

Modelo matemático para los fenómenos de combustión en un horno de cubilote

Ricardo Aristizábal Sierra*, Héctor Daniel Mejía, Claudia Silva, Diego Alfonso Pineda^a, Marcelo Rojas

(Recibido el 10 de junio de 2005. Aceptado el 8 de noviembre de 2005)

Grupo de Investigaciones Pirometalúrgicas y de Materiales GIPIMME. Facultad de Ingeniería. Departamento de Ingeniería de Materiales. Universidad de Antioquia. A. A. 1226, Medellín, Colombia.

Resumen

Se presenta un modelo matemático que describe los fenómenos de combustión en un horno de cubilote. La construcción del modelo se realizó con base en las reacciones heterogéneas coque-gas más importantes; es decir, la reacción de combustión, la gasificación por CO₂ y la gasificación por vapor de agua. Se usó el programa *Matlab* versión 5.3 y los resultados de la simulación se compararon con los datos experimentales obtenidos en el horno de cubilote de la planta ecoeficiente de la Universidad de Antioquia. El modelo proporciona los perfiles de composición de los gases en la columna del horno, la composición de los gases en chimenea y la velocidad de carga del metal durante la operación. Las desviaciones máximas obtenidas con el modelo fueron menores de 1% para CO₂, 5% para CO, 7% para la relación de combustión y 9% para la velocidad de carga del metal.

----- *Palabras clave:* horno de cubilote, modelo matemático, combustión.

Mathematical model for the combustion phenomena in a cupola furnace

Abstract

A mathematical model of the combustion phenomena occurring in a cupola furnace is presented. The most important heterogeneous coke-gas reactions: combustion, CO₂ gasification and steam gasification were used for modelling and *Matlab* (version 5.3) was used to solve said model. Results were compared with experimental data obtained in the cupola furnace of the ecoefficient plant at the University of Antioquia. The model evaluates composition profiles along the furnace column, composition of gases at the chimney and velocity at which metal is fed during this operation. Maximum deviations within 1% for CO₂, 5% for CO, 7% for combustion ratio, and 9% for velocity of metal charge were obtained with the model.

----- *Key words:* cupola furnace, mathematical model, combustion.

* Autor de correspondencia. Teléfono: +57+4+210 55 42, fax: +57+4+210 55 18, Correo electrónico: raristi@udea.edu.co (R. Aristizábal Sierra).

Introducción

El horno de cubilote es una unidad de fusión utilizada generalmente para la fabricación de hierros fundidos. Tradicionalmente, el combustible más utilizado en estas unidades es el coque de fundición; éste se obtiene sometiendo la hulla o carbón mineral a un proceso de coquización, que tiene como finalidad eliminar los materiales volátiles y aumentar el poder calorífico del combustible.

En su versión más simple, el cubilote consiste en un cilindro vertical recubierto en su interior con material refractario. En la zona inferior se localiza una serie de toberas a través de las cuales se inyecta el aire que transporta el oxígeno necesario para la combustión llamado comúnmente soplo. Al mismo tiempo, por la parte superior del horno se introducen los materiales de carga sólidos, entre los cuales se encuentran: el coque, el metal de carga y los fundentes. En la figura 1, puede observarse un esquema del horno de cubilote típico.

Las reacciones más importantes relacionadas con la combustión son: la reacción de combustión, la reacción de gasificación por CO_2 (conocida

como la reacción de *Boudouard*) y la reacción de gasificación por vapor de agua.

Tanto el balance térmico, como la pérdida por oxidación de los elementos metálicos en la carga, dependen del avance relativo de estas reacciones, el cual se ve reflejado directamente en la calidad de las piezas que se producen, ya que de la temperatura del metal de salida dependerá en gran parte el éxito de los procesos de metalurgia de cuchara y la generación de algunos defectos tales como las contracciones, juntas frías, segregación, mal acabado superficial, etc., de ahí que un estudio térmico sea importante desde el punto de vista económico tanto para la eficiencia del horno como para la producción.

La energía necesaria para el proceso se genera cuando el coque incandescente se pone en contacto con el oxígeno que entra en el soplo produciendo la reacción de combustión. Los gases calientes producto de la combustión suben por la columna del horno y entran en contacto con la carga metálica fundiéndola. Como los gases ascienden y los materiales de carga descenden, el proceso se considera a contracorriente. Ha sido común que

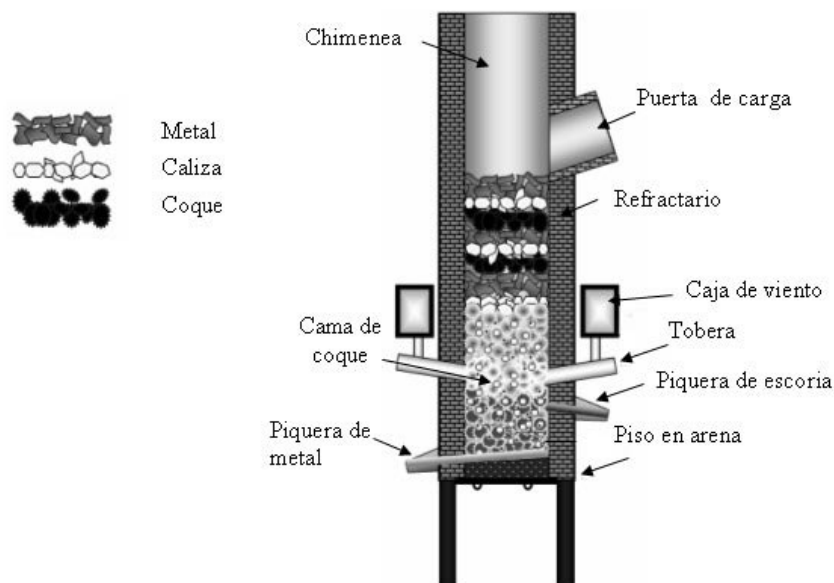


Figura 1 Esquema del horno de cubilote típico. Dibujo basado en la referencia [1]

los investigadores de cubilote lo dividan en zonas según los procesos y reacciones que ocurren en él [2]. Las cinco zonas más comúnmente citadas son: la de precalentamiento, la de fusión, la de reducción, la de oxidación y el crisol. Estas zonas se muestran en la figura 2.

