

## ***Modelos matemáticos en la industria: Ejemplos y perspectivas***



*Alfredo Bermúdez de Castro*

Catedrático y Director del Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Santiago de Compostela

### ***Resumen***

La charla va a tener dos partes diferentes. En la primera se hará una presentación general del modelado de problemas industriales, señalando los aspectos fundamentales de su metodología y dando una panorámica de sus aplicaciones. También se explicitarán las áreas de la matemática más relacionadas con el tema y los conocimientos que un “modelador” debería tener. Estos aspectos llevarán a discutir algunas cuestiones relacionadas con los planes de estudio actuales y las perspectivas en el marco de la adaptación al espacio europeo.

En la segunda parte se estudiarán ejemplos tomados de las industrias metalúrgica y de generación de energía. También se mostrarán casos de aplicación del modelado matemático a problemas medioambientales.

Más concretamente, se presentarán, en primer lugar, trabajos realizados o en curso para la empresa Ferroatlántica I+D, que desarrolla y comercializa tecnología para la producción del silicio. Se introducirán modelos para la simulación del comportamiento de hornos de arco en sus diferentes aspectos: electromagnético, térmico y mecánico. También se tratarán otras aplicaciones relacionadas con procesos de purificación del silicio con vistas a su utilización en células solares. Este ejemplo de colaboración permitirá abordar algunos aspectos generales de las relaciones entre centros de investigación y empresas y otros más específicos en el ámbito de la matemática aplicada.

Otro ejemplo de aplicación se refiere a la simulación y control del ruido en recintos. En particular, las técnicas de “antirruído” encuentran en la teoría matemática del control óptimo un marco adecuado para su análisis. Por otra parte, en muchas ocasiones, la propagación del sonido involucra la interacción mecánica entre un fluido (generalmente el aire) y uno o varios sólidos que transmiten o generan las vibraciones acústicas. Se mostrarán modelos y métodos numéricos para simular estos fenómenos.

Finalmente, se tratarán problemas relacionados con la combustión en calderas de centrales eléctricas. El nuevo marco de competitividad en el que se mueve el mercado de la energía, por una parte, y las normas cada vez más exigentes que limitan las emisiones contaminantes, por otra, obligan a las compañías a optimizar el funcionamiento de sus centrales y, de modo especial, de las calderas en las que tiene lugar la combustión del carbón o el fuel. En este contexto, la simulación numérica es una herramienta fundamental para ayudar a los ingenieros en el diseño o en el establecimiento de condiciones de operación adecuadas.

### ***Bibliografía***

- A. Bermúdez de Castro: Simulación numérica de diferentes procesos industriales relacionados con la producción de silicio. Proyectos de colaboración con Ferroatlántica I+D. *Boletín SEMA* (por aparecer).

# Simulación numérica de diferentes procesos industriales relacionados con la producción de silicio. Proyectos de colaboración con Ferroatlántica I+D.

Alfredo Bermúdez  
*Departamento de Matemática Aplicada*  
*Universidad de de Santiago de Compostela*

## Resumen

El objetivo de este trabajo es la descripción de las líneas de investigación desarrolladas en el marco de colaboración que mantiene la empresa Ferroatlántica I+D con el Departamento de Matemática Aplicada de la Universidad de Santiago de Compostela. En el artículo, se aborda la simulación numérica de diferentes problemas físicos relacionados con la producción del silicio; para ello se describen los modelos matemáticos desarrollados, los métodos numéricos utilizados y los principales resultados obtenidos.

**Palabras clave:** Simulación numérica, hornos eléctricos, colada de silicio, purificación de silicio, electromagnetismo, transferencia de calor, elementos finitos.

## 1 Introducción

El Grupo Ferroatlántica está integrado por diferentes empresas dedicadas a la producción de ferroaleaciones. 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 expondremos los principales temas

de investigación abordados y los resultados obtenidos. La actividad investigadora ha estado orientada al desarrollo de modelos matemáticos y programas de ordenador que permiten simular numéricamente diferentes procesos industriales de interés para la empresa. Así, destacan los siguientes campos:

1. Modelado de electrodos metalúrgicos.
2. Modelado de nuevos sistemas de colada para ferroaleaciones.
3. Modelado de sistemas innovadores para la purificación del silicio.

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.

El desarrollo del artículo es el siguiente: la Sección 2 se ocupa de la descripción del proceso de producción de silicio y sus aplicaciones. En la Sección 3 se describe la problemática de los electrodos, piezas clave en un horno de producción de silicio, y se describen los modelos matemáticos desarrollados en este tema. En la Sección 4 se aborda el modelado matemático de un innovador sistema de colada sobre placa vibrante de cobre refrigerada por agua, para la solidificación del silicio. La Sección 5 se ocupa del modelado de sistemas relacionados con la purificación del silicio. Finalmente, en la Sección 6 se presenta un avance de la investigación en curso sobre la simulación numérica de un horno de inducción, también destinado a la purificación de silicio.

## 2 El Silicio y sus aplicaciones

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 [16]):



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 la cantidad de impurezas presentes en el producto. Así, se distingue:

- **Silicio electrónico:** es el más puro de los empleados industrialmente, denominado 9N (“9 nueves”  $\equiv$  99,999999% de pureza). Se utiliza para la fabricación de los semiconductores, en la que se requiere una precisión en la conducción eléctrica muy alta.
- **Silicio solar:** precisa de menor pureza que el anterior, aunque en la actualidad comparte con el silicio electrónico varias fases del proceso de

producción. Sirve para fabricar las células fotovoltaicas de los paneles solares.

