlet, the normal gradients of all variables (except the pressure) are set equal to zero, corresponding to a fully developed flow condition. No-slip boundary conditions apply at the pipe wall for the velocity.

The $k-\epsilon$ models are not suited for zones close to the pipe wall, where Re is rather low and viscous effects are dominant, and so they cannot address the viscous sublayer directly. A complete treatment of the boundary conditions would then require to prescribe the wall shear stresses and the values of k and ϵ at and near the wall. In order to do this, the SWF approach [39], which is provided as an option in *Fluent* 6.3, was devised. For high Re , the SWF option is adequate because the viscosity-affected near-wall region, where the variables change most rapidly, does not need to be resolved. However, for low- Re flows the near-wall region must be solved all the way down to the wall in order to obtain an accurate description of the gap between the no-slip boundaries and the region of turbulent flow. To cope with this requirement, the EWT approach, which specifies a near-wall zone, where the eddy viscosity is calculated by means of a one-equation model [44], was also implemented.

3. Computational details

3.1. Numerical methods

The transport Eqs. (5)–(7) have the common conservation-law form

$$\frac{\partial(\rho \bar{v}_i \phi)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Lambda \frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right) + F_i, \quad (22)$$

where the dependent variable ϕ can stand for the mean velocity components or the turbulence parameters k and ϵ . If we set $\phi = 1$ and $\Lambda = F_i = 0$, Eq. (22) reduces to the conservative form of Eq. (1) for the mass flow rate

$$\frac{\partial(\rho \bar{v}_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (23)$$

For the RANS equations, Λ represents the effective viscosity, while the source term F_i includes the pressure gradient, the gravitational acceleration, and the isotropic contribution of the Reynolds stress. This coupled system of nonlinear equations are solved simultaneously with the two turbulence-closure equations using the method of finite volumes [45]. To do so, the computational domain is subdivided into a number of small hexahedral cells (or control volumes), each consisting of eight corner nodes and six quadrilateral faces. All variables are computed at the geometrical centre of control volumes and the discretization equations are derived by integrating Eqs. (22) and (23) over the volume ΔV of each computational cell so that in vector notation we have [46]

$$\int_S \rho \bar{\mathbf{v}} \phi \cdot \mathbf{n} dS = \int_S \Lambda \nabla \phi \cdot \mathbf{n} dS + \int_V F dV, \quad (24)$$

$$\int_S \rho \bar{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{n} dS = 0, \quad (25)$$

where the surface integrals are over the faces of the control volume and \mathbf{n} is the unit vector normal to the cell surfaces. Since for a hexahedral mesh, each control volume has $m = 6$ faces, Eqs. (24) and (25) can be written in discrete form as

$$\sum_{m=1}^6 \rho_m \bar{\mathbf{v}}_m \phi_m \cdot \mathbf{n}_m S_m = \sum_{m=1}^6 (\Lambda \nabla \phi)_m \cdot \mathbf{n}_m S_m + \bar{F} \Delta V, \quad (26)$$

$$\sum_{m=1}^6 \rho_m \bar{\mathbf{v}}_m \cdot \mathbf{n}_m S_m = 0, \quad (27)$$

so that each cell centre is allowed to communicate with six neighbouring cell centres through the faces of the control volume. This demands evaluating the flux of ϕ convected by the mass flow rate at the centre of cell faces, which is here performed using the quadratic upstream interpolation scheme for convective kinematics (QUICK) with a 1/8 factor [47,48]. This scheme is based on estimating face values using a 3-point upstream weighted quadratic interpolation through grid values of ϕ located at the centre of control-volume cells, resulting in upwind-biased fluxes that ensures overall second-order accuracy for the discretization scheme [48]. Since it is formally a third-order approximation for the fluxes, it gives marginally better results than conventional linear upwind difference schemes based on one-sided 3-point differences. The source term \bar{F} in Eq. (26) is evaluated at cell centres and is calculated as a volume-weighted average over the entire cell. In addition, the spatial derivatives at the faces of control volumes are evaluated using the gradient theorem

$$\int_V \nabla \phi dV = \int_S \phi n dS, \tag{28}$$

so that for a single control volume we have that

$$\bar{\nabla} \phi = \frac{1}{\Delta V} \sum_{m=1}^6 \phi_m \mathbf{n}_m S_m, \tag{29}$$

where now the face values ϕ_m are calculated as arithmetic means of the ϕ values located at the centres of adjacent cells.

With the above provisions and following the steps described in detail by Pantakar [46], Eq. (26) can be written in index notation as follows

$$a_{ijk}^{(0)} \phi_{ijk} = a_{ijk}^{(1)} \phi_{i+1,j,k} + a_{ijk}^{(2)} \phi_{i-1,j,k} + a_{ijk}^{(3)} \phi_{i,j+1,k} + a_{ijk}^{(4)} \phi_{i,j-1,k} + a_{ijk}^{(5)} \phi_{i,j,k+1} + a_{ijk}^{(6)} \phi_{i,j,k-1} + \Sigma_{ijk} = \Gamma_{ijk}, \tag{30}$$

where the subscripts i , j , and k denote the grid-point locations in the x -, y -, and z -directions, respectively, and the a_{ijk} 's represent the linearisation coefficients resulting from the discretization scheme described above. Eq. (30) is an algebraic linear equation that can be written for all internal grid points, while boundary values can be either eliminated by the use of the flux boundary conditions, if they are known, or substituted and absorbed into Σ_{ijk} for the near-boundary control volume. The resulting system of linear equations can be cast into a single matrix equation of the form

$$\mathbf{A} \cdot \Phi = \Sigma, \tag{31}$$

where \mathbf{A} is the coefficient matrix, while Φ and Σ are column vectors containing the solution ϕ_{ijk} and the sources Σ_{ijk} for all grid points, respectively. \mathbf{A} is a sparse matrix having a diagonal block that is itself tridiagonal, with sub- and super-diagonal blocks that are diagonal, and hence it is of the type called tridiagonal with fringes [49]. Furthermore, since the coefficients in Eq. (30) may themselves depend on the values of ϕ , this band diagonal system must be solved iteratively, where at any iteration stage the discretization coefficients are calculated from the current estimates of all the ϕ values. Here a block Gauss-Seidel iteration based on a coupled algebraic multigrid (AMG) solver [50,51] has been employed for solving Eq. (31). For $\phi = \bar{v}_x, \bar{v}_y, \bar{v}_z, k$, and ϵ , the actual solution involves five coupled equations of the form given by Eq. (31).

Since successive iterations may not necessarily lead to a converged solution, divergent changes in the ϕ values are controlled by under-relaxing the system according to the prescription [46]

$$\phi_{ijk} = \phi_{ijk}^* + \alpha \Delta \phi_{ijk}, \tag{32}$$

where ϕ_{ijk}^* stands for the values of ϕ from the previous iteration, $\Delta \phi_{ijk}$ is the change experienced by ϕ in two consecutive iterations, and α is an under-relaxation factor lying between 0 and 1. If $\alpha = 1$, no under-relaxation is effected, while if it is close to zero, the values of ϕ change very slowly.

