

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA



58

MODELO MATEMATICO DE UN GENERADOR
DE UN REFRIGERADOR POR ABSORCION
INTERMITENTE

T E S I S

Que Para Obtener el Título de
INGENIERO QUIMICO
P r e s e n t a n

GABRIEL LEONARDO MINGRAMM SIERRA
RICARDO RODRIGUEZ ARANA ZUMAYA

1 9 7 8



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

CLAS TESIS 1977

ABO M.T. ~~207~~

708A 286

PCGHA _____

PROC _____

TE _____



Jurado asignado originalmente
según el tema

PRESIDENTE
VOCAL
SECRETARIO
1er. SUPLENTE
2do. SUPLENTE

Héctor Sierra E.
Antonio Valiente B.
Graciela Martínez O.
José Luis Herce V.
Carlos López S.

SITIO DONDE SE DESARROLLO EL TEMA:

Centro de Investigación de Materiales

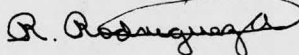
NOMBRE COMPLETO Y FIRMA DEL SUSTENTANTE:

Mingramm Sierra Gabriel Leonardo



NOMBRE COMPLETO Y FIRMA DEL SUSTENTANTE:

Rodríguez Arana Zumaya Ricardo



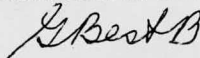
NOMBRE COMPLETO Y FIRMA DEL ASESOR DEL TEMA:

Ing. Héctor Sierra Elizondo



NOMBRE COMPLETO Y FIRMA DEL SUPERVISOR TECNICO:

Dr. Gustavo Best Brown



NUESTRO MAS SINCERO AGRADECIMIENTO A:

Ing. Héctor Sierra E.
Dr. Gustavo Best B.
Dr. Ignacio Alvarez E.
Dr. José Luis Herce V.

POR SU AYUDA EN LA ELABORACION DE
ESTE TRABAJO

A quienes me dieron
las armas para abrirme
un camino en la selva
de la vida

Mis padres

A mis hermanos

A mis tíos Rubén y Consuelo
con admiración y cariño

A Ana por su apoyo,
comprensión y cariño

g. m.

A MIS PADRES

A MIS HERMANOS

n.r.

INDICE

INTRODUCCION

OBJETIVOS

	Pág.
1.- Generalidades sobre la Refrigeración por Absorción	1
2.- El Equipo Experimental del CIM	14
3.- Modelo Matemático de un Generador de Vapor de Refrigerante	18
4.- Predicción de Propiedades	41
5.- Elaboración de un Programa de Computadora y Resultados	98
6.- Conclusiones y Recomendaciones	123

BIBLIOGRAFIA

125

APENDICES

A.- Ecuaciones de Energía Libre Propuestas por S.C.G. Schulz	127
B.- Caída de Presión en Flujo a Dos Fases	134
C.- Coeficientes de Transferencia de Calor	142

INTRODUCCION

En la actualidad, la necesidad de contar con sistemas de refrigeración para satisfacer una gran variedad de necesidades, como el conservar alimentos perecederos, disponer de sistemas de aire acondicionado, etc. es un problema que se encuentra en vastas regiones del país y que ha presentado muchas dificultades en su solución, como son:

- los altos costos que están asociados a estos sistemas
- la no disponibilidad de fuentes energéticas
- etc.

Una posible solución a este problema es el empleo de la refrigeración por absorción. Aunque este tipo de refrigeración es uno de los métodos más antiguos que se conocen, puesto que ya era ampliamente utilizada durante los últimos años del siglo XIX, el advenimiento de los sistemas mecánicos de refrigeración la relegó a un segundo plano y durante mucho tiempo se le tuvo olvidada. Sin embargo, recientemente ha vuelto a cobrar importancia por la posibilidad de usar en sus sistemas recursos energéticos no convencionales, con especial énfasis puesto en la energía solar. Como es de esperarse que esta situación se refuerce conforme pase el tiempo, en el Centro de Investigación de Materiales de la UNAM se ha iniciado un programa tendiente al estudio y la aplicación práctica de la refrigeración por absorción.

El objetivo del citado Centro (CIM) es encontrar los sistemas de refrigeración que se adecúen mejor a las características de las zonas que los requieren, que utilicen los recursos energéticos disponibles, que sean económicos y fáciles de implementar, etc. y para satisfacerlo se llevan a cabo una serie de estudios sobre los diferentes aspectos de la refrigeración por absorción.

En vista de la conveniencia de contar con una serie de herramientas analíticas que complementen el estudio experimental de la refrigeración por absorción, el Grupo de Tecnología de Materiales del CIM ha iniciado una serie de estudios a este respecto y es precisamente dentro de este contexto en que se encuentra ubicado el presente trabajo.

Es de esperarse que este estudio pueda contribuir, aunque sea en pequeña escala, a la satisfacción de las necesidades de refrigeración existentes en diferentes regiones del territorio nacional. Si esto sucede así, se habrá alcanzado el mayor objetivo del presente trabajo.

OBJETIVOS

En este estudio se han establecido como objetivos básicos los siguientes:

1.- Se pretende iniciar la elaboración de un modelo matemático del sistema de refrigeración por absorción desarrollado en el Centro de Investigación de Materiales de la UNAM. Para lograrlo se analiza el sistema de generación del equipo de refrigeración. Se ha convenido en desarrollar un modelo del sistema de generación de tipo general, que pueda adaptarse fácilmente al estudio de otros equipos que trabajen bajo el mismo principio.

2.- Debido a la necesidad que existe en el CIM de contar con medios eficientes para la predicción de las propiedades del sistema refrigerante amoníaco-agua, por ser de utilidad en diversos proyectos del citado centro, se ha planteado como siguiente objetivo básico de este trabajo el desarrollo de un paquete de subrutinas para la predicción de las propiedades de dicho sistema. Se ha hecho énfasis en la predicción de las propiedades termodinámicas por ser éstas las que más intervienen en los diversos proyectos del CIM. Se pretende establecer además una comparación entre los valores predichos por las ecuaciones y algoritmos desarrollados y los valores experimentales citados en la literatura, con el objeto de establecer la confiabilidad de las ecuaciones usadas y los valores derivados de ellas.

