

**MODELADO DEL FLUJO MULTIFASE
EN LA PRODUCCION DE ACERO
POR COLADA CONTINUA**

Autor: Angel Luis Zanotti

Tesis remitida a la Comisión de Posgrado de la
FACULTAD DE INGENIERIA Y CIENCIAS HIDRICAS
como parte de los requisitos para la obtención
del grado de
DOCTOR EN INGENIERIA
Mención Mecánica Computacional
de la
UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2007

Resumen

En la presente Tesis se desarrollan e implementan los modelos que permiten simular el flujo multifásico que tiene lugar en el proceso de fabricación de acero por el método de colada continua. Se analizan los fenómenos involucrados y las condiciones operativas que posibilitan mejorar la calidad del acero producido.

En primera instancia se propone un modelo de dos fluidos para un flujo de dos fases en régimen disperso, cuya configuración consiste en burbujas de gas en un líquido (Capítulo 2). La estrategia numérica se encuentra fundada en una formulación estabilizada de igual orden del método de elementos finitos (SUPG-PSPG), donde el *solver* es dividido de acuerdo a las diferentes fases involucradas en el cálculo, tratando a cada fase monolíticamente (cantidad de movimiento lineal y continuidad acoplada). Este esquema evita las oscilaciones debidas a la restricción de incompresibilidad y advección que dominan el flujo, como así también, las patologías numéricas relacionadas con las fuerzas de interacción entre las fases. El modelo numérico se implementa en el código computacional PETSc-FEM, elaborado en el CIMEC. Se resuelven, a manera de validación, ejemplos numéricos que demuestran la aplicabilidad del código en condiciones de régimen diluido (fracción de vacío no superior al 1%).

Por otra parte, al resolver el problema bifásico en un modelo agua-aire para la configuración de la cuchara siderúrgica, se ha encontrado problemas de convergencia. Estas dificultades numéricas se ven considerablemente acentuadas para fracciones de vacío elevadas (aproximadamente 100%), altas velocidades relativas y diferencia de densidad grande entre las fases, siendo estas condiciones las que existen en las regiones cercanas al tapón poroso en la cuchara siderúrgica. Posiblemente esta sea la razón por la cual las aplicaciones del modelo multifluido se orientan generalmente a la resolución de flujos muy diluidos.

Considerando que el modelo diferencial de dos fluidos para el flujo transitorio tiene raíces características complejas y por lo tanto no está bien puesto como un problema de valores iniciales, salvo para el caso trivial de igual velocidad de fases, en el Capítulo 3 se propone una novedosa estrategia matemática que evita los inconvenientes causados por el comportamiento no-hiperbólico del modelo original. La misma está basada en el preconditionamiento de la matriz de masa y permite resolver problemas en condiciones aún más exigentes a las que existen en la cuchara siderúrgica. Se desarrolló un análisis comparativo de los resultados, para problemas de solución analítica conocida (1D), con y sin matriz de preconditionamiento obteniéndose sólo para el primer caso y en todas las situaciones la solución en el estacionario.

Luego de haber implementado un modelo de dos fluidos que tiene escasa robustez e importante sensibilidad de los resultados con los coeficientes de ajuste de los modelos de

los términos de interacción, en el Capítulo 4 se introduce al modelo ASMM (Algebraic Slip Mixture Model) como una alternativa valiosa para la resolución del flujo multifásico en la cuchara siderúrgica. El mismo cuenta con la robustez necesaria para las condiciones de flujo presentes en el problema.

En el Capítulo 5 con la finalidad de validar el código se efectúa un estudio comparativo de los resultados numéricos obtenidos con el modelo ASMM, el modelo dos fluidos (calculados por Milleli) y datos experimentales relevados por Anagbo y Brimacombe. El sistema físico resuelto consiste en un modelo agua-aire para la configuración de la cuchara siderúrgica. Habiéndose obtenido resultados satisfactorios en esta etapa se procedió a simular la cuchara siderúrgica. Indicadores tales como el área de apertura del ojo, la velocidad crítica de atrape y el número de Weber se utilizaron para predecir el atrape de escoria para diferentes caudales de inyección de argón.

Finalmente en el Capítulo 6 se propone un modelo híbrido ASMM-Dos Fluidos, donde la mezcla acero-argón es resuelta a través de un modelo algebraico y la interacción entre la mezcla y la escoria es tratada haciendo uso de un modelo de dos fluidos. Este novedoso tratamiento del flujo multifásico se implementa en el código comercial CFX y tiene como finalidad obtener una herramienta que permita aplicar el modelo MUSIG - Multiple Size Group Model, que se encuentra implementado en el mismo código. Este último permite realizar el cálculo con varios grupos de partículas, gotas o burbujas de distinto tamaño a un costo computacional relativamente bajo y posibilitaría cuantificar y caracterizar a las partículas de escoria atrapadas en el acero. Con el modelo híbrido se resuelven los problemas de validación y la cuchara siderúrgica en distintas condiciones de operación, para configuraciones axisimétricas y 3D, para problemas con y sin superficie libre.

De esta manera se ha logrado obtener valiosas herramientas que permiten simular las condiciones tan extremas que se encuentran en una cuchara siderúrgica y que exigen estrategias computacionales robustas y de permanente desarrollo.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Generalidades	1
1.2. Objetivo	2
1.3. Motivación	3
1.4. Clasificación del Flujo Multifásico	4
1.5. Descripción Fenomenológica	7
1.5.1. Inclusiones Exógenas debido al Atrape de Escoria	7
1.5.2. Descripción de la Cuchara Siderúrgica, Repartidor y Molde	8
1.6. Modelos Matemáticos para Flujos Multifásicos	12
1.7. Contenidos de la Tesis	14
1.7.1. Modelo de Dos Fluidos - Una Formulación como Sistema Advectivo-Difusivo-Reactivo	15
1.7.2. Un Precondicionador de la Matriz de Masa para Evitar la Mala Postura Matemática del Modelo de Dos Fluidos	16
1.7.3. Modelo ASMM (Algebraic Slip Mixture Model)	17
1.7.4. Aplicación del Modelo ASMM a la Resolución del Flujo Multifásico en una Cuchara Siderúrgica	18
1.7.5. Modelo Híbrido ASMM - Dos Fluidos	18
2. Modelo de Dos Fluidos - Una Formulación como Sistema Advectivo-Difusivo-Reactivo	21
2.1. Introducción	21
2.2. Modelo Matemático del Flujo Bifásico	23
2.2.1. Ecuaciones de Balance Genéricas	24
2.2.2. Interfaz entre Fases	25
2.2.3. Función Característica X_k	25
2.2.4. Ecuaciones de Balance Promediadas	26
2.2.5. Condición de Salto	29

2.2.6.	Ecuaciones Constitutivas	30
2.2.7.	Fuerzas Interfaciales	32
2.3.	Modelo Matemático del Flujo Bifásico Turbulento Incompresible	34
2.3.1.	Modelo de Turbulencia $\kappa - \epsilon$	38
2.3.2.	Condiciones Iniciales y de Contorno	39
2.3.3.	Ley de Pared	40
2.4.	Formulación como Sistema Advectivo-Difusivo	
	-Reactivo	41
2.5.	Discretización Numérica por el Método	
	de los Elementos Finitos	46
2.5.1.	El Método SUPG para Sistemas Advectivos-Difusivos	
	-Reactivos	47
2.5.2.	El Método SUPG-PSPG visto como Sistema Advectivo-Difusivo-	
	Reactivo	49
2.5.3.	Estabilización de la Fase Continua	51
2.5.4.	Estabilización de la Fase Dispersa	52
2.6.	Ejemplo Numérico	53
2.6.1.	Canal Bidimensional con un Escalón	54
3.	Un Precondicionador de la Matriz de Masa para Evitar la Mala Postura	
	Matemática del Modelo de Dos Fluidos	61
3.1.	Introducción	61
3.2.	Modelo de Dos Fluidos	64
3.2.1.	Ecuaciones de Balance de Masa y Cantidad de Movimiento	65
3.3.	Sistemas Hiperbólicamente Fuertes y Buena Postura	66
3.4.	Análisis de las Características	70
3.5.	Precondicionamiento de la Matriz de Masa - PMM	74
3.6.	Discretización	79
3.7.	Resultados	80
3.7.1.	Water Faucet	81
3.7.2.	Water Faucet Modificado	86
3.7.3.	Wave traveling	89
4.	Modelo ASMM	
	(Algebraic Slip Mixture Model)	93
4.1.	Introducción	93
4.2.	Formulación Matemática del Modelo de Mezcla	94

4.2.1. Modelo Multifluido	95
4.2.2. Ecuación de Balance de Masa para la Mezcla	96
4.2.3. Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento Lineal para la Mezcla	97
4.2.4. Ecuación de Balance de Masa para la Fase Dispersa	99
4.2.5. Formulación Alternativa de la Ecuación de Balance de Masa para la Fase Dispersa	101
4.2.6. Determinación de la Velocidad Relativa	102
4.2.7. Modelos Constitutivos	105
4.3. Modelo de Turbulencia LES	106
4.3.1. Filtrado	107
4.3.2. Modelo SGS (Subgrid-Scale)	108
4.3.3. Ley de Pared	109
4.4. Ecuaciones para el Modelo de Mezcla	110
4.4.1. Condiciones Iniciales y de Contorno	111
4.5. Discretización Numérica por el Método de los Elementos Finitos	112
4.5.1. Ecuaciones de Balance de Masa y Cantidad de Movimiento Lineal para la mezcla	112
4.5.2. Ecuación de Balance de Masa para la fase dispersa	115
5. Aplicación del Modelo ASMM a la Resolución del Flujo Multifásico en una Cuchara Siderúrgica	117
5.1. Introducción	117
5.2. Validación del Código Computacional	117
5.2.1. Modos de Dispersión del Gas	118
5.2.2. Simulación Numérica del Modelo Físico Agua-Aire	120
5.2.3. Escalas de Tiempo y Espacio Macroscópicas - Microscópicas	120
5.2.4. Malla	122
5.2.5. Condiciones de Contorno e Iniciales	123
5.2.6. Resultados	125
5.3. Cuchara Siderúrgica	132
5.3.1. Descripción del Problema Industrial	132
5.3.2. Malla	133
5.3.3. Condiciones de Contorno e Iniciales	133
5.3.4. Datos Físicos	134
5.3.5. Área de Apertura del Ojo en la Escoria	136

5.3.6. Atrape de Escoria	139
6. Modelo Híbrido ASMM - Dos fluidos	145
6.1. Introducción	145
6.2. Modelo Híbrido ASMM-Dos Fluidos	146
6.2.1. Formulación Matemática del Modelo Híbrido ASMM-Dos Fluidos	147
6.2.2. Modelo de Turbulencia $\kappa - \epsilon$ Homogéneo	149
6.2.3. Término de Cantidad de Movimiento Lineal Interfacial	150
6.2.4. Modelo de Sato	152
6.3. Discretización Numérica y Estrategia de Solución	153
6.4. Validación del Código Computacional	155
6.4.1. Simulación Numérica del Modelo Físico Agua-Aire	155
6.4.2. Malla	155
6.4.3. Condiciones de Contorno e Iniciales	157
6.4.4. Resultados	159
6.5. Cuchara Siderúrgica	169
6.5.1. Condiciones de Contorno e Iniciales	169
6.5.2. Área de Apertura del Ojo en la Escoria	171
6.5.3. Atrape de Escoria	175
6.5.4. Patrones de Flujo	183
7. Conclusiones	187
A. Análisis Tensorial	193
A.1. Introducción	193
A.2. Definición de Cantidades y Operadores	193
B. Análisis del Fenómeno Físico de Atrape de Escoria	199
B.1. Introducción	199
B.2. Fenómeno de Atrape de Escoria	199
B.2.1. Descripción Fenomenológica- Tipos de Atrape	199
B.2.2. Fuerzas en el Fenómeno de Atrape	200
B.2.3. Números Adimensionales	201
B.3. Regímenes del Flujo en la Interfaz	202
B.3.1. Régimen de Interfaz Turbulenta	203
B.3.2. Régimen de Inestabilidades del Tipo Kelvin-Helmholtz	203
B.3.3. Régimen de Difusión Molecular	204

Índice de figuras

1.1. Esquema del proceso de fabricación de acero por el método de colada continua.	2
1.2. Clasificación del flujo bifásico. Figura extraída de Ishii [Ish75] §I.2.	6
1.3. Inclusiones exógenas típicas en una matriz de acero. Izquierda: inclusión vítrea, medio: inclusión opaca y derecha: cristales de alúmina sobre la superficie de una inclusión de acero globular.	7
1.4. Inclusiones de escoria en el acero contenido en una cuchara siderúrgica. . .	8
1.5. Representación esquemática del fenómeno de agitado fuerte en un corte de una cuchara siderúrgica.	9
1.6. Modelo físico agua-aire-kerosene de una cuchara siderúrgica perteneciente al Instituto Argentino de Siderurgia (IAS), escala 1:1. a) Detalle de la apertura del ojo - vista superior, b) Detalle de la apertura del ojo - vista inferior c) Atrape de gotas de kerosene en agua.	10
1.7. Representación esquemática del repartidor.	11
1.8. Representación esquemática del atrape de polvo colador en el molde. Figura extraída de Iguchi et al. [IYSM00].	11
2.1. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Dominio computacional y malla.	54
2.2. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Fracción de vacío para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [50,100]$	55
2.3. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Presión adimensional para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [50,100]$	56
2.4. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Fracción de vacío para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$	56
2.5. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Presión adimensional para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$	57
2.6. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Fracción de vacío para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$, con malla refinada.	57

2.7. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Presión adimensional para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$, con malla refinada.	58
2.8. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Campo de fracción de gas, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$, solución PETSc-FEM.	58
2.9. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Módulo de la velocidad del líquido, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$, solución PETSc-FEM.	59
2.10. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Módulo de la velocidad del gas, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$, solución PETSc-FEM.	59
2.11. Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Velocidad relativa, (a) Solución de Referencia (b) Solución PETSc-FEM, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$	60
3.1. Representación esquemática del modelo de dos fluidos. Figura extraída de Hau y Wang [HW00].	65
3.2. Interpretación geométrica de la norma de una matriz.	69
3.3. Representación esquemática de los posibles casos en un análisis de dispersión.	74
3.4. Autovalores para un barrido en α_g y v_l/v_g , sin preconditionamiento.	77
3.5. Autovalores para un barrido en α_g y v_l/v_g , con preconditionamiento ($\gamma = 1$).	77
3.6. Autovalores para un barrido en α_g y v_l/v_g con preconditionamiento y $\gamma \neq 1$. Todos los autovalores son reales y son iguales a la parte real de los autovalores de la Fig. 3.4.	78
3.7. Problema Water Faucet - Representación esquemática de la evolución temporal de la columna de agua.	81
3.8. Problema Water Faucet - Fracción de vacío con beta para $t = 0.4$ s. Se realiza un barrido en el número de elementos de la malla. N° elem. = [40, 80, 160, 320, 640, 1280].	83
3.9. Problema Water Faucet - Velocidad del líquido con beta para $t= 0.4$ s. Se realiza un barrido en el número de elementos de la malla. N°elem. =[40, 80, 160, 320, 640,1280].	83
3.10. Problema Water Faucet - Error medio cuadrático de la fracción de vacío.	84
3.11. Problema Water Faucet - Fracción de vacío con beta para el estado estacionario. Malla 320 elementos.	85
3.12. Problema Water Faucet - Velocidad de líquido con beta para el estado estacionario. Malla 320 elementos.	85
3.13. Problema Water Faucet Modificado - Fracción de vacío sin beta para $t = 0.3675$ s. Malla 320 elementos.	86
3.14. Problema Water Faucet Modificado - Velocidad del líquido sin beta para $t = 0.3675$ s. Malla 320 elementos.	86

3.15. Problema Water Faucet Modificado - Fracción de vacío con beta para $t = 0.4$ s. Malla 320 elementos.	87
3.16. Problema Water Faucet Modificado - Velocidad del líquido con beta para $t = 0.4$ s. Malla 320 elementos.	87
3.17. Problema Water Faucet Modificado - Fracción de vacío con beta para el estado estacionario. Malla 320 elementos.	88
3.18. Problema Water Faucet Modificado - Velocidad del líquido con beta para el estado estacionario. Malla 320 elementos.	88
3.19. Problema Wave Traveling - Velocidad del gas con beta para 5 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.	90
3.20. Problema Wave Traveling - Velocidad del gas sin beta para 4 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.	90
3.21. Problema Wave Traveling - Fracción de vacío con beta para 5 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.	91
3.22. Problema Wave Traveling - Fracción de vacío sin beta para 4 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.	91
3.23. Problema Wave Traveling - Velocidad del gas con beta para $t = 0.025$ s. Malla 100 elementos.	92
3.24. Problema Wave Traveling - Fracción de vacío con beta para $t = 0.025$ s. Malla 100 elementos.	92
5.1. Modos de dispersión del gas en tapones porosos: a) burbujas discretas, b) coalescencia incipiente, c) coalescencia (Fotos extraídas de Anagbo y Brimacombe [AB90]).	118
5.2. Variación de la frecuencia de las burbujas con el caudal específico para distintas posiciones por encima del tapón poroso. (Figura extraída de Anagbo y Brimacombe [AB90]).	119
5.3. Patrón de circulación del líquido en la cuchara.	121
5.4. Malla de elementos hexaédricos, utilizada en la simulación del sistema bifásico agua-aire, con $N_r = 40$, $N_z = 60$ y $N_\theta = 1$	123
5.5. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. <i>Fracción de gas</i> en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 50 mm.	126

- 5.6. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm. 127
- 5.7. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm. 127
- 5.8. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm. 128
- 5.9. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm. 128
- 5.10. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (— \circ —), modelo de dos fluidos (— \diamond —) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad promedio de ascenso de las burbujas en función de la coordenada axial. 129
- 5.11. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm. 130
- 5.12. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM(—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm. 131
- 5.13. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm. 131
- 5.14. Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm. 132

5.15. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Malla de elementos hexaédricos con $N_r = 60$, $N_z = 80$ y $N_\theta = 1$	134
5.16. Representación esquemática de una cuchara siderúrgica para un agitado fuerte.	136
5.17. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Fracción de escoria y radio de apertura del ojo para $Q = 35$ (a), 80 (b), 120 (c), 160 (d) l min^{-1}	137
5.18. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1}	140
5.19. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Patrón de velocidades y campo de fracción de escoria para $Q = 80 \text{ l min}^{-1}$	141
5.20. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Número de Weber e isocurvas de fracción de escoria [0.005 : 0.005 : 0.05] para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1}	142
6.1. Representación esquemática de una malla típica con espesor unitario.	153
6.2. Diagrama de flujo de la estrategia de solución utilizada por CFX.	154
6.3. Mallas utilizadas para cada caso.	156
6.4. Comparación del modelo ASMM-CFX con mallas de 40×60 , 60×90 y 80×120 para el modelo físico en frío agua-aire. <i>Fracción de gas</i> en el eje de la cuchara	157
6.5. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. <i>Fracción de gas</i> en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 50 mm.	160
6.6. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. <i>Fracción de gas</i> en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm.	160
6.7. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. <i>Fracción de gas</i> en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm.	161
6.8. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. <i>Fracción de gas</i> en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm.	161

- 6.9. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm. 162
- 6.10. Comparación del modelo ASMM-CFX (-o-), modelo de dos fluidos (-◇-) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Velocidad promedio de ascenso de las burbujas* en función de la coordenada axial. 163
- 6.11. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Velocidad axial del líquido* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm. 164
- 6.12. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Velocidad axial del líquido* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm. 164
- 6.13. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Velocidad axial del líquido* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm. 165
- 6.14. Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Velocidad axial del líquido* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm. 165
- 6.15. Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 50 mm. 166
- 6.16. Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm. 167
- 6.17. Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm. 167
- 6.18. Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm. 168

6.19. Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. Fracción de gas en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm.	168
6.20. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Fracción de escoria y radio de apertura del ojo para $Q = 35, 80, 120, 160 \text{ l min}^{-1}$.	172
6.21. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Fracción de escoria y radio de apertura del ojo para $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.	173
6.22. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Iso-superficies de fracción de escoria para $\alpha_{es} = 0.005$ y $\alpha_{es} = 0.99$ correspondientes a un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$.	174
6.23. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1} .	176
6.24. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Isocurvas de fracción de escoria [0.005 : 0.005 : 0.05] para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1} .	177
6.25. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.	178
6.26. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Isocurvas de fracción de escoria [0.005 : 0.005 : 0.05] para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.	179
6.27. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados para un dominio axisimétrico y (b) Resultados para un dominio 3D.	180
6.28. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Isocurvas de fracción de escoria [0.005 : 0.005 : 0.05] para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados para un dominio axisimétrico y (b) Resultados para un dominio 3D.	181
6.29. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Número de Weber e isocurvas de fracción de escoria [0.005,0.05] para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1} .	182

6.30. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines en el plano para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.	183
6.31. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines en el plano para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados para un dominio axisimétrico y (b) Resultados para un dominio 3D.	184
6.32. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$	185
6.33. Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines e isosuperficie correspondiente a una fracción de escoria de 0.99 para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$	185
B.1. Representación esquemática del atrape de escoria (a) estacionario y (b) por KHI	200
B.2. Representación esquemática del atrape de escoria en el ojo. Las fuerzas que compiten en el fenómeno de atrape son F_c , F_b y F_σ , fuerzas debido a las tensiones de corte, boyancia y a la tensión superficial respectivamente. . . .	201
B.3. Régimen de Kelvin-Helmholtz.	204
B.4. Régimen de ruptura de ondas: (a) Instante previo a la ruptura; (b) Ruptura de la onda.	204

Índice de cuadros

2.1. Variables en las ecuaciones de balance genéricas.	24
2.2. Coeficiente de drag para distintos regímenes.	34
2.3. Configuración física para el problema de un canal bidimensional con un escalón.	55
5.1. Escalas de longitud y tiempo macroscópicas - microscópicas.	122
5.2. Viscosidad y densidad para las distintas fases.	135
5.3. Velocidad de deslizamiento del argón y la escoria.	135
5.4. Comparación entre resultados empíricos y valores calculados del área y radio de apertura del ojo (A_0^i [m ²] y R_0^i [m])	138
6.1. Casos utilizados para determinar la convergencia en malla.	156
6.2. Comparación entre resultados empíricos y valores calculados del área y radio de apertura del ojo (A_0^i [m ²] y R_0^i [m])	171

Capítulo 1

Introducción

1.1. Generalidades

El proceso de colada continua es usado para solidificar más de 750 millones de toneladas por año de acero en todo el mundo. Este proceso es la etapa final de la fabricación del acero, donde se puede eliminar o incorporar impurezas. Las impurezas provocan una reducción de las propiedades del acero (ej. resistencia a la fatiga, resiliencia, etc.). La República Argentina produce un volumen total de acero del orden de 4.000.000 de toneladas por año, lo cual significan 1900 millones de U\$\$ anuales, esta magnitud da una idea de la importancia económica de la industria siderúrgica en el país.

La mayoría de los avances en la materia se han basado en conocimientos adquiridos de la experiencia con el proceso. Estudios en planta, necesarios para ampliar el conocimiento actual del fenómeno, que permitan optimizar el proceso no son factibles debido a las altas temperaturas, la opacidad del medio y los grandes volúmenes de acero manejados. Actualmente se utilizan modelos físicos en frío¹ y en una menor medida modelos computacionales para optimizar el proceso y lograr mejoras en el producto final.

En la Fig. 1.1 se puede apreciar los tres componentes fundamentales en la fabricación de acero por el método de colada continua, estos son:

- Cuchara siderúrgica (*ladle*).
- Repartidor (*tundish*).
- Molde (*mold*).

¹ Estos modelos son también conocidos como modelos hidráulicos, ampliamente utilizados en la industria para desarrollos y demás aspectos. Su utilización en la mayoría de los laboratorios experimentales de siderurgia es principalmente debida a que las atmósferas en modelos en caliente (acero-argón-escoria) son altamente corrosivas, lo que hace al procedimiento de adquisición de datos una tarea compleja y costosa.

Al seguir una colada, la parte del proceso que resulta de interés, comienza cuando la cuchara es llenada con acero en estado líquido que proviene del convertidor. El acero ya en la cuchara se encuentra cubierto con una capa de escoria de aproximadamente 10 a 15 cm de espesor que impide el contacto directo con la atmósfera, posteriormente es trasvasado al repartidor el cual tiene dos funciones, la primera (como su nombre lo indica) es repartir o alimentar a los moldes a través de las buzas de descarga y la segunda es la de completar la limpieza del acero por medio de la flotación de la escoria. En el molde el acero comienza a solidificarse debido al contacto con la paredes refrigeradas con agua, originando una cáscara sólida que debe contener al metal en estado líquido. Fuera del molde la barra es conducida por el tren de rodillos y sigue enfriándose por la acción de los sprays de agua.

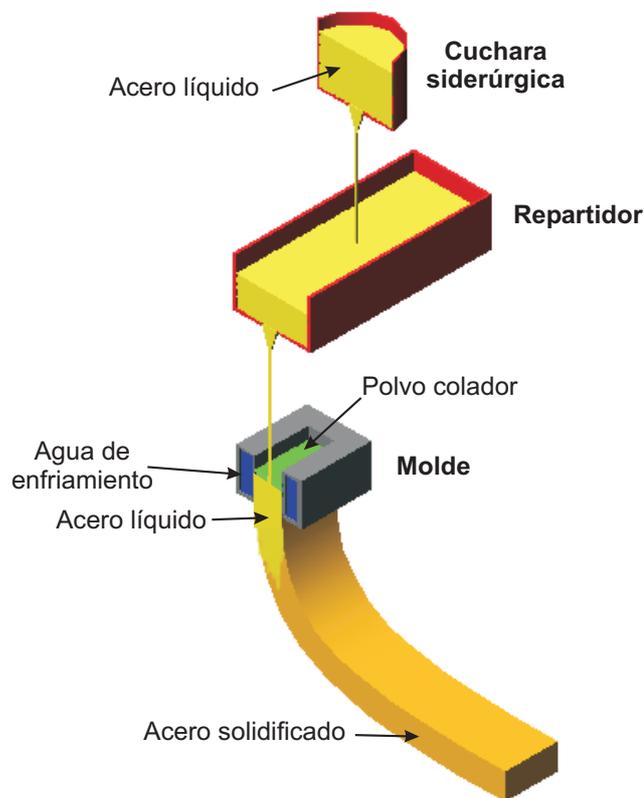


Figura 1.1: Esquema del proceso de fabricación de acero por el método de colada continua.

1.2. Objetivo

El objetivo principal de la Tesis es simular diversos fenómenos relacionados con los flujos multifásicos (acero-argón-escoria) que tienen lugar en el proceso de fabricación de

acero por el método de colada continua. La finalidad es proveer a la industria metalúrgica de una herramienta que permita lograr un mejor conocimiento del proceso y una optimización del mismo. Para lo cual se desarrollaron programas de computación orientados a este tipo de aplicaciones que fueron validados haciendo uso de modelos físicos en frío (agua-aire-kerosene) y simulaciones de referencia, de manera tal, de elevar la calidad del acero producido reduciendo los costos por pérdidas.

1.3. Motivación

El término *acero limpio* [ZT03] es comúnmente usado para describir aceros que poseen niveles bajos de elementos solutos tales como azufre, fósforo, nitrógeno, oxígeno e hidrógeno; niveles controlados de elementos residuales (impurezas metálicas) como cobre, plomo, zinc, níquel, cromo, bismuto, antimonio y magnesio; y una baja frecuencia de defectos producidos por la presencia de óxidos creados durante el proceso de fabricación del acero y la metalurgia de la cuchara.

Debido a que el término *acero limpio* es poco claro (o difuso) es más preciso hablar de *aceros de alta pureza* entendiéndose como aquellos aceros con niveles bajos de solutos, *aceros de bajos residuos* como aquellos aceros con bajos niveles de impurezas originadas por la incorporación de chatarra en la fabricación del acero y *aceros limpios* cuando se tiene una baja frecuencia de defectos debido a la presencia de óxidos (inclusiones).

Las inclusiones provienen de diversas fuentes, incluyendo desoxidación, reoxidación, atrape de escoria, desgaste de refractario y reacciones químicas. Estas inclusiones pueden generar defectos tales como grietas y astillas (*slivers*) en el producto final, con la consecuente reducción de la resistencia a la fatiga y de la capacidad de deformación de las piezas construidas con el mismo.

En la tesis son de interés aquellos problemas de limpieza del acero que surgen de la incompleta separación de la escoria emulsionada, ya que la misma constituye una de las principales fuentes de macro-inclusiones ($>200 \mu m$).

El fenómeno de emulsificación del metal líquido en la escoria, o inversamente, de la escoria en el metal líquido, juega un rol importante en las diversas etapas de la producción de acero por el método de colada continua:

- Cuando se realizan en la cuchara de acero operaciones de afino basadas en reacciones metal-escoria, como la desulfuración o la defosforación, la formación debido al agitado fuerte con gas inerte de una emulsión de gotas de escoria en el acero líquido acelera la cinética de las reacciones correspondientes [MG95].

- En las operaciones de colada continua de acero, la formación de emulsiones de escoria en el acero líquido (cubriente del repartidor o polvo colador del molde) da lugar a la generación de defectos denominados macro-inclusiones en el acero, debidos al atrape físico de las gotas de la emulsión de escoria en el frente de solidificación.
- Durante la etapa de agitado débil las burbujas de argón ascienden a través de la masa de acero líquido interceptando en su camino micro-inclusiones que resultan del proceso de desoxidación. Las mismas se adhieren a la interfaz acero-argón de la burbuja, pudiendo ser llevadas hasta la interfaz acero-escoria, limpiando de esta manera el acero. Las burbujas al atravesar la interfaz generan atrape de acero en la escoria, produciendo grandes pérdidas anuales.

Por lo tanto, la modelización por computadora del atrape de escoria permitirá optimizar la operación en el proceso de producción de aceros, en las distintas etapas mencionadas. Ello redundará esencialmente en una mejor calidad del producto final, y una disminución de costos de producción.

1.4. Clasificación del Flujo Multifásico

Se entiende como flujo multifásico a todo flujo en el cual se encuentran presentes más de un fluido, donde las fases se asumen mezcladas sobre escalas de longitud mayores que las escalas de longitud molecular.

Ejemplos son burbujas de gas ascendiendo en un líquido, gotas de agua cayendo en el aire, flujos de vapor de agua en una caldera, flujos de agua, gas y petróleo en un pozo petrolero.

Los flujos multifásicos son encontrados en una gran cantidad de aplicaciones industriales tales como reactores químicos, evaporadores, combustores, fabricación de acero y equipamiento de centrales nucleares. También están presentes en fenómenos naturales (nubes, formación de dunas de arena, etc).

De los anteriores ejemplos se observa que el término *fase* es aplicado en un sentido más amplio que su frecuente uso en termodinámica. Por *fase termodinámica* se hace referencia a la distinción familiar entre los cuatro estados de la materia, sólido, líquido, gas y eventualmente plasma. Las *fases* de un flujo multifásico pueden ser de muy diferentes especies químicas. Los flujos multifásicos no deberían ser confundidos con los flujos multicomponente, estos últimos se caracterizan por estar mezclados a nivel molecular, siendo los campos de velocidad y temperatura comunes. En los flujos multifásicos, las especies son mezcladas para escalas de longitud más grande que las escalas de longitud molecular.

En base a lo reportado por Ishii [Ish75] se ha clasificado al flujo multifásico de acuerdo a:

1. Combinación de las fases.²
2. Estructura del flujo.

El primer caso resulta de la combinación de las fases, así se tiene por ejemplo para flujos *bifásicos*, mezclas *gas-sólido*, *gas-líquido*, *líquido-sólido* y *dos líquidos inmiscibles*.

La segunda clasificación está basada en la estructura de la interfaz y la distribución topológica, y es más dificultosa de realizar, siendo que estos cambios ocurren continuamente. Por lo tanto de acuerdo a la geometría de la interfaz es posible distinguir tres clases de flujos; *flujos separados*, *flujos de mezcla* o de transición y *flujos dispersos*. Hay que tener en cuenta que cada una de estas clases tiene subclases definidas por el régimen típico del flujo, tal como se puede observar en la Fig. 1.2. Esta clasificación no es la única (ver [Hew82]) pero es una de las más frecuentemente usadas para flujos multifásicos.

² Entendiendo como fase a lo expresado en el párrafo anterior.

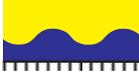
Clase	Régimen	Geometría	Configuración	Ejemplos
Flujos separados	Flujo film		-Film de líquido en gas -Film de gas en líquido	-Film en congelamiento -Film en ebullición
	Flujo anular		-Núcleo de líquido y film de gas -Núcleo de gas y film de líquido	-Film en ebullición -Condensadores
	Flujo jet		-Jet de líquido en gas -Jet de gas en líquido	-Atomización -Condensador jet
Mezcla	Flujo tapón		-Bolsón de gas en líquido	-Sodio en ebullición en convección forzada
	Flujo anular gaseoso		-Burbujas de gas en un film de líquido con núcleo de gas	-Evaporadores con nucleación en la pared
	Flujo anular húmedo		-Núcleo de gas con gotas y film de líquido	-Generador de vapor
	Flujo anular húmedo y gaseoso		-Núcleo de gas con gotas y film de líquido con burbujas de gas	-Ebullición en un canal de un reactor nuclear
Flujos dispersos	Flujo de burbujas		-Burbujas de gas en líquido	-Reactores químicos
	Flujo de gotas		-Gotas de líquido en gas	-Enfriamiento con spray
	Flujo de partículas		-Partículas sólidas en líquido o gas	-Transporte de granos

Figura 1.2: Clasificación del flujo bifásico. Figura extraída de Ishii [Ish75] §I.2.

1.5. Descripción Fenomenológica

El refinamiento del acero y las operaciones en la colada continua controlan la limpieza del acero. Un estudio de la remoción de inclusiones encontró que el tratamiento en la cuchara disminuye las inclusiones en un 65-75 %, las inclusiones removidas en el repartidor son de un 20-25 % y por último en el molde son removidas entre un 5 y un 10 % de las inclusiones. A continuación se presenta una introducción a las inclusiones exógenas debido al atrape de escoria y se describen los fenómenos donde intervienen los flujos multifásicos en la cuchara siderúrgica, repartidor y molde.

1.5.1. Inclusiones Exógenas debido al Atrape de Escoria

Las operaciones de fabricación de acero o transferencia entre recipientes que involucran flujos turbulentos, donde tiene lugar el mezclado de escoria y metal, producen partículas de escoria suspendidas en el acero. Las inclusiones de escoria [ZT03], tienen un tamaño comprendido entre 10-300 μm , contienen grandes cantidades de CaO o MgO y son por lo general líquidas a la temperatura del acero fundido (1773-1873 K), por lo tanto son de forma esférica (Fig. 1.3).

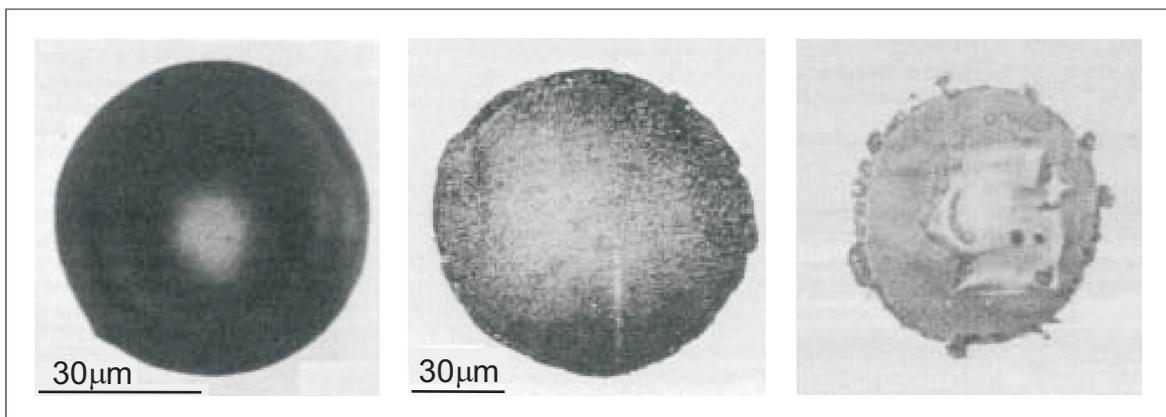


Figura 1.3: Inclusiones exógenas típicas en una matriz de acero. Izquierda: inclusión vítrea, medio: inclusión opaca y derecha: cristales de alúmina sobre la superficie de una inclusión de acero globular.

Para el proceso de fabricación de acero por el método de colada continua los factores que afectan al atrape de escoria en el acero son:

- Operaciones de transferencia desde la cuchara al repartidor y del repartidor al molde, especialmente por apertura hacia la atmósfera.
- Derramamiento de vórtices en la superficie libre del acero fundido.

- Emulsificación y atrape de escoria en la interfaz acero-escoria, especialmente cuando el caudal de gas utilizado para el agitado está por encima del valor crítico.
- Turbulencia en el menisco del molde.
- Propiedades de la escoria tales como tensión superficial y viscosidad.

En la Fig. 1.4 se puede observar inclusiones de escoria en el acero contenido en una cuchara siderúrgica debido al atrape de escoria. Las inclusiones fueron extraídas por el método Slime.³

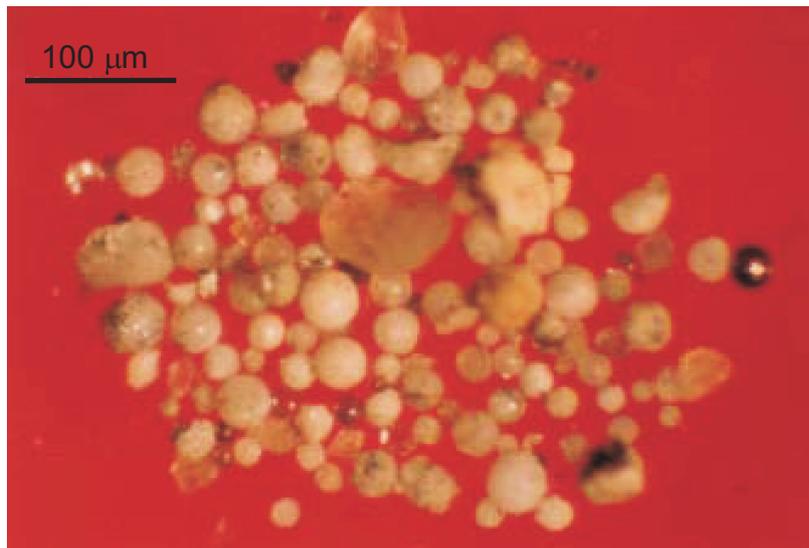


Figura 1.4: Inclusiones de escoria en el acero contenido en una cuchara siderúrgica.

1.5.2. Descripción de la Cuchara Siderúrgica, Repartidor y Molde

A continuación se realiza un análisis detallado de los principales componentes en la fabricación de acero por el método de colada continua, poniendo énfasis en los fenómenos producidos por la existencia de flujos multifásicos.

A.- Cuchara Siderúrgica

En la cuchara siderúrgica coexisten dos fases líquidas, *metal fundido* y *escoria*, y una fase gaseosa, dada por el *argón* inyectado a través de un tapón poroso situado en la parte inferior de la cuchara, cuya finalidad es el agitado de la masa de acero líquida.

³ Este método es también llamado Técnica de Disolución Potencioestática. Una muestra de acero (200 g-2 kg), sumergida en una solución de FeCl_2 o FeSO_4 , es disuelta aplicando una corriente eléctrica a través de la misma. Las inclusiones obtenidas son luego recolectadas, medidas y analizadas.

La inyección de argón en el baño de acero líquido permite incrementar las tasas de reacción, eliminar gradientes térmicos y/o de composición y remover partículas.

Durante la operación de la cuchara, los caudales de trabajo pueden ser muy diferentes dependiendo de la tarea a realizar. Por lo tanto se puede separar el proceso de agitado, según el caudal de argón a inyectar, en *agitado fuerte* y *agitado débil*. El primero tiene como finalidad incrementar el grado de reacción entre la escoria y el acero líquido, encontrándose la escoria en forma de una fina capa que flota por sobre la masa de acero líquido. Durante el *agitado fuerte* se tiene atrape de escoria en el acero, por lo tanto para esta operación es primordial conocer en forma precisa el patrón de velocidades del líquido para poder predecir el atrape de escoria.

En el *agitado débil* las finalidades pueden ser muy diversas, desde la homogeneización térmica y/o química del acero, hasta la remoción de inclusiones. En este régimen también es necesario poder predecir el patrón de velocidades del líquido, pero se suma ahora la necesidad de conocer la velocidad de ascenso y distribución de las burbujas de gas.

Como se observa en la Fig. 1.5, durante el agitado fuerte ligamentos y gotas tienden a formarse en la interfaz acero-escoria (atrape de escoria en el acero) debido a las altas tensiones de corte entre el acero y la escoria, originando un incremento significativo del área interfacial, afectando por ende a la reacción química.

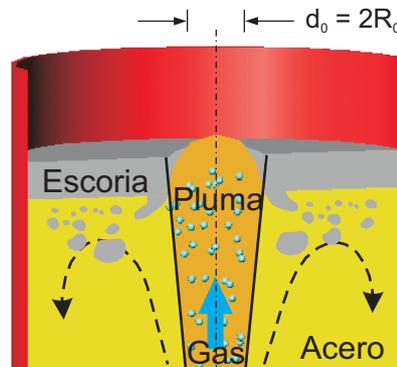


Figura 1.5: Representación esquemática del fenómeno de agitado fuerte en un corte de una cuchara siderúrgica.

Cabe acotar que durante el proceso de agitado fuerte se produce un desplazamiento radial de la escoria poniendo en contacto directo el acero en caliente con la atmósfera (apertura del ojo). Cuando esto ocurre, se produce un fenómeno de reoxidación que genera inclusiones, siendo estas últimas de un tamaño menor a las generadas por el atrape de escoria.

En la Fig. 1.6 se puede observar el fenómeno antes mencionado para un modelo físico agua-aire-kerosene [CS01], en la Fig. 1.6 a) y b) se distingue claramente la zona de apertura del ojo, mientras que en la Fig. 1.6 c) se observa las gotas de kerosene atrapadas por el agua.

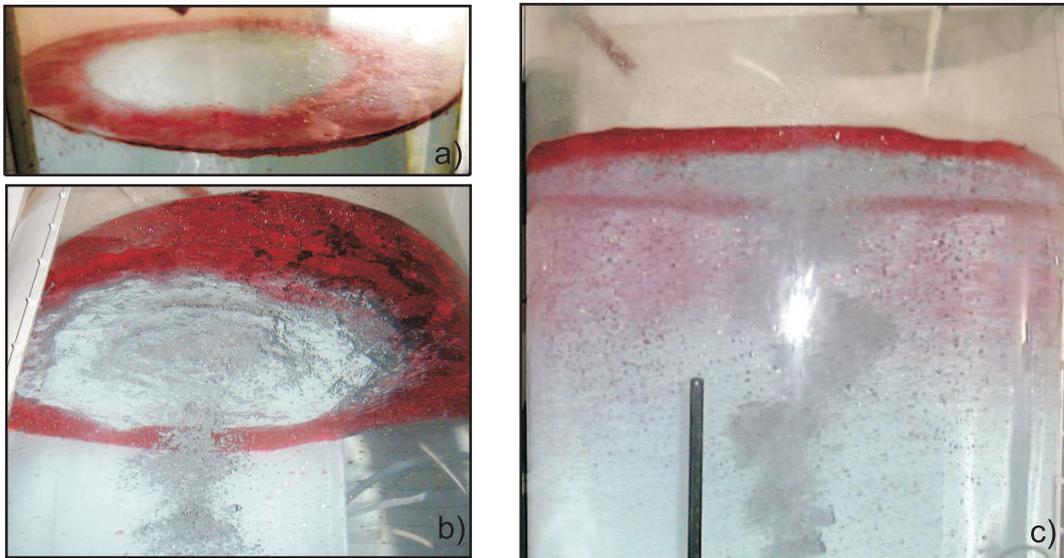


Figura 1.6: Modelo físico agua-aire-kerosene de una cuchara siderúrgica perteneciente al Instituto Argentino de Siderurgia (IAS), escala 1:1. a) Detalle de la apertura del ojo - vista superior, b) Detalle de la apertura del ojo - vista inferior c) Atrape de gotas de kerosene en agua.

B.- Repartidor

Las operaciones que se llevan a cabo en el repartidor afectan en gran medida a la limpieza del acero. Dependiendo de sus condiciones de operación, el repartidor (Fig. 1.7, página siguiente) puede actuar como la cuchara removiendo las inclusiones existentes o bien puede contaminar el acero debido al atrape de escoria, reoxidación, y disolución del refractario. Los siguientes factores afectan en gran medida a la calidad del acero producido: profundidad y capacidad del repartidor, y el control del flujo de acero.

C.- Molde

En la Fig. 1.8 (página siguiente) se representa un esquema de un molde utilizado en la fabricación de acero por colada continua. El atrape de polvo colador en el acero influye fuertemente en la calidad del acero producido. Gran cantidad de investigaciones han sido llevadas a cabo con la finalidad de poder determinar cuales son los

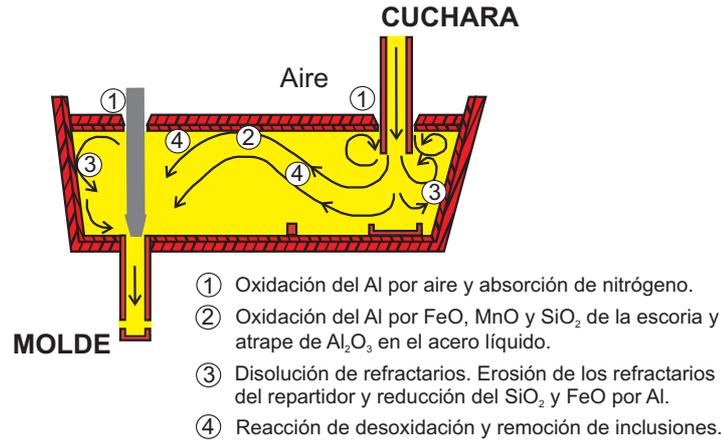


Figura 1.7: Representación esquemática del repartidor.

mecanismos del atrape. También se han realizado importantes esfuerzos para prevenir el atrape de polvo colador. Los siguientes tres tipos de mecanismos de atrape (Fig. 1.8 (1), (2), (3)) han sido identificados como posibles de ocurrir en el molde:

1. Calle de vórtices de Von Karman formada detrás de la buza. Los vórtices atrapan polvo colador ubicado sobre el menisco del molde.
2. Altas tensiones de corte entre el flujo de acero líquido que retorna desde la cara del molde y el polvo colador, induciendo inestabilidades por corte que causan el atrape.
3. El argón inyectado dentro de la buza para prevenir obstrucciones de alúmina sobre las paredes internas de la misma; este gas al llegar a la interfaz acero/polvo colador causa atrape de polvo.

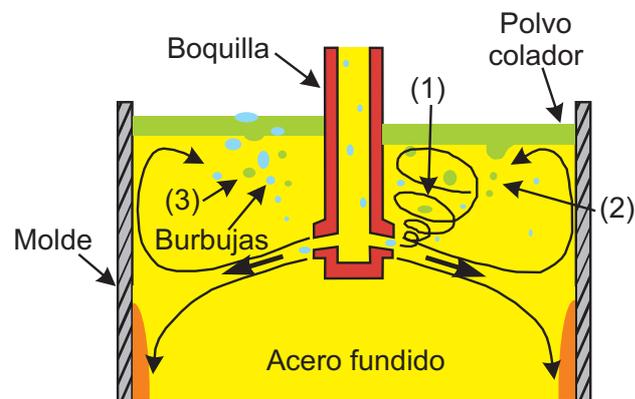


Figura 1.8: Representación esquemática del atrape de polvo colador en el molde. Figura extraída de Iguchi et al. [YISM00].

1.6. Modelos Matemáticos para Flujos Multifásicos

Cuando se modela un flujo multifásico, es necesario conocer qué fenómenos, efectos y estructuras del flujo son dominantes. La estructura del flujo es un factor importante. Como se mencionó en la Sección 1.4, hay tres clases de estructura para un flujo multifásico (separado, mezcla y disperso). Los modelos de flujos separados difieren considerablemente respecto a los modelos de flujos dispersos. Normalmente en los flujos dispersos no es posible determinar la estructura o la posición exacta de la interfaz, por lo tanto, alguna cantidad promediada es utilizada para el análisis del flujo.

Los modelos matemáticos para flujo multifásico pueden ser categorizados en dos grandes grupos. En el primer grupo, se encuentran los modelos que siguen la interfaz entre las dos fases (utilizados para flujos separados). Los modelos del segundo grupo no calculan la posición de la interfaz, asumen que en todo el dominio participan cada una de las fases presentes con una fracción de volumen asociada. Estos modelos son utilizados para flujos dispersos o de transición.

Para *flujos multifásicos separados*, donde la estructura entre las fases no es muy compleja, es posible usar un modelo que se basa en resolver las ecuaciones para un flujo de una sola fase que tiene como condición de contorno a la propia interfaz que se encuentra en movimiento. Sin embargo existen flujos separados cuya interfaz es una capa de mezcla, por lo que este último método no es posible emplearlo. Por lo tanto, para simular flujos multifásicos separados se pueden usar métodos de seguimiento de la interfaz, generalmente llamados *interface-tracking schemes* [UT92], [TEB06], o bien los métodos que no siguen la interfaz, sino que la capturan como parte del cálculo, normalmente denominados *interface-capturing schemes*.

Dos aproximaciones pueden ser utilizadas para modelar flujos dispersos: la aproximación Lagrangiana-Euleriana y la aproximación Euleriana-Euleriana.

Para flujos dispersos donde intervienen partículas es posible construir métodos que se basan en la primera de las aproximaciones antes expuestas. Uno de los esquemas comúnmente usados es el *marker and cell* (MAC) [HW65]. La idea general es seguir cada partícula del flujo cuando es transportada en la fase continua, aquí las partículas podrían representar una fase. Esta aproximación es referida como una formulación Lagrangiana-Euleriana, donde la fase continua es calculada en un esquema de referencia Euleriano, ver [AO96], [CSS77] y [PJ01].

En la aproximación Lagrangiana-Euleriana hay tres diferentes estrategias para el acoplamiento entre fases [CST98]. En la primer forma de acoplamiento, la única influencia sobre la partícula es debida al flujo circundante a la misma. En la segunda forma de acoplamiento, el fluido es también influenciado por la partícula y en el tercer tipo de

acoplamiento la partícula es influenciada por cada una de las otras.

Una diferente forma de modelado de flujos dispersos es tratar a ambas fases como un continuo. Esta aproximación es generalmente referida como *formulación Euleriana-Euleriana*, primeramente discutida por Ishii [Ish75]. En este modelo cada fase posee su propio conjunto de ecuaciones de balance [LD88], donde la interacción entre las fases es realizada vía términos de transferencia entre fases que surgen a partir de las relaciones constitutivas. Por lo tanto en cada punto del dominio están presentes cada una de las fases con una fracción de volumen asociada.

Dentro de la formulación Euleriana-Euleriana se puede distinguir *tres tipos de aproximaciones* ampliamente utilizadas que a continuación se describen:

- *Modelo Homogéneo*

En este caso se resuelven las ecuaciones de flujo de fluidos viscosos incompresibles para la mezcla y una ecuación para estimar la fracción de volumen de la fase dispersa asumiendo que ésta se mueve con la misma velocidad que la fase continua.

- *Modelo Algebraico*

A diferencia del modelo anterior se asume que la fase dispersa tiene su propia velocidad, que se puede estimar de diferentes formas. Generalmente se considera que la fase dispersa alcanza instantáneamente su velocidad límite, medida en condiciones ideales es decir como una burbuja rígida y aislada. Otras posibles estimaciones introducen diferentes fuerzas de interacción entre fases y para calcular la velocidad de deslizamiento se establece un equilibrio entre las mismas.

Despreciando los efectos de inercia y viscosos de las ecuaciones de cantidad de movimiento de la fase dispersa se obtiene una ecuación algebraica no lineal. Esta última se emplea para el cálculo de la velocidad de deslizamiento en lugar de la ecuación en derivadas parciales de origen. Una descripción detallada del modelo algebraico se presenta en el trabajo desarrollado por Manninen et al. [MTK96].

- *Modelo Multifluido*

Por último, en el modelo multifluido, la velocidad de la fase dispersa se calcula resolviendo las ecuaciones de balance de cantidad de movimiento lineal. Es decir, las ecuaciones de cada fase forman un sistema de ecuaciones de Navier-Stokes con la particularidad que la fracción de vacío participa activamente en las ecuaciones y aparecen términos fuentes de interacción entre fases (fuerzas internas). Esta particularidad hace al problema muy duro de resolver desde el punto de vista numérico. Otra dificultad numérica aparece debido a que el sistema de ecuaciones no puede ser formulado en forma conservativa.

Por otro lado el problema definido por el modelo multifluido está mal puesto desde el punto de vista matemático (ver [SI01], [DNT03] y [ZMNS04]) lo que ha motivado a importantes contribuciones en esta área (aún en la actualidad no está cerrado el tema). Estas dos últimas características expuestas (dificultad numérica y mala postura matemática), hacen que en su conjunto no se pueda discernir si los inconvenientes que surgen durante las implementaciones devienen de problemas de índole numérica o bien matemática tal como lo expone Pokharna et al. [PMR97].

Una forma que hace posible resolver este tipo de problemas y a la que recurren la mayoría de los códigos comerciales, es mediante el agregado de términos adicionales de interacción entre fases; un extensivo estudio es realizado por Drew and Passman [DP98]. Estos términos de interacción, justificados físicamente, intentan agregar términos a las ecuaciones que mejoren la postura matemática del problema. Entre ellos podemos citar:

- Fuerzas de drag.
- Fuerzas de lift.
- Fuerzas de masa virtual.
- Fuerzas de dispersion turbulenta.
- Fuerzas de presión interfacial.

Cada uno de estos términos se modelan y de estos modelos surgen coeficientes de ajuste que tienen un cierto rango de valores no muy bien precisados aún.

1.7. Contenidos de la Tesis

La presente Tesis tuvo origen con el proyecto MELT-Modelado de la Emulsión en metales en estado Líquido y sus efectos Termodinámicos (PID 99-76) ANPCYT.⁴ El proyecto fue realizado en forma conjunta entre el Centro Internacional de Métodos Computacionales en Ingeniería (CIMEC) sito en la ciudad de Santa Fe y el Instituto Argentino de Siderurgia-(IAS) sito en ciudad de San Nicolás. En el IAS se llevaron a cabo las tareas de índole experimental con modelos físicos en frío, estas consistieron en la determinación de tiempos de mezclado, patrones de flujo y ensayos de atrape de escoria utilizando kerosene como líquido modelo de la escoria. En el CIMEC se elaboraron, en una primera etapa, modelos computacionales haciendo uso del código comercial CFX. Cabe acotar, que en forma conjunta se comenzó a desarrollar en el código PETSc-FEM, la implementación de

⁴ Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica.

un modelo de turbulencia $k - \epsilon$ para un flujo de una sola fase, con el objetivo de hacerlo extensivo a flujos multifásicos en una etapa posterior.

El modelo matemático que se utilizó inicialmente, es un modelo Euleriano-Euleriano, siendo la fuerza de drag el único término de transferencia de cantidad de movimiento entre las fases. En primera instancia se simuló un modelo físico agua-aire, con una configuración análoga a la cuchara industrial.

Posteriormente se analizó la influencia de los coeficientes de las fuerzas de non-drag (masa virtual, lift, dispersión turbulenta, etc.) sobre los resultados numéricos para modelos físicos en fríos de una cuchara siderúrgica. Otros efectos que también se tuvieron en cuenta fueron el incremento de turbulencia en la fase continua producido por las burbujas, la deformación de la superficie libre y la influencia del tamaño de la burbuja [MNC02].

Los temas centrales que constituyen la tesis son:

- Modelo de dos fluidos.
- Mala postura matemática del modelo de dos fluidos y su regularización.
- Modelo de mezcla.
- Aplicaciones del modelo de mezcla.
- Modelo híbrido (mezcla-dos fluidos) y aplicaciones.

A continuación se expone el lineamiento seguido en la Tesis considerando el contenido de cada uno de los Capítulos desarrollados.

1.7.1. Modelo de Dos Fluidos - Una Formulación como Sistema Advectivo-Difusivo-Reactivo

Se implementó en el código PETSc-FEM un modelo de dos fluidos⁵ para la resolución de un problema bifásico, basándose en un sistema advectivo-difusivo-reactivo [ZMNS03] debido al grado de generalidad que posee el mismo en problemas de multifísica. La estrategia numérica se encuentra fundada en una formulación estabilizada de igual orden del método de elementos finitos (SUPG-PSPG), donde el solver se ha particionado de acuerdo a las diferentes fases involucradas en el cálculo, tratando cada fase monolíticamente (cantidad de movimiento lineal y continuidad acoplada).

En el Capítulo 2 se puede observar que con la formulación de dos fluidos se han resuelto problemas de validación en régimen diluido, o sea con valores no superiores al

⁵ El modelo de dos fluidos es también denominado modelo Euleriano-Euleriano.

2% de fracción de vacío. Los resultados obtenidos presentaron una concordancia aceptable con los determinados en los trabajos de referencia.

Por otra parte, al resolver el problema bifásico de un modelo agua-aire para la configuración de la cuchara siderúrgica, se han encontrado problemas de convergencia. Los mismos se ven considerablemente acentuados para fracciones de vacío elevadas (aprox. 100%), altas velocidades relativas y diferencia de densidad grandes entre las fases (1000:1), siendo estas condiciones similares a las que existen en regiones cercanas al tapón poroso en la cuchara siderúrgica.

Durante esta etapa y con la intención de solucionar los inconvenientes de falta de convergencia, se encontraron trabajos que ponen de manifiesto que el modelo diferencial de dos fluidos para flujo transitorio tiene raíces características complejas. Por lo tanto, el modelo diferencial de dos fluidos *no está bien puesto* como un problema de valores iniciales (ver [DNT03], [DP98] y [PDL98]), excepto para el caso trivial donde las velocidades de todas las fases son iguales.

1.7.2. Un Precondicionador de la Matriz de Masa para Evitar la Mala Postura Matemática del Modelo de Dos Fluidos

Siendo el objetivo poder contar con un código lo suficientemente robusto para correr problemas industriales (relaciones de densidad de 15000:1) y a sabiendas de que las soluciones numéricas de problemas de valores iniciales mal puestos evidencian una excesiva difusión numérica y/o inestabilidades se procedió a estudiar la mala postura del modelo diferencial de dos fluidos.

El objetivo de este trabajo fue alcanzar el conocimiento necesario para poder entender el rol que juegan los diversos términos del modelo diferencial en el problema de la mala postura. Fundamentalmente ver como los términos de interacción entre fases actúan como reguladores o atenuadores de este problema, que finalmente se manifiesta en la divergencia o crecimiento no acotado de la solución. Otro de los objetivos fue poder contar con un modelo de dos fluidos bien puesto para el rango de variación de los parámetros del problema a resolver.

Es importante notar, que entendemos como mala postura matemática a lo expuesto por Dinh et al. [DNT03], que enuncian: *el modelo de dos fluidos es un modelo mal puesto y matemáticamente complejo en el sentido de que el sistema de ecuaciones es no-hiperbólico, no-lineal y no-conservativo.*

Por lo tanto se siguieron dos líneas de trabajo: 1.-Fuerzas de Interacción entre Fases; 2.-Regularización matemática por medio de un Precondicionador de la Matriz de Masa [ZMNS04].

En la primera línea de trabajo los resultados no fueron positivos dado que la incorporación de las fuerzas de non-drag [Hew82] (fuerza de lift, masa virtual, dispersión turbulenta, etc.) no fue suficiente como para regularizar el problema para el rango de parámetros de interés. Al mismo tiempo cada una de las relaciones constitutivas de las fuerzas de non-drag poseen coeficientes que hasta el momento no están muy bien especificados, en aquellos casos donde es posible resolver el problema, es decir, relaciones de densidades próximas a la unidad, fracciones de vacío bajas, y velocidades relativas pequeñas, los resultados han mostrado ser considerablemente dependientes de los valores impuestos para los coeficientes del modelo.

Por lo tanto, en el Capítulo 3 se incorporó el desarrollo de un preconditionador de la matriz de masa que permitió regularizar el modelo de dos fluidos de manera tal de poder obtener resultados para problemas 1D en el estado estacionario y para el juego de parámetros industriales requeridos. A este método se le realizaron pruebas rigurosas, con resultados muy favorables en todas ellas. No obstante el mismo debe ser seguido de un desarrollo importante para su extensión a problemas multidimensionales.

1.7.3. Modelo ASMM (Algebraic Slip Mixture Model)

En virtud de lo expresado, luego de haber implementado un modelo multifluido que tiene escasa robustez e importante sensibilidad de los resultados con los coeficientes de ajuste de los modelos de los términos de interacción [MNC02], se decidió implementar un modelo de mezcla. Por otro lado esta elección resulta conveniente ya que en los problemas de afino de acero dominan las fuerzas de flotación [TF91] y las condiciones de trabajo industriales son muy rigurosas. En el Capítulo 4 se derivó el modelo de mezcla y se realizó la discretización numérica del mismo.

Las ecuaciones de la mezcla son similares a aquellas que se resuelven en el caso de un flujo viscoso incompresible de una fase, a menos de la existencia de un término temporal para la densidad de la mezcla en la ecuación de continuidad y del término correspondiente al tensor de difusión por la diferencia de velocidades entre cada fase y la mezcla.

Debido a la experiencia previa para el caso de un flujo viscoso de una fase, se decidió usar para las ecuaciones de continuidad y conservación de cantidad de movimiento de la mezcla, un esquema tipo SUPG-PSPG propuesto por Tezduyar et al. [TMRS92]. Para las ecuaciones de transporte de las fases se empleó un esquema estándar SUPG. Todo este esquema fue implementado en el programa de elementos finitos PETSc-FEM.

1.7.4. Aplicación del Modelo ASMM a la Resolución del Flujo Multifásico en una Cuchara Siderúrgica

En el Capítulo 5 se procedió a la validación del modelo ASMM implementado en el código PETSc-FEM y posteriormente se resolvió una cuchara siderúrgica en condiciones industriales de operación.

En la etapa de validación propuesta se compararon los resultados de los modelo ASMM y dos fluidos (resuelto por Milelli [Mil02]) con los datos experimentales obtenidos por Anagbo et al. [AB90]. Las variables consideradas (fracción de volumen de gas, velocidad de ascenso de las burbujas de gas y velocidad axial del líquido), tanto experimentales como calculadas, corresponden a un modelo físico en frío (agua-aire) a escala 1:6 de una cuchara siderúrgica de 150 t.

Con el objetivo de resolver el problema industrial, se computó el flujo multifásico acero-argón-escoria en una cuchara siderúrgica de 100 t, para cuatro caudales de argón de 35, 80, 120 y 160 l min⁻¹. Se determinó el área de apertura del ojo (íntimamente relacionado con el atrape y el agitado en la cuchara) y se lo comparó con los resultados obtenidos a través de expresiones empíricas para cada caudal de argón.

Con la finalidad de determinar si existe atrape de escoria en el acero, se utilizaron dos indicadores, la velocidad crítica de atrape y el número de Weber.

1.7.5. Modelo Híbrido ASMM - Dos Fluidos

El área interfacial influye en las reacciones químicas entre el acero y la escoria. Para modelar en un futuro las reacciones químicas en la cuchara siderúrgica resulta crucial poder predecir el tamaño de las gotas de escoria atrapadas en el acero. Hasta el momento para determinar si existe o no atrape se han utilizado indicadores, tales como lo son, el número de Weber y la velocidad crítica de atrape. La cuantificación de la escoria atrapada es estimada a través de la fracción de escoria.

En el Capítulo 6 se propuso un modelo híbrido *ASMM-dos fluidos*, donde la mezcla acero-argón es resuelta a través de un modelo algebraico y la interacción entre la mezcla y la escoria se resolvió haciendo uso de un modelo de dos fluidos. Las razones por las cuales se propuso este modelo son:

- Para resolver el flujo bifásico acero-argón se debe utilizar un modelo de mezcla. El motivo de esta elección (como se ha expuesto anteriormente) se encuentra fundado en la mala postura matemática del modelo de dos fluidos y en la necesidad de resolver un problema donde las relaciones de densidad y velocidad entre las fases involucradas (acero-argón) son considerablemente elevadas.

- La relación de densidad entre el acero y la escoria es cercana a 2:1 con valores de velocidades relativas no superiores a 1 m s^{-1} .
- Se encuentra implementado en el código CFX un modelo MUSIG - Multiple Size Group Model, para el modelo multifluido. Este último permite realizar el cálculo con varios grupos de partículas, gotas o burbujas de distinto tamaño a un costo computacional relativamente bajo.

Este novedoso tratamiento del flujo multifásico se implementó en el código CFX. Se realizaron test de validación y se corrió la cuchara siderúrgica en condiciones normales de operación.

En este Capítulo se resolvió la superficie libre, debido a que el área donde se manifiestan las altas tensiones de corte es incrementada por el aumento de la altura de la columna de líquido en la zona de apertura del ojo. Por lo tanto el atrape de escoria en el acero es afectado cuando se tiene en cuenta la superficie libre.

Capítulo 2

Modelo de Dos Fluidos - Una Formulación como Sistema Advectivo-Difusivo-Reactivo

2.1. Introducción

Tradicionalmente el diseño de sistemas en los que intervienen flujos multifásicos se ha basado en métodos empíricos. Estos métodos demandan tiempos excesivos de trabajo como así también costos elevados. Por lo tanto, resulta necesario el desarrollo de nuevas herramientas, como lo es la fluido-dinámica computacional (CFD), que permitan mejorar el diseño y la optimización de sistemas de este tipo.

El presente capítulo está orientado a la resolución de flujos multifásicos existentes en las operaciones de afino de acero [LJBK00], que tienen lugar en cucharas siderúrgicas. En estas coexisten dos fases líquidas, metal fundido y escoria, y una fase gaseosa, dada por el argón inyectado a través de un tapón poroso situado en la parte inferior de la cuchara.

Para la resolución matemática de flujos multifásicos se emplea una aproximación Euleriana multifluido [DP98]. Se trata a cada fase particular como un continuo interpenetrado presente en cada punto del dominio con una fracción de volumen asociada, interactuando entre sí vía términos de transferencia entre fases.

La solución numérica del modelo de dos fluidos ha sido estudiada desde fines de 1970. Actualmente, la mayoría de los desarrollos son realizados utilizando el Método de Volúmenes Finitos - MVF (ver [Sai95], [Zha00], [GKC01] y [Cor02]) y en menor medida empleando el Método de Diferencias Finitas - MDF (ver [RH84] y [Ran85]). Desarrollos donde se utiliza el Método de los Elementos Finitos - MEF para resolver el modelo de dos fluidos han sido considerablemente menos publicados. Se puede citar el trabajo realizado por K.Hiltunen [Hil97], donde se resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales parciales

en forma monolítica para el modelo de dos fluidos en régimen laminar. En este trabajo se utilizó una estabilización tipo SUPG-PSPG¹ estándar,² siendo una de las principales diferencias la incorporación de un nuevo término de estabilización, donde se encuentra involucrada la fracción de vacío de la fase dispersa. La validación de la formulación es realizada con fracciones de volumen de la fase dispersa no superiores al 2%. Otro aporte utilizando el método de los elementos finitos para resolver el modelo de dos fluidos en régimen laminar son los trabajos llevados a cabo por T. Uchiyama (ver [Uch99], [Uch02] y [Uch03]). En los mismos utiliza una formulación Petrov-Galerkin con funciones de peso exponenciales y un algoritmo de solución tipo *fractional step*. Los test utilizados para validar el código no superan el 5% de fracción de fase dispersa.

