

# Investigación en Matemática Aplicada

Alfredo Bermúdez de Castro\*

## Abstract

El objetivo de la charla es la presentación de algunas aplicaciones de las matemáticas a la simulación numérica de procesos físicos de interés en la industria. Parte de estas investigaciones se han desarrollado en el marco de colaboración que mantiene el Departamento de Matemática Aplicada de la Universidade de Santiago de Compostela con la empresa Ferroatlántica I+D. Se abordan diferentes problemas relacionados con la producción del silicio; para ello se describen los modelos matemáticos desarrollados, los métodos numéricos utilizados y los principales resultados obtenidos.

## 1 Introducción

Aunque la esencia de las matemáticas reside en la abstracción y los objetos que trata son abstractos, su fuerza motriz ha sido el deseo de entender la naturaleza. Tal vez sea ésta la razón fundamental para poder afirmar que las matemáticas son útiles para el sistema productivo, en varios sentidos. En primer lugar, estudiar matemáticas forma al individuo creando aptitudes genéricas como son capacidad de análisis, precisión en el lenguaje, rigor, etc. Pero además las matemáticas sirven para resolver problemas tecnológicos y ayudan a tomar decisiones en los ámbitos de la planificación económica y financiera, o de la organización de la producción, entre otros. También las matemáticas son útiles para mejorar la calidad de vida y el medio ambiente. Para sustentar esta afirmación basta con decir que son la base de muchos dispositivos utilizados corrientemente en medicina, que permiten predecir el tiempo y la evolución del clima, que ayudan a evaluar el impacto ambiental, etc.

Sin embargo, la percepción común es que saber matemáticas sólo sirve para enseñarlas o para crear más matemáticas (investigación pura). De hecho, en España, la presencia de los matemáticos en la empresa es muy escasa; además, la mayoría de los matemáticos que trabajan en la empresa lo hacen en informática de gestión. Algunas causas de esta situación son de carácter general: la falta de tradición científica y tecnológica, el hecho de que la mayoría de la población no percibe la importancia que tienen en su bienestar los avances científicos, la escasa colaboración entre los centros de investigación y el sistema productivo.

---

\*Departamento de Matemática Aplicada, Universidade de Santiago de Compostela, 15706 Santiago de Compostela, Spain.

Sin embargo, otras son particulares de las matemáticas: orientación de los planes de estudio de las Facultades muy polarizada hacia la matemática pura, imagen social de que Matemáticas es una carrera para la docencia o la investigación básica, etc. Resulta sintomático que en las Escuelas Técnicas, las matemáticas se hayan convertido más bien en un elemento de selección que en una herramienta fundamental para resolver los problemas de la ingeniería.

El mundo físico se rige por leyes que se formulan con matemáticas. Los modelos permiten simular el comportamiento de dispositivos o procesos. Generalmente, están constituidos por sistemas de ecuaciones cuyas incógnitas son las magnitudes que caracterizan los fenómenos a simular. Los ejemplos de aplicación en la industria son incontables: cálculo de las tensiones en una estructura, de la temperatura de una pieza, del comportamiento electromagnético de un dispositivo,... También la predicción del tiempo, la evaluación del impacto ambiental, la simulación de un accidente,... o la valoración de productos financieros y la gestión de carteras.

Los modelos que rigen la mayoría de los procesos que interesan en ingeniería se conocen desde finales del siglo XIX. Sin embargo, hasta la aparición de los ordenadores, su resolución sólo era posible en casos muy particulares generalmente de carácter "académico". Los ordenadores y los métodos de cálculo numérico desarrollados en los últimos años permiten, en la actualidad, resolver modelos complejos en tiempos de cálculo razonables.

La metodología de la simulación numérica comprende diversas etapas. En primer lugar debe procederse a un análisis preciso y detallado de los fenómenos que caracterizan el proceso que se desea simular. Después vendrá la construcción de uno o varios modelos. A continuación el análisis matemático de estos y, por último, su resolución mediante algoritmos de cálculo numérico, seguida del postprocesado y la visualización de los resultados obtenidos. La validación del modelo con medidas experimentales, cuando estas son factibles, es una etapa muy importante que permite dar fiabilidad al modelo.

