
PROSIM. Modelos de simulación de procesos

Entregable N°2 ProSIM. ITC-AICE



**GENERALITAT
VALENCIANA**

iVACE
INSTITUT VALENCIÀ DE
COMPETITIVITAT EMPRESARIAL



UNIÓ EUROPEA
Fondo Europeo de
Desarrollo Regional

Una manera de hacer Europa

1. Antecedentes

Las técnicas de modelización y simulación de procesos son una herramienta fundamental para el avance del conocimiento, especialmente en aquellos procesos en los que la experimentación es difícil de realizar. La cocción de baldosa cerámicas es uno de esos procesos difíciles de monitorizar, especialmente a altas temperaturas. Con respecto al secado por atomización de suspensiones cerámicas es un campo poco explorado desde el punto de vista de la modelización.

A continuación se describen brevemente los modelos desarrollados en el proyecto. El objetivo de este entregable no es, sin embargo, describir el planteamiento formal de los modelos, sino el de mostrar el funcionamiento de los modelos a modo de demostrador. De esta forma se expone que estos están ya disponibles para ser trasladados a las empresas.

A modo de recordatorio, los modelos desarrollados se encargan de describir los siguientes procesos:

1. Sinterización de gres porcelánico
2. Cocción de revestimiento poroso
3. Fenómeno de acoplamiento esmalte-soporte
4. Secado por atomización de suspensiones cerámicas.

Los modelos 1, 2 y 3 comparten gran parte del fundamento físico y software de ejecución, por lo que el demostrador es común a los 3. Por otra parte, el demostrador del modelo 4 se ha desarrollado desde 0 en este proyecto.

Finalmente, cabe destacar que la complejidad de ejecución de los modelos 1, 2 y 3 ha sido uno de los motivos que ha impulsado la continuación del proyecto, con el objetivo de crear una plataforma de simulación online a través de la cual los posibles usuarios se conecten vía web. De esta forma se evitará que los usuarios deban instalar software de terceros en sus equipos y adquirir nuevo equipamiento informático. Esta iniciativa ha surgido tras las sugerencias de las empresas colaboradoras del proyecto de poder aprovechar los modelos de una forma más ágil y robusta.

2. Modelos de cocción, sinterización y acoplamiento esmalte-soporte

A continuación se describen los modelos de cocción, sinterización y acoplamiento esmalte-soporte, los cuales comparten plataforma de simulación (Salome-Meca y Code_Aster) así como demostrador.

2.1. Descripción del modelo de sinterización de gres porcelánico

Para la descripción del modelo de sinterización de gres porcelánico se hace uso de uno de los modelos más utilizados en la bibliografía para la predicción de la sinterización, denominado SOVS (Skorohod–Olevsky viscous sintering). Este modelo es un modelo de sinterización viscosa definido por las siguientes dos ecuaciones:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{in} = \frac{\sigma'_{ij}}{2\eta_0\phi} + \frac{\sigma_{kk} - 3\sigma_s}{18\eta_0\psi} \delta_{ij}$$

$$\frac{\dot{\rho}_r}{\rho_r} = -\dot{\epsilon}_{kk}^{in}$$

Siendo, $\dot{\epsilon}_{ij}^{in}$ el tensor de velocidad de deformación inelástica, σ'_{ij} la componente desviadora del tensor de tensiones, σ_{kk} la traza del tensor de tensiones, σ_s la tensión efectiva de sinterización, ϕ y ψ la viscosidad cortante normalizada y la viscosidad volumétrica normalizada del material, las cuales dependen de la densidad relativa (ρ_r), η_0 la viscosidad aparente y δ_{ij} el delta de Kronecker. Finalmente, $\dot{\rho}_r$ es la velocidad de variación de ρ_r , mientras que $\dot{\epsilon}_{kk}^{in}$ es la traza del tensor de velocidad de deformación inelástica.

