SIMULACIÓN NUMÉRICA DEL ENFRIAMIENTO DE PROBETAS DE ÁNODOS VERDES POR CONVECCIÓN NATURAL

San Luis Tolentino¹, Juan Toledo², Jorge Mírez¹, Clifford Torres¹ y Abraham Zamudio¹

- ¹: Grupo de Modelamiento Matemático y Simulación Numérica, Universidad Nacional de Ingeniería (UNI), Lima, Perú. E-mail: sanluist@gmail.com, jmirez@uni.edu.pe, ctorresp@uni.edu.pe, abraham. zamudio@uni.pe
- ²: Centro Interdisciplinario de Investigación Aplicada a la Ingeniería, UNEXPO "AJS" Vice-Rectorado Puerto Ordaz, Bolívar, Venezuela. E-mail: toledo.juan@gmail.com

Resumen: Los ánodos verdes son un compuesto heterogéneo que contiene coque de petróleo, alquitrán y cabos, después de ser cocidos a alta temperatura; se utilizan en el proceso Hall-Heroult para obtener el aluminio. En el presente trabajo, se realizan simulaciones numéricas para el enfriamiento de probetas de ánodos verdes por convección natural, donde cada probeta se sumerge en una masa de agua contenida en un recipiente de vidrio aislado térmicamente. Se empleó el código COMSOL que aplica el método de elementos finitos. Los dominios computacionales fueron mallados con celdas triangulares y se refinados en las regiones críticas. Las ecuaciones de la masa, de la cantidad de movimiento y de la energía se emplearon para obtener la solución del sistema multifísico. Las soluciones numéricas de perfiles de temperatura se obtuvieron en función del tiempo desde el estado inicial hasta el final, para diferentes valores constantes de calores específicos, y las temperaturas obtenidas en el estado final fueron comparadas con las temperaturas de equilibrio experimentales del trabajo de Tolentino, donde los errores porcentuales están en el rango de 0.67-0.91 por ciento. Otras simulaciones numéricas se llevaron a cabo con una ecuación lineal empírica con el calor específico en función de la temperatura, las cuales arrojaron resultados de errores porcentuales en el rango de 0.05-0.91 por ciento. Además, se simuló para el campo de temperatura en estado transitorio, donde se muestra el movimiento de la masa de agua por convección natural. Se concluye que los resultados numéricos obtenidos con el calor específico en función de la temperatura están más ajustados a los datos experimentales.

Palabras Clave: Calor específico, Convección natural, ánodos verdes, Simulación numérica, Sistema multifísico.

NUMERICAL SIMULATION OF THE COOLING OF GREEN ANODE SPECIMENS BY NATURAL CONVECTION

Abstract: The green anodes are a heterogeneous compound that contains petroleum coke, tar and rejected anodes, after being cooked at high temperature; they are used in the Hall-Heroult process to obtain the aluminum. In the present paper, numerical simulations are performed for the cooling of green anode specimens by natural convection, where each specimen is immersed in a mass of water contained in a thermally insulated glass container. The COMSOL code that applies the finite element method was used. The computational domains were meshed with triangular cells in the critical regions. The equations of the mass, the amount of movement and the energy were used to obtain the solution of the multiphysical system. The numerical solutions of temperature profiles were obtained as a function of time from the initial state to the end, for different constant values of specific heats, and the temperatures obtained in the final state were compared with the experimental equilibrium temperatures of the Tolentino work, where the percentage errors are in the range of 0.67-0.91 percent. Other numerical simulations were carried out with an empirical linear equation with specific heat as a function of temperature, which yielded results of percentage errors in the range of 0.05-0.91 percent. In addition, it was simulated for the temperature field in transient state, where the movement of the water mass by natural convection is show. It is concluded that the numerical results obtained with the specific heat as a function of the temperature are more adjusted to the experimental data.

Key words: Specific heat, Natural convection, Green anode, Numerical simulation, Multiphysical system.

I. INTRODUCCIÓN

Los ánodos de carbón (también conocidos como electrodos de carbón) son un compuesto heterogéneo que en proporciones aproximadas contienen: coque de petróleo 65 %, alquitrán 15 % y cabos 20 %; y la preparación y la formulación de las mismas están establecidas [1]. Y antes de ser empleados en la producción de aluminio mediante el proceso Hall-Héroult, son cocidos en un horno a alta temperatura a 1250 °C en un tiempo de 18 horas con la finalidad de que las propiedades físicas y químicas sean las requeridas.

Uno de los compuestos del ánodo de carbón es el coque de petróleo calcinado [2], el cual es el carbón poroso obtenido a partir de la coquificación retardada del residuo proveniente de la destilación fraccionada del petróleo y posterior calcinación de 1250-1400 °C. El otro compuesto es el alquitrán [3] (también conocido como brea de alquitrán) el cual es un material obtenido mediante destilaciones sucesivas de los gases provenientes de la carbonización del carbón mineral (alquitrán de carbón) en ausencia de oxígeno donde la temperatura está en el rango de 1000-1100 °C. Y el tercer compuesto son los cabos, los cuales son los ánodos cocidos rechazados de los hornos de cocción y trozos de ánodos provenientes de las celdas de reducción de aluminio.

La fabricación de los ánodos de carbón consisten de una serie de procesos, tales como: preparación, formulación, trituración, molienda, mezclado, compactación, y, finalmente su cocción. En el proceso de mezclado, la temperatura se encuentra en el rango de 145-160 °C; luego que la mezcla alcanza una temperatura deseada de salida, es pesada, compactada y despachada; siendo nombrada la mezcla compactada como bloque de ánodo verde o simplemente ánodo verde (ver Figura 1). Seguidamente, el bloque anódico pasa por un sistema de enfriamiento por inmersión o aspersión, dependiendo de las empresas que las producen. En Venezuela, el proceso de enfriamiento de los bloques anódicos por parte de las empresas CVG-CARBONORCA y CVG-ALCASA es por inmersión en agua y por parte de la empresa CVG-VENALUM por aspersión de agua. La finalidad del enfriamiento de los bloques anódicos es para endurecer un espesor de sus paredes por debajo de la temperatura integral máxima [4] y así los ánodos puedan ser sujetados y manipulados sin que sufran deformación y agrietamiento.