Debido al grado de generalidad que posee un sistema Adectivo-Difusivo-Reactivo (ADR) en la solución de problemas de multifísica, se ha utilizado una formulación de este tipo para la resolución numérica del flujo multifásico turbulento. Métodos de estabilización para sistemas ADR pueden ser encontrados en el trabajo de Idelsohn et al. [INSB96] y Codina [Cod97]. En este último se analiza el estado del arte en la estabilización de sistemas advectivos-difusivos-reactivos. Otros trabajos sobre métodos de estabilización para sistemas ADR son los realizados por Hauke [Hau02] y Burman [BE02], [BH04].

Por razones de índole numérica se separa el cálculo por etapas, una etapa para la solución de la fase continua, luego una para cada fase dispersa y la última etapa para la solución del campo de las variables de la turbulencia.

Este trabajo pone énfasis sobre la forma de plantear la estabilización numérica necesaria en problemas de transporte gobernados por los términos convectivos, por la incompresibilidad, y/o por los términos reactivos. Para el primer y segundo caso (convección e incompresibilidad) se usa una formulación del tipo SUPG-PSPG [TMRS92] típica para resolver problemas de flujo incompresible a una sola fase y que en este trabajo se aplica a la fase continua. La fase dispersa presenta problemas de estabilización asociados a la competencia entre los términos convectivos y reactivos. Elevadas velocidades locales en el flujo dan lugar a elevados números de *Peclet* y elevados valores de las fuerzas de interacción entre las fases dan lugar a elevados números de *Damköhler* o números de Reacción. La turbulencia se resuelve usando un modelo de dos ecuaciones $\kappa - \epsilon$, que al tratarse en forma desacoplada de las ecuaciones del flujo del medio continuo hace que la inclusión de la condición de pared se simplifique respecto al caso de resolución en forma monolítica [NMA02]. La implementación del modelo se encuentra dentro de una aplicación del programa PETSc-FEM [SNP] y es parte del desarrollo de esta tesis.

¹ Las siglas SUPG-PSPG significan, SUPG: Streamline-Upwind/Petrov-Galerkin y PSPG: Pressure-Stabilized/Petrov-Galerkin.

² Similar a la utilizada para resolver la ecuación N-S (Navier-Stokes) incompresible.

2.2. Modelo Matemático del Flujo Bifásico

El modelo matemático de dos fluidos puede ser derivado por medio de diferentes técnicas de promediado. La técnica de promediado temporal ha sido extensivamente estudiada por Ishii [Ish75] y ampliamente utilizada por muchos investigadores. Nigmatulin [Nig79] derivó el conjunto de ecuaciones de balance promediadas en el volumen para un flujo multifásico, las cuales fueron obtenidas usando el concepto de celda de promediado. Un aporte más reciente donde se derivan las ecuaciones de balance para un flujo de dos fases, haciendo uso de un promediado de volumen es realizado por Espinosa-Paredes [EPS98a]. Delhaye [Del76] desarrolló una técnica de promediado espacio/temporal para un flujo de dos fases unidimensional, y Drew y Lahey [DL89] desarrollaron un modelo de dos fluidos tridimensional usando una combinación de técnicas de promediado espacial y temporal.

La técnica de promediado de un conjunto de experiencias (*ensemble*) es según Parka et al. [PL98] la técnica de promediado más rigurosa. En el proceso de promediado, el conjunto está constituido por flujos que pueden existir en una posición y tiempo dado. Por lo tanto este tipo de técnica puede incluir todas las interacciones entre fases sin necesidad de especificar escalas de longitud o tiempo, en contraste a las otras técnicas de promediado.

La técnica de promediado de un conjunto de experiencias se utiliza en la presente tesis, siguiendo la línea de trabajo de Drew y Passman [DP98].

Una de las principales características de la mayoría de los flujos multifásicos es que existe una incerteza con respecto a la posición exacta de una fase particular para un tiempo dado. O sea, la topología del flujo va cambiando continuamente y en forma caótica. Sin embargo alguna característica más gruesa del flujo (ej. velocidad media) puede ser de gran interés desde el punto de vista práctico.

El promediado de conjunto³ es un operación que permite la interpretación de un fenómeno en términos de la repetitibilidad de las experiencias. Un experimento o realización no es repetible, sin embargo cualquier repetición del experimento constituirá otro miembro del conjunto.

Si se considera un flujo multifásico constituido por una fase continua líquida y una fase dispersa, como pueden ser esferas sólidas, y se repite la experiencia, como por ejemplo el flujo a través de un conducto de sección variable (manteniendo las mismas condiciones iniciales y/o de borde), se obtendrá un conjunto de realizaciones. Las diferentes realizaciones ofrecen la posibilidad de tomar muestras y obtener la probabilidad con la cual las esferas aparecen para un punto dado y los valores de las variables mecánicas. Luego estas muestras pueden ser promediadas para obtener campos promediados.

³ De aquí en adelante nos referiremos de esta forma al promediado de un conjunto de experiencias.

Arnold [Arn88] fue uno de los primeros en desarrollar un modelo de dos fluidos multi-dimensional usando un promediado de conjunto. A continuación se derivan las ecuaciones de balance de masa y cantidad de movimiento para el modelo multifluido utilizando un promediado de conjunto.

2.2.1. Ecuaciones de Balance Genéricas

Las ecuaciones exactas de balance, válidas en el interior de cada fase, pueden ser expresadas genéricamente a través de la siguiente forma canónica

$$\frac{\partial \rho \Psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \Psi \mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{J} + \rho \mathbf{f}, \quad (2.1)$$

donde Ψ es la variable conservada, \mathbf{J} es su flujo (molecular o difusivo) y \mathbf{f} es su fuente por unidad de masa, siendo ρ y \mathbf{v} la densidad y la velocidad respectivamente.

Los flujos donde intervienen dos o más fases, se caracterizan por la presencia y movimiento de interfaces que separan a las fases. Para una interfaz las propiedades son discontinuas,⁴ sin embargo cantidades como lo son la masa y la cantidad de movimiento lineal son conservadas. Por lo tanto, deben ser satisfechas en forma conjunta las siguientes ecuaciones de balance para las interfaces entre fases⁵

$$[\rho \Psi (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n} - \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}] = m, \quad (2.2)$$

donde \mathbf{v}_i es la velocidad de la interfaz, \mathbf{n} es el versor normal a la interfaz, y m es la fuente interfacial de Ψ .

Las ecuaciones de balance genéricas pueden ser particularizadas para obtener las ecuaciones de balance de masa y cantidad de movimiento lineal de un flujo isotérmico, por medio de las sustituciones indicadas en el cuadro siguiente,

Cantidad Conservada	Ψ	\mathbf{J}	\mathbf{f}	m
Masa	1	0	0	0
Cantidad de movimiento lineal	\mathbf{v}	\mathbf{T}	\mathbf{b}	\mathbf{m}_i^σ

Cuadro 2.1: Variables en las ecuaciones de balance genéricas.

En el Cuadro 2.1 \mathbf{T} , \mathbf{b} y \mathbf{m}_i^σ , son respectivamente, el tensor de tensiones, las fuerzas de cuerpo y la tracción asociada con la tensión superficial.

⁴ Para un análisis más profundo consultar los trabajos realizados por Slattery [Sla99].

⁵ Esta ecuación es también denominada *condición de salto*.

2.2.2. Interfaz entre Fases

Esta sección tiene el objetivo de ampliar los conocimientos que se expusieron hasta este momento sobre una interfaz entre fases. Se define a una interfaz como una región que separa a dos fases, en la cual las propiedades o el comportamiento del material difiere con respecto al que poseen las fases adyacentes. Estudios realizados por Maass [Maa38], han permitido determinar que la densidad es una función continua de la posición en dirección normal a la interfaz. Estos autores sugieren que la interfaz debe ser observada como una región tridimensional, con un espesor que puede llegar a ser del orden de unos varios diámetros moleculares. La dificultad asociada con este punto de vista, se encuentra en que al tener la interfaz un espesor tan reducido, se torna dificultoso introducir instrumentos de medición en la misma.

En la presente Tesis se seguirá el modelo propuesto por Gibbs, el cual ve a una interfaz en reposo o en equilibrio⁶ como una *superficie divisoria hipotética* que vive dentro de la región interfacial y separa a dos fases homogéneas. Por lo tanto, para la interfaz, cantidades tales como la densidad y la velocidad presentan una discontinuidad. En primera instancia, no se reconoce que pueda existir masa, cantidad de movimiento lineal, o tensiones asociadas a la interfaz. Sin embargo la falta de balance intermolecular para una superficie deformada no es despreciable, y debería ser tenida en cuenta en la condición de salto, a través de tensiones que actúan tangencialmente a la superficie bidimensional. En la mayoría de los problemas estas tensiones pueden ser representadas en términos de la tensión superficial σ y de esta manera la condición de salto queda expresada como

$$[\rho\mathbf{v}(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n} - \mathbf{T} \cdot \mathbf{n}] = \nabla_{(S)}\sigma + 2H\sigma\mathbf{n} \quad (2.3)$$

donde $H = (\varrho_x + \varrho_y)/2$ es la curvatura media de la superficie, ϱ_x y ϱ_y son las curvaturas principales y $\nabla_{(S)}$ es el gradiente en las coordenadas de la superficie.

2.2.3. Función Característica X_k

Con la finalidad de poder aislar cada componente en forma teórica, se introduce la *función indicadora* de componente o *función característica* $X_k(\mathbf{x}, t; \mu)$, la cual para una realización dada del flujo μ , toma los siguientes valores

$$X_k(\mathbf{x}, t; \mu) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mathbf{x} \in k \text{ para la realización } \mu, \\ 0 & \text{en cualquier otro lado.} \end{cases} \quad (2.4)$$

⁶ La hipótesis formulada por Gibbs puede ser extendida a problemas dinámicos, ver Slattery [Sla99].

siendo \mathbf{x} el vector posición y t el tiempo. Cabe acotar que la función característica selecciona solamente a la correspondiente fase k , ignorando por completo las fases restantes y las interfaces entre fases.

Ecuación Topológica

Para el proceso de promediado se hará uso de la siguiente expresión ([DP98], §9.1.3), denominada *ecuación topológica*

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{v}_i \cdot \nabla X_k = 0, \quad (2.5)$$

donde \mathbf{v}_i representa la velocidad de la interfaz. Como se puede observar, la expresión anterior es igual a la derivada material de X_k siguiendo la interfaz, al ser esta derivada nula, significa físicamente que la función característica es un salto que permanece constante para la interfaz.

2.2.4. Ecuaciones de Balance Promediadas

El promedio de las ecuaciones de balance se obtiene tomando el producto de las ecuaciones de balance (Ec. 2.1) con la función característica X_k , luego se realiza la operación de promediado, llegando a la siguiente expresión

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho \Psi}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \Psi \mathbf{v}} - \nabla \cdot \overline{X_k \mathbf{J}} - \overline{X_k \rho \mathbf{f}} = \overline{\rho \Psi \left(\frac{\partial X_k}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla X_k \right)} - \overline{\mathbf{J} \cdot \nabla X_k}, \quad (2.6)$$

donde $\overline{(\)}$ representa el operador de promediado de conjunto. Restando al miembro derecho de la Ec. 2.6 el promedio del producto de $\rho \Psi$ con la ecuación topológica, se reduce el mismo a

$$\overline{\{\rho \Psi (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) - \mathbf{J}\} \cdot \nabla X_k}, \quad (2.7)$$

esta última expresión representa la fuente interfacial de Ψ en un sentido promediado. Esta es debida al cambio de fase, con $(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \mathbf{n} \neq 0$, y el flujo \mathbf{J} . Por lo que, la Ec. 2.6 puede ser reescrita como

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho \Psi}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \Psi \mathbf{v}} - \nabla \cdot \overline{X_k \mathbf{J}} - \overline{X_k \rho \mathbf{f}} = \overline{\{\rho \Psi (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) - \mathbf{J}\} \cdot \nabla X_k}. \quad (2.8)$$

Usando el Cuadro 2.1, las ecuaciones promediadas están definidas por las siguientes expresiones

- Ecuación de Balance de Masa

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \mathbf{v}} = \overline{\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}. \quad (2.9)$$

- Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento Lineal

$$\frac{\partial \overline{X_k \rho \mathbf{v}}}{\partial t} + \nabla \cdot \overline{X_k \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}} = \nabla \cdot \overline{X_k \mathbf{T}} + \overline{X_k \rho \mathbf{b}} + \overline{\{\rho \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) - \mathbf{T}\} \cdot \nabla X_k}. \quad (2.10)$$

Variables Promediadas

Utilizando la función característica y el operador de promediado se pueden definir las variables promediadas. El promedio de la función X_k es la fracción de volumen de la fase k para un punto \mathbf{x} y un tiempo t

$$\alpha_k \doteq \overline{X_k}. \quad (2.11)$$

La correcta interpretación de α_k en términos de promedio de conjunto es el valor esperado de la relación de volumen de la fase k con respecto al volumen total, en el límite cuando este último tiende a cero.

El resto de las variables son definidas en términos de promedios pesados. Las funciones de peso utilizadas son la función indicadora de componente X_k , el producto de esta última con la densidad $X_k \rho$ (promediado pesado con la masa o promediado de Favré) o bien una variable de interfaz como lo es ∇X_k . A continuación definimos, la densidad promedio

$$\overline{\rho}_k \doteq \frac{\overline{X_k \rho}}{\alpha_k}, \quad (2.12)$$

y la velocidad promedio

$$\tilde{\mathbf{v}}_k \doteq \frac{\overline{X_k \rho \mathbf{v}}}{\alpha_k \overline{\rho}_k}. \quad (2.13)$$

El promedio de los flujos moleculares de cantidad de movimiento lineal es el tensor de tensiones molecular promedio definido como,

$$\overline{\mathbf{T}}_k \doteq \frac{\overline{X_k \mathbf{T}}}{\alpha_k}. \quad (2.14)$$

Los flujos moleculares para la interfaz actúan como fuentes de masa y cantidad de movimiento lineal, estos términos son importantes en la teoría de flujos multifásicos porque ellos representan las interacciones entre las distintas fases. La fuente de cantidad de movimiento lineal para la interfaz es definida por la siguiente expresión

$$\mathbf{M}_k \doteq -\overline{\mathbf{T} \cdot \nabla X_k}, \quad (2.15)$$

y la fuerza de cuerpo sobre la fase k es

$$\tilde{\mathbf{b}}_k \doteq \frac{\overline{X_k \rho \mathbf{b}}}{\alpha_k \bar{\rho}_k}. \quad (2.16)$$

Una cantidad promediada que es utilizada en las próximas secciones, es la densidad de area interfacial, definida por

$$a_i = \overline{\mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k}. \quad (2.17)$$

donde \mathbf{n}_k es la normal exterior a la fase k .

Ecuaciones de Balance

Utilizando las definiciones anteriores, la ecuación de balance de masa para la fase k puede ser expresada como

$$\frac{\partial \alpha_k \bar{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot \alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{v}}_k = \mathbf{\Pi}_k, \quad (2.18)$$

siendo el miembro derecho una fuente de masa

$$\mathbf{\Pi}_k = \overline{\rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}. \quad (2.19)$$

Los movimientos de la interfaz producen variaciones en la velocidad que no necesariamente corresponden con su valor promedio. La fluctuaciones de la velocidad respecto de su valor promedio pueden ser debido a la turbulencia o bien al movimiento de las fases provocado por el desplazamiento de la interfaz. El efecto de estas fluctuaciones de la velocidad (cualquiera sea su fuente) sobre una variable es tenido en cuenta al introducir su campo fluctuante, definido como

$$\mathbf{v}'_k = \mathbf{v} - \tilde{\mathbf{v}}_k, \quad (2.20)$$

por lo tanto, utilizando la expresión anterior, se puede manipular el flujo de cantidad de movimiento lineal como sigue a continuación

$$\begin{aligned}
\overline{X_k \rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}} &= \overline{X_k \rho (\tilde{\mathbf{v}}_k + \mathbf{v}'_k) \otimes (\tilde{\mathbf{v}}_k + \mathbf{v}'_k)} \\
&= \overline{X_k \rho \tilde{\mathbf{v}}_k \otimes \tilde{\mathbf{v}}_k} + \overline{X_k \rho \mathbf{v}'_k \otimes \mathbf{v}'_k} \\
&= \overline{X_k \rho \tilde{\mathbf{v}}_k \otimes \tilde{\mathbf{v}}_k} + \overline{X_k \rho \mathbf{v}'_k \otimes \mathbf{v}'_k} \\
&= \alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \otimes \tilde{\mathbf{v}}_k - \alpha_k \mathbf{T}_k^{Re},
\end{aligned} \tag{2.21}$$

definiendo al tensor de tensiones de Reynolds como

$$\mathbf{T}_k^{Re} \doteq - \frac{\overline{X_k \rho \mathbf{v}'_k \otimes \mathbf{v}'_k}}{\alpha_k}. \tag{2.22}$$

La ecuación de balance de cantidad de movimiento lineal promediada puede ser expresada ahora como

$$\frac{\partial \alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{v}}_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \otimes \tilde{\mathbf{v}}_k) = \nabla \cdot \alpha_k (\bar{\mathbf{T}}_k + \mathbf{T}_k^{Re}) + \alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{b}}_k + \mathbf{M}_k + \mathbf{v}_{ki}^m \mathbf{\Pi}_k, \tag{2.23}$$

siendo la velocidad promedio interfacial

$$\mathbf{v}_{ki}^m = \frac{\overline{\rho \mathbf{v} \otimes (\mathbf{v} - \mathbf{v}_i) \cdot \nabla X_k}}{\mathbf{\Pi}_k}. \tag{2.24}$$

2.2.5. Condición de Salto

El promediado de un conjunto de experiencias de las ecuaciones de balance para la interfaz (Ec. 2.2), pesado con la función delta interfacial ($\mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k$), permite obtener las ecuaciones que expresan las fuentes a través de las interfaces en un sentido promediado.

Por lo tanto, las fuentes de masa y de fuerza para la interfaz deben obedecer las siguientes condiciones de salto para la masa y la cantidad de movimiento lineal

$$\sum_k \mathbf{\Pi}_k = 0, \tag{2.25}$$

y

$$\sum_k (\mathbf{M}_k + \mathbf{v}_{ki}^m \mathbf{\Pi}_k) = \mathbf{M}_m. \tag{2.26}$$

En esta última expresión \mathbf{M}_m tiene en cuenta las fuerzas inducidas debido a la tensión superficial. Ishii [Ish75] expresa la fuente de cantidad de movimiento lineal debido a la tensión superficial como

$$\mathbf{M}_m = 2\mathbf{H}\bar{\sigma}\nabla\alpha_d, \quad (2.27)$$

donde \mathbf{H} y $\bar{\sigma}$ representa la curvatura media y la tensión superficial promedio respectivamente. El subíndice d corresponde a la fase dispersa.

2.2.6. Ecuaciones Constitutivas

El propósito de esta sección es incluir las relaciones constitutivas necesarias para clausurar el sistema de ecuaciones. Si se considera un fluido Newtoniano incompresible las tensiones de microescala pueden ser modeladas de la siguiente forma

$$\mathbf{T} = -p\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau} = -p\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{D}, \quad (2.28)$$

donde $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de tensiones viscosas expresado como

$$\boldsymbol{\tau} = 2\mu\mathbf{D}, \quad (2.29)$$

siendo el tensor de velocidad de deformación dado por

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2} [\nabla\mathbf{v} + (\nabla\mathbf{v})^T]. \quad (2.30)$$

Por lo tanto, asumiendo las **propiedades de los materiales constantes**, μ_k y ρ_k , se desarrolla el promediado de conjunto de la ecuación 2.14 como sigue

$$\begin{aligned}
\overline{\mathbf{T}}_k &= \overline{X_k \mathbf{T}} / \alpha_k \\
&= \overline{X_k (-p \mathbf{I} + 2\mu_k \mathbf{D})} / \alpha_k \\
&= -\overline{p X_k} \mathbf{I} / \alpha_k + 2\mu_k \overline{X_k \mathbf{D}} / \alpha_k \\
&= -\overline{p}_k \mathbf{I} + \mu_k \left[\overline{\nabla X_k \mathbf{v}} + (\nabla \overline{X_k \mathbf{v}})^T - \overline{(\nabla X_k) \mathbf{v}} - \mathbf{v}(\nabla X_k) \right] / \alpha_k \\
&= -\overline{p}_k \mathbf{I} + \mu_k \left[\overline{\nabla \alpha_k \tilde{\mathbf{v}}_k} + (\nabla \alpha_k \tilde{\mathbf{v}}_k)^T - \overline{(\nabla X_k) \mathbf{v}} - \mathbf{v}(\nabla X_k) \right] / \alpha_k \\
&= -\overline{p}_k \mathbf{I} + \mu_k \left[\overline{\nabla \tilde{\mathbf{v}}_k} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_k)^T + (\tilde{\mathbf{v}}_k \nabla \alpha_k + (\tilde{\mathbf{v}}_k \nabla \alpha_k)^T) / \alpha_k - \overline{((\nabla X_k) \mathbf{v})} + \overline{\mathbf{v}(\nabla X_k)} \right] / \alpha_k \\
&= -\overline{p}_k \mathbf{I} + 2\mu_k \left[\mathbf{D}_k + \mathbf{D}'_k + \mathbf{D}_{ki} \right] \\
&= -\overline{p}_k \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}_k .
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Donde se introduce el tensor de tensiones viscoso promedio, definido como,

$$\boldsymbol{\tau}_k = 2\mu_k \left[\mathbf{D}_k + \mathbf{D}'_k + \mathbf{D}_{ki} \right]. \tag{2.32}$$

Siendo el tensor de velocidad de deformación expresado en término de la velocidad promedio

$$\mathbf{D}_k = \frac{1}{2} \left[\nabla \tilde{\mathbf{v}}_k + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_k)^T \right], \tag{2.33}$$

el tensor extra de velocidad de deformación

$$\mathbf{D}'_k = \frac{1}{2} \left[\tilde{\mathbf{v}}_k \nabla \alpha_k + (\tilde{\mathbf{v}}_k \nabla \alpha_k)^T \right] / \alpha_k, \tag{2.34}$$

y el tensor de velocidad de deformación interfacial

$$\mathbf{D}_{ki} = -\frac{1}{2} \left[\overline{(\nabla X_k) \mathbf{v}} + \overline{\mathbf{v}(\nabla X_k)} \right] / \alpha_k. \tag{2.35}$$

En la implementación del modelo de dos fluidos se utilizó como primer aproximación el modelo constitutivo propuesto por Hua y Wang [HW00] para plumas en un régimen de burbujas discretas. Se consideran dos fases, una fase continua (líquido) y una fase dispersa (gas), denotadas respectivamente por los subíndices l y g . Si definimos al tensor de tensiones total para la fase k como

$$\overline{\mathbf{T}}_k^{Total} = \alpha_k (\overline{\mathbf{T}}_k + \mathbf{T}_k^{Re}), \tag{2.36}$$

las correspondientes tensiones totales para cada una de las fases son expresadas por

$$\begin{aligned}\overline{\mathbf{T}}_l^{Total} &= -\alpha_l \bar{p}_l \mathbf{I} + 2\alpha_l \mu^{eff}_l \mathbf{D}_l \\ \overline{\mathbf{T}}_g^{Total} &= -\alpha_g \bar{p}_g \mathbf{I} + 2\mu^{eff}_g \mathbf{D}_g,\end{aligned}\quad (2.37)$$

con los tensores de velocidad de deformación y las viscosidades efectivas dadas por

$$\begin{aligned}\mathbf{D}_l &= \frac{1}{2} \left[\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l)^T \right] & \mu^{eff}_l &= \mu_l + \mu_t \\ \mathbf{D}_g &= \frac{1}{2} \left[\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g)^T \right] & \mu^{eff}_g &= \alpha_g \mu_g + \alpha_l \mu^{eff}_l,\end{aligned}\quad (2.38)$$

siendo μ_l , μ_g y μ_t la viscosidad molecular de la fase líquida, la viscosidad molecular de la fase gaseosa y la viscosidad turbulenta de la fase líquida respectivamente.

Cabe destacar que en el régimen de burbujas discretas, dos burbujas adyacentes se encuentran vinculadas entre sí por un medio de fase líquida continua. Dado que la fase líquida sirve como puente de interacción entre las burbujas, la viscosidad efectiva de la fase gaseosa debido al movimiento relativo de las burbujas puede ser asumido aproximadamente igual a la viscosidad del líquido tal como se observa en la Ec. 2.38.

2.2.7. Fuerzas Interfaciales

A continuación se desarrolla el término fuente de cantidad de movimiento lineal para la interfaz con la finalidad de separar los efectos del flujo medio de los efectos locales en la fuerza interfacial. Para lo cual definimos a la presión interfacial, como

$$p_{ki} \doteq \frac{\overline{p \mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k}}{a_i}, \quad (2.39)$$

y la tensión de corte interfacial

$$\boldsymbol{\tau}_{ki} \doteq \frac{\overline{\boldsymbol{\tau}_k \mathbf{n}_k \cdot \nabla X_k}}{a_i}. \quad (2.40)$$

De esta forma la fuente de fuerza interfacial puede ser escrita como

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_k &= -\overline{\mathbf{T} \cdot \nabla X_k} \\ &= \overline{p \nabla X_k} - \overline{\boldsymbol{\tau} \cdot \nabla X_k} \\ &= p_{ki} \overline{\nabla X_k} - \boldsymbol{\tau}_{ki} \cdot \overline{\nabla X_k} - \overline{\mathbf{T}'_{ki} \cdot \nabla X_k} \\ &= p_{ki} \nabla \alpha_k - \boldsymbol{\tau}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k + \mathbf{M}'_k,\end{aligned}\quad (2.41)$$

Donde se define la fuente extra de cantidad de movimiento lineal para la interfaz (debido a efectos del flujo medio)

$$\mathbf{M}'_k = \mathbf{M}_k - p_{ki} \nabla \alpha_k + \boldsymbol{\tau}_{ki} \cdot \nabla \alpha_k, \quad (2.42)$$

siendo,

$$\mathbf{T}'_{ki} = -p'_{ki} \mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}'_{ki} = -(p - p_{ki}) \mathbf{I} + (\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_{ki}), \quad (2.43)$$

Se asume a \mathbf{M}'_k ⁷ como la suma de fuerzas asociadas con el drag, la masa virtual, dispersion turbulenta, lift, etc. ([DP98] §18.1.3)

$$\mathbf{M}'_k = \sum \mathbf{F}_n. \quad (2.44)$$

En la presente formulación sólo se ha considerado la fuerza de Drag. No obstante cabe acotar que la última versión del elemset (Bubbly), desarrollado dentro de la distribución de PETSc-FEM, incluye en el cálculo las fuerzas de non-drag.

Fuerza de Drag

La fuerza de drag es la fuerza ejercida por un medio fluido sobre una partícula, gota o burbuja que se opone al movimiento de la misma. Esta fuerza es usualmente expresada en términos del coeficiente adimensional de drag, siendo la misma definida como

$$\mathbf{F}_{l,g}^{\text{inter}} = C'_{drag} Re_{bubble} C_{drag} \alpha_l \alpha_g \mathbf{v}_{rel}, \quad (2.45)$$

donde,

$$\begin{aligned} C'_{drag} &= \frac{3}{4} \frac{\mu_l}{d_{bubble}^2} \\ Re_{bubble} &= \frac{\rho_l d_{bubble} \|\mathbf{v}_{rel}\|}{\mu_l} \\ \mathbf{v}_{rel} &= \mathbf{v}_g - \mathbf{v}_l, \end{aligned} \quad (2.46)$$

⁷ Algunos autores desdoblan este término en fuerzas de drag y non-drag, en esta última se tiene en cuenta por ejemplo las fuerzas de lift, masa virtual, dispersión turbulenta, etc.

siendo d_{bubble} el diámetro efectivo de la burbuja (diámetro medio de Sauter), es decir el diámetro de una esfera cuyo volumen es igual al volumen de la burbuja en el medio, Re_{bubble} es el número de Reynolds de burbuja y C_{drag} es el coeficiente de Drag. Este último en la mayor parte de los casos es función del número de Reynolds de burbuja. El código cuenta con las siguientes correlaciones para el C_{drag} según sea el régimen del flujo (Cuadro 2.2).

Régimen	C_{drag}
Laminar	$24/Re_{bubble}$
Transición	$24/Re_{bubble}(1 + 0.15 Re_{bubble}^{0.687})$
Turbulento	0.44

Cuadro 2.2: Coeficiente de drag para distintos regímenes.

2.3. Modelo Matemático del Flujo Bifásico Turbulento Incompresible

Las ecuaciones del continuo que gobiernan a un flujo bifásico (líquido-gas) turbulento son obtenidas a continuación.

Ecuaciones de Balance de Masa

Las ecuaciones de balance de masa son

$$\frac{\partial(\alpha_l \bar{\rho}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l) = \mathbf{\Pi}_l, \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g) = \mathbf{\Pi}_g.$$

A las expresiones anteriores se le agrega la restricción algebraica sobre las fracciones de volumen expresada por $\alpha_l + \alpha_g = 1$.

Ecuaciones de Balance de Cantidad de Movimiento Lineal

Se asume que la única fuerza de cuerpo es la debida a la acción de la gravedad y que las tensiones de corte interfaciales son despreciables. De esta manera utilizando las Ecs.

2.36-2.38, 2.41, 2.44 y 2.45 la Ec. 2.23 para el líquido puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l \otimes \tilde{\mathbf{v}}_l) = \nabla \cdot (-\alpha_l \bar{p}_l \mathbf{I} + \alpha_l \mu^{eff}_l (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l)^T)) + \\ + \alpha_l \bar{\rho}_l \mathbf{g} + p_{li} \nabla \alpha_l + \mathbf{F}_{l,g}^{inter} + \mathbf{v}_{li}^m \mathbf{\Pi}_l, \end{aligned} \quad (2.48)$$

desarrollando el miembro derecho

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l \otimes \tilde{\mathbf{v}}_l) = -\alpha_l \nabla \bar{p}_l + \nabla \cdot (\alpha_l \mu^{eff}_l (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l)^T)) + \\ + \alpha_l \bar{\rho}_l \mathbf{g} + (p_{li} - \bar{p}_l) \nabla \alpha_l + \mathbf{F}_{l,g}^{inter} + \mathbf{v}_{li}^m \mathbf{\Pi}_l. \end{aligned} \quad (2.49)$$

En casos donde la burbuja puede expandirse o contraerse, la ecuación de Rayleigh determina la relación entre la presión interfacial y la presión para un punto alejado de la burbuja. Si se observa la Ec. 2.49, la fuerza volumétrica neta sobre la fase líquida debido la término $p_{li} - \bar{p}_l$ puede tener una acción sobre la fase sólo donde $\nabla \alpha_l \neq 0$.

Para la mayoría de los estados transitorios se espera que la diferencia de presión ($\Delta p = \bar{p}_k - p_{ki}$) para la fase dispersa sea prácticamente nula. La razón se debe a que la fase dispersa ocupa regiones relativamente pequeñas del dominio dentro de las cuales no son soportados gradientes de presión importantes. Por lo tanto, se asume que la expansión o contracción de las burbujas sólo contribuye a la diferencia de presión de la fase continua.

La ecuación de Rayleigh para el crecimiento de una burbuja en un medio líquido infinito es

$$\bar{p}_l - p_{li} = - \left\{ \rho_l \left[r_b \frac{d^2 r_b}{dt^2} + \frac{3}{2} \left(\frac{dr_b}{dt} \right)^2 \right] + \frac{\mu_l}{r_b} \frac{dr_b}{dt} \right\}. \quad (2.50)$$

Como podemos observar, si el radio de la burbuja es constante entonces la diferencia de presión es nula.

Nuevamente utilizando las Ecs. 2.36-2.38, 2.41, 2.44 y 2.45, la Ec. 2.23 para el gas puede ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \otimes \tilde{\mathbf{v}}_g) = \nabla \cdot (-\alpha_g \bar{p}_g \mathbf{I} + \mu^{eff}_g (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g)^T)) + \\ + \alpha_g \bar{\rho}_g \mathbf{g} + p_{gi} \nabla \alpha_l + \mathbf{F}_{g,l}^{inter} + \mathbf{v}_{gi}^m \mathbf{\Pi}_l. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Desarrollando el miembro derecho y teniendo en cuenta lo expuesto para la diferencia de presiones (Δp) de la fase dispersa

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \otimes \tilde{\mathbf{v}}_g) = -\alpha_g \nabla \bar{p}_g + \nabla \cdot (\mu^{eff}_g (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g)^T)) + \\ + \alpha_g \bar{\rho}_g \mathbf{g} + \mathbf{F}_{g,l}^{inter} + \mathbf{v}_{gi}^m \mathbf{\Pi}_g. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Siendo que para la fase dispersa $\bar{p}_g = p_{gi}$, se puede utilizar la relación de Laplace para relacionar la presión ambos lados de la interfaz, siendo la misma

$$p_{gi} - p_{li} = \bar{H}\sigma, \quad (2.53)$$

con \bar{H} la curvatura media de la interfaz (para burbujas esféricas $\bar{H} = 2/r_b$) y σ la tensión superficial. Por medio de la ecuación de Bernoulli podemos encontrar una expresión que nos permite relacionar la presión en la interfaz del líquido y la que existe para un punto alejado a la burbuja, debido al movimiento relativo entre las fases

$$p_{li} = \bar{p}_l - C_p \bar{\rho}_l |\tilde{\mathbf{v}}_r|^2, \quad (2.54)$$

donde la velocidad relativa es expresada como $\tilde{\mathbf{v}}_r = \tilde{\mathbf{v}}_g - \tilde{\mathbf{v}}_l$, el coeficiente de presión C_p es igual $C_p = 1/4$ para flujos invíscidos alrededor de una sola esfera (flujos diluidos) y $C_p = -9/32$ para bajos números de Reynolds. Utilizando estos resultados el primer término del miembro derecho de la Ec. 2.52 puede escribirse como

$$\begin{aligned} -\alpha_g \nabla p_{gi} &= -\alpha_g \nabla (p_{li} + \bar{H}\sigma) \\ &= -\alpha_g \nabla (\bar{p}_l - C_p \bar{\rho}_l |\tilde{\mathbf{v}}_r|^2 + \bar{H}\sigma) \\ &= -\alpha_g \nabla \bar{p}_l + \alpha_g \bar{\rho}_l 2C_p \tilde{\mathbf{v}}_r \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}_r^T - \nabla \bar{H}\sigma \\ &= -\alpha_g \nabla \bar{p}_l + \alpha_g \bar{\rho}_l 2C_p \tilde{\mathbf{v}}_r \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}_r^T, \end{aligned} \quad (2.55)$$

donde el último paso en el desarrollo anterior es solamente válido cuando la tensión superficial es uniforme y las burbujas son esféricas. Por lo tanto, la Ec. 2.52 se puede escribir como

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \otimes \tilde{\mathbf{v}}_g) &= -\alpha_g \nabla \bar{p}_l + \alpha_g \bar{\rho}_l 2C_p \tilde{\mathbf{v}}_r \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}_r^T + \\ &+ \nabla \cdot (\mu^{eff}_g (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g)^T)) + \alpha_g \bar{\rho}_g \mathbf{g} + \mathbf{F}_{g,l}^{inter} + \mathbf{v}_{gi}^m \mathbf{\Pi}_g. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Por último, si desarrollamos la condición de salto (Ec. 2.26)

$$\mathbf{F}_{g,l}^{inter} + \mathbf{v}_{gi}^m \mathbf{\Pi}_g = 2\mathbf{H}\bar{\sigma}\nabla\alpha_g - \mathbf{F}_{l,g}^{inter} - \mathbf{v}_{li}^m \mathbf{\Pi}_l, \quad (2.57)$$

reemplazando la Ec. 2.57 en 2.56 se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \otimes \tilde{\mathbf{v}}_g) &= -\alpha_g \nabla \bar{p}_l + \alpha_g \bar{\rho}_l 2C_p \tilde{\mathbf{v}}_r \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}_r^T + \\ &+ \nabla \cdot (\mu^{eff}_g (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g)^T)) + \alpha_g \bar{\rho}_g \mathbf{g} - \mathbf{F}_{l,g}^{inter} - \mathbf{v}_{li}^m \mathbf{\Pi}_l + 2\mathbf{H}\bar{\sigma}\nabla\alpha_g. \end{aligned} \quad (2.58)$$

El sistema completo de ecuaciones es expresado por,

$$\frac{\partial(\alpha_l \bar{\rho}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l) = \mathbf{\Pi}_l, \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g) = \mathbf{\Pi}_g,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \bar{\rho}_l \tilde{\mathbf{v}}_l \otimes \tilde{\mathbf{v}}_l) &= -\alpha_l \nabla \bar{p}_l + \nabla \cdot (\alpha_l \mu^{eff}_l (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_l)^T)) + \\ &+ \alpha_l \bar{\rho}_l \mathbf{g} + (p_{li} - \bar{p}_l) \nabla \alpha_l + \mathbf{F}_{l,g}^{inter} + \mathbf{v}_{li}^m \mathbf{\Pi}_l, \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \bar{\rho}_g \tilde{\mathbf{v}}_g \otimes \tilde{\mathbf{v}}_g) &= -\alpha_g \nabla \bar{p}_l + \alpha_g \bar{\rho}_l 2C_p \tilde{\mathbf{v}}_r \cdot \nabla \tilde{\mathbf{v}}_r^T + \\ + \nabla \cdot (\mu^{eff}_g (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_g)^T)) &+ \alpha_g \bar{\rho}_g \mathbf{g} - \mathbf{F}_{l,g}^{inter} - \mathbf{v}_{li}^m \mathbf{\Pi}_l + 2\mathbf{H}\bar{\sigma} \nabla \alpha_g. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Si se asumen las siguientes hipótesis:

- No se consideran los efectos debidos a la tensión superficial.
- Se asume que las presiones son iguales para ambas fases $p_l = p_g = p$.
- Las burbujas son de un diámetro constante y uniforme.
- No existe transferencia de masa.

Teniendo en cuenta que $\mathbf{F}_{g,l} = -\mathbf{F}_{l,g}$, el sistema anterior puede ser simplificado como sigue. De aquí en adelante se omiten los símbolos indicadores del promediado por cuestiones de simplicidad.

Ecuación de Balance de Masa

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l) &= 0 \\ \frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) &= 0 \end{aligned} \quad (2.62)$$

Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l \otimes \mathbf{v}_l) &= -\alpha_l \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_l \mu^{eff}_l (\nabla \mathbf{v}_l + (\nabla \mathbf{v}_l)^T)) + \alpha_l \rho_l \mathbf{g} + \mathbf{F}_{l,g}^{inter} \\ \frac{\partial(\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \otimes \mathbf{v}_g) &= -\alpha_g \nabla p + \nabla \cdot (\mu^{eff}_g (\nabla \mathbf{v}_g + (\nabla \mathbf{v}_g)^T)) + \alpha_g \rho_g \mathbf{g} + \mathbf{F}_{g,l}^{inter} \end{aligned} \quad (2.63)$$

2.3.1. Modelo de Turbulencia $\kappa - \epsilon$

En la presente implementación se ha utilizado un modelo de turbulencia de dos ecuaciones $\kappa - \epsilon$. Este modelo es ampliamente usado para resolver flujos turbulentos en aplicaciones industriales, donde el principal interés es conocer alguna cantidad promediada del flujo, como por ejemplo, las fuerzas promedio sobre superficies, campo de velocidad medio, etc.

El modelo de dos ecuaciones $\kappa - \epsilon$, ha sido usado extensivamente en la literatura para modelar la turbulencia de la fase líquida en reactores agitados por gas (ver [ST88], [Sch96] y [TF92]). Dado que la fase gaseosa tiene una densidad considerablemente menor que la fase líquida, no se resuelve la turbulencia para la fase gaseosa. Las ecuaciones para la energía cinética turbulenta⁸ (κ) del líquido y su disipación (ϵ) están dadas por las siguientes expresiones

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\alpha_l \rho_l \kappa)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l \kappa) &= \nabla \cdot (\alpha_l \frac{\mu^{eff}_l}{C_\kappa} \nabla \kappa) + P_\kappa - \rho_l \epsilon \\ \frac{\partial(\alpha_l \rho_l \epsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l \epsilon) &= \nabla \cdot (\alpha_l \frac{\mu^{eff}_l}{C_\epsilon} \nabla \epsilon) + \frac{\epsilon}{\kappa} (C_1 P_\kappa - C_2 \rho_l \epsilon) \end{aligned} \quad (2.64)$$

$$P_\kappa = 2\mu_t \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{u})$$

$$\mu_t = C_\mu \rho_l \frac{\kappa^2}{\epsilon},$$

donde P_κ es la producción de energía cinética turbulenta. El modelo $\kappa - \epsilon$ tiene cinco constantes las cuales asumen los siguientes valores

$$C_\mu = 0.09; \quad C_1 = 1.44; \quad C_2 = 1.92; \quad C_\kappa = 1.0; \quad C_\epsilon = 1.3. \quad (2.65)$$

En la presente Tesis la turbulencia también es resuelta haciendo uso de un modelo

⁸ Rigurosamente debería referirse a la misma como energía cinética turbulenta específica, siendo que es una energía por unidad de masa.

LES - (Large Eddy Simulation). En el Capítulo 5 se utiliza este modelo para resolver el flujo en una cuchara siderúrgica.

2.3.2. Condiciones Iniciales y de Contorno

La formulación del continuo es completada con las correspondientes condiciones iniciales y de contorno. Con respecto a las condiciones de contorno, salvo para la presión, se puede dividir el contorno completo Γ del dominio físico Ω en varias partes. Tres partes para la velocidad de la fase continua y las cantidades turbulentas imponiendo una condición tipo Dirichlet (D), Neumann (N) o una condición de pared (W) y dos partes para la velocidad y fracción de volumen de las fases dispersas imponiendo una condición tipo Dirichlet o Neumann.

Para el campo de velocidades de la fase continua

$$\begin{aligned}
 \Gamma &= \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_W \\
 \Gamma_D \cap \Gamma_N \cap \Gamma_W &= \emptyset \\
 \mathbf{v}_l &= \mathbf{v}_{l,D} && \text{en } \Gamma_D \\
 \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_l &= \mathbf{t}_{l,N} && \text{en } \Gamma_N \\
 \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_l &= \mathbf{t}_{l,W}(v_*(\mathbf{v})) && \text{en } \Gamma_W,
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

donde Γ_D , Γ_N y Γ_W representan la partes donde imponemos una condición de contorno tipo Dirichlet, Neumann y de pared respectivamente. Las condiciones de contorno para el campo de las cantidades turbulentas pueden ser expresadas como

$$\begin{aligned}
 \Gamma &= \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_W \\
 \Gamma_D \cap \Gamma_N \cap \Gamma_W &= \emptyset \\
 \phi &= \phi_D && \text{en } \Gamma_D \\
 \mathbf{n} \cdot \nabla \phi &= f_{\phi,N} && \text{en } \Gamma_N \\
 \phi &= \phi_W(v_*(\mathbf{v})) && \text{en } \Gamma_W,
 \end{aligned} \tag{2.67}$$

donde $\phi = (\kappa, \epsilon)$ es una cantidad genérica de la turbulencia y $f_{\phi,N}$ es el flujo de ϕ a través del contorno Γ_N con normal \mathbf{n} . En las Ecs. 4.64 y 2.67 la variable v_* es la velocidad de fricción la cual es calculada usando la ley de pared que será presentada en la próxima sección.

Para el campo de velocidades de la fase dispersa se tiene

$$\begin{aligned}
 \Gamma &= \Gamma_D \cup \Gamma_N \\
 \Gamma_D \cap \Gamma_N &= \emptyset \\
 \mathbf{v}_g &= \mathbf{v}_{g,D} && \text{en } \Gamma_D \\
 \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}_g &= \mathbf{t}_{g,N} && \text{en } \Gamma_N,
 \end{aligned} \tag{2.68}$$

con las condiciones de borde para las fracciones de volumen de la fase dispersa expresadas por

$$\begin{aligned}
\Gamma &= \Gamma_D \cup \Gamma_N \\
\Gamma_D \cap \Gamma_N &= \emptyset \\
\alpha_g &= \alpha_{g,D} && \text{en } \Gamma_D \\
\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha_g &= f_{g,N} && \text{en } \Gamma_N,
\end{aligned} \tag{2.69}$$

siendo $f_{g,N}$ el flujo de α_g a través del contorno Γ_N con normal \mathbf{n} .

En un flujo interno la presión debe ser fijada a un valor de referencia en al menos un nodo para remover el correspondiente modo rígido en el cálculo numérico,

$$p = p_{ref} \quad \text{en } x_p \in \Omega. \tag{2.70}$$

En un flujo exterior normalmente en todo el plano de salida es $p = p_{ref}$. Por ser incompresible p_{ref} es arbitrario.

En cuanto a las condiciones iniciales, se inicializa el cálculo con un campo particular para cada incognita que depende de la simulación a realizar.

2.3.3. Ley de Pared

En esta sección, se describe cómo se calcula la velocidad de fricción para imponer las condiciones de borde en las ecuaciones de cantidad de movimiento de la fase continua y en las ecuaciones de transporte de las variables del modelo de turbulencia. Donde Γ_W es la parte del contorno donde se impone la ley de pared. Por medio de esta ley de pared se computa la tracción de pared para las ecuaciones de cantidad de movimiento lineal y los valores de κ y ϵ para la pared. Este procedimiento involucra el cálculo de la velocidad de fricción de pared v_* , para lo cual se asume un perfil representado por las siguientes expresiones

$$\begin{aligned}
\frac{|\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_{l,W}|}{v_*} = f(y^+) &= \begin{cases} y^+ & \text{para } y^+ < 5 \text{ región laminar} \\ 5 \log(y^+) + C_{W,1} & \text{para } 5 < y^+ < 30 \text{ región buffer} \\ 2.5 \log(y^+) + C_{W,2} & \text{para } y^+ > 30 \text{ región full logarítmica} \end{cases} \\
y^+ &= \frac{y_W v_*}{\nu_l},
\end{aligned} \tag{2.71}$$

donde y_W es la distancia a la pared, y^+ es la distancia adimensional a la pared y ν_l es la viscosidad cinemática del líquido. Siendo $C_{W,1} = -3.04$ y $C_{W,2} = 5.46$. Este sistema de ecuaciones no lineales puede ser resuelto, por ejemplo, por el método de la secante. Una vez determinado el valor de v_* , la tracción para las ecuaciones de cantidad de movimiento lineal del líquido se determinan según

$$\begin{aligned} \mathbf{t}_{l,W} &= g(\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_{l,W}) \\ g &= \frac{|\tau_W|}{|\mathbf{v}_l - \mathbf{v}_{l,W}|} \\ |\tau_W| &= \rho_l v_*^2. \end{aligned} \tag{2.72}$$

Finalmente los correspondientes valores para κ_W and ϵ_W son obtenidos a partir de

$$\begin{aligned} \kappa_W &= \frac{v_*^2}{\sqrt{C_\mu}} \\ \epsilon_W &= \frac{v_*^4}{\chi y^+ \nu_l}, \end{aligned} \tag{2.73}$$

con χ la constante de Von-Karman cuyo valor es igual a 0.41.

2.4. Formulación como Sistema Advectivo-Difusivo -Reactivo

A continuación se formula el problema dado por las Ecs. 2.62, 2.63 y 2.64 como un sistema advectivo-difusivo-reactivo

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}^a &= \nabla \cdot \mathbf{F}^d + \mathbf{G}(\mathbf{U}) \\ \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}^a - \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} \mathbf{U} &= \nabla \cdot \mathbf{F}^d + \mathbf{G}', \end{aligned} \tag{2.74}$$

donde el término fuente es expresado como

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}' + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} \mathbf{U}, \tag{2.75}$$

siendo \mathbf{F}^a y \mathbf{F}^d los flujos advectivos y difusivos respectivamente. La función \mathbf{H} se denomina *función de entalpía*. Esta función se utiliza para hacer un cambio de variables

(más detalles a cerca de esta función van a ser tratados en la Sección 2.5.1). El vector de variables de estado es expresado como

$$\mathbf{U} = [p, \alpha_g, \mathbf{v}_l, \mathbf{v}_g, \kappa, \epsilon]^T. \quad (2.76)$$

Comparando las Ecs. 2.74 y 2.76 con 2.62, 2.63 y 2.64 se observa que

$$\mathbf{H}(\mathbf{U}) = [(\alpha_l \rho_l), (\alpha_g \rho_g), (\alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l), (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g), (\alpha_l \rho_l \kappa), (\alpha_l \rho_l \epsilon)]. \quad (2.77)$$

A continuación se escriben algunos arreglos necesarios para resolver el sistema expuesto, para lo cual se tiene en cuenta que el cálculo se va a llevar a cabo en tres etapas:

1. Cálculo de la fase continua.
2. Cálculo de cada fase dispersa.
3. Cálculo del modelo de turbulencia.

Por lo tanto, cada matriz jacobiana sólo contendrá las filas y columnas correspondientes a cada una de las etapas. De esta forma, si bien las matrices anteriores son de $ndf \times ndf$ ⁹ se deben interpretar por bloques. Para la primera etapa los bloques a usar son los formados por las filas y columnas $(1, 3 : nd + 2)$ ¹⁰, para la segunda etapa $(2, 2 + nd + 1 : 2 * nd + 2)$ y por último para la tercera etapa sólo se utilizan las filas y columnas $(2 * nd + 3 : 2 * nd + 4)$.

⁹ Donde ndf representa los grados de libertad por nodo.

¹⁰ Donde nd representa la dimensión del espacio.

En la Ec. 2.74 quedan por definir los flujos y calcular sus jacobianos.

Jacobiano de la Función de Entalpía

El término $\frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}}$ se escribe como

$$\frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 0 & -\rho_l & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_g & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & -\rho_l \mathbf{v}_l & \alpha_l \rho_l \mathbf{I}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & \rho_g \mathbf{v}_g & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \alpha_g \rho_g \mathbf{I}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ 0 & -\rho_l \kappa & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \alpha_l \rho_l & 0 \\ 0 & -\rho_l \epsilon & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & \alpha_l \rho_l \end{pmatrix}. \quad (2.78)$$

Flujos Advectivos y sus Jacobianos

Los flujos advectivos son

$$\mathbf{F}^a = \begin{pmatrix} \alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l^T \\ \alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g^T \\ \alpha_l \rho_l \mathbf{v}_l \otimes \mathbf{v}_l^T + \alpha_l p \mathbf{I}_{nd \times nd} \\ \alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g \otimes \mathbf{v}_g^T + \alpha_g p \mathbf{I}_{nd \times nd} \\ \alpha_l \rho_l \kappa \mathbf{v}_l^T \\ \alpha_l \rho_l \epsilon \mathbf{v}_l^T \end{pmatrix}, \quad (2.79)$$

y sus jacobianos se pueden definir como

$$\mathbf{A}_i = \frac{\partial \mathbf{F}_i^a}{\partial \mathbf{U}} \quad (2.80)$$

$$\mathbf{A}_i = \begin{pmatrix} 0 & -\rho_l v_{l,i} & \alpha_l \rho_l \mathbf{1}_i^T & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_g v_{g,i} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \alpha_g \rho_g \mathbf{1}_i^T & 0 & 0 \\ \alpha_l \mathbf{1}_i & -\mathbf{X}_{l,i} & \mathbf{Y}_{l,i} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ \alpha_g \mathbf{1}_i & \mathbf{X}_{g,i} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{Y}_{g,i} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ 0 & -\rho_l \kappa v_{l,i} & \alpha_l \rho_l \kappa \mathbf{1}_i^T & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \alpha_l \rho_l v_{l,i} & 0 \\ 0 & -\rho_l \epsilon v_{l,i} & \alpha_l \rho_l \epsilon \mathbf{1}_i^T & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & \alpha_l \rho_l v_{l,i} \end{pmatrix}, \quad (2.81)$$

donde

$$\begin{aligned}
\mathbf{X}_{l,i} &= \rho_l \mathbf{v}_l v_{l,i} + p \mathbf{1}_i \\
\mathbf{X}_{g,i} &= \rho_g \mathbf{v}_g v_{g,i} + p \mathbf{1}_i \\
\mathbf{1}_i &= \begin{pmatrix} \delta_{1i} \\ \delta_{2i} \\ \delta_{3i} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{2.82}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{Y}_{l,i} &= \alpha_l \rho_l [\mathbf{v}_l \otimes \mathbf{1}_i^T + v_{l,i} \mathbf{I}_{nd \times nd}] \\
\mathbf{Y}_{g,i} &= \alpha_g \rho_g [\mathbf{v}_g \otimes \mathbf{1}_i^T + v_{g,i} \mathbf{I}_{nd \times nd}].
\end{aligned}$$

Flujos Difusivos y sus Jacobianos

Los flujos difusivos son

$$\mathbf{F}^d = \begin{pmatrix} \mathbf{0}_{1 \times nd} \\ \mathbf{0}_{1 \times nd} \\ \alpha_l \mu^{eff}_l (\nabla \mathbf{v}_l + \nabla \mathbf{v}_l^T) \\ \mu^{eff}_g (\nabla \mathbf{v}_g + \nabla \mathbf{v}_g^T) \\ \alpha_l \frac{\mu^{eff}_l}{C_\kappa} \nabla \kappa^T \\ \alpha_l \frac{\mu^{eff}_l}{C_\epsilon} \nabla \epsilon^T \end{pmatrix}, \tag{2.83}$$

y sus jacobianos se pueden definir como

$$\mathbf{K}_{ij} = \frac{\partial \mathbf{F}_i^d}{\partial \mathbf{U}_{,j}} = \frac{\partial \mathbf{F}_i^d}{\partial \nabla \mathbf{U} \cdot \mathbf{n}_j} \tag{2.84}$$

$$\mathbf{K}_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \alpha_l \mu^{eff}_l (\delta_{ij} \mathbf{I}_{nd \times nd} + \mathbf{1}_j \mathbf{1}_i^T) & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mu^{eff}_g (\delta_{ij} \mathbf{I}_{nd \times nd} + \mathbf{1}_j \mathbf{1}_i^T) & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \delta_{ij} \alpha_l \frac{\mu^{eff}_l}{C_\kappa} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & \delta_{ij} \alpha_l \frac{\mu^{eff}_l}{C_\epsilon} \end{pmatrix}. \tag{2.85}$$

En la determinación de los jacobianos de los flujos difusivos no se considera la dependencia de la viscosidad efectiva con las incógnitas. La extensión de estos jacobianos incluyendo esta dependencia no se presenta, ya que numéricamente la viscosidad turbulenta es tratada en forma explícita.

Término fuente y sus Jacobianos

Los jacobianos reactivos se calculan a partir del término fuente \mathbf{G} que por una cuestión de orden se ha desdoblado en dos componentes, una que incluye la flotación y los términos de producción turbulenta y otra que se reserva para los términos de interacción entre las fases

$$\mathbf{G} = \tilde{\mathbf{G}} + \mathbf{G}^{\text{inter}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \alpha_l \rho_l \mathbf{g} \\ \alpha_g \rho_g \mathbf{g} \\ P_\kappa - \rho_l \epsilon \\ \frac{\epsilon}{\kappa} (C_1 P_\kappa - C_2 \rho_l \epsilon) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \mathbf{F}_{l,g}^{\text{inter}} \\ \mathbf{F}_{g,l}^{\text{inter}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.86)$$

Los jacobianos reactivos provenientes del término $\tilde{\mathbf{G}}$ son

$$\tilde{\mathbf{C}} = \frac{\partial \tilde{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & -\rho_l \mathbf{g} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & \rho_g \mathbf{g} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times nd} & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \frac{4\rho_l C_\mu \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) \frac{\kappa}{\epsilon}}{\kappa^2} & -\frac{2\rho_l C_\mu \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) \kappa^2 + \rho_l \epsilon^2}{\epsilon^2} \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \frac{2C_1 \rho_l C_\mu \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) : \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{v}) \kappa^2 + C_2 \rho_l \epsilon^2}{\kappa^2} & -2\frac{\epsilon C_2 \rho_l}{\kappa} \end{pmatrix}. \quad (2.87)$$

Los jacobianos reactivos provenientes del término $\mathbf{G}^{\text{inter}}$ son

$$\mathbf{C}^{\text{inter}} = \frac{\partial \mathbf{G}^{\text{inter}}}{\partial \mathbf{U}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & \frac{\partial \mathbf{F}_{l,g}^{\text{inter}}}{\partial \alpha_g} & \Phi & -\Phi & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ \mathbf{0}_{nd \times 1} & -\frac{\partial \mathbf{F}_{l,g}^{\text{inter}}}{\partial \alpha_g} & -\Phi & \Phi & \mathbf{0}_{nd \times 1} & \mathbf{0}_{nd \times 1} \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{0}_{1 \times nd} & \mathbf{0}_{1 \times nd} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.88)$$

donde las componentes de $\mathbf{C}^{\text{inter}}$ están expresadas por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{F}_{l,g}^{\text{inter}}}{\partial \alpha_g} &= C'_{drag} Re_{bubble} C_{drag} (1 - 2\alpha_g) \\ \Phi &= -C'_{drag} \alpha_l \alpha_g Re_{bubble} \left[C''_{drag} \frac{(\mathbf{v}_{rel} \otimes \mathbf{v}_{rel})}{\|\mathbf{v}_{rel}\|^2} + C_{drag} \mathbf{I} \right] \\ C''_{drag} &= C_{drag} + Re_{bubble} \frac{\partial C_{drag}}{\partial Re_{bubble}}. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Como se puede observar en la Ec. 2.89 sólo se debe definir la expresión para la función $C_{drag}(Re_{bubble})$ y su derivada respecto al número de Reynolds basado en el tamaño de la burbuja (Re_{bubble}). Algunas veces esta función incluye también al número de Eotvos y en este caso es sólo cuestión de incluir dicha funcionalidad, así como la expresión de la derivada respecto a este parámetro.

2.5. Discretización Numérica por el Método de los Elementos Finitos

En esta sección se presenta la discretización numérica del modelo matemático del flujo bifásico turbulento incompresible. En el presente capítulo se ha utilizado el *método de los elementos finitos* y en particular los esquemas de estabilización SUPG y SUPG-PSPG que se describen en las próximas secciones. Por cuestiones de costo computacional y por generalidad en la forma de programar el código computacional se ha dividido la resolución del conjunto total de ecuaciones en etapas, una por cada fase involucrada (en este caso son dos fases) y una para el modelo de turbulencia (siempre y cuando el mismo este formulado en términos de ecuaciones diferenciales).

Todas las fases son tratadas como incompresibles pero dado que el modelo de flujo multifásico es de una sola presión, sólo una de las fases la incluye como una de sus incógnitas. Se ha elegido a la fase continua como aquella que incluye a la presión como incógnita, mientras que cada fase dispersa contiene cada una de las fracciones de volumen correspondientes. Por lo tanto, la estabilización de la restricción de incompresibilidad se debe tener en cuenta sólo para la fase continua que eventualmente es aquella que podría originar modos espurios de presión. De esta forma, la fase continua se encuadra en un tratamiento numérico tipo flujo incompresible. Las fases dispersas son más adecuadas para una formulación tipo compresible, jugando la fracción de la fase un rol similar a la densidad. Lo expuesto anteriormente es válido para medios muy diluidos que garantizan que la fase continua siempre está presente y tenga el mayor peso en el sistema bifásico.

2.5.1. El Método SUPG para Sistemas Advectivos-Difusivos -Reactivos

Como fuera presentado previamente en la Ec. 2.74, el problema del flujo multifásico turbulento incompresible puede ser escrito como un sistema Advectivo-Difusivo-Reactivo. La formulación débil usando el método SUPG [BH82] para sistemas advectivos-difusivos y extendidos a esta situación, se puede escribir definiendo los espacios funcionales para las funciones de interpolación y de peso como

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_u^h &= \{\mathbf{U}^h | \mathbf{U}^h \in (\mathcal{H}^{1h})^{n_{sd}}, \mathbf{U}^h \doteq \mathbf{U}_D^h \text{ in } \Gamma_D\} \\ \mathcal{V}_u^h &= \{\mathbf{N}^h | \mathbf{N}^h \in (\mathcal{H}^{1h})^{n_{sd}}, \mathbf{N}^h \doteq \mathbf{0} \text{ in } \Gamma_D\}, \end{aligned} \quad (2.90)$$

donde

$$\mathcal{H}^{1h} = \left\{ \phi^h | \phi^h \in C^0(\bar{\Omega}), \phi^h|_{\Omega^e} \in P^1, \forall \Omega^e \in \mathcal{E} \right\} \quad (2.91)$$

es el espacio de Sobolev de orden uno, P^1 representa una familia de polinomios de primer grado y n_{sd} es la dimensión del dominio físico Ω . Con el símbolo \mathcal{E} se representa la partición discreta del dominio físico, siendo Ω^e la porción de esta partición que corresponde al elemento e y $\bar{\Omega} = \cup \Omega^e$ es el cierre de Ω , o sea $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$.

La formulación SUPG del sistema ADR Ec. (2.74) se escribe como

Hallar $\mathbf{U}^h \in \mathcal{S}_u^h$ satisfaciendo

$$\int_{\Omega} \mathbf{W}^h \left\{ \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U}^h)}{\partial \mathbf{U}^h} \frac{\partial \mathbf{U}^h}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}^a(\mathbf{U}^h) - \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}^h} \mathbf{U}^h - \nabla \cdot \mathbf{F}^d(\nabla \mathbf{U}^h) - \mathbf{G}' \right\} d\Omega = 0, \quad (2.92)$$

donde el subespacio expandido de funciones de peso y la divergencia del flujo advectivo son expresados como

$$\begin{aligned}
\mathbf{W}^h &= \mathbf{N}^h + \mathbf{P}^h \\
\mathbf{P}^h &= \tau \mathbf{A}^T(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla \mathbf{N}^h \\
\nabla \cdot \mathbf{F}^a(\mathbf{U}^h) &= \mathbf{A}(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla \mathbf{U}^h \\
\forall \mathbf{N}^h &\in \mathcal{V}_u^h.
\end{aligned} \tag{2.93}$$

Debilitando la expresión 2.92 se obtiene

$$\begin{aligned}
&\int_{\Omega} \mathbf{N}^h \left\{ \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U}^h)}{\partial \mathbf{U}^h} \frac{\partial \mathbf{U}^h}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}^h} \mathbf{U}^h - \mathbf{G}' \right\} d\Omega + \left\{ \int_{\Omega} \mathbf{N}^h \mathbf{A}(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla \mathbf{U}^h d\Omega \right\} (1 - \zeta_{weak}) + \\
&\left\{ \int_{\Omega} -\nabla \mathbf{N}^h \cdot \mathbf{F}^a d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}^h \mathbf{F}^a \cdot \boldsymbol{\eta} d\Gamma \right\} \zeta_{weak} + \int_{\Omega} \nabla \mathbf{N}^h \cdot \mathbf{F}^d(\nabla \mathbf{U}^h) d\Omega - \int_{\Gamma} \mathbf{N}^h \mathbf{F}^d \cdot \boldsymbol{\eta} d\Gamma + \\
&\int_{\Omega} \mathbf{P}^h \left\{ \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U}^h)}{\partial \mathbf{U}^h} \frac{\partial \mathbf{U}^h}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}^h} \mathbf{U}^h - \mathbf{G}' \right\} d\Omega + \int_{\Omega} \mathbf{P}^h \mathbf{A}(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla \mathbf{U}^h d\Omega = 0,
\end{aligned} \tag{2.94}$$

Con la función de selección del término débil definida como

$$\zeta_{weak} = \begin{cases} 1 & \text{forma débil} \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \tag{2.95}$$

La estabilización se aplica a todos los términos salvo al flujo difusivo. El código desarrollado cuenta con dos formulaciones para el término advectivo, la primera que corresponde al segundo término de la expresión anterior, donde el término advectivo está sin debilitar ($\zeta_{weak} = 0$), y la segunda correspondiente al tercer término, la cual permite debilitar el término advectivo surgiendo un término de contorno adicional ($\zeta_{weak} = 1$).

La matriz \mathbf{P}^h denominada perturbación de la función de peso depende de la matriz τ , denominada matriz de tiempos intrínsecos, cuyo diseño es un tema de constante interés científico. En este trabajo se ha usado una matriz diagonal donde los valores de las componentes se adoptan de forma de aproximar en la mayor medida posible la estabilización que se tendría usando el método SUPG-PSPG. Este método es muy utilizado para la resolución por elementos finitos de problemas de flujo incompresible viscoso pero su formulación original no fue propuesta como un sistema advectivo-difusivo, el cual es más frecuente en el caso de flujos compresibles.

Como el flujo multifásico tiene aspectos combinados de ambos tipos de flujos, por un lado la ecuación de continuidad tiene presente en sus términos a la fracción de líquido que puede hacer las veces de una densidad variable (típica del caso compresible) y por otro lado, la presión no aparece como incógnita del problema ya que no existe una ecuación termodinámica de estado que la ligue con las otras variables (típico del caso incompresible). Por el primer motivo se considera necesario formular el problema en una manera similar a un flujo compresible. Para evitar el inconveniente de no contar con la presión como incógnita se ha recurrido a la utilización de la función denominada *función de entalpía*, por su similitud con el problema de cambio de fase, que permite incorporar la presión al vector de estado. Esta misma función de entalpía puede usarse para cualquier tipo de cambio de variables, por ejemplo para el caso compresible cuando se quiere trabajar externamente con variables primitivas e internamente con las variables de conservación.

Se ha agregado a la ecuación de continuidad de la fase gaseosa un término de difusión numérica isotrópica adicional, para estabilizar *overshoots-undershoots* presentes alrededor de soluciones con discontinuidades abruptas. En la siguiente sección se mostrará cómo se pueden hacer equivalentes la formulación propuesta en este trabajo y la denominada SUPG-PSPG.