Para la satisfacción de los objetivos planteados, el trabajo se ha desarrollado en seis capítulos, que de modo general pueden resumirse de la siguiente manera:

- Un estudio breve y general de la refrigeración por absorción
- Una descripción del equipo experimental del CIM
- El planteamiento del problema específico y el establecimiento del modelo del generador
- El estudio de la predicción de propiedades, presentándose el desarrollo de las ecuaciones, la metodología utilizada y los resultados obtenidos
- Presentación de la elaboración del programa y resultados
- Conclusiones y recomendaciones

La idea general es que una vez completado este trabajo, el mismo sirva, no sólo para completar el modelo del sistema de refrigeración, sino que, ya sea como un todo o por medio de la utilización de algunas de sus partes, también pueda usarse en el diseño y/o análisis de otros sistemas de interés.

CAPITULO 1.- GENERALIDADES SOBRE LA REFRIGERACION POR ABSORCION

El presente capítulo es un breve estudio de la Refrigeración por Absorción. Se hace una descripción de los diversos sistemas, así como de su funcionamiento. Se discuten las características que deben llenar los pares refrigerante-absorbente y se realiza un breve estudio sobre la Termodinámica de los Ciclos de Refrigeración por Absorción. Por último, se mencionan ciclos más-complejos, obtenidos a partir de la introducción de varias mejoras en el ciclo básico, con el objeto de hacerlo más eficiente.

INTRODUCCION

Un sistema de refrigeración es aquél que tiene por finalidad extraer calor de una fuente (proceso, equipo, corriente, local, etc.) a una temperatura inferior a la ambiente y expulsarlo a un receptor o sumidero que se encuentra a temperatura ambiente por regla general.

El material que se encuentra dentro del sistema de refrigeración y que realiza el "acarreo" de calor antes mencionado, recibe el nombre de refrigerante.

Se han ideado y existen comercialmente diversos sistemas de refrigeración, que difieren entre sí en la forma como se llevan a cabo los diferentes procesos dentro del sistema (manera como el refrigerante extrae calor, método de dar trabajo al sistema, etc.) y en las sustancias utilizadas como refrigerantes.

Entre los sistemas de refrigeración que han recibido mayor aceptación y que por ende han sido los más utilizados, se tienen los siguientes:

- Sistema de refrigeración por eyección de vapor
- Sistema de refrigeración por medio de un gas
- Sistema de refrigeración por absorción
- Sistema de refrigeración mecánica.

La descripción del equipo y de la forma de operación de los sistemas anteriores se puede encontrar en cualquier manual de Refrigeración⁽¹⁾ o texto de Termodinámica^(2,6). Aquí solamente se expondrá de manera breve el Sistema de Refrigeración por Absorción.

1.1 SISTEMAS DE REFRIGERACION POR ABSORCION

Los sistemas de refrigeración por absorción tienen dos características principales que los distinguen de los otros sistemas de refrigeración:

1a) Utilizan un par de sustancias muy afines entre sí: el refrigerante y el absorbente. La función de este último es llevar al primero de la zona de baja presión a la zona de alta presión.

2a) La mayor parte de la energía proporcionada al sistema es de tipo calorífico (la fracción que se entrega como trabajo es muy pequeña), por lo que se puede considerar que estos sistemas se operan térmicamente.

Un sistema básico de refrigeración por absorción consta de las siguientes partes (Fig. 1.1): Absorbedor, Generador, Condensador y Evaporador. En el absorbedor, el refrigerante en fase vapor y a baja presión que viene del evaporador, pasa a la fase líquida. Esto se consigue por medio de su absorción en una mezcla refrigerante-absorbente poco concentrada. Este proceso puede llevarse a cabo porque existe una gran afinidad entre las moléculas del refrigerante y las del absorbente. Como consecuencia de esta interacción, durante el proceso de absorción se desprende cierta cantidad de calor (proveniente del calor de condensación, calor de dilución, etc.) que es entregado a un receptor (típicamente agua de enfriamiento).

La mezcla concentrada así obtenida es conducida al generador y presurizada en su camino hacia éste. Allí, la solución concentrada y a presión elevada recibe energía calorífica de una fuente externa y esto trae como consecuencia la generación de refrigerante en fase vapor y la formación de una solución débil o diluida. Lo ideal es que el refrigerante generado sea lo más puro posible y debe procurarse que la solución diluida contenga el suficiente refrigerante como para evitar el paso del absorbente al estado sólido en etapas posteriores.

Los vapores del refrigerante se dirigen al condensador y allí entregan su calor latente a un medio de enfriamiento, produciéndose un líquido saturado a presión elevada. A este líquido se le abate la presión por medio de una válvula, obteniéndose así una vaporización parcial del mismo que reduce su temperatura hasta un nivel inferior a la del medio que se quiere refrigerar.

La mezcla bifásica se conduce al evaporador, en donde se completa su vaporización, proveyendo de este modo la refrigeración requerida, pues extrae el calor necesario de la fuente que se encuentra a baja temperatura.

El vapor de baja presión que sale del evaporador se dirige al absorbedor, en donde se encuentra con la solución diluida que ha llegado allí directamente del generador y a partir de aquí se inicia nuevamente el ciclo anteriormente descrito.

Aunque todos los sistemas de refrigeración por absorción trabajan de acuerdo a los principios que se acaban de mencionar, existen dos formas de funcionamiento de dichos sistemas, que son las operaciones intermitente y continua, de las que se mencionarán brevemente sus principales características.

Ciclo Intermitente de Refrigeración por Absorción. Su característica principal es que las operaciones de dicho ciclo se llevan a cabo en un orden se