Un estudio para determinar el calor específico promedio de los ánodos verdes para un rango de temperatura fue abordado por Tolentino [5] en la empresa CVG-CARBONORCA, quien realizó ensayos experimentales para un total de nueve muestras de probetas anódicas cilíndricas y sólidas divididos en tres grupos de longitudes diferentes, y para cada experimento sumergió una sola

probeta en agua contenida en un recipiente asilado térmicamente hasta que alcanzara el equilibrio térmico, donde estuvo presente los mecanismos de transferencia de calor por conducción en la probeta y por convección en el agua. Con los datos conocidos, y mediante una ecuación obtenida por balance de energía, determinó el calor específico para cada muestra. Cabe señalar que, durante el proceso de enfriamiento de la probeta anódica y del calentamiento de la masa de agua no registró los datos experimentales de la temperatura en función del tiempo, siendo una variable de interés para conocer la evolución de las trayectorias de los perfiles de las temperaturas de la masa anódica y de la masa de agua cuando el sistema alcanza el equilibrio térmico.

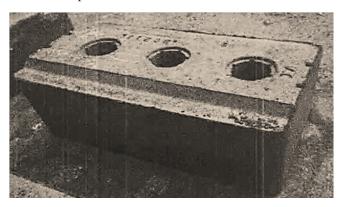


Figura 1. Tipo de bloque de ánodo verde que producen las empresas CVG-CARBONORCA, CVG-ALCASA v CVG-VENALUM en Venezuela.

Las distribuciones de temperaturas en un cuerpo sólido por conducción de calor así como en un fluido por el fenómeno convectivo es posible determinar por métodos numéricos, por tanto, se recurren a los métodos computacionales aplicados en la mecánica de sólidos y la dinámica de fluidos [6, 7, 8], para obtener las soluciones de los problemas multifísicos.

En el presente trabajo se emplea el código COMSOL Multiphysics versión 4.3 que aplica el método de elementos finitos (MEF) [9], para las simulaciones numéricas del enfriamiento de probetas de ánodos verdes sumergidos en agua, con la finalidad de determinar en varios puntos de referencias las temperaturas en función del tiempo, y las temperaturas de equilibrio en el estado final. Cabe señalar que, para cada simulación numérica del dominio computacional del sistema multifísico, se tiene una sola probeta sumergida en agua en un recipiente de vidrio asilado térmicamente. En la sección II, en la primera parte se presenta los datos experimentales [5]; y, en la segunda parte se presenta el fundamento matemático de las ecuaciones empleadas para las simulaciones numéricas, se analizan las distribuciones de las temperaturas del sistema

multifísico, además, se exponen los perfiles de temperatura en función del tiempo, y se comparan las temperaturas de equilibrio térmico con los resultados experimentales [5]. Y, en la sección III se exponen las conclusiones.

II. DESARROLLO

2.1 Datos experimentales

En un sistema aislado térmicamente, si una masa sólida caliente es sumergida en una masa líquida fría, la dirección del flujo de calor será de la masa con mayor temperatura hacia la masa de menor temperatura, logrando alcanzar el equilibrio térmico en el tiempo. Y, durante el intercambio de energía térmica entre un sólido y un líquido, están presente dos mecanismos de transferencia de calor: en el sólido por conducción y en el líquido por convección.

La Figura 2 ilustra un sistema cerrado y aislado térmicamente, donde el cuerpo es una muestra de masa de probeta de ánodo verde que se encuentra a una temperatura inicial T_(1,ánodo), sumergido en una masa de agua a una temperatura inicial T_(1,agua), donde T_(1,ánodo)>T_(1,agua), además, donde la probeta y el agua se encuentra en equilibrio térmico, siendo T_(2,ánodo)=T_(2,agua).

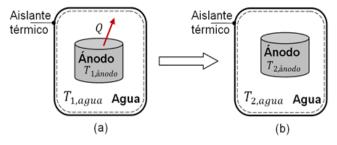


Figura 2. Esquema ilustrativo. (a) Estado inicial: la probeta anódica tiene mayor temperatura que la del agua. (b) Estado final: la probeta anódica está en equilibrio térmico con el agua.

Por definición, la energía interna total [10] se expresa como

$$U = mC_P T \tag{1}$$

Donde

U: energía interna total

m: masa

C_p: calor específico a presión constante

T: temperatura

En estado de equilibrio térmico, la energía interna total en el estado inicial es igual en el estado final, se tiene

$$U_1 = U_2 \tag{2}$$

Donde

 $\rm U_1$: energía interna en el estado inicial. La cual, es la suma de la energía interna total de la masa de la probeta de ánodo verde $\rm U_{(1,\acute{a}nodo)}$, más la energía interna total de la masa de agua $\rm U_{(1,\acute{a}nodo)}$.

 $\rm U_2$: energía interna en el estado final. La cual, es la suma de la energía interna total de la masa de la probeta de ánodo verde $\rm U_{(2, {\rm ánodo})}$, más la energía interna total de la masa de agua $\rm U_{(2, {\rm agua})}$.