2.5.2. El Método SUPG-PSPG visto como Sistema Advectivo-Difusivo-Reactivo

A continuación se expone la resolución de un flujo de una fase por el método de los elementos finitos estabilizados de igual orden. Los espacios para las funciones interpolación y de peso en el método SUPG-PSPG son definidos como sigue

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}_v^h &= \{\mathbf{v}^h | \mathbf{v}^h \in (\mathcal{H}^{1h})^{n_{sd}}, \mathbf{v}^h \doteq \mathbf{v}_D^h \text{ in } \Gamma_D\} \\
 \mathcal{V}_v^h &= \{\mathbf{N}^h | \mathbf{N}^h \in (\mathcal{H}^{1h})^{n_{sd}}, \mathbf{N}^h \doteq \mathbf{0} \text{ in } \Gamma_D\} \\
 \mathcal{S}_p^h &= \{q^h | q^h \in \mathcal{H}^{1h}\} \\
 \mathcal{V}_p^h &= \mathcal{S}_p^h,
 \end{aligned} \tag{2.96}$$

donde

$$\mathcal{H}^{1h} = \left\{ \phi^h | \phi^h \in C^0(\overline{\Omega}), \phi^h|_{\Omega^e} \in P^1, \forall \Omega^e \in \mathcal{E} \right\} \tag{2.97}$$

es el espacio de Sobolev de orden uno, P^1 representa una familia de polinomios de primer grado y n_{sd} es la dimensión del dominio físico Ω . Con \mathcal{E} se representa la partición discreta del dominio físico, siendo Ω^e la porción de esta partición correspondiente al elemento e y

$\bar{\Omega} = \cup \Omega^e$ es el cierre de Ω , o sea $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. La formulación SUPG-PSPG de la ecuación de Navier-Stokes incompresible se escribe como

Determinar $\mathbf{v}^h \in \mathcal{S}_v^h$ y $p^h \in \mathcal{S}_p^h$ tal que $\forall \mathbf{N}^h \in \mathcal{V}_v^h, \forall q^h \in \mathcal{V}_p^h$ se satisfaga

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \mathbf{N}^h \cdot \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}^h}{\partial t} + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{b} \right) + \int_{\Omega} \epsilon(\mathbf{N}^h) : \mathbf{T}^h d\Omega - \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}^h \cdot \mathbf{t}^h d\Gamma + \\
& + \int_{\Omega} q^h \nabla \cdot \mathbf{v}^h d\Omega + \\
& + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} \delta^h \cdot \left[\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}^h}{\partial t} + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{b} \right) - \nabla \cdot \mathbf{T}^h \right] d\Omega}_{(SUPG)} + \\
& + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} \epsilon^h \cdot \left[\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}^h}{\partial t} + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{b} \right) - \nabla \cdot \mathbf{T}^h \right] d\Omega}_{(PSPG)} + \\
& + \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega} \tau_{LSIC} \nabla \cdot \mathbf{N}^h \rho \nabla \cdot \mathbf{v}^h d\Omega = \mathbf{0}.
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Los parámetros de estabilización son definidos como

$$\begin{aligned}
\delta^h &= \tau_{SUPG} (\mathbf{v}^h \cdot \nabla) \mathbf{N}^h \\
\epsilon^h &= \tau_{PSPG} \frac{1}{\rho} \nabla q^h \\
\tau_{SUPG} &= \frac{h}{2 \|\mathbf{v}^h\|} z(Re_v) \\
\tau_{PSPG} &= \tau_{SUPG} \\
\tau_{LSIC} &= \frac{h}{2} \|\mathbf{v}^h\| z(Re_v),
\end{aligned} \tag{2.99}$$

con Re_v el número de Reynolds basado en los parámetros del elemento

$$Re_v = \frac{\|\mathbf{v}^h\| h}{2\nu}. \tag{2.100}$$

La longitud del elemento es calculada a través de la siguiente expresión

$$h = 2 \left(\sum_{a=1}^{nen} |\mathbf{s}^h \cdot \nabla N_a| \right)^{-1}, \tag{2.101}$$

siendo N_a la función de forma asociada al nodo a , n_{en} el número de nodos en el elemento y \mathbf{s}^h el vector velocidad normalizado a uno. La función $z(Re_v)$ usada en (2.99) es definida como

$$z(Re_v) = \begin{cases} Re_v/3 & -3 \leq Re_v < 3 \\ \text{sign}(Re_v) & 3 \leq |Re_v| \end{cases}. \quad (2.102)$$

El integrando de los términos de estabilización en 2.98 en el caso 2D contribuye con

$$(\boldsymbol{\delta}^h + \boldsymbol{\epsilon}^h) \cdot \left[\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}^h}{\partial t} + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{b} \right) + \nabla p \right] + \tau_{LSIC} \nabla \cdot \mathbf{N}^h \rho \nabla \cdot \mathbf{v}^h =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\tau_{PSPG}}{\rho} \nabla q^h \nabla p^h + \tau_{PSPG} \nabla q^h \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{v}^h}{\partial t} + \mathbf{v}^h \cdot \nabla \mathbf{v}^h - \mathbf{b} \right) \\ \tau_{SUPG} \mathbf{v}^h \cdot \nabla N^h \left(\rho \left(\frac{\partial v_x^h}{\partial t} + \mathbf{v}^h \cdot \nabla v_x^h - b_x \right) + \frac{\partial p^h}{\partial x} \right) + \tau_{LSIC} \frac{\partial N^h}{\partial x} \rho \nabla \cdot \mathbf{v}^h \\ \tau_{SUPG} \mathbf{v}^h \cdot \nabla N^h \left(\rho \left(\frac{\partial v_y^h}{\partial t} + \mathbf{v}^h \cdot \nabla v_y^h - b_y \right) + \frac{\partial p^h}{\partial y} \right) + \tau_{LSIC} \frac{\partial N^h}{\partial y} \rho \nabla \cdot \mathbf{v}^h \end{pmatrix}. \quad (2.103)$$

2.5.3. Estabilización de la Fase Continua

Como se ha mencionado, la fase continua es tratada con una formulación SUPG-PSPG pero escrita a nivel de código como un sistema ADR. Con lo cual la función de perturbación a aplicar en un esquema como el expresado en la Ec. 2.92 debería ser análoga a aquella escrita en la Ec. 2.98.

Se propone en este trabajo como matriz de tiempos intrínsecos a la siguiente expresión

$$\boldsymbol{\tau} = \text{diag}\left\{ \left(\tau_1 \quad \tau_2 \quad \dots \quad \tau_{ndf} \right) \right\}. \quad (2.104)$$

Para poder lograr una estabilización similar a la del método SUPG-PSPG se analiza cómo influye la misma sobre los diferentes términos de la expresión 2.94. Por razones de simplicidad analizaremos el caso particular de un solo fluido laminar por lo que el sistema se reduce de ndf a $nd + 1$ ecuaciones del continuo.

El término de estabilización en la Ec. 2.94 para el caso de una sola fase laminar viene dado por

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \mathbf{P}^h \cdot \left\{ \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U}^h)}{\partial \mathbf{U}^h} \frac{\partial \mathbf{U}^h}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla \mathbf{U}^h \right\} d\Omega = \\ & = \int_{\Omega} \left(\tau \mathbf{A}^T(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla N^h \right) \left(\frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U}^h)}{\partial \mathbf{U}^h} \frac{\partial \mathbf{U}^h}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla \mathbf{U}^h \right) d\Omega \\ \\ \mathbf{P}^h & = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\partial q^h}{\partial x} \tau_2 & \frac{\partial q^h}{\partial y} \tau_3 \\ \frac{\partial N^h}{\partial x} \tau_1 & \left(\frac{\partial N^h}{\partial x} \rho v_x^h + \frac{\partial N^h}{\partial y} \rho v_y^h \right) \tau_2 & 0 \\ \frac{\partial N^h}{\partial y} \tau_1 & 0 & \left(\frac{\partial N^h}{\partial x} \rho v_x^h + \frac{\partial N^h}{\partial y} \rho v_y^h \right) \tau_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.105)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^h \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{U}^h)}{\partial \mathbf{U}^h} \frac{\partial \mathbf{U}^h}{\partial t} + \mathbf{A}(\mathbf{U}^h) \cdot \nabla \mathbf{U}^h \right) & = \\ & \begin{pmatrix} \rho \left(\tau_2 \frac{\partial q^h}{\partial x} \frac{\partial v_x^h}{\partial t} + \tau_3 \frac{\partial q^h}{\partial y} \frac{\partial v_y^h}{\partial t} \right) + \frac{\partial q^h}{\partial x} \tau_2 \left(\frac{\partial p^h}{\partial x} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla v_x^h \right) + \frac{\partial q^h}{\partial y} \tau_3 \left(\frac{\partial p^h}{\partial y} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla v_y^h \right) \\ \rho \left(\tau_2 \mathbf{v} \cdot \nabla N^h \rho \frac{\partial v_x^h}{\partial t} \right) + \frac{\partial N^h}{\partial x} \tau_1 \left(\frac{\partial v_x^h}{\partial x} + \frac{\partial v_y^h}{\partial y} \right) + \rho \tau_2 \mathbf{v} \cdot \nabla N^h \left(\frac{\partial p^h}{\partial x} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla v_x^h \right) \\ \rho \left(\tau_3 \mathbf{v} \cdot \nabla N^h \rho \frac{\partial v_y^h}{\partial t} \right) + \frac{\partial N^h}{\partial y} \tau_1 \left(\frac{\partial v_x^h}{\partial x} + \frac{\partial v_y^h}{\partial y} \right) + \rho \tau_3 \mathbf{v} \cdot \nabla N^h \left(\frac{\partial p^h}{\partial y} + \rho \mathbf{v} \cdot \nabla v_y^h \right) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Comparando 2.105 con 2.103 vemos que ambas serían equivalentes si

$$\rho \tau_2 = \rho \tau_3 = \tau_{SUPG} = \tau_{PSPG} \quad (2.106)$$

$$\tau_1 = \rho \tau_{LSIC}.$$

2.5.4. Estabilización de la Fase Dispersa

Para la fase dispersa se ha elegido como función de perturbación algo muy simple que por el momento no está en armonía con lo que en general se emplea en sistemas **ADR**. La función de perturbación utilizada es

$$\mathbf{P}^h = (\tau \mathbf{v}_g \cdot \nabla N) \mathbf{I}, \quad (2.107)$$

y además se ha agregado a la ecuación de continuidad de la fase gaseosa un término de difusión numérica isotrópica adicional para estabilizar *overshoots-undershoots* presentes alrededor de soluciones con discontinuidades abruptas.

La implementación actual consiste en incorporar un término adicional del tipo

$$\int_{\Omega} \nabla N \delta_{\alpha}^h \nabla \alpha_g d\Omega \quad (2.108)$$

$$\delta_{\alpha}^h = c_{\alpha} \frac{h}{2} \|\mathbf{v}_g\|$$

a la ecuación de continuidad de la fase dispersa en la formulación expresada por la Ec. 2.92, con c_{α} siendo un coeficiente que se ha tomado igual a 0.25 para los ejemplos resueltos.

2.6. Ejemplo Numérico

En primera instancia se procedió a validar el código computacional con un modelo físico agua-aire de una cuchara siderúrgica a escala (ver [AB90], [STK02], [IKNM95] y [DGB99]) de la que se poseen un número importante de datos experimentales.

El nivel de exigencia requerido al código computacional era importante ya que las condiciones de trabajo son tales que se presentan relaciones de densidades de 1000:1 y relaciones de velocidades de 9:1. No obstante, son menos rigurosas que las que se pretende resolver en la cuchara siderúrgica.

Las soluciones numéricas obtenidas con esta formulación presentaban una patología particular conforme evolucionaba el problema. Cuando los valores de fracción de volumen de gas entorno al tapón eran elevados, la convergencia del lazo no-lineal empezaba a decrecer, perturbándose en primera instancia el campo de fracción de volumen de gas para luego propagarse al resto de los campos, produciendo soluciones no acotadas (*blow-up*). El mismo comportamiento se evidencia en códigos comerciales como CFX. Usando el set completo de fuerzas de non-drag (fuerza de masa virtual, lift, dispersión turbulenta, etc.) con el código comercial CFX, se pueden resolver problemas con una altura de columna de agua de 0.4 m.¹¹ Pero si se trata de resolver un modelo físico agua-aire a escala 1:1 (la altura de la columna de agua es ahora de 2.4 m) aparece la misma patología que la presentada en el código implementado en PETSc-FEM.

En un número importante de trabajos se expone la falencia matemática que padece el modelo multi-fluido, el mismo está mal puesto como un problema de valores iniciales (ver [DP98], [SI01] y [DNT03]), por lo menos para el juego de parámetros que se pretende resolver. En el siguiente Capítulo se trata el problema de la mala postura matemática del modelo multifluido.

Ante lo expuesto, se decidió validar el código computacional con un ejemplo (también utilizado en la literatura [Hil97]) con bajas fracciones de volumen de gas (menores a 0.02).

¹¹ Es la altura utilizada en los modelos físicos existentes en la literatura.

2.6.1. Canal Bidimensional con un Escalón

Con el fin de validar el elemset (**Bubbly**), desarrollado dentro de la distribución de PETSc-FEM, se compararon los resultados obtenidos al resolver el flujo a través de un canal bidimensional con un escalón con los publicados en el trabajo de K.Hiltunen [Hil97]. Cabe destacar que para este ejemplo se eliminó el término difusivo de la ecuación de cantidad de movimiento del gas, por ser bajo su aporte, permitiendo independizar a esta última de la fracción de volumen de gas. El dominio computacional y su malla pueden ser observados en la Fig. 2.1, manteniendo esta última el mismo número de elementos y distribución que los empleados en el trabajo de referencia.

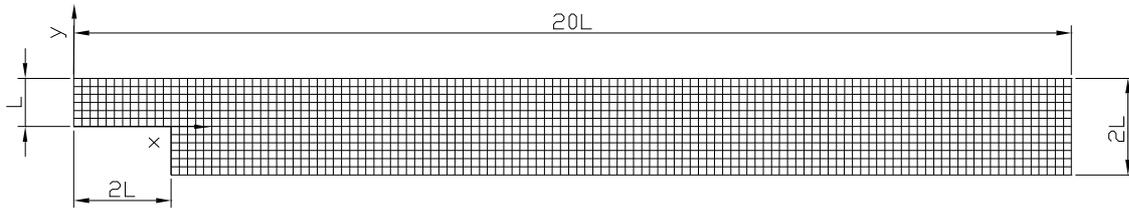


Figura 2.1: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Dominio computacional y malla.

Las condiciones de contorno e iniciales para el ejemplo son:

Condiciones de Contorno

- Plano de entrada, $v_{l_x} = v_{g_x} = 4 v_{max}(1 - y/L) \cdot y/L$, $v_{l_y} = v_{g_y} = 0$, $\alpha_{gas} = 0.01$.
- Plano de salida, $v_{l_y} = v_{g_y} = 0$, $p = 0$.
- Pared superior e inferior, condición de no deslizamiento $\mathbf{v}_l = \mathbf{v}_g = \mathbf{0}$.

Condiciones Iniciales

Se parte de un campo de presión y velocidad uniforme en la dirección del flujo. La fracción de volumen para la fase dispersa es también uniforme en todo el dominio para el estado inicial.

En el presente ejemplo el único término de transferencia de cantidad de movimiento entre fases es el correspondiente al Drag. Siendo por lo tanto, la fuerza de interacción entre fases definida como

$$\mathbf{F}_{l,g}^{inter} = \frac{3}{4} \frac{\mu_l}{d_{bubble}^2} Re_{bubble} C_{drag} \alpha_g \mathbf{v}_{rel} . \quad (2.109)$$

Definimos al número de Reynolds de la fase para el plano de entrada como

$$Re_k = \frac{\rho_k v_{max} L}{\mu_k}. \quad (2.110)$$

La configuración física correspondiente al ejemplo esta dada en el Cuadro 2.3, la que se mantiene para todos los casos resueltos.

Configuración Física			
Diám. de la partícula (d)	5×10^{-3} m	Coefficiente de Drag (C_{Drag})	0.44
Densidad del líq. (ρ_l)	1000 kg/m ³	Relación de densidades (ρ_l/ρ_g)	0.50
Viscosidad del líq. (μ_l)	3.80×10^{-3} kg/ms		

Cuadro 2.3: Configuración física para el problema de un canal bidimensional con un escalón.

En las Figs. 2.2 y 2.3 se comparan para el estado estacionario la fracción de la fase dispersa y la presión adimensional ($p^* = p/(\rho_l v_{max}^2)$) respectivamente, obtenidas por la formulación propuesta con los resultados de referencia para un plano $y=0$ con $[Re_l; Re_g] = [50; 100]$. Se observa para la fracción de vacío una diferencia entre ambas curvas que se hace constante para $x/L > 8$. Los mínimos de fracción de vacío se encuentran desfasados, siendo el más cercano al escalón el obtenido por la formulación propuesta. En cuanto a la presión adimensional no se observan diferencias apreciables entre las soluciones.

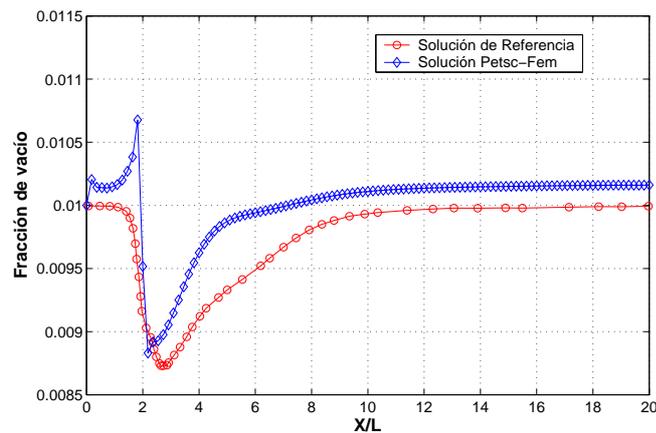


Figura 2.2: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Fracción de vacío para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [50, 100]$.

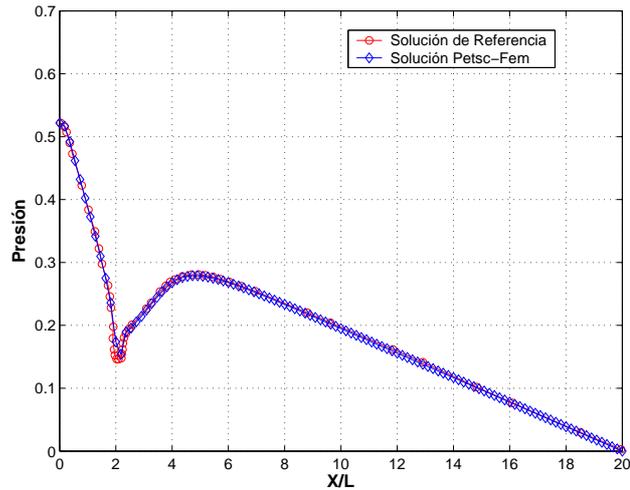


Figura 2.3: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Presión adimensional para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [50,100]$.

En las Figs. 2.4 y 2.5 se comparan la fracción de la fase dispersa y la presión adimensional respectivamente, obtenidas por la formulación propuesta con los resultados de referencia para un plano $y=0$ con $[Re_l; Re_g] = [100;200]$. En la fracción de vacío se observan las mismas diferencias que para los Reynolds más bajos. Para la presión nuevamente no se observan diferencias apreciables entre las soluciones.

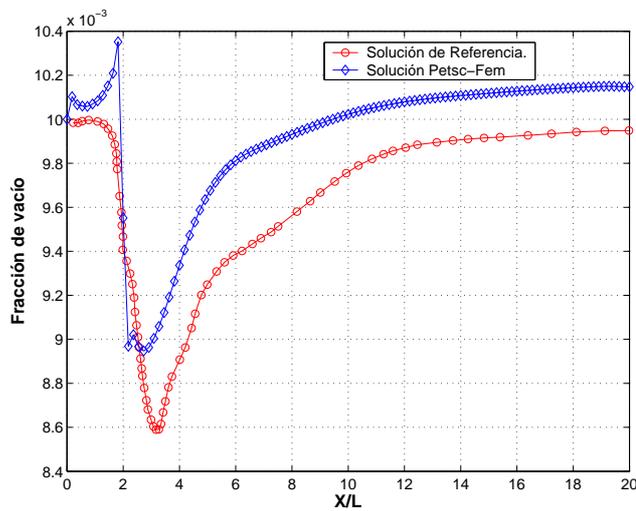


Figura 2.4: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Fracción de vacío para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$.

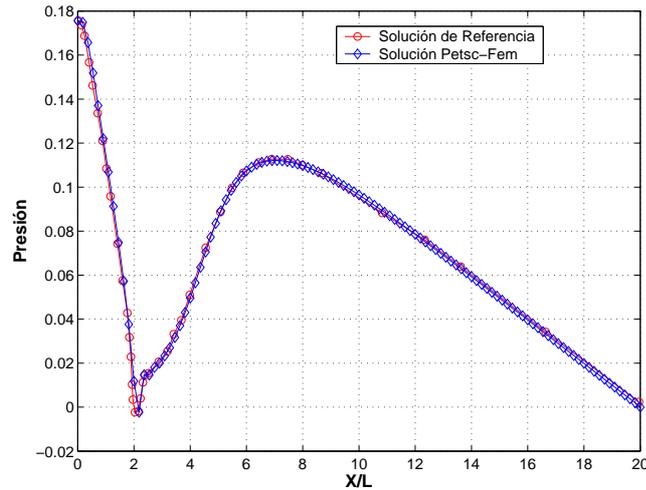


Figura 2.5: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Presión adimensional para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100, 200]$.

Se procedió a refinar la malla en forma uniforme, incrementando el número de elementos a 20100, al comparar los resultados de la fracción de gas para $[Re_l; Re_g] = [100; 200]$ (Fig. 2.6) se aprecia un acercamiento a los valores de referencia en la zona de la entrada al escalón y a la salida del canal, estando el mínimo ahora en fase. En la Fig. 2.7 se puede observar que la presión obtenida con la formulación propuesta evidencia una leve variación con respecto a la de referencia en la zona de salida del canal.

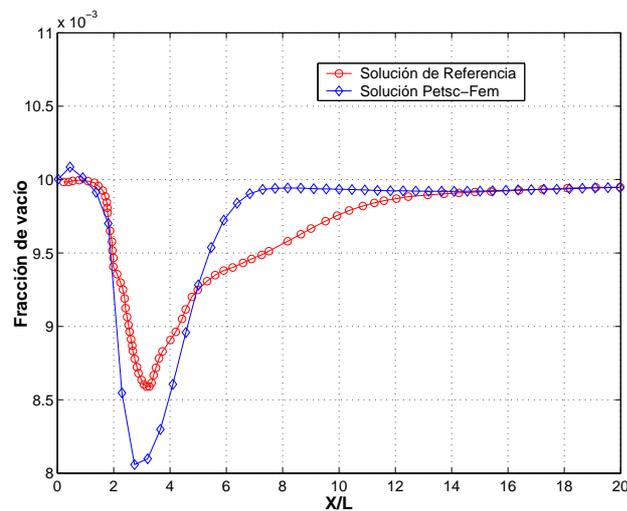


Figura 2.6: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Fracción de vacío para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100, 200]$, con malla refinada.

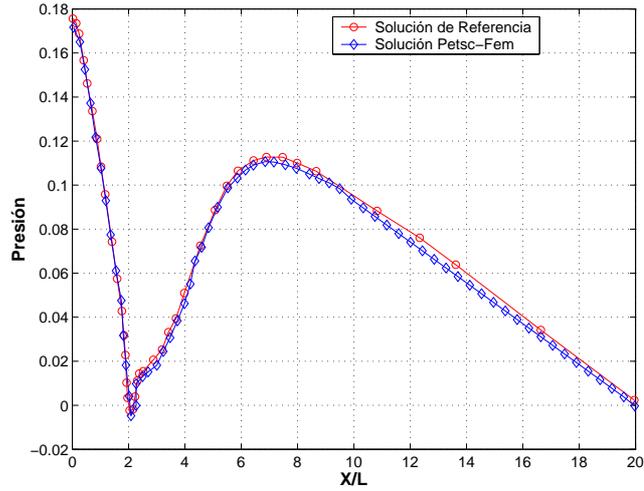


Figura 2.7: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Presión adimensional para un plano $y=0$, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$, con malla refinada.

En la Figs. 2.8, 2.9 y 2.10 se observan los campos de fracción de gas y módulo de las velocidades del líquido y gas respectivamente, para un Reynolds de fase $[Re_l; Re_g] = [100; 200]$.

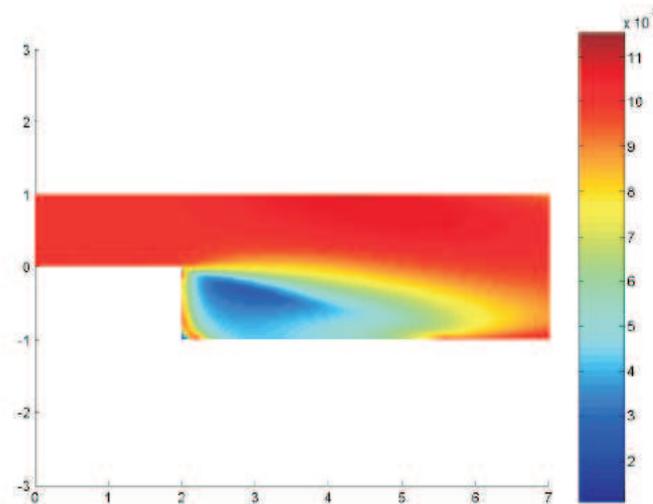


Figura 2.8: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Campo de fracción de gas, $[Re_l, Re_g] = [100,200]$, solución PETSc-FEM.

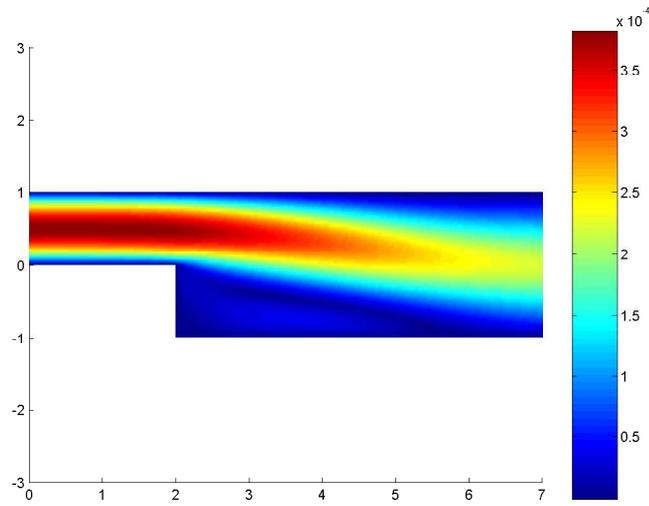


Figura 2.9: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Módulo de la velocidad del líquido, $[Re_l, Re_g] = [100, 200]$, solución PETSc-FEM.

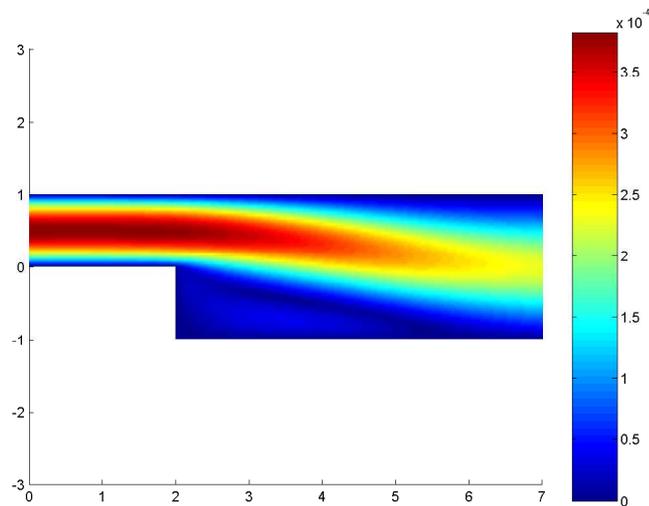


Figura 2.10: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Módulo de la velocidad del gas, $[Re_l, Re_g] = [100, 200]$, solución PETSc-FEM.

En la Fig. 2.11 se compara la velocidad relativa obtenida en el trabajo de referencia y la determinada por la formulación propuesta para $[Re_l; Re_g] = (100; 200)$, observando que ambos campos poseen el mismo patrón.

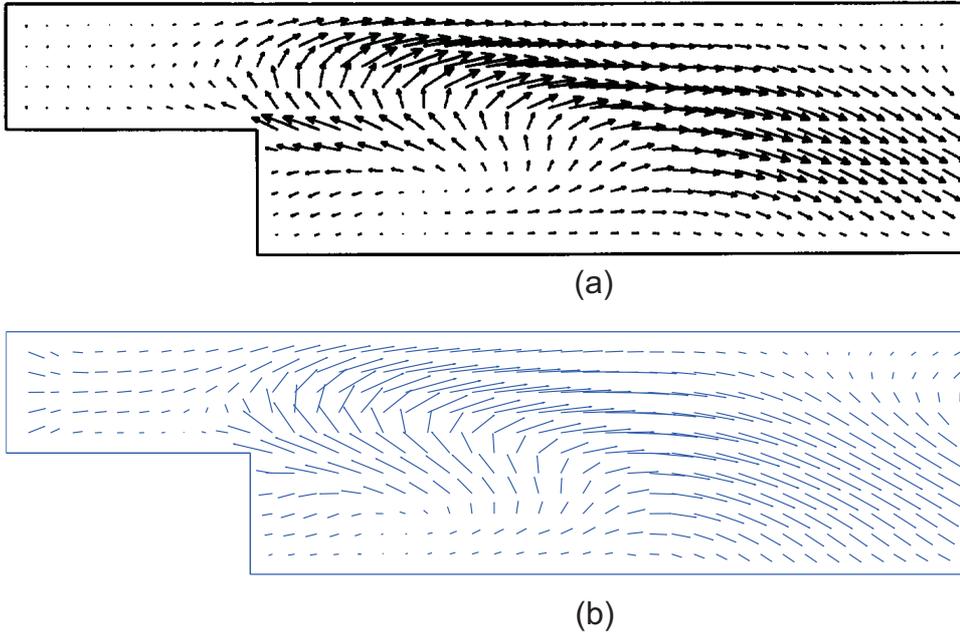


Figura 2.11: Problema de un Canal Bidimensional con un Escalón - Velocidad relativa, (a) Solución de Referencia (b) Solución PETSc-FEM, $[Re_l, Re_g] = [100, 200]$.

Capítulo 3

Un Precondicionador de la Matriz de Masa para Evitar la Mala Postura Matemática del Modelo de Dos Fluidos

3.1. Introducción

El modelo de dos fluidos es ampliamente aceptado para la resolución de problemas bifásicos, sin embargo, resulta ser de completo conocimiento por parte de la comunidad científica que en un sentido matemático el modelo de dos fluidos está *mal puesto*, dado que la hiperbolicidad fuerte puede no estar garantizada para todos los parámetros del flujo (Drew y Passman [DP98]).

El modelo es cuestionable por su formulación *no conservativa* [Key00], que en conjunto con las *no linealidades* propias del modelo, lo tornan un problema complejo en el sentido matemático.

Las soluciones numéricas de problemas de dos fluidos mal puestos evidencian dos efectos: excesiva difusión numérica y/o presencia de inestabilidades. Tales situaciones son comunes en problemas de valores iniciales mal puestos (por ejemplo, ver Joseph y Saut [JS90]).

Es importante hacer una distinción entre *problemas no-hiperbólicos* considerados en la presente tesis y los problemas que se caracterizan por una pérdida de hiperbolicidad debido a un cambio de tipo en la ecuación diferencial parcial. Los problemas donde existen cambios de tipo en la ecuación diferencial son un tópico aparte en el análisis matemático, el cual está relacionado con estudiar el flujo de información entre dominios hiperbólicos y elípticos [JS90].

Hasta el momento un gran esfuerzo ha sido realizado con la finalidad de solucionar el problema de la pérdida de hiperbolicidad del modelo de dos fluidos, encontrando dos diferentes aproximaciones para lograr dicho fin.

La primera aproximación está basada en el agregado de términos de interfaz adicionales, buscando una explicación física para cada uno de ellos. Aunque esta metodología parecería ser físicamente justificable, cada uno de los términos agregados a las ecuaciones, trae aparejado la incorporación de nuevos coeficientes y la dificultad asociada de su estimación [MNC02].

Uno de estos términos que extiende en forma significativa el rango de parámetros para los cuales el problema de dos fluidos se encuentra bien puesto, es el término de presión interfacial. Este término enriquece el modelo relajando la condición de igualdad de presiones para ambas fases. La justificación de por qué introducir dos presiones al modelo, radica en que la presión de la fase continua calculada con el modelo de dos fluidos estándar, difiere considerablemente de la que surge de resolver el campo de velocidad de la fase continua entorno a una burbuja. Esto último parece ser lógico dado que el modelo de dos fluidos no tiene como objetivo resolver los detalles del flujo entorno a una burbuja. En este sentido Lahey [LYT05] ha obtenido resultados promisorios para sistemas agua-aire encontrando buena postura matemática para todas las fracciones de vacío y elevada relación de densidades usando como condición necesaria que el coeficiente de presión de la interfaz (C_p) sea mayor a 0.166. Sin embargo, esta cota inferior no coincide con la determinada por Drew y Passman [DP98] para el flujo de fluidos altamente viscosos, donde podemos encontrar valores negativos para el coeficiente de presión de la interfaz. En este sentido es necesaria una discusión más profunda acerca del valor que debería tomar el coeficiente de presión de la interfaz.

Existen en la literatura otras contribuciones que hacen uso de diferentes presiones para las fases, las que permitirían extender el rango de parámetros para los cuales el problema es hiperbólico, (ver por ejemplo los trabajos realizados por Chung et al. [CCL02], Micaelli [Mic88], Bestion [Bes90], Coquel et al. [CGHS02], Lee et al. [LCK98], Pokharna et al. [PMR97]).

Otra importante y diferente contribución ha sido realizada por Stadtke et al. [SFW97]. En su trabajo ellos dividen en dos partes los términos de acoplamiento de las ecuaciones de cantidad de movimiento lineal, una parte asociada a los términos viscosos y otra parte a los no viscosos. La fuerza de drag corresponde a la parte viscosa mientras que para la parte no viscosa han sido introducidos una serie de términos con la finalidad de compensar la pérdida de información que surge durante el procedimiento de promediado. Estos términos contienen derivadas temporales y espaciales de los principales parámetros dependientes del problema, incluyendo velocidad de las fases, fracción de vacío y densidad de las fases,

usando solamente una presión. Los autores enumeran algunos criterios para el diseño del modelo y finalmente demuestran que obtienen un conjunto de autovalores reales y un conjunto de autovectores linealmente independientes, garantizando que el problema estará bien puesto [SH 3].

La segunda aproximación se basa en regularizar el modelo desde la óptica matemática, cuyo objetivo es encontrar, al menos, la forma de remover la componente compleja de los autovalores obtenida para estos sistemas de ecuaciones de transporte. Un problema bien puesto en el sentido de Hadamard [And99] es definido de la siguiente forma: *"para que un problema que involucra ecuaciones diferenciales parciales esté bien puesto, la solución al problema debe existir y ser única, y la solución debe depender en forma continua con los datos iniciales y de contorno."*

Una definición equivalente más conveniente para una evaluación matemática, puede ser encontrada a través del carácter hiperbólico fuerte del sistema de ecuaciones diferenciales utilizado para modelar el problema. El modelo de dos fluidos es un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden en el tiempo con derivadas espaciales de primer y segundo orden para el término convectivo y difusivo, respectivamente. También existen términos de orden cero (términos fuentes) que provienen de los términos de interacción entre fases.

Transformando estas ecuaciones a un sistema de primer orden, *un requerimiento necesario y suficiente para que el problema esté bien puesto es que el sistema de primer orden sea hiperbólicamente fuerte* (ver Reula [Reu04] y Gundlach [GMG05]), lo cual significa que el sistema de ecuaciones sea diagonalizable con autovalores reales. El sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden equivalente representa la evolución temporal del sistema y la no garantía de autovalores reales es suficiente para perder la causalidad de la solución y producir un crecimiento no acotado de la misma. Esto significa que en el esfuerzo de obtener una solución numérica a través de un esquema de avance en el tiempo, la presencia de inestabilidades aparecen como prohibidas para el cálculo de la evolución temporal de las variables, así como para conocer el estado estacionario del sistema.

Aunque los problemas reales son gobernados por soluciones no estacionarias, los requerimientos en el diseño de los procesos industriales donde están involucrados flujos multifásicos, necesitan alguna solución en el estado estacionario (en régimen). Este hecho ha motivado la idea de recuperar, al menos, la solución estacionaria haciendo uso de un preconditionador temporal el cual modifica el esquema de avance temporal.

Los sistemas preconditionados caracterizados como una proyección de los autovalores complejos sobre el eje real, pueden ser uno de posibles los caminos a seguir. La principal desventaja de esta última alternativa es que las ecuaciones originales deben ser modificadas perdiendo algunas propiedades de conservación.

El presente trabajo tiene por finalidad proponer un método de preconditionamiento

de la matriz de masa que permita hacer al modelo de dos fluidos hiperbólico, recuperando las propiedades de conservación para la solución final y generando una alternativa para hallar la solución en el estado estacionario.

Se comienza por presentar el modelo diferencial de dos fluidos para un problema unidimensional en su formulación con una única presión, o sea se asume que los dos fluidos están en equilibrio de presión, esto es, $p_l = p_g = p$. Se desarrolla luego el análisis de los valores característicos para el problema en particular (ver Jones y Prosperetti [JP85]), con la finalidad de proponer la matriz de preconditionamiento. En esta matriz intervienen dos parámetros, uno β que permite recuperar la hiperbolicidad del problema, y otro γ que hace posible controlar la velocidad de propagación de la perturbación en el medio. Por último se resuelve una serie de problemas numéricos con la finalidad de validar el método de preconditionamiento y testearlo con casos de rigurosidad igual o mayor a los que poseen los problemas industriales, los cuales constituyen nuestro objetivo último.

3.2. Modelo de Dos Fluidos

La compleja naturaleza de los flujos multifásicos, caracterizada por cambios en la configuración geométrica de las fases, hace que sea extremadamente dificultoso encontrar modelos que reproduzcan la física del sistema y al mismo tiempo no presenten un elevado costo computacional. Modelos matemáticos promediados asociados con correlaciones experimentales parecen ser la forma más conveniente para resolver un flujo bifásico diluido (ver por ejemplo Ishii [Ish75], Drew and Passman [DP98], Zhang and Prosperetti [ZP94]).

Por lo tanto los modelos multicampo son centrales para modelar y simular los procesos de transporte en sistemas multifásicos. La aproximación se basa en tratar a cada fase en particular como un continuo interpenetrado presente en cada punto del dominio con una fracción de volumen asociada, en el cual las leyes de conservación son aplicadas a cada fase como un continuo separado (campo). En esta aproximación leyes constitutivas son provistas para representar las interacciones entre campos (para un análisis más detallado sobre el modelo multicampo remitirse al Capítulo II). En la Fig. 3.1 se puede observar una representación esquemática del modelo de dos fluidos.

A continuación se presentan las ecuaciones de balance promediadas para un flujo bifásico unidimensional (ver Ishii [Ish75], Lahey [LD88]), las cuales han sido obtenidas como resultado de un promediado temporal y/o espacial de las ecuaciones de balance local instantáneas.

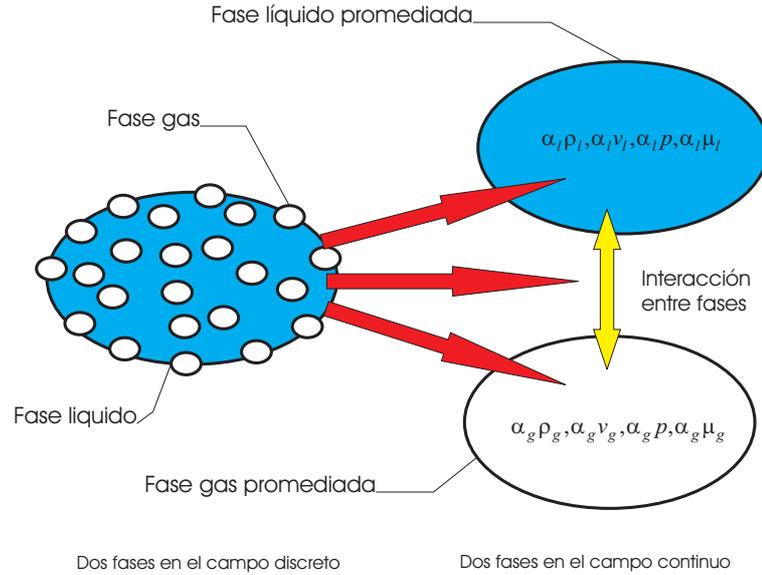


Figura 3.1: Representación esquemática del modelo de dos fluidos. Figura extraída de Hau y Wang [HW00].

3.2.1. Ecuaciones de Balance de Masa y Cantidad de Movimiento

Las ecuaciones de balance de masa y de cantidad de movimiento lineal para un flujo bifásico unidimensional pueden ser escritas en la siguiente forma

$$\frac{\partial(\alpha_g \rho_g)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_g \rho_g v_g)}{\partial x} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l)}{\partial t} + \frac{\partial(\alpha_l \rho_l v_l)}{\partial x} = 0, \quad (3.2)$$

$$\alpha_g \rho_g \frac{\partial v_g}{\partial t} + \alpha_g \rho_g v_g \frac{\partial v_g}{\partial x} = -\alpha_g \frac{\partial p}{\partial x} + \alpha_g \rho_g g - F_I, \quad (3.3)$$

$$\alpha_l \rho_l \frac{\partial v_l}{\partial t} + \alpha_l \rho_l v_l \frac{\partial v_l}{\partial x} = -\alpha_l \frac{\partial p}{\partial x} + \alpha_l \rho_l g + F_I, \quad (3.4)$$

donde α , ρ , v y p son los promedios de la fracción de vacío, densidad, velocidad y presión respectivamente. Los subíndices g y l representan la fase gaseosa y líquida respectivamente.

En este modelo la presión p es asumida la misma para ambas fases. Los términos que

contienen g representan la fuerza gravitacional, y F_I la interacción entre las fases. Varios efectos físicos pueden ser incluidos en las fuerzas de interacción entre fases F_I [MNC02], pero ciertamente el que normalmente se incluye es el producido por la fuerza de drag. Para flujos dispersos esta fuerza puede ser modelada como [IZ79]

$$F_I = \frac{3}{8} C_d \rho_l (v_g - v_l) |v_g - v_l| \frac{\alpha_g}{r_b}, \quad (3.5)$$

donde r_b es radio medio de las burbujas y C_d es el coeficiente de drag, existiendo correlaciones para el mismo en función del número de Reynolds de burbuja.¹

3.3. Sistemas Hiperbólicamente Fuertes y Buena Postura

El objetivo de esta sección es clarificar la relación entre un problema bien puesto [Mar00] [Ste98] en el sentido de Hadamard y sistemas hiperbólicos fuertes. Esta sección comienza con el análisis de la dependencia en forma continua de los datos para arribar a la noción de hiperbolicidad, bien definida para sistemas de primer orden.

Definición: un problema está bien puesto [Had02] si la solución satisface los siguientes tres prerequisites:

- La solución debe existir.
- La solución debe ser única.
- La solución debe depender en forma continua de los datos iniciales o de contorno.

Sobre este último punto se debe aclarar que: *"las condiciones iniciales y de contorno son considerados datos, si ellos son usados para fijar los valores de las constantes en una solución; los mismos no serán considerados datos si son utilizados para seleccionar un subconjunto de funciones desde la cual una superposición es construida."*

El significado de existencia y unicidad es intuitivamente claro. Sin embargo, su demostración puede ser tediosa y técnicamente difícil. Por razones de brevedad en esta sección sólo se considera la dependencia en forma continua de los datos. En el análisis matemático se seguirán las convenciones y definiciones de Kreiss y Lorenz [KJ89] y Gustafsson et al. [GKO95].

¹ Se entiende como número de Reynolds de burbuja al definido por la siguiente expresión $Re = r_b v_l / \nu_l$, siendo ν_l la viscosidad cinemática del líquido.

Se considera un problema de *Cauchy* para un sistema de ecuaciones diferenciales parciales

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \mathbf{B} \mathbf{u}, \quad (3.6)$$

para $t \geq 0$ con las siguientes condiciones iniciales

$$\mathbf{u}(0, x) = \mathbf{f}(x), \quad (3.7)$$

donde \mathbf{u} y \mathbf{f} son vectores reales de m componentes, siendo \mathbf{A} y \mathbf{B} matrices de $m \times m$. Se dice que el problema depende en forma continua con los datos si para cada $\mathbf{f} \in C^\infty(x)$ existe una solución $\mathbf{u}(t, x) \in C^\infty(t, x)$ tal que

$$\|\mathbf{u}(t, \cdot)\| \leq K e^{\alpha t} \|\mathbf{f}(\cdot)\|, \quad (3.8)$$

donde K y α son constantes independientes de \mathbf{f} y $\|\cdot\|$ representa la norma L^2 .

Por lo tanto, un problema que evoluciona en el tiempo depende en forma continua de sus datos iniciales si cambios pequeños de estos datos producen **cambios acotados** (pero no necesariamente pequeños) en la solución para tiempos posteriores.

Como una ilustración, se considera el caso de $m = 1$, $\mathbf{A} = \lambda$ y $\mathbf{B} = 0$ cuya solución es $u(t, x) = f(\lambda t + x)$. Se puede observar que la Ec. 3.8 se satisface para $K = 1$ y $\alpha = 0$. El factor $e^{\alpha t}$ es necesario para tener en cuenta términos de bajo orden,² es decir reemplazando $\mathbf{B} = 0$ con $\mathbf{B} = 1$, lo cual cambia la solución a $u(t, x) = e^t f(\lambda t + x)$, lo que requiere $\alpha = 1$ en la estimación 3.8. La condición 3.8 asegura que pequeños cambios de los datos iniciales generan pequeños cambios en las soluciones (al menos para pequeños t) capturando un aspecto del concepto de Hadamard sobre buena postura.

Si nuevamente se toma $\mathbf{B} = 0$, se considera una descomposición de Fourier de los datos iniciales \mathbf{f} y a λ como un autovalor de la matriz \mathbf{A} correspondiente al autovector \mathbf{v} , se tiene que

$$\mathbf{u}(t, x) = e^{i\xi(\lambda t + x)} \mathbf{v} \quad (3.9)$$

² Estos términos también pueden ser denominados términos reactivos.

es solución del problema definido por las Ecs. 3.6 y 3.7. Siendo los datos iniciales

$$\mathbf{u}(0, x) = \mathbf{f}(x) = e^{i\xi x} \mathbf{v}, \quad (3.10)$$

abordamos a la siguiente expresión

$$\|\mathbf{u}(t, \cdot)\| = e^{Re(i\xi\lambda)t} \|\mathbf{f}(\cdot)\|. \quad (3.11)$$

Por lo tanto el problema está bien puesto si

$$Re(i\xi\lambda) \leq \alpha, \quad (3.12)$$

para todo ξ real. Esto es posible solamente si λ es real. Por lo tanto, se puede acotar el crecimiento exponencial, donde el exponente toma un valor que a lo sumo es igual a α , con lo cual la Ec. 3.11 se reduce a

$$\|\mathbf{u}(t, \cdot)\| = \|\mathbf{u}(0, \cdot)\|. \quad (3.13)$$

Si todos los autovalores de \mathbf{A} son reales entonces el sistema del problema definido por las Ecs. 3.6 y 3.7 se dice ser *débilmente hiperbólico*. De esta manera la hiperbolicidad débil es una *condición necesaria* para la buena postura del problema.

Para el caso de $\mathbf{B} = 0$, si todos los autovalores de \mathbf{A} son reales y hay un conjunto completo de autovectores v_1, v_2, \dots, v_m , el sistema (3.6-3.7) es *fuertemente hiperbólico*.

A continuación se demuestra que un sistema hiperbólicamente fuerte conduce a un problema bien puesto. Sea \mathbf{S} una matriz con los autovectores v_1, v_2, \dots, v_m como columnas, por lo tanto $\mathbf{A} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}$ es una matriz diagonal real, donde los elementos de la diagonal son los autovalores λ^i de \mathbf{A} . Introduciendo una nueva variable (variable característica) $\tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{u}$, la cual satisface el sistema

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial t} = \mathbf{A} \frac{\partial \tilde{\mathbf{u}}}{\partial x}, \quad (3.14)$$

este sistema es también denominado *forma característica* del sistema 3.6-3.7.

Por lo tanto, se puede descomponer al sistema 3.14 en un conjunto de ecuaciones escalares de advección

$$\frac{\partial \tilde{u}^i}{\partial t} = \lambda^i \frac{\partial \tilde{u}^i}{\partial x}, \quad (3.15)$$

donde i no es un índice de sumatoria.

Si el sistema 3.6-3.7 es quasi-lineal, o sea la matriz $\mathbf{A} = A(\mathbf{u}, x, t)$, se debe tener en cuenta que cada autovalor λ^i es función de todas las variables características, y no solamente de la variable característica \tilde{u}^i . Por lo tanto las velocidades características van a depender de los valores asumidos por las propias variables.

Siendo que los autovalores de \mathbf{A} son reales, como se vio en la Ec. 3.13, se tiene que

$$\|\tilde{u}^i(t, \cdot)\| = \|\tilde{u}^i(0, \cdot)\|, \quad (3.16)$$

y por propiedad submultiplicativa (ver [GL83] §2.2.) tenemos la siguiente inecuación

$$\|\mathbf{u}(t, \cdot)\| = \|\mathbf{S}\tilde{\mathbf{u}}(t, \cdot)\| \leq |\mathbf{S}| \|\tilde{\mathbf{u}}(t, \cdot)\|, \quad (3.17)$$

donde $|\mathbf{S}|$ representa la norma de la matriz \mathbf{S} . Esta norma es definida como el máximo extendido de una bola unitaria, o sea se considera todos los vectores dentro de una bola unitaria y buscamos el máximo extendido de su imagen

$$|\mathbf{S}| = \sup_{|\mathbf{x}|=1} |\mathbf{S}\mathbf{x}|. \quad (3.18)$$

La interpretación geométrica de la definición anterior se observa en la Fig. 3.2.

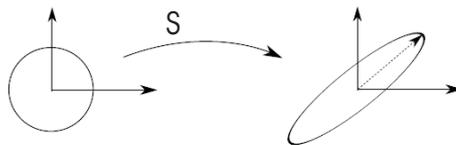


Figura 3.2: Interpretación geométrica de la norma de una matriz.

Retornado, a la expresión Ec. 3.17, y teniendo en cuenta la igualdad Ec. 3.16, se puede escribir

$$\|\mathbf{u}(t, \cdot)\| \leq |\mathbf{S}| \|\tilde{\mathbf{u}}(t, \cdot)\| = |\mathbf{S}| \|\tilde{\mathbf{u}}(0, \cdot)\|. \quad (3.19)$$

Aplicando la transformación inversa y nuevamente por propiedad submultiplicativa se llega a

$$\|\mathbf{u}(t, \cdot)\| \leq |\mathbf{S}| \|\tilde{\mathbf{u}}(0, \cdot)\| = |\mathbf{S}| \|\mathbf{S}^{-1}\mathbf{u}(0, \cdot)\| \leq |\mathbf{S}| |\mathbf{S}^{-1}| \|\mathbf{u}(0, \cdot)\|, \quad (3.20)$$

entonces en este caso el problema (3.6 y 3.7) se dice que está **bien puesto**. Por lo tanto, se ha establecido que la hiperbolicidad fuerte es una condición necesaria y suficiente para que el problema (3.6 y 3.7) esté bien puesto con $\mathbf{B} = 0$.

Por cuestiones de completitud se pueden destacar dos subcasos de hiperbolicidad fuerte, las cuales son:

1. *Hiperbolicidad en el sentido estricto*: cuando los autovalores de \mathbf{A} son reales y distintos.
2. *Hiperbolicidad simétrica*: cuando \mathbf{A} es real y simétrica.

3.4. Análisis de las Características

El análisis de las características brinda información acerca del comportamiento dinámico del modelo diferencial ante pequeñas perturbaciones y para una longitud de onda tendiendo a cero. Los términos algebraicos que surgen de las relaciones constitutivas no afectan el análisis de las características del problema. Por lo tanto, examinando las características de las ecuaciones de gobierno, se puede determinar si el modelo diferencial está debidamente formulado. A continuación se realiza el análisis de las características del modelo de dos fluidos.

Tomando en cuenta la restricción algebraica sobre las fracciones de vacío $\alpha_g + \alpha_l = 1$, y definiendo como vector de variables independientes a $\phi = (\alpha_g, p, v_g, v_l)^T$, el sistema de ecuaciones diferenciales parciales (3.1-3.4) puede ser escrito en forma vectorial compacta como

$$\mathbf{A} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{B} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \mathbf{C} = 0, \quad (3.21)$$

donde \mathbf{A} , \mathbf{B} y \mathbf{C} son las matrices

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_g \rho_g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1 - \alpha_g) \rho_l \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} v_g & 0 & \alpha_g & 0 \\ -v_l & 0 & 0 & (1 - \alpha_g) \\ 0 & \alpha_g & \alpha_g \rho_g v_g & 0 \\ 0 & (1 - \alpha_g) & 0 & (1 - \alpha_g) \rho_l v_l \end{pmatrix}, \quad (3.23)$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\alpha_g \rho_g g + F_I \\ -(1 - \alpha_g) \rho_l g - F_I \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

El carácter dinámico lineal y local de la Ec. 3.21 puede ser examinado a través de la linealización del sistema alrededor de un estado inicial ϕ_o . La ecuación diferencial lineal para una perturbación $\delta\phi = \phi - \phi_o$ es escrita como

$$\mathbf{A}_o \frac{\partial \delta\phi}{\partial t} + \mathbf{B}_o \frac{\partial \delta\phi}{\partial x} + \left[\left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \phi} \right)_o \cdot \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)_o + \left(\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \phi} \right)_o \cdot \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_o + \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \phi} \right)_o \right] \delta\phi = 0, \quad (3.25)$$

donde el subíndice o define las cantidades para el estado inicial. Asumiendo la perturbación en forma de una onda viajera se tiene que

$$\delta\phi = \delta\phi_o \exp [i(kx - \omega t)], \quad (3.26)$$

donde $\delta\phi_o$ representa la amplitud inicial de la perturbación. La parte imaginaria de ω gobierna el crecimiento o decrecimiento de la perturbación mientras que la parte real

determina la velocidad de propagación de la onda. Reemplazando la Ec. 3.26 en la Ec. 3.25, se encuentra una condición de compatibilidad para $\delta\phi_o$

$$-i\omega\mathbf{A}_o\delta\phi_o + ik\mathbf{B}_o\delta\phi_o + \left[\left(\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial\phi} \right)_o \cdot \left(\frac{\partial\phi}{\partial t} \right)_o + \left(\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial\phi} \right)_o \cdot \left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_o + \left(\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial\phi} \right)_o \right] \delta\phi_o = 0. \quad (3.27)$$

Para un estado de referencia constante y uniforme, $\left(\frac{\partial\phi}{\partial t} \right)_o$ y $\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_o$ son despreciables siendo por lo tanto el factor del último término de la Ec. 3.27

$$\mathbf{D} = \left(\frac{\partial\mathbf{C}}{\partial\phi} \right)_o. \quad (3.28)$$

Definiendo $\lambda = \lambda_R + i\lambda_I = \omega_R/k + i\omega_I/k$, la condición para la existencia de una solución no trivial para $\delta\phi_o$ esta dada por

$$\det \left(\mathbf{A}_o\lambda - \mathbf{B}_o + \frac{i}{k}\mathbf{D}_o \right) = 0. \quad (3.29)$$

En el límite cuando $k \rightarrow \infty$, la Ec. 3.29 se reduce a la ecuación característica correspondiente a la Ec. 3.21

$$\det \left(\mathbf{A}_o\lambda - \mathbf{B}_o \right) = 0. \quad (3.30)$$

Los valores que λ puede tomar son los valores característicos. Notar (como se mencionó anteriormente) que los términos algebraicos, tales como las fuerzas gravitatorias o fuerzas de drag, los cuales no contienen derivadas de las incógnitas, no afectan el análisis de las características.

Los valores característicos del modelo de dos fluidos más simple, Ecs. 3.21-3.24 , están dados por

$$\lambda = \left\{ \infty, \infty, \frac{1}{d}(r \pm s^{1/2}) \right\}, \quad (3.31)$$

donde

$$\begin{aligned} r &= \alpha_g \rho_l v_l + (1 - \alpha_g) \rho_g v_g, \\ s &= -\alpha_g (1 - \alpha_g) \rho_g \rho_l (v_g - v_l)^2, \\ d &= (1 - \alpha_g) \rho_g + \alpha_g \rho_l. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Se puede observar que excepto para el caso donde $v_g = v_l$, hay dos valores complejos conjugados para la característica λ . De esta manera, siendo que se está trabajando en el límite cuando $k \rightarrow \infty$, la componente imaginaria de omega $\omega_I = k\lambda_I$ puede tomar valores arbitrariamente grandes. Consecuentemente, observando la Ec. 3.26 la perturbación crecerá sin límites aun para pequeños incrementos en el tiempo. En otras palabras, una pequeña perturbación del estado inicial producirá la divergencia en forma instantánea de la solución. Esto está en contradicción con la tercera condición de Hadamard para una buena postura del problema, porque pequeñas perturbaciones no reflejan pequeños cambios (o al menos finitos) en la solución. Por lo tanto, la solución no depende en forma continua de sus datos y el problema se dice que está mal puesto.

Si se realiza un análisis de dispersión, y se observa la dependencia de la componente imaginaria ω_I con el número de onda k se pueden distinguir tres casos, correspondientes a la Fig. 3.3. Estos son:

- a) *Problema mal puesto.* La componente imaginaria no está acotada, vemos que crece conforme k tiende a infinito.
- b) *Problema bien puesto, hiperbólico e inestable.* La componente imaginaria tiende a cero para cuando k tiende a infinito, no obstante observamos que para números de onda finitos existe componente imaginaria, por lo que el problema es inestable. La diferencia con respecto al caso a) es que la componente imaginaria esta acotada, por lo tanto está bien puesto.
- c) *Problema bien puesto, hiperbólico y estable.* No posee componente imaginaria.

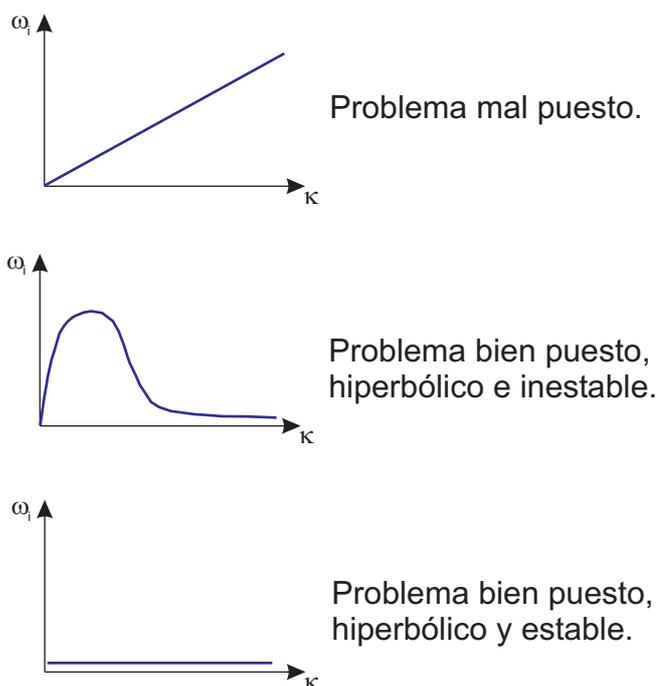


Figura 3.3: Representación esquemática de los posibles casos en un análisis de dispersión.

Como se analizó en la sección anterior la buena postura matemática puede ser garantizada si todos los valores característicos son reales y distintos (hiperbolicidad fuerte). Como en el caso de una fase, la degeneración de los dos valores característicos (valores característicos infinitos) de la Ec. 3.31 puede ser removida si se consideran las velocidades de propagación del sonido finitas para cada una de las fases. Sin embargo los dos valores complejos propios del modelo multifluido no son tan sencillos de eliminar. En la siguiente sección se presenta un método para resolver este problema.

3.5. Precondicionamiento de la Matriz de Masa - PMM

El proceso de regularización del modelo de dos fluidos es un tema de continuo interés para la comunidad científica, desde que se descubrió que el modelo invíscido de dos fluidos para la resolución de un flujo bifásico transiente está mal puesto. Es decir el modelo tiene raíces características complejas y por lo tanto está mal puesto como un problema de valores iniciales, excepto para el caso trivial de igual velocidades de las fases.

En esta sección se propone un método sencillo (usado en flujos de una fase, [Cho67] y [Tur99]) que permite hiperbolizar el modelo de dos fluidos para gran parte de los parámetros posibles del flujo. Este método se basa en proponer una *matriz de precondicionamiento* \mathbf{M} que afecta a la matriz temporal \mathbf{A} del sistema presentado anteriormente. Cabe destacar que la matriz \mathbf{M} sólo afecta a los términos temporales del sistema de ecuaciones diferen-

ciales, como se observa en la Ec. 3.21. Siendo que dichos términos desaparecen cuando la solución alcanza el estado estacionario, esta solución no es modificada por la matriz de preconditionamiento.

La matriz de preconditionamiento posee dos parámetros, uno de ellos β el cual solamente afecta a la inercia de la ecuación de masa del gas, y permite hiperbolizar el modelo, mientras que el otro γ afecta a cada uno de los términos temporales de las ecuaciones de balance, siendo su finalidad corregir la velocidad de propagación de las ondas. Por lo tanto la matriz de preconditionamiento es

$$\mathbf{M} = \gamma \begin{pmatrix} \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.33)$$

y definiendo $\tilde{\mathbf{A}}_o = (\mathbf{M}_o \mathbf{A}_o)$, la nueva ecuación característica está expresada por

$$\det(\tilde{\mathbf{A}}_o \lambda - \mathbf{B}_o) = 0. \quad (3.34)$$

Desarrollado el determinante se llega a la expresión general

$$I_0 \lambda^2 + I_1 \lambda + I_2 = 0, \quad (3.35)$$

donde

$$\begin{aligned} I_0 &= -(\rho_l \alpha_g + \beta \rho_g \alpha_l) \\ I_1 &= \frac{2}{\gamma} \left(\rho_l v_l \alpha_g + \rho_g v_g \alpha_l \left(\frac{\beta + 1}{2} \right) \right). \\ I_2 &= -\frac{1}{\gamma^2} (\rho_l v_l^2 \alpha_g + \rho_g v_g^2 \alpha_l) \end{aligned} \quad (3.36)$$

Las raíces de la ecuación característica, Ec. 3.35, son

$$\lambda_{1,2} = -\frac{I_1}{2I_0} \pm \sqrt{\left(\frac{I_1}{2I_0} \right)^2 - \frac{I_2}{I_0}}, \quad (3.37)$$

y definiendo $C_1 = I_1/(2I_0)$ y $C_2 = I_2/I_0$, con

$$C_1 = -\frac{(2\rho_l v_l \alpha_g + \rho_g v_g \alpha_l (\beta + 1))}{2\gamma (\rho_l \alpha_g + \beta \rho_g \alpha_l)}, \quad (3.38)$$

$$C_2 = \frac{(\rho_l v_l^2 \alpha_g + \rho_g v_g^2 \alpha_l)}{\gamma^2 (\rho_l \alpha_g + \beta \rho_g \alpha_l)}, \quad (3.39)$$

se llega a la siguiente expresión para las raíces

$$\lambda_{1,2} = -C_1 \pm \sqrt{C_1^2 - C_2}. \quad (3.40)$$

Si se desea asegurar la hiperbolicidad del sistema de ecuaciones, las raíces de la ecuación característica no debe tener componente imaginaria, lo que equivale a buscar que

$$\Delta = C_1^2 - C_2 \geq 0. \quad (3.41)$$

Si el discriminante es igualado a cero encontramos los valores para β_{crit} (beta crítico). Llamando $R_\alpha = \alpha_l/\alpha_g$, $R_\rho = \rho_l/\rho_g$ y $R_v = v_l/v_g$ se obtiene

$$\Delta = C_1^2 - C_2 = R_\alpha \beta_{crit}^2 + 2(2HR_v - R_\alpha)\beta_{crit} + (R_\alpha - 4H) = 0, \quad (3.42)$$

con $H = R_\rho(1 - R_v)$. Resolviendo la ecuación anterior se llega a la expresión para β_{crit}

$$\beta_{crit} = \frac{2 \rho_l v_l \alpha_g (v_l - v_g) + \rho_g v_g^2 \alpha_l \pm 2 \sqrt{\alpha_g \rho_l (\rho_l v_l^2 \alpha_g + \rho_g v_g^2 \alpha_l) (v_l - v_g)^2}}{\rho_g v_g^2 \alpha_l}. \quad (3.43)$$

Como se puede observar, cuando $v_l = v_g$ entonces $\beta_{crit} = 1$. O sea no es necesario precondicionar el sistema dado que el problema está bien puesto, por lo tanto es consistente con lo expuesto en la sección 3.4.

Si se sustituye la ecuación anterior en la Ec. 3.40 se llega a la siguiente expresión para las raíces características

$$\lambda_{1,2} = \frac{v_g (D \pm \sqrt{DE})}{\gamma (E + D \pm 2\sqrt{DE})} \quad (3.44)$$

$$D = (\rho_l v_l^2 \alpha_g + \rho_g v_g^2 \alpha_l)$$

$$E = \rho_l (v_l - v_g)^2 \alpha_g.$$

En la Fig. 3.4 se han representado los autovalores del problema sin preconditionamiento que surgen como resultado de un barrido en la fracción de vacío (0.01 : 0.01 : 0.99) y en la relación de velocidades (1:5:100). Como se puede observar los mismos poseen componente imaginaria salvo para relaciones de velocidades $R_v = 1$. La Fig. 3.5 corresponde al problema preconditionado con $\gamma = 1$, en este caso si bien no existen valores complejos para las características, la velocidad de propagación se ha visto modificada por el parámetro β . Cabe destacar que no solamente se ha modificado el valor máximo de la componente real, sino que también se tienen velocidades de propagación negativas, como se observa al comparar las abscisas de la Fig. 3.5 con las correspondientes de la Fig. 3.6.

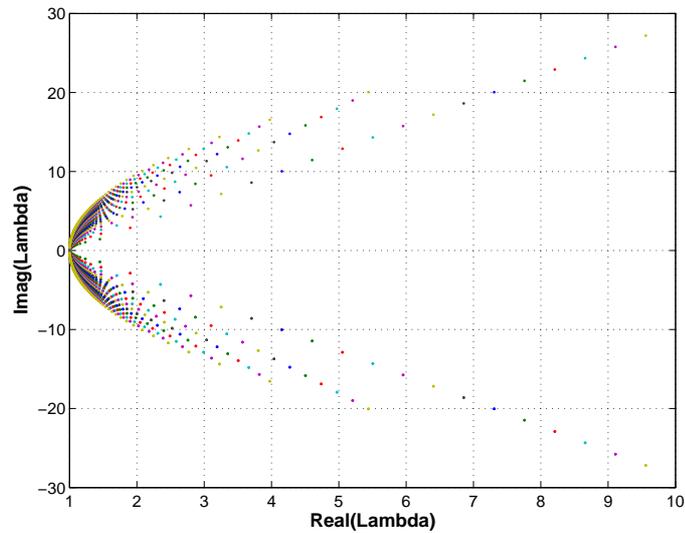


Figura 3.4: Autovalores para un barrido en α_g y v_l/v_g , sin preconditionamiento.

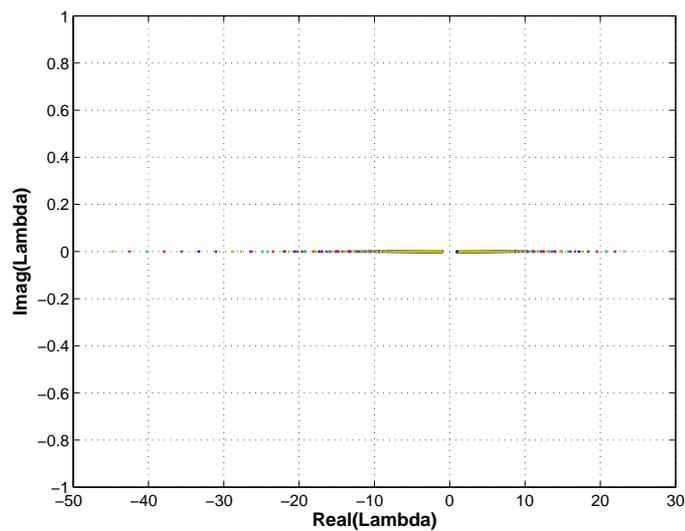


Figura 3.5: Autovalores para un barrido en α_g y v_l/v_g , con preconditionamiento ($\gamma = 1$).

El parámetro β que permite recuperar la hiperbolicidad del modelo diferencial de dos fluidos modifica la parte real de la característica, siendo la evolución del problema distinta a la original. Con la finalidad de recuperar el comportamiento temporal se afecta a la matriz de preconditionamiento por un parámetro γ cuya determinación es desarrollada a continuación.

Teniendo en cuenta la expresión para los valores característicos Ec. 3.40, se observa que el caso para el cual $\beta = 1$ y $\gamma = 1$ (sistema original) presenta características complejas, donde la parte real que determina la velocidad de propagación de la información en el medio, es $Re(\lambda_{1,2}) = -C_1(\beta = 1; \gamma = 1)$. Por lo tanto, el cociente entre la característica para $\beta = \beta_{crit}$ y la parte $Re(\lambda_{1,2})$ permite despejar γ cuya expresión final es

$$\gamma_{1,2} = \frac{\rho_l \alpha_g + \rho_g \alpha_l}{\rho_l v_l \alpha_g + \rho_g v_g \alpha_l} \cdot \frac{v_g (D \pm \sqrt{DE})}{(E + D \pm 2\sqrt{DE})}. \quad (3.45)$$

En la Fig. 3.6 se pueden observar los valores característicos con el parámetro γ determinado con la expresión anterior, los cuales no presentan componente compleja y además han recuperado el valor de la componente real correspondiente al problema original sin preconditionar.