Habitualmente en el sector azulejero, la sinterización suele ser libre, es decir, no hay ninguna fuerza exterior que participe durante el proceso de sinterizado. Conociendo este dato, la primera ecuación puede simplificarse a:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{in} = -\frac{\sigma_s}{6\eta_0\psi} \delta_{ij}$$

En el presente trabajo, se han hecho dos modificaciones al modelo SOVS original:

En primer lugar, el modelo SOVS original no incluye el efecto del crecimiento del grano durante la sinterización. Este efecto se ha añadido mediante el parámetro φ , que depende de la densidad relativa ρ_r , y que indica una relación entre los volúmenes del tamaño de grano en un instante determinado y el tamaño de grano inicial de la composición. Este parámetro φ obtiene el siguiente valor:

$$\varphi = \left(\frac{1}{a_5(\rho_f - \rho)^{b_5}} \right)^3$$

Donde a_5 y b_5 son dos parámetros de ajuste dependientes de la densidad inicial. Este parámetro se ha incluido modificando la siguiente ecuación del modelo:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^{in} = -\frac{\sigma_s}{6\eta_0\psi\varphi} \delta_{ij}$$

En segundo lugar, la bibliografía suele recurrir a una ley tipo Arrhenius para explicar el comportamiento de la viscosidad, sin embargo, se ha comprobado que este tipo de leyes no pueden reproducir correctamente los complejos fenómenos físicos que tienen lugar durante la sinterización en fase líquida de las pastas porcelánicas. Por este motivo, en este trabajo se ha utilizado una ley viscosa experimental.

La metodología que se plantea en el presente trabajo para predecir el comportamiento de pavimentos porcelánicos es la siguiente.

Como variables de partida se necesita:

- Las distribuciones de espesor y densidad aparente en seco del soporte cuyo comportamiento en cocción se quiere simular, las cuales se obtienen mediante el análisis no destructivo con un equipo basado en la absorción de rayos X.

- Las dimensiones de soporte seco o, en su defecto, las dimensiones del molde en el que se ha conformado más el cambio dimensional asociado a la expansión post-prensado.

Además de estas variables, se necesita conocer las propiedades térmicas del material, las reacciones químicas que ocurren durante el proceso de calentamiento y el ciclo de cocción aplicado. La idea es predecir las distribuciones finales de densidad aparente y espesor de la pieza cocida, así como las dimensiones de sus lados, haciendo uso de un programa de elementos finitos.

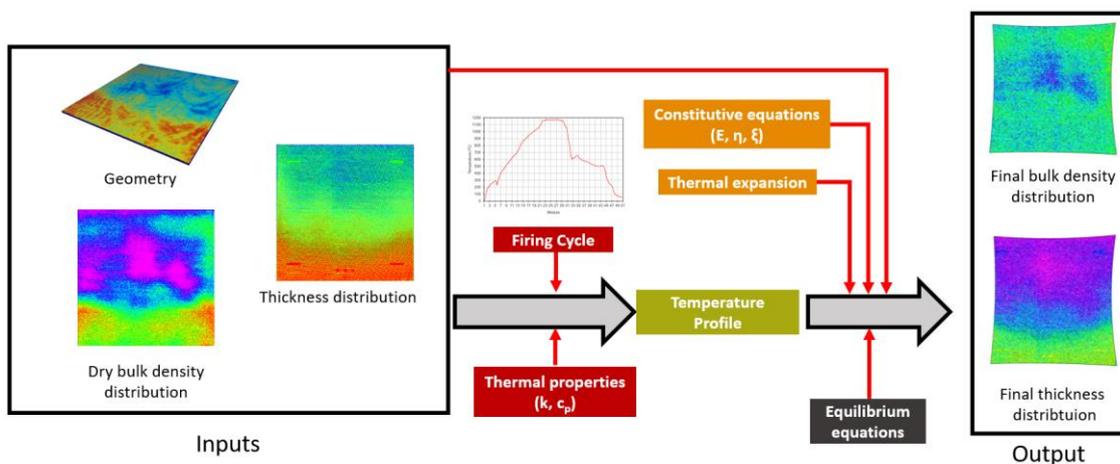


Figura 1. Esquema de funcionamiento de una simulación de la sinterización del gres porcelánico.