The mean pressure, which enters as a source term in the RANS equation (5), must adjust so that the resulting mean velocity field satisfies the continuity equation (23). This coupling between the mean velocity and pressure fields is handled by using the semi-implicit method for pressure-linked equations (SIMPLE), which was originally introduced by Pantakar and Spalding [52]. In this method intermediate mean velocities are first obtained from Eq. (31) for $\phi = \bar{v}_x, \bar{v}_y$, and \bar{v}_z using a guess for the mean pressure field, say \bar{p}_{ijk}^* . In order to satisfy the continuity equation, corrections to the mean pressure and velocity components are defined according to $\bar{p}_{ijk} = \bar{p}_{ijk}^* + \bar{p}'_{ijk}$ and $\bar{v}_{l,ijk} = \bar{v}_{l,ijk}^* + \bar{v}'_{l,ijk}$, where the subscript l stands for any of the directions x , y , and z . These improved values are then substituted into the discretized RANS equations to derive the velocity-corrected equations for $\bar{v}'_{l,ijk}$, while substitution of the improved mean velocities into the discretized continuity equation (see Eq. (27)) yields an equation for the corrected mean pressure, \bar{p}'_{ijk} . Regarding this value as a new guess, the procedure is repeated until convergence. Full details on the derivation of the velocity- and pressure-corrected equations along with the SIMPLE solution loop can be found in Pantakar [46] and Yu et al. [53], and hence they will not be repeated here. Note that the SIMPLE algorithm is implemented within the Gauss-Seidel iteration scheme to get mean velocity components that satisfy the discrete continuity equation exactly every single iteration. These values are then used to obtain new iterates for the other ϕ 's, i.e., for the turbulence parameters k and ϵ . Convergence is obtained when the residuals for all the ϕ 's satisfy the inequality

$$Res_{\phi} = \frac{\sum_{i,j,k} |\Gamma_{ijk} - a_{ijk}^{(0)} \phi_{ijk}|}{\sum_{i,j,k} a_{ijk}^{(0)} \phi_{ijk}} < 1 \times 10^{-6}, \tag{33}$$

where the summations are over all grid-points. Fixing the tolerance to single precision allows the solution to converge after a reasonable number of iterations.

3.2. Initial parameters and convergence testing

The simulated problem is the turbulent, stationary flow of oil in a circular pipe with a 90° diffuser under isothermal conditions. The dimensions of the pipe as well as the initial and boundary conditions correspond to experimentally defined values [21]. In the upstream side, the pipe has a diameter $D_1 = 50$ mm and length $L_1 = 30$ mm, while in the downstream side $D_2 = 80$ mm and $L_2 = 250$ mm, corresponding to an expansion ratio $D_2/D_1 = 1.6$ and a step height $H = (D_2 - D_1)/2 = 15$ mm. As the working fluid, we use oil with a density $\rho = 800$ kg m⁻³ and dynamic viscosity $\mu = 4.945 \times 10^{-3}$ Pa s at a temperature of 20 °C. The inlet centreline velocity is $v_{0,x} = 2.51$ m s⁻¹ for all models. With these parameters the inflow Reynolds number is $Re = \rho v_{0,x} D_1 / \mu = 2.03 \times 10^4$.

A hexahedral mesh covering the full solution field was generated with the aid of the software *Gambit 2.0* and test calculations were conducted to determine convergence of the numerical solutions. Fig. 2 shows the dependence of the pressure drop Δp on mesh resolution for all three closures with the EWT approach. Similar results were also obtained with the SWF method. The solid line is the theoretically predicted pressure drop across the sudden expansion:

$$\Delta p = \rho v_{0,x}^2 \frac{D_1^2}{D_2^2} \left(1 - \frac{D_1^2}{D_2^2} \right) = 1199,73 \text{ Pa}. \tag{34}$$

The data plotted in Fig. 2 are listed in Table 1 along with the relative error of the numerically calculated pressure drop at different spatial resolutions as compared with the theoretical value. With the coarse (173.815 elements) and medium (494.331 elements) meshes, the worst errors are given by the standard $k-\epsilon$ model, i.e., ~86% and 181%, respectively. For comparison, the Realizable $k-\epsilon$ and the RNG $k-\epsilon$ models yield much smaller relative errors (between ~0.7% and 10.9%) at these low resolutions. As expected, the convergence rate for these two latter models is higher when coarser meshes are used, due to the greater numerical dissipation introduced by the coarser meshes. A similar observation was also reported by Papageorgakis and Assanis [54], when testing the convergence behaviour of RNG-based $k-\epsilon$ closures against the standard $k-\epsilon$ model for the backward-facing step problem. As shown in Fig. 2, convergence for all three models is achieved with 1.383.510 cells. With this finer mesh, the converged values of Δp differ from the theoretical one by less than 10%, with the Realizable $k-\epsilon$ model yielding the smallest relative error (~4.7%) compared to ~7.8% for the standard $k-\epsilon$ and ~8.7% for the RNG-based $k-\epsilon$ models. We see from Fig. 2 that the variation of Δp with resolution is indeed similar for the Realizable $k-\epsilon$ and the RNG $k-\epsilon$ models, with the former producing slightly higher values of Δp at all resolutions. The calculations of this paper were carried out using a mesh consisting of 1.383.510 elements. At this resolution, the relative errors are only slightly larger than those obtained with 2.345.813 mesh elements (see Table 1), suggesting that convergence of the solution has already been achieved. For this test, the standard $k-\epsilon$ model converged to single precision after 1544 iterations of the Gauss–Seidel method compared to 2189 and 1333 iterations as required by the Realizable and the RNG $k-\epsilon$ models,

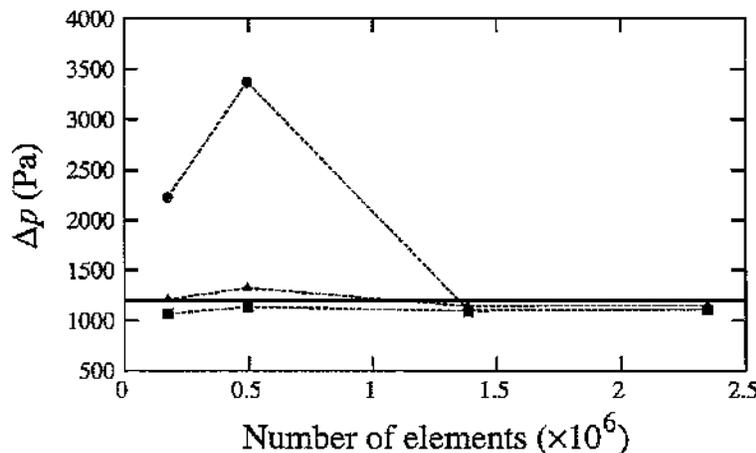


Fig. 2. Pressure drop, Δp , through the expansion as a function of the number of mesh elements filling the computational domain for three different turbulence-closure models: the standard $k-\epsilon$ (dots), the realizable $k-\epsilon$ (triangles), and the RNG $k-\epsilon$ (squares). The solid line marks the theoretically predicted value $\Delta p = 1199,73$ Pa. Four different meshes with 173.815, 494.331, 1.383.510, and 2.345.813 hexahedral elements are represented.

Table 1
Convergence of numerical solutions.

Method	Number of elements	Δp (Pa)	Relative error (%)
Standard $k-\epsilon$	173.815	2227	85.6
	494.331	3371	181.0
	1.383.510	1106	7.8
	2.345.813	1107	7.7
Realizable $k-\epsilon$	173.815	1208	0.7
	494.331	1325	10.4
	1.383.510	1143	4.7
	2.345.813	1145	4.6
RNG $k-\epsilon$	173.815	1069	10.9
	494.331	1136	5.3
	1.383.510	1095	8.7
	2.345.813	1098	8.5

Table 2
Set of numerical models.