En la zona de precalentamiento ocurre la calcinación de la caliza y una ligera oxidación de la carga. Cuando se alcanza la temperatura de fusión de la carga metálica se entra a la zona de fusión, la extensión y comienzo de ésta depende de la naturaleza del material cargado, ya que el hierro funde a unos 1.150 °C y el acero a unos 1.500 °C. La zona de oxidación se encuentra cercana a las toberas y es donde ocurre la reacción de combustión, por tanto es rica en dióxido de carbono; la extensión de esta zona depende de las condiciones del soplo (temperatura, caudal, enriquecimiento con oxígeno, etc.), de las características del coque (reactividad y tamaño), del diámetro y tipo de refractario del horno. Es precisamente

en esta zona donde se produce el calor necesario para el proceso.

Las zonas de reducción son ricas en monóxido de carbono, la superior debido a la gasificación del coque por CO_2 y la inferior debido a las reacciones de oxidación del silicio y el carbono en el metal en la zona del crisol. La extensión de la zona de reducción superior depende de la altura de la cama y de las condiciones del soplo, especialmente del caudal. El tamaño de la zona de reducción inferior depende de la diferencia de altura entre las toberas y la parte superior de la capa de escoria en el crisol. Finalmente, está la zona del crisol, donde las reacciones están más relacionadas con la composición química del metal que con la combustión; en ella ocurren la separación del metal y la escoria debido a su diferencia de densidades, la recuperación de carbono en el metal por el contacto con el coque y reacciones de oxidación-reducción en la interfase metal escoria.

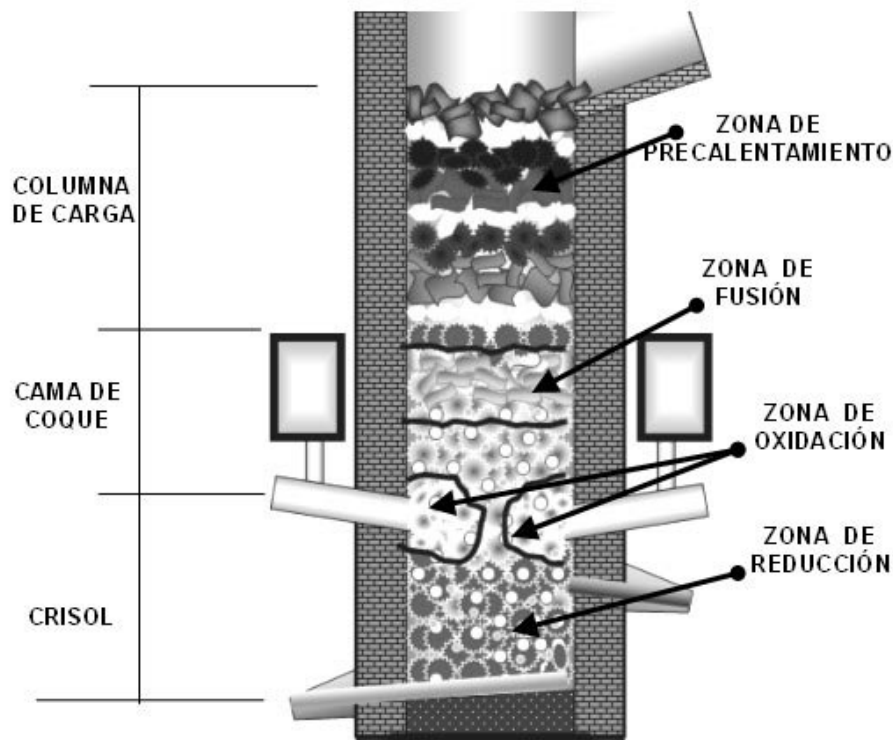


Figura 2 Localización de las zonas en el cubilote. Dibujo basado en la referencia [1]

Anteriormente, se han realizado estudios relacionados con los fenómenos de combustión en el cubilote, entre ellos pueden mencionarse el de J. Declery en 1908, quien publicó un estudio acerca de las reacciones de combustión, el cual nunca comprobó de forma experimental [3]. En 1913, Belden publicó una investigación acerca de la combustión del coque en el cubilote, basado en la experimentación, con la limitante de que el horno no fue cargado con metal [4]. Algunos investigadores realizaron trabajos teóricos y experimentales de la operación del cubilote, entre los cuales pueden mencionarse: J. G. Breen en 1963 quien midió los promedios de la temperatura de los gases, el metal y el coque en la columna del horno, sin llegar hasta la zona de fusión y encontró que el aumento en el tamaño del coque aumentaba la temperatura en el sistema [5] y J. Grennan en 1924 [6], cuyo estudio se basó en la observación del proceso en el interior del horno, a través de pequeñas ventanas, cuyo fin era determinar a qué altura comenzaba el proceso de fusión. En 1975 Nicolas Meysson presentó un modelo termoquímico, basado en las principales reacciones productoras y consumidoras de calor [7]. Draper y Nyamekye [8, 9], realizaron estudios teóricos y los refrendaron experimentalmente; autores como Katz y Stanek [10, 11, 12] han contribuido de manera apreciable al entendimiento de los fenómenos de combustión, especialmente en lo relacionado con las reacciones de gasificación del coque por acción del CO_2 y el vapor de agua.

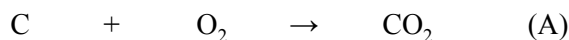
El presente artículo presenta un modelo matemático basado en las principales reacciones relacionadas con la combustión del coque en el horno de cubilote. El modelo se construye mediante la formulación de un sistema de ecuaciones diferenciales, que expresan los balances de masa de las especies gaseosas más importantes involucradas en el proceso y utiliza las expresiones cinéticas obtenidas por otros investigadores para evaluar las velocidades de reacción [11, 12]. Los resultados del modelo se comparan con la información experimental obtenida en el horno de cubilote de la planta ecoeficiente de la Uni-

versidad de Antioquia, durante la ejecución del proyecto “Estudio del comportamiento del silicio adicionado como carburo de silicio en el horno de cubilote” [13].