Algunos ejemplos de aplicación en la industria son el diseño y la optimización de cubas electrolíticas y coladas en la industria del aluminio, el modelado de la combustión en la caldera de una central térmica, el diseño de electrodos metalúrgicos, el diseño de hornos de inducción, la evaluación del impacto ambiental de vertidos contaminantes al mar, la reducción del ruido mediante técnicas de control activo, etc.

En resumen, los modelos matemáticos son una valiosa herramienta para la concepción y el diseño de dispositivos y procesos en la industria. La moderna ingeniería emplea cada vez más la simulación numérica (CAD/CAE); en efecto, el uso de modelos permite acortar y abaratar el proceso de diseño y salida al mercado de un producto, al reducir la construcción de prototipos y los ensayos en laboratorio. Por otra parte los ordenadores resultan cada vez más rápidos y menos costosos, de modo que, en el momento presente, estas tecnologías están también al alcance de las PYMES.

Finalmente cabe concluir, como consecuencia de lo anterior, que los matemáticos pueden colaborar en el análisis de los modelos, en la escritura de programas de simulación o en el uso de paquetes informáticos comerciales de Ingeniería Asis-

tida por Ordenador (CAE). Para ello se requieren fundamentalmente conocimientos de modelado de procesos (física, química, economía...), de ecuaciones en derivadas parciales, de métodos numéricos y de programación de algoritmos.

## 2 Aplicaciones en la metalurgia del silicio

El silicio (Si) es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre después del oxígeno. Se obtiene industrialmente por reducción del dióxido de silicio, en forma de cuarzo o cuarcita, con carbón, mediante una reacción química que puede escribirse en forma simplificada (ver [10]):



Este proceso tiene lugar en un horno eléctrico de reducción, más concretamente, en un “horno de arco” que se describe en la siguiente sección. El silicio tiene una gran variedad de aplicaciones dependiendo de su grado de pureza. Así, se distinguen desde el *silicio electrónico*, el más puro de los empleados industrialmente, denominado 9N (“9 nueves”  $\equiv$  99,9999999% de pureza) hasta el *ferrosilicio*, que contiene más de un 2% de otros elementos, especialmente hierro, pasando por el *silicio solar*, el *metalúrgico* y el *químico*, que es el que se utiliza para la fabricación de siliconas.

El Grupo Ferroatlántica está integrado por diferentes empresas dedicadas a la producción de las llamadas ferroaleaciones y, en particular de silicio. Su actividad le convierte en el primer grupo español del sector y el segundo de la Unión Europea. Además, es el primer productor español independiente de energía eléctrica. Las actividades de investigación y desarrollo del Grupo Ferroatlántica son gestionadas por la empresa Ferroatlántica I+D, que juega un papel fundamental en el desarrollo y comercialización de nuevas tecnologías dentro del grupo. En los últimos años, Ferroatlántica I+D ha mantenido una estrecha colaboración con la Universidad y otros Centros Públicos de Investigación principalmente en Galicia. En concreto, Ferroatlántica I+D ha iniciado proyectos de investigación con el Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Santiago de Compostela en el año 1996. En este artículo exponemos brevemente algunos de los temas de investigación abordados. se trata del modelado de electrodos metalúrgicos y de nuevos sistemas de colada.

El equipo de investigación que ha participado en el desarrollo y resolución numérica de los diferentes modelos está integrado por: A. Bermúdez, M. C. Muñiz, R. Leira, F. Pena y P. Salgado por parte del Departamento de Matemática Aplicada y por J. Bullón, M. Lage, A. Lorenzo por parte de Ferroatlántica I+D.

## 3 Modelado de electrodos metalúrgicos

Un horno eléctrico para la producción de silicio está compuesto, en general, por una cuba cilíndrica que contiene materiales carbonosos y tres electrodos cuyos ejes forman un triángulo equilátero centrado en la cuba (ver Figura 1). Los

electrodos son las piezas clave del horno y su propósito es la conducción de la corriente eléctrica, normalmente corriente alterna y trifásica. En la punta de cada electrodo se genera un arco eléctrico, que crea las altas temperaturas necesarias para que tengan lugar las diferentes reacciones químicas del proceso de reducción. El buen funcionamiento del horno depende, en gran medida, de conseguir condiciones de operación adecuadas en los electrodos.