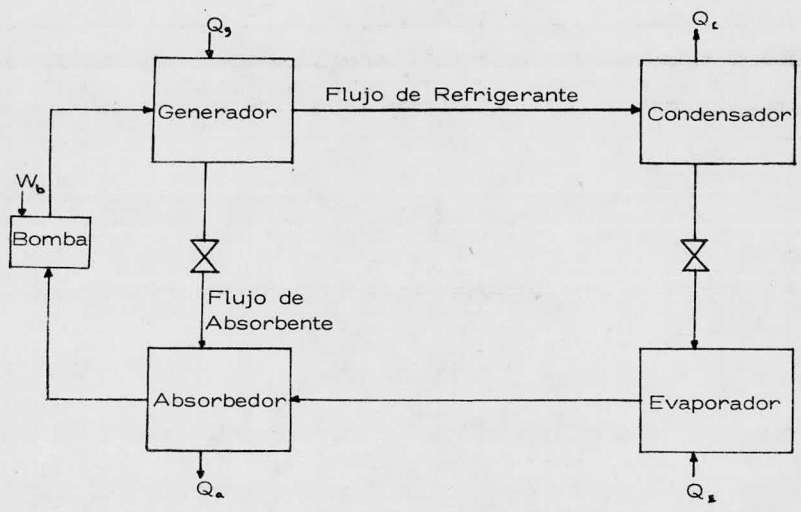
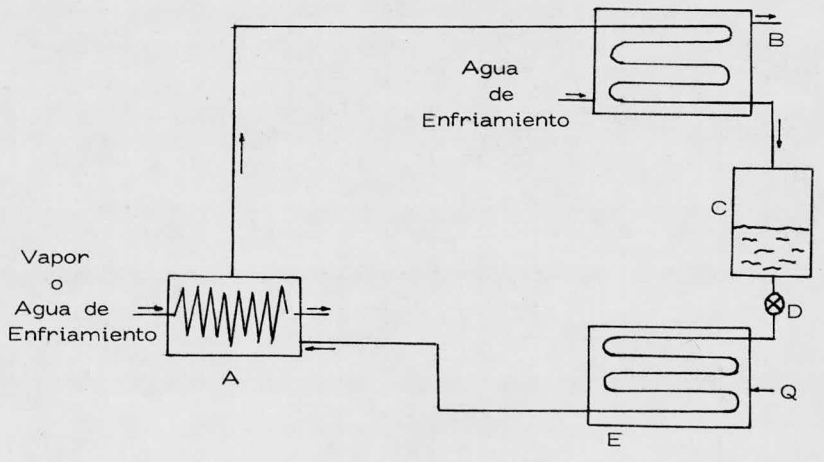


Fig. 1.1 Ciclo Básico de Refrigeración por Absorción.

Fig. 1.2 Diagrama Esquemático de un Sistema de Absorción Intermitente



cuencial, o sea, unas van siguiendo a otras en el transcurso del tiempo. Como consecuencia de ésto, algunas de sus partes pueden realizar más de una función.

En su forma más simple, este sistema se va a caracterizar porque no requiere suministro de energía mecánica y porque carece de parte móviles.

Si se observa un diagrama esquemático de ciclo simplificado (Fig. 1.2), se verá que el recipiente A funciona primeramente como absorbedor, produciéndose en él la mezcla concentrada a baja presión y utilizando un medio de enfriamiento como agente externo. Cuando esta fase ha concluido, el recipiente realiza a continuación las funciones de generador, usando como medio externo a una fuente de calentamiento. En este paso, la presión elevada requerida para la condensación, se obtiene por mera aplicación de energía calorífica. El refrigerante generado pasa al recipiente B, en donde se condensa con agua de enfriamiento. Posteriormente el líquido producido pasa al recipiente C, de donde sale hacia el evaporador (E). En el camino de C hacia E la presión y la temperatura son abatidas por medio de una válvula (D), por lo que el efecto de refrigeración se realiza en el evaporador. De allí salen los vapores hacia A, en donde ha permanecido la solución diluida, y se inicia de nuevo el ciclo.

Ciclo Continuo de Refrigeración por Absorción. Va a caracterizarse porque las operaciones básicas del ciclo se realizan de manera simultánea, tratándose por lo general de procesos a régimen permanente. Como consecuencia de ésto, cada una de las funciones debe realizarse en un equipo específico y se requiere de una bomba que transporte la solución fuerte de la zona de baja presión (absorbedor) a la de alta presión (generador).

El diagrama esquemático para este ciclo podría ser la Fig. 1.1, teniendo presente que las operaciones se están realizando continúa y simultáneamente y que entre el absorbedor y el generador existe una bomba

1.2 MEZCLAS REFRIGERANTE - ABSORBENTE

Hasta ahora no se ha hecho mención de cuales son las sustancias que se utilizan en los sistemas de refrigeración por absorción. Antes de mencionar las, se darán brevemente cuales son las características principales que debe llenar el par refrigerante-absorbente para que el ciclo pueda funcionar de modo adecuado. Estas son:

1.- Volatilidad relativa. El refrigerante debe ser mucho más volátil que el absorbente con objeto de facilitar la separación de ambos en el generador y de este modo abatir los costos asociados con esta separación.

2.- Afinidad. En general se requiere de una fuerte afinidad refrigerante-absorbente en las condiciones bajo las cuales se realiza la absorción. Esta afinidad reduce la cantidad de absorbente a utilizar y permite ahorros de energía, además de disminuir el tamaño de los equipos. Sin embargo, una afinidad fuerte también tiene sus desventajas, siendo la principal de ellas la dificultad de separación que ocasiona en el generador (principalmente cuando la afinidad

se traduce en un gran calor de dilución, que debe darse posteriormente en la generación).

3.- Presión. La presión de operación se establece de acuerdo a las características físicas del refrigerante y es deseable que sea moderada, pues una alta presión se traduce en la necesidad de emplear equipo especial, mientras que una presión muy baja da como resultado equipos muy voluminosos y la necesidad de contar con medios especiales para reducir las pérdidas de presión.

4.- Ausencia de Fases Sólidas. La mezcla no debe formar fases sólidas en todo el rango de condiciones de operación considerado, pues de otra manera existe la posibilidad de fallas en la operación normal del sistema (principalmente las asociadas a la detención del flujo).

5.- Estabilidad. Se requiere una estabilidad química casi absoluta, debido a las condiciones severas a que se ve expuesta la mezcla en el transcurso del tiempo. De no existir esta estabilidad, los resultados pueden ser la formación de gases, sólidos o sustancias corrosivas que afecten la operación del sistema.

6.- Corrosión. Es muy importante que los fluidos considerados no corroyan al material o materiales usados en la construcción de los equipos que forman el sistema de refrigeración.

7.- Seguridad. Se requiere fundamentalmente que las sustancias manejadas sean no-tóxicas y no-inflamables.

8.- Viscosidad. Es deseable un valor bajo de esta propiedad, con el objeto de aumentar las transferencias de calor y masa.

9.- Calor latente. Conviene un calor de vaporización con un valor elevado para el refrigerante, con objeto de reducir los flujos de material.

Hasta la fecha no se conoce algún par refrigerante-absorbente que cumpla perfectamente con los requerimientos que se han mencionado, y comercialmente sólo se han utilizado dos pares de sustancias que son: Agua (refrigerante) - con Bromuro de Litio (absorbente) y Amoníaco (refrigerante) con Agua (absorbente).