Model	Method	Wall treatment	CPU time (h)	Number of iterations
1A	Standard $k-\epsilon$	SWF	6.33	1654
1B		EWT	6.30	1544
2A	Realizable $k-\epsilon$	SWF	5.57	1982
2B		EWT	13.83	2189
3A	RNG $k-\epsilon$	SWF	12.08	1463
3B		EWT	12.69	1333

respectively. Table 2 lists the turbulence models along with the CPU time and the number of iterations required by each of them. On a dual-core Intel Xeon processor 5160 with 3.0 GHz clock speed, a simulation required about 6.3 h of CPU time for the standard $k-\epsilon$ model regardless of the wall treatment approach. This time was doubled by the RNG $k-\epsilon$ models, with the EWT case being slightly more expensive than the SWF run. In contrast, the computational cost of the Realizable $k-\epsilon$ model was similar to that of the standard $k-\epsilon$ when combined with the SWF option, and increased by a factor of two when working with EWT approach. In general, the standard model has the lowest computational demand due to its relative simplicity.

The results of the models are compared with the benchmark solution pertaining to experimental investigations [21]. The good qualitative agreement between the numerical and experimental results confirms the stability and robustness of the present methodology for the backward-facing step problem.

4. Results and discussion

As was stated previously, the main purpose of this study is to compare the performance of three turbulence models with the experimental flow measurements reported by Stieglmeier [21] for flow in a pipe with a sudden expansion. Here two quantities are of particular interest for comparison with the experimental results: the axial mean velocity (\bar{u}_x) and the turbulence kinetic energy (k).

In the upstream section of the pipe the flow pattern is irrotational. Owing to the uniform velocity condition at the entrance, the axial mean velocity is characterised by an almost flat profile in the centre and a steep decay close to the pipe wall due to the no-slip boundary conditions. This is in contrast with the experiment where the flow at the inlet section corresponds to a fully developed parabolic profile. Fig. 3 shows the axial mean velocity profiles as compared with the experimental measurements at different distances from the enlargement. Immediately after the expansion, the flow pattern consists of a radially expanding jet within an axisymmetric annular recirculation region. At 5, 40, and 80 mm from the step height, the calculation models predict axial mean velocity profiles that are much flatter around the centreline than the experimental ones. At cross-sectional radii >25 mm, a circulatory flow develops and the axial mean velocity diverts from the typical parabolic decay towards the wall. The experimental axial velocity achieves a minimum, corresponding to a back flow with negative velocities, before rising to zero at the pipe wall. However, this experimental trend is reproduced only qualitatively by the numerical models, since they all underestimate both the strength and position of the minimum. As was pointed out by Speziale and Thangam [55], a drawback of most $k-\epsilon$ model calculations for the backstep problem lies in the use of wall functions, which, as it is well-known, do not formally apply to separated flows. However, since a large proportion of the turbulence kinetic energy is not associated with the circulation (separated) zone, it seems unlikely that wall functions are responsible for the mismatch between the calculated and experimental axial mean velocities within the circulation zone. A more likely source of error can be associated with the use of an isotropic eddy viscosity, which inhibits the axial mean velocity to give rise to a non-zero normal Reynolds stress difference [56,57]. In fact, the use of an

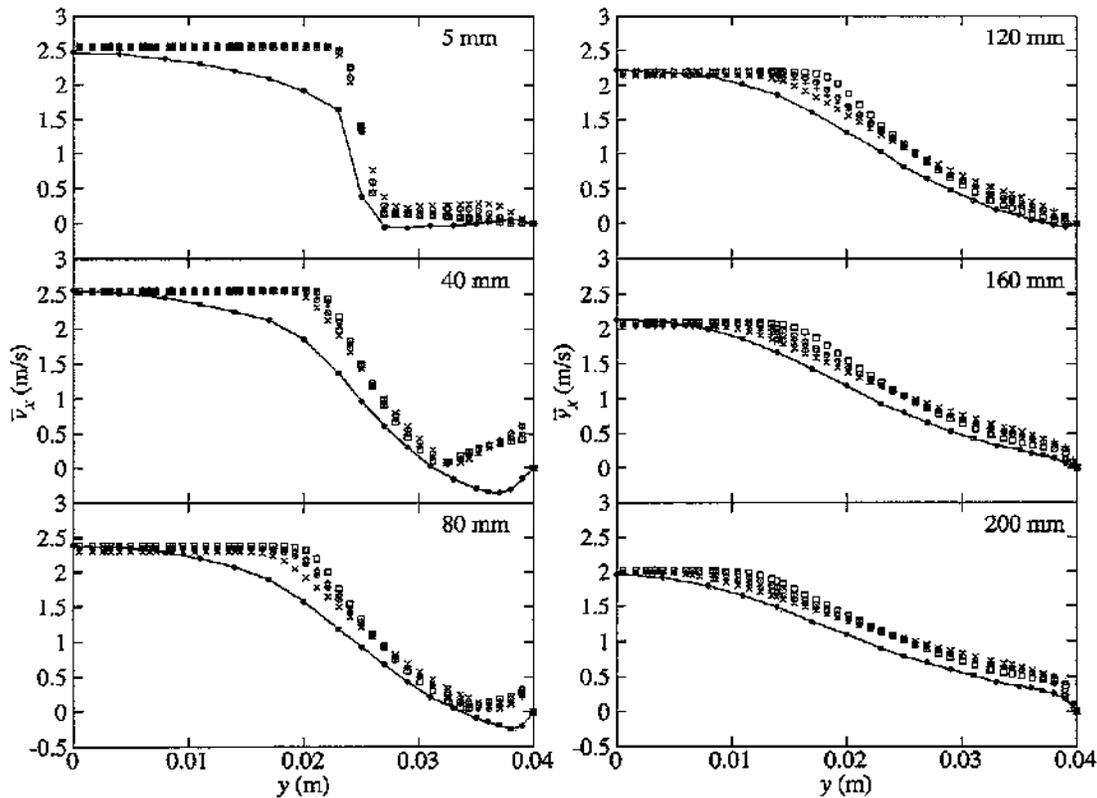


Fig. 3. Axial mean velocity, \bar{v}_x , at different pipe cross-sections after the expansion as compared with experimental measurements of flow through a 90° diffuser (filled dots) for three different closure models and two different near-wall treatments: standard $k-\epsilon$ (SWF: plus signs, model 1A; EWT: crosses, model 1B), Realizable $k-\epsilon$ (SWF: open squares, model 2A; EWT: circles, model 2B), and RNG $k-\epsilon$ (SWF: open diamonds, model 3A; EWT: open triangles, model 3B). The distance from the expansion in millimetres is given in the upper left corner of each plot.

