

A Descripción de modelos matemáticos

A.1 Radiación, emisión y absorción la combustión y el plasma

Los gases formados durante el proceso de al combustión del propano contienen principalmente dióxido de carbono y vapor de agua. Para calcular el intercambio de radiación en el horno se deben tomar en cuenta que la radiación y absorción de estos gases ocurre a ciertas longitudes de onda del espectro electromagnético, por lo cual una simplificación es necesaria. La atmósfera formada por los gases productos de la combustión es considerada como un gas gris, lo que podría conllevar importantes errores de cálculo; sin embargo, al considerar la suma ponderada de todos estos gases, el modelo puede representar una atmósfera dentro de la cámara de combustión de manera más real. Este método es conocido como el modelo mixto de gases grises [27].

La emisividad de un gas gris es calculada de la forma:

$$\epsilon_g = 1 - e^{-k_g \cdot P \cdot L} \quad (\text{A.1})$$

Donde k_g es el coeficiente de absorción en $[\frac{1}{m-atm}]$, P es la presión parcial del gas absorbente y L es la longitud del haz radiante.

La emisividad total del gas puede representarse de forma matemática como una mezcla de N gases grises, cada uno con características de absorción distintas.

$$\epsilon_g = \sum_{i=1}^n a_{g,n} [1 - e^{-k_g \cdot P \cdot L}] \quad (\text{A.2})$$

Donde $a_{g,n}$ son los coeficientes ponderados de cada gas gris. Estos coeficientes se calculan con la temperatura de los gases y asumiendo que el coeficiente de absorción permanece constante [28].

La absorción del gas es más compleja, ya que depende de la temperatura de la fuente de radiación y su distribución espectral, además de la temperatura y composición del gas mismo. La absorción total de un gas a temperatura T_g en un cuerpo gris puede ser ajustado con el mismo modelo de gases grises utilizado para determinar la emisividad (utilizando los mismos coeficientes).

$$\alpha_g = \sum_{i=1}^n a_{s,n} [1 - e^{-k_g \cdot P \cdot L}] \quad (\text{A.3})$$

En este caso, los coeficientes de ponderación se determinan utilizando la temperatura de la superficie de la siguiente manera:

$$a_{s,n} = b_{1,n} + b_{2,n} T_s \quad (\text{A.4})$$

A.1.1 Formulación numérica de radiación por absorción y transmisión

Como este caso tiene varias superficies de transferencia de calor a analizar, es necesario implementar una metodología formal para calcular las ecuaciones de una forma operativa.

Mediante un balance de energía radiante de un cuerpo gris se pude encontrar que: La energía perdida en la superficie es igual a la emitida menos la absorbida.

$$\frac{q}{A} = \epsilon E_b - \alpha G \quad (\text{A.5})$$

Donde q es el flujo de calor en el área A , además se considera que la radiación total es la suma de todas las irradiaciones G de la superficie j y si ϵ iguala α .

$$\frac{q_i}{A_i} = \epsilon_i \left(E_b - \sum G_i \right) \quad (\text{A.6})$$

Donde la irradiacion puede ser expresada como $A_i J_i F_{ij} = G_i A_i$ por lo que:

$$\frac{q_i}{A_i} = \epsilon_i \left(E_b - \sum F_{ij} J_i \right) \quad (\text{A.7})$$

Expresando todo en términos de la radiosidad J (energía radiante intercambiada entre superficies) y los factores de forma F $\frac{q_i}{A_i} = \epsilon_i J_i - \sum_j F_{ij} J_i$ para finalmente obtener:

$$J_i - (1 - \epsilon_i) \sum F_{ij} J_i = \epsilon_i E_{bi} \quad (\text{A.8})$$

Otra manera de hacer lo mismo es a través ecuaciones de nodo, en las que en cada nodo se debe cumplir el balance de energía, lo cual resulta en:

$$\frac{\epsilon_i}{1 - \epsilon_i} (E_{bi} - J_i) + \sum_j F_{ij} (J_j - J_i) = 0 \quad (\text{A.9})$$

Para programar estas ecuaciones en *MATLAB*, la forma más práctica es utilizar la forma matricial, por esta razón las ecuaciones pueden ser reescritas como sigue [29]:

$$|A| |J| = |C| \quad (\text{A.10})$$

Por lo tanto la radiosidad se calcula al encontrar la inversa de $|A|$

$$|J| = |A|^{-1} |C| \quad (\text{A.11})$$

Donde $|A|$ se define como:

$$|A| = (1 - \alpha) F \cdot (I - \epsilon_i) - I \quad (\text{A.12})$$

Siendo F el factor de forma, I una matriz identidad diagonal, α representa la absorción y ϵ la emisividad.

La matriz C se define como:

$$|C| = -\epsilon_{wi}\sigma T_{wi} - (I - \epsilon_{wi})\epsilon_g\sigma T_g \quad (\text{A.13})$$

El subíndice w indica las propiedades de la pared y el subíndice g las del gas. De esta manera se puede simular el intercambio de radiación entre las superficies del horno y los gases de la combustión.

A.2 Modelo de la transferencia de calor total en el horno

Para determinar la transferencia de calor total, primero se considera la radiosidad calculada anteriormente y luego la transferencia de calor debida a la convección.

Al igual que en la referencia [13], en el horno, hay dos formas distintas de modelar la transferencia por convección: una para el flujo paralelo a las paredes y otra para el flujo normal. Para calcular el calor transferido por convección es necesario determinar el coeficiente de transferencia de calor:

$$h = Nu \cdot \frac{k}{d} \quad (\text{A.14})$$

Donde k es la conductividad térmica del gas y d el diámetro interior del horno.

Como se sabe de [13], los efectos de radiación son los que dominan la transferencia de calor y los efectos de la convección son de una magnitud menor. El cálculo de la convección se realiza con una simplificación (se siguió el mismo método encontrado en la referencia [13]), únicamente para contabilizar en el orden de magnitud correspondiente de estos efectos. Si el horno es considerado como un conducto liso con un flujo completamente desarrollado, entonces el factor de fricción de un flujo turbulento se puede determinar con la ecuación de Petukhov.

$$f = (0.790 \ln (Re) - 1.64)^2 \quad (\text{A.15})$$

El número de Nusselt para flujo turbulento tiene relación con el factor de fricción a través de la analogía de Chilton-Colburn:

$$Nu = 0.125 \cdot f \cdot Re \cdot Pr^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A.16})$$

Para flujos completamente desarrollados en conductos lisos, se obtiene una relación sencilla de Nusselt al combinar las ecuaciones A.15 y A.16:

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A.17})$$

Esta ecuación puede mejorar su precisión cuando es modificada como:

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^n \quad (\text{A.18})$$

Siendo $n = 0.4$ para calentamiento y 0.3 para enfriamiento [30]

Para el caso de superficie normal al flujo, el Nusselt es definido como:

$$Nu = 0.027 Re^{0.805} Pr^{\frac{1}{3}} \quad (\text{A.19})$$

Finalmente, conociendo los valores de h de la ecuación A.14 a través del número de Nusselt, la ecuación de transferencia de calor por convección es:

$$Q_{conv} = h_i (T_g - T_{wi}) \quad (\text{A.20})$$

El subíndice i indica el número de la superficie, g las propiedades del gas y w las de la pared.

La transferencia total de calor dentro del horno es la suma de las ecuaciones A.11 y A.20

$$Q_{tot} = Q_{rad} + Q_{conv} \quad (\text{A.21})$$

A.3 Cálculo del perfil de temperaturas

Para analizar la transferencia de calor en las paredes, se considera una elemento diferencial de la pared Δx , luego asumiendo que la densidad es ρ , el calor específico es C y el área perpendicular a la transferencia de calor es A . Por lo que el balance de energía en este elemento en un intervalo de tiempo Δt se expresa como:

$$Q_x - Q_{x+\Delta x} + \dot{E}_{gen} = \frac{\Delta E_{elemento}}{\Delta t} \quad (\text{A.22})$$

Donde la energía interna generada (sólo si se utiliza el modelo con resistencia eléctrica) se expresa como:

$$\dot{E}_{gen} = \dot{e}_{gen} V_{elemento} = \dot{e}_{gen} A \Delta x \quad (\text{A.23})$$

Al dividir entre $A\Delta x$, y hacer los límites cuando $\Delta x \rightarrow 0$ y $\Delta t \rightarrow 0$, entonces la ecuación se reordena para obtener:

$$\frac{\delta^2 T}{\delta x^2} + \frac{\dot{e}_{gen}}{k} = \frac{1}{\alpha} \frac{\delta T}{\delta t} \quad (\text{A.24})$$

Para resolver esta ecuación es necesario utilizar un método numérico de conducción de calor transitoria. Considerando que la pared del horno tiene un espesor de longitud L , entonces el tamaño del elemento diferencial tendrá un tamaño de:

$$\Delta x = \frac{L}{M} \quad (\text{A.25})$$

Donde M es el número de nodos en las paredes con orientación en dirección de x , para este caso se eligió $M = 6$. La figura 21 muestra la configuración de los nodos de temperatura, los nodos están distribuidos de la parte interior del horno a la exterior, en total existen seis puntos a lo largo de toda la pared.