Los principales problemas que existen con el par amoníaco-agua son los siguientes: el valor de la volatilidad relativa es menor al deseable, lo cual origina que en el generador una cantidad "apreciable" de agua se vaya a la fase vapor. Como la presencia del agua es indeseable en el vapor de amoníaco, deben instalarse una serie de equipos especiales, como analizadores, rectificadores, etc., que condensen el agua existente en el vapor y de esta forma la separen del amoníaco. Esto da por resultado una mayor complejidad en el sistema y un desperdicio de energía, que resulta de la generación inútil del vapor de agua en el generador. Otro problema es el de las presiones relativamente altas que deben usarse al trabajar con este par. Por último, el amoníaco presenta ciertos problemas en cuanto a la seguridad. Por lo que concierne a los otros requerimientos, éstos son satisfechos de una manera adecuada por este par.

Con el par bromuro de litio-agua, el principal problema que se presenta es el de formación de fases sólidas. Para evitar el congelamiento del agua, el sistema debe trabajar a temperaturas superiores a 0°C , lo que reduce su ran-

go de aplicación. Por otra parte, deben evitarse las mezclas muy concentradas en bromuro de litio, para no tener la cristalización de este último. Otras desventajas que presenta este par es el tener presiones de trabajo demasiado bajas y viscosidades relativamente altas. Por lo demás, el par es muy seguro, presenta una gran afinidad, estabilidad y tiene un valor alto de calor latente para el refrigerante.

Ultimamente se han realizado diversas investigaciones sobre otras sustancias que puedan cumplir con los requerimientos para funcionar dentro de un sistema de refrigeración por absorción, y se ha concluido que los siguientes pares presentan características promisorias:

- 1.- Amoníaco-sales
- 2.- Metilamina-sales
- 3.- Alcoholes-sales
- 4.- Amoníaco-solventes orgánicos
- 5.- Dióxido de azufre-solventes orgánicos
- 6.- Hidrocarburos halogenados-solventes orgánicos.

Sin embargo, aún no se tienen noticias de instalaciones comerciales que funcionen con alguno de estos últimos pares y su importancia es solamente teórico-experimental.

1.3 ANALISIS TERMODINAMICO DEL CICLO DE REFRIGERACION POR ABSORCION

Si se observa el esquema de un ciclo de refrigeración por absorción en su forma más simple (Fig. 1.1), se notará que existen cinco lugares en donde se realizan intercambios energéticos. Estos son los siguientes:

- 1.- Absorbedor. Aquí se expulsa calor (Q_a) del sistema de refrigeración durante el proceso de formación de la solución concentrada a partir del refrigerante en fase vapor y de la mezcla diluida.
- 2.- Bomba. Con el objeto de presurizar la solución concentrada, se realiza trabajo (W_b) sobre el sistema.
- 3.- Generador. Mediante una fuente externa se proporciona calor (Q_g) al sistema, para la formación del refrigerante y de la mezcla diluida.
- 4.- Condensador. Para condensar al refrigerante que se encuentra en fase vapor, el sistema entrega calor (Q_c) a un medio de enfriamiento.
- 5.- Evaporador. El sistema extrae calor (Q_e) de la fuente de baja temperatura, realizando el efecto refrigerante requerido.

Si se toma como sistema termodinámico al sistema de refrigeración, un balance energético alrededor de él da:

$$\left(H + \frac{u^2}{2g_c} + \frac{gz}{g_c} \right)_{ent} dM_{ent} - \left(H + \frac{u^2}{2g_c} + \frac{gz}{g_c} \right)_{sal} dM_{sal} + \delta Q - \delta W = d \left[M \left(U + \frac{u^2}{2g_c} + \frac{gz}{g_c} \right) \right]_{sist} \quad (1.1)$$

Como no hay entrada ni salida de materiales al sistema:

$$\delta M_{ent} = \delta M_{sal} = 0 \quad (1.2)$$

Como se trata de una operación de tipo cíclico, las propiedades en cualquier punto que se tome como base para iniciar el mismo deberán ser iguales - al inicio y al final de la operación, por lo que se tiene que:

$$d \left[M \left(\underline{U} + \frac{u^2}{2g_c} + \frac{gz}{g_c} \right) \right]_{sist} = 0 \quad (1.3)$$

Por lo tanto, la ecuación (1.1) se reduce a:

$$\delta Q - \delta W = 0 \quad (1.4)$$

que al ser integrada da:

$$\sum Q_i - \sum W_i = 0 \quad (1.5)$$

que puede ser escrita, para este caso, como:

$$Q_a + Q_g + Q_c + Q_e - W_b = 0 \quad (1.6)$$

En estas dos últimas ecuaciones se tienen las siguientes convenciones: si el sistema recibe calor, el término que representa dicha contribución será positivo, mientras que tendrá un valor menor que cero en el caso de que el sistema ceda calor a los alrededores. Para el trabajo se tiene la convención al revés. - De acuerdo a esto es claro que:

$$Q_g, Q_e > 0 \quad (1.7)$$

$$Q_a, Q_c, W_b < 0 \quad (1.8)$$

Si se realiza un balance de entropía en el sistema termodinámico considerado, se tiene lo siguiente:

$$(\underline{S})_{ent} \delta M_{ent} - (\underline{S})_{sal} \delta M_{sal} + \int_{sup} \frac{\delta q}{T} dA + \int_{vol} \frac{\delta lw}{T} dV = d(M\underline{S})_{sist} \quad (1.9)$$

Utilizando los mismos argumentos que para el balance de energía, la ecuación (1.9) se reduce a:

$$\int_{sup} \frac{\delta q}{T} dA + \int_{vol} \frac{\delta lw}{T} dV = 0 \quad (1.10)$$

Si se hace la suposición de que los procesos de Absorción, Generación, - Condensación y Evaporación se llevan a cabo a las temperaturas medias T_a , - T_g , T_c y T_e respectivamente y si se observa que el segundo término del primer miembro de la ecuación (1.10) es la contribución de todos los procesos en donde se genera entropía en el sistema, la integración de dicha ecuación conduce a lo siguiente:

$$\frac{Q_a}{T_a} + \frac{Q_g}{T_g} + \frac{Q_c}{T_c} + \frac{Q_e}{T_e} + S_{gen} = 0 \quad (1.11)$$

Esta última ecuación, junto con la (1.6) son las ecuaciones básicas de balance en el Ciclo de Refrigeración por Absorción. De su combinación se pueden obtener importantes resultados concernientes a los sistemas de refrigeración por absorción.