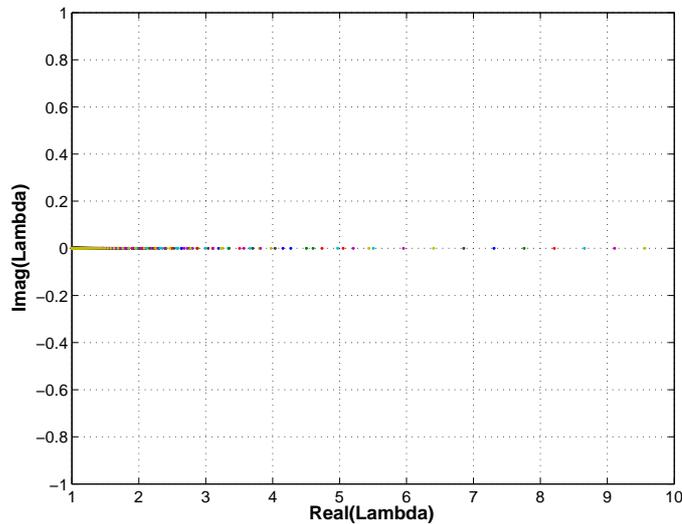


Figura 3.6: Autovalores para un barrido en α_g y v_l/v_g con preconditionamiento y $\gamma \neq 1$. Todos los autovalores son reales y son iguales a la parte real de los autovalores de la Fig. 3.4.

3.6. Discretización

La discretización numérica se basa en un esquema semi-implícito con un tratamiento tipo *upwind* para los términos convectivos. Una grilla *stagger* es usada para la discretización en el espacio, por lo tanto las variables escalares α_k ,³ ρ y p son determinadas en el centro de los volúmenes de control (índice j), mientras que las variables de la velocidad v_g y v_l son localizadas en los contornos (índice $j + 1/2$). La forma discretizada de las Ecs. 3.1-3.4 es la siguiente

$$\frac{1}{\Delta t}[(\alpha_g \rho_g)_{j+1/2}^{n+1} - (\alpha_g \rho_g)_j^n] + \frac{1}{\Delta x}[(\hat{\alpha}_g \hat{\rho}_g)_{j+1/2}^n (v_g)_{j+1/2}^{n+1} - (\hat{\alpha}_g \hat{\rho}_g)_{j-1/2}^n (v_g)_{j-1/2}^{n+1}] = 0, \quad (3.46)$$

$$\frac{1}{\Delta t}[(\alpha_l \rho_l)_{j+1/2}^{n+1} - (\alpha_l \rho_l)_j^n] + \frac{1}{\Delta x}[(\hat{\alpha}_l \hat{\rho}_l)_{j+1/2}^n (v_l)_{j+1/2}^{n+1} - (\hat{\alpha}_l \hat{\rho}_l)_{j-1/2}^n (v_l)_{j-1/2}^{n+1}] = 0, \quad (3.47)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t}(\hat{\alpha}_g \hat{\rho}_g)_{j+1/2}^n (v_g^{n+1} - v_g^n)_{j+1/2} + \frac{1}{\Delta x}(\hat{\alpha}_g \hat{\rho}_g v_g)_{j+1/2}^n [(v_g)_{j+1/2}^n - (v_g)_{j-1/2}^n] \\ & = -\frac{1}{\Delta x}(\alpha_g)_{j+1/2}^n (p_{j+1} - p_j)^{n+1} + (\alpha_g \rho_g)_{j+1/2}^n g - (F_I)_{j+1/2}^{n+1} \end{aligned} \quad (3.48)$$

y

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t}(\hat{\alpha}_l \hat{\rho}_l)_{j+1/2}^n (v_l^{n+1} - v_l^n)_{j+1/2} + \frac{1}{\Delta x}(\hat{\alpha}_l \hat{\rho}_l v_l)_{j+1/2}^n [(v_l)_{j+1/2}^n - (v_l)_{j-1/2}^n] \\ & = -\frac{1}{\Delta x}(\alpha_l)_{j+1/2}^n (p_{j+1} - p_j)^{n+1} + (\alpha_l \rho_l)_{j+1/2}^n g + (F_I)_{j+1/2}^{n+1}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Las variables escalares α_k y ρ en $j+1/2$ son el valor promedio entre j y $j+1$, y denominando θ a α_k o ρ , las variables con el símbolo sombrero son definidas como

$$\hat{\theta}_{j+1/2} = \frac{1}{2}(\theta_j + \theta_{j+1}) + \frac{1}{2} \frac{v_{j+1/2}}{|v_{j+1/2}|}(\theta_j - \theta_{j+1}), \quad (3.50)$$

donde v es la velocidad correspondiente a la fase considerada. Este modelo numérico es utilizado en el código RELAP5 para flujos multifásicos. Más detalles, tales como la implementación del control automático del paso de tiempo basado en el número de Courant, pueden ser encontrados en los trabajos de Pokharna [PMR97] y Ransom [Ran85].

³ Siendo $k = [1, g]$.

La inclusión de la matriz de acondicionamiento dentro del sistema no presenta dificultad. Solamente consiste en multiplicar los correspondientes términos en las ecuaciones de balance por los parámetros β y γ acorde a la Ec. 3.33. Para asegurar la hiperbolicidad fuerte (valores característicos reales y distintos) han sido utilizadas velocidades del sonido grandes pero finitas, como así también valores de β ligeramente superiores al β_{crit} .

3.7. Resultados

En esta sección se verificó numéricamente la validez del método de acondicionamiento. Se usó un esquema de avance en el tiempo para resolver como primer ejemplo un problema bien conocido que posee solución analítica, denominado **water faucet problem**.⁴ Este problema es ampliamente utilizado para validar modelos de flujos bifásicos (ver [CAG⁺97], [Niu01] y [TR86]).

Las implementaciones numéricas del modelo de dos fluidos sin acondicionar pueden desarrollar inestabilidades que crecen y se propagan en el dominio. Estas inestabilidades son más favorables de presentarse cuando los valores de la fracción de vacío son elevados. Otros factores que también contribuyen a dar origen a inestabilidades son las altas relaciones de densidad y velocidad. Por lo tanto, se propuso otro ejemplo con condiciones iniciales desfavorables (con tendencia a inestabilidades) que se denomina **wave-traveling problem**.⁵ Aún el esquema numérico más robusto (sin acondicionamiento), el cual se describió en la sección anterior, falla al resolver este segundo ejemplo.

Cabe acotar que el método de acondicionamiento ha sido implementado usando la misma discretización que el código comercial RELAP5 [Ran85], y que los resultados han sido comparados también con los obtenidos con el código comercial CFX [AEA04]. Ambos códigos son ampliamente utilizados para la simulación de flujos multifásicos.

La presente sección se organizó de la siguiente forma: En primera instancia se resolvió el water faucet problem con la finalidad de validar el código computacional. A continuación se resolvió un problema que resultó de una modificación al water faucet, donde las condiciones iniciales han sido perturbadas. El mismo tenía como objetivo mostrar cómo se manifiesta un modelo mal puesto cuando las condiciones iniciales son exigentes. Por último fue resuelto el *wave traveling problem* para tener una medida de la robustez del método de acondicionamiento, comparando las soluciones con y sin acondicionamiento. Cabe mencionar que en todos los problemas resueltos con el método PMM se utilizó $\gamma = 1$.

⁴ Introducido por Ranson (1987) como un test de métodos numéricos para el modelo de dos fluidos.

⁵ Este problema fue propuesto por primera vez por Mendez (2003), dentro de una serie de test severos que permiten verificar la robustez de un esquema numérico para resolver el flujo multifásico en una cuchara siderúrgica.

3.7.1. Water Faucet

Se ha seleccionado el problema *water faucet*, ideado por Ransom [Ran94], para validar la formulación propuesta. El problema contiene una discontinuidad de contacto que se propaga en la dirección del flujo cuando se encuentra bajo la acción de la gravedad, con la particularidad que este problema posee solución analítica y al mismo tiempo es exigente para cualquier formulación.

Un tubo de 12 m de longitud contiene una columna uniforme de agua ($\rho_l = 1000 \text{ kg/m}^3$) que se mueve a una velocidad uniforme v_l^0 en un anillo de gas en reposo. La fracción de volumen de agua inicial es α_l^0 . Para la entrada del tubo las condiciones de contorno son $v_l^{Inlet} = v_l^0$ y $\alpha_l^{Inlet} = \alpha_l^0$, mientras que para la salida la presión es p^{outlet} . Al comenzar la simulación se aplicó la gravedad (9.81 m/s^2), lo que provoca la aceleración de la columna de agua. En la Fig. 3.7 se observa una representación esquemática de la evolución temporal de la columna de agua.

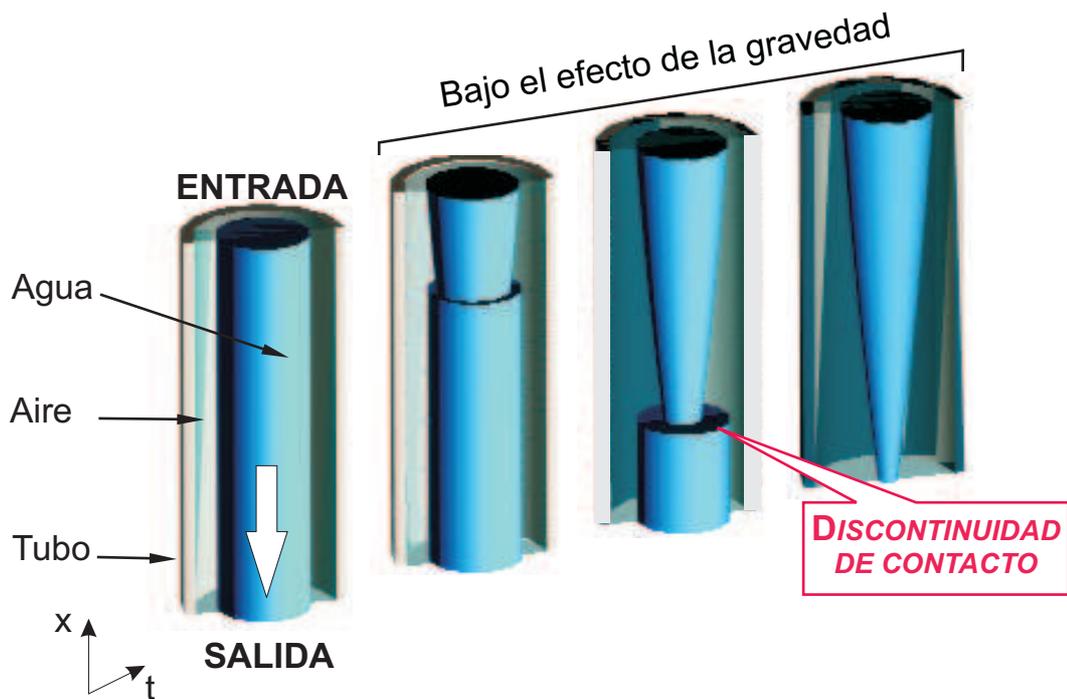


Figura 3.7: Problema Water Faucet - Representación esquemática de la evolución temporal de la columna de agua.

Una reducción en la sección transversal, debido a la aceleración del líquido, provoca una discontinuidad de contacto en la fracción de vacío que se propaga en el tubo. Por lo que un perfil de fracción de vacío en el estado estacionario se establece por detrás de la discontinuidad de contacto. A continuación se resumen las hipótesis asumidas, condiciones de contorno e iniciales para el problema en particular.

Hipótesis:

1. **Proceso Isotérmico** a 323 K. Por lo que no se encuentra presente en el modelo la ecuación de conservación de energía.
2. **Se desprecian efectos viscosos.**
3. **Sin transferencia de cantidad de movimiento entre fases.** Por lo tanto se desprecian los términos de transferencia de cantidad de movimiento entre fases.
4. **Hipótesis de flujo separado.**
5. **Tipo de problema 1D.**

A.-Condiciones de Contorno e Iniciales

Las condiciones de contorno para el problema están dadas por

$$x = 0 \text{ m}; t > 0 \left\{ \begin{array}{l} \alpha_l^{inlet} = 0.6 \\ v_l^{inlet} = 15 \text{ m/s} \\ v_g^{inlet} = 0 \text{ m/s} \end{array} \right. \quad (3.51)$$

$$x = L = 12 \text{ m}; t > 0 \{ p^{outlet} = 10^5 \text{ Pa},$$

siendo las condiciones iniciales,

$$0 \leq x \leq 12 \text{ m}; t = 0 \left\{ \begin{array}{l} \alpha_l^0 = 0.6 \\ p^0 = 10^5 \text{ Pa} \\ v_l^0 = 15 \text{ m/s} \\ v_g^0 = 0 \text{ m/s} \\ T^0 = 323 \text{ K}. \end{array} \right. \quad (3.52)$$

Despreciando el gradiente de presión en ambos fluidos el problema water faucet tiene solución analítica

$$\text{Si } x \leq v_l^0 t + \frac{1}{2} g t^2 \left\{ \begin{array}{l} \alpha_g = 1 - (\alpha_l^0 v_l^0) / v_l \\ v_l = ((v_l^0)^2 + 2 g x)^{1/2} \end{array} \right. \text{ de lo contrario } \alpha_g = 1 - \alpha_l^0. \quad (3.53)$$

En las Figs. 3.8 y 3.9 se observan las fracciones de vacío y velocidades del líquido respectivamente para seis mallas diferentes de 40, 80, 160, 320, 640 y 1280 elementos distribuidos uniformemente para el tiempo $t = 0.4$ s. La fracción de vacío tiende a la solución analítica conforme incrementamos el número de elemento capturando la discontinuidad. Un punto importante a destacar es que el método de preconditionamiento de la matriz de masa permite capturar la discontinuidad de contacto con una buena precisión.

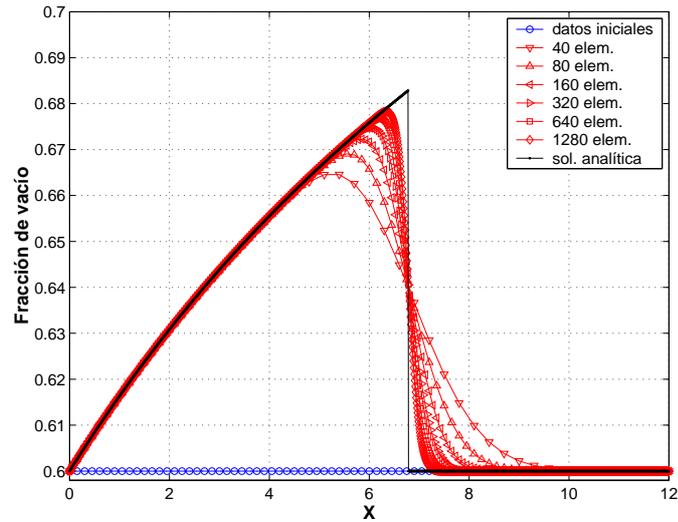


Figura 3.8: Problema Water Faucet - Fracción de vacío **con beta** para $t = 0.4$ s. Se realiza un barrido en el número de elementos de la malla. N° elem. = [40, 80, 160, 320, 640, 1280].

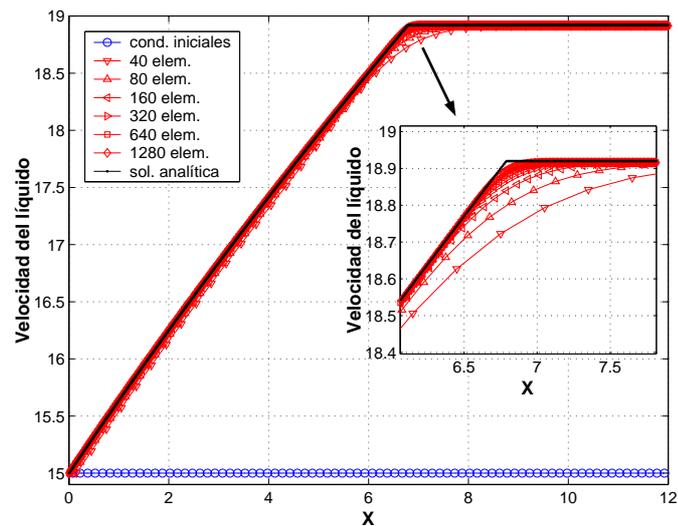


Figura 3.9: Problema Water Faucet - Velocidad del líquido **con beta** para $t = 0.4$ s. Se realiza un barrido en el número de elementos de la malla. N°elem. = [40, 80, 160, 320, 640, 1280].

Con la finalidad de establecer la precisión con la cual la formulación está resolviendo el problema se determina el error medio cuadrático de la fracción de vacío a través de la siguiente expresión,

$$\xi_{\alpha} = \sqrt{\frac{\sum_i [\alpha_{N,i} - \alpha_{A,i}]^2}{n}}, \quad (3.54)$$

donde $\alpha_{N,i}$ es la fracción de vacío determinada numéricamente para el nodo i -ésimo, $\alpha_{A,i}$ fracción de vacío analítica para el nodo i -ésimo y n es el número de nodos. El valor de error medio cuadrático correspondiente a la Fig. 3.8 para cada una de las mallas puede observarse en la Fig. 3.10. Como se puede ver conforme se incrementa el número de elementos el error medio cuadrático se reduce, con lo cual se ha recuperado la convergencia en malla que no posee el modelo de dos fluidos estándar. En el modelo de dos fluidos estándar conforme se refina la malla se hace más factible la presencia de las inestabilidades en el dominio. Esta patología es característica del modelo de dos fluidos mal puesto. Como se observa en la Fig. 3.10, el error medio cuadrático es proporcional al tamaño del elemento elevado a 0.81, $\xi_\alpha \propto h^{0.81}$.

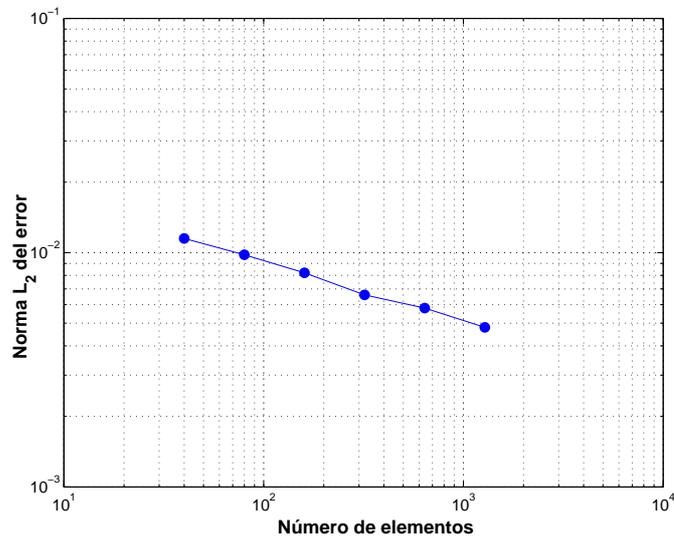


Figura 3.10: Problema Water Faucet - Error medio cuadrático de la fracción de vacío.

En las Figs. 3.11 y 3.12 se grafican la fracción de vacío del gas y la velocidad del líquido respectivamente para el estado estacionario que se obtuvo numéricamente con el método PMM y la correspondiente solución analítica. Se puede observar que la solución numérica alcanza efectivamente el estado estacionario siendo el error medio cuadrático en la fracción de vacío de $\xi_\alpha = 8.64 \times 10^{-5}$, lo que indica que el método posee una buena precisión.

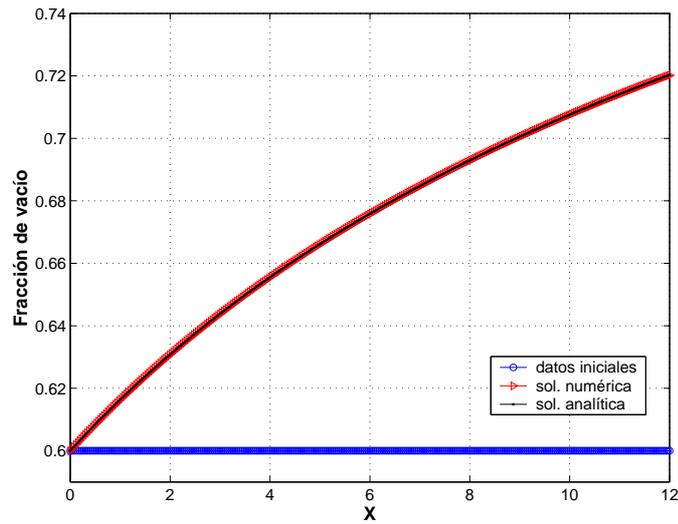


Figura 3.11: Problema Water Faucet - Fracción de vacío **con beta** para el estado estacionario. Malla 320 elementos.

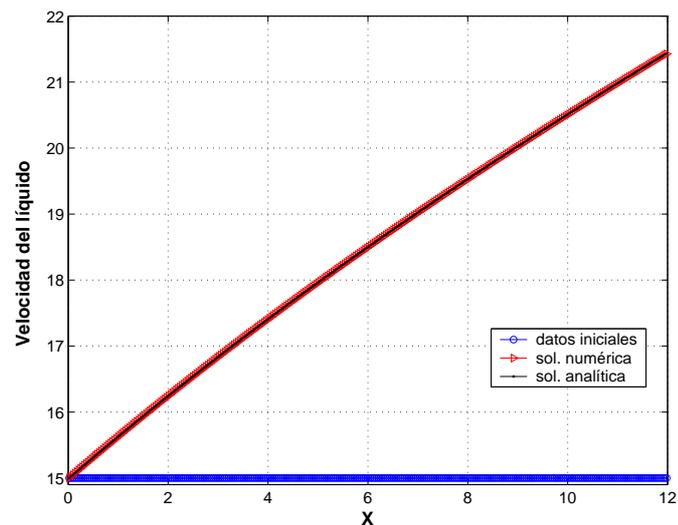


Figura 3.12: Problema Water Faucet - Velocidad de líquido **con beta** para el estado estacionario. Malla 320 elementos.

3.7.2. Water Faucet Modificado

El problema original de Ransom ha sido modificado en las condiciones iniciales. Se impuso una fracción de vacío periódica con una amplitud igual a $\min(0.9\alpha_{in}; 0.9(1 - \alpha_{in}))$, siendo el número de onda igual a 2. En la Figs. 3.13 y 3.14 se puede observar la fracción de vacío y la velocidad del líquido respectivamente obtenida sin PMM la cual se compara con la solución analítica para una condición inicial uniforme. La solución numérica diverge para un tiempo $t = 0.3675$ s.

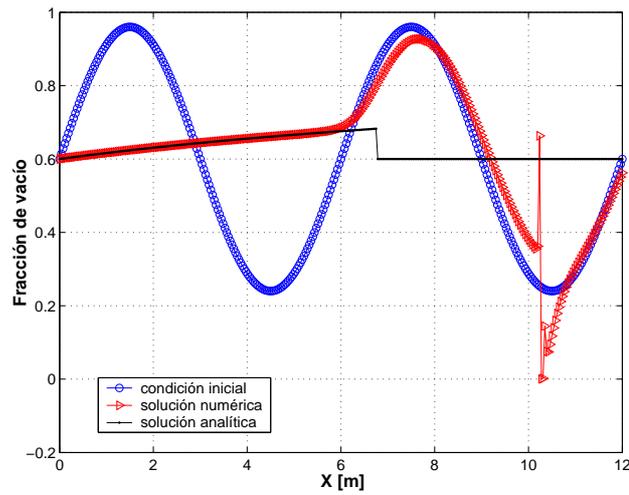


Figura 3.13: Problema Water Faucet Modificado - Fracción de vacío **sin beta** para $t = 0.3675$ s. Malla 320 elementos.

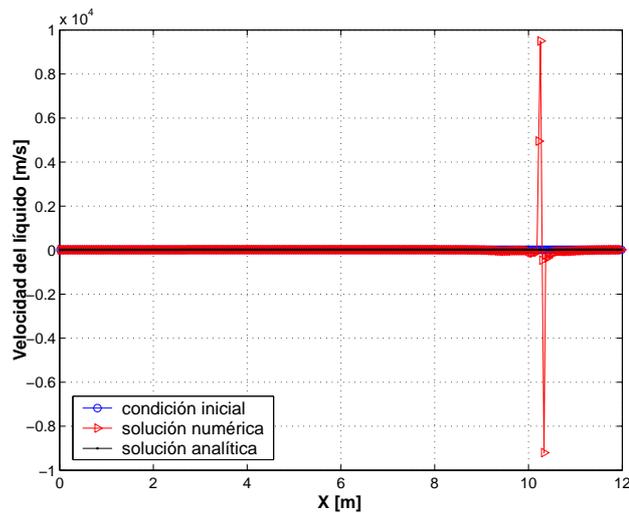


Figura 3.14: Problema Water Faucet Modificado - Velocidad del líquido **sin beta** para $t = 0.3675$ s. Malla 320 elementos.

En las Figs. 3.15 y 3.16 se grafican la fracción de vacío y velocidad del gas respectivamente utilizando el método de preconditionamiento. La solución para $t = 0.4$ s fue alcanzada y al comparar con la solución analítica se observa que el resultado fue satisfactorio, presentando la fracción de vacío una leve difusión entorno a la discontinuidad.

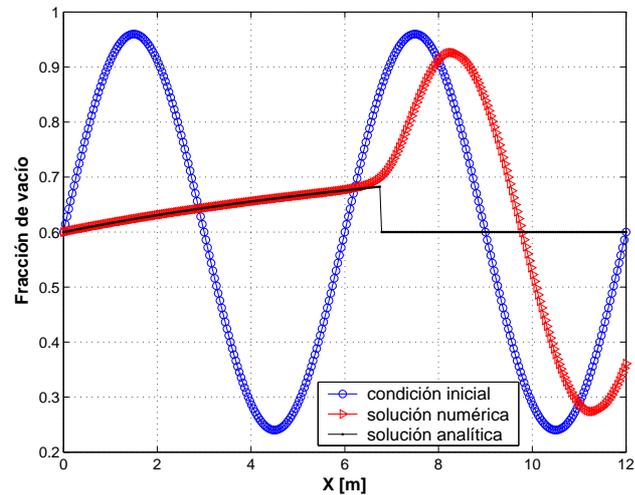


Figura 3.15: Problema Water Faucet Modificado - Fracción de vacío **con beta** para $t = 0.4$ s. Malla 320 elementos.

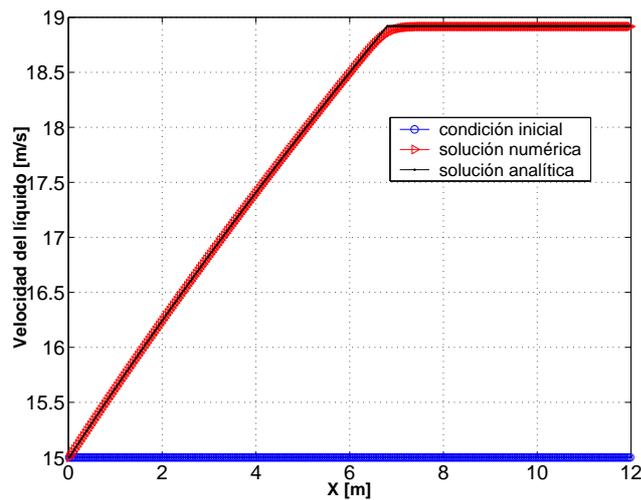


Figura 3.16: Problema Water Faucet Modificado - Velocidad del líquido **con beta** para $t = 0.4$ s. Malla 320 elementos.

El método PMM ha sido diseñado con el objetivo principal de poder alcanzar el estado estacionario, por lo tanto en las Figs. 3.17 y 3.18 se han comparado los resultados numéricos y analíticos para la fracción de vacío y la velocidad del gas en el estado estacionario. La solución numérica converge a la analítica con un error medio cuadrático $\xi_\alpha = 8.5297 \times 10^{-5}$.

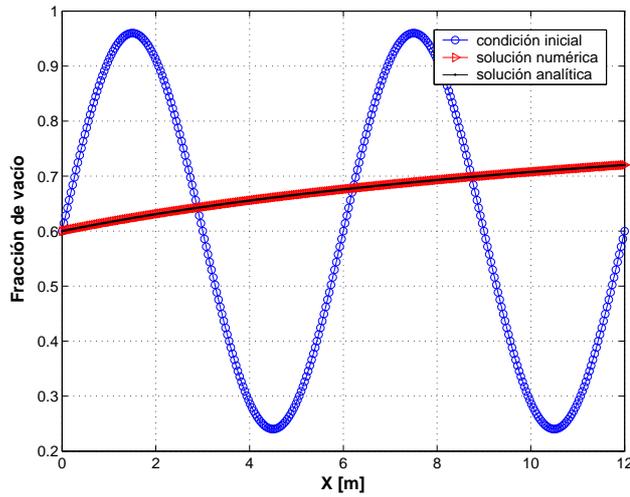


Figura 3.17: Problema Water Faucet Modificado - Fracción de vacío **con beta** para el estado estacionario. Malla 320 elementos.

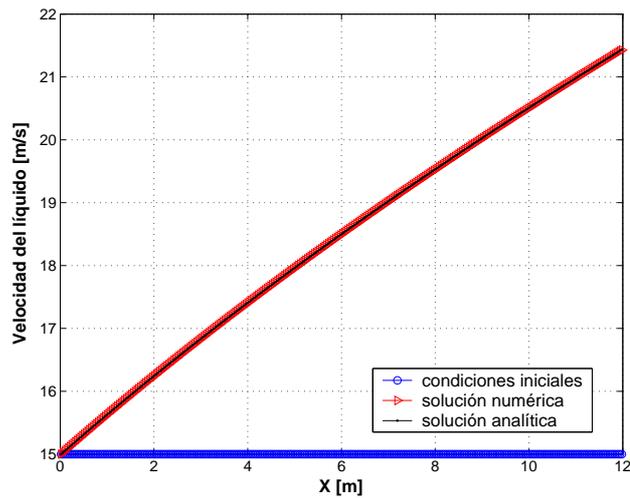


Figura 3.18: Problema Water Faucet Modificado - Velocidad del líquido **con beta** para el estado estacionario. Malla 320 elementos.

3.7.3. Wave traveling

El ejemplo consiste en un dominio unidimensional con una longitud $L = 0.4$ m, discretizado en 100 elementos, estando los nodos equidistantes entre sí. Las condiciones de contorno son periódicas para el primer y último nodo.⁶ La relación de densidades entre el líquido y el gas es de 1000:1. Las condiciones iniciales se exponen a continuación

$$0 \leq x \leq 0.4 \text{ m}; t = 0 \left\{ \begin{array}{l} \alpha_g^0 = \alpha_g^{medio} + \alpha_g^{ampl} \sin(4\pi x/L) \\ \alpha_g^{medio} = 0.5; \alpha_g^{ampl} = 0.45 \\ p^0 = 0 \text{ Pa} \\ v_l^0 = 1 \text{ m/s} \\ v_g^0 = 10 \text{ m/s} \end{array} \right. . \quad (3.55)$$

El caso es completamente desfavorable para el modelo de dos fluidos. La idea principal es estimar cuán robusto es el método para resolver problemas con exigencias similares a las que se presentan cuando se resuelve el flujo en la cuchara siderúrgica.

A continuación se comparan los resultados con y sin PMM. En la Fig. 3.19 se observa la velocidad del gas que se obtuvo con PMM para 5 pasos de tiempo de 0.001 s. La Fig. 3.20 corresponde a la misma variable pero ahora resuelta sin PMM, como se puede ver las velocidades son considerablemente mayores. En este caso la solución diverge para 0.004 s mientras que con el PMM es posible determinar la solución estacionaria sin problemas. En la Figs. 3.21 y 3.22 se puede ver la fracción de vacío correspondiente a ambos métodos, donde se observa que no hay diferencias apreciables. Es también importante notar que el mismo problema ha sido resuelto haciendo uso del código CFX, y la solución diverge en 7 pasos de tiempo de 0.001 s.

⁶ El problema es equivalente a una onda viajando en una circunferencia.

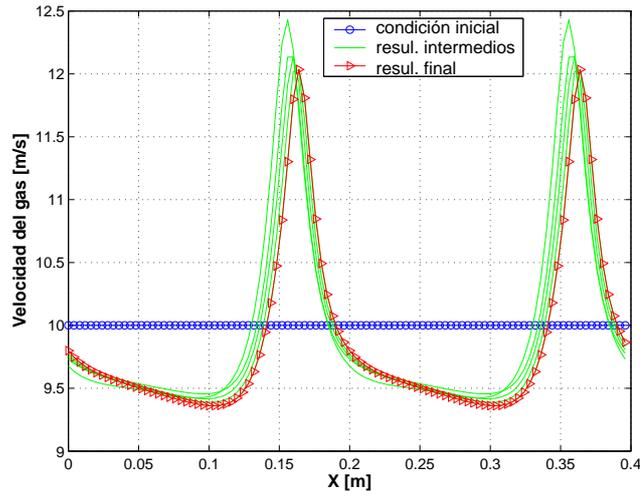


Figura 3.19: Problema Wave Traveling - Velocidad del gas **con beta** para 5 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.

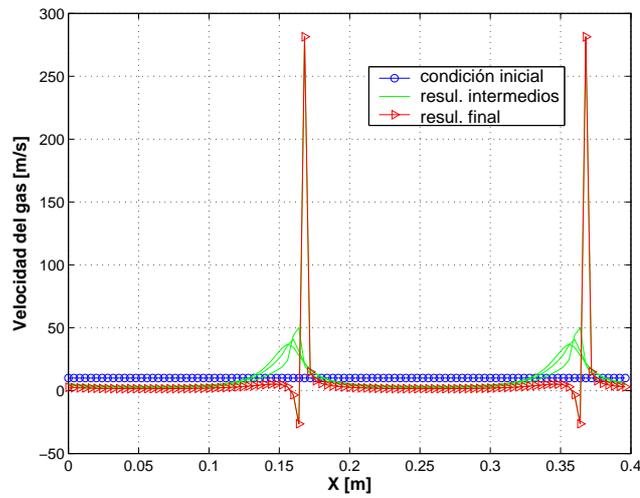


Figura 3.20: Problema Wave Traveling - Velocidad del gas **sin beta** para 4 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.

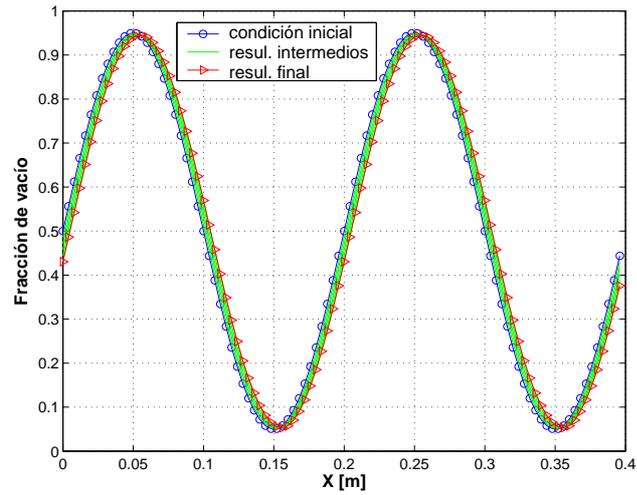


Figura 3.21: Problema Wave Traveling - Fracción de vacío **con beta** para 5 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.

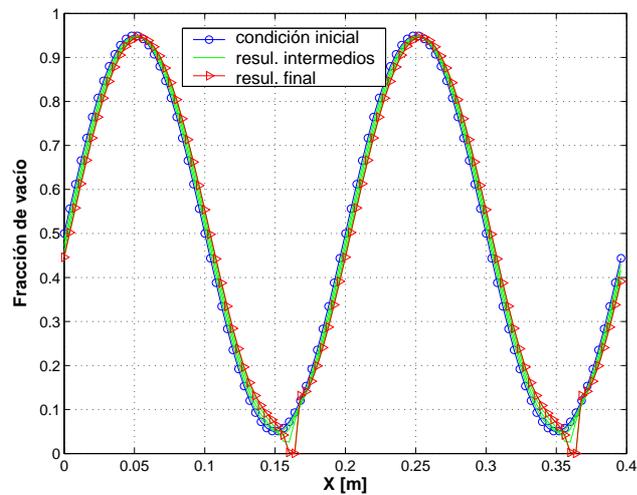


Figura 3.22: Problema Wave Traveling - Fracción de vacío **sin beta** para 4 pasos de tiempo de 0.001 s. Malla 100 elementos.

En las Figs. 3.23 y 3.24 se muestran los resultados con el método de preconditionamiento para $t = 0.025$ s.

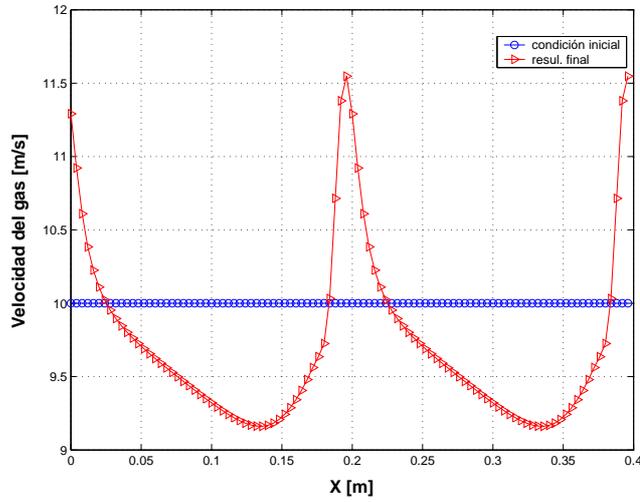


Figura 3.23: Problema Wave Traveling - Velocidad del gas **con beta** para $t = 0.025$ s. Malla 100 elementos.

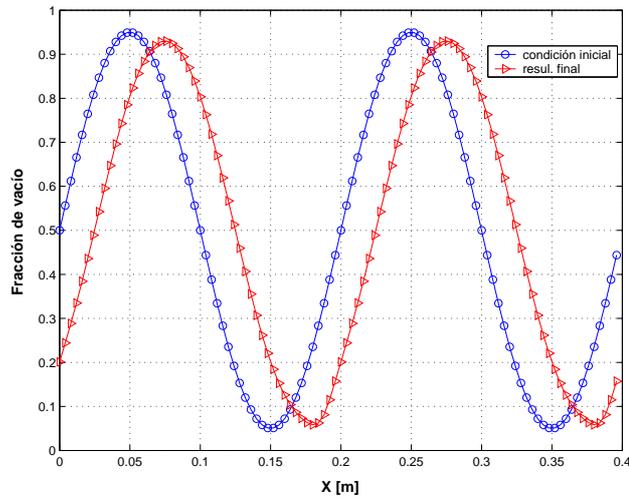


Figura 3.24: Problema Wave Traveling - Fracción de vacío **con beta** para $t = 0.025$ s. Malla 100 elementos.

Capítulo 4

Modelo ASMM (Algebraic Slip Mixture Model)

4.1. Introducción

En los trabajos de Mazumdar y Guthrie [MG95] se realiza una profunda revisión de los modelos físicos, los modelos matemáticos y la combinación de éstos utilizados para describir a los flujos multifásicos presentes en las operaciones de fabricación de acero por el método de colada continua.

Estos autores concluyen que la mayoría de las predicciones numéricas han sido comparadas sólo con resultados experimentales obtenidos a partir de la utilización de modelos de agua-aire, y que los modelos numéricos que incluyen a la escoria son escasos.

Para la resolución matemática de los flujos multifásicos se suelen emplear (tal como fue visto en el Capítulo 1) tres aproximaciones:

- Modelo Homogéneo.
- Modelo de Mezcla.
- Modelo Multifluido.

Luego de haber implementado un modelo multifluido que tiene una escasa robustez [ZMNS03] y siendo importante la sensibilidad de los resultados con los coeficientes de ajuste de los modelos constitutivos [MNC02], se decidió que para resolver el flujo en la cuchara siderúrgica (donde las condiciones de trabajo industriales [IKNM95] son extremas y exigentes en lo que respecta a la robustez que debe presentar el código)¹ la alternativa más propicia era utilizar un modelo de mezcla.

¹ Relaciones de densidad de 15000:1, velocidades relativas de 15 m/s y fracciones de vacío cercanas al 100 %.

En el modelo de mezcla o modelo ASMM (Algebraic Slip Mixture Model) se trabaja con las ecuaciones para la mezcla, y la principal simplificación consiste en eliminar los términos inerciales y viscosos en la ecuación de cantidad de movimiento lineal de las fases dispersas (se obtiene una ecuación algebraica no lineal para la velocidad de deslizamiento), manteniendo las mismas ecuaciones para los balances de masa. A lo anterior se le agrega normalmente el carácter turbulento del flujo, por lo que se precisa un modelo para el tensor de tensiones de Reynolds como clausura del sistema. En este Capítulo se utilizó un modelo de grandes escalas (LES-Large Eddy Simulation). La implementación del modelo computacional se realizó en el código paralelo de elementos finitos PETSc-FEM [SNP].

El presente Capítulo se organiza de la siguiente forma: En primera instancia se deriva el modelo de mezcla y luego se realiza una introducción al modelado de flujos multifásicos turbulentos presentando el modelo LES, utilizado para la resolución del flujo en la cuchara siderúrgica. Por último, se desarrolla la discretización numérica por el método de los elementos finitos del modelo matemático ASMM.

4.2. Formulación Matemática del Modelo de Mezcla

El **modelo de mezcla** es una simplificación del modelo multifluido. El mismo puede ser aplicado a casos especiales de flujo multifásico, donde la fase dispersa responde en un intervalo pequeño de tiempo y en una distancia corta a los cambios en la velocidad de la fase continua, lo que equivale a decir que debe existir *un fuerte acoplamiento entre las fases*.

En mezclas multifásicas, la gravedad, la aceleración material de la mezcla y las fuerzas centrífugas tienden a causar diferencias de velocidad entre la fases, y en aquellos casos donde son dominantes deben ser tenidas en cuenta. Un conjunto de modelos ha sido desarrollado sobre la base de asumir un equilibrio local entre las fases. Dependiendo de la formulación de las ecuaciones usadas para determinar la diferencia de velocidades, el modelo se denomina, modelo de *drift-flux* (Zuber y Findlay [ZF65]), modelo de mezcla (Ishii [Ish75]), modelo algebraico (Pericleous y Drake [PD86]), aproximación a modelos de suspensión (Verloop [Ver95]), modelo de difusión (Ungarish [Ung95], Ishii [Ish75]) o modelo de equilibrio local (Johansen [JAS90]).

En esta aproximación las ecuaciones de continuidad y cantidad de movimiento lineal son escritas para la mezcla de la fase continua y las fases dispersas. Las concentraciones de las fases dispersas son resueltas mediante su correspondiente ecuación de continuidad, aproximando la ecuación de cantidad de movimiento para cada una de las fases dispersas por medio de expresiones algebraicas.²

² Dependiendo del tipo de aproximación puede que la expresión no sea algebraica, apartado 4.2.6.

La forma de las ecuaciones constitutivas para las velocidades relativas varía en los diferentes modelos de mezcla. La hipótesis básica en esta formulación es el establecimiento de un equilibrio local sobre las escalas espacio-temporales cortas. Debido al requerimiento de un fuerte acoplamiento entre las fases, el modelo de mezcla es más apto para ser utilizado en mezclas de líquido-líquido o líquido-sólido, que para mezclas de gas y sólidos.

El principal inconveniente en el desarrollo de un modelo para flujos multifásicos se encuentra en la formulación de las leyes constitutivas (Drew y Lahey [DL79]). La existencia de varios tipos de flujos multifásicos (que pueden llegar a coexistir) hace muy compleja la derivación de las leyes constitutivas. Debido a esto, varias simplificaciones y suposiciones son realizadas. Como resultado final, las ecuaciones constitutivas tendrán un alto grado de incerteza, por lo tanto *toda información empírica constituye una parte esencial del modelo*. Cabe destacar que generalmente en la implementación del modelado de flujos multifásicos se emplean relaciones de clausura correspondientes a flujos de una fase, las cuales son extendidas a sistemas multifásicos (lo que no quiere decir que esto sea correcto).

Aunque el modelo multifluido es teóricamente más completo, las incertezas en las relaciones de clausura pueden hacer al mismo menos confiable (por lo menos en aquellos problemas donde los coeficientes de las ecuaciones constitutivas no son conocidos a priori) que un modelo de mezcla más simple.

Si se suman a las incertezas en los coeficientes de las ecuaciones constitutivas, las falencias que sufre un modelo multifluido en lo que respecta a la mala postura matemática (por lo menos, para el juego de parámetros manejados en los problemas industriales de esta Tesis - Capítulo 3), resulta acertada la decisión de utilizar un modelo de mezcla para la resolución del flujo multifásico en una cuchara siderúrgica.

4.2.1. Modelo Multifluido

Las ecuaciones para un flujo multifásico pueden ser escritas en numerosas formas. Estas pueden ser derivadas por un promedio temporal [Ish75], espacial [EPS98b], de un conjunto de experiencias [ZP94] o por cualquier combinación de estos. En cualquier caso las ecuaciones resultantes contienen básicamente los mismos términos.

Para el desarrollo del modelo de mezcla se parte del modelo multifluido, el cual se obtiene por el promediado de conjunto³ de las ecuaciones de conservación exactas para cada fase en un flujo multifásico, arribando al siguiente sistema de ecuaciones,

³ También denominado promediado de un conjunto de experiencias.

$$\frac{\partial(\alpha_k \bar{\rho}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{v}}_k) = \mathbf{\Pi}_k, \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial(\alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{v}}_k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\rho}_k \tilde{\mathbf{v}}_k \otimes \tilde{\mathbf{v}}_k) = -\alpha_k \nabla \bar{p}_k + \nabla \cdot (\alpha_k \bar{\boldsymbol{\tau}}_k) + \alpha_k \bar{\rho}_k \mathbf{g} + \mathbf{M}'_k, \quad (4.2)$$

donde α_k , $\bar{\rho}_k$ y $\tilde{\mathbf{v}}_k$ es la fracción de volumen, densidad promedio y velocidad promedio respectivamente, para la fase genérica k . El término $\mathbf{\Pi}_k$ representa la tasa de generación de masa de la fase k para la interfaz y \mathbf{M}'_k el promedio de la fuente de cantidad de movimiento lineal interfacial.⁴ Los símbolos sobre las variables representa los operadores de promediado (para más detalles consultar el Capítulo 2). En la Ec. 4.2, $\bar{\boldsymbol{\tau}}_k$ es el tensor de tensiones viscoso total, cuya expresión está dada por,

$$\bar{\boldsymbol{\tau}}_k = \bar{\boldsymbol{\tau}}_k^D + \boldsymbol{\tau}_k^{Re}, \quad (4.3)$$

donde $\bar{\boldsymbol{\tau}}_k^D$ es la componente deviatórica del tensor de tensiones molecular promediado y $\boldsymbol{\tau}_k^{Re}$ el tensor de tensiones de Reynolds. Para el presente trabajo se asume que no existe diferencia de presiones entre las fases ($\bar{p}_k = \bar{p} \forall k$), siendo dicha aproximación considerada válida excepto en el caso de burbujas expansivas [Dre83]. A continuación se omiten los símbolos de promediado por simplicidad. En la derivación de las ecuaciones de balance para la mezcla, se sigue la nomenclatura y desarrollos realizados por Manninen et al. [MTK96].

4.2.2. Ecuación de Balance de Masa para la Mezcla

Tomando la ecuación de balance de masa para la fase genérica k , y sumando sobre las n fases que constituyen el sistema multifásico, se obtiene la siguiente expresión para la mezcla

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{k=1}^n (\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k) = \sum_{k=1}^n \mathbf{\Pi}_k. \quad (4.4)$$

Dado que la masa total debe conservarse, el miembro derecho de la Ec. 4.4 debe ser igual a cero

$$\sum_{k=1}^n \mathbf{\Pi}_k = 0, \quad (4.5)$$

⁴ Se considera despreciable la transferencia de cantidad de movimiento lineal debido al cambio de fase.

por lo tanto la ecuación de continuidad para la mezcla está dada por

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = 0, \quad (4.6)$$

siendo ρ_m la densidad de la mezcla y \mathbf{v}_m la velocidad de la mezcla definidas como

$$\rho_m = \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k, \quad (4.7)$$

$$\mathbf{v}_m = \frac{1}{\rho_m} \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k = \sum_{k=1}^n c_k \mathbf{v}_k. \quad (4.8)$$

Notar que la velocidad de la mezcla \mathbf{v}_m representa la *velocidad del centro de masa* y que ρ_m varía punto a punto, aunque la densidad de cada uno de los componentes se mantenga constante. La fracción de masa de la fase genérica k es definida como sigue

$$c_k = \frac{\alpha_k \rho_k}{\rho_m}. \quad (4.9)$$

La Ec. 4.6 tiene la misma forma que la ecuación de continuidad para un flujo de una sola fase. Si la densidad de cada fase es una constante y la transferencia de masa para la interfaz no es considerada, la ecuación de continuidad para la mezcla ahora está dada por la siguiente expresión

$$\nabla \cdot \sum_{k=1}^n (\alpha_k \mathbf{v}_k) = \nabla \cdot \sum_{k=1}^n \mathbf{j}_k = \nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0. \quad (4.10)$$

En esta última expresión se ha definido el flujo volumétrico de la fase k , como $\mathbf{j}_k = \alpha_k \mathbf{v}_k$, y el flujo volumétrico de la mezcla $\mathbf{j}_m = \sum \mathbf{j}_k$. El flujo volumétrico de la mezcla representa la *velocidad del centro de volumen*.

4.2.3. Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento Lineal para la Mezcla

Tomando la ecuación de balance de cantidad de movimiento lineal para la fase genérica k , y sumando sobre las n fases que constituyen el sistema multifásico, se obtiene la

siguiente expresión para la mezcla,

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \sum_{k=1}^n (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k) + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \otimes \mathbf{v}_k) \\ &= - \sum_{k=1}^n \alpha_k \nabla p_k + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n \alpha_k (\tau_k^D + \tau_k^{Re}) + \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \mathbf{g} + \sum_{k=1}^n \mathbf{M}'_k. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Usando las definiciones 4.7 y 4.8, correspondientes a la densidad de la mezcla ρ_m y velocidad de la mezcla \mathbf{v}_m , el segundo término del miembro izquierdo puede ser reescrito haciendo uso del algebra indicial (Apéndice A) como sigue

$$\nabla \cdot \sum_{k=1}^n (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k \otimes \mathbf{v}_k) = \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \otimes \mathbf{v}_m) + \nabla \cdot \sum_{k=1}^n (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_{Mk} \otimes \mathbf{v}_{Mk}), \quad (4.12)$$

donde \mathbf{v}_{Mk} representa la velocidad de difusión, o sea es la velocidad de la fase k relativa al centro de masa de la mezcla

$$\mathbf{v}_{Mk} = \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_m. \quad (4.13)$$

A continuación se escribe la ecuación de cantidad de movimiento lineal en términos de las variables de la mezcla

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (\rho_m \mathbf{v}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \otimes \mathbf{v}_m) \\ &= -\nabla p + \nabla \cdot (\tau_m^D + \tau_m^{Re}) + \nabla \cdot \tau_m^{Diff} + \rho_m \mathbf{g} + \mathbf{M}_m, \end{aligned} \quad (4.14)$$

donde τ_m^D , τ_m^{Re} y τ_m^{Diff} son los tensores de tensiones deviatórico, de Reynolds y de difusión para la mezcla, respectivamente, definidos como

$$\tau_m^D = \sum_{k=1}^n \alpha_k \tau_k^D, \quad (4.15)$$

$$\tau_m^{Re} = - \sum_{k=1}^n \alpha_k \overline{\rho'_k \mathbf{v}'_k \otimes \mathbf{v}'_k}, \quad (4.16)$$

$$\tau_m^{Diff} = - \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_{Mk} \otimes \mathbf{v}_{Mk}. \quad (4.17)$$

Si se observa la Ec. 4.14, ésta posee los mismos términos que la ecuación de cantidad de movimiento lineal para una sola fase, salvo por el tercer ($\nabla \cdot \tau_m^{Diff}$) y el último término (\mathbf{M}_m) del miembro derecho, los cuales corresponden a la difusión de cantidad de movimiento debido a movimientos relativos y la influencia de la tensión superficial sobre la mezcla, respectivamente.

4.2.4. Ecuación de Balance de Masa para la Fase Dispersa

Usando la definición de velocidad de difusión 4.13 para eliminar la velocidad de la fase en la ecuación de continuidad 4.1, se obtiene la ecuación de balance de masa para una fase dispersa k ,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_m) = \mathbf{I}_k - \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_{Mk}). \quad (4.18)$$

Si la fase dispersa es incompresible (densidad constante y uniforme) y no existe cambio de fase, la ecuación de balance de masa se reduce a,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{v}_m) = -\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{v}_{Mk}). \quad (4.19)$$

En algunos códigos se trabaja con la ecuación de balance de masa en términos de la fracción de masa (tal como es el caso del código comercial CFX), por lo que si se multiplica y divide por ρ_m en la Ec. 4.18 y haciendo uso de la expresión 4.9, se llega a,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m c_k) + \nabla \cdot (\rho_m c_k \mathbf{v}_m) = \mathbf{I}_k - \nabla \cdot (\rho_m c_k \mathbf{v}_{Mk}). \quad (4.20)$$

En las implementaciones la velocidad de difusión⁵ se determina a través de la velocidad relativa (*slip*-deslizamiento), la cual es definida como la diferencia entre la velocidad de la fase dispersa y la velocidad de la fase continua (subíndice c)

$$\mathbf{v}_k^{Slip} = \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_c, \quad (4.21)$$

⁵ Son escasos los trabajos donde se determina analítica o experimentalmente, de manera directa, la velocidad de difusión.

por lo tanto la velocidad de difusión de una fase dispersa p , $\mathbf{v}_{Mp} = \mathbf{v}_p - \mathbf{v}_m$, puede ser expresada en términos de las velocidades relativas, para lo cual se debe utilizar la restricción algebraica sobre las fracciones de masa, llegando a

$$\mathbf{v}_{Mp} = \mathbf{v}_p^{Slip} - \sum_{k=1}^n c_k \mathbf{v}_k^{Slip}. \quad (4.22)$$

Para la aplicación industrial desarrollada en el proximo capítulo, se sigue la aproximación propuesta por Buscaglia et al. [BBG02] donde la velocidad de las fases dispersas se determina en función de la velocidad relativa (como se define a continuación en las Ecs. 4.25 y 4.26). Se considera una fase continua, formada por el acero líquido, y dos fases dispersas, el gas y la escoria (subíndices g y es respectivamente). Para las fases dispersas el modelo algebraico plantea que las velocidades de las mismas alcanzan sus valores límites y por lo tanto no se resuelven las ecuaciones de cantidad de movimiento correspondientes. De esta manera, se debe plantear una ecuación algebraica que exprese el valor de la velocidad de las fases dispersas en términos de la velocidad de la mezcla. Una vez que estas velocidades son definidas queda por satisfacer los balances de masa, escritos de la siguiente forma

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_g \rho_g) + \nabla \cdot (\alpha_g \rho_g \mathbf{v}_g) = \nabla \cdot (\rho_g \frac{\nu_{Tm}}{Sc_g} \nabla \alpha_g), \quad (4.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_{es} \rho_{es}) + \nabla \cdot (\alpha_{es} \rho_{es} \mathbf{v}_{es}) = \nabla \cdot (\rho_{es} \frac{\nu_{Tm}}{Sc_{es}} \nabla \alpha_{es}), \quad (4.24)$$

siendo ν_{Tm} la viscosidad cinemática turbulenta y Sc el número de Schmidt. Las expresiones algebraicas para las velocidades de las fases dispersas están dadas por

$$\mathbf{v}_g = \mathbf{v}_m + v_g^{slip} \mathbf{e}_z, \quad (4.25)$$

$$\mathbf{v}_{es} = \mathbf{v}_m + v_{es}^{slip} \mathbf{e}_z. \quad (4.26)$$

Cabe acotar (como fue observado en la sección 4.2.1), que la Ec. 4.1 es obtenida por promediado de conjunto, donde según lo expuesto por López de Bertodano [Lóp98] y Buscaglia et al. [BBG02], este promediado es realizado sobre escalas de movimiento menores o iguales a la distancia entre burbujas. Por lo tanto es necesario realizar un

segundo promediado con el objeto de tener en cuenta las escalas de movimiento mayores a la distancia entre burbujas. El segundo promediado da lugar a un nuevo término que surge del término convectivo de la ecuación de masa y representa la difusión de la fase debido a la turbulencia. Dicho término es modelado para cada fase por el miembro derecho de las Ecs. 4.23 y 4.24, donde aparecen tanto la viscosidad turbulenta de la mezcla como así también el número adimensional de Schmidt (Sc).

Shirabe [Shi81] demostró que el número adimensional de Schmidt es aproximadamente igual a la unidad para partículas de escoria en el acero. Ante la inexistencia de datos precisos del número de Schmidt para ambas fases (argón-acero y escoria-acero), se convino tomar el valor del Sc igual al medido en modelos físicos agua-aire, por lo tanto se asume $Sc_g = Sc_{es} = 0.83$.

En la presente aplicación las velocidades de deslizamiento son constantes y determinadas según el diámetro de burbuja más representativo del problema. Para la escoria la hipótesis de ser una fase dispersa es más discutida porque la misma tiende a estratificarse y a flotar en la superficie de la cuchara, razón por la cual su velocidad de deslizamiento debe corregirse. En esta aplicación se ha usado un factor $\varepsilon_{slip} = 1 - \rho_{es}/\rho_m$ que afecta a la velocidad de deslizamiento de la fase escoria y que tiende a anularla cuando la mezcla es mayoritariamente escoria.

4.2.5. Formulación Alternativa de la Ecuación de Balance de Masa para la Fase Dispersa

Nuevamente, si la fase dispersa es incompresible (densidad constante y uniforme) y no se considera transferencia de masa para la interfaz, la Ec. 4.1 puede ser escrita en términos del flujo volumétrico como sigue

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_k = 0. \quad (4.27)$$

A continuación se define la velocidad de deriva (*drift*), como la velocidad de la fase dispersa relativa a la velocidad del centro de volumen de la mezcla

$$\mathbf{v}_{V_k} = \mathbf{v}_k - \mathbf{j}_m. \quad (4.28)$$

Usando esta definición y la Ec. 4.10, se llega a

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k \mathbf{v}_{V_k} = 0. \quad (4.29)$$

Despejando \mathbf{v}_k de la Ec. 4.28, reemplazándola en la expresión 4.27 y teniendo en cuenta que $\mathbf{j}_k = \alpha_k \mathbf{v}_k$, la ecuación de balance de masa queda expresada como

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{j}_m) = -\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{v}_{V_k}). \quad (4.30)$$

Desarrollando el segundo término del primer miembro y aplicando la relación $\nabla \cdot \mathbf{j}_m = 0$, se aborda a la siguiente expresión

$$\frac{\partial \alpha_k}{\partial t} + \mathbf{j}_m \cdot \nabla \alpha_k = -\nabla \cdot (\alpha_k \mathbf{v}_{V_k}). \quad (4.31)$$

Como en el caso de la velocidad de difusión, la velocidad de deriva puede ser determinada a partir de la velocidad relativa y la restricción algebraica sobre las fases

$$\mathbf{v}_{V_p} = \mathbf{v}_p^{Slip} - \sum_{k=1}^n \alpha_k \mathbf{v}_k^{Slip}. \quad (4.32)$$

4.2.6. Determinación de la Velocidad Relativa

La velocidad relativa puede ser determinada en forma rigurosa a partir de la ecuación de balance de fuerzas, que surge de combinar la ecuación de cantidad de movimiento lineal para una fase particular p y la respectiva para la mezcla, ambas en su forma no conservativa.⁶ Siendo entonces la ecuación de cantidad de movimiento lineal para la fase p

$$\alpha_p \rho_p \frac{\partial \mathbf{v}_p}{\partial t} + \alpha_p \rho_p \mathbf{v}_p \cdot \nabla \mathbf{v}_p = -\alpha_p \nabla p_p + \nabla \cdot [\alpha_p (\tau_p^D + \tau_p^{Re})] + \alpha_p \rho_p \mathbf{g} + \mathbf{M}'_p, \quad (4.33)$$

y la ecuación correspondiente para la mezcla

$$\rho_m \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} + \rho_m \mathbf{v}_m \cdot \nabla \mathbf{v}_m = -\nabla p + \nabla \cdot (\tau_m^D + \tau_m^{Re}) + \nabla \cdot \tau_m^{Diff} + \rho_m \mathbf{g}. \quad (4.34)$$

En esta última se considera que la fuerza debido a la tensión superficial es despreciable y por lo tanto $\mathbf{M}_m = 0$.

⁶ La forma no conservativa se obtiene combinando la ecuación de cantidad de movimiento con la ecuación de continuidad respectiva.

Se elimina el término correspondiente al gradiente de presión (recordar que se asume $p_k = p_m = p \forall k$) multiplicando la Ec. 4.34 por α_p , para luego sumarla miembro a miembro a la Ec. 4.33. Finalmente se puede obtener la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \mathbf{M}'_p = & \alpha_p \left[\rho_p \frac{\partial \mathbf{v}_{Mp}}{\partial t} + (\rho_p - \rho_m) \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} \right] + \\ & + \alpha_p [\rho_p (\mathbf{v}_p \cdot \nabla) \mathbf{v}_p - \rho_m (\mathbf{v}_m \cdot \nabla) \mathbf{v}_m] - \\ & - \nabla \cdot [\alpha_p (\tau_p^D + \tau_p^{Re})] + \alpha_p \nabla \cdot (\tau_m^D + \tau_m^{Re} + \tau_m^{Diff}) - \\ & - \alpha_p (\rho_p - \rho_m) \mathbf{g}, \end{aligned} \quad (4.35)$$

donde se utilizó la definición 4.13 para la velocidad de difusión \mathbf{v}_{Mp} .

A continuación se consideran las siguientes hipótesis:

1. La derivada temporal de la velocidad de deriva es despreciable (*La aceleración temporal relativa a la mezcla es nula*).
2. Se asume la siguiente aproximación (*La aceleración convectiva relativa a la mezcla es nula*)

$$(\mathbf{v}_p \cdot \nabla) \mathbf{v}_p \cong (\mathbf{v}_m \cdot \nabla) \mathbf{v}_m. \quad (4.36)$$

3. Los términos de difusión debido a la velocidad de difusión y viscosos son omitidos en el modelo asumiendo que los mismos son despreciables en comparación al resto de términos. Los tensores de tensiones de Reynolds (de la mezcla y de la fase p) deben ser tenidos en cuenta si se desea considerar la dispersión debido a la turbulencia. Estos últimos pueden ser escritos de la siguiente forma

$$-\nabla \cdot (\alpha_p \tau_p^{Re}) + \alpha_p \nabla \cdot \tau_m^{Re} = \alpha_p \nabla \cdot (\alpha_c \tau_c^{Re}) - \alpha_c \nabla \cdot (\alpha_p \tau_p^{Re}), \quad (4.37)$$

por lo que la Ec. 4.35 se simplifica a

$$\begin{aligned} \mathbf{M}'_p = & -\alpha_p (\rho_p - \rho_m) \left[\mathbf{g} - (\mathbf{v}_m \cdot \nabla) \mathbf{v}_m - \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} \right] + \\ & + \alpha_p \nabla \cdot (\alpha_c \tau_c^{Re}) - \alpha_c \nabla \cdot (\alpha_p \tau_p^{Re}). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Si se considera solamente la transferencia de cantidad de movimiento debido a las fuerzas de arrastre, el término \mathbf{M}'_p puede ser escrito de la siguiente forma

$$\mathbf{M}'_p = -\hat{\beta}\mathbf{v}_p^{Slip} + \mathbf{M}''_p. \quad (4.39)$$

donde \mathbf{M}''_p es un término que tiene en cuenta la transferencia de cantidad de movimiento lineal debido a las fluctuaciones de la velocidad [Sim90]. La función de arrastre $\hat{\beta}$ depende de la concentración de la fase dispersa, número de Reynolds y tamaño de las burbujas, partículas o gotas.

En el modelo de Ishii y Mishima [IM84], la función $\hat{\beta}$ tiene la siguiente forma

$$\hat{\beta} = \frac{3}{4}C_D \frac{\alpha_p \rho_c |\mathbf{v}_p^{Slip}|}{d_p}, \quad (4.40)$$

siendo el coeficiente de arrastre C_D determinado en función del número de Reynolds de burbuja, partícula o gota [CGW78].

Combinando las Ecs. 4.38, 4.39 y 4.40, obtenemos una expresión de equilibrio simplificada para la velocidad relativa

$$\begin{aligned} \frac{3}{4}C_D \frac{\alpha_p \rho_c |\mathbf{v}_p^{Slip}| \mathbf{v}_p^{Slip}}{d_p} = \alpha_p (\rho_p - \rho_m) \left[\mathbf{g} - (\mathbf{v}_m \cdot \nabla) \mathbf{v}_m - \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} \right] - \\ - [\alpha_p \nabla \cdot (\alpha_c \tau_c^{Re}) - \alpha_c \nabla \cdot (\alpha_p \tau_p^{Re})] + \mathbf{M}''_p. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Desde el punto de vista de la implementación del modelo se requiere una ecuación constitutiva para modelar los términos asociados a la turbulencia. Para lo cual Manninen, basándose en trabajos de Ishii [Ish75] y Simonin [Sim90] postula la siguiente solución,

$$\mathbf{v}_p^{Slip} = \mathbf{v}_{p0}^{Slip} + \frac{D_p^{Slip}}{\alpha_p} \nabla \alpha_p, \quad (4.42)$$

siendo D_p^{Slip} el coeficiente de dispersión, definido como $D_p^{Slip} = \nu_{Tm}/[Sc_g(1 - c_p)]$. En esta última expresión \mathbf{v}_{p0}^{Slip} es la solución a la Ec. 4.41 sin los términos de fluctuación turbulenta, es decir

$$\frac{3}{4}C_D \frac{\alpha_p \rho_c |\mathbf{v}_{p0}^{Slip}| \mathbf{v}_{p0}^{Slip}}{d_p} = \alpha_p (\rho_p - \rho_m) \left[\mathbf{g} - (\mathbf{v}_m \cdot \nabla) \mathbf{v}_m - \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} \right]. \quad (4.43)$$

Es importante notar que la aparición del término de difusión debido a las fluctuaciones turbulentas en la Ec. 4.42 surge debido al promediado utilizado por Manninen para derivar las ecuaciones, siendo el mismo un promediado pesado con la masa o promediado de Favre. En las ecuaciones obtenidas sin utilizar el promediado de Favre, el término de difusión aparece en la ecuación de continuidad. En este sentido la velocidad \mathbf{v}_{p0}^{Slip} puede ser interpretada como la velocidad relativa a utilizar con un promediado distinto al de Favre. *Por lo tanto si se modela la dispersión turbulenta a través del término de difusión en la ecuación de balance de masa para la fase dispersa, se debe usar la velocidad \mathbf{v}_{p0}^{Slip} para determinar la velocidad de la fase dispersa.*

En los desarrollos llevados a cabo en este Capítulo, la dispersión turbulenta es incluida en la ecuación de masa de las respectivas fases dispersas (Ecs. 4.23 y 4.24), por lo tanto, para determinar la velocidad relativa utilizamos la expresión 4.43.

4.2.7. Modelos Constitutivos

Con la finalidad de hacer aplicable las ecuaciones para la mezcla 4.6, 4.14, 4.23 y 4.24, es necesario realizar la clausura de las mismas, es decir determinar los modelos constitutivos para varios términos de las ecuaciones anteriores. Este problema de clausura es comúnmente difícil. Algunas de las ecuaciones de cierre son consecuencia obvia del tipo de aproximación usada en el desarrollo de las ecuaciones de balance, tal es el caso de la definición de densidad y velocidad de la mezcla. Otras leyes constitutivas como por ejemplo el tensor de tensiones de Reynolds son menos conocidas.

Los estudios realizados por Ishii [Ish75] son vistos como el tratamiento más comprensivo del problema de cierre para el modelo de mezcla desde el punto de vista teórico. Sin embargo desde el punto de vista práctico algunos investigadores (Johansen et al. [JAS90], Ungarish [Ung95], Hallanger et al. [HSA⁺95]) utilizan una aproximación más pragmática, principalmente en las relaciones constitutivas para los términos que involucran las tensiones viscosas y las debidas a la turbulencia. Para un análisis minucioso de este importante apartado se aconseja consultar los trabajos realizados por Manninen [MTK96] y Kallio et al. [KMT99]. A continuación se presentan las relaciones constitutivas utilizadas para la aplicación del problema industrial.