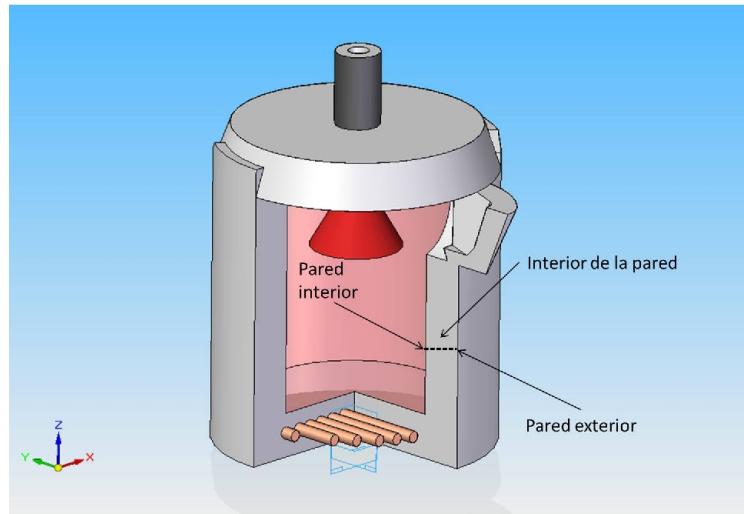


Figura 21: Análisis del perfil de temperatura en el horno

Como un elemento diferencial interno M incluye conducción de calor de ambos lados, la formulación de diferencias finitas para un nodo transitorio se puede expresar como:

$$kA \frac{T_{m-1} - T_m}{\Delta x} + kA \frac{T_{m+1} - T_m}{\Delta x} + \dot{e}_m A \Delta x = \rho A \Delta x C_p \frac{T_m^{i+1} - T_m^i}{\Delta t} \quad (\text{A.26})$$

Al cancelar el área A y multiplicar por $\frac{\Delta x}{k}$:

$$\alpha = \frac{k}{\rho C_p} \quad (\text{A.27})$$

$$\tau = \frac{\alpha \Delta t}{\Delta x^2} \quad (\text{A.28})$$

$$T_{m-i}^i - 2T_m^i + T_{m+1}^i + \frac{\dot{e}_m \Delta x^2}{k} = \frac{T_m^{i+1} - T_m^i}{\tau} \quad (\text{A.29})$$

Esto crea un sistema de ecuaciones para los nodos interiores, y para completar las ecuaciones del sistema es necesario formular las ecuaciones de los nodos de frontera, esto con el fin de evaluar el intercambio de calor que existe entre el horno y el medio ambiente. El coeficiente h es global, toma en cuenta los efectos de radiación y convección. En caso de ser un sistema aislado el coeficiente h sera cero y la ecuación no se altera:

$$T_0^{i+1} = \left(1 - 2\tau - 2\tau \frac{h \Delta x}{k} \right) T_0^i + 2\tau \frac{h \Delta x}{k} T_\infty + \tau \frac{e_0^i \Delta x^2}{k} \quad (\text{A.30})$$

Una vez que el sistema de ecuaciones esta completo y después de especificar las condiciones iniciales, la solución al problema transitorio se obtiene al ejecutar en el tiempo con un intervalo de tamaño Δt [30]. Los perfiles de temperatura pueden ser calculados en un intervalo de tiempo definido por el usuario, pero si el usuario define la temperatura interior del horno, la simulación mostrara el tiempo que le lleva llegar a esa temperatura.

A.4 Simulación de la energía del plasma

La simulación realizada se concentra en el análisis de transferencia de calor de la antorcha de plasma al aluminio y a las paredes del horno. Para llevar a cabo la simulación se toman en cuenta una serie de consideraciones:

- Los factores de forma se calculan de tal manera que se desprecian los efectos del ánodo (móvil). Sólo se consideran las paredes del cilindro, el cátodo, que también es un cilindro y la llama de plasma, que se modela como una pirámide truncada divergente hacia el metal.
- La corriente durante todo el proceso se mantiene constante en 600 [A], pero la potencia, al igual que el voltaje sufren variaciones.
- El calor por convección se desprecia casi en todos los casos, excepto para calcular la temperatura de las paredes después de la fusión del aluminio, como se explicó en la ecuación A.30 . Se comprobó que la transferencia de calor por convección tiene un efecto casi despreciable al compararla con la transferencia provocada por la radiación.

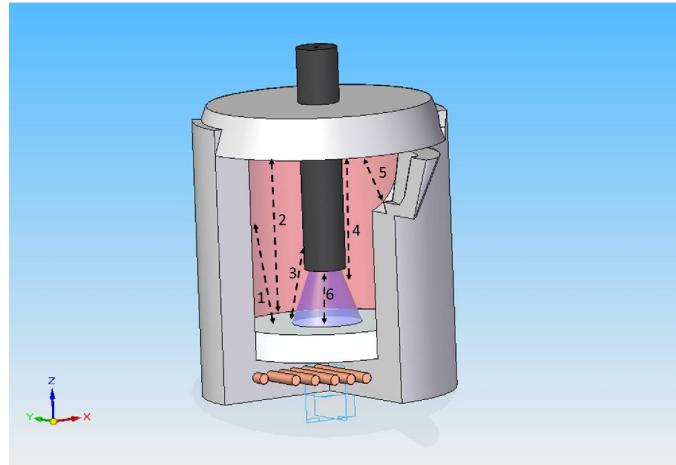


Figura 22: Transferencia de calor en el sistema con plasma, 1

Como se muestra en 22, el metal intercambia energía con las paredes (flujo 1), la tapa (flujo 2), el cátodo (flujo 3) y la llama de plasma (flujo 6). La tapa intercambia energía con la llama de plasma y las paredes del horno (flujos 4 y 5), también intercambia energía con el cátodo como se ve en la figura 23.

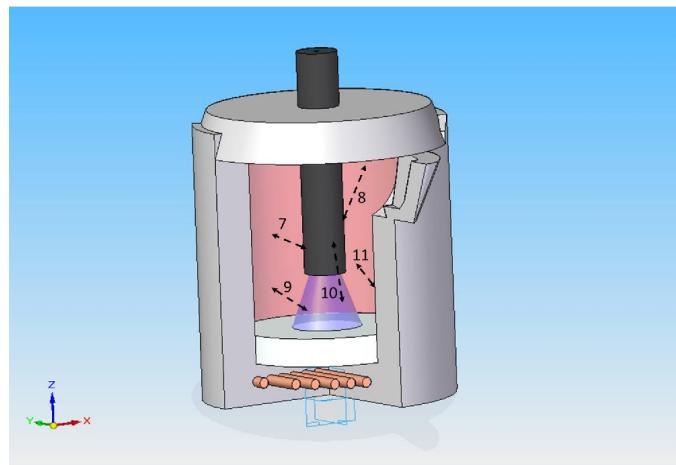


Figura 23: Transferencia de calor en el sistema con plasma, 2

Por otra parte, las paredes del horno intercambian energía con la antorcha de plasma, con el cátodo y con si mismas (flujos 9, 7 y 11). Finalmente el cátodo intercambia energía con la llama de plasma de dos maneras: por

radiación y por contacto directo, ya que la llama se crea justo a la salida del cátodo. Esto se ha implementado según las ecuaciones vistas en la sección A.1.

A.4.1 Análisis en el cátodo

El cátodo es el elemento por el cual se introduce el nitrógeno para producir el plasma. Este elemento es el transmisor de corriente eléctrica al nitrógeno, lo que provoca un desprendimiento de electrones y la elevación de la su temperatura. Para analizar el desprendimiento de los electrones del cátodo, es necesario estudiarlo primero a una escala atómica, la figura 24 muestra la interacción entre el cátodo y electrones. El potencial ϕ es la *work function* (la energía mínima que un electrón debe adquirir de una fuente de energía térmica para abandonar el metal).

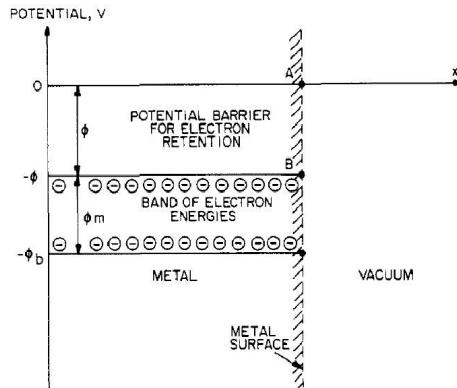


Figura 24: Diagrama de potencial de distancia [31]

Los electrones están atrapados en el metal dentro de un pozo de energía, la profundidad de este pozo es igual a la *work function*, ϕ . La banda de movilidad de los electrones en el metal es de ϕ_m , lo que da como resultado una banda total de $\phi_b = \phi + \phi_m$. Para que un electrón sea liberado del metal tiene que sobrepasar la barrera de ϕ . A temperaturas bajas esto no sucede, sin embargo cuando se trata de temperaturas muy altas, los electrones del metal adquieren suficiente energía térmica y escapan del mismo.