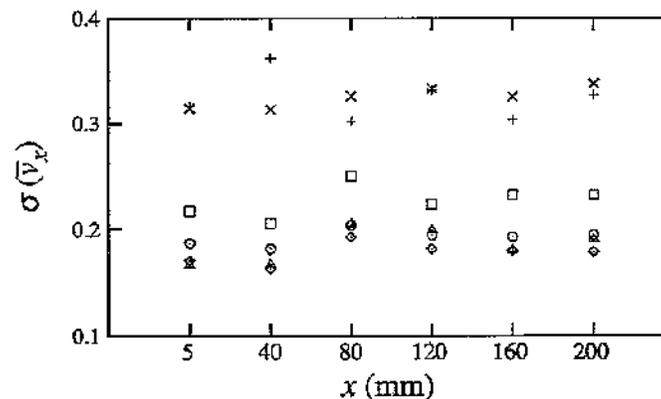


Fig. 4. Standard deviations of the calculated axial mean velocity profiles of Fig. 3 from the experimental observations: standard $k-\epsilon$ (SWF: plus signs, model 1A; EWT: crosses, model 1B), Realizable $k-\epsilon$ (SWF: open squares, model 2A; EWT: circles, model 2B), and RNG $k-\epsilon$ (SWF: open diamonds, model 3A; EWT: open triangles, model 3B).

eddy-viscosity model for the Reynolds-stress tensor as in Eq. (3) leads to models that are purely dissipative and therefore cannot account for Reynolds-stress relaxation effects. In addition, they fail to distinguish between plane shear, plane strain, and rotating plane shear.

We evaluate the performance of the closure models in terms of the standard deviation of the numerical data from the experimental one. The standard deviations of the numerical axial mean velocity profiles from the experimental measurements are shown in Fig. 4. At 5 and 40 mm from the expansion, the RNG $k-\epsilon$ models (models 3A and 3B) exhibit the lowest deviations from the experimental profile. The use of either the SWF or the EWT approach makes little difference. However, at 80 mm from the expansion, model 3A performs slightly better. We may also see that the performance of the Realizable $k-\epsilon$

model improves when it is implemented with the EWT method (model 2B), yielding comparable standard deviations to models 3A and 3B at distances ≥ 80 mm.

Depending on the closure model and near-wall treatment, flow reattachment occurs at distances of $x_R \approx 95$ to 176 mm from the onset of the expansion (see Table 3), corresponding to ≈ 6 –12 step heights, compared to the mean experimental value of ≈ 150 mm [21]. We see from Table 3 that the standard k - ϵ and RNG k - ϵ closures with the SWF approach (models 1A and 3A) produce reattachment lengths that are closer to the experimental value, while with the EWT approach the RNG k - ϵ closure (model 3B) produces the best result (≈ 137 mm) compared to the experimental measurement. Although the reattachment point is likely to be affected by the near-wall treatment employed, the difference in inlet velocity profiles at the onset of the expansion, i.e., a nearly-flat profile for the calculations and a parabolic profile for the experiment, is another factor that may affect the results [15]. Earlier results based on the standard k - ϵ model yields underpredictions of the reattachment point by as much as 11–20% [56,57]. While this is in contrast with the predictions of model 1A, model 1B, which uses the EWT approach, yields a 37% underprediction. Evidently, the SWF approach produces much better predictions of the reattachment point than the EWT method for the standard k - ϵ model. While this error was often attributed to the inaccurate prediction of normal Reynolds-stress anisotropies in the recirculation zone [56], Thangam [58] demonstrated that a change of about 5% in the value of the empirical constant $C_{2\epsilon}$ from 1.92 to 11/6 causes a 15% error reduction in the reattachment point with the standard k - ϵ model, making the calculation much less sensitive to the near-wall treatment employed and more in line with the experiments. In general, we may see from Table 3 that using the SWF approach leads to overpredicted reattachment lengths (17% for the Realizable k - ϵ and only 3% for the RNG k - ϵ). Conversely, the use of the EWT approach yields underprediction errors of 25% for the Realizable k - ϵ and 9% for the RNG k - ϵ . The errors for the RNG k - ϵ are in line with previous studies that report predictions to within 5% of the experimental values [55]. This apparent improvement in the predictions of the RNG k - ϵ model may be largely attributed to a better treatment of the near-wall turbulence effects and to the form of the $C_{2\epsilon}$ parameter in Eq. (18), which incorporates an additional production term in the transport equation for the dissipation rate of the turbulence kinetic energy [41].

Downstream of the reattachment point when the flow becomes fully developed, the numerical profiles reproduce more closely the experimental measurements over the entire cross-section. In particular, model 1B produces axial mean velocities that are closer to the experiment around the centreline, while model 2A gives superior results near the wall. However, as shown in Fig. 4 the lowest standard deviations from the experimental profiles are again provided by models 2B, 3A, and 3B. In spite of these differences, all models agree very well in predicting the experimental value of the centreline axial mean velocity and its gradual decrease downstream.

The turbulence kinetic energy, k , as used in the k - ϵ closures, is shown in Fig. 5 at different cross-sections after the expansion. At 5 mm from the expansion, k peaks at a radius of about 29 mm from the pipe centreline due to the presence of circulatory motion immediately downstream of the expansion. Although the numerical models follow a qualitatively similar trend, they all predict a peak at ≈ 25 mm from the centreline and overestimate its height compared with the experiment. The smallest relative errors are provided by models 2A and 3A with deviations from the experimental data of $\sim 33\%$ and 41% , respectively. On both sides of the peak, the turbulence kinetic energy decreases monotonically. However, as shown in Fig. 6, model 3B exhibits the smallest standard deviation from the experimental profile. The excess of turbulence kinetic energy predicted by the models immediately after the facing step may be caused by the difference in the inlet velocity profile between the models and the experiment. At 5 mm from the step, the axial mean velocity is still nearly flat and, as a consequence, close to the separation zone it will be considerably larger than in a fully developed parabolic profile with the same centreline velocity. This implies larger velocity gradients near the flow separation region compared to the experiment, which will in turn enhance the turbulence production rate through the term G_k in Eq. (6).

Downstream of the expansion, the models are seen to reproduce qualitatively well the experimental trends. However, at 40 and 80 mm from the facing step, they overpredict the amount of turbulence kinetic energy within the recirculation region and underpredict it towards the centre of the pipe. As expected, the worst overpredictions are for the standard k - ϵ models, which are known to suffer from an excessive production of k in regions with large strain rates. At 40 mm from the expansion, the lowest standard deviation from the experiment is given by model 2B, while at 80 mm models 1A, 1B, and 3B perform better. The contribution of the axial stress component to the turbulence kinetic energy at radii less than 25 mm from the centreline is in general underestimated by the numerical models. This is more clearly seen at distances >120 mm from the expansion, suggesting that the models consider that the flow returns to a full parabolic profile in a smaller space than in reality. In this regime, models 2B and 3B exhibit the smallest standard deviations. As the turbulence kinetic energy decreases gradually downstream, models 1B and 2B fit the experimental profile near the pipe wall better than the other models. The inability of these closures to account for the effects of rotational strains may cause additional dissipation of turbulence kinetic energy towards the centreline and additional production close to the pipe walls downstream of the expansion as compared with the experimental findings.

Table 3
Predicted reattachment lengths.