- **Silicio metal:** es el silicio metalúrgico que contiene un 1-2% de otros elementos. Se usa principalmente en aleaciones con otros metales no féreos, como el aluminio.
- **Silicio químico:** es el que se utiliza para la fabricación de siliconas, productos de gran consumo por su variedad de aplicaciones.
- **Ferrosilicio:** es el que contiene más de un 2% de otros elementos, especialmente hierro (de ahí su nombre). Tiene menor precio que el silicio metal y se usa para producir aceros al silicio.

### 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.

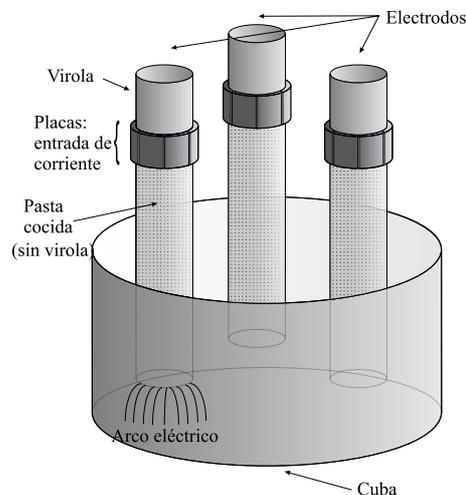


Figura 1: Cuba de un horno de reducción.

Los electrodos clásicos utilizados mayoritariamente en la industria son los electrodos de grafito puro, los precocidos y los Söderberg. Estos últimos, están

compuestos de pasta carbonosa que se va cociendo durante el proceso y son los más empleados en la industria del ferrosilicio. Sus ventajas son que se construyen de tamaños mayores y que son más baratos que los de grafito puro o los precocidos. Sin embargo, los electrodos Söderberg no se pueden utilizar para la producción de silicio metal, ya que durante el proceso contaminan el producto. Así, hasta la pasada década, los electrodos precocidos eran la única alternativa para la producción de silicio metal.

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. Así, el comportamiento de los electrodos clásicos ha sido estudiado durante décadas (ver por ejemplo [12] y [10]). La mayoría de estos trabajos asumen simetría cilíndrica y utilizan métodos de diferencias y elementos finitos para la resolución de los modelos. Sin embargo, la estructura compuesta del electrodo ELSA hace que su comportamiento termoelectrónico sea diferente del de los electrodos clásicos. En particular, el electrodo ELSA combina el grafito, que es muy buen conductor de la electricidad, con la pasta, que solo es buena conductora a temperaturas altas. Por lo tanto, no sólo el grafito es importante en el movimiento de la columna, sino también en la distribución de la corriente. Así, el llamado *efecto piel* es comparable al de electrodos clásicos sólo en la punta. Por otra parte, la pasta cambia de estado durante el proceso, siendo su cocción un fenómeno fundamental; sin embargo, este proceso de cocción también presenta notables diferencias con respecto al que tiene lugar en los electrodos Söderberg (ver [15] para más detalles). Teniendo en cuenta estas diferencias, la simulación numérica del electrodo 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.

La naturaleza de los modelos desarrollados para estudiar el comportamiento del electrodo ELSA es muy diversa y ha dado lugar al estudio numérico y matemático de un amplio número de problemas. 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). Así, se han desarrollado y resuelto los siguientes modelos:

- Un modelo **termoeléctrico estacionario**, que permite conocer la distribución de la temperatura y la densidad de corriente en una sección radial del electrodo en estado estacionario. El modelo electromagnético se obtiene a partir de las ecuaciones de Maxwell en régimen armónico de baja frecuencia y el modelo térmico a partir de la ecuación de transferencia de calor en estado estacionario. Se trata de un problema acoplado, ya que la fuente de calor en el problema térmico es el efecto Joule y, por otra parte, los parámetros termoeléctricos dependen de la temperatura.
- Un modelo **termoeléctrico transitorio**, que resuelve las ecuaciones de Maxwell acopladas con la ecuación de transferencia de calor en estado transitorio. Así, puede obtenerse la evolución de la temperatura con el tiempo y tener en cuenta aspectos de la operación que dependen del tiempo como son los descensos del electrodo, las desconexiones de la red eléctrica, etc.
- Un modelo **termomecánico**, que permite conocer la distribución de esfuerzos en el electrodo debido a su peso y a los gradientes térmicos. Los resultados obtenidos han permitido, por ejemplo, mejorar el diseño de los *nipples* que son las piezas que unen las columnas de grafito.

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 [15] 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 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. El paquete permite la visualización de una amplia gama de resultados. En la Figura 4 se presenta un ejemplo de los cuadros de diálogo.

Los modelos bidimensionales descritos previamente, han proporcionado información importante sobre algunos de los parámetros que intervienen en el

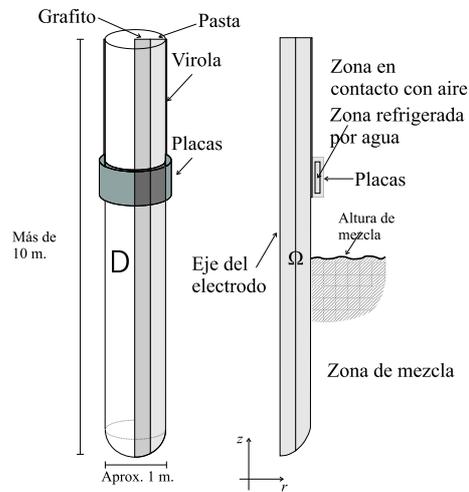


Figura 2: Esquema del electrodo ELSA y dominio bidimensional de los modelos axisimétricos.