Reacciones de combustión en el horno de cubilote

La reacción de combustión

Cuando el oxígeno que transporta el aire del sople entra en contacto con el coque incandescente, ocurre la siguiente reacción de combustión (A):



Esta reacción es exotérmica y produce la mayor parte del calor necesario para el proceso. En el horno de cubilote ocurre en una zona muy cercana a las toberas, en donde la temperatura se encuentra por encima de 2.000°C . La reacción es de carácter heterogéneo ya que en ella se encuentran involucrados un sólido (coque) y un fluido gaseoso (aire); bajo las condiciones térmicas en las cuales ocurre, la cinética está controlada por el transporte del reactante gaseoso (oxígeno), hasta la superficie del coque. Stanek et al. [11] proponen que la velocidad de reacción puede expresarse como lo indica la relación (1).

$$R_1 = k_1 a_{S\text{Coque}} C_{\text{O}_2} \quad (1)$$

En donde:

R_1 es la velocidad de reacción en $[\text{kmoles}/\text{m}^3 \text{ s}]$.

$a_{S\text{Coque}}$ es el área superficial del coque $[\text{m}^2/\text{m}^3]$.

C_{O_2} es la concentración de oxígeno en los gases $[\text{kmoles}/\text{m}^3]$.

k_1 es el coeficiente de transferencia de masa del oxígeno hacia el coque $[\text{m}/\text{s}]$.

El coeficiente de transferencia de masa se evalúa con la correlación (2).

$$k_1 = \left(\frac{0,99 G_{\text{gases}}}{\rho_{\text{gases}}} \right) \left(\frac{d_{S\text{Coque}} G_{\text{gases}}}{\mu} \right)^{-0,41} Sc^{-2/3} \quad (2)$$

En donde:

G_{gases} , es el flux de la corriente gaseosa [kg/m³ s].

ρ_{gases} , es la densidad de la corriente gaseosa [kg/m³].

d_{SCoque} , es el diámetro promedio de las partículas de coque en el lecho empacado [m].

μ , es la viscosidad de la corriente gaseosa [kg/m s].

Sc , es el número de Schmidt el cual se toma como 0,86.

La viscosidad de los gases se calcula con la correlación (3) y la densidad con la (4).

$$\mu = 1,149 \times 10^{-5} \left(\frac{T_{gases}}{273,1} \right)^{0,768} \quad (3)$$

En donde T_{gases} es la temperatura de la corriente gaseosa [K].

$$\rho_{gases} = \frac{PM_{gases}}{RT_{gases}} \quad (4)$$

En donde:

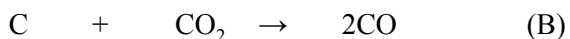
P , es la presión [atm].

M_{gases} , es el peso molecular de la corriente gaseosa [kg/kmol].

R , es la constante de gas ideal la cual se toma como 0,08206 [m³ atm/K kmole].

La reacción de gasificación por CO₂ o reacción de *Boudouard*

El CO₂ generado durante la reacción de combustión puede reaccionar con el carbono en el coque para producir la reacción (B).



Esta reacción es endotérmica y consume gran parte del calor generado en el proceso. Aunque desde el punto de vista energético podría considerarse indeseable, es importante que durante el proceso avance en cierto grado, ya que disminuye las pérdidas por oxidación de los elementos me-

tálicos en la carga. La cinética de esta reacción es también de carácter heterogéneo. Los mecanismos cinéticos que la gobiernan dependen de la temperatura [10]. A temperaturas inferiores a 1.000 °C la velocidad está controlada por la reactividad, ésta a su vez depende de la calidad del coque y de las condiciones bajo las cuales se haya llevado a cabo el proceso de coquización. En el rango de temperaturas entre 1.000 y 1.200 °C la velocidad está limitada por dos mecanismos: el transporte del reactante gaseoso CO₂ hasta la superficie del coque y la difusión de éste a través de los poros, por tanto la propiedad más importante en este intervalo es el volumen y la estructura de los poros. Por último, cuando la temperatura es mayor a 1.200 °C la reacción se hace muy rápida y el dióxido de carbono no tiene suficiente tiempo para difundirse hacia el interior, por tanto la velocidad de reacción queda limitada por el transporte del reactante en la fase gaseosa y depende del área específica del coque.

Para la difusión externa del CO₂ hasta la superficie del coque la velocidad de reacción puede expresarse como lo indica la ecuación (5) [11].

$$R_{2,1} = k_1 a_{SCoque} C_{CO_2} \quad (5)$$

En donde:

$R_{2,1}$, es la velocidad de reacción en la superficie del coque [kmoles/m³ s].

C_{CO_2} , es la concentración de CO₂ en la corriente gaseosa [kmoles/m³].

En el caso de la difusión a través de los poros se utiliza la ecuación (6) [11].

$$R_{2,2} = \frac{d_{SCoque}}{6} \frac{\rho_{SCoque}}{M_C} k_v \eta a_{SCoque} C_{CO_2} \quad (6)$$

En donde:

$R_{2,2}$, es la velocidad de la reacción por la difusión a través de los poros [kmoles/m³ s].

ρ_{SCoque} , es la densidad en bulto del coque [kg/m³].

M_C , es el peso molecular del carbono [kg/kmol].

k_v , es la constante cinética de gasificación [$m^3/kmol\ s$].

η , es la difusividad efectiva por los poros.

La combinación de ambos mecanismos se expresa mediante la ecuación (7). Ésta simplemente establece el mecanismo cinético como un sistema de resistencias en serie.

$$R_2 = \frac{1}{\frac{1}{R_{2,1}} + \frac{1}{R_{2,2}}} \quad (7)$$

En la ecuación (7) R_2 es la velocidad global de la reacción de gasificación por CO_2 [$kmol/m^3\ s$].

Reacción de gasificación por vapor de agua

El agua ingresa al cubilote a través de dos vías. La primera es la humedad presente en los materiales de carga, la segunda es el vapor de agua que ingresa con el aire de soplado. La humedad de los materiales de carga, se evapora luego de ingresar al horno en una zona muy cercana a la puerta y sale con los gases en la chimenea, su efecto es despreciable [2]. El vapor de agua que ingresa en el aire de soplado llega directamente a la zona de combustión del horno y reacciona con el coque de acuerdo con la reacción (C).



De la misma manera como para la reacción de *Boudouard*, la cinética de la gasificación por vapor de agua está determinada por el transporte del reactante hasta la superficie de reacción y por la difusión del reactante a través de los poros; las velocidades para ambos mecanismos han sido establecidas como lo indican las expresiones (8) y (9), respectivamente [12].

$$R_{3,1} = k_1 a_{SCoq} C_{H_2O} \quad (8)$$

En donde:

$R_{3,1}$, es la velocidad de la reacción de gasificación por vapor de agua en la superficie del coque [$kmol/m^3\ s$].