Para el estado inicial, se tiene que: $T_{(1,\text{ánodo})} > T_{(1,\text{agua})}$, entonces, la energía interna en el estado inicial se expresan como

$$U_1 = U_{1, \acute{a}nodo} + U_{1, agua} \tag{3}$$

 $U_{1,\text{á}nodo} = m_{\text{á}nodo} C_{P,1,\text{á}nodo} T_{1,\text{á}nodo}$

$$U_{1,aqua} = m_{aqua} C_{P,1,aqua} T_{1,aqua}$$

Así mismo, para el estado final, se tiene que: $T_{(2,anodo)} = T_{(2,agua)}$, y la energía interna en el estado final es

$$U_2 = U_{2,\text{ánodo}} + U_{2,\text{aqua}} \tag{4}$$

$$U_{2,lpha nodo} = m_{lpha nodo} \, C_{P,2,lpha nodo} \, T_{2,lpha nodo}$$
 $U_{2,aqua} = m_{aqua} \, C_{P,2,aqua} \, T_{2,aqua}$

Se considera que el calor específico del ánodo verde en el estado inicial es igual al estado final $C_{(P,1,\hat{a}nodo)} = C_{(P,2,\hat{a}nodo)} = C_{(P,\hat{a}nodo)}$. Además, señalando que, en el estado final la temperatura de la probeta de ánodo y del agua es la misma $T_{(2,\hat{a}nodo)} = T_{(2,agua)} = T_2$. Sustituyendo las expresiones conocidas en la ecuación (2), y por despeje se obtiene la ecuación (5).

$$= \frac{m_{agua}}{m_{\acute{a}nodo}} \frac{\left(C_{P,1,agua} T_{1,agua} - C_{P,2,agua} T_{2}\right)}{\left(T_{2} - T_{1,\acute{a}nodo}\right)}$$
(5)

Los datos experimentales [5] para determinar los calores específicos de cada muestra de ánodo verde de diámetro de 50 mm, son las siguientes: en la Tabla 1 se presentan los datos de las probetas anódicas en el estado inicial; en la Tabla 2 de la masa de agua en el estado inicial; y en la Tabla 3 los resultados de la temperatura de equilibrio entre la probeta anódica y el

agua, los calores específicos de las probetas anódicas obtenidas con la ecuación (5), así como los valores de los calores específicos del agua en el estado final que fueron obtenidos por interpolación lineal con datos de la literatura [12]. Es importante señalar, los resultados con la ecuación (5) simplificada con valores constantes de los calores específicos del agua y de la probeta anódica fueron reportados en [5], posteriormente, en otro trabajo [10] se empleó la ecuación (5) para determinar los calores específicos de los ánodos verdes, las cuales se muestran en la Tabla III, siendo estos resultados más precisos que los anteriores.

El experimento realizado [5] siguió los siguientes pasos: en una estufa, el primer grupo de las probetas anódicas fue calentada a 156 °C, el segundo grupo a 170 °C y el tercer grupo a 150 °C. Luego, el primer grupo fue sumergida en agua a 29 °C, el segundo a 30.5 °C y el tercero a 25 °C; siendo el volumen de agua 0.0009 m^3 (0.9 Litro) y el recipiente un envase de vidrio aislado térmicamente. Durante el proceso de enfriamiento, con el fin de garantizar el equilibrio térmico entre la probeta anódica y el agua, después del tiempo estimado de 16 min, con una varilla cada probeta anódica fue desintegrada para garantizar que la temperatura final del sistema sea uniforme en el tiempo final de 1020 s. (17 min).

Cabe señalar, cuando la probeta anódica está en el rango de 150-170 °C, se encuentra por arriba de la temperatura de ablandamiento (110±0.71 °C) [5], por lo cual, la masa anódica es deformable, y para que pueda ser manipulado y transportado tiene que disminuir su temperatura por debajo de la temperatura integral máxima (100.3 °C) [5], y cuando es almacenado, después de un tiempo, alcanza la temperatura de su entorno, por tanto, para el experimento se obtiene la temperatura de equilibrio el estado final en el rango de 30-40 °C (ver Tabla III).

Tabla I. Experimento: probetas anódicas

Muestra:	Longitud	$m_{st nodo}$	$T_{1, \acute{a}nodo}$
probeta	(mm)	(gr)	(°C)
1	38.02	120.03	156
2	38.32	121.00	156
3	38.78	122.45	156
4	60.05	189.60	170
5	61.12	192.98	170
6	61.57	194.42	170
7	91.66	289.39	150
8	92.14	290.00	150
9	92.64	292.49	150

Tabla II. Experimento: masa de agua

Muestra:	$C_{P,1,agua}$	m_{agua}	$T_{1,agua}$
agua	(J/kg.° $C)$	(gr)	$(^{\circ}\mathcal{C})$
1	4178.4	897.3	29.0
2	4178.4	897.3	29.0
3	4178.4	897.3	29.0
4	4178.0	897.3	30.5
5	4178.0	897.3	30.5
6	4178.0	897.3	30.5
7	4180.0	897.3	25.0
8	4180.0	897.3	25.0
9	4180.0	897.3	25.0

Tabla III. Experimento: temperatura de equilibrio (T_2) entre la probeta anódica y el agua

Muestra:	T_2	$C_{P,2,agua}$	$C_{P,lpha no do}$
probeta	(°C)	$(J/kg.^{\circ}C)$	(J/kg.°C)
1	32.9	4178.0	988.81
2	33.0	4178.0	1006.87
3	33.1	4178.0	1020.67
4	37.3	4178.46	1013.84
5	37.5	4178.5	1026.96
6	37.5	4178.5	1019.36
7	34.0	4178.0	1003.76
8	34.0	4178.0	1001.65
9	34.1	4178.0	1005.04

2.2 Procedimiento computacional

A) Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones gobernantes de la dinámica de fluidos [11] para un flujo de fluido no isotérmico y conjugado con la transferencia de calor [12], y sin presencia de generación y fuentes externas de calor, son las siguientes: ecuación de la conservación de la masa (6), ecuación de la conservación de la cantidad de movimiento (7) y ecuación de la conservación de la energía (8), respectivamente.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} =$$

$$-\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{I} \right) + \mathbf{F}$$
(7)

$$\rho C_{\mathbf{p}} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_{\mathbf{p}} \mathbf{u}. \nabla T = \nabla. (k \nabla T)$$
(8)

Donde, los términos de los parámetros son las siguientes: ρ : densidad; t: tiempo; u: vector velocidad del flujo; p: presión; μ : viscosidad dinámica; F: vector fuerza (fuerza de volumen) que actúa por efecto del producto de la gravedad y de la densidad del fluido; I: tensor unitario; C_p : calor específico a presión constante; T: temperatura absoluta; y, k: conductividad térmica del fluido.