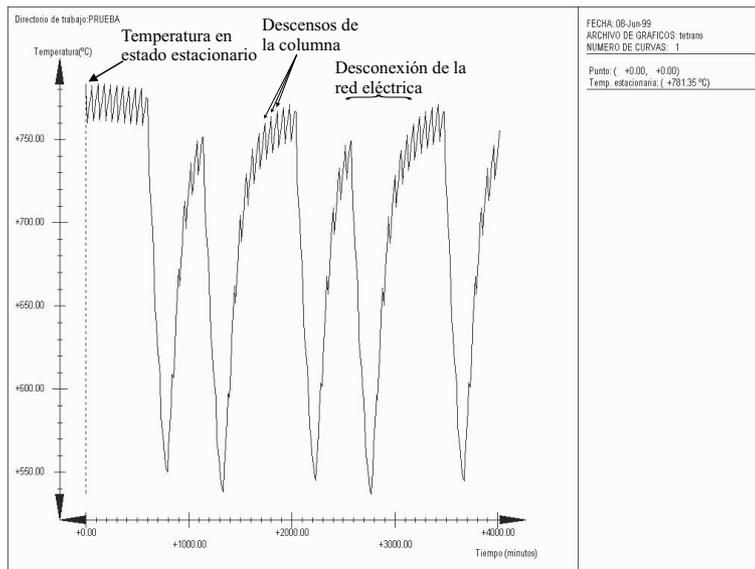


Figura 3: Evolución de la temperatura.

funcionamiento del electrodo ELSA y tienen la ventaja de un importante ahorro computacional con respecto a un modelo puramente tridimensional. Sin embargo, como se ha indicado anteriormente, la hipótesis de simetría cilíndrica obliga a despreciar ciertos hechos como el efecto de los otros dos electrodos (el llamado *efecto de proximidad*) o la no simetría de las condiciones de contorno. Estos

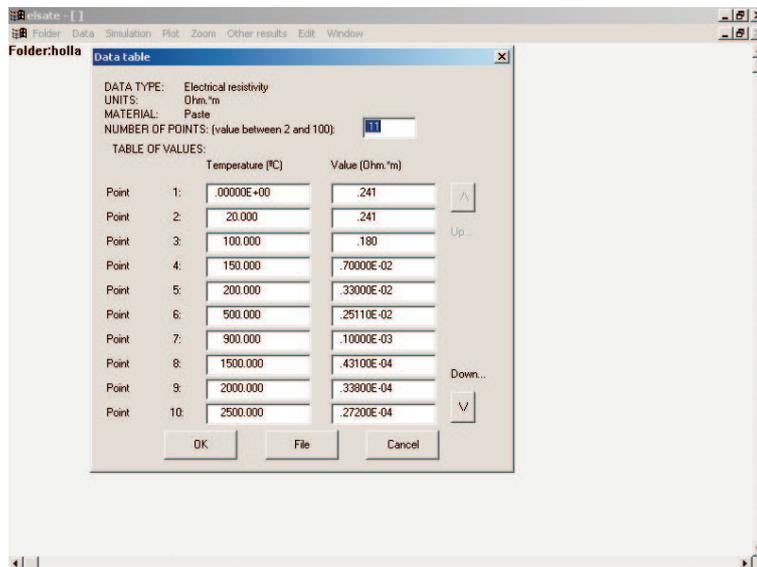


Figura 4: Un ejemplo de menú del paquete ELSATE.

hechos solo pueden ser considerados por un modelo puramente tridimensional. Además, los modelos tridimensionales son necesarios para simular los electrodos Soderberg que por su propia geometría no poseen simetría cilíndrica. Por ello, con el objetivo de tener en cuenta los efectos tridimensionales se ha desarrollado un **modelo termoelectrónico tridimensional**, que es lo suficientemente general para simular cualquier tipo de electrodo e incluso el horno completo. La necesidad de resolver el problema electromagnético a partir de datos realistas, es decir, medibles en la práctica, nos ha llevado a investigar en el campo de las ecuaciones de Maxwell en baja frecuencia (ver [15], para detalles).

## 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 (ver Figura 5). Pero con este sistema el eje central del bloque de silicio contendrá un mayor porcentaje de impurezas que los bordes y al tritararlo 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.

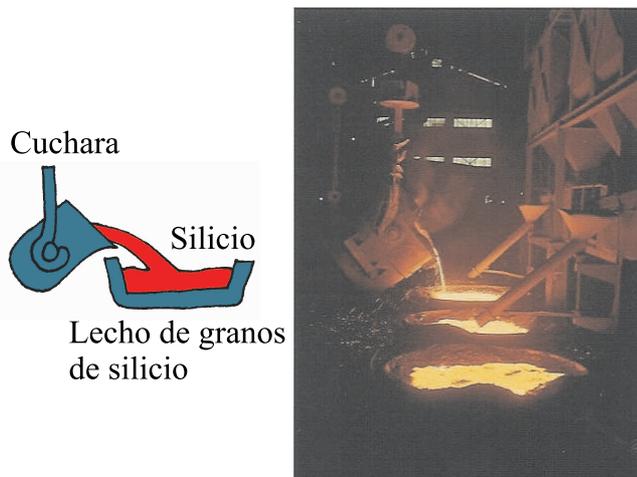


Figura 5: Esquema y foto de la colada clásica.