El cátodo del plasma opera a altas temperaturas, lo que provoca una corriente muy grande que da el efecto descrito en el párrafo anterior. La corriente es distribuida sobre toda el área del cátodo, por lo que su densidad de corriente no es demasiado grande.

$$J_i = \frac{I}{A_{cat}} \quad (\text{A.31})$$

Tan sólo materiales especiales como el carbón, tungsteno o molibdeno pueden soportar de manera continua altas temperaturas, que se producen por la corriente del arco y por el calentamiento de una fuente externa de calor [12].

Para calcular la temperatura de trabajo del cátodo es necesario recurrir a la mecánica estadística; estudiar las emisiones de electrones en las superficies, lo que se conoce como la ecuación de Richardson [31].

$$J = A \cdot T^2 \cdot \exp\left(\frac{-e\phi}{kT}\right) \left[\frac{A}{m^3}\right] \quad (\text{A.32})$$

En dicha ecuación, T es la temperatura de la superficie, el parámetro A es la constante de emisión, k es la constante de Boltzmann ($1.381 \cdot 10^{-23} \frac{J}{K}$) y e la carga del electrón ($1.602 \cdot 10^{-19} [C]$). Cuando se emiten electrones de la superficie de un cátodo, se dice que emite de manera termiónica. Las constantes A y ϕ generalmente se determinan de manera experimental al medir la densidad de corriente J emitida desde una superficie metálica a distintos valores de temperatura T .

La teoría de la mecánica estadística predice que para todos los metales el parámetro A de la ecuación de Richardson se obtiene de la forma [31]:

$$A = \frac{4\pi mek^2}{h^3} = 1.2 \cdot 10^6 \left[\frac{A}{m^2 k^2}\right] \quad (\text{A.33})$$

Donde m es la masa de la partícula y h es la constante de plank.

La *work function* del grafito ϕ se determinó por L. Mathur [32] en una serie de experimentos sobre barras de grafito bajo varios regímenes de temperatura y diferentes presiones. En ese artículo se calculó un valor de 4.83, sin embargo en estudios más recientes aplicados al análisis de cátodos para sistemas de plasma se ha demostrado que las aleaciones de grafito tienen una *work function* de entre 3 y 4, basados en el trabajo de P. V. Sherstnev [33] se eligió el valor de 3.2 [ev] para el cátodo del sistema en este caso.

Con las consideraciones anteriores, se realizaron iteraciones para que el valor de la densidad de la corriente, calculado como en la ecuación A.31 y la obtenida de la ecuación de Richardson fueran similares, de esto se obtuvo de manera indirecta la temperatura del cátodo, que será utilizada para el balance de energía.

El siguiente paso es calcular la temperatura del plasma, con lo que se podrá calcular el calor transmitido del plasma al aluminio.

A.4.2 Ecuación de Elenbaas-Heller

En esta ecuación la presión del gas se considera constante, por lo que la descripción de la columna de plasma requiere únicamente la descripción de la distribución de la temperatura. Dicha distribución se obtiene a través de la ecuación de Elenbaas-Heller, la cual analiza a la columna de plasma como un cilindro en estado estacionario estabilizado entre paredes en un tubo de radio R . Para este enfoque la corriente y la presión se suponen bajas y que la temperatura del plasma no excede los 11600 [K].

De acuerdo a la ecuación de Maxwell, el campo eléctrico en un arco homogéneo es constante a través de su sección transversal. La distribución radial de la conductividad térmica $\sigma(T)$, la densidad de corriente $J = \sigma(T)E$ y la densidad del calor del efecto Joule $w = jE = \sigma(T)E^2$ se determinan únicamente por la distribución radial $T(r)$. Por tanto, la energía del plasma puede ser expresada por la ecuación de conducción de calor con la fuente de calor por efecto Joule:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r\lambda(T) \frac{dT}{dr} \right] + \sigma(T)E^2 = 0 \quad (\text{A.34})$$

Donde r es el radio de la columna de plasma, E es el campo eléctrico y λ es la conductividad térmica. La ecuación A.34 es la que se conoce como ecuación de Hellenbaas-Heller.

El campo eléctrico no es parámetro controlado como la corriente, por lo tanto para calcularlo es necesario recurrir a una ecuación que relacione las propiedades eléctricas y térmicas en la antorcha de plasma [12].

$$I = E \int_0^R \sigma(T_r) 2\pi \delta r \quad (\text{A.35})$$

Para reducir el número de funciones a uno, es conveniente introducir el concepto de flujo de calor potencial $\Theta(T)$ (relación de la conductividad térmica y la temperatura) en lugar de la temperatura como parámetro independiente:

$$\Theta = \int_0^T \lambda(T) dT \quad (\text{A.36})$$

$$\lambda(T) \frac{dT}{dr} = \frac{d\Theta}{dr} \quad (\text{A.37})$$

substituyendo el flujo de calor potencial en la ecuación de Hellenbass-Heller:

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left[r \frac{d\Theta}{dr} \right] + \sigma(\Theta)E^2 = 0 \quad (\text{A.38})$$

La ecuación anterior no se puede resolver de manera analítica debido a la no linealidad de la función $\sigma(\Theta)$. Por tal razón se tienen que realizar simplificaciones como en el modelo propuesto por Steenbeck.

A.4.3 Modelo de Steenbeck

El modelo de Steenbeck se basa en la fuerte dependencia exponencial de la conductividad de la electricidad y la temperatura del plasma de la ecuación de Saha [34], la cual trata sobre el nivel de ionización esperado en el gas del plasma [12].

A temperaturas muy bajas, la conductividad eléctrica del plasma en estado de cuasi-equilibrio es pequeña, sin embargo, cuando la temperatura excede los 4000 [K], ésta crece significativamente.

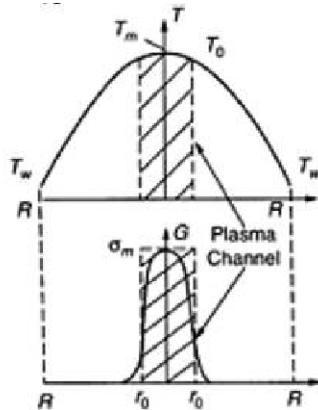


Figura 25: Modelo de Steenbeck [12]

La figura 25 muestra que el decremento de la temperatura desde el centro al exterior es gradual, mientras que el cambio de la conductividad eléctrica es muy fuerte. Esto lleva a la conclusión de que la corriente del arco está situada en el radio r_0 .

La temperatura y la corriente eléctrica pueden ser considerados constantes dentro del arco y máximas en el eje de descarga: T_m y $\sigma(T_m)$. En este caso la corriente eléctrica total del arco puede ser expresada como:

$$I = E\sigma\pi r_0^2 \quad (\text{A.39})$$

Es importante señalar que fuera del arco $r > r_0$, la conductividad térmica se puede despreciar, al igual que la corriente y el calor por efecto Joule. Por esta razón, la ecuación de Helenbaas-Heller puede integrarse fácilmente fuera del arco. La integral relaciona el flujo de calor potencial $\Theta_m(T_m)$ en el arco, la temperatura del plasma en la columna y el efecto Joule por unidad de longitud $W = EI$:

$$\Theta_m = \frac{w}{2\pi} \ln \frac{R}{r_0} \quad (\text{A.40})$$

La potencia de descarga del arco (calor por efecto joule) se define también como:

$$W = \frac{I^2}{\pi r_0^2 \sigma_m} \quad (\text{A.41})$$

El modelo incluye tres parámetros por determinar: la temperatura del plasma T_m , el radio del arco r_0 , y el campo eléctrico. Por lo general, la corriente y el radio R del tubo de descarga son los parámetros controlados.

Para encontrar los tres parámetros desconocidos, el modelo de Steenbeck sugiere el Principio de mínima potencia para proveer la tercera ecuación necesaria para completar el sistema.

De acuerdo al principio de mínima potencia, la temperatura del plasma y el radio del arco deben minimizar la potencia específica de descarga y el campo eléctrico cuando el valor de la corriente es fijo. La ecuación extra obtenida de este modelo es por tanto la ecuación A.42:

$$\left(\frac{d\sigma}{dT} \right)_{T=t_m} = \frac{4\pi\lambda\sigma}{w} \quad (\text{A.42})$$

Los modelos del arco de plasma basados en las ecuaciones A.40, A.41 y A.42 ofrecen excelentes resultados, muy próximos con los datos experimentales.

A.4.4 Modelo de Raizer

Para calcular la temperatura del plasma se utilizó el modelo de Raizer. La clave de este modelo está en definir un arco como una región en donde la conductividad no decrece más de e veces con respecto al máximo valor en el eje de descarga. La conductividad eléctrica de un arco de plasma en cuasi-equilibrio puede expresarse con la ecuación de Saha como la siguiente función:

$$\sigma(T) = C \exp \left(-\frac{I_i}{2T} \right) \quad (\text{A.43})$$

Donde I_i es el potencial de ionización del gas en el arco y C es el parámetro constante de conductividad, esta ecuación es valida sólo para corrientes y temperaturas moderadas. En el caso de la conductividad eléctrica en aire, nitrógeno y argón a presión atmosférica y temperaturas de $T_m = 8000$ a 14000 [K] se puede expresar como la siguiente ecuación numérica:

$$\sigma(T) = 83 \exp \left(-\frac{36000}{T} \right) \quad (\text{A.44})$$

Donde el potencial de ionización toma el típico valor de 6.2 [eV].