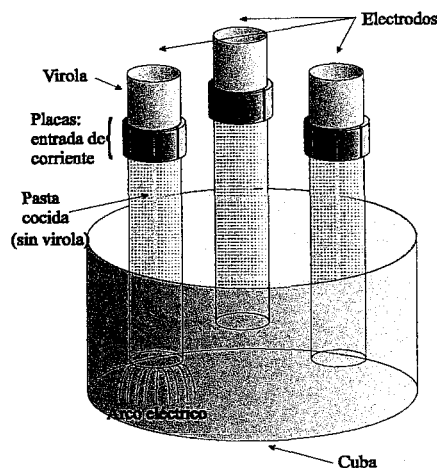


Figure 1: Cuba de un horno de reducción.

A principios de los años 90, Ferroatlántica I+D desarrolló un nuevo tipo de electrodo, el llamado electrodo ELSA, que es apto para la producción de silicio metal. Si bien los electrodos clásicos están formados por un único material, el electrodo ELSA es un electrodo compuesto que está formado por un núcleo de grafito rodeado de pasta (ver Figura 2). El electrodo ELSA es mucho más barato que el electrodo precocido, por lo que se ha convertido en una alternativa muy interesante para la producción de silicio metal al reducir en más del 10% los costes de producción.

En general, las condiciones de funcionamiento de cualquier tipo de electrodo son complejas, por lo que la simulación numérica constituye una herramienta muy importante para estudiar su comportamiento. Modelar el problema en un ordenador permite estudiar la influencia de los diferentes parámetros que intervienen en el funcionamiento del electrodo, y por lo tanto del horno, sin necesidad de experimentos delicados y costosos. El carácter compuesto del electrodo ELSA hace que su comportamiento termoeléctrico sea diferente del de los electrodos clásicos. En particular, combina el grafito que es muy buen conductor de la electricidad, con la pasta que solo es buena conductora a temperaturas altas. La pasta cambia de estado durante el proceso, siendo su cocción un fenómeno fundamental; sin embargo, este proceso también presenta notables diferencias con respecto al que tiene lugar en los electrodos Söderberg (ver [9] para más detalles). Teniendo en cuenta estas diferencias, la simulación numérica del elec-

trodo ELSA ha constituido el objetivo fundamental de muchos de los proyectos y contratos mantenidos con Ferroatlántica I+D. Cabe señalar sin embargo, que los modelos desarrollados son lo suficientemente generales para simular el comportamiento de cualquier tipo de electrodo. Los resultados más relevantes se recogen en diferentes publicaciones ([1, 2, 7, 5, 6]). Por ello, en esta sección daremos una descripción bastante general de los principales problemas abordados y de los resultados obtenidos.

La simulación del electrodo ELSA ha tenido dos objetivos fundamentales: conocer y controlar los diferentes parámetros que intervienen en la cocción de la pasta y conocer los factores que pueden provocar roturas en el electrodo. Así, los modelos matemáticos desarrollados tienen como objeto el cálculo de la distribución de la temperatura, de la densidad de corriente y de las tensiones en el electrodo, bajo diferentes condiciones de operación.

El primer paso ha sido el desarrollo de modelos matemáticos basados en la simetría cilíndrica; es decir, despreciando el *efecto proximidad* de los otros dos electrodos y considerando condiciones de contorno axisimétricas. En estas condiciones se puede suponer que los diferentes campos no dependen de la variable angular. Estas hipótesis permiten resolver el problema en un dominio bidimensional, en concreto, en una sección radial del electrodo (ver Figura 2).

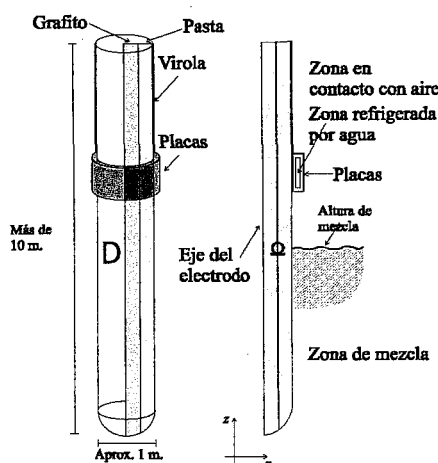


Figure 2: Esquema del electrodo ELSA y dominio bidimensional de los modelos axisimétricos.