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 (ver Figura 7). 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.

La placa de enfriamiento se compone de varias secciones. Cada una de ellas mide casi 3 metros de largo, cerca de 2 metros de ancho y 50 mm de alto. Las dos primeras son de cobre y las restantes de hierro, hasta alcanzar una longitud de unos 15 metros. El sistema de refrigeración está compuesto por varios grupos de tubos horadados en la placa (ver Figura 6). Una serie de seis tubos se repite a lo largo de toda la placa. Los tubos de mayor diámetro contienen en su interior otro tubo de diámetro menor, soldado a su parte inferior, para que el agua circule por la parte superior del primero.

La capa de silicio cubre el 80% de la anchura de la placa. Se estima que la producción ronda las 8 toneladas de silicio por hora.

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

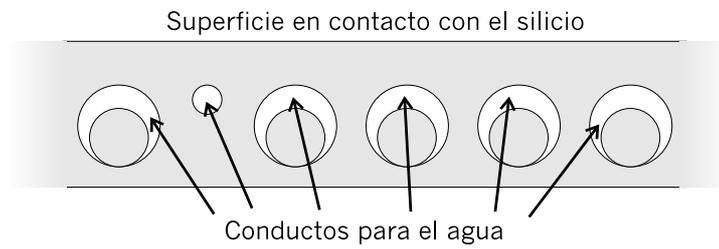


Figura 6: Detalle de un corte longitudinal de la placa.

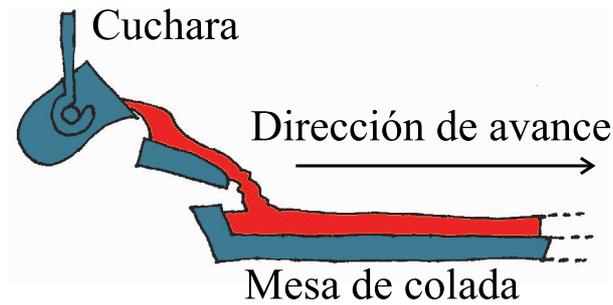


Figura 7: Esquema y foto de una placa de colada.

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 8). 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,  $\Omega_s$ .

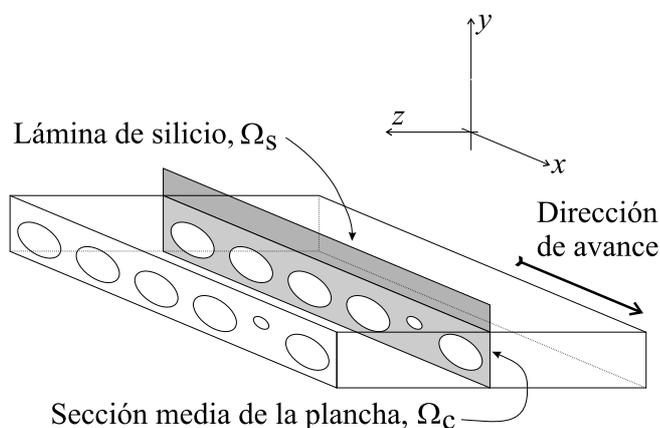


Figura 8: Sección media de la placa.

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 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*  $e$ :

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

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 [14] 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.

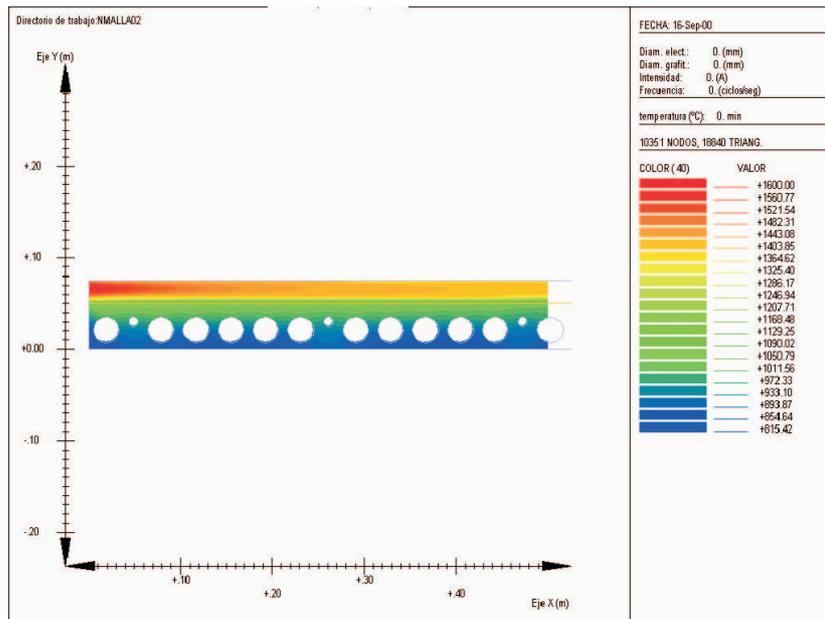


Figura 9: Temperatura a la entrada de la placa

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 9, 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.