En primer lugar, en la ecuación (1.6) se observa el término W_b , que representa el trabajo dado a la solución fuerte líquida, que se encuentra a baja presión, con el objeto de aumentar esta última. La ecuación que permite el cálculo de dicho trabajo puede escribirse como:

$$W_b = - \int_{p_1}^{p_2} v \, dP \quad (1.12)$$

en donde se observa que la magnitud del trabajo va a depender del volumen específico del fluido en cuestión. Como en este caso particular se está considerando un líquido, el volumen del mismo es pequeño y por consiguiente así será también el trabajo calculado de acuerdo a la ecuación anterior. Para fines prácticos se puede despreciar dicho término en comparación con los otros términos de la ecuación (1.6) y ésta puede reescribirse como:

$$Q_a + Q_g + Q_c + Q_e = 0 \quad (1.13)$$

En la ecuación (1.11) se tienen las temperaturas T_a y T_c , que representan la temperatura media de absorción y la temperatura media de condensación, respectivamente. En las aplicaciones prácticas, ambas temperaturas van a ser iguales, puesto que ambos procesos usarán como receptor de calor al mismo medio (agua de enfriamiento por lo general). Usando a T_0 para representar ambas temperaturas, la ecuación (1.11) se convierte en:

$$\frac{Q_a}{T_0} + \frac{Q_g}{T_g} + \frac{Q_c}{T_0} + \frac{Q_e}{T_e} + S_{gen} = 0 \quad (T_g > T_0 > T_e) \quad (1.14)$$

que puede escribirse alternativamente como:

$$\frac{Q_a}{T_0} + \frac{Q_g}{T_g} + \frac{Q_c}{T_0} + \frac{Q_e}{T_e} \leq 0 \quad (1.15)$$

en donde se ha aprovechado que $S_{gen} \geq 0$

Al combinar esta última ecuación con la ecuación (1.13) se llega a que:

$$\frac{Q_g}{T_g} + \frac{Q_e}{T_e} \leq \frac{Q_g + Q_e}{T_0} \quad (1.16)$$

de donde resulta que:

$$Q_e \leq Q_g \frac{T_e(T_g - T_0)}{T_g(T_0 - T_e)} \quad \text{ó} \quad Q_g \geq Q_e \frac{T_g(T_0 - T_e)}{T_e(T_g - T_0)} \quad (1.17)$$

Si ahora se incorpora el concepto de Coeficiente de Operación (C.O.P.), el cual se define como:

$$COP = \frac{\text{Efecto de refrigeración producido por el Sistema}}{\text{Energía suministrada al Sistema para su Operación}}$$

se verá que para estos sistemas de refrigeración por absorción el Coeficiente de Operación se puede calcular como:

$$COP = \frac{Q_e}{Q_g - W_b} \quad (1.18)$$

y de acuerdo a las suposiciones hechas, el resultado es:

$$COP = \frac{Q_e}{Q_g} \quad (1.19)$$

Si en la ecuación anterior se incorporan los resultados de la ecuación (1.17) se llega a:

$$COP = \frac{Q_e}{Q_g} \leq \frac{T_e(T_g - T_o)}{T_g(T_o - T_e)} \quad (1.20)$$

Del análisis de todas las ecuaciones que rigen el comportamiento de un sistema de refrigeración por absorción se obtienen las siguientes conclusiones:

Para una carga de refrigeración especificada de antemano (Q_e) y condiciones de operación establecidas (T_e , T_o , T_g), la cantidad mínima de energía calorífica que debe proporcionarse en el generador viene dada por la expresión:

$$Q_{g \min} = Q_e \frac{T_g(T_o - T_e)}{T_e(T_g - T_o)} \quad (1.21)$$

lo cual corresponde a una situación ideal de un ciclo completamente reversible (en donde, por consecuencia, la S_{gen} valga 0). En cualquier ciclo real, el calor dado en el generador deberá ser mayor que este valor, tanto más cuanto más se aleje el sistema de la reversibilidad (cuanto mayor sea la producción de entropía).

De un modo similar, para una carga de calor fija dada en el generador y condiciones especificadas de antemano (T_g , T_o , T_e), la máxima cantidad de calor que puede removerse en el evaporador (efecto de refrigeración máximo posible) corresponde al caso reversible y vale:

$$Q_e = Q_g \frac{T_e(T_g - T_o)}{T_g(T_o - T_e)} \quad (1.22)$$

El COP del sistema (efecto de refrigeración por unidad de energía dada al sistema) tiene un valor máximo igual a:

$$\frac{T_e(T_g - T_o)}{T_g(T_o - T_e)} \quad (1.23)$$

el cual corresponde al producto de la eficiencia que tendría un Ciclo de Carnot que operase entre las temperaturas del Generador y del Condensador, por el Coeficiente de Operación de un Ciclo de Carnot Inverso operando entre las temperaturas del Condensador y del Evaporador.

Esto último se debe a que en cierta manera el ciclo de refrigeración por absorción es comparable a una combinación de un ciclo de potencia, acoplado a un ciclo de refrigeración mecánica, tal y como se puede observar en la Fig. 1.3

De la ecuación (1.20) resulta claro que el COP, que es una medida de la eficiencia global con que trabaja el sistema de refrigeración, aumenta si T_j o T_e lo hacen, permaneciendo constantes los demás parámetros del sistema. Sin embargo, los valores de dichas temperaturas en los sistemas reales no se fijan solamente de acuerdo a este criterio, sino que se escogen en relación a muchos otros parámetros de los que dependen y de modo que sus valores resulten satisfactorios en la práctica.

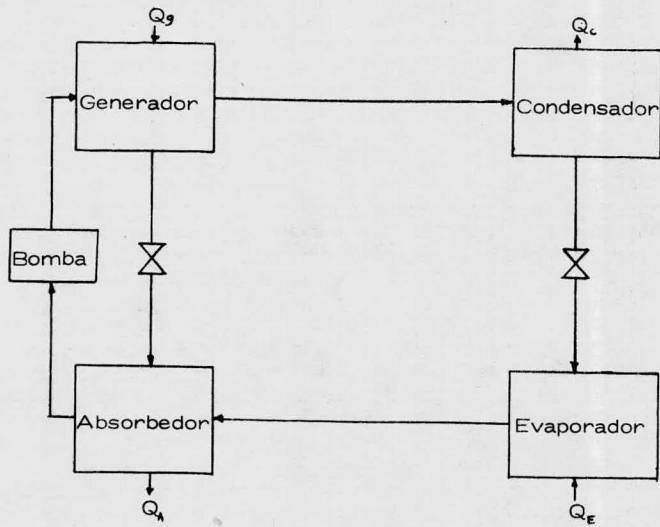
1.4 CICLOS PRACTICOS DE REFRIGERACION POR ABSORCION

Hasta ahora se ha discutido únicamente el ciclo básico de refrigeración por absorción. Sin embargo, se han desarrollado a partir de él varios ciclos que tienen como objetivo el cubrir las principales deficiencias que tiene el ciclo básico, y son estos ciclos mejorados los que se hallan en uso actualmente.