Si se conocen las propiedades térmicas y el ciclo de cocción, el programa de elementos finitos es capaz de predecir el perfil de temperaturas dentro de la pieza. Una vez se sabe como evoluciona la temperatura en cada punto de la pieza, el modelo mecánico utilizado en el programa de elementos finitos es capaz de calcular la evolución temporal de las variables mecánicas (desplazamientos, tensiones y densidad). Por tanto, si el modelo está bien calibrado, se puede obtener una buena predicción del mapa de distribución de espesores o de densidades aparentes en cocido. Una descripción gráfica de este proceso se ejemplifica en la Figura 1.

Los resultados de la simulación pueden ser tratados por un programa de post procesado para obtener, por ejemplo, un mapa de colores que pueda ser visualizado con facilidad por el usuario o cualquier otra información que pueda considerarse útil.

2.2. Descripción del modelo de cocción de revestimiento poroso

Los pasos que se siguieron para modelar el revestimiento poroso fueron similares al del porcelánico. En primer lugar, el modelo subyacente es idéntico al desarrollado para el gres porcelánico. Sin embargo, la sinterización del revestimiento poroso (sinterización en fase sólida) es distinta a la de porcelánico (sinterización viscosa).

Las diferencias principales entre ambos modelos, las cuales afectan a los parámetros del mismo, son las siguientes:

- Las distintas reacciones que tienen lugar durante el calentamiento. Mientras que en el porcelánico solo se ha tenido que modelizar una reacción, en la porosa es necesario modelizar hasta tres reacciones.
- La expansión térmica es distinta en ambos materiales (Figura 3).

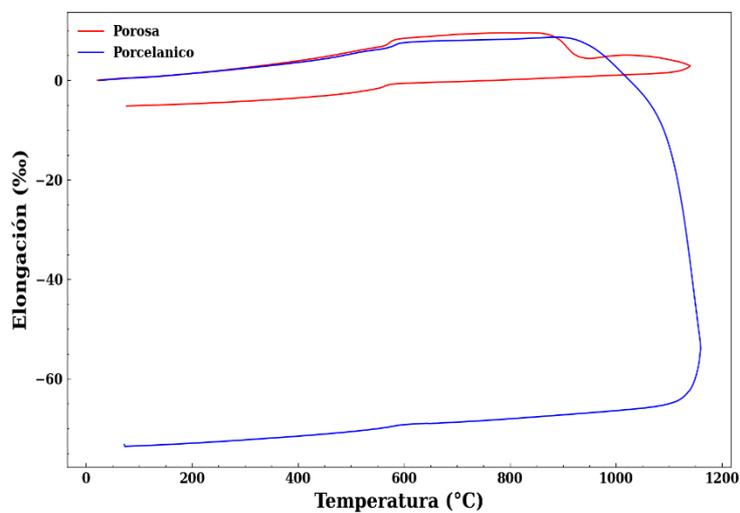


Figura 2. Comparación entre una dilatación de porosa (azul) con otra de gres porcelánico (roja).

- Pérdida de masa. La pérdida de masa durante el calentamiento de ambos materiales es distinta, afectando decisivamente a la evolución de la densidad de ambos materiales (Figura 3).

Con la introducción de todas estas variaciones es posible reproducir el comportamiento del revestimiento poroso.