C_{H_2O} , es la concentración de vapor de agua en la corriente gaseosa [$kmol/m^3$].

$$R_{3,2} = \frac{d_{SCoq}}{6M_C} a_{SCoq} 4,367 \times 10^7 \exp\left[\frac{-32121}{T_{gases}}\right] (C_{H_2O})^{0,58} \quad (9)$$

En donde $R_{3,2}$ es la velocidad de la reacción de gasificación por vapor de agua debida a la difusión por los poros del coque [$kmol/m^3\ s$].

La combinación de ambos mecanismos en serie se presenta en la ecuación (10).

$$R_3 = \frac{1}{\frac{1}{R_{3,1}} + \frac{1}{R_{3,2}}} \quad (10)$$

En donde R_3 es la velocidad global de la reacción de gasificación del coque por vapor de agua [$kmol/m^3\ s$].

Información experimental

La información experimental que se presenta a continuación fue obtenida en el horno de cubilote de la planta ecoeficiente de la Universidad de Antioquia, cuyas características se encuentran en la tabla 1. Además el horno puede trabajar en colada continua o colada intermitente, y el aire del soplo puede enriquecerse con oxígeno y precalentarse entre 200 y 500 °C. Encima de la puerta de carga se encuentra un posquemador encargado de oxidar el CO a CO_2 y así evitar su salida a la atmósfera.

El tamaño de partícula del coque se seleccionó entre 0,035 y 0,075 m, además se le realizó análisis próximo con el fin de determinar el carbono fijo; el valor encontrado fue de 90,4%. La composición química de los gases de chimenea se analizó por espectrometría infrarroja no dispersiva para el CO y el CO_2 y por celda electroquímica para el O_2 , el

equipo utilizado fue un *Mahiak* de referencia *Multor 610*. Las muestras se tomaron durante los períodos estables de operación del horno, inmediatamente antes de la puerta de carga del horno, con el fin de evitar la dilución de la corriente gaseosa en ascenso y obtener un dato confiable. En la tabla 2 se presentan los datos de operación durante los experimentos y en la tabla 3 los resultados de los análisis de composición de los gases. En la tabla 4, *RC* es la relación de combustión, la cual se calcula a partir de los datos de composición de gases como

$$RC = 100 \times \frac{\%CO_2}{\%CO_2 + \%CO}$$

Los porcentajes se expresan como porcentaje en volumen.

Tabla 1 Dimensiones principales del horno de cubilote de la planta ecoeficiente

<i>Parámetro</i>	<i>Dimensión</i>
Diámetro interno	0,31 m
Diámetro exterior en la zona de fusión	0,60 m
Número de toberas	4 en una fila
Diámetro de las toberas	0,054 m
Distancia desde el centro de las toberas hasta la puerta de carga	2,10 m
Distancia desde el centro de las toberas hasta el fondo del horno	0,20 m
Altura desde la piquera de escoria hasta el fondo del horno	0,15 m

Tabla 2 Condiciones de operación durante los experimentos

<i>Colada número</i>	<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>
Coque [kg]	3,0000	3,0000	3,0000	3,0000	3,0000
Carga Caliza [kg]	0,8500	0,8500	1,5000	1,5000	1,5000
Metal [kg]	12,0000	12,0000	12,0000	12,0000	12,0000
Caudal soplo (aire + O ₂) [Nm ³ /s]	0,0617	0,0600	0,0920	0,0912	0,0895
Soplo % O ₂ total	35,6000	35,9000	33,6300	32,2000	32,5700
Temperatura [°C]	287,0000	300,0000	350,0000	350,0000	220,0000
% humedad relativa	65,0000	65,0000	71,0000	68,0000	71,0000

Tabla 3 Resultados de los análisis de composición de los gases y el consumo de metal

<i>Colada</i>	<i>CO₂</i>	<i>CO</i>	<i>O₂</i>	<i>RC</i>	<i>Velocidad de carga del metal [kg/h]</i>
1	9,720	39,610	3,510	19,70	308
2	10,050	38,710	3,770	20,61	308
3	20,230	21,250	0,990	48,77	348
4	11,940	35,140	3,010	25,36	387
5	13,720	31,360	3,050	30,27	385

Construcción del modelo matemático

Obtención de las ecuaciones diferenciales

El presente modelo matemático es unidimensional y en estado estable, es decir que sólo considera los cambios en la composición de los gases en función de la coordenada axial del horno y no

considera las variaciones con el tiempo. Se asume que el sistema es estanco, por tanto no existen fugas de gas en la columna del horno. La formación de pequeñas cantidades de NO_x se considera despreciable y se asume que todo el oxígeno se consume durante la reacción de combustión. Para la formulación se toma el elemento diferencial de volumen que se muestra en la figura 3. El eje coordenado se ubica a la altura de las toberas y

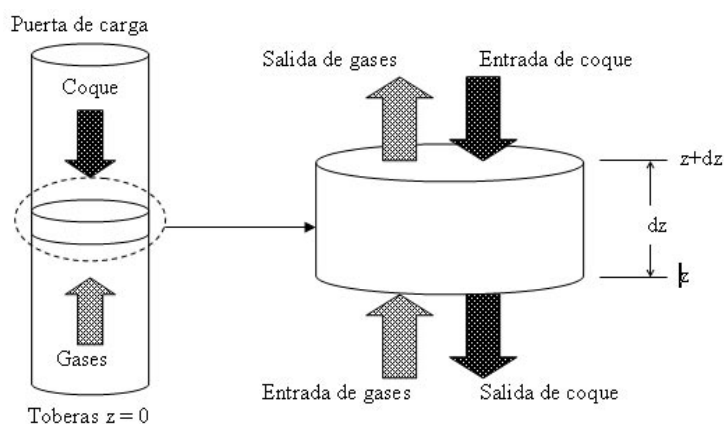


Figura 3 Elemento diferencial de volumen utilizado para construir el modelo matemático