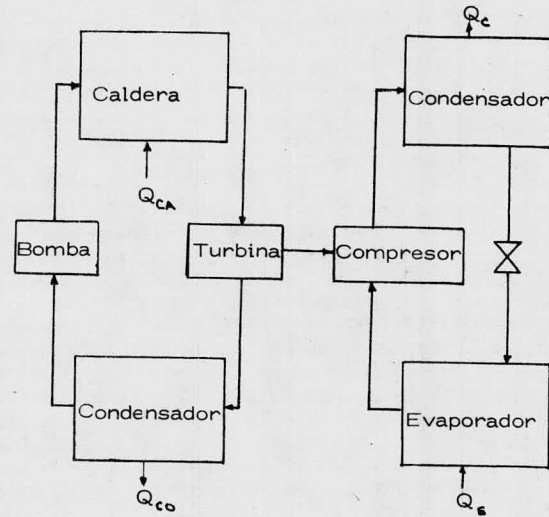
La primera mejora que puede hacerse consiste en incluir un cambiador de calor entre el generador y el absorbedor, en el cual la solución débil caliente que regresa al absorbedor, cede calor a la solución fuerte que se dirige al generador. Este intercambio presenta la ventaja de precalentar a la solución fuerte, lo que disminuye la cantidad de calor que debe darse en el generador. Al mismo tiempo, la solución diluida es enfriada, lo que es conveniente pues en el absorbedor de todos modos debe quitarse dicho calor. El intercambio reduce la cantidad de calor que debe disiparse en el absorbedor y de este modo beneficia al sistema global desde un punto de vista económico. Por otra parte, el intercambio de calor reduce las pérdidas de calor que puedan existir en el sistema.

Otras mejoras posibles son: Utilizar un intercambiador líquido-vapor, en el cual el condensado se enfríe a costa del vapor proveniente del evaporador, calentar la solución fuerte que va al generador usando el calor que es removido en el rectificador, etc.

En la Fig. 1.4 se presentan dos diagramas en donde se muestran ciclos que han incorporado algunas de las mejoras discutidas aquí y otras más que no han sido mencionadas.

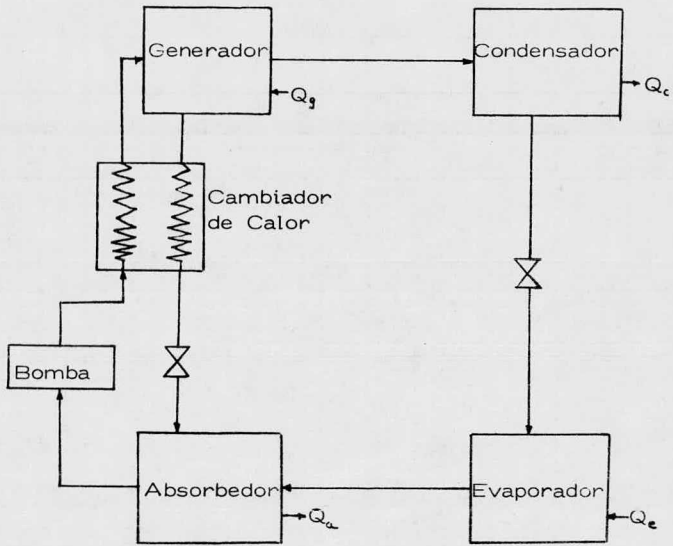


Ciclo Básico de Refrigeración por Absorción



Ciclo de Potencia (Carnot) acoplado a
Ciclo de Refrigeración Mecánica (Car_ not invertido)

Fig. 1.3



Ciclo de Refrigeración por Absorción (Bromuro de litio-Agua)

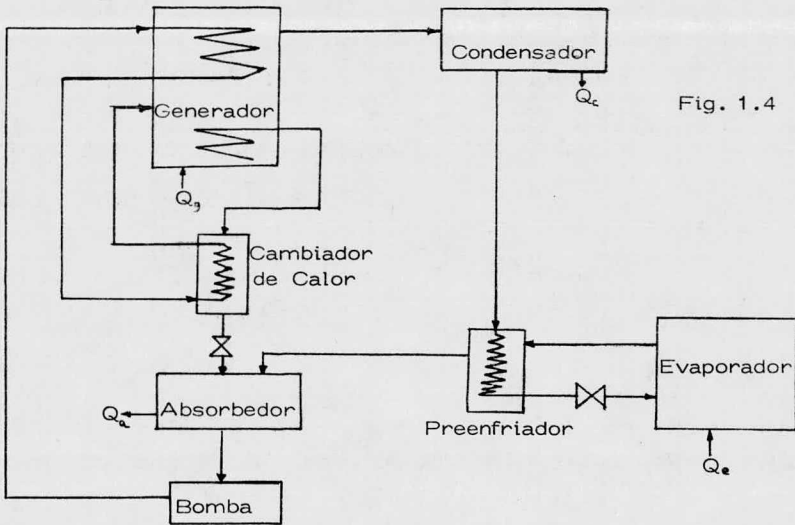


Fig. 1.4

Ciclo de Refrigeración por Absorción (Amoníaco-Agua)

SIMBOLOGIA EMPLEADA (Capítulo 1)

A	Area
COP	Coefficiente de Operación
g	Aceleración de la Gravedad
H	Entalpía
l_w	Trabajo perdido / unidad de volumen
M	Masa
P	Presión
q	Calor / unidad de área
Q	Calor
S	Entropía
T	Temperatura
u	Velocidad
U	Energía interna
V	Volumen
W	Trabajo
Z	Altura

Subíndices

—	Propiedad molar (o másica)
Ā	Absorbedor
b	Bomba
C	Condensador
ent	Entrada
E	Evaporador
gen	Generado
G	Generador
0	Común
sal	Salida
sist	Sistema
sup	Superficie
vol	Volumen

CAPITULO 2.- EL EQUIPO EXPERIMENTAL DEL CIM

Se presenta el equipo experimental de Refrigeración por Absorción construido en el CIM (UNAM). Se hace una descripción general del mismo y se explica su funcionamiento. Finalmente, se plantean sus objetivos.