Model	1A	1B	2A	2B	3A	3B
x_R (mm)	149	95	176	113	155	137
x_R/H	10	6	12	8	10	9

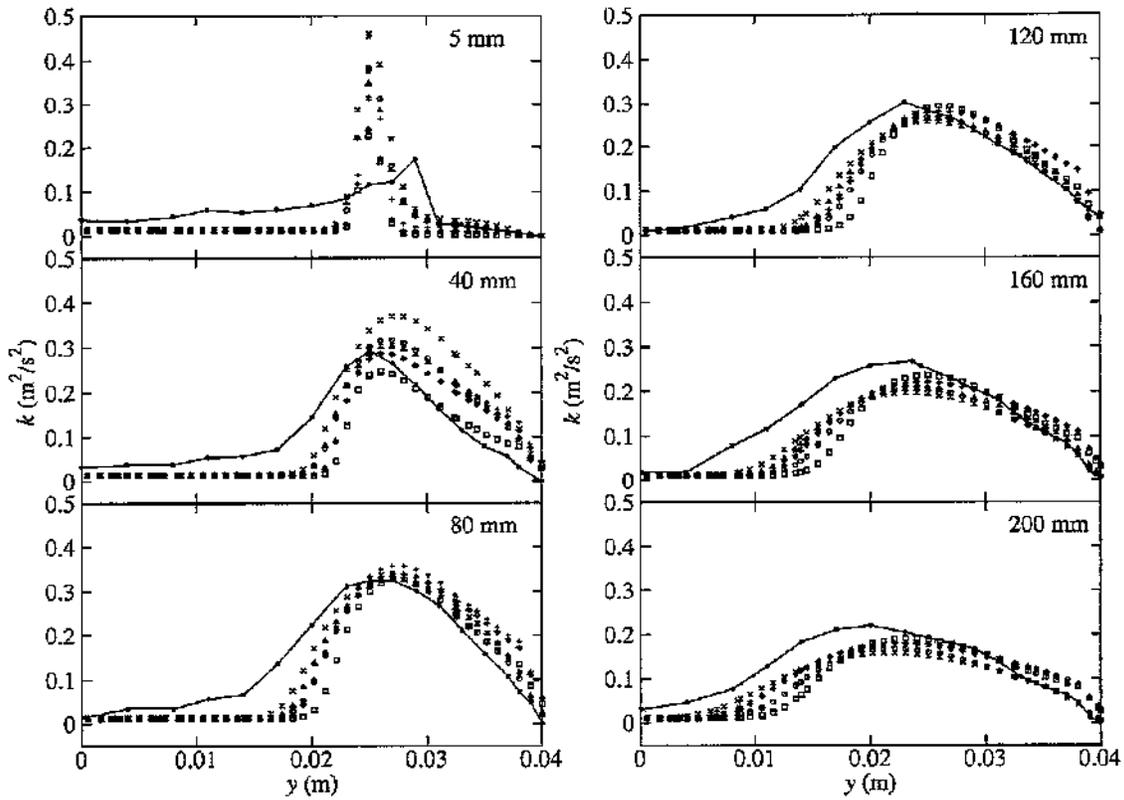


Fig. 5. Turbulence kinetic energy, k , at different pipe cross-sections after the expansion as compared with experimental measurements of flow through a 90° diffuser (filled dots) for three different closure models using two different wall treatments: standard $k-\epsilon$ (SWF: plus signs, model 1A; EWT: crosses, model 1B), Realizable $k-\epsilon$ (SWF: open squares, model 2A; EWT: circles, model 2B), and RNG $k-\epsilon$ (SWF: open diamonds, model 3A; EWT: open triangles, model 3B). The distance from the expansion in millimetres is given in the upper left corner of each plot.

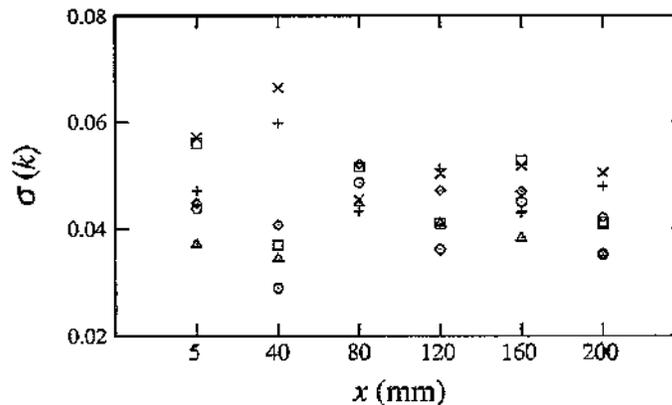


Fig. 6. Standard deviations of the calculated turbulence kinetic energy profiles of Fig. 5 from the experimental observations: standard $k-\epsilon$ (SWF: plus signs, model 1A; EWT: crosses, model 1B), Realizable $k-\epsilon$ (SWF: open squares, model 2A; EWT: circles, model 2B), and RNG $k-\epsilon$ (SWF: open diamonds, model 3A; EWT: open triangles, model 3B).

Fig. 7 shows contour plots of the turbulence kinetic energy for all models, where an axisymmetric annular recirculation zone around the laminar jet is clearly observed immediately after the expansion. The sequence of plots on the left corresponds to run models with the SWF approach, while that on the right belongs to calculations using the EWT approach. The existence of twin recirculation bubbles is confirmed by the present calculations. A primary recirculation bubble forms just behind the corner zone, which connects to a secondary recirculation zone of much larger size downstream. For all closure models, the SWF approach results in larger recirculation lengths than the EWT approach. However, this differences in the recirculation size are more pronounced for the standard (models 1A and 1B) and the Realizable $k-\epsilon$ closures (models 2A and 2B) than