La ecuación gobernante para la transferencia de calor por conducción para un cuerpo sólido, y sin presencia de generación de calor u otras fuentes de calor, se expresa como

$$\rho C_{\rm p} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (k \nabla T) \tag{9}$$

Donde, C_p: calor específico a presión constante; ρ: densidad; t: tiempo; T: temperatura absoluta; y, k: conductividad térmica del sólido.

B) Dominios computacionales y mallado

Se establecen tres dominios computacionales 2D con simetría axial, donde cada dominio comprende de tres zonas: fluido 1 (agua), sólido 1 (probeta de ánodo verde) y el sólido 2 (pared del recipiente de vidrio), tal como se muestran en la Figura 3. Cabe señalar, el dominio computacional 1 corresponde para la muestra de la probeta N° 1, el dominio 2 para la muestra de la probeta N° 4 y el dominio 3 para la muestra de la probeta N° 7, manteniendo así las referencias numeradas de las probetas anódicas que se muestran en la Tabla 1. Además, en cada dominio computacional se ubicaron seis puntos de referencias en el eje de simetría axial para registrar durante las simulaciones numéricas las lecturas de las temperaturas en función del tiempo a medida que el sistema multifísico alcanza el equilibrio térmico, donde, las longitudes de las probetas anódicas se dividieron en cuatro partes iguales y se ubicaron las referencias y1,y2 y y3 así como para la altura de las masas de agua las cuales están referenciadas con y4,y5 y y6. Todos las probetas anódicas tienen radio de r=25 mm, y para la muestra 1 la altura de la probeta es y=38.02 mm, para la muestra 2 la altura de la probeta es y=60.05 mm, y para la muestra 3 la altura de la probeta es y=91.66 mm; señalando que, las longitudes de las probetas han sido tomadas de la Tabla 1. El recipiente de vidrio tiene un radio interno de r=49.25 mm y espesor de 2 mm. Y, cada dominio computacional tiene una altura determinada: el dominio 1 una altura y=129.90465 mm, el dominio 2 una altura y=135.58117 mm y el dominio 3 una altura y=143.72619 mm, respectivamente. Cabe señalar, las alturas de los tres dominios computacionales han sido obtenidas considerando los volúmenes de las masas de las probetas anódicas, de la masa de agua de volumen de 0.9 Litro y del recipiente de vidrio; siendo la altura de cada dominio computacional donde se presenta el nivel del agua en el recipiente.

La Figura 4 muestra los dominios 2D con simetría axial mallados con celdas triangulares no estructuradas [9], teniendo cada dominio computacional un total de 18047 celdas. La malla se refinó en los bordes de las paredes debido a la capa límite [11, 12] del movimiento del fluido donde se desarrolla la transferencia de calor por convección, ya que dentro de la capa límite existen regiones del fluido que están en movimiento ascendente debido a las variaciones de la densidad del fluido por el incremento de su temperatura.

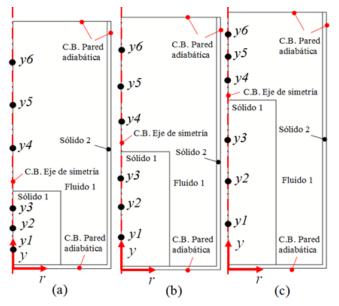


Figura 3. Dominios computacionales. (a) Dominio 1: muestra de probeta N° 1, (b) Dominio 2: muestra de probeta N° 4, y (c) Dominio 3: muestra de probeta N° 7.

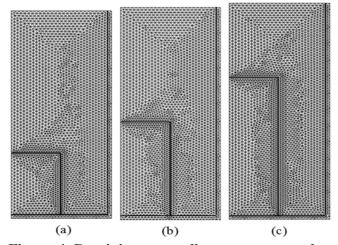


Figura 4. Dominios con mallas no estructuradas,

cada dominio tiene 18047 celdas triangulares.

C) Condiciones iniciales y de contorno

Condiciones para el fluido

La velocidad del movimiento del fluido en las paredes del recipiente de vidrio, en la probeta y en la pared superior es nula por la presencia de esfuerzos cortantes; además, en el eje de simetría axial la velocidad del flujo en la dirección radial es nula, para r=0. Las propiedades del agua involucrados se consideran en función de la temperatura, debido a la sensibilidad de los cambios de temperatura en cada región por el fenómeno convectivo; siendo calculadas estas variaciones internamente en el código COMSOL. Las condiciones iniciales para el agua son las mismas temperaturas del agua de cada ensayo experimental que se muestran en la Tabla II correspondiente a las muestras numeradas como 1, 4 y 7.