Tabla 4 Sistema de ecuaciones diferenciales

Especie	Ecuación diferencial	Número
Carbono _(coque)	$\frac{dN_{\text{carbono-coque}}}{dz} = R_1 + R_2 + R_3$	(11)
Oxígeno	$\frac{dN_{\text{O}_2}}{dz} = -R_1$	(12)
Dióxido de carbono	$\frac{dN_{\text{CO}_2}}{dz} = R_1 - R_2$	(13)
Monóxido de carbono	$\frac{dN_{\text{CO}}}{dz} = 2R_2 + R_3$	(14)
Vapor de agua	$\frac{dN_{\text{H}_2\text{O}}}{dz} = -R_3$	(15)
Hidrógeno	$\frac{dN_{\text{H}_2}}{dz} = R_3$	(16)
Nitrógeno	$\frac{dN_{\text{N}_2}}{dz} = 0$	(17)

es positivo hacia la puerta de carga. El sistema de ecuaciones diferenciales se obtiene expresando el flux de las especies gaseosas involucradas mediante su consumo o generación de acuerdo con las reacciones antes mencionadas. En la tabla 4, se muestran las ecuaciones diferenciales obtenidas, en donde N_i corresponde al flux de la especie i en la corriente gaseosa expresado en unidades de $\text{kmol/m}^3 \text{ s}$ y z es la coordenada axial del horno en m.

El balance de masa global para la corriente gaseosa, se obtiene mediante la suma de las ecuaciones de la (12) a la (17), como se presenta en la ecuación (18). Para la solución del modelo sólo pueden utilizarse seis de ellas, por lo que la número (17) no se tiene en cuenta y se calcula por diferencia.

$$\frac{dN_{gases}}{dz} = R_2 + R_3 \quad (18)$$

Cálculo de las concentraciones molares de los gases y el área específica del coque

Dado que todas las expresiones cinéticas dependen de la concentración de uno de los reactivos gaseosos, es necesario calcularlas a partir de los valores de los flux expresados en el sistema de ecuaciones diferenciales. Para este fin se calculan las fracciones molares como la relación entre el flux de la especie i y el flux total de gases (N_{gases}), como lo indica la ecuación (19). Se utiliza la ecuación (20) para calcular la con-

centración molar total de la corriente gaseosa y se calculan las concentraciones de cada especie mediante la ecuación (21).

$$fm_i = \frac{N_i}{N_{gases}} \quad (19)$$

En donde fm_i es la fracción molar de la especie i en la corriente gaseosa [--].

$$C_{gases} = 100 \frac{P}{RT_{gases}} \quad (20)$$

En donde C_{gases} es la concentración molar total de la corriente gaseosa [kmol/m^3].

$$C_i = fm_i C_{gases} \quad (21)$$

En la expresión (21) C_i es la concentración molar de la especie i en la corriente gaseosa [kmol/m^3].

Para calcular el área específica del coque se utiliza la expresión propuesta por Stanek [11]. Esta expresión es una variación de la que se utiliza comúnmente para calcular el área específica de un sólido en un lecho empacado. La diferencia consiste en que en el horno de cubilote, el lecho empacado se encuentra en movimiento debido al descenso de los materiales de carga, por tanto el área de los elementos en él, debe ponderarse de acuerdo con las velocidades de descenso de cada material, expresada como la relación entre el flux másico y la densidad, tal como se muestra en la expresión (22).

$$a_{SCoque} = \frac{6(1-\epsilon)}{d_{SCoque}} \frac{\frac{G_{SCoque}}{\rho_{SCoque}} + \frac{G_{SCaliza}}{\rho_{SCaliza}} + \frac{G_{SCuarzo}}{\rho_{SCuarzo}} + \frac{G_{SHierro}}{\rho_{SHierro}} + \frac{G_{SAcero}}{\rho_{SAcero}} + \frac{G_{SFeSi}}{\rho_{SFeSi}} + \frac{G_{SSiC}}{\rho_{SSiC}}}{\frac{G_{SCoque}}{\rho_{SCoque}} + \frac{G_{SCaliza}}{\rho_{SCaliza}} + \frac{G_{SCuarzo}}{\rho_{SCuarzo}} + \frac{G_{SHierro}}{\rho_{SHierro}} + \frac{G_{SAcero}}{\rho_{SAcero}} + \frac{G_{SFeSi}}{\rho_{SFeSi}} + \frac{G_{SSiC}}{\rho_{SSiC}}} \quad (22)$$

En donde G_{sj} y P_{sj} son el flux másico en [$\text{kg/m}^3 \text{ s}$] y la densidad respectivamente del componente sólido de la carga j y ϵ es la porosidad del lecho empacado [m^3/m^3]. El flux de coque G_{SCoque} se calcula con la ecuación (23).

$$G_{SCoque} = \frac{M_C N_{carbono-coque}}{f_{carbonofijo-coque}} \quad (23)$$

En donde $f_{carbonofijo-coque}$ es la fracción de carbono fijo en el coque.

Los flux de los otros componentes sólidos se calculan con las relaciones de carga, de acuerdo con las ecuaciones de la (24) a la (29).

$$G_{SCaliza} = \frac{W_{Caliza}}{W_{Coque}} G_{SCoque} \quad (24)$$

$$G_{SCuarzo} = \frac{W_{Cuarzo}}{W_{Coque}} G_{SCoque} \quad (25)$$

$$G_{SHierro} = \frac{W_{Hierro}}{W_{Coque}} G_{SCoque} \quad (26)$$

$$G_{SAcero} = \frac{W_{Acero}}{W_{Hierro}} G_{SCoque} \quad (27)$$

$$G_{SFeSi} = \frac{W_{FeSi}}{W_{Coque}} G_{SCoque} \quad (28)$$

$$G_{SSiC} = \frac{W_{SiC}}{W_{Coque}} G_{SCoque} \quad (29)$$

La velocidad de carga del metal se calcula multiplicando la relación de carga del metal por el valor del flux de coque en la puerta de carga y por el área del cubilote, como lo expresa la ecuación (30).

$$G_{SHierro} = \left(\frac{W_{Hierro}}{W_{Coque}} + \frac{W_{Acero}}{W_{Coque}} \right) G_{SCoque(puertadecarga)} \frac{\pi}{4} D_{cubilote}^2 \quad (30)$$

En donde $D_{cubilote}$ es el diámetro interno del horno de cubilote [m].

Solución del modelo

El modelo consiste en un sistema de siete ecuaciones diferenciales ordinarias cuyos parámetros varían de acuerdo con las expresiones cinéticas de las reacciones involucradas. El sistema coordinado comienza en la altura de las toberas y es positivo a medida que se acerca hacia la puerta de carga. A primera vista se conocen sólo seis condiciones iniciales, las cuales corresponden al flux de las especies gaseosas al nivel de las toberas, éstas se calculan con

las condiciones del aire de soplado durante la operación que se desea simular.