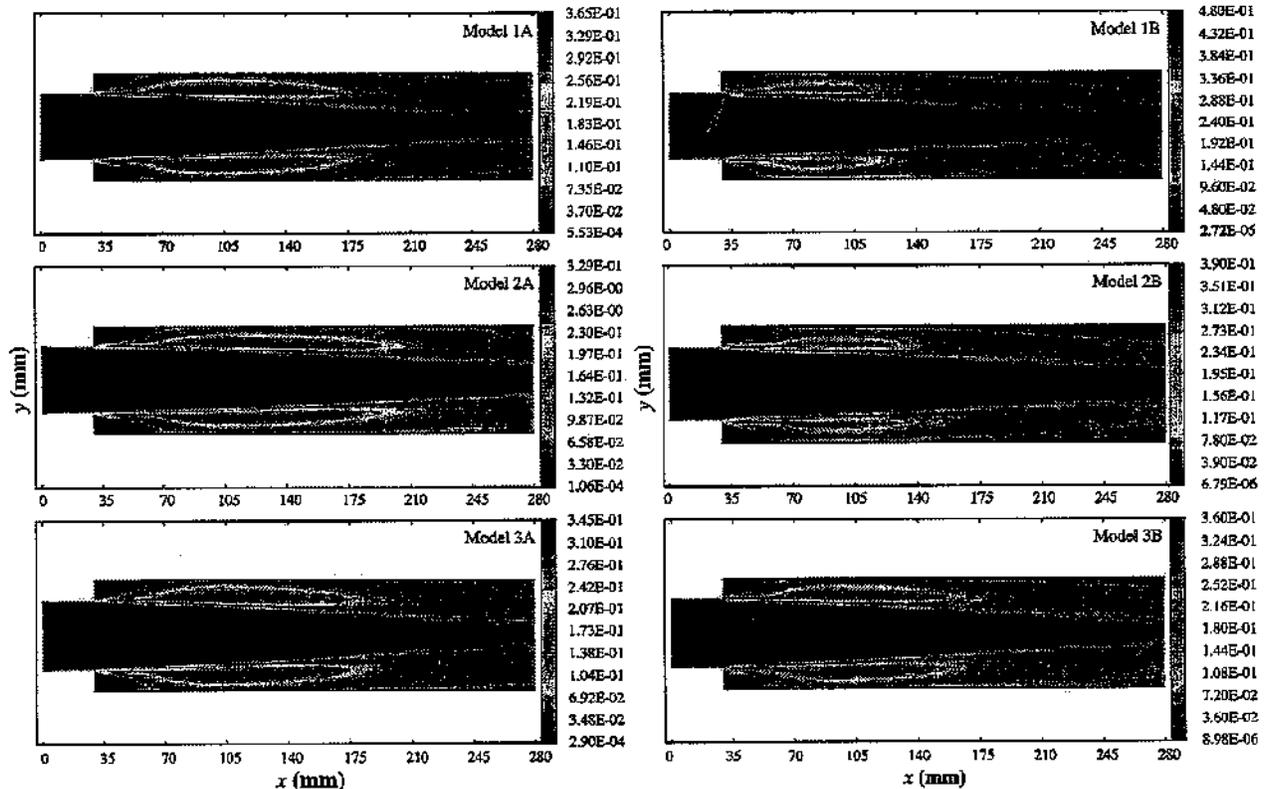


Fig. 7. Contours of the turbulence kinetic energy as predicted by the numerical models. The colour scale bar and numbers on the left of each plot indicate the magnitude of the turbulence kinetic energy in units of $\text{m}^2 \text{s}^{-2}$.

for the RNG $k-\epsilon$ closure (models 3A and 3B), where the recirculation lengths are comparable. This result shows that in contrast to the other two closures, the RNG $k-\epsilon$ model is not too sensitive to the details of the near-wall treatment.

5. Conclusions

In this paper, we have performed three-dimensional calculations of oil flow past an abrupt expansion in a circular pipe with the aid of the commercial code *Fluent* 6.3. Three different turbulence closures: the standard $k-\epsilon$, the Realizable $k-\epsilon$, and the RNG-based $k-\epsilon$ models, with two different near-wall treatments: the Standard Wall Functions (SWF) and the Enhanced Wall Treatment (EWT), were considered. The performance of these three turbulence models was investigated and their predictions for the mean characteristics of the flow were compared among themselves and with experimental measurements of oil flow through a 90° diffuser [21].

In terms of the standard deviation of the predicted axial mean velocities from the experimental data, the RNG $k-\epsilon$ model gives the best results with very little difference between the SWF and the EWT approaches. We also find that the performance of the Realizable $k-\epsilon$ model improves when it is implemented with the EWT method, yielding comparable standard deviations to the RNG $k-\epsilon$ models. Concerning the turbulence kinetic energy, the smallest deviations from the experimental observations are again provided by the Realizable $k-\epsilon$ and RNG $k-\epsilon$ models when implemented with the EWT approach. In addition, the standard $k-\epsilon$ and RNG $k-\epsilon$ closures produce reattachment lengths that agree very well with the experimentally measured value when employed together with the SWF approach, while with the EWT method only the RNG $k-\epsilon$ model predicts a reattachment length that is comparable to the experimental one. Although the RNG $k-\epsilon$ model performs on average better than the other two models, it still fails to reproduce the exact experimental profiles. This is probably due to a difference in the inlet velocity profiles between the experiment and the numerical simulations and to the assumption that turbulence is isotropic. Another important factor is the inability of these closures to account for the effects of rotational strains, which may cause additional production of turbulence kinetic energy within the recirculation region and close to the walls downstream of the reattachment point as well as additional dissipation towards the centreline compared to the experimental data.

Acknowledgments

We thank the referees who have provided a number of comments and suggestions that have improved the content and quality of the manuscript.