Para resolver numéricamente los diferentes modelos se han escrito programas en Fortran 77, que han sido utilizados para simular el comportamiento de electrodos reales. En las referencias [3], [7] y [9] se presentan algunos de los resultados obtenidos por los diferentes modelos. En la Figura 3 se presenta, por ejemplo, la evolución de la temperatura con respecto al tiempo en un punto situado en el eje del electrodo a la altura de placas. Nótese que en la simulación

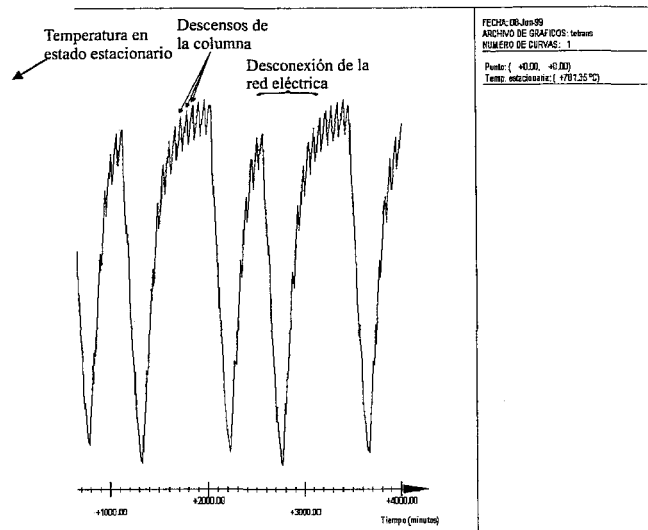


Figure 3: Evolución de la temperatura.

se tienen en cuenta los deslizamientos y desconexiones del electrodo de la red eléctrica varias horas al día. Además, se ha desarrollado un paquete informático llamado ELSATE, que incluye un menú desplegable que permite al usuario la introducción de datos a través de cuadros de diálogo muy simples.

## 4 Modelado de nuevos sistemas de coladas para ferroaleaciones

### 4.1 Descripción del proceso físico

El silicio producido en los hornos de arco eléctrico se extrae en estado líquido a través de un orificio situado en la parte inferior de la cuba. El sólido que se obtiene tras su enfriamiento debe ser desmenuzado para obtener trozos de silicio del tamaño deseado. El silicio solidifica en forma de cristales. En el frente de cristalización, las impurezas que contiene el metal se desplazan a la parte aún líquida, por lo que la mayor concentración de éstas se dará en las últimas zonas que hayan alcanzado la temperatura de solidificación.

El procedimiento más sencillo consiste en almacenar el silicio líquido en unos recipientes cilíndricos llamados *cucharas*, para dejarlo enfriar al aire. Pero con este sistema el eje central del bloque de silicio contendrá un mayor porcentaje de impurezas que los bordes y al tritularlo no es posible conseguir que la pureza de cada trozo sea homogénea, como exigen algunos de los usos de este producto. En este contexto, en la Sección 5 se presenta un nuevo mecanismo de enfriamiento

del silicio a partir de la cuchara tradicional con el objetivo de obtener un silicio con un reparto de impurezas más homogéneo.

Ferroatlántica I+D ha desarrollado una alternativa a los sistemas tradicionales de colada que consiste en verter el silicio líquido en una placa refrigerada para producir una delgada lámina de metal en la que la concentración de impurezas sea constante en el sentido longitudinal. El sistema consiste en un canal que riega la placa en zig-zag y en una placa que está inclinada y posee un mecanismo que la hace vibrar para permitir que la lámina de silicio se deslice sin pegarse a la placa. Una serie de tubos por los que circula agua la enfrían por su parte inferior.

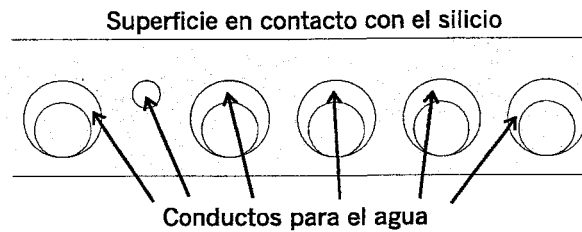


Figure 4: Detalle de un corte longitudinal de la placa.