Como datos de la operación se conocen: el caudal del aire de soplado (Q_{soplo}), el porcentaje de enriquecimiento con oxígeno de éste y la temperatura de entrada. El caudal volumétrico debe convertirse a flux másico para poder ser utilizado como condición inicial para la solución del modelo. Ya que el caudal del aire de soplado se expresa en condiciones normales y se sabe que una kilomol de gas ideal ocupa 22,414 m³ el caudal másico puede expresarse de acuerdo con la ecuación (31).

$$Q_{másico} = \frac{Q_{soplo}}{22,414} \quad (31)$$

En la ecuación (31) $Q_{másico}$ es el caudal másico en [kmol/s] y Q_{soplo} es el caudal del aire de soplado en [Nm³/s]. Para convertir el caudal másico a flux másico basta dividir por el área perpendicular al flujo de los gases, como muestra la ecuación (32).

$$flux_{soplo} = \frac{Q_{másico}}{\frac{\pi}{4} D_{cubilote}^2} \quad (32)$$

En donde $Flux_{soplo}$ es el flux del aire de soplado en [kmol/m² s].

La ecuación (32) es la condición inicial para el flux total de gases, es decir para la ecuación diferencial (11). Para el flux inicial de oxígeno basta multiplicar el flux del soplo por la fracción de oxígeno en él, como indica la ecuación (33). Este cálculo es válido ya que los datos que se tiene son en condiciones normales y por tanto la fracción volumétrica es igual a la fracción molar.

$$flux_{O_2} = flux_{soplo} \left(\frac{\%O_2}{100} \right) \quad (33)$$

En donde $flux_{O_2}$ es el flux de oxígeno molecular en el aire de soplado y $\% O_2$ es el porcentaje total de oxígeno en el aire de soplado, es decir 21% del aire atmosférico más el porcentaje de enriquecimiento.

Para los flux de las demás especies gaseosas: CO_2 , CO y H_2 se tomaron valores iniciales de 10^{-6} $[\text{kmol}/\text{m}^2 \text{ s}]$. Aunque los valores reales son ceros, se adoptó este valor con el fin de evitar singularidades en la solución numérica y acelerar la convergencia del programa; no se considera que se haya incurrido en un error dada la magnitud del valor inicial asumido.

La séptima condición inicial corresponde al flux del carbono en el coque al nivel de las toberas. Si se asume que el horno trabaja en condiciones estacionarias y que la cama de coque no desciende ni asciende, se puede considerar que el flux del carbono del coque al nivel de las toberas es cero, es decir, que todo el carbono se consume en el trayecto desde la puerta de carga hasta las toberas y que sólo las cenizas del coque pueden descender por debajo de las toberas durante la operación, como en efecto sucede cuando el horno es bien operado. De nuevo se asumió un valor de 10^{-6} $[\text{kmol}_{(\text{carbono})}/\text{m}^2 \text{ s}]$ para el flux de carbono en el coque al nivel de las toberas, tal como se hizo para las especies gaseosas. Los perfiles de temperatura de los gases se obtuvieron

mediante la simulación de los experimentos en el *AFS Cupola Model* [14], los cuales se muestran en la figura 4.

Con las condiciones iniciales y los perfiles de temperatura se puede resolver el modelo. La solución obtenida será única, ya que es un arreglo de siete ecuaciones diferenciales con siete condiciones iniciales. La función utilizada fue la *ODE23S* del *Matlab* versión 5.3. El sistema se solucionó dividiendo la altura del horno en 501 partes.

Para ajustar el modelo se utilizó la difusividad efectiva por los poros del coque, los valores que mejor ajustaron con los datos experimentales, se presentan más adelante.

Resultados

Los perfiles obtenidos para las fracciones molares de los gases en cada colada se muestran en las figuras 5, 6 y 7. Los valores de la difusividad efectiva por los poros del coque que mejor ajustaron el modelo se presentan en la tabla 5.

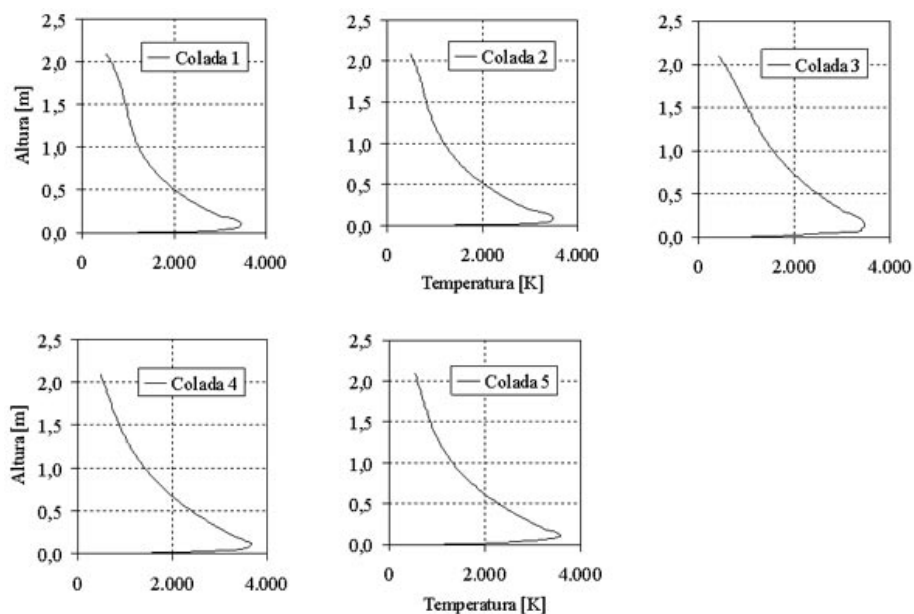


Figura 4 Perfiles de temperatura de los gases para las cinco coladas. Estos perfiles se obtuvieron en *Matlab* versión 5.3, basados en la información suministrada por el *AFS Cupola Model*

Tabla 5 Valores del coeficiente de difusividad efectiva utilizados para ajustar el modelo matemático

Difusividad efectiva por los poros del coque	Colada				
	1	2	3	4	5
	2,00E-08	1,80E-08	7,50E-09	1,30E-08	1,30E-08

En la tabla 6, se puede observar la comparación de los resultados experimentales y los valores obtenidos de las simulaciones, para los gases de chimenea.