Condiciones para el sólido

Las paredes externas del recipiente de vidrio y de la pared superior del agua se consideran adiabáticas. En el eje de simetría axial el flujo de calor en la dirección radial es nulo, e internamente el código COMSOL lo considera proceso adiabático por la simetría del dominio. En la probeta de ánodo verde la transferencia de calor es por conducción, y el flujo de calor es en dirección de la probeta hacia el agua. Para las simulaciones numéricas, las propiedades constantes de las probetas del ánodo verde son la densidad 1608 kg/m³ [5] y la conductividad térmica k=3.8 W/(m.K) [5, 13], así como los valores de los calores específicos que se muestran en la Tabla 3 para las muestras numeradas 1, 4 y 7. Las propiedades del recipiente de vidrio son tomadas de la base de datos del código COMSOL: siendo la densidad p=2203 kg/m³, la conductividad térmica k=1.38 W/(m.K) y el calor específico C P=703 J(kg.K).

D) Método de solución computacional y equipo

Para las simulaciones numéricas de los dominios computacionales en el código COMSOL, se seleccionó la opción geometría en 2D simetría axial. Para la discretización del fluido se consideró la opción (P1+P1) para los elementos en el campo de velocidad. Se consideró para el paso de tiempo el método de fórmula de diferenciación hacia atrás (BDF, backward differentiation formula) con el orden máximo de 5, y el método de solución directa escasa paralela (PARDISO, parallel sparse direct

solver). Para el procesamiento de datos se utilizó un equipo con las siguientes características: Laptop marca Síragon, modelo M54R, Intel Core 2 Duo, dos procesadores de 1.8 GHz y memoria RAM de 3 GB.

2.3 Resultados y discusión

Durante el proceso de intercambio de energía entre la masa anódica, el recipiente de vidrio y la masa de agua, están presentes dos mecanismos de transferencia de calor: en la probeta anódica y en el recipiente de vidrio la transferencia de calor es por conducción, y en el agua en reposo por convección natural.

En las Figura 5, 6 y 7, para los dominios computacionales 1, 2 y 3, se muestran los perfiles de temperaturas de las referencias y1,y2 y y3 para la zona de la probeta anódica, donde la transferencia de calor es por conducción, y se observan las caídas de temperaturas desde el estado inicial hasta el tiempo de 200 s (3 miny 20 s) y luego de este tiempo los perfiles tienen un comportamiento asintótico con respecto a la horizontal hasta el tiempo de 600 s (10 min). Mientras que, para los perfiles de temperaturas ubicados en las referencias y4,y5 y y6 de la zona de la masa de agua, se muestran con un comportamiento oscilatorio debido al efecto convectivo hasta el tiempo de 200 s (3 miny 20 s) y luego de este tiempo los perfiles tienen un comportamiento azintótico hasta el tiempo de 600 s (10 min). Y, para este tiempo final, aún existen diferencias de temperatura, lo cual indica que no han alcanzado el equilibrio térmico. No obstante, aunque no se presente las simulaciones después de este tiempo, las trayectorias continúan siendo asintóticas hasta que el sistema alcanza el equilibrio térmico para el tiempo final de 45900 s (12 h y 45 min). En el estado inicial, todas las muestras anódicas están por arriba de la temperatura de ablandamiento [5], y para el tiempo estimado de 60 s (1 min) (ver Figuras 5, 6 y 7) las muestras anódicas están por debajo de la temperatura de ablandamiento (110±0.71 °C) [5], por tanto, las muestras anódicas tienden a endurecerse a medida que disminuyen sus temperaturas.

Las distribuciones de temperaturas del sistema multifísico para los dominios computacionales 1, 2 y 3 se muestran en las Figuras 8, 9 y 10. Inicialmente, en los primeros segundos del proceso de transferencia de calor, en ciertas regiones del fluido adyacente a la pared vertical de la probeta, la masa de agua se calienta con mayor intensidad, y en su ascenso empuja a otra regiones de la masa de agua que se encuentra por encima, produciendo un intercambio de energía y movimiento aleatorio de sus moléculas,

por lo tanto, existen regiones de masa de agua con diferentes magnitudes de temperaturas, sin embargo, a medida que pasa el tiempo, cesa la intensidad de la transferencia de calor del sólido hacia el líquido. y las regiones que tienen mayor temperatura están en la parte superior y de menor temperatura en la parte inferior, alcanzando el equilibrio térmico en el tiempo. Y, la masa de la probeta anódica, durante el enfriamiento del mismo, luego del estado inicial las paredes superiores y las paredes verticales disminuye su temperatura, y para el tiempo final de 400 s (6 min y 40 s) las regiones inferiores de las probetas tienen menor temperatura que sus regiones superiores. Además, para este tiempo final de 400 s (6 min+ 40 s) se muestran en las Figuras 8, 9 y 10 las diferencias de temperaturas. Seguidamente, después de este tiempo de 400 s (6 miny 40 s) las regiones superiores transfieren energía térmica a las regiones inferiores para alcanzar el equilibrio térmico en el tiempo, lo cual hace que el proceso sea lento en el tiempo por la baja intensidad de energía térmica de esas regiones. tal como lo demuestran las trayectorias de los perfiles después de 200 s (3 miny 20 s) que se muestran en las Figuras 5, 6 y 7.

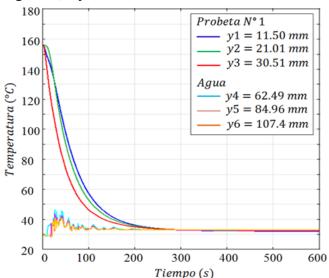


Figura 5. Perfiles de temperatura en el dominio 1, para la muestra de la probeta N° 1.

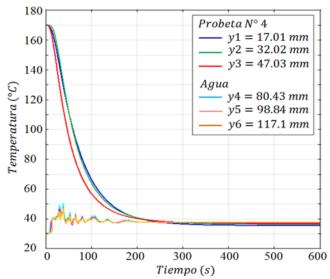


Figura 6. Perfiles de temperatura en el dominio 2, para la muestra de la probeta N° 4.