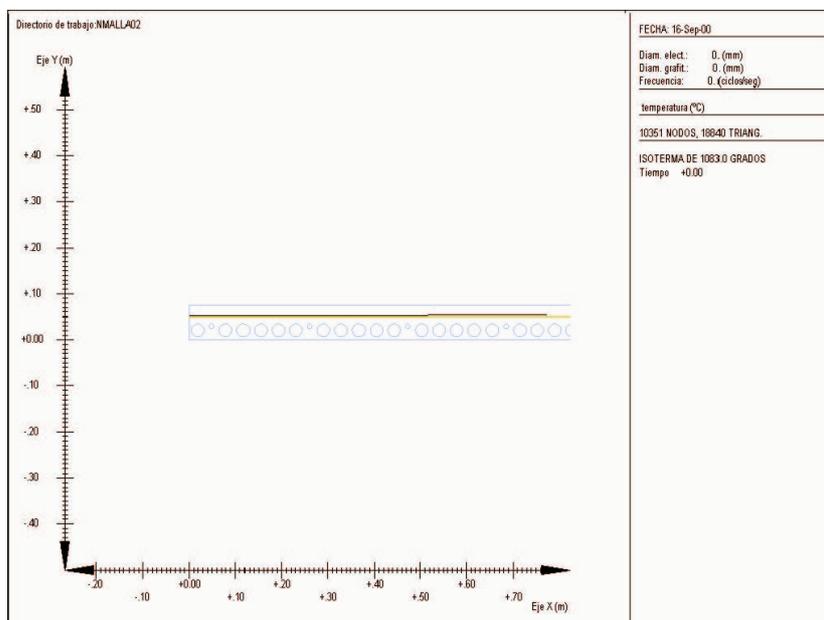


Figura 10: Isotherma de fusión del cobre.

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. Como se ve en la Figura 10, la isoterma de 1083 °C no interseca la placa de cobre.

## 5 Modelos de purificación del silicio

### 5.1 Descripción del proceso físico

En los últimos años se ha producido un importante crecimiento de la demanda de silicio de alta pureza para la fabricación de placas solares. Actualmente el silicio solar se obtiene como un subproducto de la fabricación de silicio electrónico. Sin embargo las estimaciones de la demanda de silicio solar superan a las del electrónico y es por eso que, en las grandes compañías están llevando a

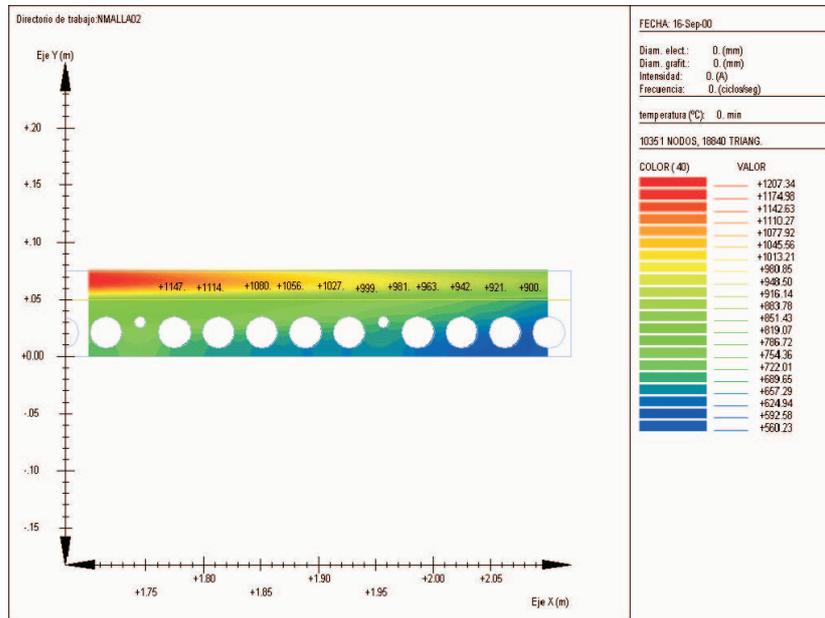


Figura 11: Temperatura en la parte final del dominio.

cabo grandes proyectos de investigación para encontrar métodos alternativos y directos para la purificación del silicio metal de manera que se obtenga silicio solar. En este contexto, el diseño de nuevos sistemas de colada como el visto en la sección anterior u otros procedimientos como el que se describe en esta sección persiguen obtener siempre un silicio más puro.

Un sistema utilizado por Ferroatlántica para enfriar el silicio que sale del horno consiste en un recipiente cilíndrico que contiene en su interior un crisol (ver Figura 12). En el crisol se introduce silicio fundido que irá solidificando por la pérdida de calor, creando un frente de solidificación que progresa de la parte inferior a la superior. Es importante que este frente de solidificación sea lo más horizontal posible de modo que las impurezas emigren hacia las capas altas para ser posteriormente eliminadas. Por ello, conocer y controlar la distribución de temperaturas en el silicio bajo diferentes condiciones de operación y con diferentes geometrías, son los objetivos que se persiguen con la simulación numérica de este proceso.