A.- Condición de Saturación-R restricción Algebraica

Esta expresión ya fue utilizada cuando se determinó la relación entre las distintas velocidades para el modelo de mezcla. Por lo tanto cuando el modelo se dice *completamente saturado*, se cumple que

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k = 1. \quad (4.44)$$

B.- Tensiones de Corte

En el presente modelo de mezcla el tensor de tensiones total es aproximado, asumiendo que se comporta en forma análoga a un tensor de tensiones para un fluido de una sola fase [MTK96]. El tensor de tensiones total para la mezcla se define por

$$\begin{aligned} \tau_m &= \mu_{efm} (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T) \\ \mu_{efm} &= \sum_{k=1}^n \alpha_k \mu_k + \mu_{Tm}, \end{aligned} \quad (4.45)$$

donde μ_{efm} es la viscosidad efectiva, o sea la suma de la viscosidad de la mezcla ($\sum_{k=1}^n \alpha_k \mu_k$) y la viscosidad debido a la turbulencia (μ_{Tm}).

4.3. Modelo de Turbulencia LES

La técnica de *simulación de grandes torbellinos* [Sag02] (se hace referencia de aquí en adelante a esta simulación como LES (Large Eddy Simulation)) se basa en la selección de las escalas de la turbulencia, es decir hace una separación entre grandes y pequeñas escalas.

Con la finalidad de definir estas dos categorías, primero es necesario determinar una longitud de referencia o corte (*cutoff*). Aquellas escalas que poseen un tamaño característico mayor que la longitud de corte son denominadas *grandes escalas o escalas resueltas*, mientras que las restantes se denominan *pequeñas escalas o escalas de subgrilla*. Estas últimas son incluidas por medio de un modelo estadístico denominado *modelo de subgrilla*.

El punto más importante surge de las escalas resueltas, dado que las mismas son las que poseen el mayor contenido energético en el flujo y están afectadas en forma directa por las condiciones de contorno. Estas llevan consigo la mayor parte de las tensiones de Reynolds, y por lo tanto deben ser calculadas. Las pequeñas escalas de la turbulencia

son más débiles y tienen poco aporte al tensor de tensiones de Reynolds y por lo tanto son menos críticas. Sin embargo no hay que descuidar el tratamiento de las mismas, ya que pueden influir en la distribución espectral de la energía para las grandes escalas, observando fenómenos de apilamiento energético en torno a la escala de corte.

Siendo que LES involucra el modelado de las pequeñas escalas, el tamaño de los elementos utilizados para discretizar el dominio pueden ser considerablemente más grande que las escalas de longitud de Kolmogorov. Además, el paso de tiempo en la simulación puede ser mayor al que debe ser utilizado en DNS (Direct Numerical Simulation) disminuyendo los tiempos de corrida.

La mayor dificultad que reviste este modelo, se encuentra en las cercanías de la pared donde todos los torbellinos son pequeños. Por lo tanto se hace necesario utilizar mallas extremadamente finas y con leyes predeterminadas, y consecuentemente con una reducción acorde en el paso de tiempo. Una forma de evitar este inconveniente es utilizar una ley de pared para calcular la tracción en la misma.

4.3.1. Filtrado

Para entender la diferencia primaria entre DNS y LES, es necesario introducir el concepto de *filtrado* [Wil00]. Se debe notar primero, que los valores de las propiedades del flujo en puntos discretos en una simulación numérica representan valores promedios. Para verlo de una manera más clara, se considera una aproximación en diferencias centradas a una derivada de una variable continua, $\phi(x)$, para una grilla de puntos equidistantes por una distancia h . Desde el punto de vista matemático, lo expresado anteriormente puede ser escrito como

$$\frac{\phi(x+h) - \phi(x-h)}{2h} = \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{2h} \int_{x-h}^{x+h} \phi(\xi) d\xi \right]. \quad (4.46)$$

Esto demuestra que la aproximación de diferencia centrada puede ser pensada como un operador que filtra las *escalas menores que el tamaño de la grilla*. Aun más, la aproximación da el valor de la derivada de un cantidad promediada, $\phi(x)$.

Existen un gran número de tipos de filtros que pueden ser usados. El tipo de filtro más simple, es el filtro de promedio en volumen (o caja) implementado por Deardorff, uno de los principales investigadores en LES. Este filtro es expresado como

$$\bar{\phi}_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta^3} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} \int_{y-\frac{1}{2}\Delta y}^{y+\frac{1}{2}\Delta y} \int_{z-\frac{1}{2}\Delta z}^{z+\frac{1}{2}\Delta z} \phi_i(\boldsymbol{\xi}, t) d\xi d\eta d\zeta, \quad (4.47)$$

donde la cantidad $\bar{\phi}_i$ representa la *escala resuelta* de la variable espacio-temporal $\phi(\mathbf{x}, t)$. La *escala de subgrilla* (SGS - Subgrid-Scale) ϕ'_i y el *ancho del filtro* Δ están dados por

$$\begin{aligned}\phi'_i &= \phi_i - \bar{\phi}_i \\ \Delta &= (\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3}.\end{aligned}\tag{4.48}$$

Leonard definió un filtro generalizado como una convolución integral

$$\bar{\phi}_i(\mathbf{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_i(\boldsymbol{\xi}, t') G(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}, t - t') d\xi d\eta d\zeta dt',\tag{4.49}$$

donde el núcleo de convolución G es característico del filtro usado, el cual está asociado con las escalas de corte en el espacio y tiempo, Δ y τ_c , respectivamente.

Esta relación es denotada simbólicamente

$$\bar{\phi} = G \star \phi.\tag{4.50}$$

Para las ecuaciones de balance utilizadas para modelar el flujo multifásico vía un modelo multifluido, el operador de filtrado que se aplica es

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = G \star \phi = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{p=1}^N \phi_p(\mathbf{x}, t),\tag{4.51}$$

donde $\{\phi_p, p = 1, N\}$ representa el valor de ϕ para una *p-ésima* realización del mismo flujo (o sea, con todas las condiciones de contorno e iniciales estadísticamente iguales).

La derivación de las ecuaciones para un flujo multifásico haciendo uso de LES es reciente [LLT⁺07], estando actualmente en vías de desarrollo. La misma tiene por objetivo modelar en forma completa la interacción entre la turbulencia y las interfaces entre fases. Por lo tanto, la *aproximación* seguida en este Capítulo se reduce a utilizar el modelo de Smagorinsky para determinar el tensor de tensiones de subgrilla de Reynolds.

4.3.2. Modelo SGS (Subgrid-Scale)

Los modelos LES forman una familia de modelos de turbulencia, donde el modelo de *Smagorinsky* es uno de los más utilizados. El modelo asume que las tensiones de subgrilla siguen el proceso de difusión por gradientes, similar al movimiento molecular. Consecuentemente, τ_m^{Re} está dado por

$$\begin{aligned}\tau_m^{Re} &= 2 \rho_m \nu_{Tm} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m) \\ \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m) &= \frac{1}{2} (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T),\end{aligned}\tag{4.52}$$

donde $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m)$ se denomina tensor de velocidad de deformación resuelto. Siendo ν_{Tm} la *viscosidad cinemática de torbellino de Smagorinsky*

$$\nu_{Tm} = C_s \Lambda \Delta^2 \sqrt{\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m)}, \quad (4.53)$$

con la constante de Smagorinsky, C_s igual a 0.18 y Λ es una función de amortiguamiento que permite reducir la cantidad de viscosidad turbulenta en la vecindad de los objetos sólidos. Con Δ se indica el tamaño de la grilla o ancho del filtro, el cual determina las escalas de la turbulencia a ser resueltas. Finalmente $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m)$ representa la traza del tensor de velocidad de deformación, que hace a la viscosidad turbulenta un parámetro local.

4.3.3. Ley de Pared

A continuación se describe como calcular la velocidad de fricción de pared para definir totalmente las condiciones de borde de las ecuaciones de momento para la mezcla 4.14. Mediante Γ_W se representa la parte del contorno donde se impone la ley de pared. Por medio de esta condición de contorno se computa la tracción de pared para las ecuaciones de momento. Este procedimiento involucra el cálculo de la velocidad de fricción de pared v_* , para lo cual se asume un perfil representado por las siguientes expresiones

$$\frac{|\mathbf{v}_m - \mathbf{v}_{m,W}|}{v_*} = f(y^+) = \begin{cases} y^+ & \text{para } y^+ < 5 \text{ región laminar} \\ 5 \log(y^+) + C_{W,1} & \text{para } 5 < y^+ < 30 \text{ región buffer} \\ 2.5 \log(y^+) + C_{W,2} & \text{para } y^+ > 30 \text{ región full logarítmica} \end{cases}$$

$$y^+ = \frac{y_W v_*}{\nu_m}, \quad (4.54)$$

donde y_W es la distancia a la pared. Siendo $C_{W,1} = -3.04$ y $C_{W,2} = 5.46$. Este sistema de ecuaciones no lineales puede resolverse por ejemplo, por el método de la secante. Una vez determinado el valor de v_* , la tracción (τ_W) para las ecuaciones de momento se determina según

$$\mathbf{t}_{m,W} = g(\mathbf{v}_m - \mathbf{v}_{m,W})$$

$$g = \frac{|\tau_W|}{|\mathbf{v}_m - \mathbf{v}_{m,W}|} \quad (4.55)$$

$$|\tau_W| = \rho v_*^2.$$

4.4. Ecuaciones para el Modelo de Mezcla

A continuación presentamos un resumen de las ecuaciones para el modelo de mezcla.

Modelo de Mezcla (Resumen de Ecuaciones)

Ecuación de Balance de Masa

$$\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m) = 0 \quad (4.56)$$

Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_m \mathbf{v}_m) + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \otimes \mathbf{v}_m) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau_m + \nabla \cdot \tau_m^{Diff} + \rho_m \mathbf{g} \quad (4.57)$$

Tensor de tensiones total y viscosidad dinámica efectiva

$$\tau_m = \mu_{efm} (\nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T) \quad \mu_{efm} = \sum_{k=1}^n \alpha_k \mu_k + \mu_{Tm} \quad (4.58)$$

Tensor de difusión

$$\tau_m^{Diff} = - \sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_m) \otimes (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_m) \quad (4.59)$$

Ecuación de Balance de Masa para la fase dispersa

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_k \rho_k) + \nabla \cdot (\alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k) = \nabla \cdot \left(\rho_k \frac{\nu_{Tm}}{Sc_k} \nabla \alpha_k \right) \quad (4.60)$$

Viscosidad cinemática y dinámica turbulenta

$$\nu_{Tm} = C_s \Lambda \Delta^2 \sqrt{\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m) : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{v}_m)} \quad \mu_{Tm} = \rho_m \nu_{Tm} \quad (4.61)$$

Velocidad de la fase k y restricción algebraica

$$\mathbf{v}_k = \mathbf{v}_m + v_{k0}^{slip} \mathbf{e}_z \quad \sum_{k=1}^n \alpha_k = 1 \quad (4.62)$$

Ecuación de la velocidad relativa

$$\frac{3}{4}C_D \frac{\alpha_k \rho_c |\mathbf{v}_{k0}^{Slip}| \mathbf{v}_{k0}^{Slip}}{d_k} = \alpha_k (\rho_p - \rho_m) \left[\mathbf{g} - (\mathbf{v}_m \cdot \nabla) \mathbf{v}_m - \frac{\partial \mathbf{v}_m}{\partial t} \right] \quad (4.63)$$

4.4.1. Condiciones Iniciales y de Contorno

Las formulación fuerte del modelo de mezcla se completa con las correspondientes condiciones iniciales y de contorno. El contorno completo Γ del dominio físico Ω se divide en tres partes para el campo de velocidades de la mezcla, imponiendo una condición tipo Dirichlet (D), Neumann (N) o una condición de pared (W) y en dos partes para la fracción de volumen de las fases dispersas imponiendo una condición tipo Dirichlet o Neumann.

Para el campo de velocidades de la mezcla

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Gamma_D \cup \Gamma_N \cup \Gamma_W \\ \Gamma_D \cap \Gamma_N \cap \Gamma_W &= \emptyset \\ \mathbf{v}_m &= \mathbf{v}_{m,D} && \text{en } \Gamma_D \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}_m &= \mathbf{t}_{m,N} && \text{en } \Gamma_N \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\tau}_m &= \mathbf{t}_{m,W}(v_*(\mathbf{v}_m)) && \text{en } \Gamma_W, \end{aligned} \quad (4.64)$$

donde Γ_D , Γ_N y Γ_W representan la partes donde imponemos una condición de contorno tipo Dirichlet, Neumann y de pared respectivamente.

Las condiciones de borde para las fracciones de volumen de la fase dispersa genérica k son expresadas por

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Gamma_D \cup \Gamma_N \\ \Gamma_D \cap \Gamma_N &= \emptyset \\ \alpha_k &= \alpha_{k,D} && \text{en } \Gamma_D \\ \mathbf{n} \cdot \nabla \alpha_k &= f_{k,N} && \text{en } \Gamma_N, \end{aligned} \quad (4.65)$$

siendo $f_{k,N}$ el flujo de α_k a través del contorno Γ_N con normal \mathbf{n} .

4.5. Discretización Numérica por el Método de los Elementos Finitos

La solución numérica del modelo de mezcla se determina utilizando el método de los elementos finitos estabilizados de igual orden. El conjunto de ecuaciones que constituyen el modelo de mezcla se resuelve dividiendo el cálculo en etapas. En la primera etapa se resuelven las ecuaciones de balance para la mezcla, determinando el campo de velocidad y presión de la mezcla. Luego se computan las ecuaciones de balance para cada una de las fases dispersas, donde la velocidad de la fase es determinada a través de la Ec. 4.62.

A medida que el número de Reynolds se incrementa, el término advectivo en la ecuación de balance de cantidad de movimiento lineal de la mezcla se vuelve dominante. Por otro lado, siendo que las ecuaciones para la mezcla se discretizan utilizando un método basado en presiones (*pressure based methods*), es decir que la presión es una variable incógnita del problema, estas necesitan estabilizarse por las oscilaciones que pueden producirse por la restricción de incompresibilidad asociada al balance de masa de la mezcla. Es de notar que en esta ecuación no participa la presión en forma directa sino como una restricción que hace que se satisfaga la misma. Para fijar ideas, esto mismo ocurre en el caso incompresible a una sola fase, en donde la ecuación de balance de masa degenera en una condición que el campo de velocidades sea solenoidal. A diferencia de este, el caso más general de una mezcla multifásica requiere que la presión sea tal que satisfaga la Ec. 4.60. Es por satisfacer esta ecuación que pueden aparecer las mencionadas oscilaciones. En los casos límites en que la mezcla sea muy diluida o bien las densidades de todas las fases presentes tiendan a ser iguales, la anterior Ec. 4.60 se transforma, como en el caso de una única fase antes citado, en una restricción sobre el campo de velocidades de mezcla, de forma que este sea solenoidal. Por lo tanto, ante lo expuesto, se emplea para resolver las ecuaciones de balance de la mezcla una formulación SUPG-PSPG propuesta por Tezduyar et al. [TMRS92].

La ecuación de balance de masa de las fases dispersas es del tipo advectivo difusivo. La misma presenta inestabilidades para elevados números de Peclet local, por lo tanto se utiliza una formulación del tipo SUPG para estabilizar los términos advectivos. Por otra parte, se incorpora un término de difusión numérica isotrópica (*shock capturing*), para evitar oscilaciones localizadas en zonas de altos gradientes de fracción de fase dispersa.

4.5.1. Ecuaciones de Balance de Masa y Cantidad de Movimiento Lineal para la mezcla

La formulación débil discreta usando el método SUPG-PSPG aplicado al modelo de mezcla se desarrolla en la presente sección, para lo cual se definen los espacios funcionales

para las funciones de interpolación y peso como

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}_{\mathbf{v}_m}^h &= \{ \mathbf{v}_m^h \mid \mathbf{v}_m^h \in (\mathcal{H}^{1h})^{n_{sd}}, \mathbf{v}_m^h \doteq \mathbf{v}_{m,D}^h \text{ en } \Gamma_D \} \\
 \mathcal{V}_{\mathbf{v}_m}^h &= \{ \mathbf{N}^h \mid \mathbf{N}^h \in (\mathcal{H}^{1h})^{n_{sd}}, \mathbf{N}^h \doteq \mathbf{0} \text{ en } \Gamma_D \} \\
 \mathcal{S}_p^h &= \{ p^h \mid p^h \in \mathcal{H}^{1h} \} \\
 \mathcal{V}_p^h &= \{ q^h \mid q^h \in \mathcal{H}^{1h} \},
 \end{aligned} \tag{4.66}$$

donde

$$\mathcal{H}^{1h} = \left\{ \phi^h \mid \phi^h \in C^0(\bar{\Omega}), \phi^h|_{\Omega^e} \in P^1, \forall \Omega^e \in \mathcal{E} \right\}, \tag{4.67}$$

es el espacio de Sobolev de orden uno, P^1 representa la familia de polinomios de primer grado, n_{sd} es la dimensión del dominio físico Ω , \mathcal{E} expresa la partición discreta del dominio físico, Ω^e la porción de esta partición correspondiente al elemento e y $\bar{\Omega} = \cup \Omega^e$ es el cierre de Ω , o sea $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$. La formulación SUPG-PSPG del sistema de ecuaciones diferenciales del modelo de mezcla se escribe como

determinar la velocidad de la mezcla $\mathbf{v}_m^h \in \mathcal{S}_{\mathbf{v}_m}^h$ y la presión $p^h \in \mathcal{S}_p^h$ tal que $\forall \mathbf{N}^h \in \mathcal{V}_{\mathbf{v}_m}^h, \forall q^h \in \mathcal{V}_p^h$ se satisfaga

$$\begin{aligned}
 & \int_{\Omega} \mathbf{N}^h \cdot \left[\rho_m \left(\frac{\partial \mathbf{v}_m^h}{\partial t} + \mathbf{v}_m^h \cdot \nabla \mathbf{v}_m^h - \mathbf{g} \right) + \nabla p \right] d\Omega + \int_{\Omega} \epsilon(\mathbf{N}^h) : \boldsymbol{\tau}_m^h d\Omega - \\
 & - \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}^h \cdot \mathbf{t}_m^h d\Gamma - \int_{\Gamma_W} \mathbf{N}^h \cdot \mathbf{t}_{m,W}^h d\Gamma - \\
 & - \int_{\Omega} \epsilon(\mathbf{N}^h) : \left(\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k^{Slip} \otimes \mathbf{v}_k^{Slip} \right) d\Omega + \int_{\Gamma_N} \mathbf{N}^h \cdot \left(\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k^{Slip} \otimes \mathbf{v}_k^{Slip} \right) \cdot \mathbf{n} d\Gamma + \\
 & + \int_{\Omega} q^h \frac{\partial \rho_m}{\partial t} d\Omega - \int_{\Omega} \rho_m \nabla q^h \cdot \mathbf{v}_m^h d\Omega + \int_{\Gamma} \rho_m q^h \mathbf{v}_m^h \cdot \mathbf{n} d\Gamma + \\
 & + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} \boldsymbol{\delta}^h \cdot \left[\rho_m \left(\frac{\partial \mathbf{v}_m^h}{\partial t} + \mathbf{v}_m^h \cdot \nabla \mathbf{v}_m^h - \mathbf{g} \right) + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_m^h + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k^{Slip} \otimes \mathbf{v}_k^{Slip} \right) \right]}_{(SUPG)} d\Omega + \\
 & + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} \boldsymbol{\epsilon}^h \cdot \left[\rho_m \left(\frac{\partial \mathbf{v}_m^h}{\partial t} + \mathbf{v}_m^h \cdot \nabla \mathbf{v}_m^h - \mathbf{g} \right) + \nabla p - \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_m^h + \nabla \cdot \left(\sum_{k=1}^n \alpha_k \rho_k \mathbf{v}_k^{Slip} \otimes \mathbf{v}_k^{Slip} \right) \right]}_{(PSPG)} d\Omega + \\
 & + \sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} \tau_{LSIC} \nabla \cdot \mathbf{N}^h \left(\frac{\partial \rho_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m^h) \right) d\Omega = \mathbf{0}.
 \end{aligned} \tag{4.68}$$

Los parámetros de estabilización son definidos como

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\delta}^h &= \tau_{SUPG}(\mathbf{v}_m^h \cdot \nabla) \mathbf{N}^h \\
 \boldsymbol{\epsilon}^h &= \tau_{PSPG} \frac{1}{\rho_m} \nabla q^h \\
 \tau_{SUPG} &= \frac{h_{SUPG}}{2\|\mathbf{v}_m^h\|} z(Re_{v_m}) \\
 \tau_{PSPG} &= \frac{h_{PSPG}}{2\|\mathbf{v}_m^h\|} z(Re_{v_m}) \\
 \tau_{LSIC} &= \frac{h_{SUPG}}{2} \|\mathbf{v}_m^h\| z(Re_{v_m}),
 \end{aligned} \tag{4.69}$$

con Re_{v_m} el número de Reynolds basado en los parámetros del elemento

$$Re_{v_m} = \frac{\|\mathbf{v}_m^h\| h_{SUPG}}{2\nu_{efm}}. \tag{4.70}$$

Las longitudes del elemento son calculadas a través de la siguientes expresiones

$$\begin{aligned}
 h_{SUPG} &= 2 \left(\sum_{a=1}^{n_{en}} |\mathbf{s}_m^h \cdot \nabla N_a| \right)^{-1} \\
 h_{PSPG} &= \sqrt[3]{\frac{6V_e}{\pi}},
 \end{aligned} \tag{4.71}$$

con N_a como la función de forma asociada al nodo a , n_{en} el número de nodos en el elemento, \mathbf{s}_m^h el versor en dirección de la velocidad y V_e es el volumen del elemento. La función $z(Re_{v_m})$ usada en 4.69 se define como

$$z(Re_{v_m}) = \begin{cases} Re_{v_m}/3 & -3 \leq Re_{v_m} < 3, \\ \text{sign}(Re_{v_m}) & 3 \leq |Re_{v_m}|. \end{cases} \tag{4.72}$$

4.5.2. Ecuación de Balance de Masa para la fase dispersa

A continuación se determina la forma débil discreta de la ecuación de balance de masa para la fase genérica k . Los espacios funcionales para las funciones de interpolación y peso se definen como

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_{\alpha_k}^h &= \{\alpha_k^h \mid \alpha_k^h \in \mathcal{H}^{1h}, \alpha_k^h \doteq \alpha_{k,D}^h \text{ en } \Gamma_D\} \\ \mathcal{V}_{\alpha_k}^h &= \{w^h \mid w^h \in \mathcal{H}^{1h}, w^h \doteq 0 \text{ en } \Gamma_D\}.\end{aligned}\quad (4.73)$$

La formulación débil por el método de los elementos finitos estabilizados se escribe como

encontrar $\alpha_k^h \in \mathcal{S}_{\alpha_k}^h$ tal que $\forall w^h \in \mathcal{V}_{\alpha_k}^h$ se satisfaga

$$\begin{aligned}& \int_{\Omega} \left[w^h \frac{\partial \alpha_k^h}{\partial t} - \nabla w^h \cdot \alpha_k^h (\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z) + \nabla w^h \cdot \frac{\nu_{Tm}}{Sc_k} \nabla \alpha_k^h \right] d\Omega + \\ & + \int_{\Gamma} w^h \alpha_k^h (\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z) \cdot \mathbf{n} d\Gamma - \int_{\Gamma_N} w^h \frac{\nu_{Tm}}{Sc_k} f_{k,N}^h d\Gamma + \\ & + \underbrace{\sum_{e=1}^{nel} \int_{\Omega^e} \delta_{\alpha_k} \left[\frac{\partial \alpha_k^h}{\partial t} + (\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z) \cdot \nabla \alpha_k^h + \alpha_k^h (\nabla \cdot (\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z)) \right]}_{(SUPG)} d\Omega + \\ & + \underbrace{\int_{\Omega} \nabla w^h \cdot \delta_{sc} \nabla \alpha_k^h d\Omega}_{(Shock Capturing)} = 0.\end{aligned}\quad (4.74)$$

Los parámetros de estabilización son definidos como

$$\begin{aligned}\delta_{\alpha_k} &= \tau_{SUPG}^{\alpha_k} ((\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z) \cdot \nabla) w^h \\ \tau_{SUPG}^{\alpha_k} &= \frac{h_{SUPG}}{2 \|\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z\|} z(Pe_{\alpha_k}) \\ \delta_{sc} &= \frac{h_{SUPG}}{2} \|\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z\| z(Pe_{\alpha_k}) \\ Pe_{\alpha_k} &= \frac{h_{SUPG} \|\mathbf{v}_m^h + v_k^{Slip} \mathbf{e}_z\|}{2 \frac{\nu_{Tm}}{Sc_k}},\end{aligned}\quad (4.75)$$

la función $z(Pe_{\alpha_k})$ se expresa como

$$z(Pe_{\alpha_k}) = \begin{cases} Pe_{\alpha_k}/3 & -3 \leq Pe_{\alpha_k} < 3, \\ \text{sign}(Pe_{\alpha_k}) & 3 \leq |Pe_{\alpha_k}|. \end{cases}\quad (4.76)$$

Capítulo 5

Aplicación del Modelo ASMM a la Resolución del Flujo Multifásico en una Cuchara Siderúrgica

5.1. Introducción

En el presente Capítulo se hace uso del modelo ASMM desarrollado en el Capítulo anterior para resolver el flujo en una cuchara siderúrgica. En primera instancia, con el objetivo de validar el código computacional, se comparan los resultados numéricos obtenidos con el código PETSc-FEM y los datos experimentales relevados de un modelo físico en frío agua-aire. Una vez cumplida la etapa de validación, se resuelve el flujo en una cuchara de 100 t de acero, la cual es agitada por medio de la inyección de argón. Para esta cuchara se tiene en cuenta la fase escoria (tercera fase) que sobrenada por encima de la masa de acero, donde la altura de la columna de escoria es de 10 cm. Los caudales de argón utilizados en el cómputo son de 35, 80, 120 y 160 l min⁻¹.

5.2. Validación del Código Computacional

Gran parte de los ensayos experimentales realizados con la finalidad de reproducir las condiciones del flujo en una cuchara siderúrgica se efectúan haciendo uso de modelos físicos en frío. La principal razón se debe a que en modelos físicos en caliente las elevadas temperaturas y la atmósfera fuertemente corrosiva del medio hacen que la vida útil de las sondas utilizadas para relevar las características de las burbujas sea extremadamente corta tal como reporta Iguchi [IKNM95].

Debido a la escasez de resultados experimentales en modelos en caliente, se optó por emplear un modelo físico en frío para validar el código computacional. En este trabajo se utilizaron los resultados experimentales obtenidos por Anagbo y Brimacombe [AB90] en un modelo físico en frío (agua-aire) a escala 1:6 de una cuchara siderúrgica de 150 t. El modelo consiste en un tanque cilíndrico de PLEXIGLAS de 500 mm de diámetro que contiene agua desionizada hasta una altura de 400 mm medidos desde la base del tanque. El tanque cuenta con un tapón poroso (radio del tapón $r_0 = 30$ mm) ubicado en el centro de la base del tanque para inyectar el aire.

5.2.1. Modos de Dispersión del Gas

Como se puede observar en la Fig. 5.1, la pluma que se genera por sobre el tapón poroso presenta ciertas características para diferentes caudales volumétricos.

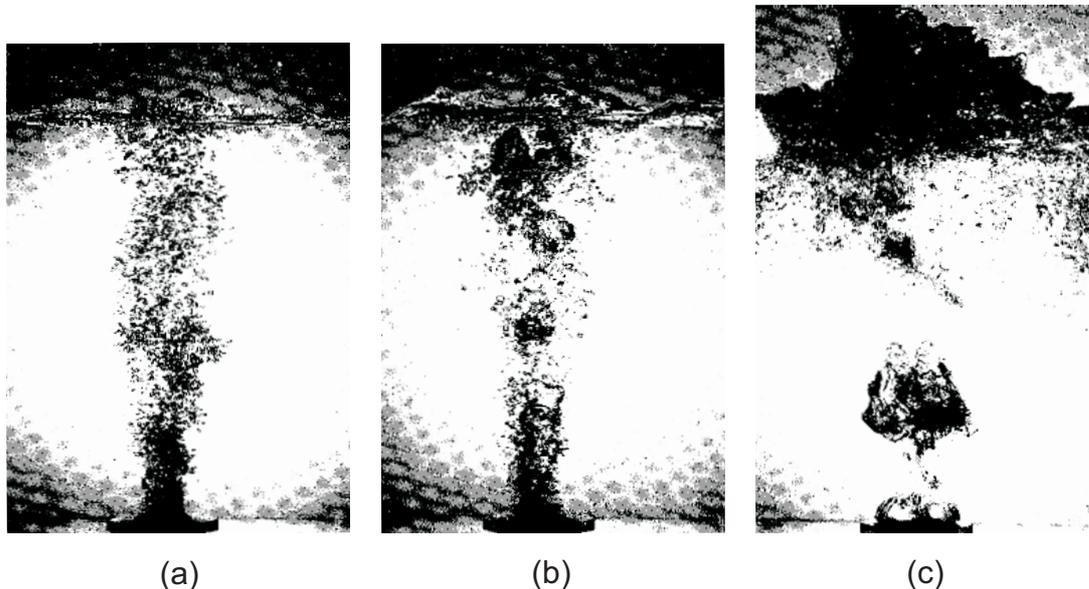


Figura 5.1: Modos de dispersión del gas en tapones porosos: a) burbujas discretas, b) coalescencia incipiente, c) coalescencia (Fotos extraídas de Anagbo y Brimacombe [AB90]).

Conforme se incrementa el caudal de gas suministrado al tapón, se puede distinguir tres modos de dispersión del gas. Siendo que dichos modos guardan relación con la frecuencia axial de las burbujas, se utiliza esta última para caracterizar el modo de burbujeo:

- **Modo de burbujas discretas:** corresponde al rango comprendido entre 0 y $14 \text{ cm}^3\text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ de caudal de gas por unidad de superficie del tapón. Como es posible observar en la Fig. 5.2, entre 0 y $8 \text{ cm}^3\text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ la frecuencia de burbujeo aumenta con el caudal, esto es debido a la activación de poros del tapón con el aumento del

suministro de gas. Entre 8 y $14 \text{ cm}^3\text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ la frecuencia se mantiene aproximadamente constante, este rango corresponde al rango de burbujas discretas completamente desarrollado.

- **Modo de coalescencia incipiente:** entre 14 y $40 \text{ cm}^3\text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ se comienzan a formar arreglos (*clusters*) de burbujas, algunos de los cuales coalescen en pequeños paquetes, provocando una reducción en la frecuencia. El fenómeno se intensifica hasta $40 \text{ cm}^3\text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ donde la frecuencia se vuelve estable con el caudal.
- **Modo de coalescencia:** corresponde a valores de caudal específico superiores a $40 \text{ cm}^3\text{s}^{-1}\text{cm}^{-2}$. En este modo una gran burbuja se forma sobre el tapón cubriéndolo por completo. Durante su ascenso la burbuja se inestabiliza rompiéndose en burbujas más pequeñas. La frecuencia permanece constante con el caudal reduciéndose con la altura debido a la expansión de la pluma y al aumento de la cantidad de líquido en la zona de dos fases.

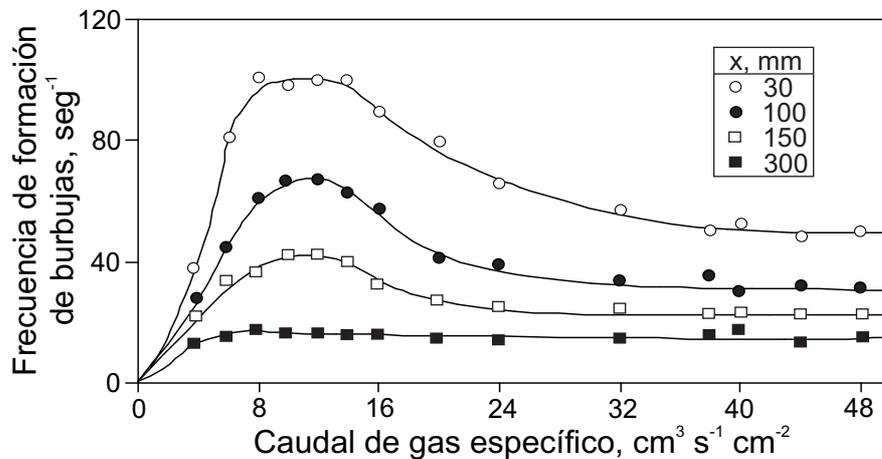


Figura 5.2: Variación de la frecuencia de las burbujas con el caudal específico para distintas posiciones por encima del tapón poroso. (Figura extraída de Anagbo y Brimacombe [AB90]).

Para la validación del código computacional se consideró en primera instancia el modo de dispersión de “burbujas discretas”. Este modo presenta la ventaja de constituir una mezcla diluida, la cual es una de las principales hipótesis tomadas en el desarrollo del modelo de mezcla.

5.2.2. Simulación Numérica del Modelo Físico Agua-Aire

El sistema multifásico estaba constituido por dos fases, una fase continua *agua* (subíndice l) y una fase dispersa formada por *burbujas de gas* (subíndice g), considerando a las mismas de forma esférica. La velocidad de deslizamiento se determinó a través de las expresiones empíricas expuestas en el trabajo de Buscaglia et al. [BBG02].

Para la resolución del sistema multifásico se asumieron las siguientes hipótesis:

Hipótesis:

1. **Proceso isotérmico** a 293 K. Por lo que no se encontraba presente en el modelo la ecuación de conservación de energía.
2. **Diámetro de burbuja constante.** Las mediciones revelan que el diámetro de la burbuja sufre una pequeña variación durante su ascenso (no mayor a un 25%), por lo cual el diámetro de la burbuja se asumió constante e igual a 4 mm. Siendo por lo tanto $v_g^{Slip} = 0.23 \text{ m s}^{-1}$.
3. **Régimen de burbujeo dinámico.**
4. **Hipótesis de mezcla.**
5. **Libre de la expansión del gas.** Se despreció el trabajo desarrollado por el gas sobre el líquido durante el proceso de formación de la burbuja, dado que el fenómeno es fuertemente dominado por las fuerzas de flotación.
6. **Problema axisimétrico sin superficie libre.**

5.2.3. Escalas de Tiempo y Espacio Macroscópicas - Microscópicas

Como se vió en el apartado 4.3 el modelo de turbulencia empleado es un modelo LES. Este modelo tiene la característica de capturar gran parte de la física del problema, o sea resuelve las principales escalas de la turbulencia modelando aquellas escalas que están por debajo del tamaño del elemento de la malla. Por lo tanto para hacer un correcto uso del mismo es necesario conocer (siempre y cuando sea posible) cuál debe ser el tamaño característico de elemento de la malla (h_{malla}) como así también el paso de tiempo (dt) a utilizar en la simulación [Mi102]. La finalidad de este apartado es determinar las escalas de longitud y tiempo características que intervienen en el fenómeno y que son las que van a permitir conocer los parámetros antes mencionados.

Escalas Macroscópicas

Son las que poseen el mayor contenido energético del flujo e interactúan en forma directa con el flujo medio.

La *escala de longitud macroscópica* (L^*) está dada por el tamaño característico del macrovórtice Fig. 5.3, por lo tanto

$$L^* = \frac{2}{3} H, \quad (5.1)$$

siendo L^* y H la longitud del macrovórtice y la altura de la columna de agua respectivamente.

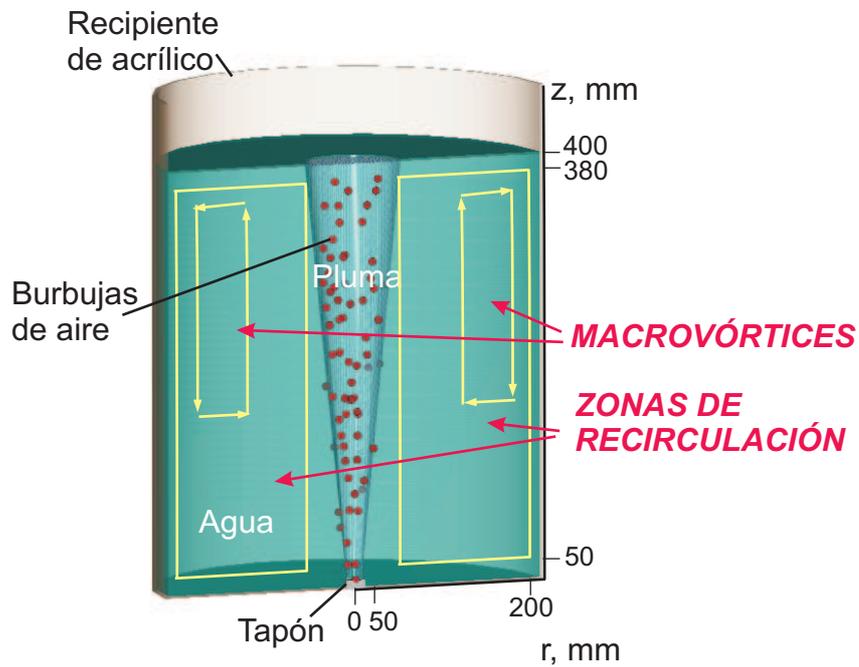


Figura 5.3: Patrón de circulación del líquido en la cuchara.

Un modelo macroscópico fue propuesto por Sahai y Guthrie [SG82] para predecir la velocidad promedio de recirculación de la mezcla \bar{U} , expresada en m s^{-1} , en la cuchara

$$\bar{U} \cong 8.6 \frac{Q^{1/3} H^{1/4}}{R^{0.58}}. \quad (5.2)$$

Por lo tanto la *escala de tiempo macroscópica* T^* , expresada en s, está dada por

$$T^* \cong \frac{L^*}{\bar{U}} = 7.75 \times 10^{-2} \frac{R^{0.58} H^{3/4}}{Q^{1/3}}, \quad (5.3)$$

siendo R el radio de la cuchara y Q el caudal volumétrico de aire en CNPT (condiciones normales de presión y temperatura).

Escalas Microscópicas

Son las escalas donde se produce disipación de energía por efectos viscosos.

La *escala de longitud microscópica* l^* surge de la hipótesis de que los vórtices más pequeños, que pueden estar presentes en el cálculo directo sin modelar, son a lo sumo de una longitud igual a la mitad del diámetro de la burbuja d , por lo tanto

$$l^* = \frac{d}{2}. \quad (5.4)$$

Considerando una velocidad de la burbuja dada por $u_g^* = \bar{U} + u_g^{Slip}$, la *escala de tiempo microscópica* t^* es

$$t^* = \frac{d}{2(\bar{U} + u_g^{Slip})}. \quad (5.5)$$

Siendo la altura de la columna de agua $H = 0.40$ m, el radio $R = 0.25$ m y el caudal volumétrico en CNPT que ingresa por el tapón $Q = 2.11 \times 10^{-4} \text{ m}^3 \text{ s}^{-1}$, las escalas de longitud y tiempo para estas condiciones de trabajo están dadas en el Cuadro 5.1.

-	Macroscópica	Microscópica
Longitud	$L^* = 0.267 \text{ m}$	$l^* = 2 \times 10^{-3} \text{ m}$
Tiempo	$T^* = 0.44 \text{ s}$	$t^* = 2.40 \times 10^{-3} \text{ s}$

Cuadro 5.1: Escalas de longitud y tiempo macroscópicas - microscópicas.

5.2.4. Malla

La malla que se utilizó es del tipo estructurada con elementos hexaédricos. Como se expresó anteriormente, para resolver la turbulencia es importante conocer cuál ha de ser la distribución de tamaños de los elementos en función de la física del problema, para lo cual en base a lo visto en el apartado anterior y en las simulaciones previas realizadas por Milelli [Mil02], se optó para la validación un número de elementos $N_r = 40$, $N_z = 50$ y $N_\theta = 1$. Realizando un refinamiento hacia el tapón en ambas direcciones (radial y axial) y hacia la superficie libre en la dirección axial, como se puede observar en la Fig. 5.4.

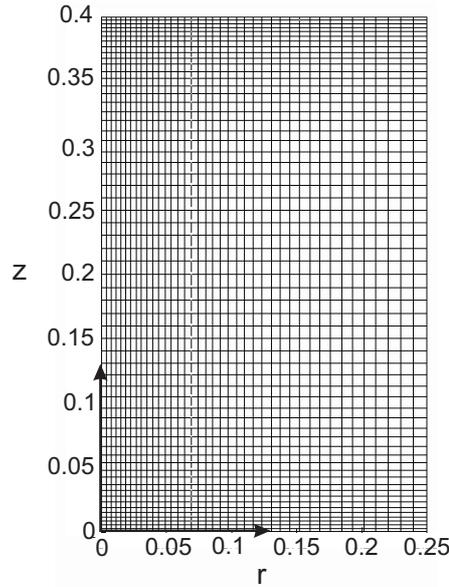


Figura 5.4: Malla de elementos hexaédricos, utilizada en la simulación del sistema bifásico agua-aire, con $N_r = 40$, $N_z = 60$ y $N_\theta = 1$.

5.2.5. Condiciones de Contorno e Iniciales

Las condiciones de contorno para las variables dependientes necesitan ser especificadas a lo largo de los contornos del dominio computacional.

Eje de simetría: debido a la restricción de axisimetría, a lo largo del centro de línea de la cuchara ($r = 0$), las siguientes condiciones fueron impuestas

$$r = 0 ; 0 < z < H : \begin{cases} v_m^r = v_m^\theta = 0 \\ \frac{\partial v_m^z}{\partial r} = \frac{\partial \alpha_g}{\partial r} = 0 \end{cases} . \quad (5.6)$$

Pared: el gradiente de la fracción de volumen del gas a lo largo de la pared se hace nulo debido a que no existe flujo másico a través de la pared, por lo tanto las condiciones de contorno son

$$r = R ; 0 < z < H : \begin{cases} v_m^r = v_m^z = v_m^\theta = 0 \\ \frac{\partial \alpha_g}{\partial r} = 0 \end{cases} . \quad (5.7)$$

Fondo: tenemos condiciones de no-deslizamiento e impenetrabilidad, por lo tanto

$$r_0 < r < R; z = 0 : \begin{cases} v_m^r = v_m^z = v_m^\theta = 0 \\ \alpha_g = 0 \end{cases} . \quad (5.8)$$

Siendo la velocidad de la mezcla nula como así también la fracción de vacío del gas para el fondo, entonces por medio de la expresión 4.8 se observa que $v_i^r = v_i^z = v_i^\theta = 0$.

Tapón poroso: como vimos en el apartado 6.4.1, se ha considerado al flujo multifásico libre de la expansión del gas, lo que implica que al dominio computacional ingresan las burbujas ya formadas y con una velocidad igual a la velocidad terminal. Por lo tanto las condiciones de contorno para el tapón están dadas por

$$0 < r \leq r_0; z = 0 : \begin{cases} v_m^r = v_m^z = v_m^\theta = 0 \\ \alpha_g = 0.45^* \end{cases} . \quad (5.9)$$

*Nota: Cabe acotar que la fracción de vacío en la mayoría de los trabajos sobre cucharas que hacen uso ya sea del modelo de dos fluidos [MG95] o bien del de mezcla [STK02] es tomada igual a 1 en el régimen de burbujeo, lo cual es incorrecto porque no existe una frecuencia infinita de formación de burbujas, o sea, la fracción de vacío deberá ser siempre menor que 1 en este régimen. Mediciones experimentales revelan que para este tipo de aplicaciones la fracción de vacío puede estar entre 0.40 y 0.73.

Superficie libre: por simplicidad se asumió que la superficie del líquido no se deforma, manteniéndose plana. La velocidad de la mezcla normal a la superficie se fijó a cero, por lo tanto el gas abandona el dominio computacional con una velocidad igual a la velocidad de deslizamiento. Por otro lado, se fijaron restricciones de manera tal de hacer nulas las tensiones de corte para la superficie

$$0 < r < R; z = H : \begin{cases} v_m^z = 0 \\ \frac{\partial v_m^r}{\partial z} = \frac{\partial v_m^\theta}{\partial z} = 0 \end{cases} . \quad (5.10)$$

Periodicidad: el problema presenta simetría con respecto al eje z , por lo que se consideró un sector del cilindro con una apertura angular de 1° , empleando un solo elemento en la dirección circunferencial.

Las **condiciones iniciales** para el problema fueron velocidad de la mezcla nula y fracción de gas igual a 0.1% para todo el dominio computacional.

5.2.6. Resultados

En esta sección se comparan los datos experimentales obtenidos por Anagbo y Brimacombe [AB90], con los valores calculados con los modelos de dos fluidos (resuelto por Milelli [Mil02]) y ASMM-PETSc-FEM.

Las Figs. 5.5-5.9 (páginas siguientes) muestran los valores de fracción de gas para cinco alturas diferentes medidas a partir del plano del tapón: 50, 100, 200, 300 y 380 mm, respectivamente. Los resultados obtenidos con el modelo ASMM-PETSc-FEM han sido promediados en el tiempo para 5.25 s de simulación.

Es importante acotar que en el modelo de dos fluidos el término de transferencia de cantidad de movimiento lineal entre las fases tiene en cuenta la fuerza de drag, masa virtual, lift y dispersión turbulenta. Los respectivos valores para los coeficientes de cada una de las fuerzas son: $C_D = 0.44$, $C_{VM} = 0.5$, $C_L = 0.1$ y $C_{TD} = 0.1 \div 3.3$ (este último depende del modelo de turbulencia). En la Tesis de Milelli se comparan los resultados obtenidos por cuatro modelos de turbulencia, listados a continuación: modelo de Simonin & Viollet (S-V) [SV88], modelo de turbulencia inducida por la burbuja (Sato) [SS75] [SSS81], modelo de Lee (Grupo de Lahey) [LLJ89] y modelo de Issa (Grupo de Gosman)[WIG94]. Los mejores resultados fueron los determinados por el modelo de S-V. Por lo tanto, son los utilizados para comparar con el modelo ASMM. Todos los cálculos realizados por Milelli han sido llevados a cabo con el código comercial CFX-4.2 (1997). Un aspecto que se resalta en dicha Tesis, es que se hizo uso de un esquema de primer orden (UPWIND)¹ para la discretización espacial de la ecuación de conservación del gas, dado que los esquemas de alto orden tipo QUICK² producen valores no acotados de la solución donde existen gradientes elevados de fracción de volumen, tal como lo reporta también Lathouwers & Van Den Akker [LA02].

En las Figs. 5.5 y 5.6 se observa que para posiciones cercanas al tapón (50 y 100 mm) los resultados de la fracción de gas obtenidos con el modelo ASMM para el centro de la cuchara ($r = 0$) concuerdan satisfactoriamente con los datos experimentales, presentando una ligera desviación a medida que crece r . Los resultados obtenidos en la zona central ($r < 0.005$ m) por el modelo de dos fluidos subestiman los valores de fracción de gas en ambos casos.

Para alturas mayores (Figs. 5.7-5.9): 200, 300 y 380 mm las diferencias entre los datos experimentales y el modelo ASMM varían entre un 10 y 30 %. La causa de estas diferencias se atribuyó a la definición del dominio computacional. Si bien las variables medias son axisimétricas, la turbulencia no lo es. O sea, existen escalas en la dirección circunferencial,

¹ A pesar de tener una excesiva difusión numérica (esquema de primer orden).

² *Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*.

que fueron filtradas al colocar un solo elemento en dicha dirección; por lo tanto toda la difusión normal al plano provocada por la fluctuación de la componente circunferencial no ha sido incluida. Esta diferencia aumenta en alturas más alejadas al tapón donde el flujo es dominado por la difusión turbulenta [Sch01].

Como se puede observar en la Fig. 5.7 el modelo de dos fluidos logra representar el valor de la fracción de gas en el centro de la cuchara, alejándose de los valores experimentales a medida que crece r . En las restantes situaciones (Figs.5.8 y 5.9) las diferencias con los valores experimentales es notoria aun en toda la extensión radial de la cuchara.

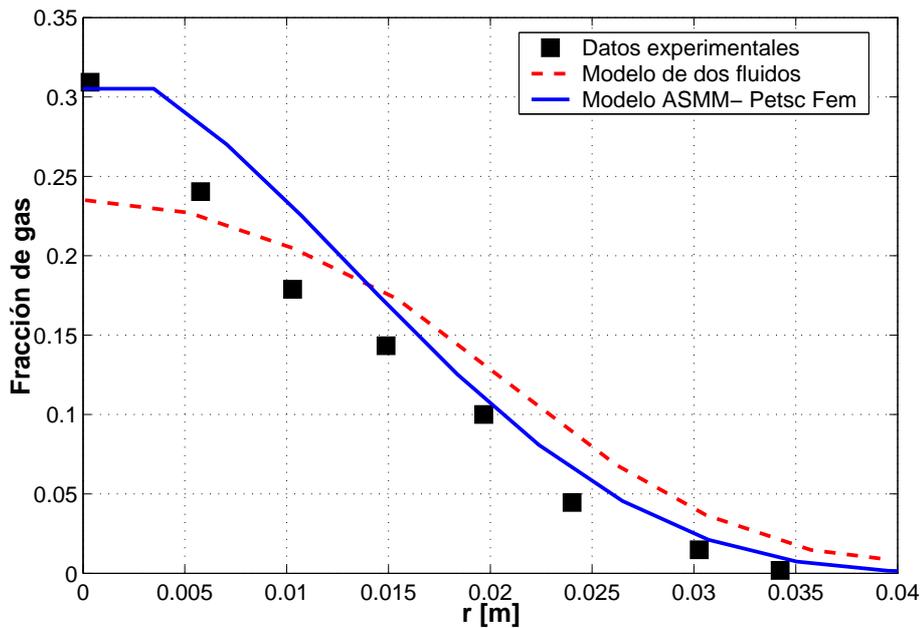


Figura 5.5: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\blacksquare) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 50 mm.

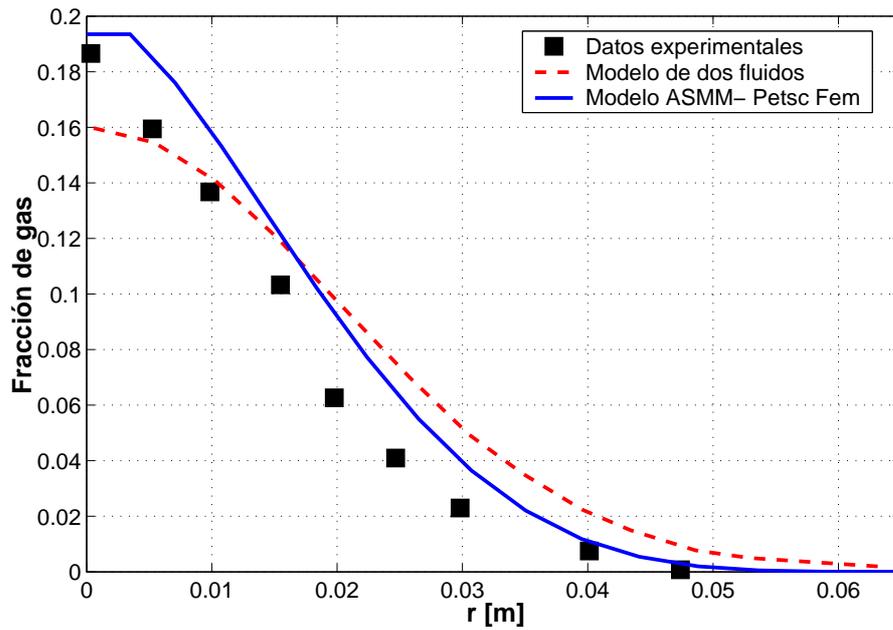


Figura 5.6: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm.

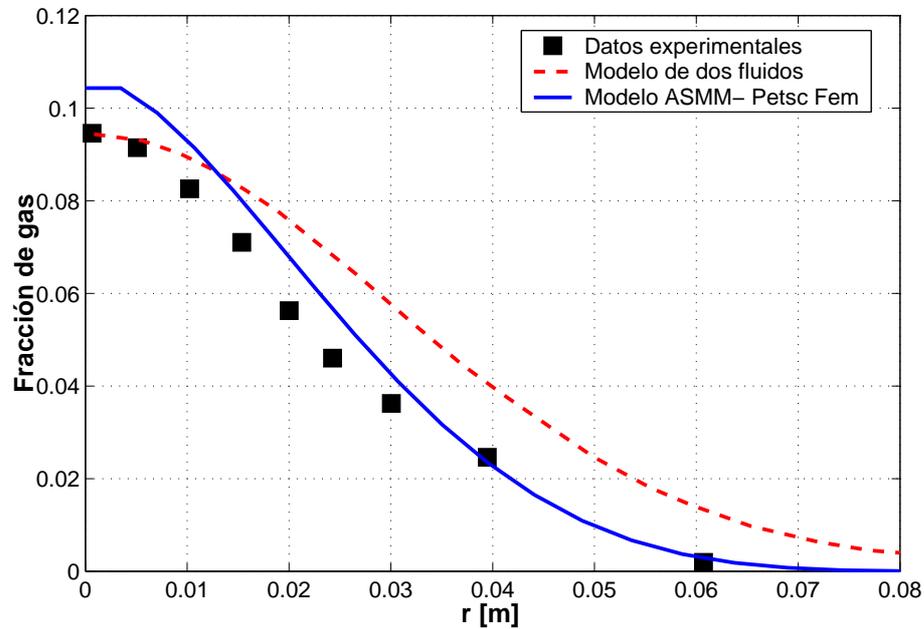


Figura 5.7: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm.

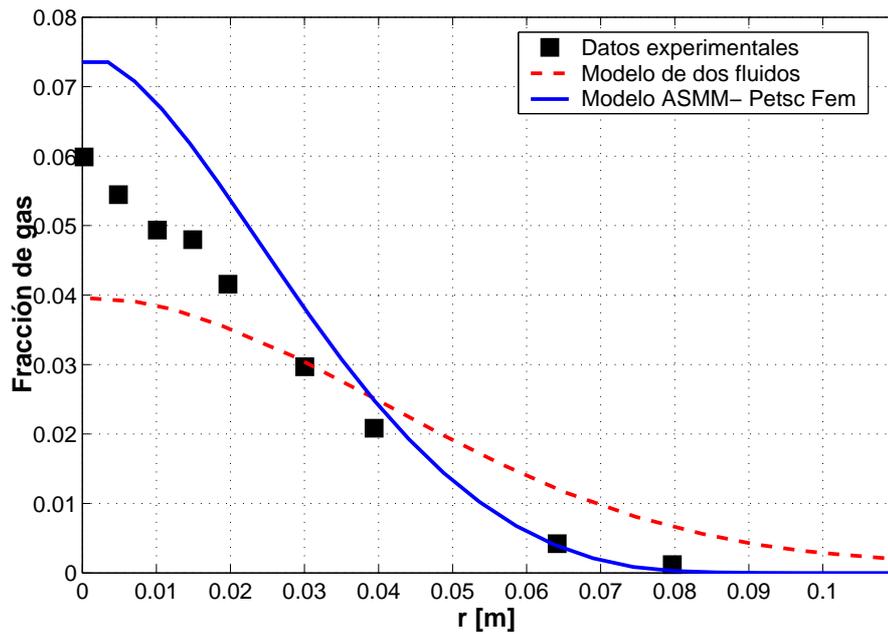


Figura 5.8: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (□) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm.

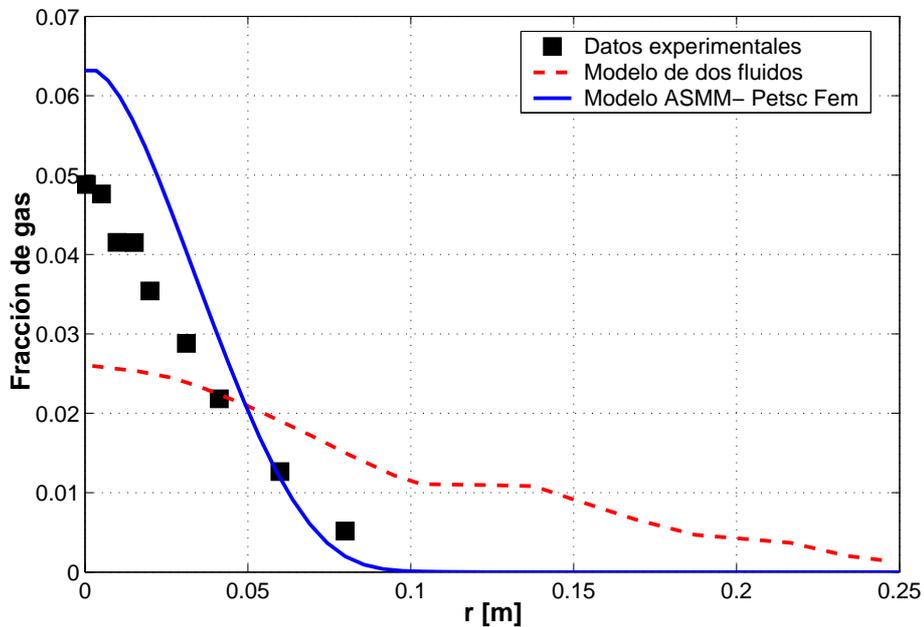


Figura 5.9: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (□) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm.

En la Fig. 5.10 se observa la velocidad de ascenso de las burbujas, promediada radialmente y pesada con la fracción de volumen del gas, en función de la coordenada axial z . El promedio pesado con la fracción de volumen del gas está definido por la siguiente expresión

$$\bar{v}_g(z_i) = \frac{\int_0^{\Delta_r} \alpha_g(z_i, r) v_g(z_i, r) dr}{\int_0^{\Delta_r} \alpha_g(z_i, r) dr}, \quad (5.11)$$

donde z_i es la altura medida desde el tapón. La razón de calcular el promedio radial pesado con la fracción de volumen, se debe a que los datos experimentales para cada altura son escasos y tomados en torno al eje de la cuchara ($\Delta_r = 20 \text{ mm}$).

La diferencia que se observa en posiciones cercanas al tapón (50 y 100 mm) entre el modelo de mezcla y los datos experimentales pueden deberse a que la velocidad de deslizamiento es considerada constante y uniforme, o sea, no se tiene en cuenta en la determinación de la velocidad de deslizamiento el aporte de la aceleración convectiva de la mezcla debido a la reducción de la sección efectiva de la pluma para alturas cercanas al tapón.

Otra causa puede deberse al fenómeno de arrastre que se produce cuando la estela de las burbujas afecta a aquellas que viajan por detrás de las primeras, ocasionando que las burbujas viajen a una velocidad superior a la que predicen ambos modelos (dado que los mismos no tienen en cuenta dicho efecto).

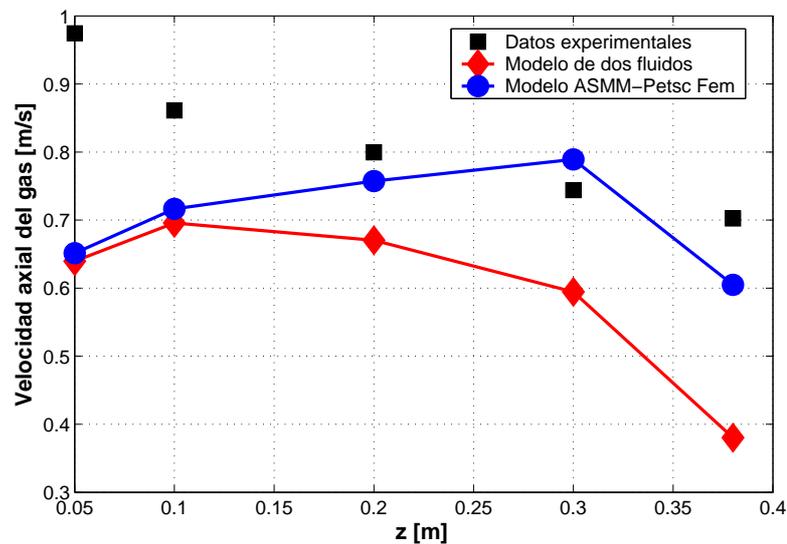


Figura 5.10: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—○—), modelo de dos fluidos (—◇—) y datos experimentales (□) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad promedio de ascenso de las burbujas en función de la coordenada axial.

En las Figs. 5.11-5.14 se compara la velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para alturas medidas desde el tapón de 100, 200, 300 y 380 mm respectivamente. Nuevamente se observan las mayores diferencias para alturas cercanas al tapón (Figs. 5.11 y 5.12), presentando el modelo de dos fluidos un mejor acuerdo con los datos experimentales.

Los valores de la velocidad axial del líquido son determinados satisfactoriamente por el modelo ASMM para una altura de 300 mm (Fig. 5.13, página siguiente). Para esta altura el modelo de dos fluidos subestima la velocidad axial de líquido, siendo esta discrepancia más significativa en la zona central.

En la Fig. 5.14 (páginas siguientes) se muestra la velocidad axial del líquido para una altura de 380 mm. Los resultados obtenidos por el modelo ASMM logran describir la tendencia de los datos experimentales, pero los subestima para todo el radio. Esta diferencia puede deberse principalmente a que no se está modelando la superficie libre, por lo tanto al ser una superficie plana con una condición de deslizamiento (tensiones de corte nulas) se produce una reducción en la velocidad con un aumento de la presión local.

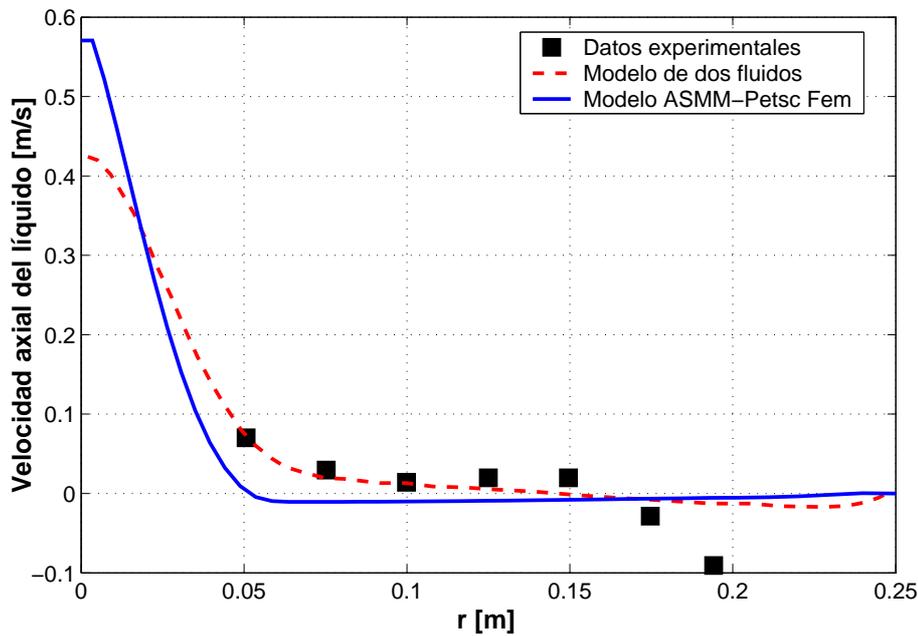


Figura 5.11: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (□) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm.

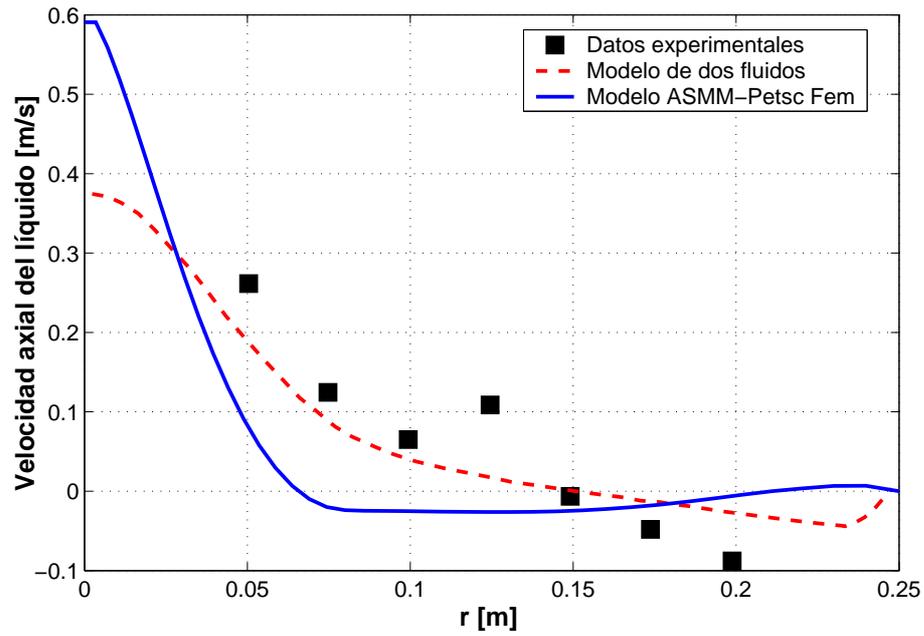


Figura 5.12: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM(—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm.

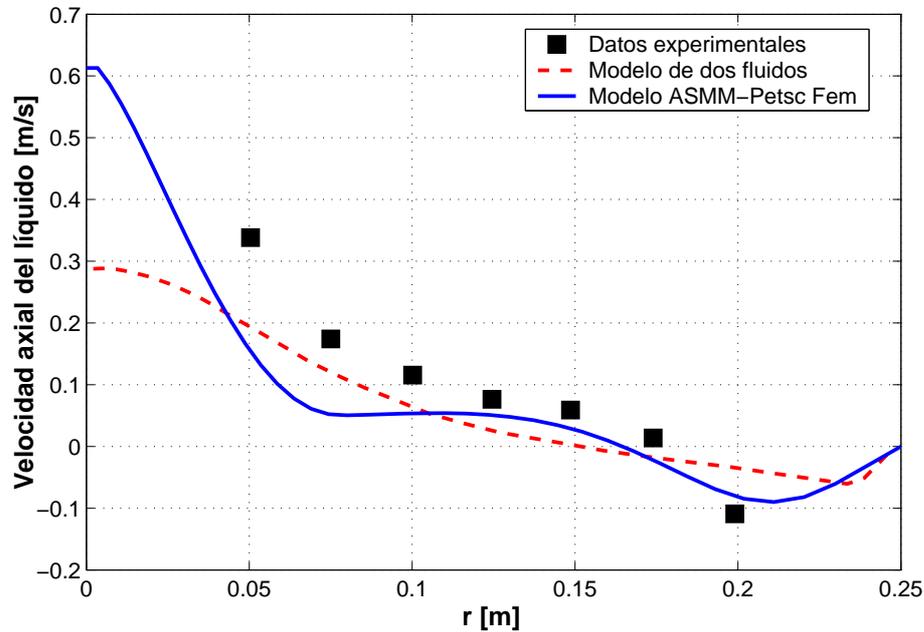


Figura 5.13: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm.

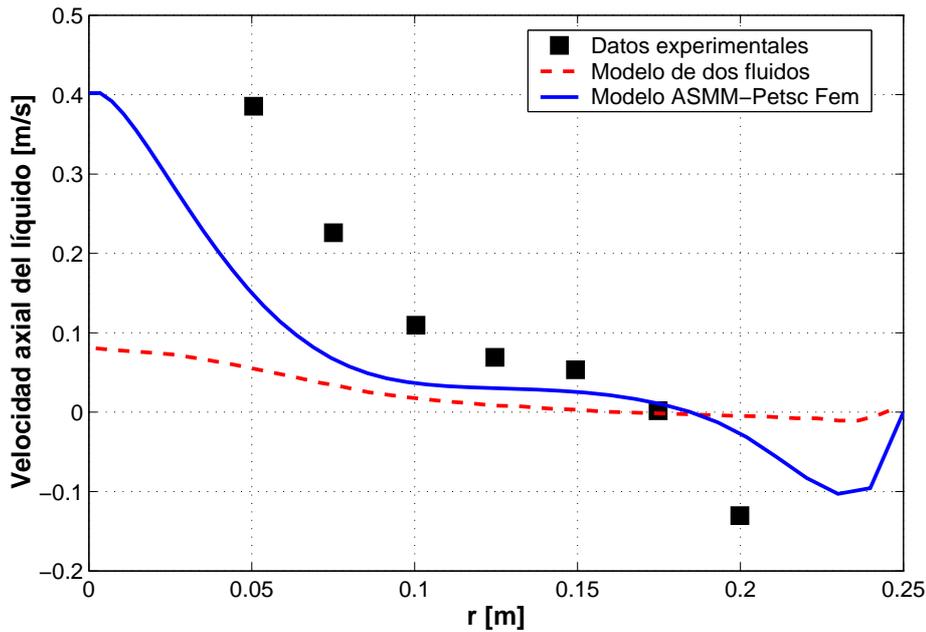


Figura 5.14: Comparación del modelo ASMM-PETSc-FEM (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm.