Tomando la conductividad eléctrica del arco y asumiendo que $\frac{I}{2T} \gg 1$, el decremento e veces de la conductividad corresponde al siguiente decremento de temperatura.

$$\Delta T = T_m - T_0 = \frac{2T_m^0}{I_i} \quad (\text{A.45})$$

Combinando estas ecuaciones y bajo la asunción de efecto Joule constante:

$$W = 4\pi\lambda_m\Delta T \quad (\text{A.46})$$

$$W = 8\pi\lambda_m \frac{T_m}{I_i} \quad (\text{A.47})$$

Donde λ es la conductividad térmica. Esta ecuación coincide completamente con la del principio de mínima potencia, por lo que se concluye que los modelos son equivalentes y pueden utilizarse ambos para resolver el sistema de ecuaciones del plasma.

Por otro lado, de la ecuación A.39 se obtiene:

$$E = \frac{I}{\sigma\pi r^2} \quad (\text{A.48})$$

Donde la corriente y el radio de la llama de plasma son valores conocidos. La conductividad eléctrica máxima del nitrógeno, gas utilizado para formar el plasma, es de 2000 $\frac{s}{cm}$ según J. Roth [31] y el calor de efecto joule por unidad de longitud en un arco a presión alta es significativo, usualmente entre 0.2 y 0.5 $\frac{kW}{cm}$.

El campo eléctrico es constante a lo largo de la columna de plasma, por lo que en realidad describe el voltaje. Las características de la corriente y el voltaje son hiperbólicas, lo que indica que el efecto calorífico Joule por unidad de longitud no cambia significativamente con la corriente. El calor

del efecto Joule crece con la presión, que está relacionada con la transferencia de calor debida a la contribución de la radiación del plasma de alta densidad.

El efecto Joule resulta de la aproximación hiperbólica del decrecimiento del campo eléctrico con la corriente:

$$E = \frac{8\pi\lambda_m T_m^2}{I_i} \frac{1}{I} \quad (\text{A.49})$$

La conductividad térmica se estima constante con un valor de $1.55 \left[\frac{W}{m \cdot K} \right]$, valor encontrado en F. Alexander [12] y de gráficas en J. Dunn [35]. El campo eléctrico se obtiene la ecuación A.48, y utilizando los modelos descritos anteriormente se calcula la temperatura de la ecuación A.49. Una vez que se calculó la temperatura del plasma, es necesario continuar el análisis de la energía transmitida de la llama de plasma al horno de aluminio.

A.4.5 Modelo de la transferencia de calor del plasma

Para analizar el efecto del plasma sobre el aluminio es necesario conocer el flujo de partículas de plasma, el número de partículas por unidad de área por unidad de tiempo que golpean la superficie del metal. Este valor es dado por el producto de la velocidad normal y la superficie del metal [31].

$$v_z = v \cos \theta \quad (\text{A.50})$$

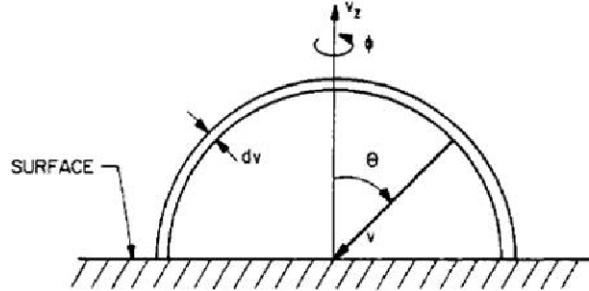


Figura 26: Vector de velocidad [31]

La figura 26 muestra que el vector de velocidad de una partícula es definido por la velocidad v y los ángulos azimuthal y polar, ϕ y θ respectivamente.

Consideramos un diferencial de volumen, el cual contiene un número de partículas (Γ) que se aproximan el aluminio a un espacio de velocidad definida por $v, v + dv; \theta, \theta + d\theta$ y $\phi + d\phi$:

$$d\Gamma(v, \theta, \phi) = V_z dn(v, \theta, \phi) = \frac{V f(v) \sin \theta \cos \theta d\phi d\theta dv}{4\pi} \quad (\text{A.51})$$

Si las partículas son isotópicas y homogéneas en el espacio de velocidad y se aproximan al metal desde la parte de arriba, el flujo total de partículas que llegan al aluminio es:

$$\Gamma = \int_0^\infty v f(v) dv \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin \theta \cos \theta d\theta d\phi = \frac{1}{4} \int_0^\infty v f(v) dv \quad (\text{A.52})$$

Sustituyendo la velocidad e integrando:

$$\Gamma = n \left(\frac{2kT}{\pi m} \right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty x^3 e^{2x} dx = \frac{1}{4} n \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{A.53})$$

Donde n es el número de densidad (cantidad intensiva utilizada para describir el grado de concentración de objetos que se pueden contar como partículas, moléculas o fotones en un espacio físico de tres dimensiones). El valor de n fue tomado de valores típicos de la referencia [34], correspondiente a valores medidos para el nitrógeno en plasma a presión atmosférica.

Las ecuaciones anteriores dan el valor diferencial del flujo de partículas que golpean el aluminio. Para conocer la potencia que entrega el plasma al aluminio, en Watts por metro cuadrado, es necesario multiplicar el diferencial de flujo de partículas por la energía cinética de cada una de ellas.

$$dP(v, \theta, \phi) = \frac{1}{2}mv^2dT(v, \theta, \phi) \quad (\text{A.54})$$

Sustituyendo las ecuaciones de impacto de las partículas en la ecuación anterior, se obtiene la potencia que recibe el metal por unidad de área [12].

$$P = \frac{m}{8} \int_0^m v^3 f(v) dv = \frac{nm}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2kT}{m} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{\infty} x^5 e^{-x^2} dx \quad (\text{A.55})$$

$$P = \frac{mn}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2kT}{m} \right)^{\frac{3}{2}} = 2kT\Gamma \quad (\text{A.56})$$

Con la ecuación A.53 se calculó el flujo de partículas y luego con la ecuación A.56 se estima el calor que se entrega al aluminio. Con este calor, fue posible realizar las iteraciones necesarias para resolver el problema de conducción de calor en estado transitorio en el horno de plasma.

A.5 Resistencia eléctrica

El calor también puede ser transferido mediante el espectro electromagnético en regiones con una longitud de onda grande (dentro del espectro infrarrojo y más allá). Los elementos eléctricos son la principal fuente de energía que existe para calentar mediante el espectro electromagnético, lo más común son los calentadores de resistencias eléctricas [7]. Sin embargo, en este caso particular, la resistencia se encuentra colocada en medio del refractario y su transferencia de calor hacia adentro del horno se da más por conducción que por radiación, aun así el funcionamiento y modelo matemático (excepto por la transferencia de calor, que se modela como generación interna de calor en el refractario) es igual.

Cuando pasa electricidad a través de un conductor produce un incremento en la generación de calor en el metal debido a su resistencia. La potencia alcanzada se puede describir como:

$$P_{elec} = I^2 R \quad (\text{A.57})$$

Donde I es la corriente en amperios y R es la resistencia en ohms, esta resistencia esta dada por:

$$R = \Omega \frac{x}{A} \quad (\text{A.58})$$

Donde Ω es la resistividad del material, x es la longitud de la resistencia y A es el Área de la sección transversal de la resistencia. En la mayoría de los materiales Ω presenta variaciones en tres ordenes de magnitud dependiendo de las propiedades y la temperatura. Tipicamente la resistividad se incrementa con la variacion de la temperatura, si la variacion es uniforme, entonces Ω puede ser representada como:

$$\Omega_r = \Omega_0 (1 + aT) \quad (\text{A.59})$$

Donde Ω_r es la resistividad a la temperatura T , Ω_0 es la resistividad a $20 [^\circ C]$ y a es el coeficiente de variación de resistividad con la temperatura.

La temperatura se obtiene del balance de energía, que involucra las propiedades del material y la potencia generada por la corriente eléctrica:

$$T_i = \frac{P_{elec}(t)}{m_{res}c_{pres}} + T_{i-1} \quad (\text{A.60})$$

Para modelar la resistencia, existen dos posibles materiales, nicromo y platino, las características de estos materiales se obtienen del sitio web *Matweb* [36].

B Código de Matlab

En este apéndice se mostrará de forma general, con las subrutinas más importantes, la manera en que se programó la simulación del horno para fundir aluminio. Todos los scripts son propios y fueron diseñados exclusivamente para realizar esta simulación.