La simulación numérica de la transferencia de calor que se produce en la lámina de silicio y en la placa se convierte en una herramienta muy interesante para conocer mejor el proceso de enfriamiento. Son varios los objetivos que se persiguen: por un lado se desea aumentar el caudal de silicio colado, pero sin producir daños por fusión o deformación en la placa de cobre (nótese que el silicio funde a una temperatura muy superior a la del cobre); por otro se pretende conocer (e intentar controlar) la región de la lámina de silicio que solidifica en último lugar, es decir, donde se concentran la mayor parte de las impurezas. Para ello, se ha desarrollado un modelo matemático que permite obtener la distribución de temperaturas en la placa de refrigeración cubierta por la lámina de silicio en movimiento continuo.

## 4.2 El modelo matemático

El problema que se plantea es hallar la temperatura de un cuerpo compuesto por la plancha de cobre refrigerada y la lámina de silicio existente sobre ella.

Dado que la anchura de la placa es mucho mayor que su altura y los gradientes de temperatura son mucho menores en la primera dirección que en la segunda, es factible restringir el problema al estudio de lo que ocurre en una sección longitudinal de la placa (ver Figura 5). Tomaremos como dominio  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$  la unión de la sección media de la placa de cobre,  $\Omega_c$ , y de la lámina de silicio,  $\Omega_s$ .

El modelo se obtiene a partir de la ecuación de transferencia de calor en estado transitorio. Además, como el silicio cambia de estado líquido a sólido

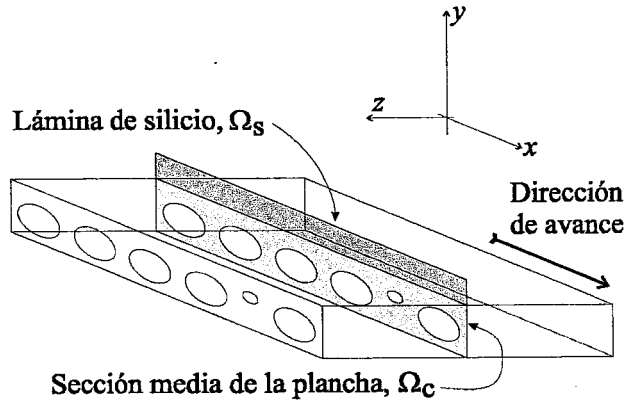


Figure 5: Sección media de la placa.

debemos tener en cuenta el calor latente liberado al alcanzar la temperatura de solidificación  $T_S$ . Por ello, conviene escribir la ecuación de transmisión del calor en términos de la variable *entalpía*  $e$ :

$$\frac{\partial e(\mathbf{x})}{\partial t} + \mathbf{v}(\mathbf{x}) \cdot \text{grad } e(\mathbf{x}) - \text{div}((k(\mathbf{x}) \text{grad } T(\mathbf{x}))) = 0, \quad (2)$$

donde  $\mathbf{x}$  es la coordenada espacial,  $T$  es la temperatura,  $\mathbf{v}$  es la velocidad y  $k$  la conductividad térmica.

La entalpía en el silicio se expresa como función de la temperatura a través de un operador monótono multivaluado

$$e(\mathbf{x}) \in H(\mathbf{x}, T), \quad (3)$$

siendo

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, T) = \begin{cases} \int_0^T \rho c ds & T < T_S \\ \left[ \int_0^T \rho c ds, \int_0^T \rho c ds + \rho(\mathbf{x}, T_S) L \right] & T = T_S \\ \int_0^T \rho c ds + \rho(\mathbf{x}, T_S) L & T > T_S \end{cases} \quad (4)$$

donde  $L$  el “calor latente de fusión” o calor por unidad de masa necesario para realizar el cambio de estado,  $\rho$  es la densidad del silicio y  $c$  su calor específico.

En el caso de la placa, al no haber cambio de estado, la expresión para la entalpía es, simplemente

$$H(\mathbf{x}, T) = \int_0^T \rho(\mathbf{x}, s) c(\mathbf{x}, s) ds. \quad (5)$$

Cabe señalar que todos los parámetros dependen de la posición (por haber dos materiales, silicio y cobre) y de la temperatura.