Análisis de resultados

Como puede observarse en los perfiles obtenidos para las fracciones molares de las especies gaseosas (figuras 5, 6 y 7), el comportamiento

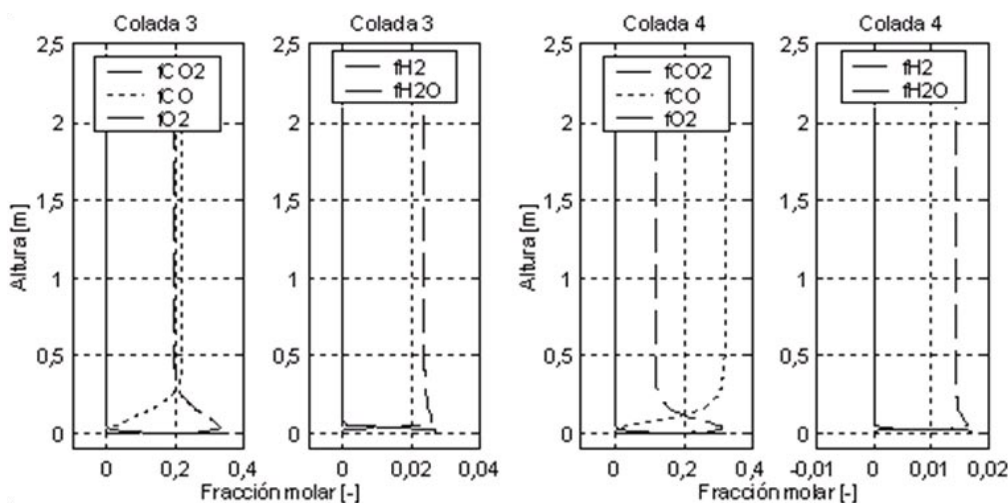


Figura 5 Perfiles de fracción molar de los gases para las coladas 1 y 2

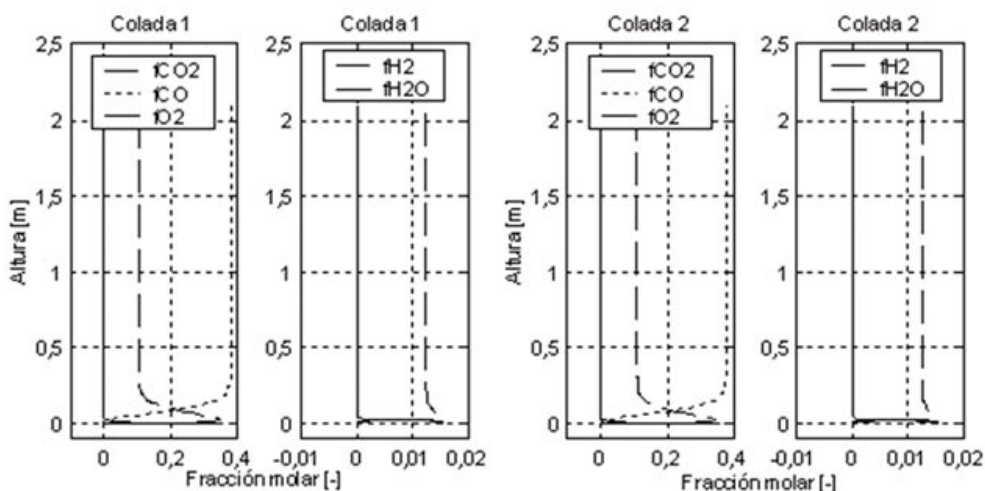


Figura 6 Perfiles de fracción molar de los gases para las coladas 2 y 3

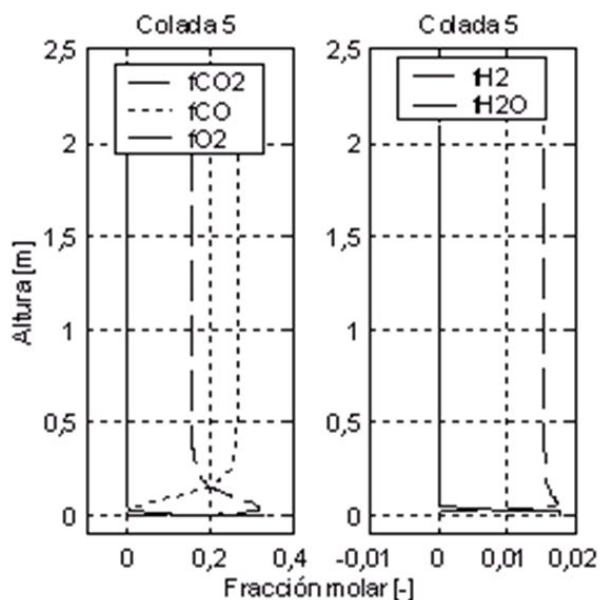


Figura 7 Perfiles de fracción molar de los gases para la colada 5

Tabla 6 Comparación de los resultados experimentales y los obtenidos con el modelo matemático

Colada		1	2	3	4	5
% CO ₂	Real	9,72	10,05	20,23	11,94	15,05
	Modelo	10,11	10,63	19,74	11,63	15,54
	% error	0,39	0,58	0,49	0,31	0,49
% CO	Real	39,61	38,71	21,25	35,14	31,36
	Modelo	38,19	37,77	21,97	31,85	26,48
	% error	1,42	0,94	0,72	3,29	4,88
Relación de combustión	Real	19,70	20,61	48,77	25,36	30,27
	Modelo	20,93	21,97	47,32	26,75	36,99
	% error	1,23	1,36	1,45	1,39	6,72
Velocidad de carga del metal [kg/h]	Real	308,00	308,00	348,00	387,00	385,00
	Modelo	322,00	313,00	379,00	420,00	391,00
	% error	4,55	1,62	8,91	8,53	1,66

es acorde con lo que se espera para un horno de cubilote. El oxígeno se consume de forma rápida en la zona cercana a las toberas generando dióxido de carbono, cuya fracción molar aumenta en alturas comprendidas entre el nivel de las toberas y 0,04 m, es en este punto donde comienza a ser importante la reacción de gasificación del coque por CO₂. A una altura de 0,40 m máximo, la fracción molar de CO

se hace mayor que la de CO₂, lo que marca el final de la zona de oxidación y el comienzo de la zona de reducción superior.