## 5.2 El modelo matemático

El modelo matemático que permite obtener la distribución de temperaturas en el recipiente descrito anteriormente y en el silicio contenido en su interior es la ecuación de transmisión del calor en estado transitorio sin convección, es decir con velocidad nula. Supondremos que los campos no dependen de la coordenada angular, lo cual permite resolver el problema en un dominio

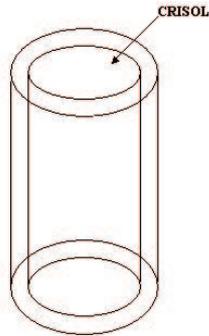


Figura 12: Esquema del dominio.

bidimensional. En concreto, el dominio de cálculo es la sección del dominio cilíndrico que se presenta en la Figura 13. Nótese que el interior del cilindro está formado por diferentes materiales: la capa externa es una manta de alúmina aislante, mientras que la interior está formada por cemento.

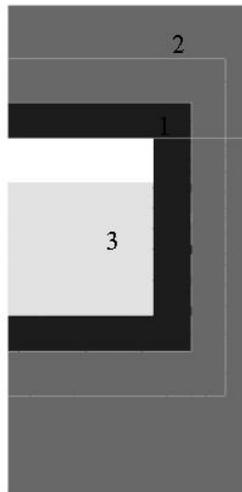


Figura 13: Sección radial de la cuchara: manta de alúmina (2), cemento (1), silicio (3).

Dado que el silicio cambia de estado durante el proceso es necesario utilizar la ecuación de transmisión del calor en términos de la entalpía, que escrita en

coordenadas cilíndricas queda de la forma:

$$\dot{\epsilon} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( k \frac{\partial T}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0. \quad (8)$$

La expresión de la entalpía en términos de la temperatura es la descrita en la sección anterior dependiendo de si el material experimenta o no un cambio de estado.

Con respecto a las condiciones de contorno, en las fronteras exteriores del recipiente, se considera una condición de convección mientras que en el hueco que queda entre la tapa y el crisol se considera una condición de radiación. En el resto de las fronteras se proporciona el flujo de calor, que es conocido a partir de resistencias internas que calientan el recipiente.

El esquema numérico utilizado es el mismo que el descrito en la sección anterior.

### 5.3 Resultados numéricos

Se ha desarrollado un programa Fortran que permite resolver la ecuación de transferencia de calor en la cuchara descrita anteriormente. En esta sección se presentan los resultados obtenidos al estudiar el comportamiento de la cuchara bajo determinadas condiciones de operación. En concreto, se realiza un precalentamiento de la cuchara mediante resistencias internas durante 10 horas. A continuación, se introduce el silicio en el crisol a una temperatura de 1480 °C y se conectan resistencias en la parte inferior de la tapa. La potencia máxima de las resistencias internas es de 10 Kw, manteniendo esta potencia mientras las temperaturas en ellas sean inferiores a 1450 °C. A partir de 1450 °C, la potencia de las resistencias disminuye linealmente hasta ser apagadas definitivamente a 1550 °C.

Con la composición de materiales descrita en la sección anterior, la Figura 14 muestra el frente de solidificación obtenido (temperaturas entre 1412 y 1414 °C) a las 10 horas.

Dado que el principal objetivo consistía en obtener un frente de solidificación más horizontal, se abordó la posibilidad de introducir un nuevo material muy conductor tal y como se indica en la Figura 15. La conclusión es que cuanto mayor sea la conductividad de dicho material, el frente es más horizontal. La Figura 16 presenta el frente de solidificación obtenido con esta nueva geometría al cabo de 10 horas, siendo la conductividad eléctrica del material 1000 W/mK.

## 6 Líneas de investigación en curso: modelado de un horno de inducción para la purificación de silicio.

En el contexto de la sección anterior, actualmente la empresa Ferroatlántica I+D está investigando nuevos sistemas de purificación de silicio. En concreto, el

Rango de isoterms entre 1412°C y 1414°C, a las 10 horas

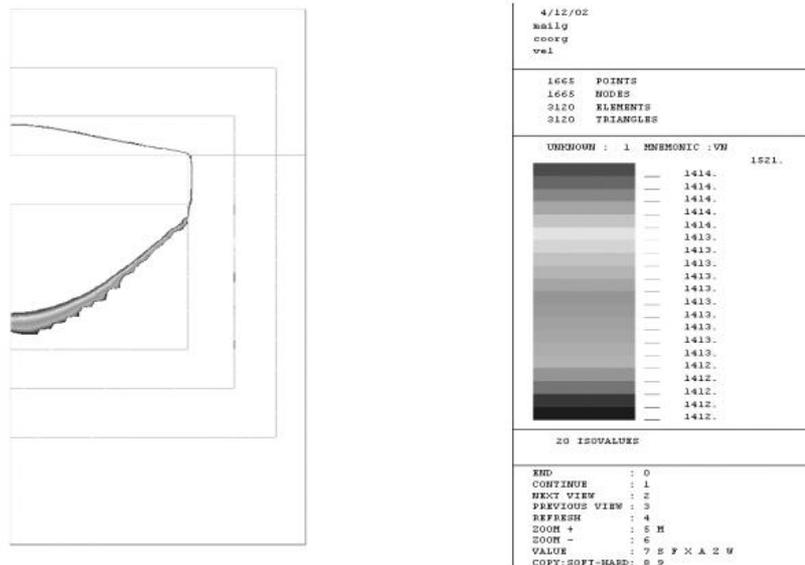


Figura 14: Frente de solidificación utilizando 3 materiales.

diseño de un horno destinado al calentamiento por inducción electromagnética, del silicio contenido en un crisol, es uno de los actuales temas de investigación. En esta sección, se describen brevemente los modelos matemáticos que se están desarrollando por parte del Departamento de Matemática Aplicada para contribuir al diseño de dicho horno.