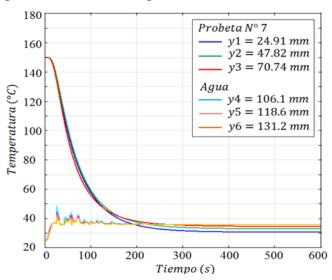
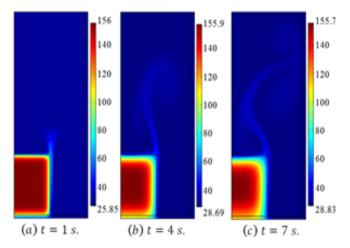


Figura 7. Perfiles de temperatura en el dominio 3, para la muestra de la probeta N° 7.



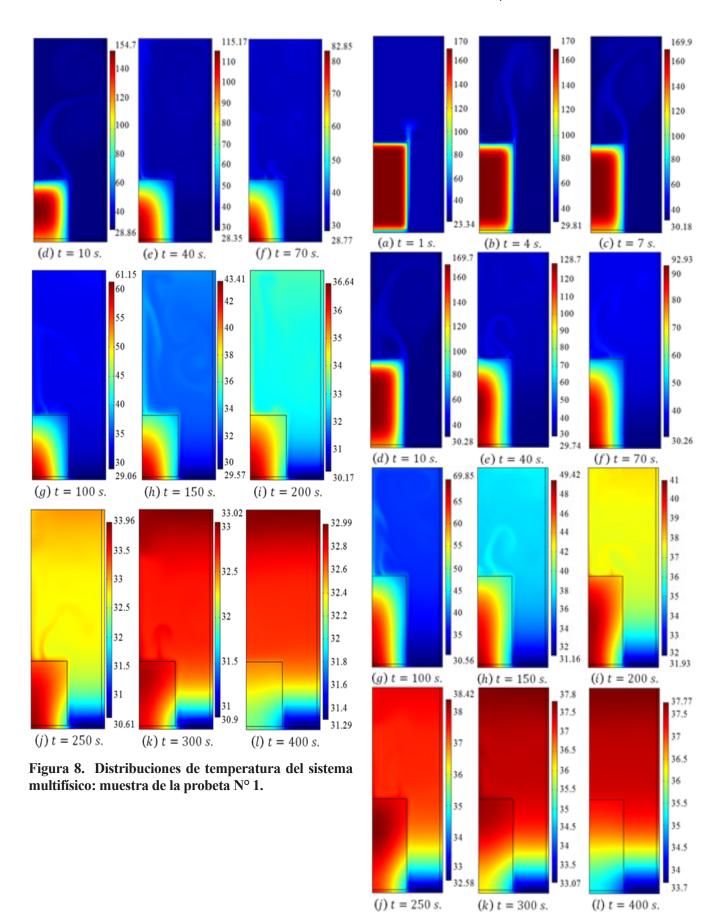
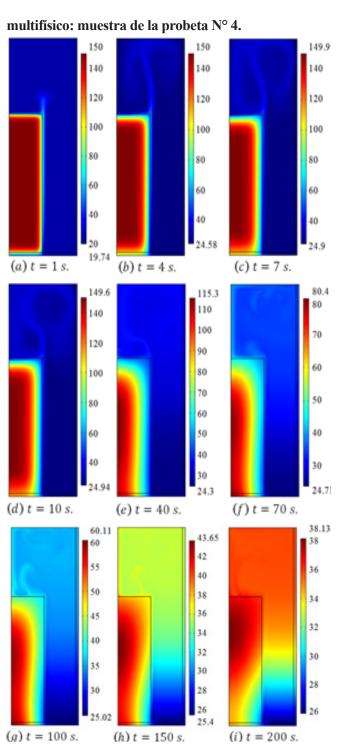


Figura 9. Distribuciones de temperatura del sistema



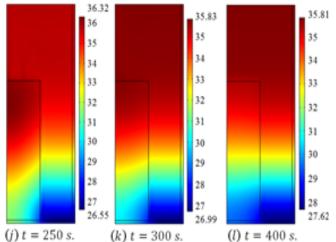


Figura 10. Distribuciones de temperatura del sistema multifísico: muestra de la probeta N° 7.

Las distribuciones de temperaturas para el tiempo de enfriamiento de 10 s del sistema multifísico en un dominio computacional 3D se muestran en las Figuras 11, 12 y 13, donde se observan en las probetas cómo se distribuyen las temperaturas durante el enfriamiento, y cómo se calientan la masa de agua en las regiones adyacentes a las paredes verticales y sobre las probetas.

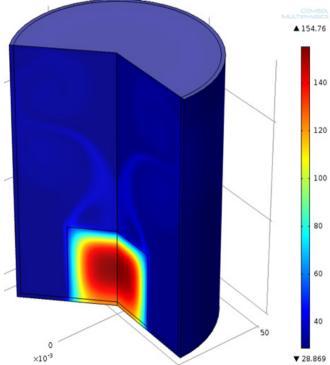


Figura 11. Distribuciones de temperatura del sistema multifísico en 3D, para el tiempo de enfriamiento de 10 s: muestra de la probeta N° 1.

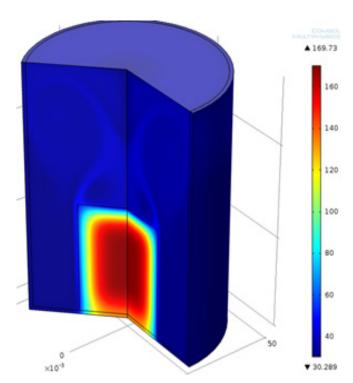


Figura 12. Distribuciones de temperatura del sistema multifísico en 3D, para el tiempo de enfriamiento de 10 s: muestra de la probeta N° 4.