5.3. Cuchara Siderúrgica

Como se mencionó en la introducción, el objetivo final de este Capítulo es poder determinar el grado de precisión del modelo numérico para reproducir los fenómenos que tienen lugar en la cuchara siderúrgica.

5.3.1. Descripción del Problema Industrial

El sistema multifásico está constituido por tres fases, una fase continua de *acero* y dos fases dispersas (*escoria* y *argón*). Si se analiza el proceso desde que las burbujas se forman en el tapón, podemos observar que las mismas ascienden transfiriendo cantidad de movimiento al fluido, llegando a la interfaz acero-escoria y escapando luego de la superficie de la cuchara hacia la atmósfera.

La cuchara tiene una capacidad de 100 t de acero, siendo su geometría cilíndrica con un radio de 1.5 m y llena de acero líquido hasta una altura de 2.3 m. La superficie libre es cubierta por una capa de escoria (impidiendo el contacto directo del acero con la atmósfera) cuyo espesor inicial es de 0.1 m. El argón es inyectado a través de un tapón con rendijas (radio del tapón $r_0 = 0.051$ m), siendo los caudales utilizados en la simulación $Q = 35, 80, 120$ y 160 l min^{-1} . Para la resolución del problema se asumieron las siguientes

hipótesis:

Hipótesis:

1. **Proceso Isotérmico** a 1873 K. Por lo que no se encuentra presente en el modelo computacional la ecuación de conservación de energía.
2. **Diámetro de burbuja constante.** El diámetro medio de las burbujas se determinó a partir de los valores obtenidos en la simulación realizada por Lage Jonsson [Jon98], siendo dicho valor igual a 25 mm.
3. **Diámetro de las gotas de escoria.** Éstas fueron consideradas como esferas rígidas con un diámetro medio de 5 mm determinado a partir de modelos físicos en frío [CS01].
4. **Régimen de burbujeo dinámico.** [LMS04]
5. **Hipótesis de mezcla.**
6. **Libre de la expansión del gas.** O sea, se despreció el trabajo desarrollado por el gas sobre el líquido durante el proceso de formación de la burbuja, dado que el fenómeno es fuertemente dominado por las fuerzas de flotación [TF91].
7. **Problema axisimétrico sin superficie libre.**

5.3.2. Malla

La malla que se utilizó es del tipo estructurada con elementos hexaédricos (Fig. 5.15, página siguiente). El número de elementos en la dirección radial, axial y azimutal fue respectivamente $N_r = 60$, $N_z = 80$ y $N_\theta = 1$.

La malla se refinó hacia el eje de axisimetría como así también hacia la superficie libre y base de la cuchara. Los resultados presentados corresponden a un solo elemento en la dirección azimutal.

5.3.3. Condiciones de Contorno e Iniciales

Se utilizaron las mismas condiciones de borde del problema anterior (agua-aire), Ecs. 5.6-6.29, salvo por una modificación en la condición de borde para la fracción de gas en el tapón

$$0 < r \leq r_0 ; z = 0 : \left\{ \alpha = 0.95^* \right. . \quad (5.12)$$

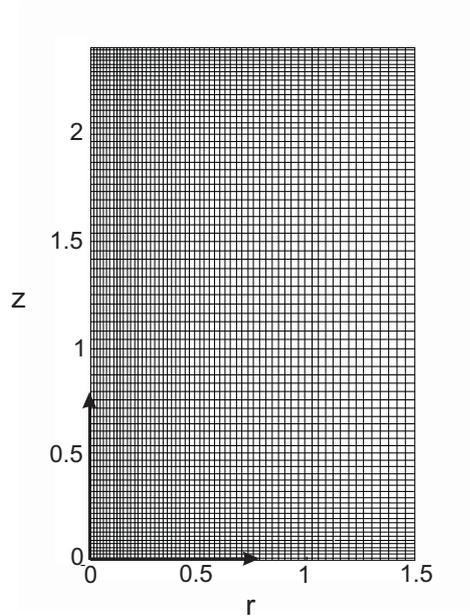


Figura 5.15: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Malla de elementos hexaédricos con $N_r = 60$, $N_z = 80$ y $N_\theta = 1$.

A las anteriores se le agregaron las siguientes condiciones de borde debido a la presencia de la tercera fase (escoria)

$$r = 0 ; 0 < z < H : \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \alpha_{es}}{\partial r} = 0 \end{array} \right. \quad (5.13)$$

$$0 < r < R ; z = 0 : \{ \alpha_{es} = 0$$

*Nota: para este problema se asumió una fracción de vacío igual a 0.95, dado que hasta este momento no es de nuestro conocimiento la existencia de mediciones experimentales para la condición de trabajo u otra que permita extrapolarla [IUU95]. Por lo tanto el valor de la fracción de vacío que se adoptó, surgió de observaciones experimentales en un modelo físico en frío agua-aire de una cuchara siderúrgica a escala 1:1.

5.3.4. Datos Físicos

A) Densidad y viscosidad

La densidad y viscosidad de los distintos componentes del sistema multifásico son función de la temperatura T , por lo tanto se los determinó a partir de la hipótesis de proceso isotérmico a 1873 K. En el Cuadro 5.2 se presentan las expresiones que se utilizaron

para el cálculo de la viscosidad y densidad como así también los correspondientes valores que se obtuvieron.

Fase	Dato físico	Expresión	Ref.	Valor a T= 1873 K
Acero	Densidad	$\rho_{ac} = 8.586 \times 10^3 - 0.857T$	[Ke88]	6982 kg m ⁻³
	Viscosidad	$\mu_{ac} = 3.147 \times 10^{-4} \exp\left(\frac{46480}{8.3144T}\right)$	Falta	6.2×10^{-4} kg m ⁻¹ s ⁻¹
Escoria	Densidad	$\rho_{es} = 2977.6 - 0.154T$	[Jon98]	2960 kg m ⁻³
	Viscosidad	$\mu_{es} = 4.191 \times 10^{-5} \exp\left(\frac{16402.2}{T}\right)$	[Jon98]	0.266 kg m ⁻¹ s ⁻¹
Argón	Densidad	Ecuación de estado	[Jon98]	1.23 kg m ⁻³
	Viscosidad	$\mu_{Ar} = \mu_{Ar}^{ref} \left(\frac{T}{T^{ref}}\right)^{0.72}$	[MC03]	8.531×10^{-5} kg m ⁻¹ s ⁻¹

Cuadro 5.2: Viscosidad y densidad para las distintas fases.

B) Velocidad de deslizamiento

La velocidad de deslizamiento de las burbujas de argón y las gotas de escoria se determinó utilizando las correlaciones empíricas [MG95] expuestas en el Cuadro 5.3.

-	Expresión	Valor
Argón	$v_{Ar}^{Slip} = 1.08 \left(\frac{g d_{Ar}}{2}\right)^{1/2}$	0.378 m s ⁻¹
Escoria**	$v_{es}^{Slip} = \left(\frac{(\rho_{ac} - \rho_{es})}{(\rho_{ac} - \rho_{Ar})}\right)^{1/2} 1.08 \left(\frac{g d_{es}}{2}\right)^{1/2}$	0.133 m s ⁻¹

Cuadro 5.3: Velocidad de deslizamiento del argón y la escoria.

**Nota: Dado que por el momento no contamos con una expresión analítica o correlación empírica para determinar la velocidad de deslizamiento de la escoria, determinamos la misma a partir de la velocidad de deslizamiento de las burbujas de argón, suponiendo que la relación entre las velocidades de deslizamiento de las fases es la misma que la que existe para las velocidades terminales en el acero de esferas rígidas en régimen turbulento ($750 < Re_b < 3.50 \times 10^5$).

5.3.5. Área de Apertura del Ojo en la Escoria

El área de apertura del ojo en la escoria está íntimamente asociada al volumen de escoria que sobrenada en la cuchara y afecta en gran medida a la eficiencia del proceso [Jon98], por lo que una determinación precisa de la misma es crucial para conocer la cantidad de escoria atrapada durante la etapa de agitado fuerte. Cuando la capa de escoria es fina y el caudal de gas es elevado (agitado fuerte), el acero líquido que llega a la interfaz acero-escoria desplaza a la escoria en forma radial (Fig. 5.16), provocando que el metal se ponga en contacto con la atmósfera. El área de la sección transversal aproximadamente circular expuesta a la atmósfera se denomina *área de apertura del ojo* A_o .

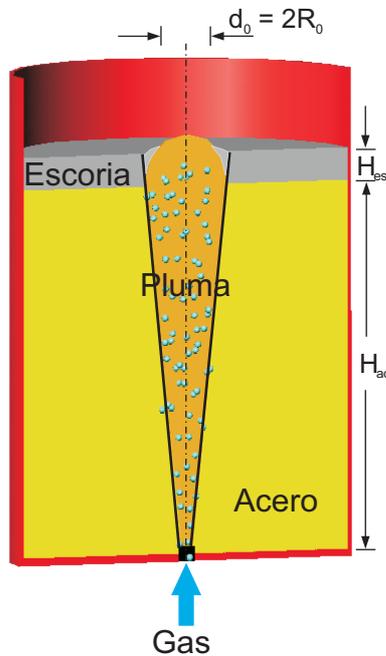


Figura 5.16: Representación esquemática de una cuchara siderúrgica para un agitado fuerte.

Para calcular el área de apertura del ojo A_o , se definió al radio R_0 como la distancia que existe desde el centro de la cuchara a un punto de la superficie cuya fracción de escoria es igual a un 99%. En la Fig. 5.17 (página siguiente) se muestra el campo de fracción de escoria para los caudales de argón de 35, 80, 120 y 160 l min^{-1} ; como se puede observar se acota en cada figura los respectivos radios de apertura del ojo. Los resultados numéricos indican un incremento en el radio de apertura del ojo conforme aumenta el caudal, siendo nula la apertura del ojo para un caudal de 35 l min^{-1} .

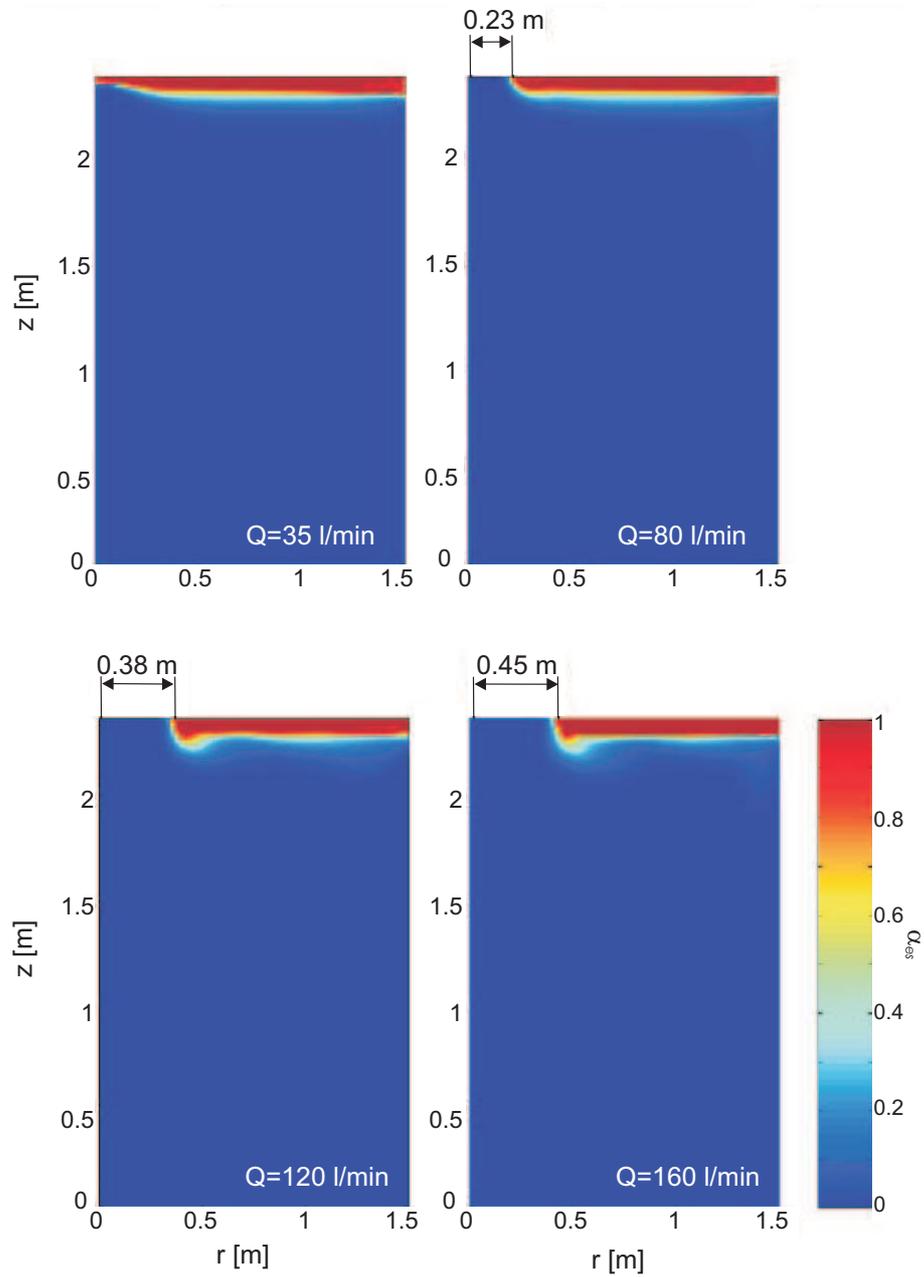


Figura 5.17: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Fracción de escoria y radio de apertura del ojo para $Q = 35$ (a), 80 (b), 120 (c), 160 (d) l min^{-1} .

Con un caudal de 160 l m^{-1} se determinó un área de apertura del ojo $A_0 = 0.634 \text{ m}^2$ siendo su radio $R_0 = 0.449 \text{ m}$. Los resultados obtenidos por Jonsson et al. [Jon98] son $A_0 = 0.126 \text{ m}^2$ y $R_0 = 0.20 \text{ m}$. La gran diferencia que se observa posiblemente se deba al modelo de dos fluidos utilizado en el trabajo de referencia para el flujo multifásico. Dado que no se considera en el modelo las fuerzas de non-drag (lift, masa virtual, etc) que influyen notablemente sobre la apertura de la pluma, tal como es reportado por Mendez et al. [MNC02].

Por otra parte, es posible determinar el área de apertura del ojo a partir de expresiones empíricas derivadas de modelos físicos en frío (agua-aire-kerosene) por Iguchi et al. [IMY+04]. Estas expresiones tienen en cuenta las propiedades físicas del acero, escoria y del argón inyectado

$$A_0/H_{ac}^2 = 0.600 - 0.652 \left[\frac{2g(\rho_{ac} - \rho_{es})H_{es}}{\rho_{ac}u_{ac,cl}^2} \right], \text{ para } \left[\frac{2g(\rho_{ac} - \rho_{es})H_{es}}{\rho_{ac}u_{ac,cl}^2} \right] < 0.7, \quad (5.14)$$

$$\log A_0/H_{ac}^2 = -0.222 - 0.741 \left[\frac{2g(\rho_{ac} - \rho_{es})H_{es}}{\rho_{ac}u_{ac,cl}^2} \right], \text{ para } \left[\frac{2g(\rho_{ac} - \rho_{es})H_{es}}{\rho_{ac}u_{ac,cl}^2} \right] < 4. \quad (5.15)$$

Siendo ρ_{ac} y ρ_{es} las densidades del acero y la escoria respectivamente, H_{ac} y H_{es} las alturas de la columna de acero y escoria respectivamente y $u_{ac,cl}$ la velocidad del acero en el eje de la cuchara. En el Cuadro 5.4 se comparan los resultados que se obtuvieron en la simulación numérica para los distintos caudales con los correspondientes empíricos. Los resultados que se determinaron para los caudales de 120 y 160 l min^{-1} son satisfactorios, con un error porcentual en el radio de apertura de ojo de 22 y 4% respectivamente. Para el caudal de 80 l min^{-1} , no fue posible realizar la comparación, porque las expresiones empíricas están fuera de su límite de aplicación.

-	A_0^{80}	R_0^{80}	A_0^{120}	R_0^{120}	A_0^{160}	R_0^{160}
Calculado	0.1642	0.2286	0.4477	0.3775	0.6339	0.4492
Empírico	-	-	0.3027	0.3104	0.5934	0.4346

Cuadro 5.4: Comparación entre resultados empíricos y valores calculados del área y radio de apertura del ojo (A_0^i [m^2] y R_0^i [m]).

5.3.6. Atrape de Escoria

Las reacciones químicas entre dos líquidos inmiscibles en sistemas agitados por inyección de un gas son de considerable interés en la industria siderúrgica. Un gran número de trabajos experimentales [MG95] han sido llevados a cabo con la finalidad de clarificar la relación existente entre las reacciones químicas y el atrape de escoria para la interfaz acero-escoria en cucharas siderúrgicas, dado que las mismas influyen considerablemente en la obtención de un acero de buena calidad.

Los modelos numéricos como herramienta de desarrollo son de gran importancia para el estudio del atrape de escoria en conjunción con modelos físicos. Modelos físicos en frío han sido utilizados para predecir el fenómeno de transferencia de masa entre la escoria y el acero en cucharas siderúrgicas, donde agua y aceites vegetales son utilizados como fluidos de modelado para representar al acero y escoria respectivamente.

Sin embargo, muchos de estos estudios no son de relevancia directa sobre la operación de la cuchara siderúrgica, dado que las condiciones del experimento (caudales, configuración de los tapones, etc.) no corresponden exactamente a las que existen en la cuchara. Por lo tanto simulaciones numéricas reproduciendo las mismas condiciones que las existentes en la planta pueden resultar un medio muy eficiente para conocer la dependencia del atrape de escoria con los parámetros de la cuchara (relación de aspecto, caudal, etc.) en pos de lograr resultados que sean de implicancia directa.

Durante el agitado fuerte, ligamentos y gotas tienden a formarse en la interfaz acero-escoria originando un incremento significativo del área interfacial, afectando por ende a la reacción química.

A continuación presentamos dos métodos que nos permiten estimar la dispersión de escoria en el metal durante el agitado por inyección de argón. Estos son: la velocidad crítica de atrape y el número de Weber.

Velocidad Crítica de Atrape de Escoria

El atrape de escoria en el acero tiene lugar en mayor medida en la zona adyacente al ojo (Apéndice B - *Análisis del fenómeno físico de atrape de escoria*), donde el acero líquido en su retorno al núcleo arrastra gotas y ligamentos de la capa de escoria debido a las altas tensiones de corte. Por este motivo resulta de interés práctico poder determinar el campo de velocidades del acero en torno a la interfaz acero-escoria para las distintas condiciones de flujo, pudiendo predecir si existe o no atrape.

La utilización de la velocidad crítica como estimador de atrape de escoria en la simulación numérica surgió a partir de la idea de combinar los estudios siderúrgicos experimentales realizados por Iguchi et al. [IYSM00] con las herramientas computacionales, ya que estas últimas permiten determinar la velocidad del acero en torno a la capa de escoria.

A continuación se calcula la velocidad interfacial crítica necesaria para remover gotas o ligamentos de escoria, expresada por medio de la siguiente ecuación (ver [IYSM00])

$$V_{crit}^{Inter} = \left(48 \sigma_{ac,es} g \frac{(\rho_{ac} - \rho_{es})}{\rho_{es}^2} \right)^{1/4}, \quad (5.16)$$

donde $\sigma_{ac,es}$ es la tensión superficial entre el acero y la escoria, la que actúa como estabilizador de la interfaz. Empleando los datos físicos correspondientes al problema y siendo $\sigma_{ac,es} = 0.12 \text{ N m}^{-1}$, la velocidad interfacial crítica es igual a $V_{crit}^{Inter} = 0.427 \text{ m s}^{-1}$.

En la Fig. 6.23 se presenta el módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para caudales de 80, 120 y 160 l min^{-1} . Para los caudales de 120 y 160 l min^{-1} la velocidad interfacial del acero en la zona de apertura del ojo se encontró comprendida entre 0.6 – 0.7 m s^{-1} , resultando la misma superior a la crítica, por lo que en dicha zona existe atrape de escoria tal como se reporta en la Tesis de Jonsson [Jon98]. Cuando $Q = 80 \text{ l min}^{-1}$ el valor determinado de la velocidad interfacial del acero en la zona de apertura del ojo fue de 0.5 m s^{-1} . La velocidad interfacial es muy cercana a la velocidad crítica de atrape de escoria; sin embargo, se observó que existe dispersión de escoria en el acero del mismo orden que para los dos caudales superiores.

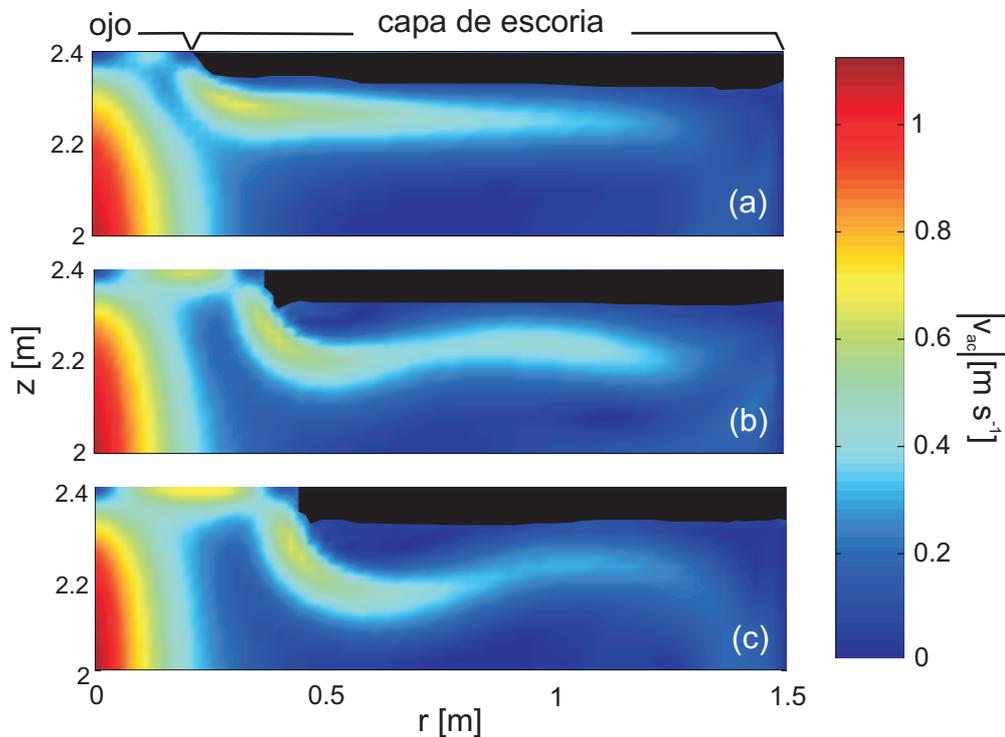


Figura 5.18: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1} .

Para $Q = 80 \text{ l min}^{-1}$ el mecanismo de atrape parece no ser debido al atrape estacionario de escoria (Fig. B.2), sino que resulta de inestabilidades del tipo Kelvin-Helmholtz (de aquí en adelante KHI). Esta condición de flujo presenta dos ventajas. La primera es que el área del acero líquido expuesta a la atmósfera es menor, reduciendo la contaminación del acero. La segunda ventaja de este caudal, radica en que se logra un atrape de escoria del mismo orden que para caudales superiores dado que existe otro mecanismo de atrape de escoria. Este nuevo mecanismo no provoca un cambio abrupto en la dirección del flujo, por lo tanto la pérdida de carga es menor y no existe zona de recirculación (acumulación de escoria). Si se analiza el patrón de velocidades del acero en conjunción con la fracción de la escoria (Fig. 5.19) se observa que la escoria una vez desprendida es arrastrada por el acero en dirección paralela a la capa de escoria, descendiendo en dirección a la pared por el macrovórtice que la termina impulsando hacia el seno de la cuchara.

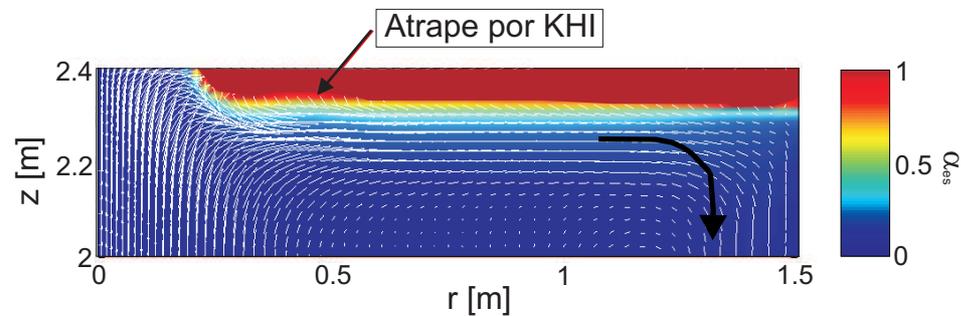


Figura 5.19: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Patrón de velocidades y campo de fracción de escoria para $Q = 80 \text{ l min}^{-1}$.

Número de Weber

La capa de escoria que está sujeta a las fluctuaciones del flujo de acero líquido puede, bajo ciertas condiciones, deformarse y eventualmente desprender gotas o ligamentos de escoria. Las fuerzas de inercia que son inducidas por las fluctuaciones tienen un efecto desestabilizador sobre la capa de escoria, mientras que la fuerza debida a la tensión superficial tiene la tendencia de mantener la forma de la capa, o sea, actúa como mecanismo de estabilización. La relación de estas fuerzas es conocida como número adimensional de Weber, quedando definido por

$$We = \frac{v_{r,ac}^2 \rho_{ac}}{\sqrt{\sigma_{ac,es} g (\rho_{ac} - \rho_{es})}}, \quad (5.17)$$

siendo $v_{r,ac}$ la velocidad radial del acero.

El número de Weber en torno a la interfaz acero-escoria es utilizado como un indicador del atrape de escoria en el acero. Usando modelos físicos, Xiao et al. ([XPL87]) establecen que el atrape de escoria en el acero se inicia cuando el número de Weber es igual o mayor a 12.3.

En la Fig. 5.20 se muestra el número de Weber e isocurvas de fracción de vacío $[0.005 : 0.005 : 0.05]$ para los caudales que se tiene apertura del ojo. Como se observa el número de Weber en torno a la pluma adquiere valores superiores a 12.3, indicando como se vió en el apartado anterior que en dicha zona existe atrape de escoria. Para los caudales $Q = 120, 160 \text{ l min}^{-1}$ se observa una región con valores de número de Weber mayores a 12.3 más concentrada en la zona de apertura del ojo, mientras que para $Q = 80 \text{ l min}^{-1}$ esta región se extiende en dirección a la capa de escoria, lo que en cierto modo confirma que en dicha zona se produce desprendimiento por KHI.

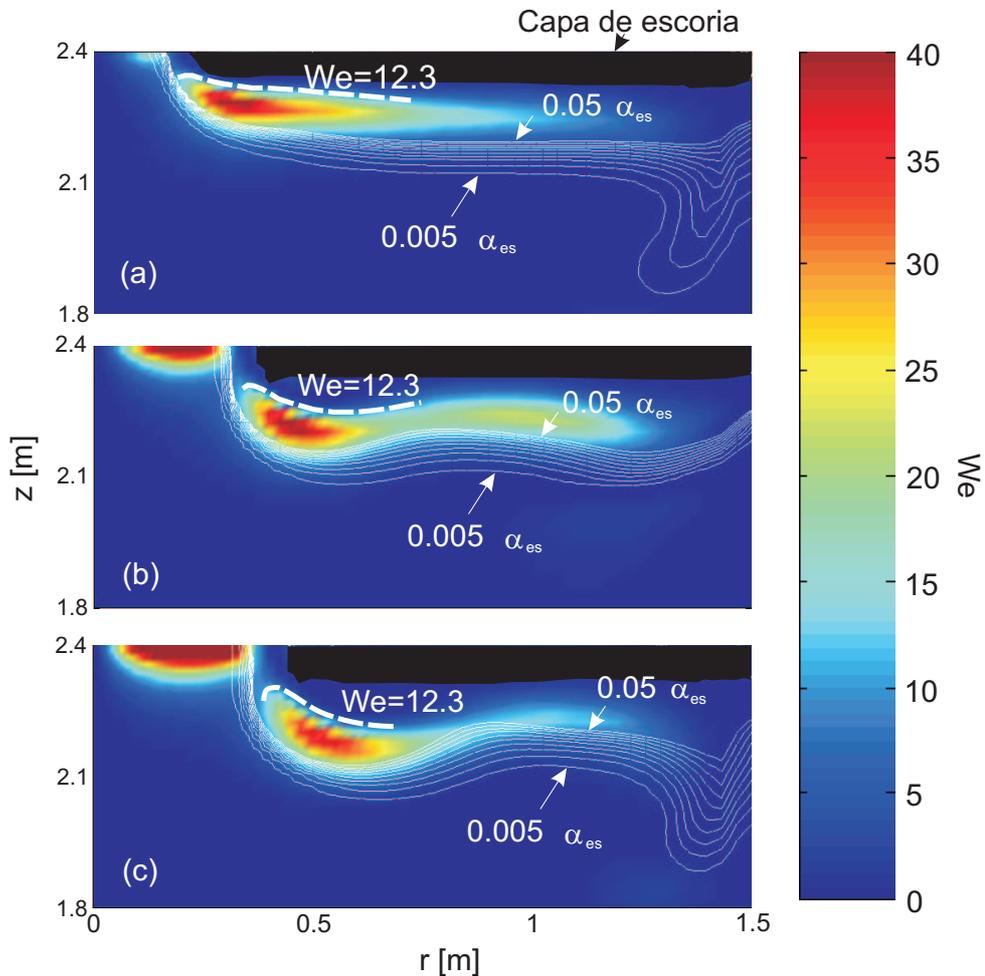


Figura 5.20: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t acero. Número de Weber e isocurvas de fracción de escoria $[0.005 : 0.005 : 0.05]$ para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1} .

Tal como se expresó anteriormente, se observa que la dispersión de escoria para $Q = 80$ l min^{-1} , es del mismo orden que la existente para caudales superiores.

Capítulo 6

Modelo Híbrido ASMM - Dos fluidos

6.1. Introducción

Durante el desarrollo de la Tesis, se han determinado diversos puntos notables, de índole física, matemática y/o numérica. Los mismos, se exponen a continuación:

1. El flujo multifásico en una cuchara siderúrgica es del tipo de transición. En la pluma, existe una mezcla de dos fases una continua dada por el acero en estado líquido y otra dispersa dada por el argón inyectado a través de un tapón poroso. El argón asciende en forma de burbujas cuyo diámetro medio se estimó en 25 mm. Durante su ascenso transfiere cantidad de movimiento al acero y produce el movimiento de circulación del mismo.

La superficie libre esta cubierta por una fina capa de escoria que impide el contacto directo del acero con la atmósfera. En la zona adyacente al ojo, entre las fases de acero y de escoria se desarrolla una capa de mezcla [CUW99] donde se produce el atrape de escoria. Al alejarse en forma radial del ojo se encuentra la zona de flujo separado donde existe una interfaz bien definida entre el acero y la escoria.

2. En torno al tapón poroso, por donde se inyecta el gas a una velocidad aproximada de 16 m s^{-1} , la relación de densidad entre el acero y el argón es del orden de 15000:1 y la fracción de vacío considerablemente alta.
3. El modelo dos fluidos ([Ish75] y [DP98]) presenta problemas debido a su mala postura matemática ([SI01], [DNT03] y [ZMNS04]), generando inestabilidades que se propagan en el dominio cuando se presentan situaciones desfavorables tales como elevadas relaciones de densidad, velocidad y fracciones de vacío altas.
4. El estado actual de aplicación del modelo dos fluidos para elevados valores de fracción de vacío y problemas análogos a los de la presente Tesis, puede ser vistos en

el trabajo realizado por Issa et al. [WIG94]. En el mismo, se incorporan para regularizar el modelo de dos fluidos, las fuerzas de non-drag, funciones para el coeficiente de drag que dependen de la fracción de vacío y un modelo de turbulencia $\kappa - \epsilon$ para flujos multifásicos. Con estos medios los autores pueden resolver en forma precisa valores de fracción de vacío no mayores al 25 %.

5. El modelo de mezcla presenta buena precisión para resolver flujos multifásicos dominados por la boyancia (ver Capítulo 5).
6. La relación de densidad entre el acero y la escoria es de 2:1, con velocidades relativas no superiores a 1 m s^{-1} .

Por lo tanto, en virtud de lo expresado, en el presente Capítulo se propone una estrategia distinta para la resolución del flujo multifásico en la cuchara siderúrgica. Se implementó en el código comercial CFX [AEA04] un modelo híbrido, compuesto por el modelo ASMM (Algebraic Slip Mixture Model) y el modelo de dos fluidos.

La resolución del flujo multifásico acero-argón, se realizó utilizando un modelo ASMM, que como se ha expuesto, es apto para resolver flujos dominados por la boyancia. La interacción entre la escoria y la mezcla (acero-argón), es computada utilizando un modelo de dos fluidos. La razón se debe principalmente a la baja relación de densidad y velocidad relativa entre la escoria y la mezcla, estando el modelo de dos fluidos bien puesto para este juego de parámetros [SI01].

A continuación se presenta la formulación matemática del modelo híbrido ASMM-dos fluidos, utilizando para la resolución de la turbulencia un modelo de dos ecuaciones $\kappa - \epsilon$, el cual está expresado en términos de las variables de la mezcla. Además, se exponen los aspectos generales correspondientes a la discretización de las ecuaciones de balance.

Se utiliza el problema de Anagbo y Brimacombe [AB90] para validar el modelo de mezcla en CFX. Por último, se resuelve el flujo en una cuchara siderúrgica para los dominios axisimétrico y 3D, con y sin superficie libre.

6.2. Modelo Híbrido ASMM-Dos Fluidos

En la presente sección se desarrolla la formulación matemática del modelo híbrido ASMM-dos fluidos, utilizado para resolver el flujo en una cuchara siderúrgica. Básicamente el modelo resulta de la combinación de dos tipos de aproximación para resolver flujos multifásicos.

El modelo de dos fluidos es utilizado para resolver el flujo multifásico escoria-mezcla, donde la interacción entre las dos fases se descompone en la fuerza de drag y las fuerzas de

non-drag. Si bien la interacción entre las fases es debida principalmente a la fuerza de drag, las fuerzas de non-drag (tales como la fuerza de masa virtual, la fuerza de lift y la fuerza de dispersión turbulenta) son importantes y deben ser consideradas. Si analizamos la física del problema de atrape de escoria (Apéndice B), podemos observar que cuando las gotas o los ligamentos se desprenden tienden a acelerarse, siendo afectada su distribución por los niveles de turbulencia de la fase continua (efecto debido a la masa virtual y dispersión turbulenta respectivamente). Por otro lado, el efecto de lift está presente por variaciones en el campo de velocidad y que en última instancia también determina la distribución de escoria.

El cómputo del flujo bifásico acero-argón se realiza con un modelo de mezcla ASMM. Para este modelo, se consideró que la velocidad de deslizamiento es la misma para cualquier punto del dominio de cálculo.

6.2.1. Formulación Matemática del Modelo Híbrido ASMM-Dos Fluidos

A continuación se exponen las ecuaciones de balance de masa y cantidad de movimiento lineal para cada una de las fases. Los subíndices *es*, *m* y *ar* representan a la escoria, la mezcla y el argón respectivamente.

Escoria

Ecuación de Balance de Masa

$$\frac{\partial(\alpha_{es}\bar{\rho}_{es})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{es}\bar{\rho}_{es}\tilde{\mathbf{v}}_{es}) = 0. \quad (6.1)$$

Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento Lineal

$$\frac{\partial(\alpha_{es}\bar{\rho}_{es}\tilde{\mathbf{v}}_{es})}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_{es}\bar{\rho}_{es}\tilde{\mathbf{v}}_{es} \otimes \tilde{\mathbf{v}}_{es}) = -\alpha_{es}\nabla\bar{p} + \nabla \cdot (\alpha_{es}\bar{\boldsymbol{\tau}}_{es}) + \alpha_{es}\bar{\rho}_{es}\mathbf{g} + \mathbf{M}'_{es}, \quad (6.2)$$

donde α , $\bar{\rho}$ y $\tilde{\mathbf{v}}$ son la fracción de volumen, densidad promedio y velocidad promedio respectivamente.¹ El término \mathbf{M}' es el promedio de la fuente de cantidad de movimiento lineal interfacial, el mismo está compuesto por las fuerzas de drag y non-drag.² Los símbolos sobre las variables representa los operadores de promediado (para más detalles

¹ Se omiten los subíndices debido a que las definiciones son válidas para cualquiera de las fases presentes.

² No existe transferencia de cantidad de movimiento lineal debido al cambio de fase.

consultar el Capítulo 2). En la Ec. 6.2, $\bar{\tau}$ es el tensor de tensiones viscoso total, cuya expresión está dada por

$$\bar{\tau}_{es} = \bar{\tau}_{es}^D + \tau_{es}^{Re} = (\mu_{es} + \mu_{Tes}) (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_{es} + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_{es})^T) + \frac{2}{3} \bar{\rho}_{es} \kappa_M \mathbf{I}, \quad (6.3)$$

donde $\bar{\tau}^D$ es la componente deviatórica del tensor de tensiones molecular promediado y τ^{Re} es el tensor de tensiones de Reynolds.

Mezcla (acero-argón)

Ecuación de Balance de Masa

$$\frac{\partial(\alpha_m \bar{\rho}_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_m \bar{\rho}_m \tilde{\mathbf{v}}_m) = 0, \quad (6.4)$$

el balance de masa para el argón se expresa en términos de la fracción de masa, por lo tanto es necesario definir las variables de la mezcla en función de esta última. La velocidad y densidad de la mezcla son expresadas por

$$\tilde{\mathbf{v}}_m = c_{ac} \tilde{\mathbf{v}}_{ac} + c_{ar} \tilde{\mathbf{v}}_{ar}, \quad \frac{1}{\bar{\rho}_m} = \frac{c_{ac}}{\bar{\rho}_{ac}} + \frac{c_{ar}}{\bar{\rho}_{ar}}. \quad (6.5)$$

Ecuación de Balance de Cantidad de Movimiento Lineal

$$\frac{\partial(\alpha_m \bar{\rho}_m \tilde{\mathbf{v}}_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_m \bar{\rho}_m \tilde{\mathbf{v}}_m \otimes \tilde{\mathbf{v}}_m) = -\alpha_m \nabla \bar{p} + \nabla \cdot (\alpha_m (\bar{\tau}_m + \bar{\tau}_m^{Diff})) + \alpha_m \bar{\rho}_m \mathbf{g} + \mathbf{M}'_m, \quad (6.6)$$

donde el tensor de tensiones viscoso total para la mezcla está dado por

$$\bar{\tau}_m = \bar{\tau}_m^D + \tau_m^{Re} = (\mu_m + \mu_{Tm}) (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_m + (\nabla \tilde{\mathbf{v}}_m)^T) + \frac{2}{3} \bar{\rho}_m \kappa_M \mathbf{I}, \quad (6.7)$$

siendo la viscosidad molecular para la mezcla $\mu_m = \alpha_{ac} \mu_{ac} + \alpha_{ar} \mu_{ar}$. El tensor de difusión es definido como

$$\tau_m^{Diff} = -\alpha_{ar} \bar{\rho}_{ar} (\tilde{\mathbf{v}}_{ar} - \tilde{\mathbf{v}}_m) \otimes (\tilde{\mathbf{v}}_{ar} - \tilde{\mathbf{v}}_m). \quad (6.8)$$

Restricción algebraica entre la escoria y la mezcla

$$\alpha_{es} + \alpha_m = 1. \quad (6.9)$$

Argón

La ecuación de balance de masa en términos de la fracción de masa para el argón es expresada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_m \bar{\rho}_m c_{ar}) + \nabla \cdot (\alpha_m \bar{\rho}_m c_{ar} (\tilde{\mathbf{v}}_m + \mathbf{v}_{Mar})) = \nabla \cdot (\alpha_m \frac{\mu_{Tm}}{Sc_{ar}} \nabla c_{ar}), \quad (6.10)$$

donde c_{ar} representa la fracción de masa, μ_{Tm} la viscosidad turbulenta de la mezcla y Sc_{ar} el número de Schmidt para el argón. Siendo el argón la única fase dispersa en la mezcla, la velocidad de difusión necesaria para resolver la ecuación anterior es igual a

$$\mathbf{v}_{Mar} = (1 - c_{ar})v_{ar}^{Slip}. \quad (6.11)$$

Con la restricción algebraica entre el acero y el argón

$$c_{ac} + c_{ar} = 1. \quad (6.12)$$

6.2.2. Modelo de Turbulencia $\kappa - \epsilon$ Homogéneo

En el código CFX es posible resolver un único modelo de turbulencia de dos ecuaciones $\kappa - \epsilon$ para todas las fases del flujo multifásico, denominado *modelo de turbulencia $\kappa - \epsilon$ homogéneo*. Este modelo es el mismo que se utiliza para las ecuaciones de una sola fase (Ver Turbulence Models-p.67 en ANSYS CFX-Solver, Release 5.7:Theory [AEA04]), excepto por las cantidades de la mezcla (densidad, viscosidad y velocidad) las que se definieron en la sección 4.2. Este modelo de turbulencia es recomendado para modelar flujos separados, flujos estratificados y cualquier otra situación donde los flujos tiendan a separarse.

En el modelo $\kappa - \epsilon$ la viscosidad dinámica turbulenta para la fase genérica k , es definida como

$$\mu_{Tk} = C_\mu \bar{\rho}_k \frac{\kappa_k^2}{\epsilon_k}, \quad (6.13)$$

donde la constante $C_\mu = 0.09$. El modelo homogéneo asume que $\kappa_k = \kappa_M$ y $\epsilon_k = \epsilon_M$, donde $1 \leq k \leq N_P$, siendo N_P el número de fases. El subíndice M representa la mezcla, que en este caso está constituida por las fases escoria-mezcla.

Recientes datos experimentales sugieren que cuando la fracción de volumen de la fase dispersa aumenta más allá de cierto límite, el cual podría ser tan pequeño como un 6 %, el

coeficiente de respuesta³ se aproxima a valores constantes (ver [GLM01] y [LRS01]). Esto implica que ambas fases fluctúan al unísono como una sola entidad y consecuentemente el uso de un solo set de ecuaciones para la mezcla de la fase continua y las fases dispersas, es apropiado.

6.2.3. Término de Cantidad de Movimiento Lineal Interfacial

Como ya se ha mencionado el término de transferencia de cantidad de movimiento lineal interfacial es descompuesto en las fuerzas de drag y las fuerzas de non-drag, siendo expresado como

$$\mathbf{M}'_k = F_k^D + F_k^{ND}. \quad (6.14)$$

En esta sección se presentan los modelos constitutivos empleados para cada una de estas fuerzas. Para el modelado del sistema escoria-mezcla, se considera como fase continua a la mezcla y como fase dispersa a la escoria.

A.- Fuerza de Drag

La fuerza de drag por unidad de volumen para la fase continua es usualmente expresada como

$$F_m^D = -F_{es}^D = \frac{3}{4} \frac{C_D}{d} \alpha_{es} \bar{\rho}_m |\tilde{\mathbf{v}}_{es} - \tilde{\mathbf{v}}_m| (\tilde{\mathbf{v}}_{es} - \tilde{\mathbf{v}}_m), \quad (6.15)$$

donde d es el diámetro de la gota de escoria. Para una partícula de una forma dada que se encuentra en movimiento en un fluido newtoniano incompresible, el C_D depende solamente del número de Reynolds

$$Re = \frac{\bar{\rho}_m v d}{\mu_m}, \quad (6.16)$$

donde μ_m es la viscosidad molecular y ρ_m la densidad de la fase continua (mezcla), d el diámetro de la gota y $v = |\mathbf{v}_{es} - \mathbf{v}_m|$. La dependencia del coeficiente de drag $C_D(Re)$ con el número de Reynolds es obtenida a través de la denominada curva de drag, la cual puede ser determinada en forma experimental. Existen varias expresiones empíricas para esta curva, dependiendo del número de Reynolds del flujo. En esta sección se utiliza una

³ El coeficiente de respuesta es igual a la relación entre la componente fluctuante de la fase dispersa y la componente fluctuante de la fase continua, $C_t = \mathbf{v}'_d / \mathbf{v}'_c$.

modificación de la expresión original de Schiller and Nauman, la cual asegura un correcto comportamiento límite en el rango inercial ($1000 \leq Re \leq 2 \times 10^{-5}$). Por lo tanto el coeficiente de drag es igual a

$$C_D = \max \left[\frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.687}), 0.44 \right], \quad (6.17)$$

el cual es válido en el rango $0 \leq Re \leq 2 \times 10^{-5}$.

B.- Fuerzas de Non-Drag

Cada una de las fuerzas de non-drag modela un efecto físico determinado

$$F_k^{ND} = F_k^{VM} + F_k^L + F_k^{TD} + F_k^{LUB} + F_k^S + \dots, \quad (6.18)$$

las fuerzas indicadas en la expresión anterior son respectivamente, la fuerza de masa virtual, la fuerza de lift, la fuerza de dispersión turbulenta, la fuerza de lubricación de la pared y la fuerza de presión del sólido (solamente para fases densas de partículas sólidas). En este Capítulo sólo se utilizan las tres primeras fuerzas, las cuales son definidas a continuación.

Fuerza de Masa Virtual

La fuerza de masa virtual tiene en cuenta el efecto de la aceleración del líquido desplazado por las gotas, y puede ser modelada como

$$F_m^{VM} = -F_{es}^{VM} = \alpha_{es} \bar{\rho}_m C_{VM} \left(\frac{D_{es} \tilde{\mathbf{v}}_{es}}{Dt} - \frac{D_m \tilde{\mathbf{v}}_m}{Dt} \right). \quad (6.19)$$

El operador D_p/Dt representa la derivada material correspondiente a la fase p (con $p = es, m$). El coeficiente C_{VM} es igual a 0.5 para un flujo invíscido sobre una esfera aislada. Para burbujas este valor es considerablemente más pequeño, y muchas veces este término es despreciado. En los cálculos efectuados en la presente Tesis se consideró al coeficiente de masa virtual $C_{VM} = 0.06$.

Fuerza de Lift

La fuerza de lift aparece cuando la partícula o gota se mueve en un flujo que se encuentra bajo los efectos de las tensiones de corte. Se produce una distribución de presiones

asimétrica sobre la partícula o gota, dando origen a la fuerza de lift. Esta fuerza es expresada en términos de la velocidad relativa y la vorticidad del campo de velocidades de la fase continua

$$F_m^L = -F_{es}^L = \alpha_{es} \bar{\rho}_m C_L (\tilde{\mathbf{v}}_{es} - \tilde{\mathbf{v}}_m) \otimes (\nabla \otimes \tilde{\mathbf{v}}_m). \quad (6.20)$$

El coeficiente C_L es igual a 0.5 para un flujo invíscido sobre una esfera aislada. El coeficiente de lift puede tomar valores tan pequeños como 0.01 para flujos viscosos.

Fuerza de dispersión turbulenta

Esta fuerza aparece como consecuencia del incremento de difusión debido a la turbulencia. Siendo que la dispersión turbulenta está relacionada con la difusión, parece ser natural incorporar este efecto como un término difusivo en la ecuación de continuidad [HW00]. Sin embargo, en esta Tesis este fenómeno fue modelado como un término de fuerza en la ecuación de cantidad de movimiento [dB91]. La expresión utilizada para la fuerza de dispersión turbulenta es [dB91]

$$F_m^{TD} = -F_{es}^{TD} = -C_{TD} \rho_m \kappa_m \nabla \alpha_m, \quad (6.21)$$

donde C_{TD} es un parámetro que puede encontrarse en el rango comprendido entre 0.1–1.0 (Para una discusión reciente sobre el modelado de esta fuerza ver [MLDJ03]).

6.2.4. Modelo de Sato

El modelo de Sato tiene en cuenta el incremento de la turbulencia de la fase continua inducido por la fase dispersa. Denotando la fase continua con el subíndice m y la fase dispersa con el subíndice es , la viscosidad efectiva de la fase continua es expresada como,

$$\mu_{m_{eff}} = \mu_m + \mu_{Tm} + \mu_{Ties}. \quad (6.22)$$

El término de turbulencia inducida por la fase dispersa μ_{Ties} es modelado por

$$\mu_{Ties} = C_{\mu b} \rho_m \alpha_{es} d |\tilde{\mathbf{v}}_{es} - \tilde{\mathbf{v}}_m|, \quad (6.23)$$

donde d es el diámetro de las gotas de escoria, y $C_{\mu b}$ es una constante usualmente igual a 0.6.

6.3. Discretización Numérica y Estrategia de Solución

Los resultados presentados en este Capítulo son obtenidos utilizando el código ANSYS CFX 10.0, este software soporta topologías arbitrarias de malla, incluyendo hexaedros, tetraedros y elementos prismáticos. El código utiliza una aproximación híbrida elementos finitos/volúmenes finitos para discretizar las ecuaciones [AEA04]. Como en el método de volúmenes finitos esta aproximación satisface estrictamente la conservación global, forzando a la conservación local sobre los volúmenes de control construidos alrededor de cada vértice de la malla o nodo, como se puede observar en la Fig. 6.1. Todas las variables y propiedades del fluido son salvadas en los nodos de los elementos. Sin embargo, un importante número de términos en las ecuaciones requiere soluciones o gradientes de soluciones evaluados para los puntos de integración. Por esta razón, se debe tener una forma de calcular la variación de la solución dentro de un elemento. Esto es posible, con las funciones de forma de elementos finitos.

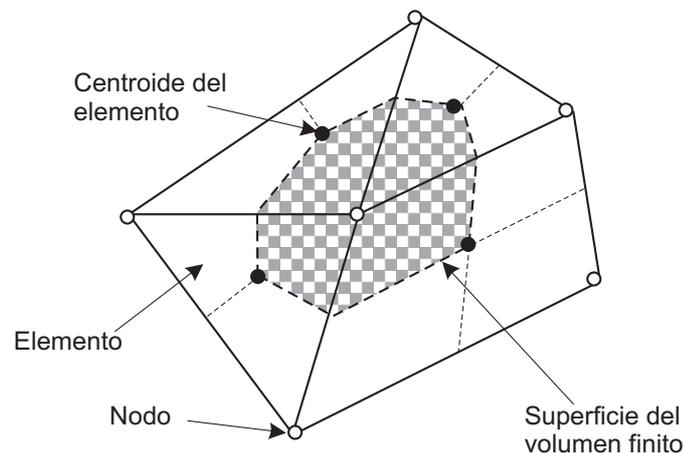


Figura 6.1: Representación esquemática de una malla típica con espesor unitario.

Los flujos advectivos son evaluados utilizando un esquema de alto orden, que esencialmente es de segundo orden para todos los términos advectivos, excepto por los términos de primer orden (*upwind*) correspondientes a las ecuaciones de transporte de las cantidades turbulentas ($\kappa - \epsilon$). Para el caso de flujos transientes, se utiliza un esquema Backward Euler de segundo orden. El mismo es implícito y conservativo en el tiempo.

En la Fig. 6.2 se presenta el diagrama de flujo de la estrategia de solución empleada por el código CFX 10.0. Este utiliza un *solver*, el cual resuelve las ecuaciones hidrodinámicas (u, v, w, p) en forma monolítica y en forma desacoplada el resto de ecuaciones.

Para problemas en los cuales se busca determinar el estado estacionario, se trabaja con un pseudo paso de tiempo el cual actúa como un *parámetro de aceleración*, reduciendo el número de iteraciones para la convergencia al estado estacionario.

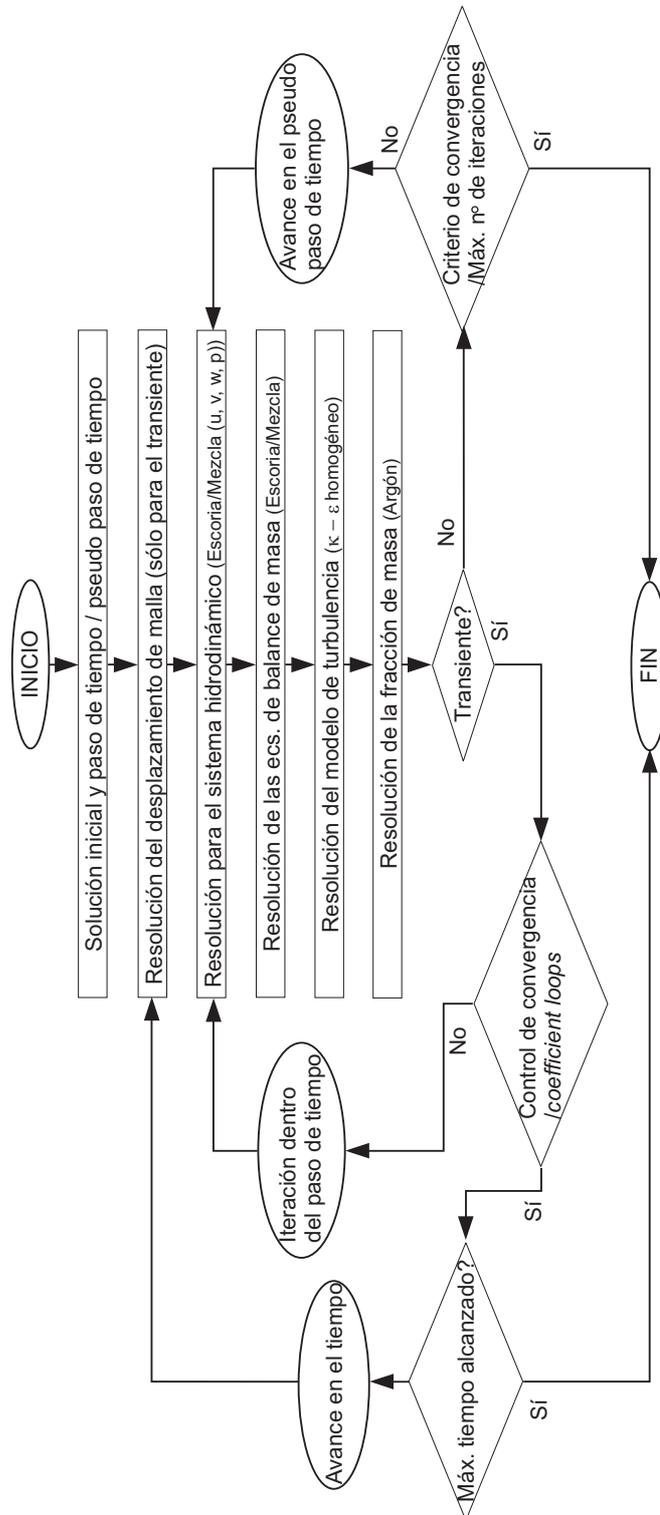


Figura 6.2: Diagrama de flujo de la estrategia de solución utilizada por CFX.

6.4. Validación del Código Computacional

Como fue expuesto en el Capítulo 4, son escasas las mediciones realizadas en planta, principalmente debido al medio opaco y a las altas temperaturas. Por lo tanto, nuevamente se utilizaron los resultados medidos por Anagbo y Brimacombe [AB90] en un modelo físico en frío (agua-aire) a escala 1/6 de una cuchara siderúrgica de 150 tn para validar la presente formulación.

6.4.1. Simulación Numérica del Modelo Físico Agua-Aire

El sistema multifásico estaba constituido por dos fases, una fase continua *agua* y una fase dispersa formada por *burbujas de gas* cuya forma se supuso esférica. Para el presente problema se asumieron las siguientes hipótesis:

Hipótesis:

1. **Proceso isotérmico** a 293 K. Por lo que no se encontraba presente en el modelo la ecuación de conservación de energía.
2. **Diámetro de burbuja constante.** Las mediciones revelan que el diámetro de la burbuja sufre una pequeña variación durante su ascenso (no mayor a un 25 %), por lo cual el diámetro de la burbuja se asumió constante e igual a 4 mm. Siendo por lo tanto $v_g^{Slip} = 0.23$ m/s.
3. **Régimen de burbujeo dinámico.**
4. **Hipótesis de mezcla.**
5. **Libre de la expansión del gas.** Se despreció el trabajo desarrollado por el gas sobre el líquido durante el proceso de formación de la burbuja, dado que el fenómeno es fuertemente dominado por las fuerzas de flotación.
6. **Problema axisimétrico sin superficie libre.**

6.4.2. Malla

La validación del código computacional se realizó utilizando una malla estructurada con elementos hexaédricos. Como se mencionó en el Capítulo 5, mediante un análisis cuantitativo del fenómeno, es posible determinar en forma aproximada la escalas temporales macroscópicas y microscópicas, con estas últimas se determina el paso temporal Δt y espacial h . Por lo tanto, en base a los resultados determinados en la sección 5.2.3, se optó para realizar la validación un número de elementos $N_r = 40$, $N_z = 60$ y $N_\theta = 1$.

Por otro lado, se han definido tres casos para determinar la convergencia en malla, estos son expuestos en el Cuadro 6.1. En la Fig. 6.3 se pueden observar las mallas utilizadas para cada caso.

Caso	Tipo de Elemento	Malla	N° Elementos	$h_c \times 10^{-3}$
I	Hexaedro	$40 \times 60 \times 1$	2400	6.25
II	"	$60 \times 90 \times 1$	5400	4.16
III	"	$80 \times 120 \times 1$	9600	3.12

Cuadro 6.1: Casos utilizados para determinar la convergencia en malla.

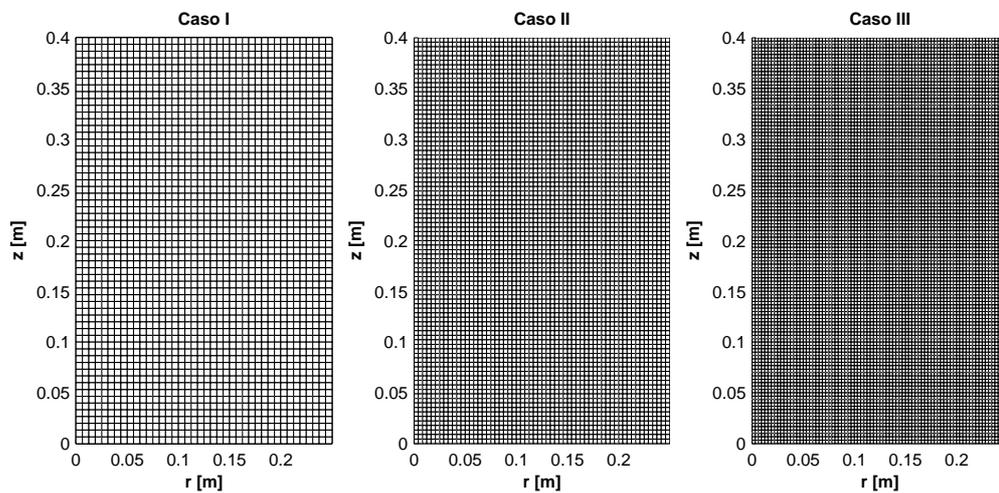


Figura 6.3: Mallas utilizadas para cada caso.

La convergencia en malla es determinada comparando la fracción de vacío en el eje de la cuchara para los tres casos expuestos. La justificación del porque se utiliza esta variable, radica en que el término de boyancia en la ecuación de cantidad de movimiento lineal de la mezcla depende directamente de la distribución de la fracción de volumen. Siendo el fenómeno físico dominado por la boyancia, la fracción de volumen es un buen indicador global de la solución completa de problema [CB87].

En la Fig. 6.4 se compara la fracción de volumen de gas que se determinó con el modelo ASMM-CFX para los tres casos propuestos. Como se puede observar, la diferencia de fracción de volumen de gas entre el Caso I y II, es mayor a la diferencia que existe entre el Caso II y III, por lo tanto se puede concluir que hay un comportamiento del tipo

asintótico conforme el número de elementos de la malla se incrementa, asegurando de esta forma que existe convergencia en malla.

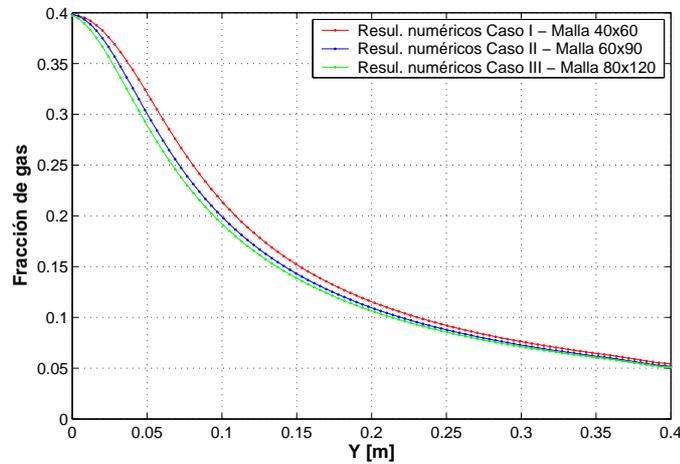


Figura 6.4: Comparación del modelo ASMM-CFX con mallas de 40×60 , 60×90 y 80×120 para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en el eje de la cuchara

6.4.3. Condiciones de Contorno e Iniciales

Dado que en el computo del problema de Anagbo et al. con el código CFX se utilizó el modelo de mezcla, las condiciones de borde e iniciales para los campos de velocidad de la mezcla y la presión, son las mismas que las expuestas en la sección 5.2.5.

La ecuación de balance de masa de la fase dispersa para el código CFX es definida en término de la fracción de masa. Por otro lado, como se expresó en la sección 6.2.1, la turbulencia es resuelta por medio de un modelo de dos ecuaciones $\kappa - \epsilon$. Por lo tanto, las condiciones de borde e iniciales para la ecuación del balance de masa y las cantidades de la turbulencia deben ser especificadas para cerrar la formulación fuerte.

Las **condiciones de contorno** para el presente problema son:

Eje de simetría: debido a la restricción de axisimetría, a lo largo del centro de línea de la cuchara ($r = 0$), las condiciones de borde para la fracción de masa del gas y las cantidades de la turbulencia son

$$r = 0 ; 0 < z < H : \begin{cases} \frac{\partial c_g}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial k}{\partial r} = 0; \frac{\partial \epsilon}{\partial r} = 0 \end{cases} . \quad (6.24)$$

Pared: el gradiente de la fracción de masa del gas a lo largo de la pared se hace nulo debido a que no existe flujo másico a través de la pared, por lo tanto las condición de contorno es

$$r = R ; 0 < z < H : \left\{ \frac{\partial c_g}{\partial r} = 0 \right. . \quad (6.25)$$

Los valores de las cantidades turbulentas para la pared se determinan por medio de una extrapolación desde el interior del dominio.

Fondo: siendo que no ingresa masa a través del fondo, entonces

$$r_0 < r < R ; z = 0 : \left\{ c_g = 0 \right. . \quad (6.26)$$

Tapón poroso: en las hipótesis, se ha considerado al flujo multifásico libre de la expansión del gas, lo que implica (como se vio en la sección 5.2.5) que al dominio computacional ingresan las burbujas ya formadas y con una velocidad igual a la velocidad terminal.

La condición de contorno en el tapón es una condición tipo INLET, utilizando para la turbulencia la opción Medium (Intensity = 5%), para la cual la intensidad de la turbulencia es tomada igual a 0.05, determinando k y ϵ por medio de la siguientes expresiones

$$\begin{aligned} k &= \frac{3}{2} I v_m \quad \text{siendo} \quad v_m = 0 \quad (v_g = v_g^{Slip}) \implies k = 0, \\ \epsilon &= \frac{k^{3/2}}{L_t} \implies \epsilon = 0. \end{aligned} \quad (6.27)$$

Donde I es la intensidad de la turbulencia y L_t es una longitud característica. La viscosidad dinámica turbulenta para este tipo de condición de contorno es $\mu_T = 10\mu$.

Por lo tanto, las condiciones de contorno para el tapón están dadas por:

$$0 < r \leq r_0 ; z = 0 : \left\{ \begin{array}{l} c_g = 7.9175 \times 10^{-4} \\ k = 0, \epsilon = 0 \text{ con } \mu_T = 10\mu \end{array} \right. . \quad (6.28)$$

Superficie libre: por simplicidad se asumió que la superficie libre no se deforma, manteniéndose plana. En el código CFX, se impuso una condición de contorno tipo WALL, con la llave Free Slip activada, o sea

$$0 < r < R ; z = H : \left\{ \begin{array}{l} v_m^z = 0 \\ \frac{\partial v_m^r}{\partial z} = \frac{\partial v_m^\theta}{\partial z} = 0 \end{array} \right. . \quad (6.29)$$

Por otra parte, también se activó la llave `deposition`, la cual remueve la fase dispersa al llegar al contorno con una tasa dada por la velocidad de deslizamiento, adicionando una cantidad igual de fase continua para mantener la restricción algebraica. Por lo tanto, la tapa actúa como una superficie plana sin rozamiento y porosa para la fase gaseosa.

Periodicidad: se asumió periodicidad circunferencial con un vínculo nodal del tipo 1:1. La cantidad de elementos en la dirección circunferencial es $N_\theta = 1$, si bien se filtran las componentes normales al plano, el modelo $\kappa - \epsilon$ tiene en cuenta gran parte de la difusión normal al plano (ver [Wil00]).

Las **condiciones iniciales** para el problema fueron velocidad de la mezcla nula y fracción de masa de gas igual a $6 \times 10^{-5} \%$ para todo el dominio computacional. Las condiciones iniciales para la energía cinética turbulenta y la disipación de la energía cinética turbulenta son iguales a $\kappa = 1 \times 10^{-8}$ y $\epsilon = 0.9 \times 10^{-8}$, respectivamente.

6.4.4. Resultados

A continuación se presentan los datos experimentales obtenidos por Anagbo et al. [AB90] y los resultados de los modelos ASMM-CFX y de dos fluidos (resuelto por Milelli [Mil02]). En las Figs. 6.5-6.9 (páginas siguientes) se comparan los valores de la fracción de volumen de gas para alturas medidas desde el tapón de 50, 100, 200, 300 y 380 mm, respectivamente.

En las Figs. 6.5 y 6.6 se observan los resultados obtenidos para las alturas de 50 y 100 mm. Los valores de la fracción de volumen determinados por el modelo ASMM-CFX describen satisfactoriamente los datos experimentales en la longitud radial considerada, para ambos casos. La desviación en el eje de la cuchara ($r = 0$) respecto al valor experimental es de un 3% para 50 mm y de un 20% para 100 mm. En el caso del modelo de dos fluidos los resultados no representan muy bien los datos experimentales, subestimando los valores de fracción de volumen en el eje en un 33% y 12%, respectivamente.

Si ahora se observan las Figs. 6.7 y 6.8 (alturas de 200 y 300 mm) las fracciones de volumen de gas determinadas por el modelo ASMM-CFX sobreestiman los valores experimentales en el eje en un 21 y 25% respectivamente. La precisión de modelo mejora a medida que crece el radio de la cuchara. El modelo de dos fluidos presenta un comportamiento opuesto (Fig. 6.7), es más preciso en la zona central y el error alejado del centro de la cuchara se incrementa alcanzando valores máximos de un 50%.

Los resultados del modelo de mezcla para 380 mm (Fig. 6.9) concuerdan favorablemente con los datos experimentales, por otro lado, los resultados obtenidos con el modelo de dos fluidos tienen una gran discrepancia respecto a los anteriores.