INTRODUCCION

El grupo de Energía Solar del Centro de Investigación de Materiales de la UNAM ha desarrollado un sistema experimental de refrigeración por absorción de tipo intermitente, con el objeto de llevar a cabo diversos estudios sobre usos de la Energía Solar y sobre diferentes aspectos de la refrigeración por absorción. A continuación se describe brevemente dicho equipo de refrigeración.

2.1 DESCRIPCION GENERAL DEL EQUIPO

En la Fig. 2.1 se muestra un diagrama del Equipo Experimental mencionado anteriormente. Dicho equipo está formado de las siguientes partes:

1.- Un recipiente principal (A) que almacena la mezcla refrigerante y que cuenta con un cambiador helicoidal (B) a flujo paralelo por el que circula en su interior la solución diluida proveniente del generador y que precalienta a la solución concentrada que fluye hacia éste. En la parte superior cuenta con un flotador (J) que cubre la superficie líquida, para evitar la reabsorción del refrigerante gaseoso producido en el generador.

2.- Un generador (G), compuesto de una batería de veinte tubos verticales por los que fluye la mezcla refrigerante proveniente del recipiente principal. Por la coraza de este equipo circula un fluido caliente que proporciona la energía necesaria para lograr la generación del refrigerante.

3.- Rectificador (R). Consiste de un tubo vertical con aletas móviles que sirven para poder controlar la zona de rectificación y las temperaturas de ésta.

4.- Condensador (C). Compuesto por dos tubos concéntricos. Por el interior fluye el refrigerante que se condensa y por el espacio anular circula el agua de enfriamiento.

5.- Evaporador (E). Consiste de dos recipientes concéntricos. En el interior se almacena el refrigerante condensado y en el exterior se coloca el fluido (u objeto) a refrigerar.

6.- Absorbedor (D). Consiste de un intercambiador enfriado con agua, con una batería de veinte tubos, en donde la solución débil absorbe el refrigerante gaseoso que se produce en el evaporador y que se inyecta a través de un distribuidor múltiple.

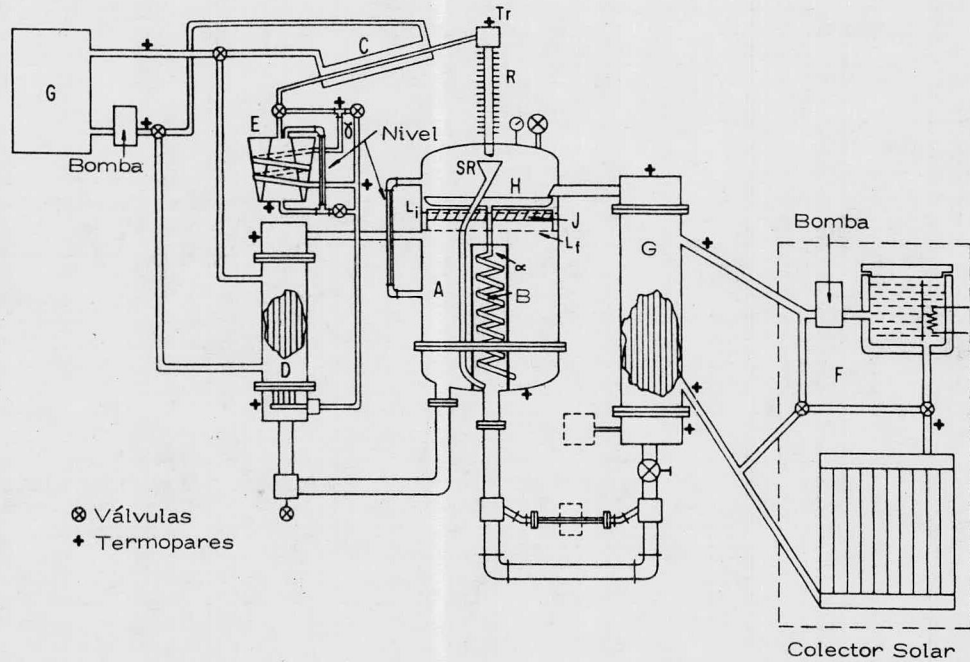


Fig. 2.1 Equipo Experimental de Refrigeración por Absorción

2.2 FUNCIONAMIENTO TEORICO DEL EQUIPO

El equipo experimental es un refrigerador de tipo intermitente y funciona de la siguiente manera:

Al inicio de la operación se tiene en el recipiente principal (A) una solución concentrada de composición x_i , a una temperatura t_i y con un nivel L_i . Esta solución fluye a través del brazo de alimentación hacia el generador, debido a una convección natural que se establece en virtud del refrigerante gaseoso que se produce en el generador como consecuencia del calentamiento a que es sometida dicha solución.

La mezcla bifásica producida en el generador es descargada a través del brazo de salida y llega a la parte superior del recipiente principal. La solución diluida cae a la charola (H) y la fase vapor se dirige al rectificador, en donde se separa la mayor parte del absorbente que lleva el vapor por medio de una condensación parcial. Este condensado se colecta en el embudo (SR) y de allí se incorpora al flujo por medio del tubo .

El refrigerante que sale del rectificador pasa por el condensador y se almacena como líquido en el evaporador.

Este período termina cuando la solución contenida en el recipiente principal alcanza una concentración x_f , a una temperatura t_f y con un nivel L_f .

Antes de iniciar el período de evaporación, es necesario enfriar la solución débil que se encuentra en el recipiente A. Para esto se utiliza agua de enfriamiento y un cambiador de calor (D). El enfriamiento de la solución débil produce una circulación natural en sentido inverso al de las manecillas del reloj y dicho enfriamiento cesa cuando se alcanza una temperatura t_d y una presión P_d .

Bajo estas condiciones se inicia el período de refrigeración, durante el cual el refrigerante líquido que se encuentra en E se evapora a la presión P_e (ligeramente mayor que P_d). El refrigerante en fase vapor que abandona el evaporador puede usarse para producir un efecto refrigerante mayor (yéndose por γ), o bien puede dirigirse directamente al absorbedor.

Durante la absorción, los vapores del refrigerante se inyectan al absorbedor a través de un distribuidor diseñado para evitar las zonas de alta temperatura. Los gradientes de concentración y temperatura que se crean inducen una circulación natural en el sentido de las manecillas del reloj y al final de la absorción se tiene una solución fuerte con una concentración x_i y a una temperatura t_i , que es el origen de un nuevo ciclo.