B.1 Gases de combustión

El siguiente script muestra el modelo de Tucker [27], para calcular las propiedades radiativas de los gases de combustión:

```

1 b=[0.4370000000000000,0.3900000000000000,0.1730000000000000;
2 7.13000000000000e-05,-5.20000000000000e-06,
3 -6.61000000000001e-05];
4 k_g=[0,1.8800000000000000,68.80000000000000];
5
6 for i=1:3
7     a_s(i)=b(1,i)+b(2,i)*T_wall_c(i);
8 end
9
10 L_m=0.3780000000000000;
11 P=.27;
```

```

12 alpha=0;
13
14 for i=1:3
15     alpha=a_s(i)*(1-exp(-k_g(i)*P*L_m))+alpha ;
16 end
17
18 tau=1-alpha ;
19
20 for i=1:3
21     a_g(i)=b(1,i)+b(2,i)*T_gas ;
22 end
23
24 epsilon=0;
25
26 for i=1:3
27     epsilon=a_g(i)*(1-exp(-k_g(i)*P*L_m))+ epsilon ;
28 end

```

B.2 Factores de forma

Los factores de forma (ecuaciones de R. Howell [17]) se obtuvieron con el siguiente código:

```

1 R=r/H;
2 X=(2*(R^2)+1)/R^2;
3 A_cyl=2*pi*r*H; %area del cilindro en m^2
4 A_top=pi*r^2; %area de la tapa y base
5 for i=1:2
6     for j=1:3
7         F_c(i,j)=1/2*(X-(X^2-4)^(1/2));
8         if i == j
9             F_c(i,j)=0;
10        else
11            if j==3
12                F_c(i,j)=1-F_c(i,j-1);
13                if i==2
14                    F_c(i,j)=1-F_c(i,j-2);
15                end
16            end
17        end
18    end
19 end
20 end

```

```

21 for i=3
22     for j=1:3
23         F_c(i,j)=F_c(j,i)*(A_top/A_cyl);
24         if i == j
25             F_c(i,j)=0;
26         end
27     end
28 end

```

La radiosidad se obtuvo de la siguiente manera:

```

1 sigma=5.6704*10^(-8);
2
3 for i=1:3
4     for v=1:3
5         if i==v
6             mpwc(i,v)=epsilon_wall_c(i);
7         else
8             mpwc(i,v)=0;
9         end
10    end
11 end
12
13 E_g=sigma*T_gas^(4);
14 Ac=tau*F_c*([1,0,0;0,1,0;0,0,1]-mpwc)-[1,0,0;0,1,0;0,0,1];
15
16 for i=1:3
17     l(i)=1-epsilon_wall_c(i);
18     E_wall_c(i)=sigma*T_wall_c(i)^(4);
19     Cc(i,1)=-epsilon_wall_c(i)*E_wall_c(i)-l(i)*epsilon*E_g;
20 end
21
22 Ac_inv=inv(Ac);
23 j_c=Ac_inv*Cc;

```

B.3 Radiación y convección

La transferencia de calor total (radiación y convección) en el horno es:

```

1 if Q_gas1==10
2     Pr=.73;
3     Re=.55*10^5;

```

```

4  end
5
6  if Q_gas1==40
7      Pr=.73;
8      Re=5*10^5;
9  end
10
11 d=r*2; %m
12 kq=.08984; %W/m-K
13 Nuss=.027*Re^(.805)*Pr^(1/3);
14
15 for i=1:3
16     E.bi(i)=sigma*T_wall_c(i)^4;
17
18     if i == 1
19
20         h(i)=Nuss*kq/d;
21         Q_rad(i)=epsilon/(1-epsilon)*(E.bi(i)-j_c(i));
22         Q_conv(i)=h(i)*(T_gas-T_wall_c(i));
23         Q(i)=Q_rad(i)+Q_conv(i);
24
25     else
26         if i == 2
27             h(i)=Nuss*kq/d;
28
29             Q_rad(i)=epsilon/(1-epsilon)*(E.bi(i)-j_c(i));
30             Q_conv(i)=h(i)*(T_gas-T_wall_c(i));
31             Q(i)=Q_rad(i)+Q_conv(i);
32
33     else
34         h(i)=.023*(kq/d)*Re^(.8)*Pr^(.4);
35         Q_rad(i)=epsilon/(1-epsilon)*(E.bi(i)-j_c(i));
36         Q_conv(i)=h(i)*(T_gas-T_wall_c(i));
37         Q(i)=Q_rad(i)+Q_conv(i);
38
39     end
40     end
41
42
43 end

```

B.4 Calentamiento del refractario

Un ejemplo del cálculo de la transferencia de calor transitoria dentro de las paredes del horno es el siguiente:

```

1 M=L/Dx+1; %numero de nodos
2 timewall=floor( timewall*60/Dt)
3 T_r=0;
4
5 for i=2:timewall
6   for j=1:3
7     T_0(1,j)=T_ini;
8     if charge==5
9       if proper==6
10         k=1.94330297E+01-5.70236231E-02*T_0(i-1,j)
11         +5.75522715E-05*T_0(i-1,j)^2-14.31+k_p2;
12         C=6.82022135E+02+4.21441374E+00*T_0(i-1,j)
13         -4.70509047E-03*T_0(i-1,j)^2-804.2+C_p2;
14       end
15     if proper==7
16
17       if T_0(i-1,j)>530
18         T_kk=530;
19         k=2.48978954E+01-2.91021877E-02
20         *(T_kk+273)-16.17+k_30;
21     else
22       k=2.48978954E+01-2.91021877E-02
23       *(T_0(i-1,j)+273)-16.17+k_30;
24     end
25
26   end
27   else
28     if T_0(i-1,j)>=1000
29       k=k_1000;
30     else
31       if T_0(i-1,j)>=500
32         k=k_500;
33       else
34         if T_0(i-1,j)<500
35           k=k_30;
36         end
37       end
38     end
39   end
40   if charge==5
41     if proper==8

```

```

42     alpha_w=(3.62381800E+01-3.42212333E
43     +00*zro2+1.04816666E-01*zro2^2)*10^(-7);
44     alpha_wp(par)=alpha_w;
45     else
46     alpha_w=k/(rho*C); %thermal diffusivity m^2/s
47
48     end
49     else
50     alpha_w=k/(rho*C); %thermal diffusivity m^2/s
51     end
52 Tau=alpha_w*Dt/(Dx^2);
53 A=Tau;
54 B=1-2*Tau;
55
56     T_2(1,j)=T_ini;
57     T_1(1,j)=T_ini;
58     T_3(1,j)=T_ini;
59     T_4(1,j)=T_ini;
60     T_5(1,j)=T_ini;
61
62     T_0(i,j)=B*T_0(i-1,j)+2*A*(T_1(i-1,j))+2*A*Q(j)*Dx/k;
63     T_1(i,j)=A*(T_0(i-1,j)+T_2(i-1,j))+B*T_1(i-1,j);
64     if j==2
65     if T_0(i-1,j)>t_liq
66
67         T_2(i,j)=A*(T_1(i-1,j)+T_3(i-1,j))+B*T_2(i-1,j);
68     else
69     if Rss==0
70         T_2(i,j)=A*(T_1(i-1,j)+T_3(i-1,j))
71         +B*T_2(i-1,j);
72     else
73         resistancecylinder
74         T_2(i,j)=A*(T_1(i-1,j)+T_3(i-1,j))
75         +B*T_2(i-1,j)+A*Qr*(Dx^2)/k;
76         T_r=T_r+1;
77     end
78
79
80 end
81 else
82     T_2(i,j)=A*(T_1(i-1,j)+T_3(i-1,j))+B*T_2(i-1,j);
83
84 end
85
86     T_3(i,j)=A*(T_2(i-1,j)+T_4(i-1,j))+B*T_3(i-1,j);

```

```

87 T_4(i,j)=A*(T_3(i-1,j)+T_5(i-1,j))+B*T_4(i-1,j);
88 T_ext=30; %c
89 h_et=0
90 Q_ext=h_et*(T_5(i-1,j)-T_ext);
91 T_5(i,j)=B*T_5(i-1,j)+2*A*(T_4(i-1,j))-2*A*Q_ext*Dx/k;
92
93 T_wall_c(j)=T_0(i,j)+273.15;%c
94 T_wll(j)=T_0(i,j);%
95
96 %propiedades de la combustion
97
98 PCI=46350; %kj/kg
99 m_com=Q_come/PCI; %[kg/s]
100 m_air=0.0033; %[kg/s]
101 m_gases=m_air+m_com; %[kg/s]
102 cp_gas=1.424;
103 T_gas=Q(j)*r*2*H/(1000*m_gases*cp_gas)+T_0(i,j)+273;
104
105 end
106 T_gas=(T_gas+1295+100)/2;
107 gasexergy
108 B_gas(i)=B_gast*(i*Dt)/3600; %kwh
109 Jicylinder;
110 Q_icylinder;
111 end
112
113 B_pgas=B_gast*t_pre*60/3600;
114 if Rss==1
115
116 time_r=T_r*Dt %[s] tiempo de uso de la resistencia.
117 Er=(Pot1*time_r/1000)/3600; %[kWh] from Electric R
118 Q_comkwh=Q_come*(t_pre*60)/3600; %fuel Energy kWh
119 Q_comex=B_com*m_com*(t_pre*60)/3600; %fuel Exergy kWh
120
121 else
122 Q_comkwh=Q_come*(t_pre*60)/3600; %fuel Energy kWh
123 Q_comex=B_com*m_com*(t_pre*60)/3600; %fuel Exergy kWh
124 end
125
126 T_gas_c=T_gas-273.15
127 Q_gas=m_gases*cp_gas*(T_gas_c-Tr_0)*(t_pre*60)/3600;