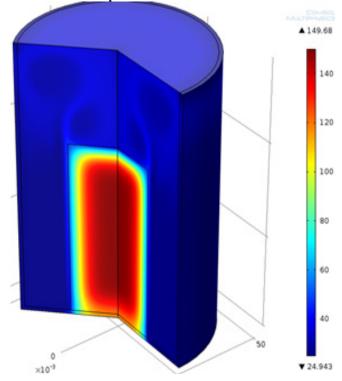


Figura 13. Distribuciones de temperatura del sistema multifísico en 3D, para el tiempo de enfriamiento de 10 s: muestra de la probeta N° 7.

Las temperaturas de equilibrio térmica fueron alcanzadas en el tiempo final de 45900 s (12 h y 45 min), y

cuyos resultados se presentan en la Tabla 4; y, en la misma tabla se presenta los resultados para el resto de las muestras de las probetas anódicas que se presentan en la Tabla 1 y estas probetas anódicas que fueron evaluados con los calores específicos que se presentan en la Tabla 3. En la misma Tabla 4 se incluyen los resultados experimentales de la temperatura de equilibrio [5], las diferencias de temperaturas entre las experimentales y numéricas, y los errores porcentuales. Donde, los resultados numéricos de las temperaturas tienen magnitudes menores que las temperaturas experimentales y las diferencias de temperatura están en el rango de ΔT =0.23-0.37 °C; y todos los errores porcentuales se encuentran por debajo del uno por ciento (1 %), en el rango de 0.67-0.91 por ciento, respectivamente.

Como lo argumentado anteriormente sobre el experimento realizado por Tolentino [5], con el fin de garantizar el equilibrio térmico del sistema multifísico que estaba compuesto por la probeta anódica, el recipiente de vidrio y el agua, después de un tiempo estimado de 16 min, con una varilla desintegró cada probeta anódica para garantizar que la temperatura final del sistema sea uniforme en el tiempo de 1020 s (17 min), y tal decisión tomada fue acertada, ya que al comparar con los resultados que se presentan en las Figuras 5, 6 y 7, donde las trayectorias de los perfiles de temperaturas tienen un comportamiento asintótico a partir del tiempo de 300 s (5 min), por lo cual, el proceso es lento para los mecanismos de transferencia de calor presente, sino hubiera desintegrado las probetas, hubiera tenido que esperar el tiempo de 45900 s (12 h y 45 min) para cada ensayo experimental realizado en el laboratorio.

Tabla IV. Temperatura de equilibrio numérica obtenida con el calor específico de magnitud constante

Muestra:	Ехр.	Num.	ΔT	Error
probeta	T_2 (°C)	T_2 (°C)	(°C)	porcentual
1	32.9	32.60	0.30	0.9118
2	33.0	32.71	0.29	0.8787
3	33.1	32.80	0.30	0.9063
4	37.3	36.94	0.36	0.9651
5	37.5	37.13	0.37	0.9866
6	37.5	37.14	0.36	0.9600
7	34.0	33.75	0.25	0.7352
8	34.0	33.77	0.23	0.6764
9	34.1	33.83	0.27	0.7917

Es importante resaltar que Tolentino [5, 13] obtuvo la conductividad térmica promedio de 3.8 W/(m.K) con datos experimentales de temperaturas en función del tiempo, donde las temperaturas fueron medidos en los bloques anódicos durante la etapa de enfriamiento por inmersión en agua en la piscina de la empresa CVG-CARBONORCA. Y, en el presente trabajo se demuestra la validación de este parámetro físico, la cual ha sido empleada en las simulaciones numéricas realizadas del sistema multifísico compuesto por la probeta anódica, el recipiente de vidrio y el agua, para determinar la temperatura de equilibrio del sistema y comparado con resultados experimentales, tales como se muestran en la Tabla IV.

Al tener diferentes valores de calores específicos de las probetas anódicas, tales como se muestran en la Tabla III, para un rango de temperatura establecido de 30-170 °C, una opción es obtener un promedio para este rango de temperatura, y lo otro es obtener una ecuación empírica del calor específico en función de la temperatura para este mismo rango de temperatura. Y, esta segunda opción es razonable, por tanto, se propone una nueva ecuación empírica del calor específico en función de la temperatura T(°C), la cual se expresa como:

$$C_P(T) = 1000.8 + 0.7843T \tag{10}$$

Donde, la ecuación (10) ha sido obtenida en una hoja de cálculo de Excel, con los datos de los calores específicos de magnitudes constantes mostrados en la Tabla III, los datos iniciales de temperatura de las probetas anódicas (Tabla I) y los datos de la temperatura de equilibrio del sistema (Tabla III). Y, en la Tabla V, se establecen los parámetros físicos del ánodo verde para el rango de temperatura de 30-170 °C.

Tabla V. Parámetros físicos del ánodo verde para el rango de temperatura 30-170 °C

T (°C)	ρ (kg/m^3)	C _P (J/kg.°C)	k (W/m.K)
30-170	1608	1000.8	3.8
		+ 0.7843T	

En la Tabla VII se muestran los resultados numéricos de las temperaturas de equilibrio obtenidos con la ecuación empírica lineal del calor específico en función de la temperatura para el tiempo final de 45900 s (12 h y 45 min), donde las diferencias de temperatura están en el rango de ΔT=0.02-0.31 °C; y los resultados de los errores porcentuales están en el rango de 0.05-0.91 por ciento, y estos resultados

tienen menor errores numéricos con respecto a los resultados de las temperaturas de equilibrio obtenidos con los calores específicos de magnitudes constantes que se muestran en la Tabla IV.