El modelo presenta dos limitaciones. La primera es que no considera la generación de CO₂ por la calcinación de la caliza y la segunda que asume que el oxígeno se consume en su totalidad. Sin embargo, los valores obtenidos para las

fracciones molares de los gases en chimenea presenta muy buenos ajustes, con porcentajes de error menores del 1% para el CO_2 , 5% para el CO y 7% para la relación de combustión. Esto implica que, estas dos limitaciones no son tan importantes como los fenómenos considerados en la modelación y puede explicarse desde el punto de vista de las cantidades relativas de coque y caliza para la primera de ellas y de las cantidades de oxígeno que se encuentran en chimenea durante la operación para la segunda (máximo de 3,77% en la colada 2, véase tabla 3).

El porcentaje de error obtenido para la velocidad de carga del metal fue de 9% máximo, lo que indica que el supuesto de que el carbono en el coque debe ser aproximadamente cero al nivel de las toberas es bueno para la condición inicial del flux de coque durante la solución numérica.

En cuanto a los perfiles obtenidos para las fracciones molares de H_2 y $\text{H}_2\text{O}_{(\text{vapor})}$, aunque no se tienen datos experimentales para la fracción molar de H_2 en chimenea, el comportamiento cualitativo es acorde con lo que se espera en un horno de cubilote. El vapor de agua reacciona con el carbono en el coque en una zona muy cercana a las toberas y produce H_2 y CO .

Con respecto a los perfiles de temperatura (figura 4) obtenidos con el *AFS Cupola Model*, se encuentra que son consistentes con lo que se espera. Al nivel de las toberas, la temperatura de los gases es la temperatura de entrada del soplo, la generación de calor debida a la reacción de combustión hace que la temperatura aumente de manera significativa en la zona de oxidación (hasta 0,4 m desde las toberas). A partir de este punto, la temperatura de los gases comienza a disminuir debido a tres factores: cesa la reacción de combustión debido a la falta de oxígeno, la reacción de gasificación comienza a ser más importante y la transferencia de calor entre las fases se hace significativa. La temperatura sigue descendiendo hasta la puerta de carga debido a la transferencia de calor entre los gases y el lecho empacado.

Conclusiones

Se construyó un modelo matemático que simula los fenómenos de combustión en un horno de cubilote, cuyos resultados se ajustan a los datos experimentales con desviaciones menores del 1% para el CO_2 , 5% para el CO , 7% para la relación de combustión y 9% para la velocidad de carga del metal. El modelo proporciona los perfiles de composición de los gases y permite determinar las zonas de oxidación y reducción superior en el horno. Aunque no se posee información experimental para el porcentaje de H_2 en chimenea el comportamiento cualitativo de los perfiles es consistente con lo que se espera para un horno de cubilote. Este modelo puede utilizarse como herramienta confiable para la simulación de los procesos de combustión en el horno de cubilote, permitiendo estimar la cantidad de metal cargado y la eficiencia de los fenómenos que ocurren entre los gases y el coque. Además, es un primer paso en la construcción de un modelo matemático que permita simular el comportamiento de la carga metálica en el horno de cubilote y los perfiles térmicos del mismo.

Agradecimientos

Los autores quieren expresar sus agradecimientos a la empresa *Katz Associates Inc* y al CODI por la financiación del proyecto, al grupo de investigaciones GASURE de la Universidad de Antioquia por proporcionarnos y asesorarnos en la toma de los datos de composición de gases en chimenea y a todas las personas que de una u otra forma han participado en el proyecto "Carburo".

Referencias

1. C. Silva. *Modelo matemático para la disolución del silicio en el horno de cubilote*. Informe final tesis de pregrado para optar al título de ingeniera metalúrgica. Medellín. Facultad de Ingeniería. Universidad de Antioquia. 2004. p. 18.
2. American Foundry Society. *AFS Cupola Handbook*. Estados Unidos. AFS. 6.ª ed. 1999. pp. 12-6, 12-7.

3. J. Declery. "Chemical Reactions in Cupola Practice". En: *The Foundry*. Vol. 32. USA. Aug. 1908. pp. 296-298.
4. A. W. Belden. "Foundry Cupola Gases and Temperatures". En: *U. S. Bureau of Mines. Bulletin 54*. USA. 1913.
5. J. G. Breen. "Calculation of Metal, Coke and Gas Temperature Distributions in a Cupola Furnace". En: *Proceedings Australasian Institute of Mining and Metallurgy*. N.º 208. Australia. December, 1963. pp. 25-42.
6. J. Grennan. "Visual Observation of Melting in a Cupola". En: *AFS transaction*. Vol. 31. USA. 1924. pp. 101-110.
7. N. Meysson. "Mathematical Simulation Model of Cupola Operation". En: *Fonderie*. Francia. 1975. p. 165.
8. A.B. Oraper, K. Nyamekye. "Energy Model Predictions of Gas Composition and Temperature Profiles in a Cold Blast Cupola". En: *AFS Transactions*. Vol. 93. USA. 1985. pp. 615-626.
9. K. Nyamekye, A. B. Craper. "Heat and Mass Balances in a Cold Blast Cupola". En: *AFS Transactions*. Vol. 97. USA. 1989. pp. 837-846.
10. K. Seymour. "The Properties of Coke Affecting the Cupola Performance". En: *AFS Transactions*. Vol. 90. USA. 1982. pp. 825-833.
11. V. Stanek, B. Q. Li, J. Szekely. "Mathematical Model of a Cupola Furnace-Part I: Formulation and an Algorithm to Solve the Model". En: *AFS Transactions*. Vol. 100. USA. 1992. pp. 425-437.
12. V. Stanek, S. Katz, C. Landefeld. "Mathematical Model of a Cupola Furnace—Part VII: Effect of Humidity of the Blast on the Cupola Performance". En: *AFS Transactions*. Vol. 100. USA. 1992. pp. 839-845.
13. H. D. Mejía, R. Aristizábal, C. Silva. *Estudio del comportamiento del silicio adicionado como carburo de silicio en el horno de cubilote*. Proyecto CODI de investigación aplicada. Facultad de Ingeniería. Universidad de Antioquia. Medellín. 2002.
14. Software *AFS Cupola Model*. AFS. USA. 1999.