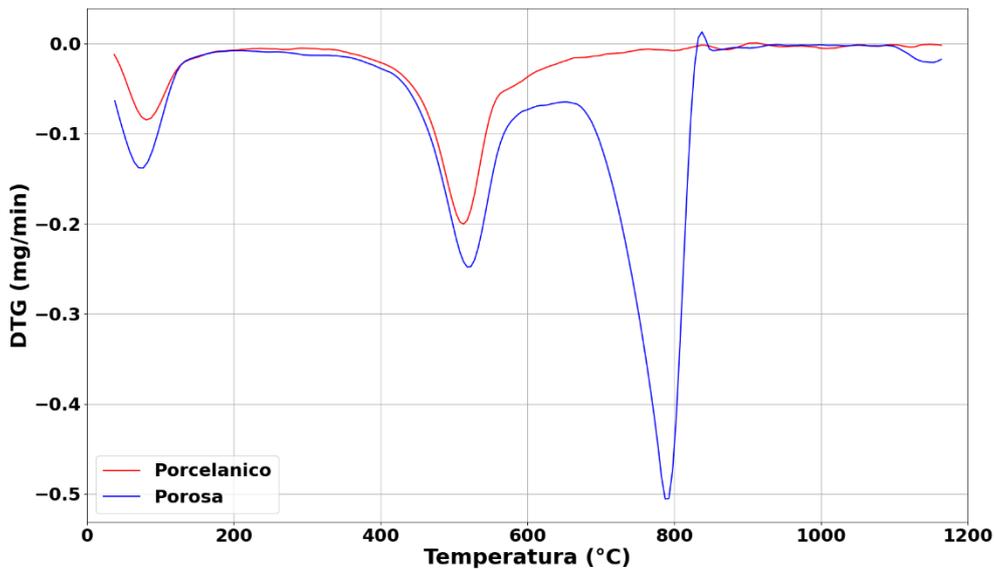


Figura 3. Evolución del coeficiente de dilatación respecto a la temperatura. En color rojo se muestra la evolución del soporte mientras que el color azul representa el esmalte.

2.3. Descripción del modelo de acoplamiento esmalte-soporte

La adición de un esmalte sobre el soporte permite modificar las características finales del producto para conseguir satisfacer las necesidades del producto final. Este acoplamiento se suele conseguir depositando el esmalte sobre el soporte mientras ambos se someten al mismo ciclo térmico. Durante la fase de enfriamiento, la diferente contracción térmica experimentada por ambos elementos puede generar tensiones que originen defectos como fisuras o grietas. Por tanto, existe cierto interés en obtener un modelo que sea capaz de replicar, dentro de lo posible, los fenómenos que ocurren durante la cocción de ambos materiales.

Desde el punto de vista de la simulación, la adición del esmalte supone añadir un nuevo tipo de material al modelo, convirtiéndose en un modelo multimaterial (Figura 4). En efecto, el esmalte, tras estar sometido a un ciclo térmico, se funde generando una fina capa sobre el soporte de naturaleza vítrea. Este vidrio, al enfriarse, sufre de una determinada contracción debido a los cambios de temperatura correspondientes. En este trabajo el vidrio se ha simulado, en primera aproximación, mediante un modelo viscoso lineal que tras convertirse en un sólido elástico durante el enfriamiento sufre de una contracción lineal (contracción térmica) diferente a la del soporte. Incorporando ello al modelo multimaterial es posible reproducir el efecto que tiene la adición del esmalte en las curvatura y la aparición de tensiones residuales en el cuerpo final.

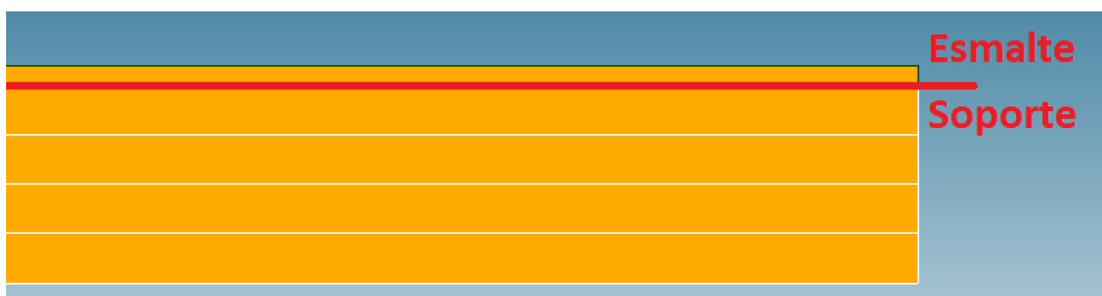


Figura 4. Ejemplo de modelo de elementos finitos bicapa, representando una baldosa cerámica esmaltada.