La velocidad a la que se mueve el silicio se supone constante y con sólo componente horizontal. La placa de cobre, por su parte, está quieta. La velocidad es, por tanto,

$$\mathbf{v} = \begin{cases} v^* \mathbf{e}_x, & \text{en } \Omega_s \\ \mathbf{0}, & \text{en } \Omega_c. \end{cases}$$

El modelo se completa definiendo condiciones de contorno adecuadas. En concreto, en la frontera vertical izquierda del dominio correspondiente a la entrada del silicio, se supone conocida e igual a la temperatura a la que éste sale de la cuchara. En el resto de las fronteras, se consideran condiciones de radiación-convección siendo nula la radiación en la zona en contacto con el agua. Los coeficientes de convección han sido obtenidos a partir de fórmulas semiempíricas de la bibliografía (ver [8] para más detalles).

Por otra parte, la placa posee un mecanismo vibratorio que permite el deslizamiento del silicio. Como la amplitud de las vibraciones es pequeña comparada con el movimiento de la lámina de silicio, hemos supuesto que la velocidad sólo tiene componente horizontal. Sin embargo, un aspecto en el que inciden de forma determinante las vibraciones es la transmisión del calor entre el silicio y la placa. Llamemos  $\Gamma_{I+}$  y  $\Gamma_{I-}$  a las superficies de silicio y cobre en las que se produce el contacto,  $T_+$  a la temperatura del silicio y  $T_-$  a la del cobre. Debido a la vibración, no podremos asumir que exista un contacto térmico perfecto entre ambos materiales, sino que supondremos que existe una transmisión imperfecta, es decir, que existe una “resistencia de contacto”, regulada por una ley del tipo siguiente:

$$-k(T_+) \frac{\partial T_+}{\partial \mathbf{n}} = h_r(T_+ - T_-) \text{ en } \Gamma_{I+}, \quad (6)$$

$$-k(T_-) \frac{\partial T_-}{\partial \mathbf{n}} = h_r(T_- - T_+) \text{ en } \Gamma_{I-}. \quad (7)$$

El coeficiente  $h_r$  es a priori desconocido y muy difícil de medir de forma directa. Por ello, este parámetro ha sido ajustado numéricamente a partir de medidas experimentales de la temperatura de salida del agua de refrigeración.

La ecuación (2) se discretiza en tiempo utilizando un esquema implícito en el que el término convectivo se discretiza mediante el método de características. La ecuación semidiscretizada se resuelve usando elementos finitos continuos y lineales a trozos sobre su formulación variacional. Para tener en cuenta el calor latente de solidificación del silicio y la no linealidad debida a los parámetros, se ha usado un algoritmo iterativo (ver [4] para más detalle). El hecho de no conocer la resistencia térmica entre silicio y placa nos ha obligado utilizar este parámetro como elemento de ajuste para que el modelo reproduzca el incremento observado en la temperatura de salida del agua de refrigeración.

### 4.3 Resultados numéricos

El algoritmo para resolver el problema de la colada ha sido implementado en un ordenador mediante un programa escrito en lenguaje Fortran. Presentamos

aquí los resultados de una simulación sobre un dominio semejante al de la placa de enfriamiento utilizada por Ferroatlántica S.L.