```

B.5 Resistencia eléctrica

La resistencia eléctrica se simuló de la siguiente manera:

```

1 Area=pi*r^2;
2 La=sqrt(Area);
3 Xr=La; %[m] %longitud de las resistencias
4 Ar=pi*rar^2; %[m^2] area de las resistencias
5 Nr=La/(rar^2); %numero de resistencias
6 Vr=Ar*Nr*Xr; %[m3] volumen de la resistencia
7 mr=rhon*Vr; %[kg] masa de la resistencia
8 s=1;
9
10 for timer=0:Dt
11     omega1(s)=omega*(1+Ur*(Tr1(s)-20)); %[ohm-m]
12     Rr(s)=omega1(s)*Xr*Nr/Ar; %[ohm] resistencia
13     Pot(s)=V^2/Rr(s); %[W]
14     Potv(s)=Pot(s)/Vr; %[W/m^3] generacion de potencia
15     Pot1=V^2/Rr(s); %[W]
16     Ir=V/Rr(s); %[A]
17     Qr=Potv(s);
18     Tr2(s)=(Pot(s))/(mr*cpni)+Tr1(s); %[c]
19
20 if Tr2(s)>=1200
21     Tr2(s)=1200;
22 end
23
24 s=s+1;
25 Tr1(s)=Tr2(s-1);
26 end

```

B.6 Fusión del aluminio

Uno de los más importantes es la fusión del aluminio, que se muestra a continuación:

```

1 M=L_m/Dx_m+1; %numero de nodos
2 Tau=alpha_a*Dt_m/(Dx_m^2);
3 A=Tau;
4 B=1-2*Tau;
5
6 j=2;
7 y=2;
8 T_a1(1)=T_aini;
9 T_a2(1)=T_aini;

```

```

10 T_a3(1)=T_aini;
11 T_a4(1)=T_aini;
12 T_a5(1)=T_aini;
13 R_ad=1;
14 Tr_2=0;
15 D_c=Dt_m;
16 Qp=0;
17 B0_ex=1;
18 while T_a3<t_m
19
20
21     if T_a5(j-1)>=t_m
22
23         if B0_ex==1
24             B1_ex=j ;
25         end
26         B0_ex=B0_ex+1;
27         if Rss2==0
28             T_a0(j)=2*A*T_a1(j-1)+B*T_a0(j-1);
29         else
30             T_a0(j)=2*A*T_a1(j-1)+B*T_a0(j-1)+2*A*Qp*Dx_m/k_m;
31             end
32             T_a1(j)=A*(T_a0(j-1)+T_a2(j-1))+B*T_a1(j-1);
33             T_a2(j)=A*(T_a1(j-1)+T_a3(j-1))+B*T_a2(j-1);
34             T_a3(j)=A*(T_a2(j-1)+T_a4(j-1))+B*T_a3(j-1);
35             T_a4(j)=A*(T_a3(j-1)+T_a5(j-1))+B*T_a4(j-1);
36             T_a5(j)=T_a5(j-1);
37             D_c=D_c+Dt_m;
38             if D_c>=Dt
39                 D_c=Dt_m;
40                 Twallscylindermetal
41             end
42
43             Tal=[T_a0(j);T_a1(j);T_a2(j);T_a3(j);T_a4(j);T_a5(j)];
44             j=j+1;
45             t_j=j*Dt_m;
46             T_q2=-(T_q-j)*Dt_m; %[s]
47             Qal=Q(2)*Area*T_q2; %[J]
48             else
49                 if Rss2==0
50                     T_a0(j)=2*A*T_a1(j-1)+B*T_a0(j-1);
51                 else
52                     T_a0(j)=2*A*T_a1(j-1)+B*T_a0(j-1)+2*A*Qp*Dx_m/k_m;
53                     end
54                     T_a1(j)=A*(T_a0(j-1)+T_a2(j-1))+B*T_a1(j-1);

```

```

55     T_a2(j)=A*(T_a1(j-1)+T_a3(j-1))+B*T_a2(j-1);
56     T_a3(j)=A*(T_a2(j-1)+T_a4(j-1))+B*T_a3(j-1);
57     T_a4(j)=A*(T_a3(j-1)+T_a5(j-1))+B*T_a4(j-1);
58     T_a5(j)=B*T_a5(j-1)+2*A*(T_a4(j-1))+2*A*Q(2)*Dx_m/k_m;
59
60     Tal=[T_a0(j);T_a1(j);T_a2(j);T_a3(j);T_a4(j);T_a5(j)];
61     D_c=D_c+Dt_m;
62     if D_c>=Dt
63         D_c=Dt_m;
64         Twallscylindermetal
65     end
66     j=j+1;
67     T_q=j;
68     end
69 T_wall_c(2)=T_a5(j-1)+273.15;%  

70 Jicylinder
71 Q_icylinder;
72
73 end
74 plotj1=j;
75 tjm=tj/60;
76 Tal
77 Q_lat=L_f*m; %[J]
78 T_q2;
79
80 u=0;
81 R_ad=0;
82
83 while Qal<=Q_lat
84
85
86 T_q2=T_q2+1;
87 Qal=Q(2)*Area*T_q2; %[J]
88 B_a1_f=Qal*(1-(Tr_0+273)/(t_m+273))/1000/3600;
89 T_a5(j)=T_a5(j-1);
90 T_a0(j)=T_a0(j-1);
91 T_a1(j)=T_a1(j-1);
92 T_a2(j)=T_a2(j-1);
93 T_a3(j)=T_a3(j-1);
94 T_a4(j)=T_a4(j-1);
95
96 u=u+1;
97     D_c=D_c+Dt_m;
98     if D_c>=Dt
99         D_c=Dt_m;

```

```

100      Twallscylindermetal
101      end
102      j=j+1;
103      end
104      R_ad=1;
105      plotj2=j;
106      Tui2=u/60;
107      T_q2;
108
109      timef=T_q2+T_q*Dt_m;
110
111      Time_min=timef/60;
112      u=0;
113
114
115      B2_ex=j;
116      while T_a3<t_liq
117          u=u+1;
118          alpha_a_liq=k_m/(rho_m*C_m_liq); %thermal diffusivity m^2/s
119          Tau=alpha_a_liq*Dt_m/(Dx_m^2);
120          A=Tau;
121          B=1-2*Tau;
122          if Rss2==0
123              T_a0(j)=2*A*T_a1(j-1)+B*T_a0(j-1);
124          else
125              T_a0(j)=2*A*T_a1(j-1)+B*T_a0(j-1)+2*A*Qp*Dx_m/k_m;
126              end
127              T_a1(j)=A*(T_a0(j-1)+T_a2(j-1))+B*T_a1(j-1);
128              T_a2(j)=A*(T_a1(j-1)+T_a3(j-1))+B*T_a2(j-1);
129              T_a3(j)=A*(T_a2(j-1)+T_a4(j-1))+B*T_a3(j-1);
130              T_a4(j)=A*(T_a3(j-1)+T_a5(j-1))+B*T_a4(j-1);
131              T_a5(j)=B*T_a5(j-1)+2*A*(T_a4(j-1))+2*A*Q(2)*Dx_m/k_m;
132              D_c=D_c+Dt_m;
133              if D_c>=Dt
134                  D_c=Dt_m;
135                  Twallscylindermetal
136              end
137              Tal=[T_a0(j);T_a1(j);T_a2(j);T_a3(j);T_a4(j);T_a5(j)];
138              T_wall_c(2)=T_a5(j)+273.15;%
```

139
140
141
142
143
144

```

145 end
146 Tr_2;
147 plotj3=j-1;
148 Tul=u*Dt_m/60;
149 time_g_a=j-1;
150
151 t15=Time_min+Tul;
152
153 if Rss2==1
154 if Rss==0
155     resistance2cylinder
156
157     time_r2=Tr_2*Dt %[s] tiempo de uso de la resistencia.
158     Er2=(Pot1*time_r2/1000)/3600; %[kWh] from Electric R
159 else
160     time_r2=Tr_2*Dt %[s] tiempo de uso de la resistencia.
161     Er2=(Pot1*time_r2/1000)/3600; %[kWh] from Electric R
162
163 end
164 end

```

B.7 Exergía del aluminio

Finalmente se presenta el cálculo de la exergía del aluminio:

```

1 B_cf=1;
2 B_al_f1=B_al_f/(B2_ex-B1_ex);
3 for B=1:time_g_a
4     if B>=B1_ex
5         if B<=B2_ex
6             Te_alum(B)=(T_a0(B)+T_a1(B)+T_a2(B)+T_a3(B)
7             +T_a4(B)+T_a5(B))/6;
8             B_al(B)=m*(C_m*(Te_alum(B)-Tr_0)-Tr_0*C_m
9             *log((Te_alum(B)+273)/(Tr_0+273)))/1000/3600
10            +B_al_f1*B_cf; %exergia del metal [kWh]
11            B_alf=B_al(B);
12            DB_al(B)=B_al(1)-B_al(B);
13            B_cf=B_cf+1;
14        else
15            Te_alum(B)=(T_a0(B)+T_a1(B)+T_a2(B)+T_a3(B)+T_a4(B)+T_a5(B))/6;
16            B_al(B)=m*(C_m*(Te_alum(B)-t_m)-
17            Tr_0*C_m*log((Te_alum(B)+273)/(t_m+273)))/1000/3600
18            +B_alf; %exergia del metal [kWh]