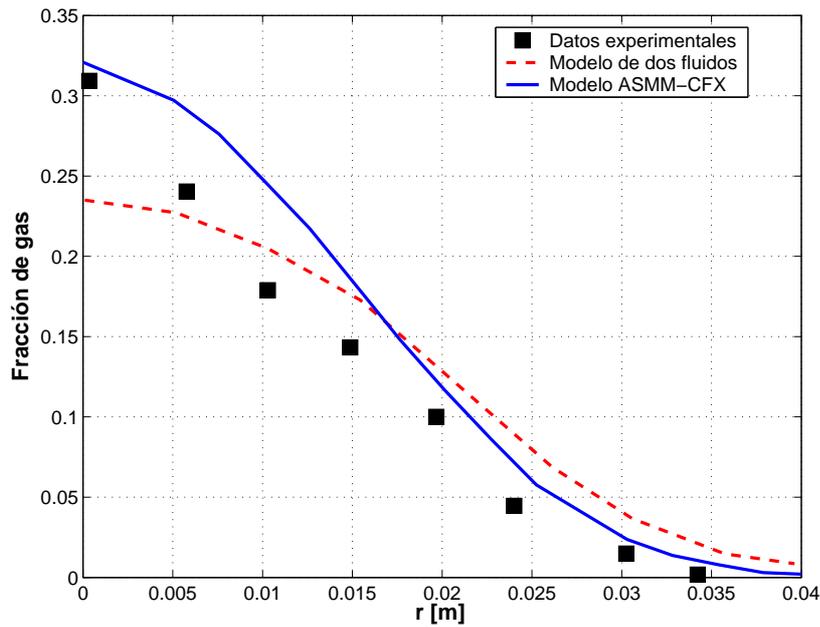


Figura 6.5: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 50 mm.

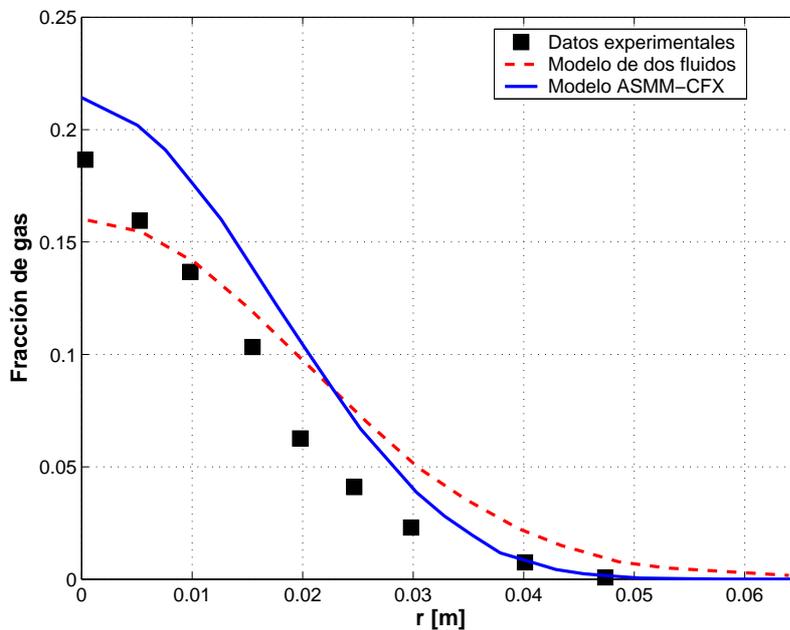


Figura 6.6: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm.

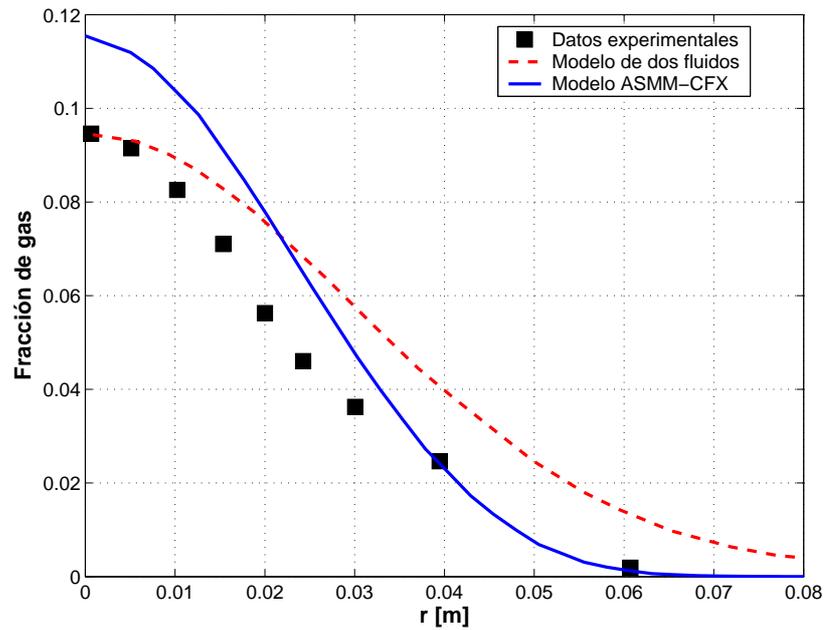


Figura 6.7: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm.

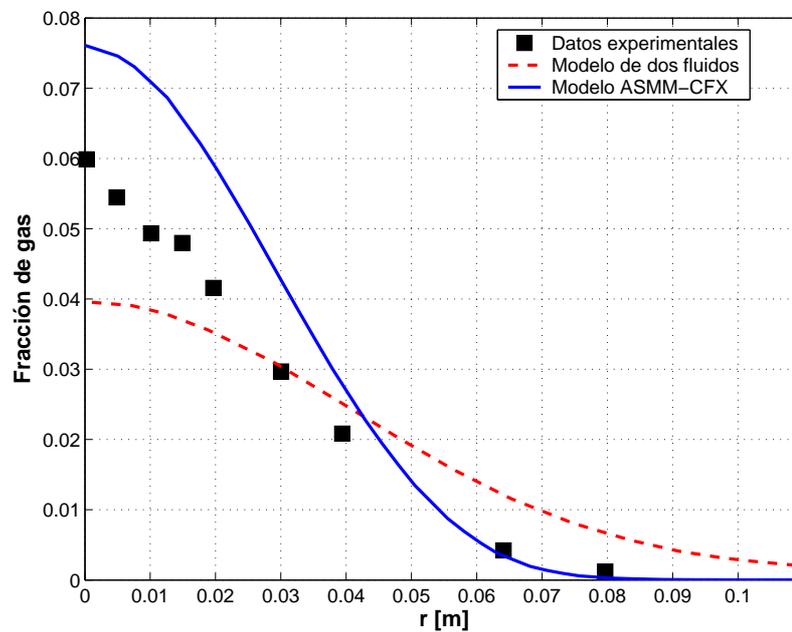


Figura 6.8: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm.

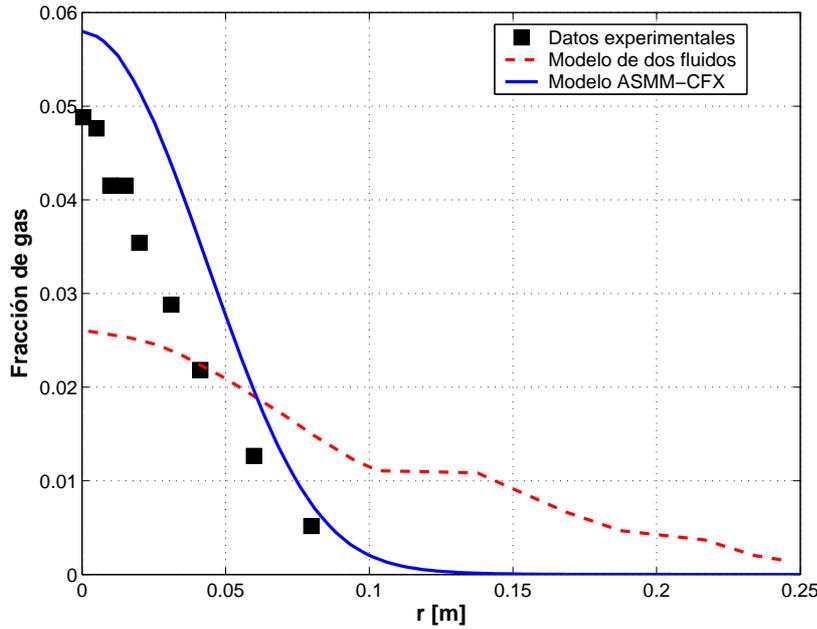


Figura 6.9: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. *Fracción de gas* en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm.

En la Fig. 6.10 se observa la velocidad de ascenso de las burbujas, promediada radialmente y pesada con la fracción de volumen de gas (ver definición 5.2.6), respecto a la coordenada axial z . Se debe notar que los modelos de mezcla ASMM-CFX y ASMM-PETSc-FEM (5.14) presentan igual comportamiento. Las diferencias entre los resultados del modelo ASMM-CFX y los datos experimentales para alturas cercanas al tapón son ligeramente menores que las determinadas con el modelo ASMM-PETSc-FEM. No obstante, en ambos casos las principales dificultades se encuentran en alturas cercanas al tapón, donde justamente es de esperar que el modelo algebraico pierda precisión ($v_{slip} = cte$).

La velocidad de ascenso de las burbujas de gas para el modelo ASMM-CFX es aproximadamente constante para radios comprendidos entre 0.1 y 0.3 m, luego las burbujas se desaceleran debido a que se asumió a la superficie libre plana. La mezcla al llegar a la superficie disminuye su velocidad provocando un aumento de la presión local, para luego cambiar su dirección dirigiéndose hacia la pared. Si se tiene en cuenta que la velocidad del gas queda determinada en términos de la velocidad de la mezcla y la velocidad de deslizamiento (modelo algebraico), siendo esta última constante y uniforme, es de esperar que la velocidad del gas también disminuya.

Cabe destacar, como se observa en la Fig. 6.10, que la desaceleración de las burbujas computadas con el modelo ASMM es aproximadamente la misma que la determinada por el modelo de dos fluidos.

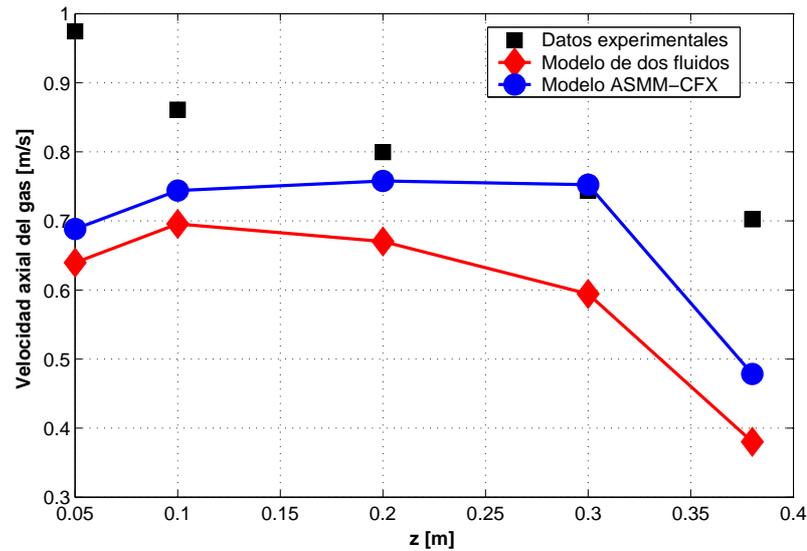


Figura 6.10: Comparación del modelo ASMM-CFX ($- \circ -$), modelo de dos fluidos ($- \diamond -$) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad promedio de ascenso de las burbujas en función de la coordenada axial.

A continuación en las Figs. 6.11-6.14 (páginas siguientes) se comparan los valores de la velocidad axial del líquido obtenidos por el modelo ASMM-CFX, modelo de dos fluidos y los determinados por Anagbo et al. para alturas medidas desde el tapón de 100, 200, 300 y 380 mm respectivamente.

Para una altura de 100 mm (Fig.6.11) el modelo de dos fluidos representa satisfactoriamente los datos experimentales en la zona central, mientras que para posiciones alejadas del eje de la cuchara $r > 0.15$ m, las predicciones de ambos modelos son similares.

En cuanto a los resultados obtenidos para alturas de 200 y 300 mm, el modelo ASMM-CFX describe satisfactoriamente los datos experimentales. Por último en la Fig. 6.14 se observa que los modelos subestiman los datos experimentales. El modelo de mezcla presenta un mejor comportamiento. Esta discrepancia se puede atribuir a que no se modeló la superficie libre.

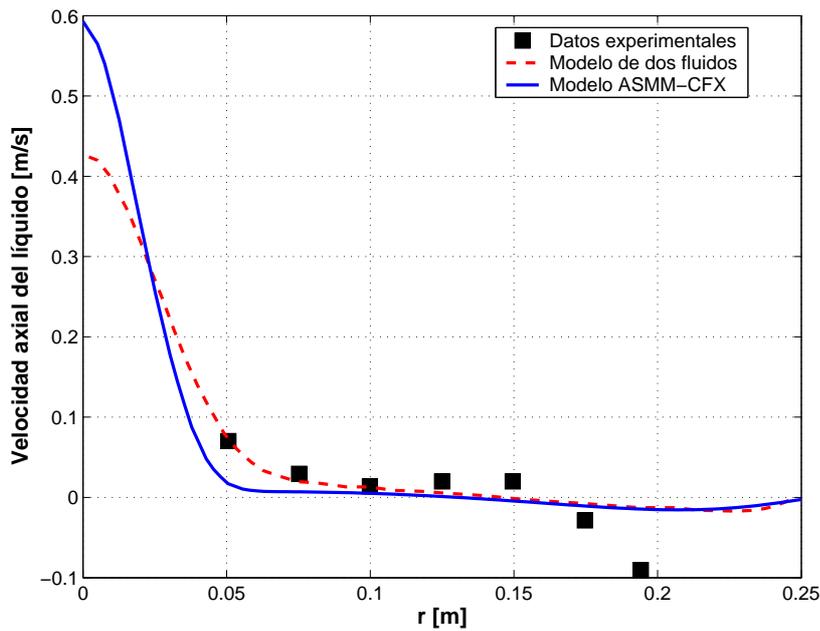


Figura 6.11: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm.

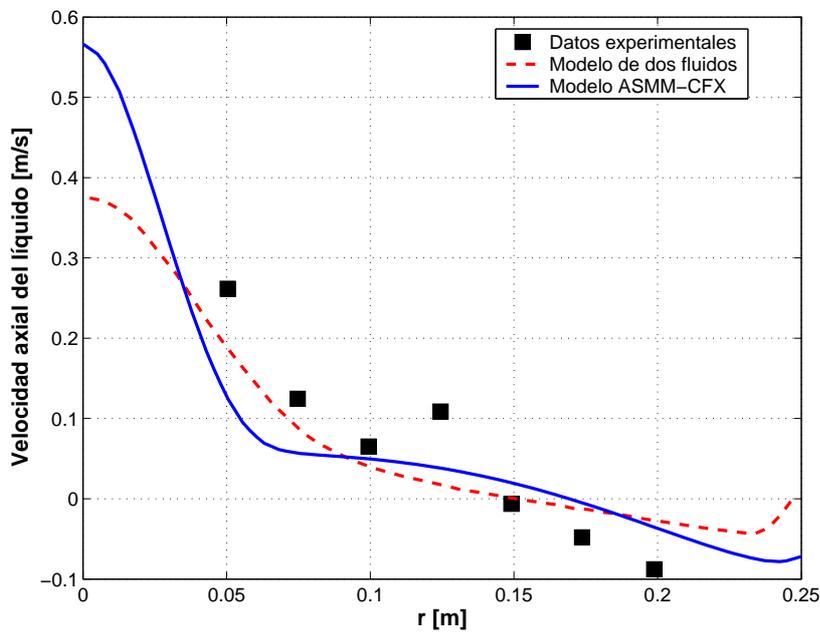


Figura 6.12: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm.

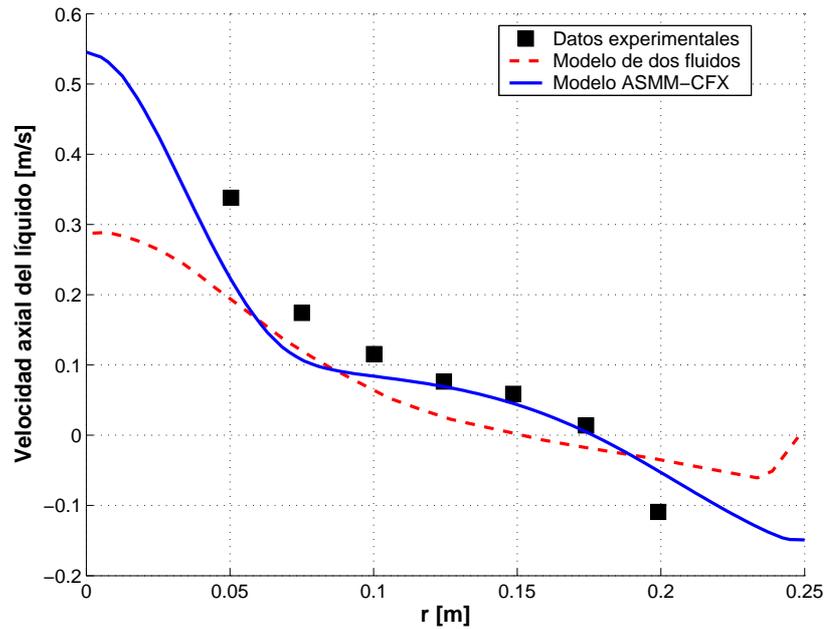


Figura 6.13: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm.

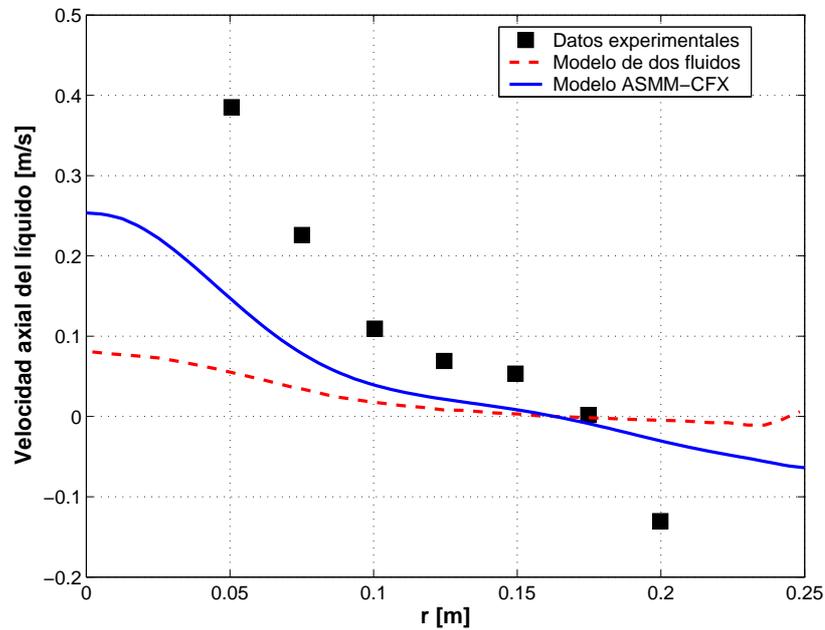


Figura 6.14: Comparación del modelo ASMM-CFX (—), modelo de dos fluidos (---) y datos experimentales (\square) para el modelo físico en frío agua-aire. Velocidad axial del líquido en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm.

En las Figs. 6.15-6.19 (páginas siguientes) se comparan los resultados obtenidos con los modelos ASMM-PETSc-FEM y ASMM-CFX para alturas medidas desde el tapón de 50, 100, 200, 300 y 380 mm respectivamente.

Para una altura de 50 mm (Fig. 6.15) los resultados son similares, sin embargo para alturas de 100 y 200 mm (Figs. 6.16 y 6.17) los resultados del modelo ASMM-CFX se muestran más concentrados hacia el centro de la cuchara alejándose de los valores experimentales tal como se observó anteriormente. Por otro lado, existe un comportamiento opuesto para alturas de 300 y 380 mm (Figs. 6.18 y 6.19), donde ahora el modelo ASMM-PETSc-FEM presenta la fracción de gas más concentrada (Fig. 6.19). Se estima que la diferencia que existe entre los resultados se debe principalmente a los modelos de turbulencia empleados.

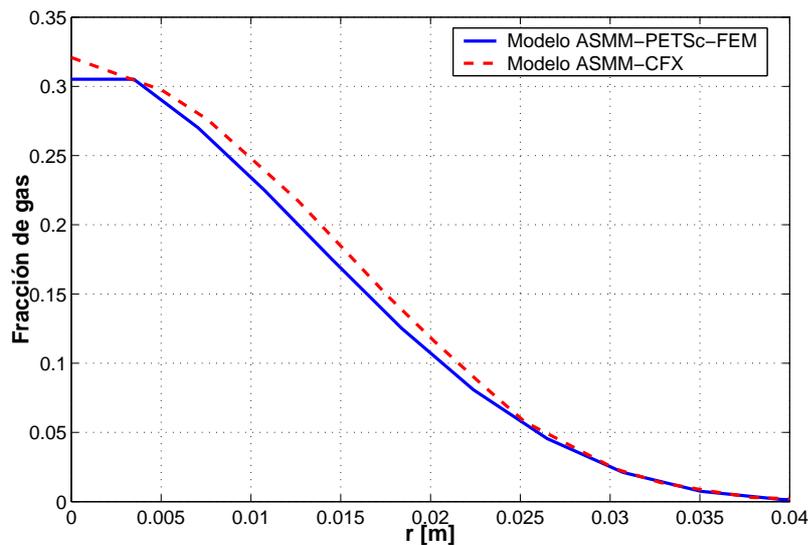


Figura 6.15: Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. Fracción de gas en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 50 mm.

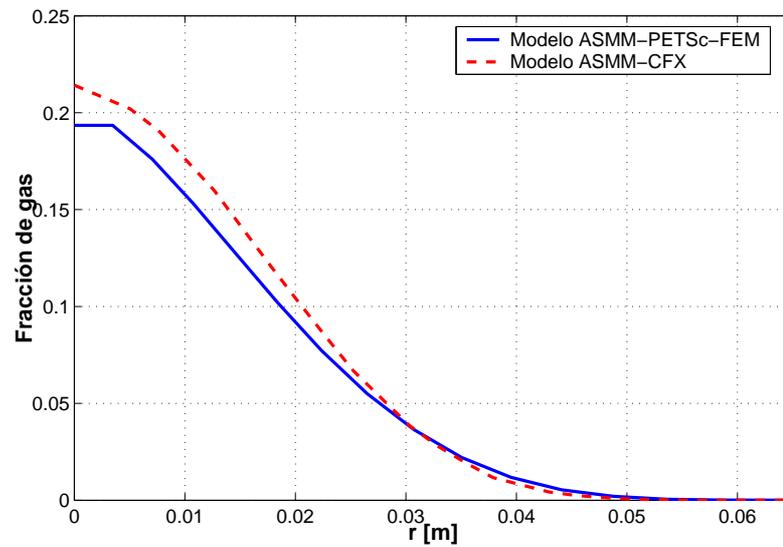


Figura 6.16: Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. Fracción de gas en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 100 mm.

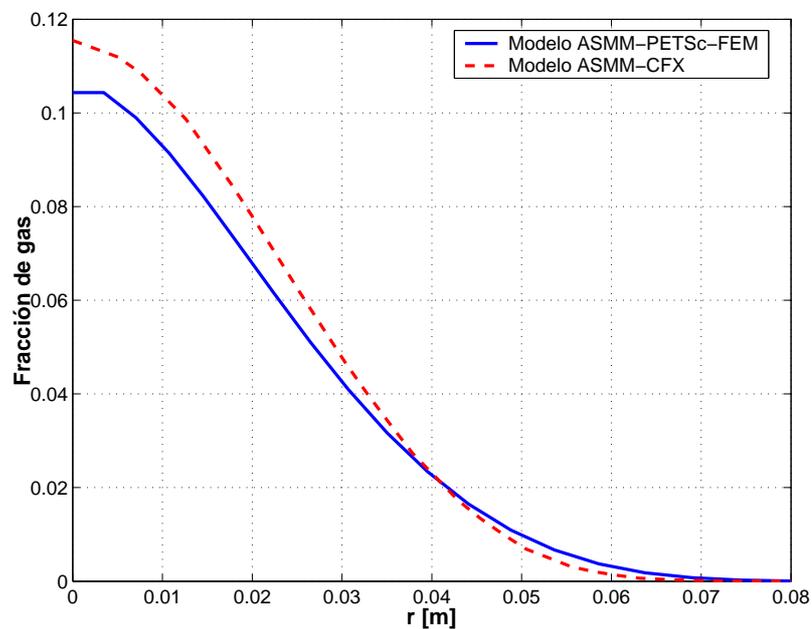


Figura 6.17: Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. Fracción de gas en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 200 mm.

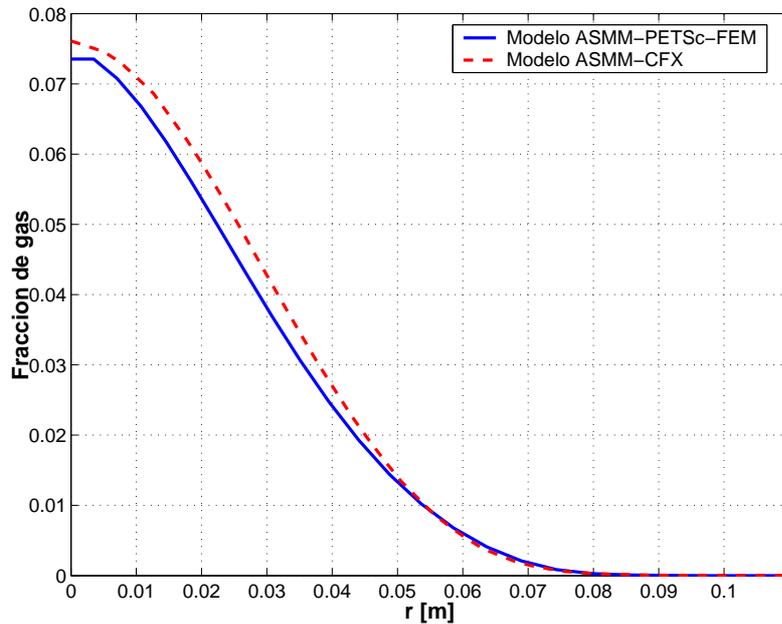


Figura 6.18: Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. Fracción de gas en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 300 mm.

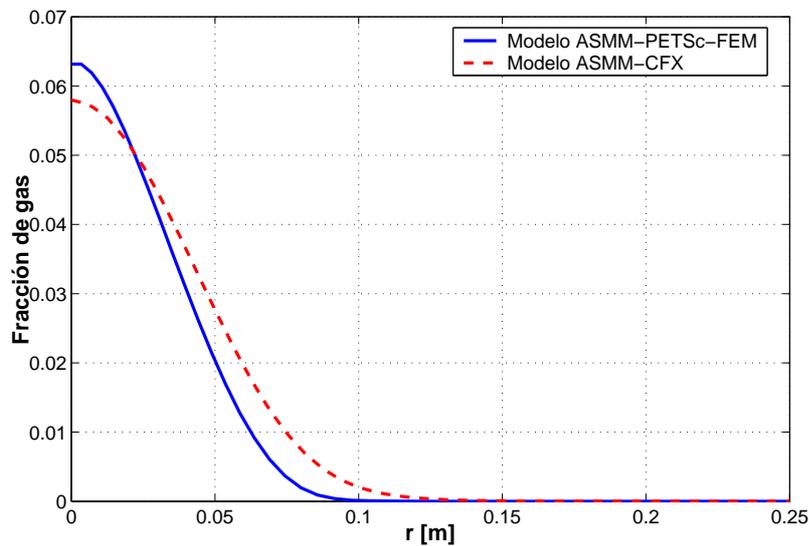


Figura 6.19: Comparación entre los modelos ASMM-PETSc-FEM (—) y ASMM-CFX (---) para el modelo físico en frío agua-aire. Fracción de gas en función de la coordenada radial para una altura medida desde el tapón de 380 mm.

6.5. Cuchara Siderúrgica

El modelo híbrido es utilizado para resolver el flujo en la cuchara siderúrgica de 100 t de capacidad que se describió en la sección 5.3.1. En este problema están presentes las tres fases acero, argón y escoria. Por lo tanto, en el modelo híbrido se deben establecer las condiciones de borde e iniciales para la velocidad de la escoria, la velocidad de la mezcla, la presión, la fracción de volumen de la escoria y la fracción de masa del gas.

La malla y los datos físicos son los mismos que se emplearon en el Capítulo anterior. Cabe destacar que la velocidad de deslizamiento de la escoria no es utilizada en este modelo.

6.5.1. Condiciones de Contorno e Iniciales

Las condiciones de contorno⁴ para el presente problema son:

Eje de simetría:

$$r = 0; 0 < z < H : \begin{cases} v_{es}^r = v_{es}^\theta = 0 \\ v_m^r = v_m^\theta = 0 \\ \frac{\partial v_{es}^z}{\partial r} = \frac{\partial v_m^z}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial \alpha_{es}}{\partial r} = \frac{\partial c_{ar}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial k_M}{\partial r} = 0; \frac{\partial \epsilon_M}{\partial r} = 0 \end{cases} . \quad (6.30)$$

Pared:

$$r = R; 0 < z < H : \begin{cases} \frac{\partial \alpha_{es}}{\partial r} = 0 \\ \frac{\partial c_{ar}}{\partial r} = 0 \end{cases} , \quad (6.31)$$

$$r_0 < r < R; z = 0 : \begin{cases} \frac{\partial \alpha_{es}}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial c_{ar}}{\partial z} = 0 \end{cases} . \quad (6.32)$$

⁴ Se omiten los símbolos de promediado sobre las variables dependientes para una mayor claridad.

Se impone en la pared una condición de contorno tipo `Wall` y la opción `No Slip` para la escoria y la mezcla. Esta condición utiliza la ley de pared para calcular la tracción en las ecuaciones de cantidad de movimiento lineal e impide que exista flujo a través de la pared.

Los valores de las cantidades turbulentas para la pared se determinan por medio de una extrapolación desde el interior del dominio.

Tapón poroso:

La condición de contorno en el tapón es una condición tipo `INLET`, utilizando para la turbulencia la opción `Medium` (`Intensity = 5%`)

$$0 < r \leq r_0 ; z = 0 : \begin{cases} v_{es}^z = v_m^z = 0 \\ \alpha_{es} = 0 \\ c_g = 1.69 \times 10^{-2} \\ k_M = 0, \epsilon_M = 0 \text{ con } \mu_{TM} = 10\mu_M \end{cases} . \quad (6.33)$$

Superficie libre: al igual que en el caso anterior se asumió que la superficie libre no se deforma, manteniéndose plana. En el código CFX, se impuso una condición de contorno tipo `WALL`, con la llave `Free Slip` activada, o sea

$$0 < r < R ; z = H : \begin{cases} v_{es}^z = 0 \\ \frac{\partial v_{es}^r}{\partial z} = \frac{\partial v_{es}^\theta}{\partial z} = 0 \\ v_m^z = 0 \\ \frac{\partial v_m^r}{\partial z} = \frac{\partial v_m^\theta}{\partial z} = 0 \end{cases} . \quad (6.34)$$

Se activó la llave `deposition` para el argón.

Periodicidad: se asumió periodicidad circunferencial con un vínculo nodal del tipo 1:1.

Se utilizó la llave `automatic`⁵ para las **condiciones iniciales** de la velocidad de la escoria, velocidad de la mezcla y la fracción de masa del argón. La presión se inicializa con un campo hidrostático. Por último se considera una capa de escoria de 10 cm de espesor sobre el acero, donde $\alpha_{es} = 1$ para la condición inicial.

⁵ El *solver* calcula las condiciones iniciales a partir de las condiciones de contorno impuestas.

6.5.2. Área de Apertura del Ojo en la Escoria

Se determinó el área de apertura del ojo para los cuatro caudales. Con 35 l min^{-1} no existe apertura del ojo, tal como lo predice también el modelo de mezcla. En el Cuadro 6.2 se comparan el área y el radio de apertura del ojo para el modelo híbrido, modelo ASMM y los resultados de las expresiones empíricas derivadas de modelos físicos en frío (agua-aire-kerosene) por Iguchi et al. [IMY+04]. Se observa una reducción en el radio de apertura del ojo conforme disminuye el caudal. Para un caudal de 160 l min^{-1} el modelo híbrido subestima el valor empírico. Siendo más cercano al valor empírico el obtenido por el modelo ASMM-PETSc-FEM. Con un caudal de 120 l min^{-1} el modelo híbrido presenta un resultado más favorable. Para 80 l min^{-1} no se tiene el resultado empírico para comparar, si se puede observar que el modelo híbrido predice una apertura del ojo mayor que la determinada por el modelo ASMM-PETSc-FEM.

En la Fig 6.20 (página siguiente) se observa la fracción de escoria y el radio de apertura del ojo para los distintos caudales.

-	A_0^{80}	R_0^{80}	A_0^{120}	R_0^{120}	A_0^{160}	R_0^{160}
Calculado Modelo Híbrido	0.2096	0.2583	0.3972	0.3556	0.4753	0.3890
Calculado Modelo ASMM	0.1642	0.2286	0.4477	0.3775	0.6339	0.4492
Empírico	-	-	0.3027	0.3104	0.5934	0.4346

Cuadro 6.2: Comparación entre resultados empíricos y valores calculados del área y radio de apertura del ojo (A_0^i [m²] y R_0^i [m]) .

Con la finalidad de determinar como influye en los resultados la superficie libre, se ha resuelto el modelo axisimétrico con superficie libre. Además se han incluido en el modelo de dos fluidos escoria-mezcla las fuerzas de non-drag, donde los coeficientes utilizados para cada una de las fuerzas son, $C_{VM} = 0.06$, $C_L = 0.3$ y $C_{TD} = 0.1$. También se utiliza el modelo de Sato, para tener en cuenta la turbulencia inducida en la fase continua por las gotas de escoria.

Como podemos observar en la Fig. 6.21 (páginas siguientes), la distribución de la escoria cambió notablemente para el caso en el cual se resolvió la superficie libre. El radio de apertura del ojo que predice el modelo con superficie libre es mayor al determinado por las expresiones empíricas y el modelo sin superficie libre.

Se resolvió la cuchara siderúrgica para un dominio 3D. Las condiciones de operación corresponden a un caudal de 160 l min^{-1} . Se resuelve la superficie libre y se utilizan las fuerzas de non-drag en el cómputo. En la Fig. 6.22 se presenta una iso-superficie para una fracción de escoria de 0.99 y otra correspondiente a 0.005. El radio medio de apertura del ojo para esta configuración es de 0.445 m.

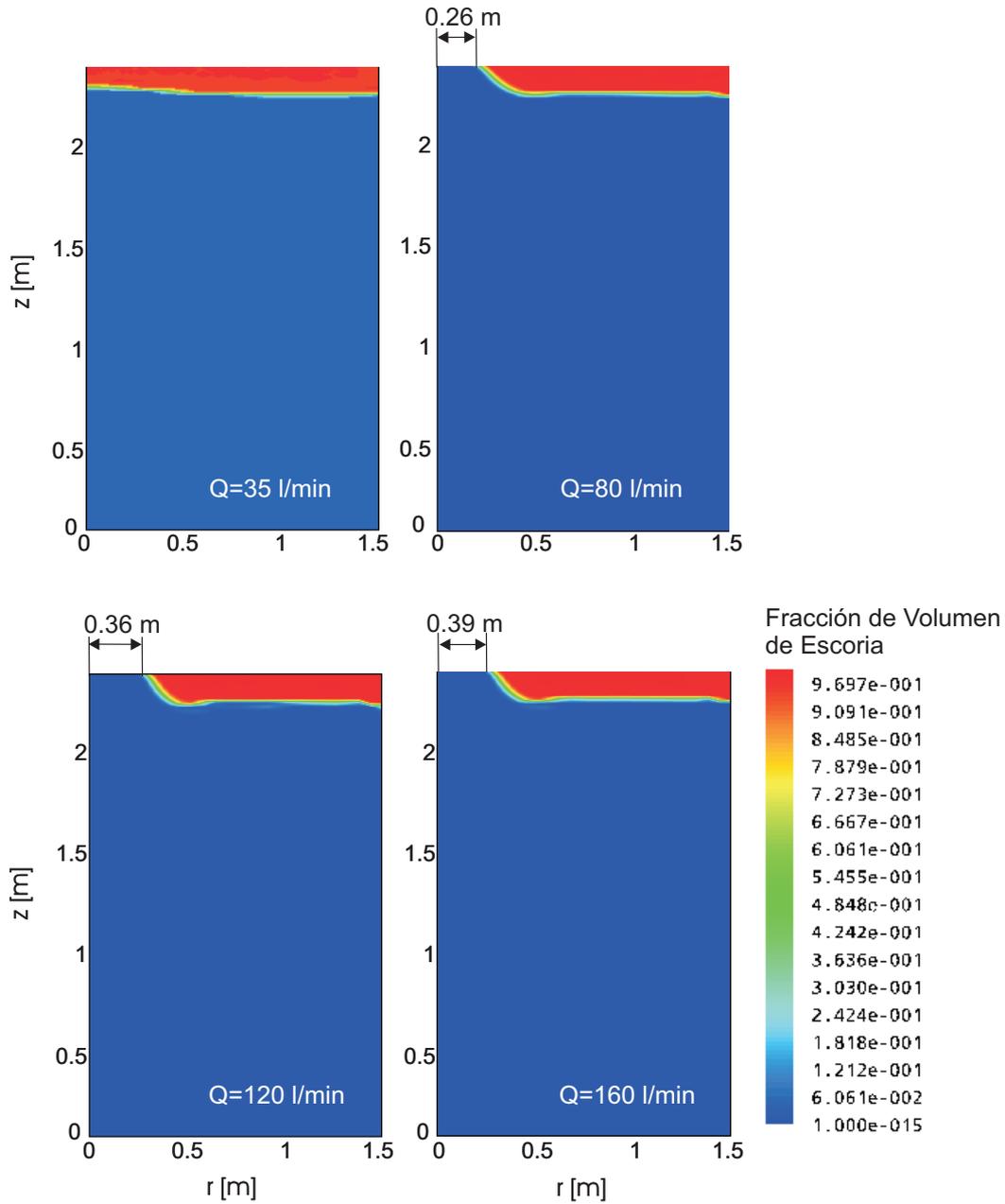


Figura 6.20: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Fracción de escoria y radio de apertura del ojo para $Q = 35, 80, 120, 160 \text{ l min}^{-1}$.

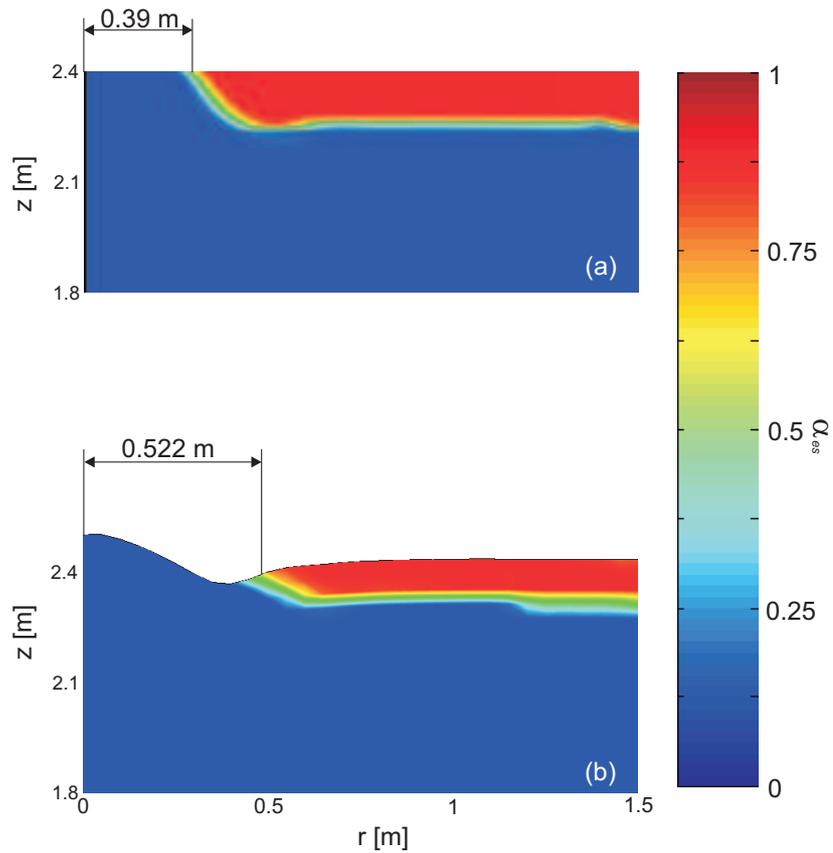


Figura 6.21: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Fracción de escoria y radio de apertura del ojo para $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.

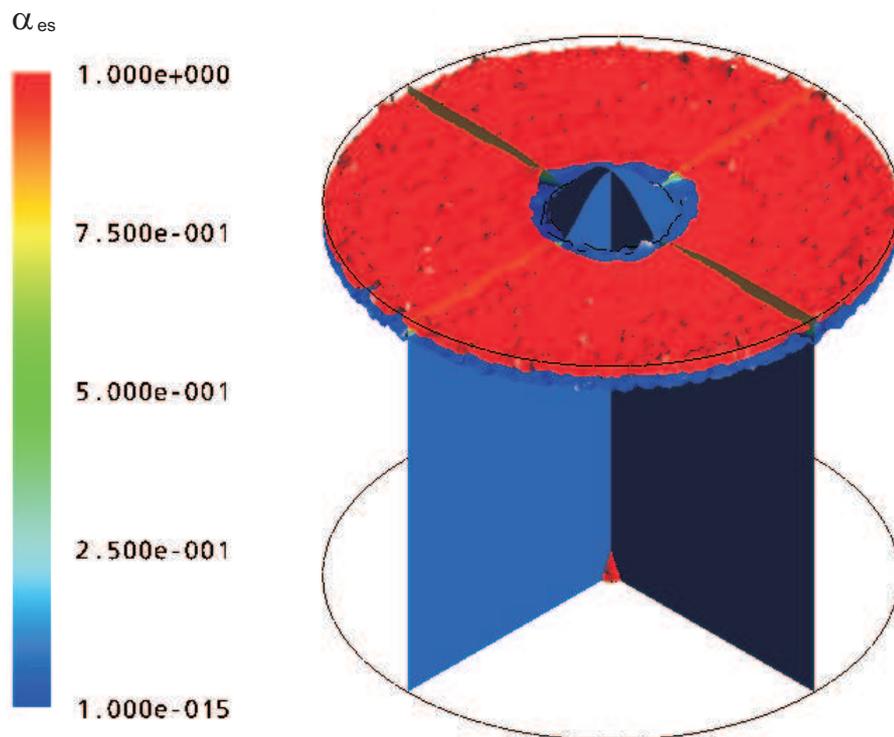


Figura 6.22: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Iso-superficies de fracción de escoria para $\alpha_{es} = 0.005$ y $\alpha_{es} = 0.99$ correspondientes a un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$.

6.5.3. Atrape de Escoria

A continuación se analiza el atrape de escoria mediante los indicadores de atrape: velocidad crítica de atrape y número de Weber, y las isocurvas de fracción de escoria. Se comparan los resultados con y sin el cómputo de la superficie libre. También se analiza el atrape de escoria en un dominio 3D.

Velocidad Crítica de Atrape

En el capítulo anterior se determinó la velocidad crítica de atrape cuyo valor es igual a $V_{crit}^{Inter} = 0.427 \text{ m s}^{-1}$. Si el acero alcanza un valor de velocidad igual o mayor a este valor crítico en torno a la capa de escoria, se produce atrape de escoria en el acero.

En la Fig. 6.23 se observa el módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para caudales de 80, 120 y 160 l min⁻¹ de argón. Para caudales de 80 y 160 l min⁻¹ se observa un comportamiento similar, alcanzando el acero una velocidad de 0.6-0.7 m s⁻¹ entorno a la capa de escoria. Para el caso de un caudal de 120 l min⁻¹ el acero alcanza velocidades similares a las anteriores, pero el flujo sale del ojo con una dirección horizontal, pudiéndose observar en la Fig. 6.24 b que la escoria tiende a dispersarse en una zona paralela a la capa de escoria.

Se compara a continuación (Fig. 6.25, páginas siguientes) el módulo de la velocidad del acero obtenido con y sin el cómputo de la superficie libre para un caudal de 160 l min⁻¹ de argón. Para la cuchara sin superficie libre, se produce un cambio abrupto de la dirección del flujo en torno al ojo, retornando el acero a alta velocidad hacia el núcleo de la cuchara. El acero alcanza valores de 0.6 m s⁻¹ en torno a la capa de escoria por lo que existe atrape de escoria en dicha zona. Si ahora se observa la Fig. 6.26 a donde se exponen las isocurvas de fracción de escoria de [0.005 : 0.005 : 0.05], se puede ver que en la zona donde el indicador establece que existe atrape la escoria, esta última tiende a dispersarse.

Por otro lado en la Fig. 6.25 b, se muestra la velocidad del acero para la cuchara siderúrgica con superficie libre. El acero ingresa con un ángulo menor y su velocidad se encuentra por debajo del valor crítico para la zona en torno a la capa de escoria. Sin embargo existe una capa de mezcla de un espesor considerable (Fig. 6.26 b) manifestándose dispersión de escoria en la zona de la capa donde se superan las velocidades críticas.

Finalmente en la Fig. 6.27 se compara el módulo de la velocidad del acero para los dominios axisimétrico y 3D. Se puede observar una capa de mezcla importante en ambos casos, presentando una mayor dispersión para la configuración 3D Fig. 6.28.

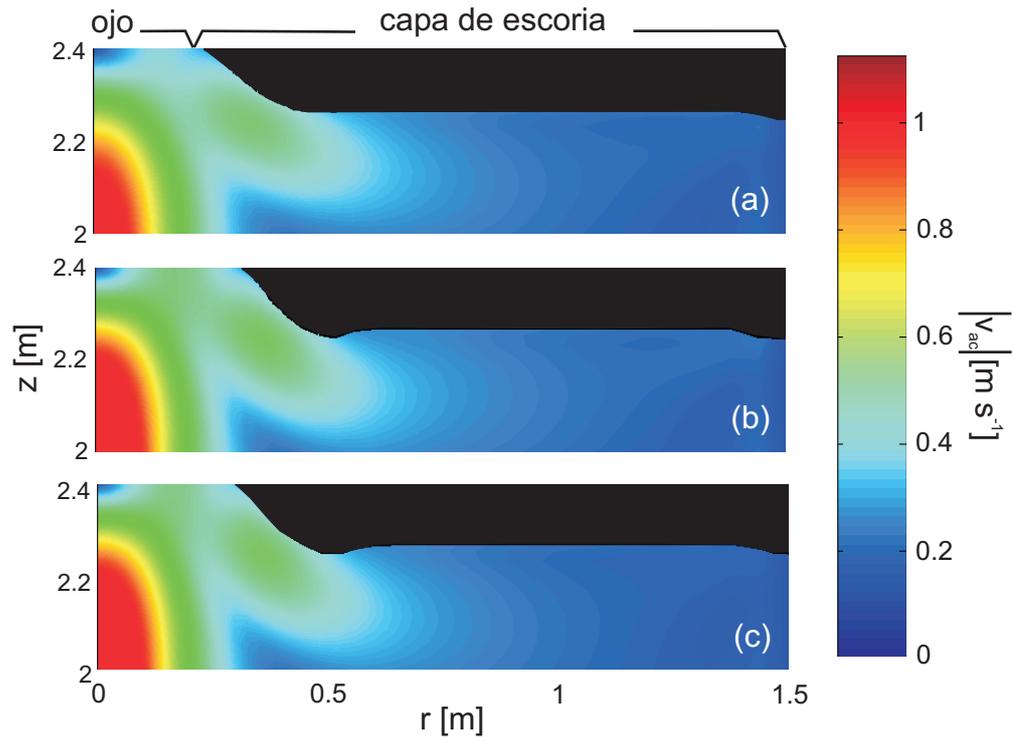


Figura 6.23: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min⁻¹.

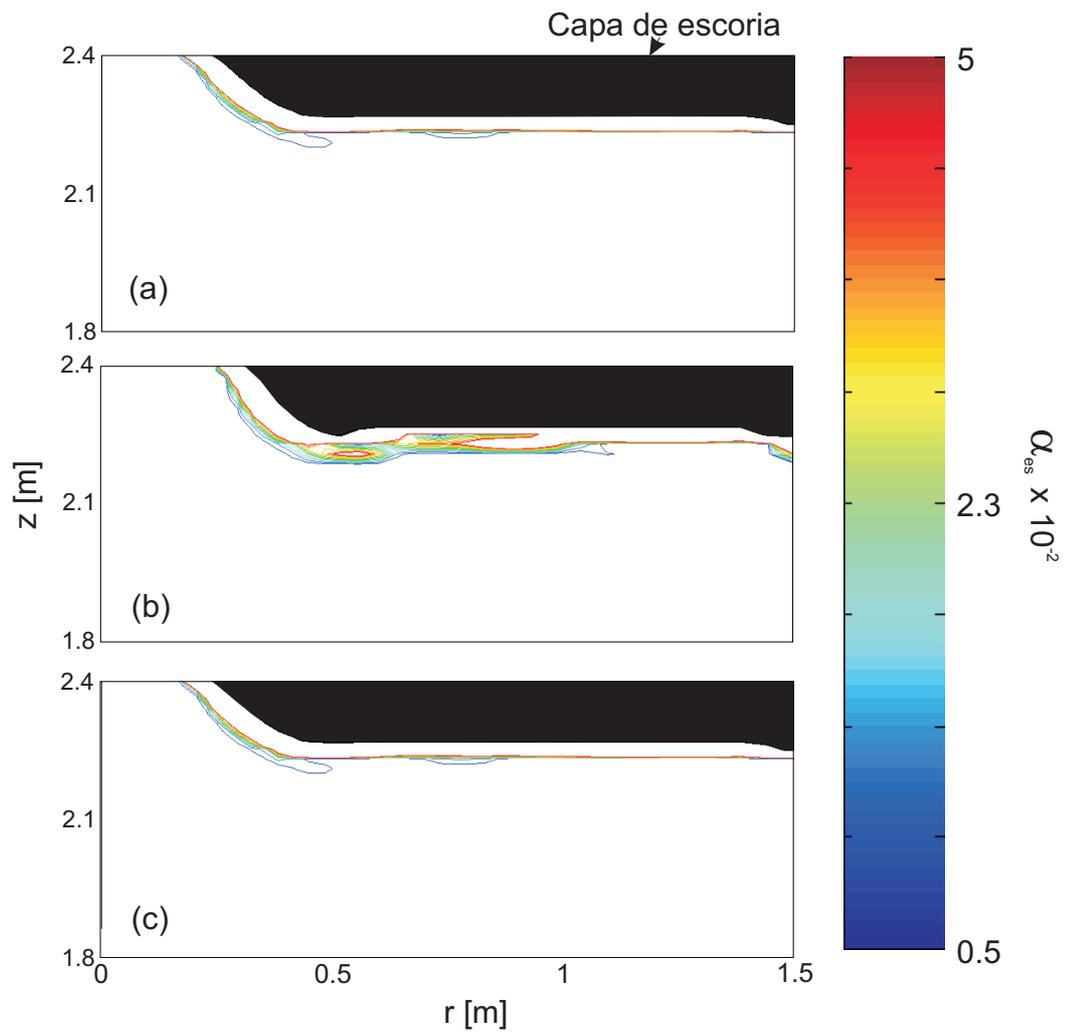


Figura 6.24: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Isocurvas de fracción de escoria [0.005 : 0.005 : 0.05] para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min $^{-1}$.

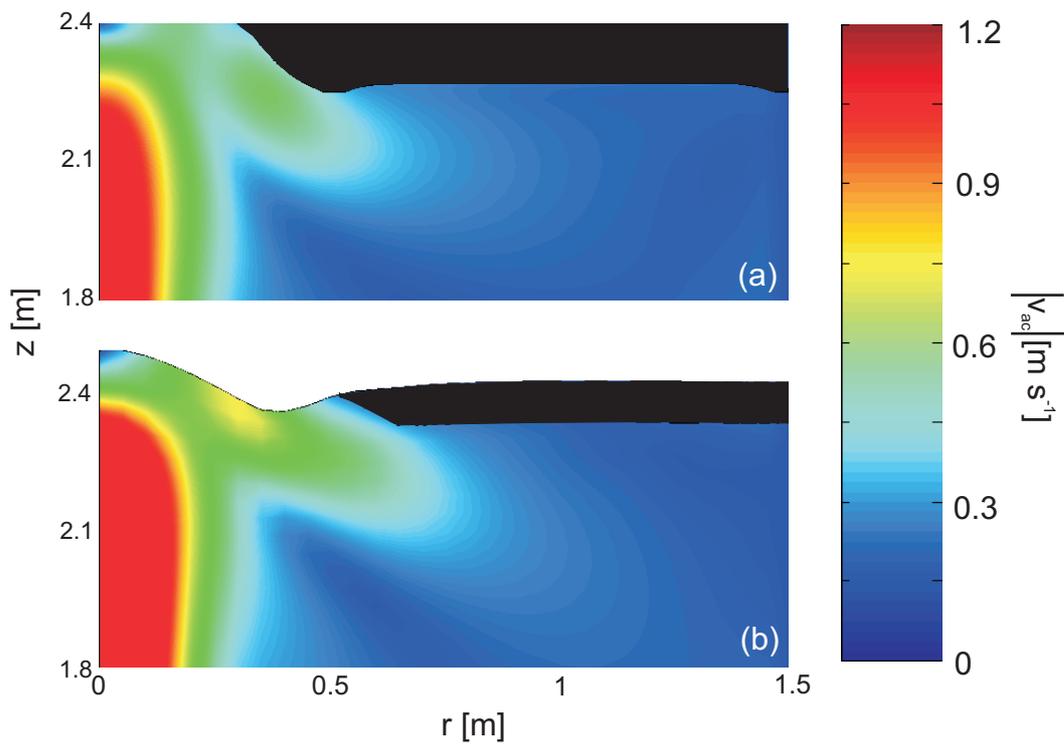


Figura 6.25: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.

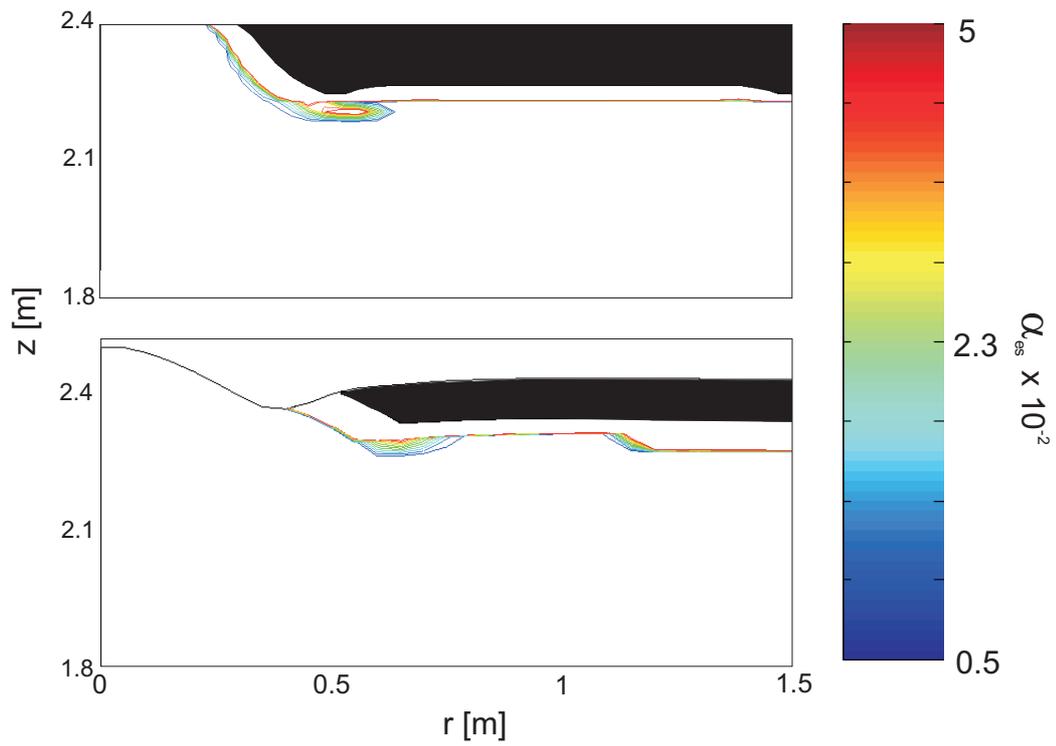


Figura 6.26: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Isocurvas de fracción de escoria [0.005 : 0.005 : 0.05] para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.

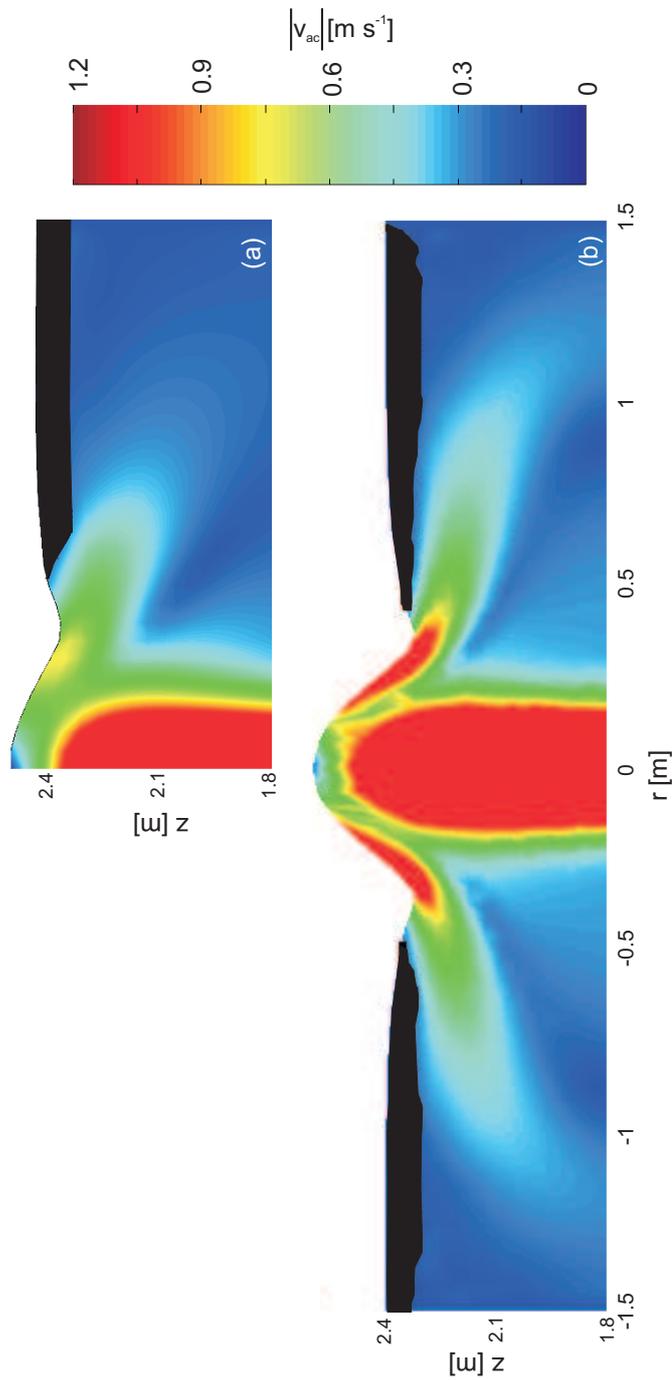


Figura 6.27: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Módulo de la velocidad del acero en torno a la capa de escoria para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados para un dominio axisimétrico y (b) Resultados para un dominio 3D.

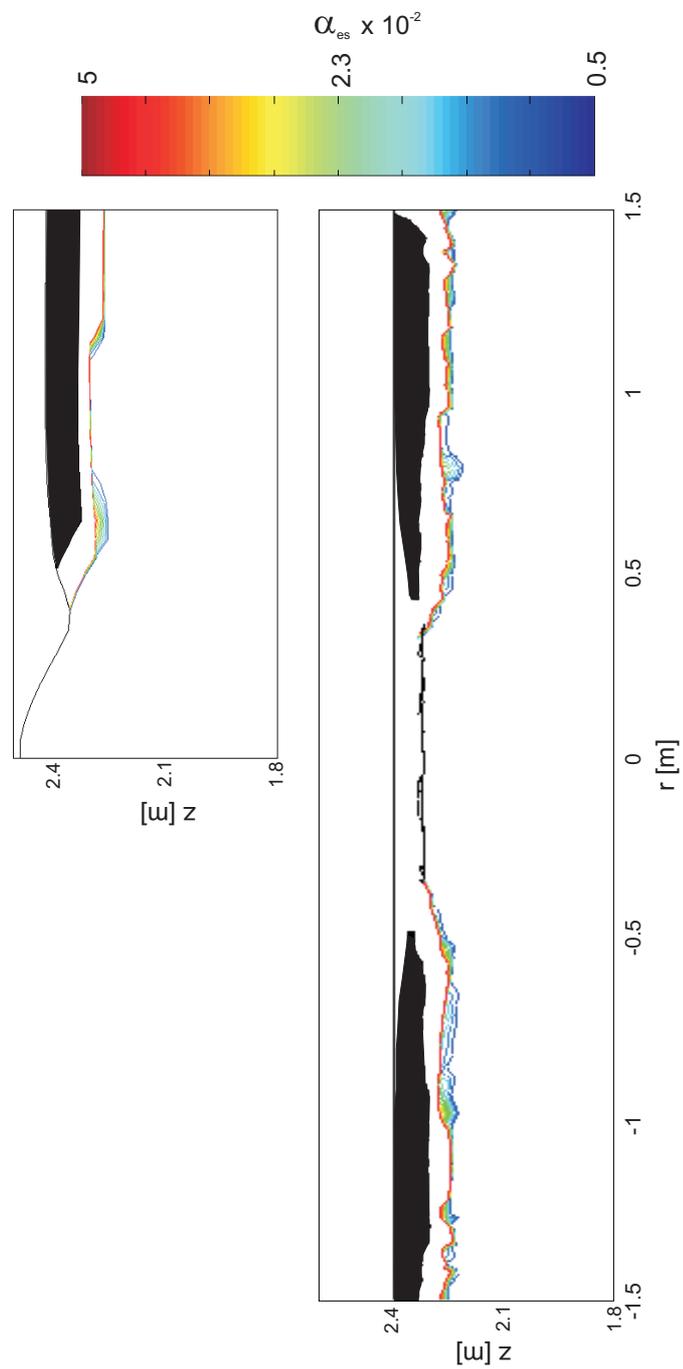


Figura 6.28: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Isocurvas de fracción de escoria [0.005 : 0.005 : 0.05] para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados para un dominio axisimétrico y (b) Resultados para un dominio 3D.

Número de Weber

El número de Weber es otro indicador de atrape de escoria, si toma valores iguales o mayores a 12.3 en torno a la capa de escoria se puede decir que existe atrape de escoria en el acero. En la Fig. 6.29 se expone el número de Weber para caudales $Q = 80, 120$ y 160 l min^{-1} . En la zona de la capa de mezcla en todos los casos el número de Weber es superior a 12.3, evidenciando la existencia de atrape en torno al ojo, tal como lo predice la velocidad crítica.

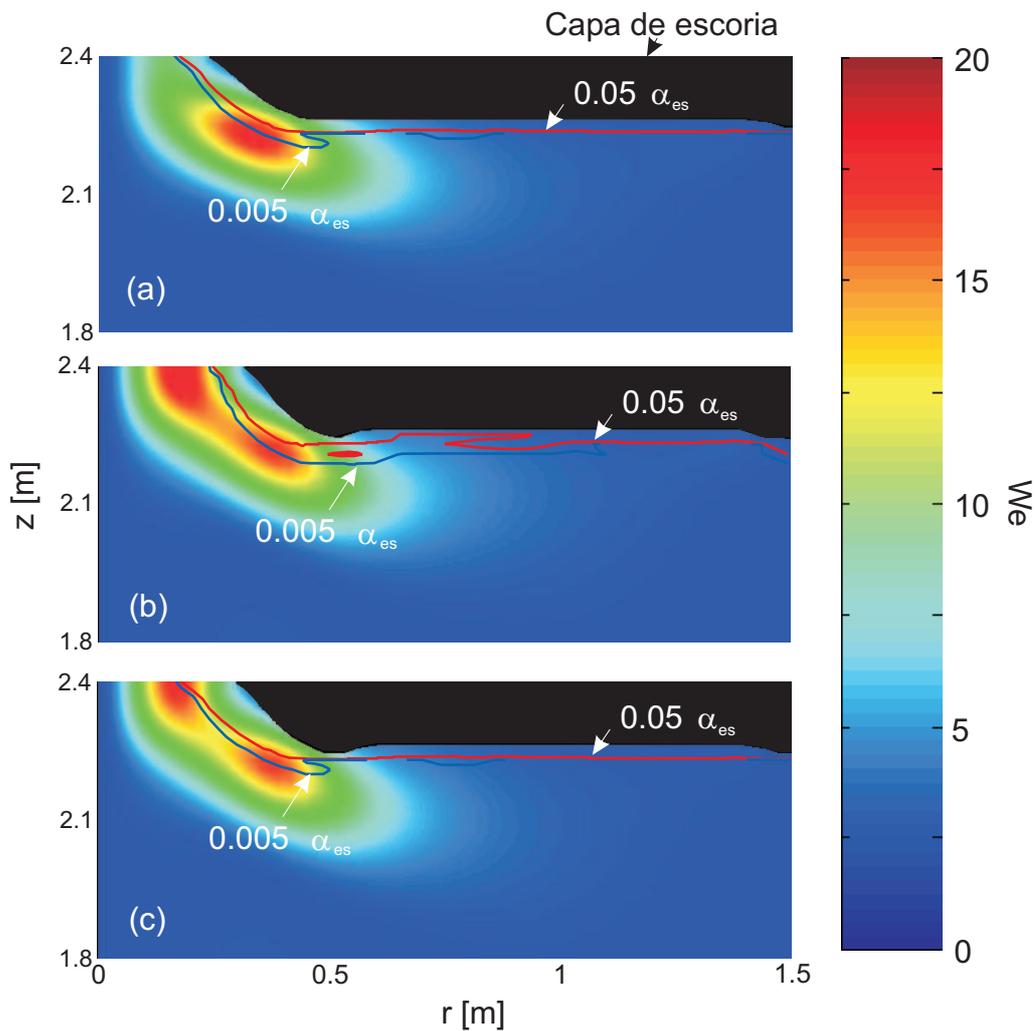


Figura 6.29: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Número de Weber e isocurvas de fracción de escoria [0.005,0.05] para caudales $Q = 80$ (a), 120 (b), 160 (c) l min^{-1} .

6.5.4. Patrones de Flujo

En esta sección a modo de completitud se presentan los patrones de flujo para las distintas configuraciones computadas. En la Fig. 6.30 se comparan los patrones de flujo para el modelo axisimétrico con y sin superficie libre. El patrón de flujo es similar en ambas configuraciones, pero los centros de los vórtices no coinciden.

A continuación en la Fig. 6.31 se comparan los patrones de flujo para la configuración axisimétrica y 3D. El patrón de flujo nuevamente es similar en ambos casos, observándose un desplazamiento radial del centro del vórtice para la configuración 3D.

Por último en las Figs. 6.32 y 6.33 se muestran las streamlines determinadas a partir de un anillo situado en la zona de apertura del ojo.