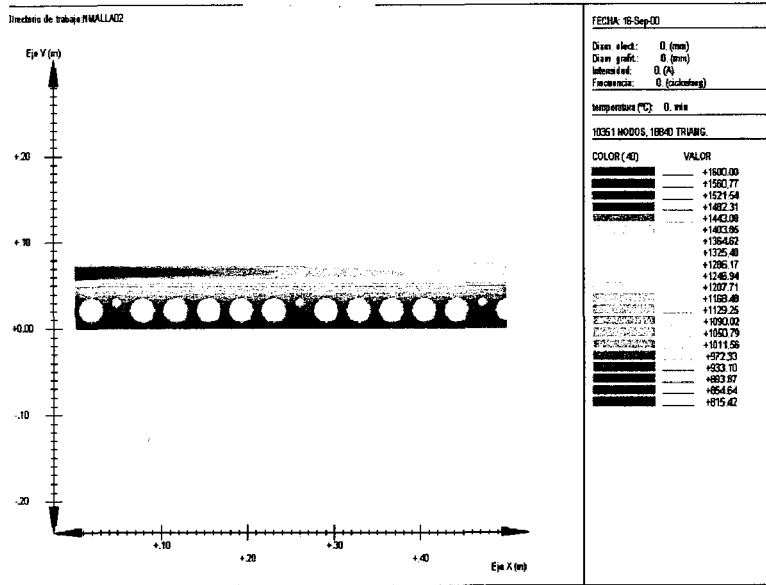


Figure 6: Temperatura en la primera parte de la placa

En todas las figuras, el dominio es una sección longitudinal de la placa junto con una sección de la lámina de silicio situado sobre ella. El silicio líquido entra en el dominio por la parte izquierda y el movimiento vibratorio lo desplaza hacia la derecha. Como se ve en la Figura 6, la temperatura en la lámina de silicio es superior en su interior pues, tanto el aire como el agua a través del cobre, extraen el calor del silicio líquido.

La temperatura de entrada se toma a 1600 °C, casi 200 °C por encima de su temperatura de fusión.

Lógicamente, el comienzo de la placa es el lugar donde existe un mayor riesgo de que el cobre se funda o deforme por alcanzar altas temperaturas. Se han hecho varias pruebas para ajustar cuál debería ser el caudal de agua a circular por los tubos de refrigeración para evitar que el cobre alcance su temperatura de fusión, 1083 °C. La resistencia de contacto provoca que la temperatura deje de ser continua al pasar a través de la interfase entre grafito y cobre.

**Agradecimientos.**- El autor agradece a los profesores Pilar Salgado y Francisco Pena la ayuda prestada en la realización de este artículo.

## References

- [1] A. Bermúdez, J. Bullón and F. Pena, “A finite element method for the thermoelectrical modelling of electrodes”, *Commun. Numer. Meth. Engng.* **14**, (1998), 581-593.
- [2] A. Bermúdez and R. Muñoz, “Existence of solution of a coupled problem arising in the thermoelectrical simulation of an electrode”, *Quart. of Appl. Math.* **57**, (1999), no. 4, 621-636.
- [3] A. Bermúdez, J. Bullón, F. Pena, P. Salgado, “Modelado y simulación numérica de electrodos para hornos metalúrgicos”, CD-ROM Actas del XVII Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones/VII Congreso de Matemática Aplicada (XVII CEDYA/VII CMA) Salamanca, España, 2001.
- [4] A. Bermúdez, J. Bullón y F. Pena, “Simulación estacionaria de una colada de silicio” CD-ROM Actas del XVII Congreso de Ecuaciones Diferenciales y Aplicaciones/VII Congreso de Matemática Aplicada (XVII CEDYA/VII CMA) Salamanca, España, 2001.
- [5] A. Bermúdez, R. Rodríguez and P. Salgado, “A finite element method with Lagrange multipliers for low-frequency harmonic Maxwell equations”, *SIAM J. Numer. Anal.*, **40**, (2002), 1823-1849.
- [6] A. Bermúdez, R. Rodríguez and P. Salgado, “Numerical treatment of realistic boundary conditions for the eddy current problem in an electrode via Lagrange multipliers”, Preprint 2002-11, Universidad de Concepción, Chile, 2002.
- [7] A. Bermúdez, J. Bullón, F. Pena and P. Salgado, “A numerical method for transient simulation of metallurgical compound electrodes”, *Finite Elem. Anal. Des.*, **39**, (2003), 283-299.
- [8] F. Pena, *Contribución al modelado matemático de algunos problemas en la metalurgia del silicio*, Tesis Doctoral, Universidade de Santiago de Compostela, 2003
- [9] P. Salgado, *Mathematical and numerical analysis of some electromagnetic problems. Application to the simulation of metallurgical electrodes*, Tesis Doctoral, Universidade de Santiago de Compostela, 2002
- [10] A. Schei, J.K. Tuset and H. Tveit, *High Silicon alloys*, Tapir Forlag, Trondheim, Noruega, 1998.