```

```

19 DB_al(B)=B_al(1)-B_al(B);
20
21     end
22 else
23 Te_alum(B)=(T_a0(B)+T_a1(B)+T_a2(B)+T_a3(B)+T_a4(B)+T_a5(B))/6;
24 B_al(B)=m*(C_m*(Te_alum(B)-Tr_0)-
25 Tr_0*C_m*log((Te_alum(B)+273)/(Tr_0+273)))/1000/3600;
26 DB_al(B)=B_al(1)-B_al(B);
27 end
28 end

```

C Análisis Exergético

El balance general de exergía en estado estacionario se expresa como:

$$\sum B_{in} - \sum B_{out} = \sum B_{des} \quad (C.1)$$

Lo que significa que la exergía que entra al sistema menos la que sale de él es igual a la exergía destruida durante la fundición. Para el caso del horno de fundición de aluminio los términos anteriores se expresan de la siguiente manera:

- Precalentamiento:

$$\sum B_{in} = B_{fuel} + B_{aire} \quad (C.2)$$

$$\sum B_{out} = B_{paredes} + B_{gases} + B_{perdidas} \quad (C.3)$$

- Fundición:

$$\sum B_{in} = B_{fuel} + B_{aire/N^2} + B_{aluminio\ solidio} \quad (C.4)$$

$$\sum B_{out} = B_{aluminio\ liquido} + B_{gases} + B_{perdidas} \quad (C.5)$$

C.0.1 Exergía del plasma

Las investigaciones realizadas en el área del plasma térmico son vastas y comprenden varios aspectos: modelos de transferencia de calor, campos magnéticos, cátodos y ánodos para mantener la ionización del gas, emisividad y radiación térmica, sin embargo en cuestiones de exergía no se han desarrollado tantas investigaciones como en los temas anteriormente señalados.

Sobre el tema, Petela, R. [37] ha desarrollado una metodología para calcular la exergía contenida en un flujo de plasma. Esta metodología consiste en calcular la entalpía (h) y la entropía (s) del plasma fuera de su ambiente de referencia (AR) para después hacer el cálculo de la exergía de la forma:

$$b = h - h_{AR} - T_{AR}(s - s_{AR}) \quad (C.6)$$

Estas funciones de estado del plasma son calculadas para un plasma de gas monoatómico considerando tres componentes característicos del plasma: plasmogen (tratamiento del gas de plasma como un gas ideal), excitación electrónica (cambio de nivel energético en un electrón, representa aproximadamente el 10% de la entalpía [38]) e ionización (sacar a las partículas del plasma fuera de su estado eléctrico neutro).

$$h_{plasma} = h_{plasmogen} + h_{excitacion} + h_{ionizacion} \quad (C.7)$$

$$s_{plasma} = s_{plasmogen} + s_{exitacion} + s_{ionizacion} \quad (C.8)$$

Cuando se trata de un gas diatómico es necesario agregar dos parámetros más: la oscilación de los átomos del plasmogen y la disociación (separación de iones) del gas. Debido a la complejidad de las ecuaciones es común obtener la exergía del plasma término a término para finalmente obtener la exergía total de la suma de los resultados individuales. El desarrollo de cada uno de los términos de las ecuaciones C.7 y C.8 se puede consultar en la referencia [37].

C.1 Exergía de la radiación

Para evaluar la eficiencia energética de un proceso generalmente se hace un estudio de la primera ley de la termodinámica, sin embargo, está claro que la segunda ley de la termodinámica, la cual esta directamente relacionada con la exergía, puede analizar de manera cualitativa el uso de la energía durante el proceso [39].

La transferencia por radiación de calor juega un papel muy importante en sistemas térmicos con altas temperaturas por lo que un análisis de segunda ley es una herramienta que puede ayudar a la mejora de estos sistemas. La exergía de la radiación fue originalmente estudiada para explicar la degradación de la energía solar recibida, por lo que la mayoría de los trabajos sobre el tema están inmersos en temas de ingeniería de la energía solar [40].

C.1.1 Exergía de un cuerpo negro

En 1964 Petela determinó la ecuación para el cálculo de un flujo de exergía de un cuerpo negro a una temperatura T [41].

Para un cuerpo negro tenemos las siguientes expresiones para la energía y entropía por unidad de área:

$$e_{cn} = \sigma T^4 \quad (C.9)$$

$$s_{cn} = \frac{4}{3}\sigma T^3 \quad (C.10)$$

Considerando un proceso reversible, la radiación de un cuerpo negro a la temperatura T es transmitida a otro cuerpo negro a temperatura T_0 [42]

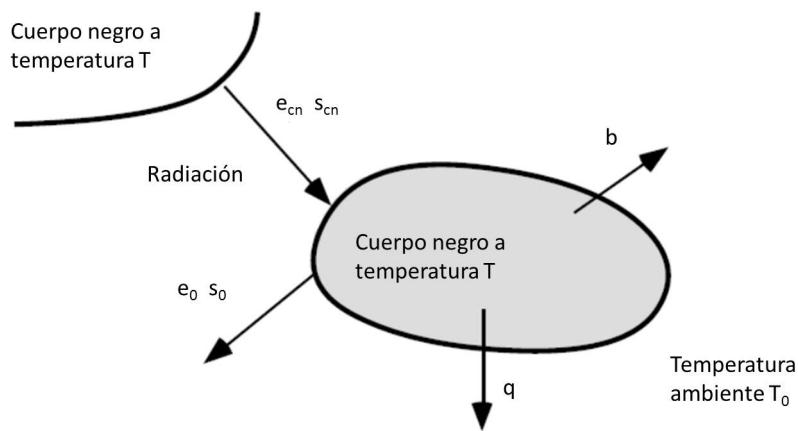


Figura 27: Exergía de la transferencia de calor de un cuerpo negro [42]

El flujo de exergía b , el cual es asociado a la transferencia de calor se obtiene al aplicar la primera y la segunda ley a un proceso ideal reversible. Este proceso convierte la radiación en exergía y calor a temperatura ambiente. Se asume que el convertidor no puede recibir radiación sin emitir radiación. El convertidor recibe energía y entropía de acuerdo a las ecuaciones C.9 y C.10, simultáneamente, bajo el mismo principio, emite energía e_0 y entropía s_0 .

$$e_0 = \sigma T^4 \quad (C.11)$$

$$s_0 = \frac{4}{3}\sigma T^3 \quad (C.12)$$

De la primera ley de la termodinámica se obtiene:

$$e_{cn} = e_0 + b_{cn} + q \quad (\text{C.13})$$

Como el proceso es reversible, no producción de entropía y de la segunda ley:

$$s_{cn} = s_0 + \frac{q}{T_0} \quad (\text{C.14})$$

El trabajo o exergía que se puede obtener de la radiación se convierte en:

$$b_{cn} = e_{cn} - e_0 - q = e_{cb} - e_0 - T_0 (s_{cn} - s_0) = \sigma \left[T^4 - T_0^4 - \frac{4}{3} T_0 (T^3 - T_0^3) \right] \quad (\text{C.15})$$

$$b_{cn} = \sigma \left(T^4 - \frac{4}{3} T_0 T^3 + \frac{1}{3} T_0^4 \right) \quad (\text{C.16})$$

Donde T_0 es la temperatura del ambiente estable de referencia, la cual es la única propiedad del ambiente requerida para realizar el cálculo. Por lo general la expresión de la exergía de un cuerpo negro se expresa en términos de la eficiencia definida por la razón de exergía y energía.

$$\eta_{cn} = \frac{b_{cn}}{e_{cn}} = 1 - \frac{4}{3} \frac{T_0}{T} T^3 + \frac{1}{3} \left(\frac{T_0}{T} \right)^4 \quad (\text{C.17})$$

Que es la eficiencia máxima de conversión para radiación solar (cuerpo negro). Esta ecuación es valida para cualquier $T > T_0$, en el caso de $T < T_0$ es valida cuando $\frac{T}{T_0} \cong 0.63$ [43]

C.2 Cálculo de las exergías

A continuación se presenta la manera en que se calculó cada término de las ecuaciones anteriores:

B_{fuel} :

Para el caso de fusión con plasma, se considera que la electricidad utilizada para generar el plasma tiene el mismo valor de energía y exergía (Según la primera ley de la termodinámica, si δW es el trabajo técnico que se intercambia durante un proceso térmico. Entonces, éste representa la capacidad de producir trabajo que realmente fue útil, si δW es mayor que cero quiere decir que el sistema ha realizado trabajo contra el exterior, y se ha perdido la capacidad de realizar trabajo. Entonces δW es la exergía que el sistema pierde o gana debido al flujo de trabajo intercambiado con el ambiente de referencia. Por tal motivo el trabajo W , tiene el mismo valor energético y exergético. De la misma forma los valores de exergía y energía de la electricidad son idénticos porque en teoría toda la energía eléctrica puede ser convertida en trabajo mecánico), sin embargo, para los casos donde existe combustión es necesario calcular la exergía del combustible utilizado. Para calcular la exergía del combustible utilizado en el precalentamiento y fusión con gas del horno se recurrió a la metodología propuesta por Valero y Lozano [44].