Cabe señalar que el calentamiento por inducción electromagnética es ampliamente utilizado en la industria actual en procesos como fundición de metales, precalentamiento para operaciones de soldadura, y en general, en aquellos procesos que requieren una velocidad alta de calentamiento en zonas localizadas de la pieza de un material conductor. Se trata de un proceso complejo que involucra fenómenos electromagnéticos, fenómenos térmicos con cambio de estado y fenómenos hidrodinámicos en las fases líquidas del metal. Por ello, la simulación numérica es un herramienta muy eficaz en este campo. En el caso concreto del horno de inducción, la simulación numérica permite conocer y controlar los parámetros que intervienen en su funcionamiento.

El objetivo que se persigue es estudiar los diferentes modelos matemáticos que permiten simulan los procesos físico-químicos mencionados anteriormente y desarrollar métodos numéricos adecuados para su resolución numérica. Se pretende, por tanto, la realización de un programa de ordenador que resuelva numéricamente las ecuaciones de la termo-electromagneto-hidrodinámica de

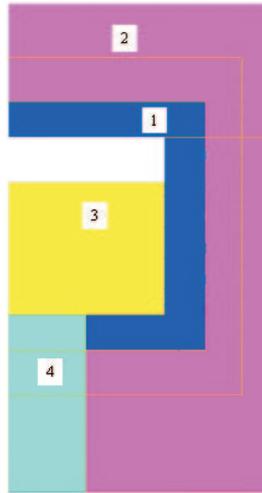


Figura 15: Sección radial de la cuchara: manta de alúmina (2), cemento (1), silicio (3), material muy conductor (4).

modo que se puedan obtener, en un tiempo de cálculo razonable, las corrientes inducidas, la distribución de la temperatura junto con la posición de la interfase sólido-líquido y el campo de velocidades en el material líquido.

Desde un punto de vista matemático, el modelado completo de un horno de inducción implica el acoplamiento de las ecuaciones de Maxwell, con la ecuación del calor con términos de convección-difusión y cambio de estado, así como las ecuaciones de Navier-Stokes para un fluido incompresible. Las relaciones entre los modelos anteriores se esquematizan en el diagrama que se presenta en la Figura 17.

Este proceso presenta características muy complejas entre las que cabe destacar:

• **Acoplamiento de los fenómenos:**

- Modelo Electromagnético - Modelo Térmico: el campo de temperaturas depende de la densidad de corriente a través del efecto Joule, mientras que las conductividades eléctricas de los diferentes materiales dependen de la temperatura.
- Modelo Electromagnético - Modelo hidrodinámico: la fuerza de Lorentz combinada con la gravitatoria y las diferencias de densidad con la temperatura, provocan el movimiento del metal fundido y dicho movimiento produce, a su vez, variaciones de los campos electromagnéticos a través de la Ley de Ohm.
- Modelo térmico - Modelo hidrodinámico: La resolución del primero dará como resultado la posición del frente de solidificación del metal y,

Rango de isothermas entre 1412°C y 1414°C a las 10 horas  
**CT4= 1000 W/m.K**

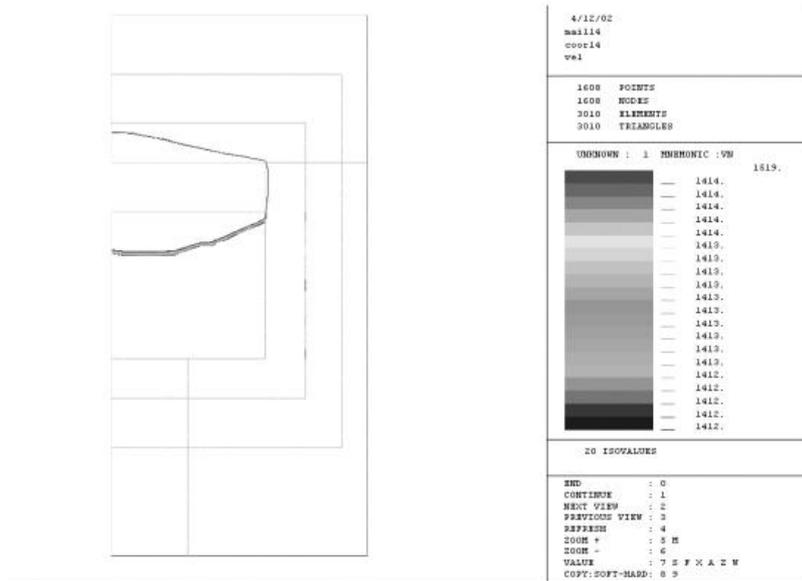


Figura 16: Frente de solidificación utilizando 4 materiales.