2.4. Demostrador 1

El demostrador de las simulaciones utilizando este tipo de modelos puede consultarse en la siguiente dirección web:

<https://youtu.be/1DkEL1JBRqE>

El demostrador incluye todo el proceso de simulación, desde el inicio de la aplicación, carga de modelos, resolución y post-procesado.

3. Modelos de secado por atomización de suspensiones cerámicas

A continuación se describe el modelo de secado por atomización de suspensiones cerámicas, desarrollado en Python.

3.1. Descripción del modelo

Un atomizador puede considerarse como un reactor en el que se produce transferencia de calor y masa entre sus componentes. La Figura 5 muestra un esquema de un atomizador típico de los utilizados en la industria cerámica para fabricar polvo atomizado. El equipo de bombeo se encarga de introducir una suspensión acuosa de arcillas a través de unas lanzas, generando una nebulosa de gotas dentro del atomizador que son secadas mediante aire a alta temperatura. Tras el secado parte del aire caliente es depurado y liberado al ambiente, mientras que la arcilla seca en forma de polvo esférico es depositada en una cinta transportadora

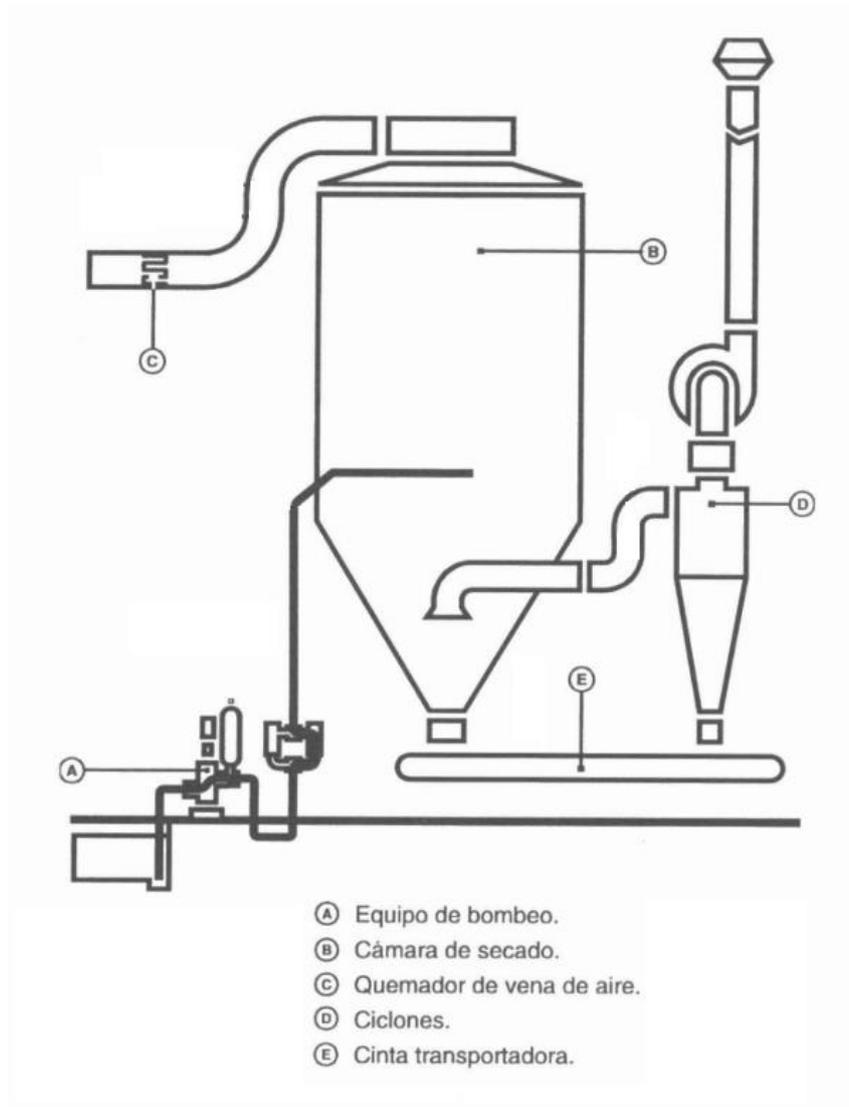


Figura 5. Esquema de un atomizador típico

La descripción matemática del balance de materia a la fase agua es:

$$\frac{dM_{w,g}}{dt} = F_{w,in} + R_{drying} - F_{w,out}$$

donde $M_{w,g}$ es la masa de agua en la fase gas dentro del atomizador, $F_{w,in}$ es el caudal de agua en fase gas a la entrada del atomizador, R_{drying} es el caudal de vapor de agua evaporada de las gotas y $F_{w,out}$ es el caudal de agua a la salida del atomizador. El caudal de vapor de agua evaporada puede obtenerse mediante correlaciones y el balance de materia a las gotas, restando el valor inicial de humedad de cada clase de gota a su valor final y multiplicando por la velocidad adimensional de entrada de gotas de cada clase al atomizador.

El balance de materia a la fase gas es:

$$\frac{dM_{dry,g}}{dt} = F_{dry,in} - F_{dry,out} = 0$$