References

- [1] P.N. Ananthanarayanan, Basic Refrigeration and Air Conditioning, Tata McGraw-Hill Education, New Delhi, India, 2013.
- [2] K.C. Schadow, E. Gutmark, Combustion instability related to vortex shedding in dump combustors and their passive control, *Prog. Energy Combust. Sci.* 18 (2) (1992) 117–132.
- [3] R.S. Gabruk, L.A. Roe, Velocity characteristics of reacting and nonreacting flows in a dump combustor, *J. Propul. Power* 10 (2) (1994) 148–154.
- [4] C. Bertolotti, V. Deplano, J. Fusari, P. Dupouy, Numerical and experimental models of post-operative realistic flows in stenosed coronary bypasses, *J. Biomech.* 34 (8) (2001) 1049–1064.
- [5] M.D. Griffith, T. Leweke, M.C. Thompson, K. Hourigan, Steady inlet flow in stenotic geometries: convective and absolute instabilities, *J. Fluid Mech.* 616 (2008) 111–133.
- [6] S.D. Peterson, M.W. Plesniak, The influence of inlet velocity profile and secondary flow on pulsatile flow in a model artery with stenosis, *J. Fluid Mech.* 616 (2008) 263–301.
- [7] R.M.C. So, Inlet centerline turbulence effects on reattachment length in axisymmetric sudden-expansion flows, *Exp. Fluids* 5 (1987) 424–426.
- [8] R.G. Teysandiert, M.P. Wilson, An analysis of flow through sudden enlargements in pipes, *J. Fluid Mech.* 64 (1) (1974) 85–95.
- [9] E.O. Macagno, T.-K. Hung, Computational and experimental study of captive annular eddy, *J. Fluid Mech.* 28 (1) (1967) 43–64.
- [10] L.H. Back, E.J. Roschke, Shear-layer flow regimes and wave instabilities and reattachment lengths downstream of an abrupt circular channel expansion, *J. Appl. Mech.* 39 (3) (1972) 677–681.
- [11] D.J. Latonell, A. Pollard, Some observations on the evolution of shear layer instabilities in laminar flow through axisymmetric sudden expansions, *Phys. Fluids* 29 (9) (1986) 2828–2835.
- [12] D. Badekas, D.D. Knight, Eddy correlations for laminar axisymmetric sudden expansion flows, *J. Fluids Eng.* 114 (1) (1992) 119–121.
- [13] K.J. Hammad, M.V. Örlügen, E.B. Arık, A PIV study of the laminar axisymmetric sudden expansion flow, *Exp. Fluids* 26 (3) (1999) 266–272.
- [14] I. Dağtekin, M. Ünsal, Numerical analysis of axisymmetric and planar sudden expansion flows for laminar regime, *Int. J. Numer. Methods Fluids* 65 (9) (2011) 1133–1144.
- [15] E.J. Roschke, L.H. Back, The influence of upstream conditions on flow reattachment lengths downstream of an abrupt circular channel expansion, *J. Biomech.* 9 (1976) 481–483.
- [16] C.E. Tinney, M.N. Glauser, E.L. Eaton, J.A. Taylor, Low-dimensional azimuthal characteristics of suddenly expanding axisymmetric flows, *J. Fluid Mech.* 567 (2006) 141–155.
- [17] L.F. Moon, G. Rudinger, Velocity distribution in an abruptly expanding circular duct, *J. Fluids Eng.* 99 (1) (1977) 226–230.
- [18] H. Ha-Nling, D. Chassaing, Perturbations of turbulent pipe flow, *Turbulent Shear Flows*, vol. 1, Springer-Verlag, 1979, pp. 178–197.
- [19] R.P. Durrert, W.H. Stevens, H.D. Thompson, LDV measurements near the step in an axisymmetric sudden expansion air flow, in: *Second International Symposium on Applications of Laser Anemometry to Fluid Mechanics, Proceedings (A86-16351 05-34)*, Instituto Superior Técnico Lisbon, Portugal, 1985.
- [20] L. Khezziar, J.H. Whitelaw, M. Yianneskis, An experimental study of round sudden-expansion flows, in: *Fifth Symposium on Turbulent Shear Flows, Proceedings (A86-30201 13-24)*, Pennsylvania State University, 1985, pp. 5–25.
- [21] M. Sniegmeier, C. Tropea, N. Weiser, W. Nitsche, Experimental investigation of the flow through axisymmetric expansions, *J. Fluids Eng.* 111 (4) (1989) 464–471.
- [22] D.R. Cole, M.N. Glauser, Flying hot-wire measurements in an axisymmetric sudden expansion, *Exp. Therm. Fluid Sci.* 18 (2) (1998) 150–167.
- [23] A. Restivo, J.H. Whitelaw, Turbulence characteristics of the flow downstream of a symmetric plane sudden expansion, *J. Fluids Eng.* 100 (3) (1978) 308–310.
- [24] M.P. Escudier, P.J. Oliveira, R.J. Poole, Turbulent flow through a plane sudden expansion of modest aspect ratio, *Phys. Fluids* 14 (10) (2002) 3641–3654.
- [25] D. Drikakis, Bifurcation phenomena in incompressible sudden expansion flows, *Phys. Fluids* 9 (1) (1997) 76–87.
- [26] F. Battaglia, G. Papadopoulos, Bifurcation characteristics of flows in rectangular sudden expansion channels, *J. Fluids Eng.* 128 (4) (2006) 671–679.
- [27] T. Mullin, J.R.T. Seddon, M.D. Mantle, A.J. Sederman, Bifurcation phenomena in the flow through a sudden expansion in a circular pipe, *Phys. Fluids* 21 (1) (2009) 014110.
- [28] J. Mamizadeh, S.A. Ayyoubzadeh, Simulation of flow pattern in open channels with sudden expansions, *Res. J. Appl. Sci. Eng. Technol.* 4 (19) (2012) 3852–3857.
- [29] E. Sanmiguel-Rojas, T. Mullin, Finite-amplitude solutions in the flow through a sudden expansion in a circular pipe, *J. Fluid Mech.* 691 (2012) 201–213.
- [30] C.D. Cantwell, D. Barkley, H.M. Blackburn, Transient growth analysis of flow through a sudden expansion in a circular pipe, *Phys. Fluids* 22 (3) (2010) 034101.
- [31] K.A. Cliffe, E.J.C. Hall, P. Houston, E.T. Phipps, A.G. Salinger, Adaptivity and a posteriori error control for bifurcation problems III: Incompressible fluid flow in open systems with $o(2)$ symmetry, *J. Sci. Comput.* 52 (2012) 153–179.
- [32] E.D. Koronaki, H.H. Liakos, M.A. Founti, N.C. Markatos, Numerical study of turbulent diesel flow in a pipe with sudden expansion, *Appl. Math. Modell.* 25 (5) (2001) 319–333.
- [33] F.T. Pinho, P.J. Oliveira, J.P. Miranda, Pressure losses in the laminar flow of shear thinning power-law fluids across a sudden axisymmetric expansion, *Int. J. Heat Fluid Flow* 24 (2003) 747–761.
- [34] A. Mansoori, M.R. Bazargan-Lari, Evaluation of turbulent models in sudden expansion analysis at high Reynolds numbers, *Fluid Mechanics & Aerodynamics*, WSEAS Press, 2007, pp. 253–260.
- [35] K. Mohanarangam, J.Y. Tu, L. Chen, Numerical study of particle dispersion behind a sudden expansion geometry and its effects on step heights, *Comput. Chem. Eng.* 32 (12) (2008) 3187–3197.
- [36] V. Roy, S. Majumder, D. Sanyal, Analysis of the turbulent fluid flow in an axis-symmetric sudden expansion, *Int. J. Eng. Sci. Technol.* 2 (6) (2010) 1569–1574.
- [37] S. Majumder, A. Mandal, Turbulent fluid flow analysis by RANS-method in axis-symmetric sudden expansion, *Int. J. Res. Mech. Eng. Technol.* 3 (1) (2013) 7–12.
- [38] G. Satish, K.A. Kumar, V.V. Prasad, S.M. Pasha, Comparison of flow analysis of a sudden and gradual change of pipe diameter using fluent software, *Int. J. Res. Eng. Technol.* 2 (12) (2013) 41–45.
- [39] B.E. Launder, D.B. Spalding, The numerical computation of turbulent flows, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 3 (2) (1974) 269–289.
- [40] T.-H. Shih, W.W. Liou, A. Shabbir, Z. Yang, J. Zhu, A new $k-\epsilon$ eddy viscosity model for high Reynolds number turbulent flows, *Comput. Fluids* 24 (3) (1995) 227–238.
- [41] V. Yakhot, S.A. Orszag, S. Thangam, T.B. Gatski, C.G. Speziale, Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique, *Phys. Fluids A* 4 (7) (1992) 1510–1520.
- [42] D.C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD*, DCW Industries, La Cañada, California, 2006.
- [43] D. Kuzmin, O. Mierka, S. Turek, On the implementation of the $k-\epsilon$ turbulence model in incompressible flow solvers based on a finite element discretization, *Int. J. Comput. Sci. Math.* 1 (2/3/4) (2007) 193–206.
- [44] M. Wolfshtein, The velocity and temperature distribution of one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient, *Int. J. Heat Mass Transfer* 12 (3) (1969) 301–318.
- [45] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, Finite volume methods, *Techniques of Scientific Computing, Handbook of Numerical Analysis, Part III*, North-Holland Publishing, 2000, pp. 713–1020.
- [46] S.V. Pantakar, A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations, *Numer. Heat Transfer* 4 (1981) 409–425.

- [47] B.P. Leonard, A stable and accurate convective modeling procedure based on quadratic upstream interpolation, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 19 (1979) 59–98.
- [48] B.P. Leonard, Order of accuracy of quick and related convection–diffusion schemes, *Appl. Math. Modell.* 19 (11) (1995) 640–653.
- [49] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, B.P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran*, Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 1992.
- [50] S. Shu, J. Xu, Y. Xiao, L. Zikatanov, Algebraic multigrid method on lattice block materials, *Recent Progress in Computational and Applied PDEs*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2002, pp. 289–307.
- [51] Z. Huang, Q. Chang, Gauss–Seidel-type multigrid methods, *J. Comput. Math.* 21 (4) (2003) 421–434.
- [52] S.V. Pantakar, D.B. Spalding, A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows, *Int. J. Heat Mass Transfer* 15 (1972) 1787–1806.
- [53] B. Yu, H. Ozoe, W.-Q. Tao, A modified pressure-correction scheme for the simpler method, *MSIMPLER*, *Numer. Heat Transfer, Part B* 39 (2001) 435–449.
- [54] G.C. Papageorgakis, D.N. Assanis, Comparison of linear and nonlinear RNG-based k – ϵ models for incompressible turbulent flows, *Numer. Heat Transfer, Part B* 35 (1) (1999) 1–22.
- [55] C.G. Speziale, S. Thangam, Analysis of an RNG based turbulent model for separated flows, *Int. J. Eng. Sci.* 30 (10) (1992) 1379–1388.
- [56] C.G. Speziale, T. Ngo, Numerical solution of turbulent flow past a backward facing step using a nonlinear k – ϵ model, *Int. J. Eng. Sci.* 26 (10) (1988) 1099–1112.
- [57] C.G. Speziale, Analytical models for the development of Reynolds-stress closures in turbulence, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 23 (1991) 107–157.
- [58] S. Thangam, Analysis of two-equation turbulence models for recirculating flows, Contractor report NASA CR-187607, ICASE Report No. 91-61, Institute for Computer Applications in Science and Engineering, July 1991.