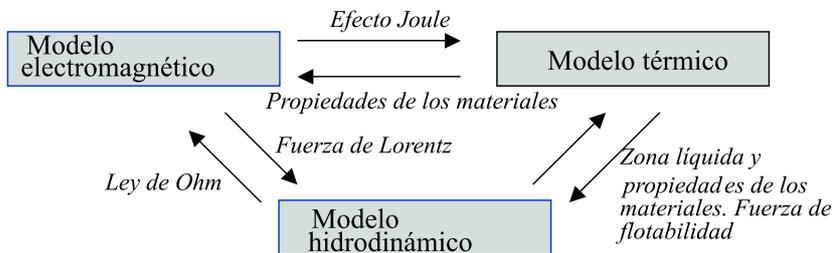


Figura 17: Acoplamiento entre los diferentes modelos.

en consecuencia, la zona líquida donde se resolverán numéricamente las ecuaciones de la hidrodinámica. Téngase en cuenta que la viscosidad del metal líquido también depende de la temperatura. Asimismo, el campo de velocidades que proporcionará la resolución numérica del segundo modelo se incluirá en la parte convectiva de la ecuación del calor.

- Presencia de términos no lineales:

- La fuente de calor en el modelo térmico es la densidad de potencia del efecto Joule que es proporcional al cuadrado de la densidad de corriente.
  - Las propiedades físicas de los materiales que forman el horno y del propio metal que se funde dependen, en general de forma no lineal, de la temperatura.
  - La fusión del metal dentro del horno requiere que se resuelva la ecuación del calor evolutiva con cambio de estado, lo que introduce una fuerte no linealidad en el problema.
  - Las condiciones de contorno del modelo térmico serán de convección-radiación con lo cual el flujo de calor en la frontera depende de la potencia cuarta de la temperatura.
- **Existencia de fronteras libres:** la interfase sólido-líquido del material que se introduce en el horno de inducción. Téngase en cuenta que el conocimiento de dicha interfase es crucial para los modelos electromagnético e hidrodinámico, puesto que las propiedades físicas varían considerablemente al cambiar de estado y, además, el modelo hidrodinámico solo se desarrolla en la fase líquida.

En la literatura pueden encontrarse algunos trabajos donde se acoplan el modelo térmico y el modelo electromagnético (ver por ejemplo [8], [9]) o bien el modelo electromagnético y el modelo hidrodinámico ([13]). Sin embargo, el acoplamiento de los tres modelos constituye una línea de investigación novedosa. Recientemente, en [11] se presenta la simulación numérica de un horno de inducción, también destinado a la purificación del silicio, que se lleva a cabo mediante códigos comerciales.

Finalmente, las técnicas numéricas que se emplearán para la resolución de las ecuaciones que modelan los tres procesos anteriormente descritos son:

- Modelo electromagnético: se utilizará un método híbrido de elementos finitos (FEM) y elementos de contorno (BEM). La combinación de ambas técnicas permite utilizar sus respectivas ventajas numéricas: el método de elementos finitos nos permite aproximar bien la geometría y tratar eficazmente los términos no lineales, y las matrices resultantes son "huecas". Por otro lado, los elementos de contorno proporcionan un método eficaz para tratar dominios homogéneos no acotados. Los BEM reducen el número de incógnitas pero tienen el inconveniente de que dan lugar a matrices llenas.
- Modelo térmico: La ecuación del calor se integrará en tiempo mediante un esquema implícito mientras que, en espacio, se utilizará el método de los elementos finitos. Además, se emplearán técnicas de operadores maximales monótonos para el tratamiento del cambio de estado.
- Modelo hidrodinámico: se integrarán en tiempo las ecuaciones de Navier-Stokes utilizando un esquema implícito donde el término inercial será

aproximado mediante un método de características. En cada paso de tiempo, se utilizará un método de elementos finitos; en particular, se considerarán elementos continuos lineales a trozos con “burbujas” para las componentes de la velocidad y lineales a trozos para la presión.

## Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por FERROATLANTICA I+D y los proyectos FEDER-CICYT 1FD97.0280 y PGIDT00PXI20701PR.

## Referencias

- [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] C. Chaboudez, S. Clain, R. Glardon, D. Mari, J. Rappaz, J. and M. Swierkosz, “Numerical Modeling in Induction Heating for axisymmetric geometries”, *IEEE Transactions on Magnetics*, **33**(1), (1997), 739-745.

- [9] S. Clain, J. Rappaz, M. Swierkosz and R. Touzani “Numerical modelling of induction heating for two-dimensional geometries”, *Mathematical Models and Methods in Applied Sciences*, **3**(6), (1993), 805-822.
- [10] P. D’Ambrosio and I. Letizia, “Temperature and stress distribution on carbon electrodes for silicon metal production under transient temperature conditions”, *16<sup>th</sup> Biennial Conference on Carbon*, Baden-Baden, (1983).
- [11] Y. Delannoy, C. Alemany, K.-I. Li, P. Proulx and C. Trassy, “ Plasma-refining process to provide solar-grade silicon”, *Solar Energy Materials & Solar Cells*, **72**, (2002), 69-75.
- [12] R. Innvær and L. Olsen, “Practical use of mathematical models for Søderberg electrodes”, *Elkem Carbon Technical Paper presented at the A.I.M.E. Conference* (1980).
- [13] T.T. Natarajan and N. El-Kaddah, “A methodology for two-dimensional finite element analysis of electromagnetically driven flow in induction stirring systems”, *IEEE Transactions on Magnetics*, **35**(3), (1999), 1773-1776.
- [14] F. Pena, *Contribución al modelado matemático de algunos problemas de la metalurgia del silicio*, Tesis Doctoral, Universidade de Santiago de Compostela, 2003
- [15] 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
- [16] A. Schei, J.K. Tuset and H. Tveit, *High Silicon alloys*, Tapir Forlag, Trondheim, Noruega, 1998.