Donde $M_{dry,g}$ es la masa de aire dentro del atomizador, que en estado estacionario es constante. $F_{dry,in}$ es el caudal de aire a la entrada del atomizador y $F_{dry,out}$ es el caudal de aire a la salida del atomizador.

Finalmente, el balance de energía del atomizador se puede describir del siguiente modo:

$$\frac{dH_v}{dt} = \phi_{v,in} - \phi_{v,out} + R_{drying} C_{p,h_2o(v)} T_v - QdT - Q_{less}$$

donde H_v es la entalpía de la fase gas, $\phi_{v,in}$ es el flujo de entalpía a la entrada del atomizador, $\phi_{v,out}$ es el flujo de entalpía a la salida del atomizador, $C_{p,h_2o(v)}$ es el calor específico a presión constante del vapor de agua y T_v es la temperatura de la fase gas del atomizador. QdT es el flujo de entalpía transferida de la fase gas a las gotas (sale del balance a las gotas), y Q_{less} es el flujo de entalpía que se pierde a través de las paredes del atomizador. QdT es fácil de obtener para cada clase de gotas, restando el flujo de calor final de la clase (agua + sólido) - flujo de calor inicial de la clase (agua + sólido).

Nótese que el balance de gotas es más complejo y por sencillez no se incorpora en este entregable, aunque para mayor detalle puede consultarse [1], [2].

- [1] M. Pinto, I. Kemp, S. Bermingham, T. Hartwig, and A. Bisten, "Development of an axisymmetric population balance model for spray drying and validation against experimental data and CFD simulations," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 92, no. 4, pp. 619–634, 2014.
- [2] H. Jubaer, S. Afshar, J. Xiao, X. D. Chen, C. Selomulya, and M. W. Woo, "On the importance of droplet shrinkage in CFD-modeling of spray drying," *Dry. Technol.*, vol. 36, no. 15, pp. 1785–1801, 2018.

3.2. Demostrador 2

El demostrador de las simulaciones utilizando este modelos puede consultarse en la siguiente dirección web:

<https://youtu.be/peYVIsAwS0s>

El demostrador incluye todo el proceso de simulación, desde el inicio de la aplicación, carga de parámetros, resolución y post-procesado.