Se parte de la composición del combustible y del peso atómico de cada uno de los componentes del combustible.

PCS [kJ/kg]	50 449.67
Carbón	82 %
Hidrógeno	18 %
Oxígeno	0 %
Nitrógeno	0 %
Azufre	0 %
Humedad	0 %
Cenizas	0 %

Tabla 5: Composición del combustible en porcentaje

Carbón	12.01
Hidrógeno	1.01
Oxígeno	16
Nitrógeno	14.01
Azufre	32.06
Humedad	18.02
Cenizas	1

Tabla 6: Peso atómico de los elementos en el combustible

Se multiplica el valor porcentual del elemento en el combustible por el peso atómico y se obtiene la composición atómica:

Carbón	1
Hidrógeno	2.62
Oxígeno	0
Nitrógeno	0
Azufre	0
Humedad	0
Cenizas	0

Tabla 7: Composición atómica del combustible

Para calcular el factor de conversión de base atómica a molar se usa la siguiente expresión:

$$F_i = \frac{1000}{\%C \cdot A_r(c)} \quad (C.18)$$

Se trata de dividir la multiplicación del porcentaje de carbón por su peso atómico.

ΔH^{circ}	Cal/mol
H_2O	-68 315
SO_2	-70 960
CO_2	-94 052

Tabla 8: Energía de elementos químicos y substancias en el AR

F_i [mol – C/kg]	68.27
PCS [cal/molC]	176532.40
Δh [cal/molC]	- 6 863
S [cal/molC-k]	1263

Tabla 9: Factor de conversión de base molar a másica

La tabla 9 muestra el resultado del cálculo del factor de conversión de base molar a másica, con ayuda de la tabla 8, de energías de substancias químicas en el estado de referencia, se obtiene el valor del poder calorífico superior en base molar:

$$PCS_{masico} = \frac{PCS_{molar}}{F_i} 1000 \quad (C.19)$$

La diferencia de energía con el ambiente de referencia es:

$$\Delta h = PCS_{molar} + \Delta h^\circ CO_2 + \frac{H}{2} \Delta h^\circ H_2O + S \Delta h^\circ SO_2 \quad (C.20)$$

La entropía con el ambiente estable de referencia es:

$$s = 1.1 + 4.4H + 10.66O + 20.56N + 20.7S \quad (C.21)$$

$[cal/mol]$	$H^{00}I$	$H^{00}II$	$H^{00}III$	$\mu^{00}j$
C	-94 052	-94 052	-94 052	-98 548
H	-28 898	-34 158	-34 158	-32 766
O	0	0	0	-7 777
N	0	0	0	-6 902
S	-70 960	-70 960	-152 032	-145 966

Tabla 10: Entalpía y potencial químico de los elementos en el combustible

La tabla 10 muestra la entalpía para calcular la energía correspondiente al combustible. El primer caso trata de la energía considerando un poder calorífico inferior, el segundo es el poder calorífico superior y finalmente el tercer caso es para el cálculo de la exergía.

En termoquímica el potencial químico, cuyo símbolo es μ , lo introdujo como término en 1876 el fisicoquímico estadounidense Willard Gibbs. De manera simple se puede decir que el potencial químico es la tendencia de un componente a escapar de una determinada fase en el estado de referencia, de tal forma, si el potencial químico es alto, el componente querrá salir lo más rápido posible de su estado de referencia, la fase en que se encuentra. Sí es bajo, al contrario, querrá permanecer en él.

Para calcular la energía en el combustible, de cualquiera de los tres casos, sólo se le resta al diferencial de entalpía la sumatoria de la multiplicación de la composición atómica del elemento por la entalpía de referencia.

$$e_n = \Delta h - (C \cdot h^{00n}(C) + H \cdot h^{00n}(H) + N \cdot h^{00n}(N) + O \cdot h^{00n}(O) + S \cdot h^{00n}(S)) \quad (C.22)$$

La exergía del combustible se calcula como:

$$b = \Delta h - (C \cdot \mu^{00n}(C) + H \cdot \mu^{00n}(H) + N \cdot \mu^{00n}(N) + O \cdot \mu^{00n}(O) + S \cdot \mu^{00n}(S)) \quad (C.23)$$

De la misma manera que la energía, la exergía se calcula; primero restando del diferencial de entalpía la sumatoria de la multiplicación de la composición atómica del elemento por el potencial químico, después se resta la entropía calculada, multiplicada por la temperatura de referencia.

	[cal/molC]	[kcal/kg]	[kJ/kg]
eI	162 775	11 112	46 518
eII	176 533	12 052	50 450
eIII	176 533	12 052	50 450
b	173 623	11 853	49 618

Tabla 11: Exegía del combustible

B_{aire} y B_{N2} :

Para este caso y para simplificar los cálculos, se considera que el aire para la combustión, así como el nitrógeno para la ionización, entra al sistema a la misma temperatura y presión que los valores de referencia.

$B_{paredes}$:

Para el precalentamiento la exergía que se gana en las paredes se considera parte de producto útil del sistema, durante la fundición del aluminio el calentamiento de las paredes es parte de las pérdidas del sistema, ya que el producto deseado es el aluminio líquido.

$$B_{pared} = m_p \left(CP_p (T_{p,i} - T_0) - T_0 CP_p \ln \frac{T_{p,i}}{T_0} \right) \quad (C.24)$$

Donde el subíndice p significa pared, m es la masa, Cp el poder calorífico, T la temperatura. Del análisis anterior se obtuvo el perfil de temperaturas en el tiempo, el subíndice i , señala el momento en que se hace el cálculo. Cabe señalar que la temperatura que se considera en este caso es la temperatura promedio, en un tiempo determinado. Para el balance de exergía final del horno se considera la exergía que se tiene en las paredes al final del precalentamiento.

B_{gases/N_2} :

Para calcular la exergía de los gases de salida se considera la exergía termo-mecánica y la química del CO_2 , N_2 , H_2O . La exergía termo-mecánica se determina de la siguiente manera:

$$B_{gas,tm} = m_{gas} \left(CP_{gas,i} (T_{gas,i} - T_0) - T_0 CP_p \ln \frac{T_{gas,i}}{T_0} \right) \quad (C.25)$$

Donde el subíndice gas representa cada uno de los gases mencionados anteriormente, como en el caso anterior el subíndice i indica que se realiza el cálculo en cada instante de la simulación. Teniendo en cuenta esto, se calcula el Cp de los gases de la siguiente manera:

$$CP_{gas} = a + b \cdot T_{gas,i} + c \cdot T_{gas,i}^2 + d \cdot T_{gas,i}^3 \quad (C.26)$$

Las constantes a , b , c y d para cada gas se obtienen de Cengel [45].

Para el cálculo de la exergía química se recurre a la siguiente ecuación:

$$B_{gas,ch} = m_{gas} \cdot R_{gas} \cdot T_0 \cdot \ln \frac{Y_{gas}}{Y_{0,gas}} \quad (C.27)$$

Donde Y_{gas} es la fracción molar del gas y $Y_{0,gas}$ es la fracción molar del componente dado bajo el estado ambiente de referencia (Moran, 2000) [46].

Finalmente, la exergía total es la suma de los términos de exergía termo-mecánica y exergía química.

$B_{perdidas}$:

Este término representa todas las pérdidas en calor que se tienen en el sistema y no se pueden contabilizar.

$$Q_{perdidas} = E_{fuel} - E_{producto} - E_{gases} \quad (C.28)$$

La ecuación C.28 representa la energía proporcionada por el combustible menos la energía de los gases de salida menos la energía del producto (en el caso de pre-calentamiento: la energía de las paredes, en el caso de fusión: la energía de fusión). La temperatura de pérdidas se obtiene de Dennis, 2003 [11].

B_{aluminio}:

El cálculo de la exergía del aluminio, al igual que el de las paredes del horno y los gases de salida, se hace a lo largo del tiempo durante toda la simulación. Para el cálculo de la exergía del metal únicamente se considera la exergía termo-mecánica, ya que en esta etapa de la investigación es difícil calcular las impurezas en las piezas de aluminio a fundir, por lo cual se considera que no existen cambios en la química del material durante la fundición.

Para el cálculo de la exergía se dividió el proceso en tres:

- Durante el calentamiento del sólido

$$B_{alum,sol} = m_{alum} \left(CP_{alum} (T_{alum,i} - T_0) - T_0 CP_{alum} \ln \frac{T_{alum,i}}{T_0} \right) \quad (C.29)$$

- Durante el cambio de fase

$$B_{alum,cf} = m_{alum} \left(CP_{alum} (T_{alum,i} - T_0) - T_0 CP_{alum} \ln \frac{T_{alum,i}}{T_0} \right) + Q_{fund} \left(1 - \frac{T_0}{T_{fund}} \right) \quad (C.30)$$

- Durante el calentamiento del líquido

$$B_{alum,liq} = m_{alum} \left(CP_{alum} (T_{alum,i} - T_0) - T_0 CP_{alum} \ln \frac{T_{alum,i}}{T_0} \right) + B_{alum,cf} \quad (C.31)$$

Donde T_{fund} es la temperatura de fundición del aluminio y Q_{fund} es el calor necesario para lograr el cambio de fase del metal.