ANEXO 5

PRESENTACIONES

**3ra International Conference on Chemical Engineering and
Advanced Materials (CEAM)**

Del 14 al 18 de Noviembre, (2011). Italia



Certificate of Attendance

3rd International Conference on Chemical Engineering and Advanced Materials (CEAM) - VIRTUAL FORUM- 2011

The management of the Publishing House **Praise Worthy Prize in Naples**, Italy, certifies that **Dr. Zambrano Héctor, Dr. Alfonso Bencomo and Dr. Orlaynie Alén** have submitted a full manuscript entitled “**COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS STUDY OF GAS STIRRED LADLE USED IN THE SECONDARY METALLURGY**” to the **3rd International Conference on Chemical Engineering and Advanced Materials (CEAM) - VIRTUAL FORUM- 2011** hosted by Praise Worthy Prize.

The manuscript was peer reviewed following full international reviewing procedure and it was accepted for publication in the Proceedings of the 2011 CEAM.

All authors of accepted manuscripts were required to attend the Online Conference Discussions from November 14th - 28th, 2011.

Copies of the proceedings will be forwarded to the National Libraries of Rome, Naples and Florence (Italy) in accordance with the Legal Deposit provisions of the Italian Copyright's Law.

Abstracting and Indexing information will be supplied to the following scientific databases:

Academic Search Complete - EBSCO Information Services
Cambridge Scientific Abstracts - CSA/CIG
Index Copernicus (Journal Master List): Impact Factor 6.29

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'S. Meo'.

Prof. Santolo Meo
Managing Chair of CEAM

ANEXO 6

**Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el
Encuentro Académico Industria (JIFI-EAI-2010)**

PRESENTACIONES

Presentación 1:

**Aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC)
para el estudio de cucharones agitados por gas utilizando
tapón poroso excéntrico**

Presentación 2:

**Estudio Fluidodinámico Computacional de Cucharones de
refinación utilizados en la metalurgia secundaria**

Caracas, 29 de Noviembre al 3 de Diciembre de 2010

CERTIFICADO

Que se otorga a

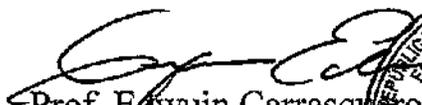
Héctor Zambrano, Alfonso Bencomo

Por su participación en las Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-EAI 2010) en calidad de

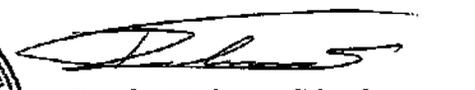
PONENTE

con el trabajo titulado

“Aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC) para el estudio de cucharones agitados por gas utilizando tapon poroso excentrico”


Prof. Edwin Carrasquero
Coordinador del Área
Materiales y Nanotecnología




Profa. Rebeca Sánchez
Coordinadora del Comité Central

Caracas, 29 de Noviembre al 3 de Diciembre de 2010

CERTIFICADO

Que se otorga a

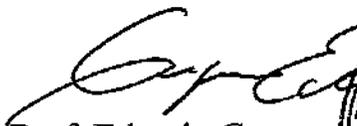
Héctor Zambrano, Alfonso Bencomo

Por su participación en las Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-EAI 2010) en calidad de

PONENTE

con el trabajo titulado

“Estudio Fluidodinámico Computacional de cucharones de refinación utilizados en la metalurgia secundaria”


Prof. Edwuin Carrasquero
Coordinador del Área
Materiales y Nanotecnología




Profa. Rebeca Sánchez
Coordinadora del Comité Central

Caracas, 29 de Noviembre al 3 de Diciembre de 2010

ANEXO 7

**Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el
Encuentro Académico Industria (JIFI-EAI-2014)**

PRESENTACIONES

Presentación 1:

**Estudio numérico de cucharones agitados por gas utilizando
tapón poroso excéntrico mediante el uso de la dinámica de
fluidos computacional**

Presentación 2:

**Estudio Fluidodinámico Computacional de cucharones
agitados por gas utilizando tapón poroso céntrico**

Presentación 3:

**Aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional (DFC)
para el estudio del transporte de fluidos viscosos por tuberías
con expansión brusca (3D)**

Presentación 4:

**Aplicación de la Dinámica de Fluidos Computacional para el
Estudio de la Influencia de los Modelos de turbulencia en el
comportamiento de los separadores tipo ciclónicos.**

Caracas, 25 al 28 de Noviembre del 2014



CERTIFICADO

Que se otorga a

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA

Por su participación en las Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-EAI 2014) en calidad de

PONENTE

con el trabajo titulado

**ESTUDIO FLUIDODINÁMICO COMPUTACIONAL DE CUCCHARONES
AGITADOS POR GAS UTILIZANDO TAPON POROSO CENTRICO**

AUTORES

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA y ALFONSO BENCOMO

Prof. Rebeca Sánchez
Coordinadora del Comité Central



CERTIFICADO

Que se otorga a

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA

Por su participación en las Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-EAI 2014) en calidad de

PONENTE

con el trabajo titulado

**APLICACIÓN DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL (DFC)
PARA EL ESTUDIO DEL TRANSPORTE DE FLUIDOS VISCOSOS POR
TUBERÍA CON EXPANSIÓN BRUSCA (3D)**

AUTORES

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA y ALFONSO BENCOMO

Prof. Rebeca Sánchez
Coordinadora del Comité Central



CERTIFICADO

Que se otorga a

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA

Por su participación en las Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-EAI 2014) en calidad de

PONENTE

con el trabajo titulado

APLICACIÓN DE LA DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL PARA EL ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE LOS MODELOS DE TURBULENCIA EN EL COMPORTAMIENTO DE LOS SEPARADORES TIPO CICLÓNICOS

AUTORES

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA, ALFONSO BENCOMO, JOSÉ RUJANO, CARLOS TORRES-MONZÓN.

Prof. Rebeca Sánchez
Coordinadora del Comité Central



CERTIFICADO

Que se otorga a

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA

Por su participación en las Jornadas de Investigación de la Facultad de Ingeniería y el Encuentro Académico Industrial (JIFI-EAI 2014) en calidad de

PONENTE

con el trabajo titulado

**ESTUDIO NUMÉRICO DE CUCCHARONES AGITADOS POR GAS
UTILIZANDO TAPON POROSO EXCENTRICO MEDIANTE EL USO DE LA
DINÁMICA DE FLUIDOS COMPUTACIONAL**

AUTORES

HÉCTOR J. ZAMBRANO MEZA y ALFONSO BENCOMO

Profa. Rebeca Sánchez
Coordinadora del Comité Central