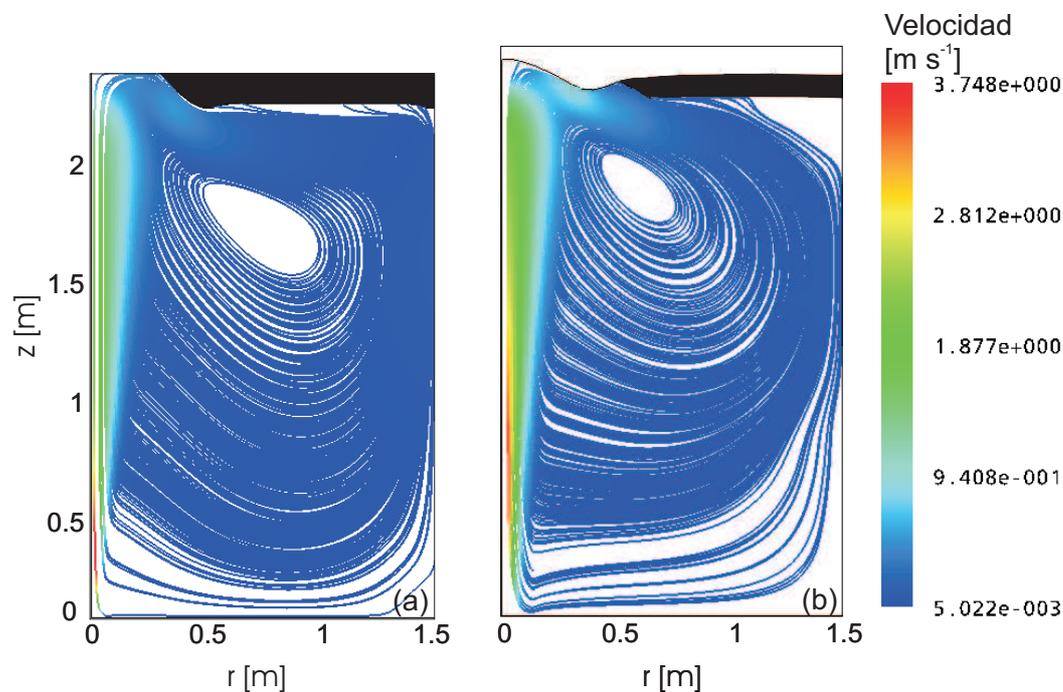


Figura 6.30: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines en el plano para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados sin computar la superficie libre y (b) Resultados computando la superficie libre.

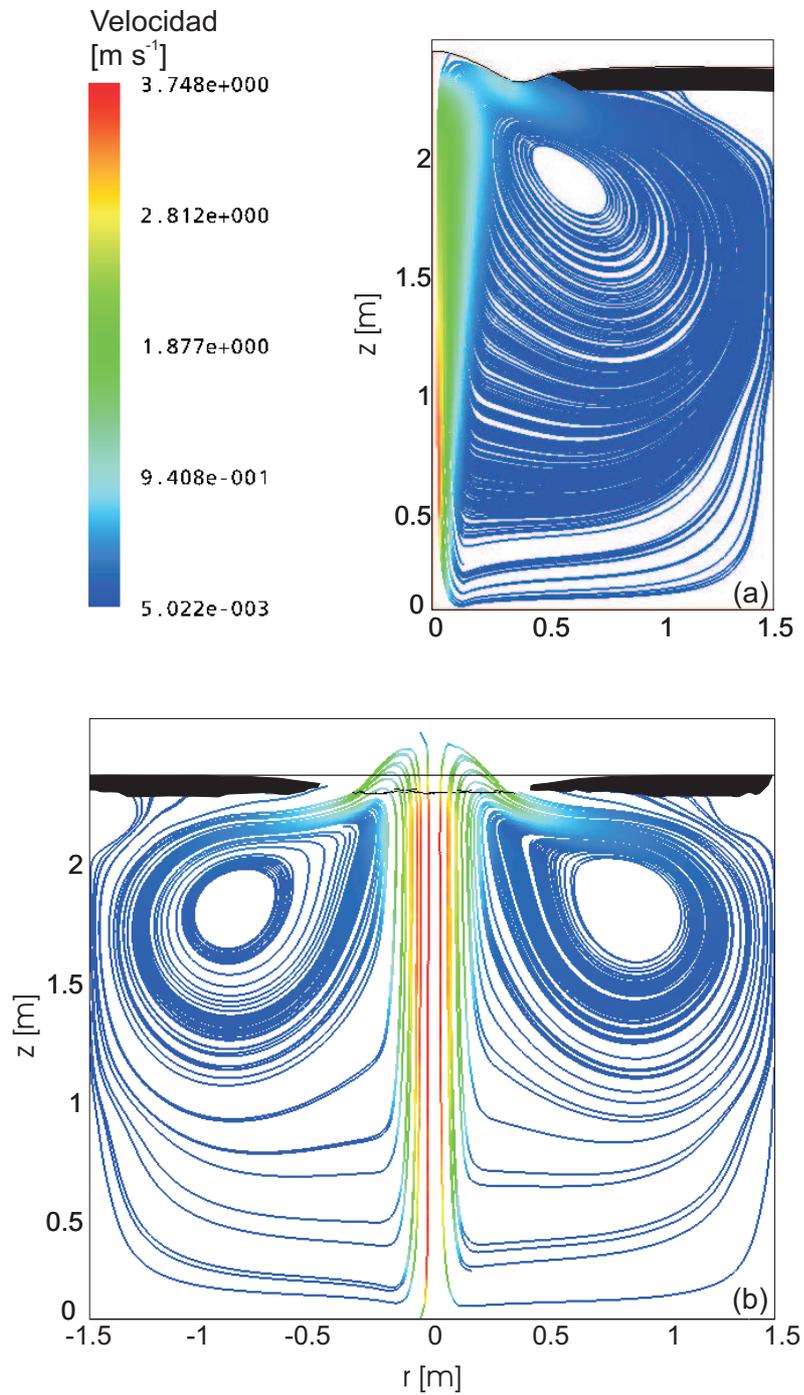


Figura 6.31: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines en el plano para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$. (a) Resultados para un dominio axisimétrico y (b) Resultados para un dominio 3D.

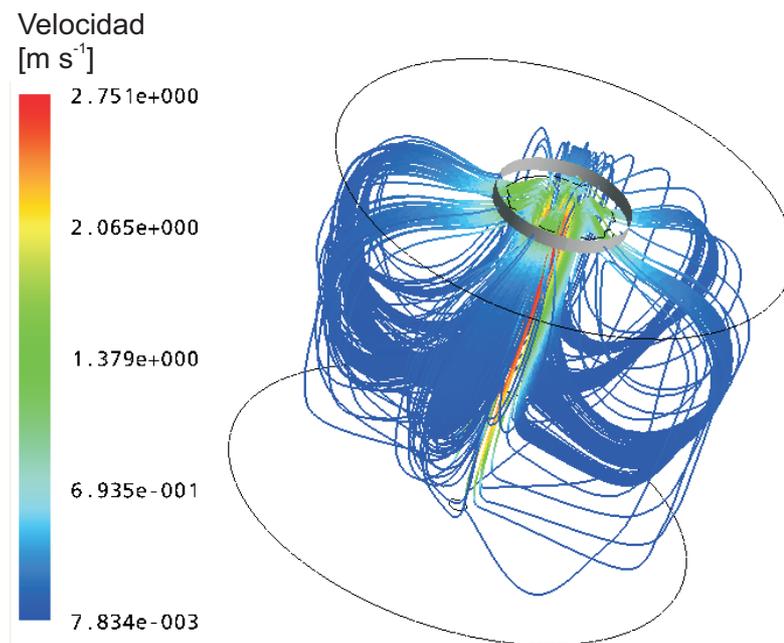


Figura 6.32: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$.

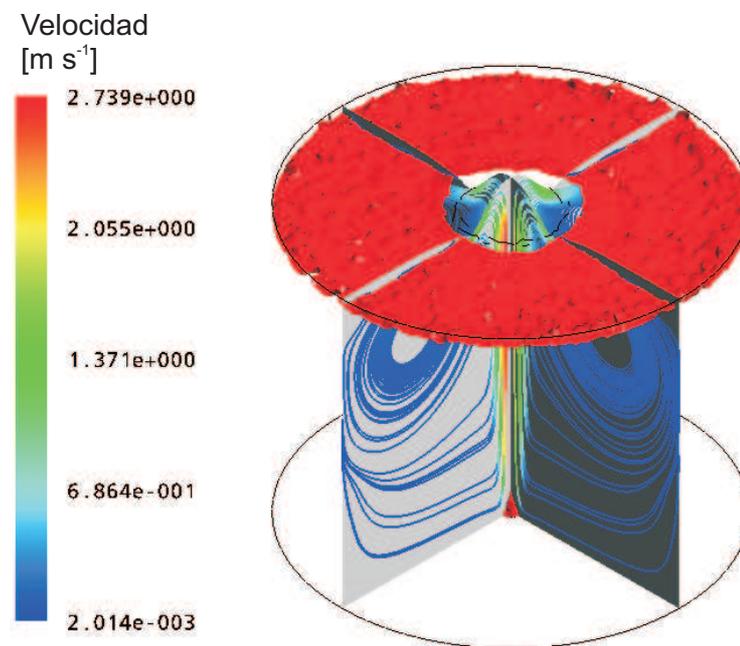


Figura 6.33: Cuchara siderúrgica de una capacidad de 100 t de acero. Streamlines e isosuperficie correspondiente a una fracción de escoria de 0.99 para un caudal $Q = 160 \text{ l min}^{-1}$.

Capítulo 7

Conclusiones

Esta Tesis trata en general sobre el modelado de flujos multifásicos presentes en la industria siderúrgica y en particular se orienta a procesos de afino de aceros en la cuchara siderúrgica donde conocer un diagnóstico sobre el atrape de escoria es de vital importancia.

Como corolario de esta Tesis se pueden extraer dos ejes temáticos en los cuales se han presentado contribuciones, por un lado en los aspectos propios del modelado donde todavía está en discusión la validez de ciertos modelos ampliamente usados para aplicaciones de flujo multifásico, y por otro la aplicación industrial de estos modelos al problema de afino de aceros en la cuchara siderúrgica.

Esta Tesis presenta un detallado resumen de los diferentes modelos que se pueden emplear para resolver problemas de flujo multifásico presentes en la industria siderúrgica. De la misma se pueden extraer conclusiones acerca de cual sería la mejor elección de acuerdo al tipo de problema a resolver.

Se ha revisado la formulación matemática del problema desde principios físicos y matemáticos básicos y se han presentado desde los modelos más complejos como el modelo multifluido, hasta modelos más simples como el modelo de mezcla.

Estos modelos han sido finalmente formulados en términos numéricos optando para su resolución por el método de los elementos finitos, pensando en contribuir a su uso en este tipo de problema ya que existen pocas referencias que dan cuenta de su utilización.

Debido a numerosos inconvenientes encontrados para hallar una solución numérica al problema utilizando el modelo multifluido, se realizó un exhaustivo estudio bibliográfico del tema que desembocó en la afirmación que el modelo multifluido está matemáticamente mal planteado como problema de valores iniciales y que requiere ciertos cuidados para poder alcanzar una solución numérica.

A raíz de esto se incorporó a la Tesis el uso de un código comercial que cuenta con modelos adecuados para regularizar el modelo matemático para un conjunto acotado de parámetros del flujo, a la vez que se continuó desarrollando el software propio para poder

analizar esta dificultad de índole matemática.

Con el código comercial se pudieron resolver algunos de los problemas planteados en el marco de esta Tesis, mientras que con el software propio se propuso resolver el problema de la mala postura matemática mediante una técnica ampliamente usada en otro contexto, pero novedosa en este, como es la inclusión de una matriz de masa preconditionante.

Por otro lado esta Tesis también propone el uso de un modelo de mezcla (ASMM) el cual es más simple y robusto. Este modelo ha sido formulado numéricamente mediante el uso de elementos finitos y finalmente incorporado al software propio. Se validó su implementación contra resultados obtenidos con el mismo modelo pero usando un software comercial. Se compararon los resultados obtenidos con un modelo multifluido y con un modelo de mezcla frente a datos experimentales siendo esto de suma utilidad dado que no era de conocimiento del autor la existencia de tal comparación.

Del uso de ambos modelos y del pormenorizado análisis matemático del modelo multifluido surgen varias conclusiones que permiten diagnosticar a priori cuál es la mejor elección para afrontar cada problema industrial. Altas relaciones de densidades entre las fases, altas velocidades relativas y altas fracciones de vacío de las fases dispersas suelen ser muy problemáticas para el modelo multifluido.

Estas condiciones se dan en la cuchara siderúrgica en la interacción del argón con el acero, no así en la interacción del acero con la escoria.

En cuanto al tema de aplicaciones industriales esta Tesis pretende contribuir en la aproximación al diagnóstico del fenómeno de atrape de escoria en los procesos de afino de acero. Su simulación puede permitir un control mas exhaustivo del proceso con el fin de aumentar la productividad del mismo en términos económicos. Para ello se incluyó una tercera fase la escoria y por las razones esgrimidas anteriormente se optó por una estrategia de modelado híbrida, tratando de explotar lo mejor de cada modelo. Se usó un modelo de mezcla para la interacción del acero con el argón dada la altísima relación de densidades entre estas fases y la alta fracción de vacío y un modelo de dos fluidos para la interacción de esa mezcla (acero-argón) con la escoria.

Incorporando la superficie libre al modelo se pudo analizar el fenómeno de apertura del ojo y del atrape de escoria en la cuchara siderúrgica.

A continuación se presentan las contribuciones en cada uno de los temas citados con anterioridad.

Una formulación estabilizada de igual orden del método de elementos finitos (SUPG - PSPG) ha sido implementada para resolver un modelo Euleriano-Euleriano. La misma constituye una contribución novedosa al modelo de dos fluidos, dado que son escasas las formulaciones de este modelo usando el método de elementos finitos siendo más abundante en la bibliografía el uso de volúmenes finitos.

Mediante la formulación propuesta se ha logrado describir el comportamiento de los resultados publicados en la bibliografía de referencia, para un canal bidimensional con un escalón. La formulación es robusta para los valores de fracción de vacío empleados, no obstante se han detectado ciertas dificultades numéricas para altos valores de fracción de vacío, como así también para velocidades relativas y diferencias de densidades grandes que dieron sustento a un estudio matemático detallado del modelo, cuyas conclusiones se presentan más adelante.

Debido a las dificultades encontradas para obtener una solución numérica a los problemas de flujo multifásico usando el modelo multifluido desarrollado, se realizó un exhaustivo estudio bibliográfico sobre este modelo, encontrando una enorme cantidad de publicaciones citadas a lo largo de esta Tesis que dan cuenta de la mala postura matemática del modelo multifluido, como problema de valores iniciales. El mismo se caracteriza por ser no-hiperbólico lo cual redundaba en que no se puede garantizar una solución estable a lo largo de todo el tiempo de simulación. Esto además se ve agravado por el hecho que el fenómeno se manifiesta más notoriamente al refinar las mallas, lo cual va en contra de las necesidades propias del análisis, la de garantizar la convergencia en malla de una solución obtenida. En la literatura revisada la mayoría de los intentos de dar solución a este grave problema utilizaban una aproximación física al mismo, buscando identificar fuerzas de interacción entre las fases que por un lado sean justificables y por otro lado que se modelen matemáticamente con términos que alteren los autovalores de la matriz de advección del sistema. Fuerzas de masa virtual, de lift, de presión interfacial, de dispersión turbulenta van en ese sentido, lamentablemente muchas de ellas incorporando coeficientes inciertos que requieren de su difícil estimación. De todos modos recién en el año 2005, durante el transcurso de esta Tesis, surgió un trabajo de Lahey Jr. que pudo resolver el problema pero solamente para una mezcla aire-agua. Por el lado de la aproximación matemática al problema las contribuciones halladas son escasas.

Cuál fue la idea ?

La idea fue precondicionar el sistema de ecuaciones del continuo modificando la evolución temporal del problema pensando que a nivel industrial muchas veces lo que se busca son soluciones en régimen (casi estacionarias) que permitan diseñar procesos a partir del ajuste de datos operativos.

Esta metodología es muy aplicada en problemas hiperbólicos mal condicionados, como el caso de un flujo compresible a muy bajo número de Mach, o en régimen próximo al transónico, donde interesa la solución estacionaria para el diseño aeronáutico de alas.

Cómo se justifica la idea de este precondicionador ?

Pensando al precondicionador como una proyección que remueva las componentes imaginarias de los autovalores.

De esta forma se logra el objetivo de hacer al mismo hiperbólico.

La matriz de preconditionamiento que se obtuvo cuenta con dos parámetros que se calculan automáticamente sin intervención del usuario, el primero β tiene la finalidad de lograr la hiperbolicidad del modelo y el segundo γ recupera la velocidad de propagación de las ondas del modelo original. Ambos parámetros son función de la fracción de vacío y de las relaciones de velocidad y densidad.

El análisis de las características del modelo preconditionado, no evidencia componente imaginaria alguna y mantiene la componente real del modelo original.

En esta Tesis se muestran resultados para el modelo con $\gamma = 1$ para un problema test muy usado por todos aquellos que desarrollan modelos físicos y/o métodos numéricos para el modelo multifluido, denominado *water faucet*. Se incluye además un test muy similar a este pero más severo para mostrar la robustez de la matriz de masa preconditionante desarrollada.

Se desarrolló una formulación por elementos finitos estabilizada para el modelo de mezcla algebraico (ASMM) para poder evaluar la factibilidad de usarlo como herramienta de predicción y diagnóstico para problemas siderúrgicos industriales. Este modelo a diferencia del modelo multifluido es considerablemente más robusto, menos dependiente de la experiencia del usuario, menos dependiente del problema y su rango de operación. Todo esto lo hace muy atractivo restando por determinar si su alcance o precisión son adecuadas para dar respuesta a las necesidades industriales.

A lo largo de esta Tesis se compararon exitosamente resultados obtenidos con este desarrollo realizado con elementos finitos contra resultados equivalente obtenidos mediante un código comercial basado en volúmenes finitos. Además se hicieron comparaciones entre resultados obtenidos con el modelo multifluido contra el modelo de mezcla y ambos contra mediciones experimentales encontrándose que el modelo de mezcla es una buena herramienta para este fin.

Lo anterior está basado en problemas donde intervienen dos fases, una líquida y otra gaseosa. En el caso de la cuchara siderúrgica la existencia de burbujas de diferente tamaño desparramadas por todo el seno del acero líquido contenido en la cuchara no es de vital importancia para el diagnóstico del funcionamiento del proceso, a menos de la capacidad de agitación que estas poseen. De todos modos los resultados comparativos dan muestra de la buena predicción que el modelo de mezcla produce en términos de agitación motivo por el cual no es necesario entrar en mayor detalle, usando un modelo multifluido, al costo de los otros inconvenientes que aparecen por tal motivo.

No obstante este no es el caso de la interacción del acero líquido con la escoria. Aquí importa como se ensucia el acero por el atrape de la escoria presente en la parte superior de la cuchara y también importa la distribución de tamaños porque influye sobre las

inclusiones presentes en el producto final a través del modelo de atrape. Esto motivó al desarrollo de un modelo híbrido, donde la interacción acero con escoria es resuelta mediante un modelo como el multifluido que tiene mayor exactitud en la predicción de la interacción entre las fases y que por la baja relación de densidades entre estas dos fases no produce demasiados inconvenientes numéricos.

Finalmente esta Tesis muestra algunos resultados en cuanto al atrape de escoria en procesos siderúrgicos a escala industrial. Si bien estos resultados son preliminares son importantes debido a la escasez de aportes en la bibliografía específica.

Se introduce a la velocidad crítica de atrape como indicador de la existencia de atrape de escoria en el acero. Si bien el mismo es utilizado con frecuencia por parte de los experimentalistas, su aplicación en conjunción con los métodos numéricos es novedosa, y muestra un potencial importante para futuros desarrollos en modelos de atrape.

El número de Weber como indicador de atrape es comúnmente más utilizado. Incluso para aplicaciones siderúrgicas, se encuentran bien establecidos los valores críticos a partir de los cuales existe atrape de escoria.

No obstante estos indicadores por sí solos no brindan toda la información necesaria como para hacer un diagnóstico certero, por lo que es crucial utilizar a los mismos en conjunción con las isocurvas o isosuperficies de fracción de escoria, normalmente acotada entre un 0.5 y 5% de fracción de escoria.

Se estudió el atrape de escoria en una cuchara siderúrgica de 100 t de capacidad de acero, para caudales de operación de 35, 80, 120 y 160 l min⁻¹. Los resultados obtenidos con los distintos indicadores de atrape mostraron una buena concordancia y una sensibilidad aceptable en las predicciones.

A modo de recomendaciones y sugerencias esta tesis muestra los criterios a ser tenidos en cuenta para resolver problemas de flujo multifásico de interés industrial en sistemas gas-líquido. En particular aquellos presentes en procesos de afino de acero. Los estudios realizados en esta Tesis consideran satisfactorio al modelo de mezcla para su uso en la predicción de la interacción del acero líquido con el argón inyectado para agitar el baño. Por otro lado propone un modelo híbrido para incluir a la escoria, necesaria para diagnosticar el atrape de la misma durante el proceso de afino y por ende las mermas de material y la productividad del proceso. La Tesis presenta la problemática del modelado y las dificultades encontradas por el mal planteamiento de las ecuaciones del modelo multifluido. Propone una solución desde una perspectiva matemática y abre un potencial camino por donde se pueden realizar aportes futuro con la finalidad de lograr mejorar los modelos usados en este área.

Apéndice A

Análisis Tensorial

A.1. Introducción

El objetivo del análisis tensorial es proveer un camino sistemático para transformar cantidades tales como vectores y matrices desde un sistema de coordenadas a otro. El análisis tensorial es una herramienta muy poderosa para realizar tales transformaciones, aunque generalmente sea complicado. Sin embargo en este apartado sólo se analizan los elementos presentes en el análisis tensorial Cartesiano, poniendo especial atención sobre la notación, la nomenclatura y algunos tensores especiales.

A.2. Definición de Cantidades y Operadores

Vectores

Para mantener la consistencia entre el análisis tensorial general y el Cartesiano se usan los términos subíndice e índice de igual manera. Los componentes de un vector \mathbf{x} se denominan x_1, x_2, \dots, x_n . Por ejemplo, en un espacio tridimensional, se escribe el vector de coordenadas $\mathbf{x} = (x, y, z)$ como $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$.

Si se considera la ecuación que describe un plano en el espacio tridimensional,

$$a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 = c, \tag{A.1}$$

donde a_i y c son constantes. Esta ecuación puede ser escrita como

$$\sum_{i=1}^3 a_i x_i = c. \tag{A.2}$$

En el análisis tensorial se introduce la convención de Einstein y se reescribe la Ec.A.2 en la forma

$$a_i x_i = c. \quad (\text{A.3})$$

La convención de Einstein dice:

La repetición de un índice en un término denota sumatoria con respecto a ese índice en su rango

El **rango** de un índice es el conjunto de n valores enteros que va desde 1 a n . El índice sobre el que se efectúa la sumatoria es denominado **índice mudo** y sobre el cual no se realiza la sumatoria se denomina **índice libre**. Debido a que el índice mudo indica sumatoria, es innecesario que el símbolo sea usado. Por lo tanto, $a_i x_i$ puede ser reemplazado por $a_j x_j$, ya que

$$\sum_{i=1}^3 a_i x_i = \sum_{j=1}^3 a_j x_j. \quad (\text{A.4})$$

Ahora, si se considera un vector unitario \mathbf{n} en el espacio tridimensional. Si los versores en las direcciones x_1 , x_2 y x_3 son denominados \mathbf{i}_1 , \mathbf{i}_2 e \mathbf{i}_3 , los cosenos directores α_1 , α_2 y α_3 para el vector \mathbf{n} son,

$$\alpha_k = \mathbf{n} \cdot \mathbf{i}_k, \quad (\text{A.5})$$

esta expresión no implica sumatoria, no es más que una forma corta de las tres ecuaciones que definen los cosenos directores. Como la longitud del versor es uno, se puede hacer el producto punto de cada $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ respecto así misma y se obtiene que

$$\alpha_i \alpha_i = 1. \quad (\text{A.6})$$

Ahora se considera otro ejemplo, el diferencial total de una función de tres variables, $p(x_1, x_2, x_3)$

$$dp = \frac{\partial p}{\partial x_1} dx_1 + \frac{\partial p}{\partial x_2} dx_2 + \frac{\partial p}{\partial x_3} dx_3, \quad (\text{A.7})$$

en notación tensorial,

$$dp = \frac{\partial p}{\partial x_i} dx_i. \quad (\text{A.8})$$

La ecuación A.8 puede ser pensada como el producto punto del gradiente de p , denominado ∇p , y el vector diferencial $d\mathbf{x} = (dx_1, dx_2, dx_3)$. Por lo que se puede decir que la componente i de ∇p , el cual se escribe como $(\nabla p)_i$, se define como

$$\nabla p = \frac{\partial p}{\partial x_i} = p_{,i}, \quad (\text{A.9})$$

donde una coma seguida de un índice es una notación tensorial para la derivación con respecto a x_i . De manera similar, la divergencia de un vector \mathbf{u} está dada por

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = u_{i,i}, \quad (\text{A.10})$$

donde nuevamente se marca la derivación con respecto a x_i con el subíndice “ $,i$ ”.

Matrices

Para el caso de matrices, se definen dos subíndices. El primero corresponde al número de fila y el segundo índice al número de columna. Por ejemplo, se considera una matriz $[A]$ de 3×3 , definida como

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

En notación tensorial, la matriz $[A]$ se representa como A_{ij} . Si se post-multiplica una matriz B_{ij} de $m \times n$ por un vector columna x_j , de $n \times 1$, su producto es un vector columna y_i , de $m \times 1$. Si se usa la convención, se escribe

$$y_i = B_{ij} x_j. \quad (\text{A.12})$$

La Ec. A.12 contiene ambos índices, un índice libre (i) y uno mudo (j). El producto de la matriz cuadrada A_{ij} y su inversa es la matriz identidad,

$$[A][A]^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

La Ec. A.13 se reescribe en notación tensorial de la siguiente manera:

$$A_{ik}(A^{-1})_{kj} = \delta_{ij}, \quad (\text{A.14})$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker definida como

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}. \quad (\text{A.15})$$

Se puede usar la delta de Kronecker para reescribir la Ec. A.6 como

$$\alpha_i \delta_{ij} \alpha_j = 1. \quad (\text{A.16})$$

Esto corresponde al pre-multiplicar la matriz de 3×3 δ_{ij} por el vector fila $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ y post-multiplicar este producto por el vector columna $(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)^T$, donde el supraíndice T representa la transpuesta.

El determinante de la matriz A_{ij} es

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix} = \begin{aligned} & A_{11}A_{22}A_{33} + A_{21}A_{32}A_{13} + A_{31}A_{12}A_{23} \\ & - A_{11}A_{32}A_{23} - A_{12}A_{21}A_{33} - A_{13}A_{22}A_{31} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

El análisis tensorial provee una expresión para esta operación, se reemplaza la Ec. A.17 por

$$\det(\alpha_{ij}) = |\alpha_{ij}| = \epsilon_{rst} A_{r1} A_{s2} A_{t3}. \quad (\text{A.18})$$

donde ϵ_{rst} es el **tensor permutación**, definido como

$$\begin{aligned} \epsilon_{123} &= \epsilon_{231} = \epsilon_{321} = 1 \\ \epsilon_{213} &= \epsilon_{321} = \epsilon_{132} = -1 \\ \epsilon_{111} &= \epsilon_{222} = \epsilon_{333} = \epsilon_{112} = \epsilon_{113} = \epsilon_{221} = \epsilon_{223} = \epsilon_{331} = \epsilon_{332} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

En otras palabras, ϵ_{ijk} es nulo siempre que los valores de cualquiera de dos índices sean iguales; $\epsilon_{ijk} = 1$ cuando los índices surgen de una permutación par; y $\epsilon_{ijk} = -1$ si resultan de una permutación impar.

Puede determinarse sin dificultad, que el producto vectorial de dos vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} puede ser expresado como sigue

$$(\mathbf{a} \times \mathbf{b})_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k. \quad (\text{A.20})$$

En particular el rotor de un vector \mathbf{u} es

$$(\nabla \times \mathbf{u})_i = \epsilon_{ijk} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} = \epsilon_{ijk} u_{k,j}. \quad (\text{A.21})$$

La delta de Kronecker y el tensor permutación son cantidades muy importantes y se encuentran relacionadas de la siguiente forma

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ist} = \delta_{js} \delta_{kt} - \delta_{jt} \delta_{ks}. \quad (\text{A.22})$$

Tensores

Por último resta definir un tensor. Los tensores son clasificados según su rango. Para determinar el rango de un tensor, simplemente se cuenta el número de índices.

El rango menor es cero y corresponde a un escalar, es decir una cantidad que tiene sólo una magnitud. Las propiedades termodinámicas tales como la presión y la densidad son cantidades escalares. Los vectores tales como la velocidad, la vorticidad y el gradiente de presión son tensores de rango uno. Estos tienen magnitud y dirección. Las matrices son tensores de rango dos. El tensor de tensiones es un buen ejemplo para ilustrar la interpretación física de un tensor de rango dos. Define una fuerza por unidad de área que tiene una magnitud y dos direcciones, la dirección de la fuerza y de la dirección de la normal al plano sobre el cual actúa la fuerza.

A medida que el rango de los tensores aumenta la interpretación física se vuelve más difícil de determinar. Pero en general los tensores de relevancia física tienen un rango dos o menor. El tensor permutación tiene un rango 3, por ejemplo, y fue definido por la Ec. [A.19](#).

Un tensor a_{ij} es **simétrico** si $a_{ij} = a_{ji}$. Muchos tensores importantes en la matemática física son simétricos, tal es el caso del tensor de tensiones, el de deformación y el de velocidad de deformación, el tensor de momento de inercia y el de masa virtual. Un tensor es antisimétrico si $a_{ij} = -a_{ji}$.

Es importante mencionar, que al efectuar las operaciones del análisis tensorial con tensores que no son operadores diferenciales, no se ha prestado particular atención en preservar el orden de los términos, como sucedió en la Ec. [A.16](#). No hay confusión si se escribe $\delta_{ij} \alpha_i \alpha_j$ con $\alpha_i \delta_{ij} \alpha_j$.

Apéndice B

Análisis del Fenómeno Físico de Atrape de Escoria

B.1. Introducción

El presente apéndice tiene como objetivo hacer un análisis del fenómeno de atrape de escoria desde la óptica física, incorporando los conocimientos necesarios para poder evaluar los resultados numéricos obtenidos.

B.2. Fenómeno de Atrape de Escoria

El atrape de una fase en otra es un fenómeno complejo, la mayoría de los artículos y textos que tratan el tema desde la óptica numérica no profundizan lo suficiente en la física del problema. Existe una disociación entre los estudios experimentales y los correspondientes numéricos. Se puede citar el trabajo del Prof. Celik [CUW99] donde se analiza en forma equilibrada (experimental y teórica) este fenómeno.

A continuación se incorporan conocimientos básicos como son, descripción fenomenológica y tipos de atrape, fuerzas presentes en el fenómeno de atrape de escoria y números adimensionales.

B.2.1. Descripción Fenomenológica- Tipos de Atrape

El atrape de escoria en el acero se da en mayor medida en la zona adyacente al ojo por medio de dos mecanismos distintos:

Atrape Estacionario

Se produce cuando el acero líquido retorna al núcleo de la cuchara, arrastrando gotas y ligamentos de la capa de escoria debido a las altas tensiones de corte (Fig.B.1 a). Estas gotas o ligamentos se pueden romper en gotas más pequeñas dependiendo de las condiciones locales del flujo (por ejemplo niveles de turbulencia, velocidades relativas, etc.).

Atrape por KHI-(Kelvin-Helmholtz Instability)

Este tipo de atrape tiene lugar en una zona más alejada del ojo y puede estar presente para bajos caudales de argón sin necesidad de que exista apertura del ojo. Cuando el flujo se vuelve paralelo a la capa de escoria, se originan inestabilidades del tipo **KHI** bien definidas (Fig.B.1 b) que desprenden pequeñas gotas de escoria que pasan a la fase continua de acero.

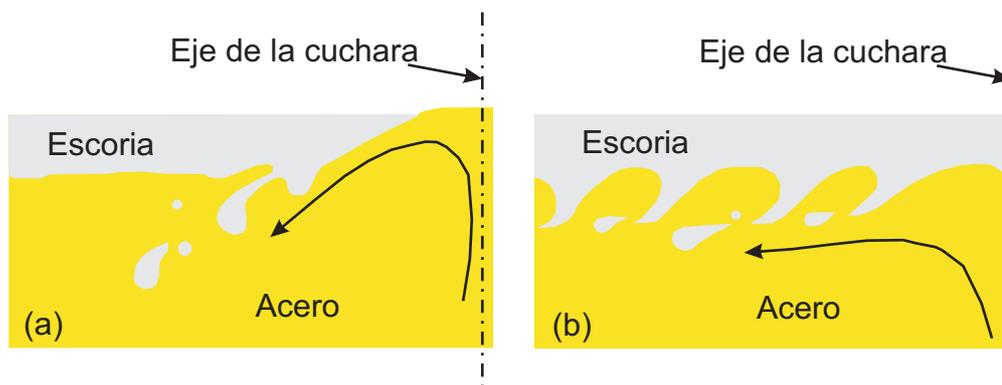


Figura B.1: Representación esquemática del atrape de escoria (a) estacionario y (b) por KHI.

B.2.2. Fuerzas en el Fenómeno de Atrape

Las fuerzas dominantes presentes en el fenómeno de atrape de escoria se observan en la Fig. B.2 (página siguiente), las cuales pueden ser clasificadas en dos grupos, *fuerzas estabilizantes* y *fuerzas inestabilizantes*. Estas fuerzas compiten entre sí para dar origen a los distintos regímenes de la interfase entre fases, siendo su resultado final el atrape de una fase en otra. Las fuerzas presentes en la interfase son,

- **Fuerzas de corte o inerciales, (F_c):** se originan debido al fenómeno de corte en torno a la interfase, pudiendo observar un gradiente de velocidad en la capa de

mezcla definido a ambos lados de la interfase. Estas fuerzas dan origen a inestabilidades del tipo Kelvin-Helmholtz, las cuales serán analizadas en profundidad en el apartado siguiente. Las fuerzas de corte o inerciales son caracterizadas por las diferencia de velocidades de la corriente libre a un lado y otro de la capa de mezcla, y por el espesor de esta última.

- **Fuerzas de flotación o de boyancia, (F_b):** tienen origen en la diferencia de densidad que existe entre las fases, son fuerzas estabilizadoras, dado que cuanto mayor sea el gradiente de densidad entre las fases en la interfaz, más estable será la interfaz. Estas fuerzas son dominantes, por ejemplo, en fenómenos oceánicos donde la relación de densidades es aproximadamente 1000:1.
- **Fuerzas de tensión superficial, (F_σ):** en la interfase entre un líquido y un gas o entre dos líquidos inmiscibles, se forma una película o capa debido a la atracción molecular del líquido bajo la superficie, la fuerza requerida para formar esta película se denomina fuerza de tensión superficial. La misma ejerce un efecto estabilizador ante una perturbación externa de la interfase.

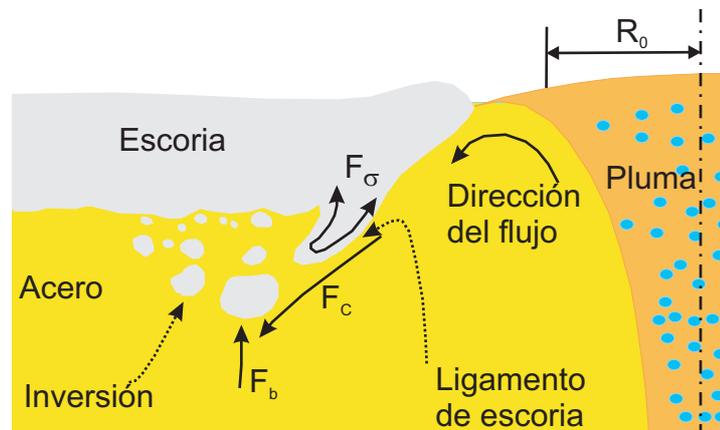


Figura B.2: Representación esquemática del atrape de escoria en el ojo. Las fuerzas que compiten en el fenómeno de atrape son F_c , F_b y F_σ , fuerzas debido a las tensiones de corte, boyancia y a la tensión superficial respectivamente.

B.2.3. Números Adimensionales

Los parámetros adimensionales profundizan de manera significativa la comprensión de los fenómenos de fluidos, permitiendo realizar generalizaciones de datos experimentales, reduciendo tiempos y costos. En este apartado se presentan los números adimensionales básicos utilizados para describir el fenómeno de atrape, estos son:

Número de Richardson

Representa una medida relativa de la influencia de las fuerzas de flotación sobre las fuerzas inerciales. Hay definidas matemáticamente un número importante de expresiones para el mismo. A continuación se presenta una de las más utilizadas, el número de Richardson de capa (*layer*),

$$Ri_L = \frac{g \Delta\rho h}{\rho_{es}(\Delta U)^2}, \quad (\text{B.1})$$

donde $\Delta\rho$ es la diferencia de densidades, ρ_{es} es la densidad de la escoria en este caso la fase más liviana, g la aceleración de la gravedad igual a 9.81 m/s, (ΔU) es la diferencia de velocidad entre las dos capas de fluidos y h es el espesor de la capa de mezcla.

Número de Weber

Es la relación de las fuerzas inerciales a las fuerzas de tensión superficial, es importante en interfases gas-líquido o líquido-líquido o también donde estas interfases están en contacto con una frontera. En el caso de atrape de escoria para el ojo de la cuchara o el atrape de polvo colador en el molde, es ampliamente utilizado por los experimentalistas, definiendo valores críticos del mismo en base a modelos físicos en frío para establecer cuando existe o no atrape.

$$We = \frac{v_{r,ac}^2 \rho_{ac}}{\sqrt{\sigma_{ac,es} g (\rho_{ac} - \rho_{es})}}, \quad (\text{B.2})$$

siendo $v_{r,ac}$ la velocidad radial del acero.

B.3. Regímenes del Flujo en la Interfaz

A continuación se analizan los tres regímenes del flujo que pueden estar presentes en la interfase entre fases: régimen de interfase turbulenta, un segundo que resulta de la combinación de los regímenes de K-H (Kelvin-Helmholtz) y ruptura de onda, denominado régimen de ruptura por inestabilidades del tipo Kelvin-Helmholtz (esta agrupación es realizada dado que el mecanismo de formación de gotas es el mismo para ambos) y por último el régimen de difusión molecular.

B.3.1. Régimen de Interfaz Turbulenta

Este régimen se presenta donde las fuerzas inerciales son dominantes. En la interfase están ausentes estructuras vorticosas de gran escala, siendo posible observar la presencia de estructuras de pequeña escala cuyo efecto es similar al que se evidencia en un flujo homogéneo, la capa de fluido adyacente a la interfase es incorporada o desplazada hacia la interfase misma.

Para entender el mecanismo de atrape para este régimen se supone la presencia de un sistema formado por dos fluidos inmiscibles (ver [TB06]). Al ubicarse a un lado de la interfase donde el flujo es turbulento se puede observar que las fluctuaciones de mayor contenido energético tienden a dispersar el flujo, y posiblemente romper la interfase desprendiendo de la misma gotas (ver [BP01]), existiendo una competencia entre las fuerzas de inercia y las debidas a tensión superficial (Número de Weber).

Las fluctuaciones de menor contenido energético también pueden producir deformaciones. Esta componente de la turbulencia se manifiesta en sí misma a través de ondas cuya altura podemos calcular a partir de una relación hidrostática $\xi \simeq p/\rho g$, donde p es la componente fluctuante de la presión, ρ es la densidad de la fase opuesta a la de análisis y g es la aceleración de la gravedad. Phillips demostró que cuando las fluctuaciones de presión asociadas con la turbulencia advectan a lo largo de la interfase con la velocidad de las ondas de la superficie libre se presenta resonancia con modos de la superficie, los cuales tienden a crecer hasta desprender gotas, y siendo por lo tanto la otra fuente de atrape. En general en este régimen las gotas que se generan son de un tamaño pequeño, por lo tanto el tamaño de las gotas atrapadas depende directamente de la energía cinética turbulenta κ y de la disipación de la energía cinética turbulenta ϵ .

B.3.2. Régimen de Inestabilidades del Tipo Kelvin-Helmholtz

Este segundo régimen se presenta para números de Ri moderado, la interfase del fluido se vuelve inestable y se desarrollan ondas. El mecanismo de mezcla es dominado por el roll-up y el apareamiento de vórtices del tipo K-H, los cuales dispersan el fluido hacia fuera de la región de mezcla de fluido. Dependiendo del valor del número de Ri estas ondas pueden crecer y colapsar cíclicamente (Ri bajo), o volverse demasiado grandes (Ri altos), conduciendo a una inestabilidad gravitacional, provocando finalmente su ruptura (Figs. B.3 y B.4, página siguiente).

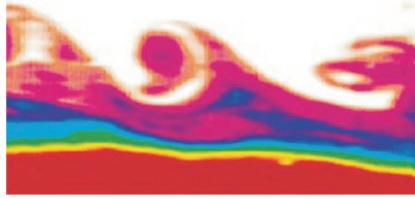


Figura B.3: Régimen de Kelvin-Helmholtz.

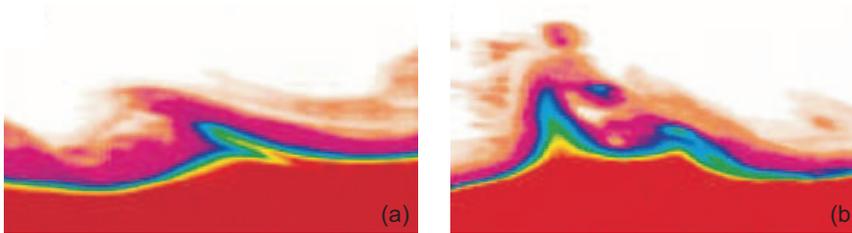


Figura B.4: Régimen de ruptura de ondas: (a) Instante previo a la ruptura; (b) Ruptura de la onda.

B.3.3. Régimen de Difusión Molecular

Este régimen se presenta para números de Ri relativamente grandes, donde los efectos inerciales son muy pequeños comparados con los de flotación. Debido a esto, muy pocas o ninguna inestabilidad se desarrolla en la interfase, y la mezcla es dominada por la difusión molecular. Para este régimen podemos definir la escala de longitud característica como $l_d = \nu/V$ donde ν es la viscosidad cinemática y V es la velocidad vertical.

Bibliografía

- [AB90] P.E. Anagbo and J.K. Brimacombe. Plume characteristics and liquid circulation in gas injection through a porous plug. *Metallurgical Transactions B*, 21B:637–648, 1990. [18](#), [53](#), [118](#), [119](#), [125](#), [146](#), [155](#), [159](#)
- [AEA04] AEA Technology plc, Harwell, UK. *AEA Technology. User Manual to CFX Version 5.7*, 2004. [80](#), [146](#), [149](#), [153](#)
- [And99] A. Anderson. Fixing Einstein’s equations. *Phys. Rev. Let.*, 82:43–84, 1999. [63](#)
- [AO96] M.J. Andrews and P.J. ORourke. The multiphase particle-in-cell (mp-pic) method for dense particulate flows. *International Journal of Multiphase Flow*, 22:379–402, 1996. [12](#)
- [Arn88] G.S. Arnold. *Entropy and objectivity as constraints upon constitutive equations for two-fluid modeling of multiphase flow*. PhD thesis, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York, 1988. [23](#)
- [BBG02] G.C. Buscaglia, F.A. Bombardelli, and M.H. García. Numerical modeling of large-scale bubble plumes accounting for mass transfer effects. *International Journal of Multiphase Flow*, 28:1763–1785, 2002. [100](#), [120](#)
- [BE02] E. Burman and A. Ern. Nonlinear diffusion and discrete maximum principle for stabilized galerkin approximations of the convection-diffusion-reaction equation. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 191:3833–3855, 2002. [22](#)
- [Bes90] D. Bestion. The physical closure laws in cathare code. *Nucl. Eng. Design*, 124:229–245, 1990. [62](#)
- [BH82] A.Ñ. Brooks and T. J. R. Hughes. Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 32:199–259, 1982. [47](#)
- [BH04] E. Burman and P. Hansbo. Edge stabilization for galerkin approximations of convection-diffusion-reaction problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 193:1437–1453, 2004. [22](#)
- [BP01] M. Brocchini and D. H. Peregrine. *J. Fluid Mech.*, 449:225, 2001. [203](#)
- [CAG⁺97] F. Coquel, K. El. Amine, E. Godlewski, B. Perthame, and P. Rasle. A numerical method using upwind schemes for the resolution of two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 136:272–288, 1997. [80](#)
- [CB87] A. H. Castillejos and J. K. Brimacombe. Measurement of physical characteristics of bubbles in gas-liquid plumes: Part ii. local properties of turbulent air-water plumes in vertically injected jets. *Metallurgical Transactions B*, 18B:659–671, 1987. [156](#)
- [CCL02] M. Chung, K. Chang, and S. Lee. Numerical solution of hyperbolic two-fluid two-phase flow model with non-reflecting boundary conditions. *Int. Journal of Engineering Science*, 40:789–803, 2002. [62](#)
- [CGHS02] F. Coquel, T. Gallouët, J. Hérard, and N. Seguin. Closure laws for a two-fluid two-pressure model. *C.R. Acad. Sci. Paris*, I-334:927–932, 2002. [62](#)
- [CGW78] R. Clift, J. Grace, and M. Weber. *Bubbles, Drops and Particles*. Academic Press, 1978. [104](#)
- [Cho67] A. J. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous problems. *J. Comp. Phys.*, 2:12–26, 1967. [74](#)
- [Cod97] R. Codina. Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 156:185–210, 1997. [22](#)

- [Cor02] J. Cortes. On the constructions of upwind schemes for non-equilibrium transient two-phase flows. *Computers & Fluids*, 31:159–182, 2002. 21
- [CS01] W. Chiapparoli and S. Sylvestre. Estudio en modelo de agua sobre el agitado con argón en la cuchara de acero de siderar. Technical report, SIDERAR-Informe ACE 01 086/E, San Nicolas, Argentina, 2001. 10, 133
- [CSS77] C.T. Crowe, M.P. Sharma, and D.E. Stock. The particle-source-in-cell method for gas droplet flow. *Journal of Fluids Engineering*, 99:325, 1977. 12
- [CST98] C. Crowe, M. Sommerfeld, and Y. Tsuji. *Multiphase Flows with Droplets and Particles*. CRC Press, 1998. 12
- [CUW99] I. B. Celik, M. R. Umbel, and W. M. Wilson. Computations of turbulent mixing at the interface of a density stratified, shear layer. In *3rd ASME/JSME Joint Fluids Engineering Conference*, San Francisco, California, 1999. 145, 199
- [dB91] M. Lopez de Bertodano. *Turbulent Bubbly Two-Phase Flow in a Triangular Duct*. PhD thesis, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York, 1991. 152
- [Del76] J.M. Delhaye. *Two-phase Flows and Heat Transfer, Vol.1. In: Kakac, Veziroglu (Ed.)*. Hemisphere, New York, 1976. 23
- [DGB99] J.F. Domgin, P. Gardin, and Mn Brunet. Experimental and numerical investigation of gas stirred ladles. In *Second International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries*, pages 181–186, Melbourne, Australia, 1999. 53
- [DL79] D. A. Drew and R. T. Lahey. Application of general constitutive principles to the derivation of multidimensional two-phase flow equations. *Int. J. Multiphase Flow*, 5:243–264, 1979. 95
- [DL89] D.A. Drew and R.T. Lahey. Application of general constitutive principles to the derivation of multidimensional two-phase flow equations. *International Journal of Multiphase Flow*, 5:243–263, 1989. 23
- [DNT03] T.N. Dinh, R.R. Nourgaliev, and T.G. Theofanous. Understanding the ill-posed two fluid model. In *The 10th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH10)*, Seoul, Korea, 2003. 14, 16, 53, 145
- [DP98] D. A. Drew and S. L. Passman. *Theory of Multicomponent Fluids*. SpringerVerlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1998. 14, 16, 21, 23, 26, 33, 53, 61, 62, 64, 145
- [Dre83] D. A. Drew. Mathematical modeling of two phase flow. *Ann. Rev. Fluid. Mech.*, 15:261–291, 1983. 96
- [EPS98a] G. Espinosa-Paredes and A. Soria. Method of finite difference solutions to the transient bubbly air-water flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluid*, 26:1155–1180, 1998. 23
- [EPS98b] G. Espinosa-Paredes and A. Soria. Method of finite difference solutions to the transient bubbly air-water flows. *Int. J. Numer. Meth. Fluid*, 26:1155–1180, 1998. 95
- [GKC01] J.M Ghidaglia, A. Kumbaro, and G. Le Coq. On the numerical solution to two fluid models via a cell centered finite volume method. *Eur. J. Mech. B - Fluids*, 20:841–867, 2001. 21
- [GKO95] B. Gustafsson, H-O. Kreiss, and J. Olinger. Stabilization of incompressibility and convection through orthogonal sub-scales in finite element method. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1995. 66
- [GL83] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computation*. The Johns Hopkins University Press, 1983. 69
- [GLM01] C. Garnier, M. Lance, and J.L. Marié. Measurements of local flow characteristics in buoyancy-driven bubbly flow at high void fraction. In *Proceedings of the Fourth International Conference on Multiphase Flow*, New Orleans, LA, USA, 2001. 150
- [GMG05] C. Gundlach and J. Martín-García. Hyperbolicity of second order in space systems of evolution equations. *General Relativity and Quantum Cosmology*, 2005. e-print 0506037. 63
- [Had02] J. Hadamard. Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Princeton University Bulletin*, pages 49–52, 1902. 66
- [Hau02] G. Hauke. A simple subgrid scale stabilized method for the advection-diffusion-reaction equation. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 191:2925–2947, 2002. 22
- [Hew82] G.F. Hewitt. *Section 2. In G. Hedsroni, editor, Handbook of Multiphase Systems*. McGraw-Hill, New York, 1982. 5, 17

- [Hil97] K. Hiltunen. A stabilized finite element method for particulate two-phase flow equations—laminar isothermal flow. *Comp. Meth. Applied Mechanics and Engineering*, 147:249–262, 1997. [21](#), [53](#), [54](#)
- [HSA⁺95] A. Hallanger, K. Sveberg, N. Anlnsen, F. Sontabo, and T. Knutsen. A simulation model for three-phase gravity separators. In *Proceedings of the 2nd Colloquium on Process Simulation*, pages 199–213, Espoo, Finland, 1995. [105](#)
- [HW65] F.H. Harlow and J.E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluids with a free surface. *Physics of Fluids*, 8:2182–2189, 1965. [12](#)
- [HW00] Jinsong Hua and Chi-Hwa Wang. Numerical simulation of bubble-driven liquid flows. *Chemical Engineering Science*, 55:4159–4173, 2000. [31](#), [65](#), [152](#)
- [IKNM95] M. Iguchi, H. Kawabatya, K. Nakaajima, and Z. Morita. Continuous measurements of bubble characteristics in a molten iron bath with ar gas injection. *ISIJ International*, 12:980–985, 1995. [53](#), [93](#), [117](#)
- [IM84] M. Ishii and K. Mishima. Two-fluid model and hidrodynamic constitutive relations. *Nucl. Eng. and Des.*, 82:107–126, 1984. [104](#)
- [IMY⁺04] M. Iguchi, K. Miyamoto, S. Yamashita, D. Iguchi, and M. Zeze. Spout eye area in ladle refining process. *Note-ISIJ International*, 44:636–638, 2004. [138](#), [171](#)
- [INSB96] S. Idelsohn, N. Nigro, M. Storti, and G. Buscaglia. A petrov-galerkin formulation for advection-reaction-diffusion problems. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 136:27–46, 1996. [22](#)
- [Ish75] M. Ishii. *Thermo Fluid Dynamic Theory of Two Phase Flow*. Eyrolles, Paris, 1975. [4](#), [6](#), [13](#), [23](#), [30](#), [64](#), [94](#), [95](#), [104](#), [105](#), [145](#)
- [IUU95] M. Iguchi, H. Ueda, and T. Uemura. Bubble and liquid flow characteristics in a vertical bubbling jet. *Int. J. Multiphase Flow*, 21:861–873, 1995. [134](#)
- [IYSM00] M. Iguchi, J. Yoshida, T. Shimizu, and Y. Mizuno. Model study on the entrapment of mold powder into molten steel. *ISIJ International*, 40:685–691, 2000. [11](#), [139](#), [140](#)
- [IZ79] M. Ishii and N. Zuber. Relative motion and interfacial drag coefficient in dispersed two-phase flow of bubbles, drops and particles. *AIChE J.*, 25:843–855, 1979. [66](#)
- [JAS90] S. T. Johansen, N. M. Anderson, and S. R. De Silva. A two-phase model for particle local equilibrium applied to air classification of powder. *Powder Technology*, 63:121–132, 1990. [94](#), [105](#)
- [Jon98] L. Jonsson. *Mathematical Modeling of Selected Ladle Operations*. PhD thesis, Department of Metallurgy Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 1998. [133](#), [135](#), [136](#), [138](#), [140](#)
- [JP85] A.V. Jones and A. Prosperetti. On the stability of first-order differential models for two-phase flow prediction. *Int. J. Multiphase Flow*, 11:133–148, 1985. [64](#)
- [JS90] D. D. Joseph and J. C. Saut. Short wave instabilities and ill posed initial value problems. *Journal of Theoretical and Computational Fluid Mechanics*, 1:191–227, 1990. [61](#)
- [Ke88] Y. Kawai and Y. Shiraishi (eds). *Handbook of Physico-chemical properties at high temperature*. ISIJ, Japan, 1988. [135](#)
- [Key00] B. L. Keyfitz. Mathematical properties of nonhyperbolic models for incompressible two-phase flow. In *Proceedings of the ICMF 2001*, pages —, —, 2000. [61](#)
- [KJ89] H-O. Kreiss and Lorenz J. Initial-boundary value problems and the navier-stokes equations. *New York: Wiley*, 1989. [66](#)
- [KMT99] S. Kallio, M. Manninen, and V. Taivassalo. Turbulence in mixture models. Technical report, VTT Publications-Technical Research Center of Finland, 1999. [105](#)
- [LA02] D. Lathouwers and H. E. A. Van Den Akker. An evaluation of two-fluid models for two-phase turbulent bubbly flows. In *Merseburg Proceedings*, 2002. [125](#)
- [LCK98] S. Lee, K. Chang, and K. Kim. Pressure wave speeds from the characteristics of two fluids, two-phase hyperbolic equation system. *Int. Journal of Multiphase Flow*, 24:855–866, 1998. [62](#)
- [LD88] R. T. Lahey and D. A. Drew. The three dimensional time and volume averaged conservation equations of two-phase flows. *Adv. Nucl. Sci. Technol*, 20, 1988. [13](#), [64](#)

- [LJBK00] H. Laux, S. T. Johansen, H. Berg, and O. S. Klevan. Cfd analysis of the turbulent flow in ladles and the alloying process during tapping of steel furnaces. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 29:71–80, 2000. 21
- [LLJ89] S. L. Lee, R. T. Jr. Lahey, and O. C. Jr. Jones. The prediction of two-phase turbulence and phase distribution phenomena using a k-epsilon model. *Japanese J. Multiphase Flow*, 4:3, 1989. 125
- [LLT⁺07] E. Labourasse, D. Lacanette, A. Toutant, P. Lubin, S. Vincent, O. Lebaigue, J.P. Caltagirone, and Sagaut. Towards large eddy simulation of isothermal two-phase flows: Governing equations and a priori tests. *International Journal of Multiphase Flow*, 33:1–39, 2007. 108
- [LMS04] T. Loimer, G. Machu, and U. Schafinger. Inviscid bubble formation on porous plates and sieve plates. *Chemical Engineering Science*, 59:809–818, 2004. 133
- [Lóp98] M. López de Bertodano. Two fluid model for two-phase turbulent jets. *Nucl. Eng. and Des.*, 179:65–74, 1998. 100
- [LRS01] A. Larue de Tournemine, V. Roig, and C. Suzanne. Experimental study of the turbulence in bubbly flows at high void fraction. In *Proceedings of the Fourth International Conference on Multiphase Flow*, New Orleans, LA, USA, 2001. 150
- [LYT05] R. T. Jr. Lahey, J. Yin, and P. Tiwari. Analysis of void wave propagation and sonic velocity using a two-fluid model. *Multiphase Science and Technology*, 17:293–320, 2005. 62
- [Maa38] O. Maass. Changes in the liquid state in the critical temperature region. *Chem. Rev.*, 23:17–28, 1938. 25
- [Mar00] W. Martinson. *Index and characteristic analysis of Partial Differential Equations*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology (MIT), Massachusetts, USA, 2000. 66
- [MC03] N. Macrossan and L. Charles. Viscosity of argon at temperatures >2,000 k from measured shock thickness. *Physics Fluids*, A15:1363–1371, 2003. 135
- [MG95] D. Mazumdar and R. I. L. Guthrie. The physical and mathematical modelling of gas stirred ladle systems. *ISIJ International*, 35:1–20, 1995. 3, 93, 124, 135, 139
- [Mic88] J. C. Micaelli. *Document Syntheses CATHARE (CATHARE An Advanced Best-Estimate Code for PWR Safety Analysis)*. CATHARE SETH/LEML-EM/88-129, Grenoble Cedex, 1988. 62
- [Mil02] M. Milelli. *A Numerical Analysis of Confined Turbulent Bubble Plumes*. PhD thesis, Swiss Federal Institute of Technology, Zurich, Switzerland, 2002. 18, 120, 122, 125, 159
- [MLDJ03] F.J. Moraga, A.E. Larreteguy, D.A. Drew, and R.T. Lahey Jr. Assessment of turbulent dispersion models for bubbly flows in the low stokes number limit. *Int. J. Multiphase Flow*, 29:655–673, 2003. 152
- [MNC02] C. G. Mendez, N. Nigro, and A. Cardona. Drag and non-drag force influences in numerical simulations of metallurgical ladles. *Journal of Materials Processing Technology*, 160:296–305, 2002. 15, 17, 62, 66, 93, 138
- [MTK96] M. Manninen, V. Taivassalo, and S. Kallio. On the mixture model for multiphase flow. Technical Report 288, VTT Publications-Technical Research Center of Finland, 1996. 13, 96, 105, 106
- [Nig79] R.I. Nigmatulin. Spatial averaging in the mechanics of heterogeneous and dispersed systems. *International Journal of Multiphase Flow*, 5:353–385, 1979. 23
- [Niu01] Y.Y. Niu. Advection upwinding splitting method to solve a compressible two-fluid model. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 36:351–371, 2001. 80
- [NMA02] Norberto Nigro, M. Storti, and A. Zanotti. Numerical aspects of k-epsilon turbulence modeling using a finite element incompressible navier-stokes formulations. In *Mecom 2002-Mecánica Computacional vol. XXI*, pages 700–719, Santa Fe-Paraná, Argentina, 2002. 22
- [PD86] K. A. Pericleous and S.Ñ. Drake. *And Algebraic Slip Model of PHOENICS for Multiphase Applications, Numerical Simulation of Fluid Flow and Heat/Mass Transfer Processes*. Lecture Notes in Engineering 18, Springer-Verlag, Berlin, 1986. 94
- [PDL98] J. Park, D. Drew, and R. Lahey. The analysis of void wave propagation in adiabatic monodispersed bubbly two-phase flows using ensemble-averaged two-fluid model. *I.J. of Multiphase Flow*, 24:1205–1244, 1998. 16

- [PJ01] N.A. Patankar and D.D. Joseph. Modeling and numerical simulation of particulate flows by the eulerian-lagrangian approach. *International Journal of Multiphase Flow*, 27:1659–1684, 2001. 12
- [PL98] J.W. Parka and D.A. Drew R.T. Lahey. The analysis of void wave propagation in adiabatic monodispersed bubbly two-phase flows using an ensemble-averaged two-fluid model. *International Journal of Multiphase Flow*, 24:1205–1244, 1998. 23
- [PMR97] H. Pokharna, M. Mori, and V. H. Ransom. Regularization of two-phase flow models: A comparison of numerical and differential approaches. *J. Comp. Phys.*, 134:282–295, 1997. 14, 62, 79
- [Ran85] V. H. Ransom. *RELAP5/MOD2 Code Manual 1, Code 2, Structure, System Models, and Solution Methods*. NUREG/CR 4312, 1985. 21, 79, 80
- [Ran94] V. H. Ransom. *RELAP5/MOD3 Code Manual, Volume 6, Validation of numerical techniques in Relap5/Mod3.0*. NUREG/CR 5535, 1994. 81
- [Reu04] O. Reula. Strongly hyperbolic systems. *General Relativity and Quantum Cosmology*, 2004. e-print 0403007. 63
- [RH84] V. H. Ransom and D. L. Hicks. Hyperbolic two-pressure models for two-phase flow. *J. Comp. Phys.*, 54:124–151, 1984. 21
- [Sag02] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Second Edition Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg New York, 2002. 106
- [Sai95] L. Sainsaulieu. Finite volume approximation of two-phase fluid flows based on an approximate roe-type riemann solver. *J. Comp. Phys.*, 121:1–28, 1995. 21
- [Sch96] M. P. Schwarz. Simulation of gas injection liquid metals. *Applied Mathematical Modelling*, 20:41–51, 1996. 38
- [Sch01] J. Schluter. Influence of axisymmetric assumptions on large eddy simulations of a confined jet and a swirl flow. Technical report, CERFACS, Toulouse, France, 2001. 126
- [SFW97] H. Städtke, G. Franchello, and B. Worth. Numerical simulation of multi-dimensional two-phase flow based on flux vector splitting. *Nuclear Engineering and Design*, 177:199–213, 1997. 62
- [SG82] Y. Sahai and R.I.L. Guthrie. Hydrodynamics of gas stirred melts, part i - gas/liquid coupling. *Metallurgical Transactions B*, 13B:193–, 1982. 121
- [SH 3] H. Städtke and R. Holtbecker. Hyperbolic model for one-dimensional inhomogeneous two-phase flow. In *29th Meet. Of European Two-Phase Flow Group*, June 2-3. 63
- [Shi81] K. Shirabe. *A Mathematical Model of RH Vacuum Degassing System*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology (MIT), Massachusetts, USA, 1981. 101
- [SI01] J. Song and M. Ishii. On the stability of a one-dimensional two-fluid model. *Nucl. Eng. Des.*, 204:101–115, 2001. 14, 53, 145, 146
- [Sim90] O. Simonin. Eulerian formulation for particle dispersion in turbulent two-phase flow. In *Proc. 5th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, pages 156–166, 1990. 104
- [Sla99] J.C. Slattery. *Advanced Transport Phenomena*. Cambridge University Press, Cambridge-UK, 1999. 24, 25
- [SNP] M. Storti, N. Nigro, and R. Paz. *PETSc-FEM A general purpose, parallel, multy-physics fem program*. International Center of Computational Method in Engineering (CIMEC), <http://www.cimec.org.ar/petscfem/>. 22, 94
- [SS75] Y. Sato and K. Sekoguchi. Liquid velocity distribution in two-phase bubbly flow. *Int. J. Multiphase Flow*, 2:79–95, 1975. 125
- [SSS81] Y. Sato, M. Sadatomi, and K. Sekoguchi. Momentum and heat transfer in two-phase bubbly flow - i theory. *Int. J. Multiphase Flow*, 7:167–177, 1981. 125
- [ST88] M. P. Schwarz and W. J. Turner. Applicability of the standard $\kappa - \epsilon$ turbulence model to gas-stirred baths. *Applied Mathematical Modelling*, 12:273–279, 1988. 38
- [Ste98] J. M. Stewart. The cauchy problem and the initial boundary value problem in numerical relativity. *Class. Quantum Grav.*, 15:2865–2889, 1998. 66

- [STK02] S. Kawaguchi S. Taniguchi and A. Kikuchi. Fluid flow and gas-liquid mass transfer in gas-injected vessels. *Applied Mathematical Modelling*, 26:249–262, 2002. 53, 124
- [SV88] O. Simonin and P. L. Violette. On the computation of turbulent two-phase flows in the eulerian formulation. In *EUROMECH 1988*, page 234, Toulouse, France, 1988. 125
- [TB06] M. A. C. Teixeira and S. E. Belcher. *Dynamics of Atmospheres and Oceans*, 41:1, 2006. 203
- [TEB06] G. Tryggvason, A. Esmaeeli, and J. L. Souvik Biswas. Direct numerical simulations of gas/liquid multiphase flows. *Fluid Dynamics Research*, 38:660–681, 2006. 12
- [TF91] H. Turkoglu and B. Farouk. Mixing time and liquid circulation rate in steelmaking ladles with vertical gas injection. *ISIJ International*, 31:1371–1380, 1991. 17, 133
- [TF92] H. Turkoglu and B. Farouk. Effect of gas injection velocity on mixing and heat transfer in molten steel baths. *Numerical Heat Transfer - Part A*, 21:377–399, 1992. 38
- [TMRS92] T. E. Tezduyar, S. Mittal, S. E. Ray, and R. Shih. Incompressible flow computations with stabilized bilinear and linear equal order interpolation velocity-pressure elements. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 95:221–242, 1992. 17, 22, 112
- [TR86] J. A. Trapp and R. A. Riemke. A nearly-implicit hydrodynamic numerical scheme for two-phase flows. *J. Comput. Phys.*, 66:62–82, 1986. 80
- [Tur99] E. Turkel. Preconditioning techniques in computational fluid dynamics. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31:385–416, 1999. 74
- [Uch99] T. Uchiyama. Petrov-galerkin finite element method for gas-liquid two-phase flow based on an incompressible two-fluid model. *Nuclear Engineering and Design*, 193:145–157, 1999. 22
- [Uch02] T. Uchiyama. Finite element analysis of bubbly flow around an oscillating square-section cylinder. *Finite Elements in Analysis and Design*, 38:803–821, 2002. 22
- [Uch03] T. Uchiyama. Numerical prediction of added mass and damping for a cylinder oscillating in confined incompressible gas-liquid two-phase mixture. *Nuclear Engineering and Design*, 222:68–78, 2003. 22
- [Ung95] M. Ungarish. Hydrodynamics of suspensions,. *Int. J. Multiphase Flow*, 21:929–933, 1995. 94, 105
- [UT92] S.O. Univerdi and G. Tryggvason. A front-tracking method for viscous, incompressible, multi-fluid flows. *Journal of Computational Physics*, 100:25–37, 1992. 12
- [Ver95] W. C. Verloop. The inercial coupling force. *Int. J. Multiphase Flow*, 21:929–933, 1995. 94
- [WIG94] D. M. Wang, R. I. Issa, and Gosman. Numerical prediction of dispersed bubbly flow in a sudden enlargement. *Numerical Methods in Multiphase Flow*, 185, 1994. 125, 146
- [Wil00] D. C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. Second Edition DCW-Industries, La cañada, California, 2000. 107, 159
- [XPL87] Z. Xiao, Y. Peng, and C. Liu. *Chin. J. Mater. Sci. Technical*, 3:187, 1987. 142
- [ZF65] N. Zuber and J. A. Findlay. Average volumetric concentration in two-phase flow systems. *J. Heat Trans.*, 87:453–468, 1965. 94
- [Zha00] L. Zhang. Mathematical simulation of fluid flow in gas-stirred liquid systems. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 8:463–476, 2000. 21
- [ZMNS03] A. L. Zanotti, C. G. Mendez, N. Nigro, and M. Storti. Método de elementos finitos estabilizado aplicado a flujos multifásicos. In M. Rosales, V. Cortínez, and D. Bambill, editors, *Mecánica Computacional Vol. XXII*, pages 244–257. AMCA, 2003. 15, 93
- [ZMNS04] A. Zanotti, C. Méndez, N. Nigro, and M. Storti. A preconditioning mass matrix to avoid the ill-posed two-fluid model. In *ENIEF'2004 Conference*, San Carlos de Bariloche, Argentina, 2004. 14, 16, 145
- [ZP94] D. Z. Zhang and A. Prosperetti. Ensemble phaseaveraged equations for bubbly flows. *Phys. Fluids*, 6:295, 1994. 64, 95
- [ZT03] L. Zhang and B.G. Thomas. State of the art in evaluation and control of steel cleanliness. *ISIJ International*, 43:271–291, 2003. 3, 7