Tabla VI. Temperatura de equilibrio numérica obtenida con el calor específico en función de la temperatura

Muestra:	Ехр.	Num.	ΔΤ	Error
probeta	T_2 (°C)	T_2 (°C)	(°C)	porcentual
1	32.9	32.84	0.06	0.1823
2	33.0	32.90	0.10	0.3030
3	33.1	32.98	0.12	0.3625
4	37.3	37.32	0.02	0.0536
5	37.5	37.45	0.05	0.1333
6	37.5	37.48	0.02	0.0533
7	34.0	34.27	0.27	0.7941
8	34.0	34.31	0.31	0.9117
9	34.1	34.34	0.24	0.7038

En base a los resultados numéricos obtenidos en el presente trabajo, se puede simular en estado transitorio dominios computacionales de geometrías complejas de sistemas multifísicos, por ejemplo, que estén compuestos por sólido-líquido, sólidogas y sólido-líquido-gas. Las simulaciones computacionales experimentales ahorran recursos económicos, equipos y materiales de laboratorio, recursos en sistemas de seguridad para el uso de materiales tóxicos, corrosivos, radiactivos, entre otros, así como, el ahorro del tiempo requerido en realizar los experimentos en laboratorios.

III. CONCLUSIONES

Los resultados de las trayectorias de los tres perfiles de temperaturas, las cuales se muestran en la Figuras 5, 6 y 7, muestran las caídas de las temperaturas por debajo de 45 °C para el tiempo de 3 miny 20 s, y luego de este tiempo las trayectorias de los tres perfiles tienen un comportamiento asintótico, así como, las tres trayectorias de los perfiles de las temperaturas de las masas de agua tienen un comportamiento oscilatorio hasta el tiempo de 3 miny 20 s, y luego de este tiempo las oscilaciones disminuyen y también tienen un comportamiento asintótico; y este comportamiento asintótico continúa hasta alcanzar el equilibrio térmico el sistema multifísico para el tiempo final de 12 h y 45 min.

Durante los mecanismos de transferencia de calor por conducción en la probeta anódica y el recipiente de vidrio, y por convección en la masa de agua (Figuras 8, 9 y 10, se evidencia cómo se comportan las distribuciones y el gradiente de temperatura a medida que transcurre el tiempo, por lo cual aporta una comprensión del fenómeno al observar con detenimiento las regiones que tienen mayor y menor energía térmica.

Las simulaciones numéricas de las temperaturas de equilibrio comparados con respecto a los datos experimentales, para las probetas anódicas evaluadas con magnitudes constantes de los calores específicos, arrojaron resultados de errores porcentuales en el rango de 0.67-0.91 por ciento. Y, los resultados de las simulaciones numéricas evaluados con una ecuación empírica en función de la temperatura (C_P (T)=1000.8+0.7843T) arrojaron resultados de errores porcentuales en el rango de 0.05-0.91 por ciento. Siendo ambos resultados de los errores porcentuales menores del uno por ciento.

IV. REFERENCIAS

[1]Betancourt R., "Tecnología del Carbón en la Industria del Aluminio", VENALUM, Gerencia del Carbón, 1996, p. 118.

[2]Belitskus D., "Evaluation Calcined Coke for Aluminiun Smelting by Bulk Density", Light Metals, 1994, pp. 245-251.

[3]Fischer W., Perruchoud R., "Influence of Coke Calcining Paramaters on Petroleum Coke Quality", Light Metals, 1995, pp. 812-826.

[4]Meir M., Fisher W., "R & D Essentiales About Anodes", Sierra, Switserland, 1995, p.25.

[5] Tolentino S.L., "Evaluación Térmica y Propuesta de Mejora del Sistema de Enfriamiento de Ánodos Verdes de la Empresa CVG-CARBONORCA", Práctica Profesional de Grado, UNEXPO "AJS" Vice-Rectorado Puerto Ordaz, Venezuela, 2003, p. 142.

[6]Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., "El Método de los Elementos Finitos, Volumen 2: Mecánica de Sólidos y Fluidos. Dinámica y No linealidad", Cuarta Edición, McGraw-Hill, 1995, p. 865.

[7] Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., "The Finite Element Method, Volumen 3: Fluid Dynamics", Fifth Edition, Butterworth Heinemann, 1995, p. 334.

[8] Ferziger J.H., Peric M., "Computational Methods for Fluid Dynamics", 3rd edition, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2002, p. 423.

[9]Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., "The Finite Element Method, Volumen 1: The Basis", Fifth

Edition, Butterworth Heinemann, 2000, p. 689.

[10] Tolentino S.L., "Evaluación Térmica de un Bloque de Ánodo Verde en un Sistema de Enfriamiento por Aspersión Mediante Simulación Numérica" Trabajo de Grado de Maestría en Ingeniería Mecánica, UNEXPO "AJS" Vice-Rectorado Puerto Ordaz, Venezuela, 2014, p. 146.

[11]Incropera F., De Witt D., "Fundamentos de Transferenica de Calor" Cuarta edición, Prentice Hall, 1999, p. 886.

[12] White F.M., "Fluid Mechanics", Seventh Edition, McGraw-Hill, 2011, p. 862.

[13]Tolentino S.L., Gutiérrez E., "Determinación de la Conductividad Térmica de los Ánodos Verdes, Utilizando un Modelo Numérico Tridimensional", Memorias del VII congreso Internacional de Métodos Numéricos en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, CIMENICS 2004, San Cristóbal, Venezuela, 28 al 30 de abril del 2004, pp. MF-46 – MF-52, P1-106 al P1-112.

AGRADECIMIENTOS

Mi agradecimiento a Jehová, mi Dios todopoderoso, mi fuente de sabiduría e inspiración.

Al Grupo de Modelamiento Matemático y Simulación Numérica (GMMNS, Group of Mathematical Modeling and Numerical Simulation) de la Universidad Nacional de Ingeniería (UNI), Lima, Perú.