2.3 OBJETIVOS DEL EQUIPO EXPERIMENTAL

Este equipo fue diseñado y construido con el objeto de contar con una herramienta de tipo experimental, en la que se puedan llevar a cabo diversos estudios y de la que se obtenga la información suficiente para posteriormente construir unidades, ya a nivel comercial, que ayuden a satisfacer las necesidades de refrigeración en ciertas zonas del país.

Desde el punto de vista de refrigeración por absorción, el equipo es apto para realizar en él estudios sobre el comportamiento de las diferentes partes que componen el ciclo de refrigeración por absorción. Para esto fue dotado de equipo auxiliar y de instrumentación que permitirán conocer el funcionamiento del sistema como tal y el de sus partes individuales. Una de las finalidades del equipo es poder realizar en él estudios sobre el COP (Coeficiente de Operación) como función de las condiciones de operación, mezclas refrigerantes empleadas, fuentes de calor utilizadas, etc., para poder encontrar las condiciones más adecuadas.

Para lograr lo anterior se ha construido un equipo que es lo bastante flexible como para poder utilizar diferentes mezclas (Ej. $\text{NH}_3\text{-H}_2\text{O}$, $\text{NH}_3\text{-NaSCN}$, $\text{H}_2\text{O-LiBr}$, etc.), operar a diferentes temperaturas de enfriamiento, con lo cual se puede simular el comportamiento de diversos medios de enfriamiento y sobre todo poder utilizar diferentes fuentes de calor que operen al ciclo. Sobre este último punto se ha hecho énfasis en la utilización de energía solar.

CAPITULO 3.- MODELO MATEMATICO DE UN GENERADOR DE VAPOR DE REFRIGERANTE

Se describe el problema general que se piensa resolver en el Centro de Investigación de Materiales y a partir de él se detalla el problema específico que se ataca en el presente trabajo.

Ya planteado el problema específico (la creación de un modelo matemático para el sistema de generación), se presenta desde un punto de vista general la metodología de solución.

Primeramente se estudian por separado cada una de las partes que componen el sistema. En cada una de ellas se mencionan las consideraciones que se han hecho, se plantean las ecuaciones básicas y se da una secuencia de cálculo.

Posteriormente se hace la integración del modelo total a partir de sus componentes.

INTRODUCCION

En el capítulo anterior se describe el equipo experimental de refrigeración por absorción desarrollado en el CIM. En vista de la importancia que tiene este equipo y dado que el estudio puramente experimental sería sumamente tardado y costoso, se decidió crear un modelo matemático que simule el comportamiento del equipo global y de este modo lo complementa, para poder así alcanzar los objetivos planteados.

Debido a que el crear un modelo del equipo global es un problema muy complicado, el estudio se realizará por etapas para posteriormente integrarlas en un modelo total.

La primera etapa consiste en crear un modelo del generador, ya que la fase de generación es la del inicio del funcionamiento del sistema. Se considera además que una vez que se tenga el modelo de la generación y se compruebe la validez del mismo, puede plantearse la misma metodología para las etapas restantes.

3.1 EL PROCESO DE GENERACION EN EL EQUIPO EXPERIMENTAL

El proceso de generación en el equipo experimental se lleva a cabo en un generador de tubos verticales con circulación natural (Fig. 3.1). La solución concentrada que se encuentra en el recipiente principal fluye a través del brazo de alimentación (B) y entra al generador (C) en donde se distribuye uniforme -

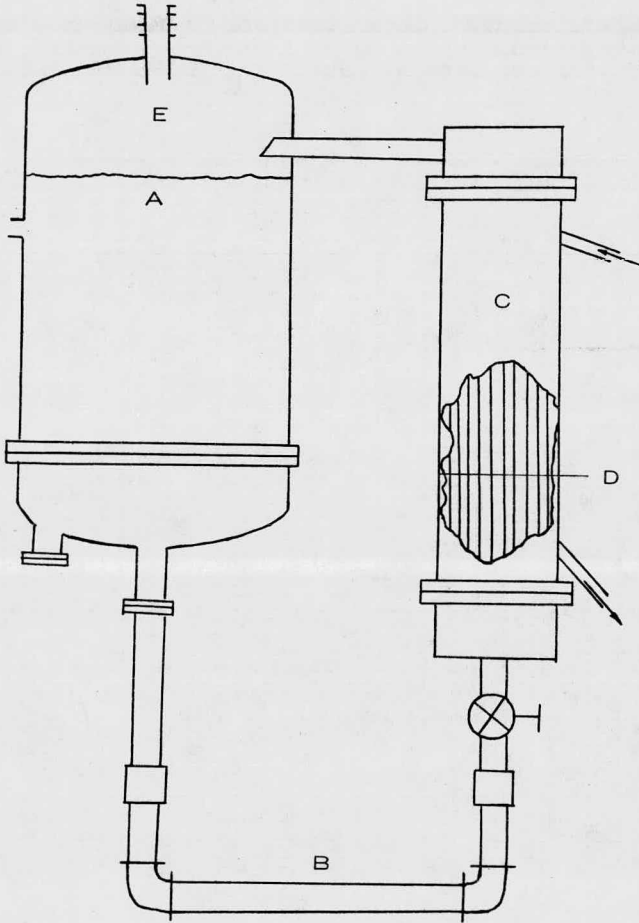


Fig. 3.1 Diagrama esquemático del sistema de generación

mente en los tubos. Allí recibe energía calorífica de un fluido que circula a con tracorriente por la coraza y como consecuencia de dicho calentamiento, dentro de los tubos se presentarán dos zonas:

Una inicial de calentamiento sensible, que va desde la entrada del gene rador hasta el punto donde la solución alcanza su temperatura de saturación (D).

Otra de flujo en dos fases, a partir del punto D, en donde se genera el refrigerante requerido.

La mezcla a dos fases se descarga a través del brazo de salida y llega a la parte superior del tanque (E), en donde los vapores se separan hacia el condensador y la solución débil cae al tanque.

3.2 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

3.2.1 Generalidades

De la descripción del sistema de generación del equipo experimental y de su funcionamiento se concluye que la operación del mismo es compleja; además de que los fenómenos que se presentan son muy complicados, la operación es e sencialmente a régimen no permanente.

La existencia de un régimen transitorio durante todo el período de gene ración tiene las siguientes causas:

1.- La presión en el tanque es variable.

Inicialmente se tiene una presión P_i , la cual se va incrementando conforme se genera el refrigerante vapor hasta llegar al valor P_c , que corresponde a la presión a la cual el vapor puede condensarse con el medio de enfriamiento - disponible (Este proceso se presenta en el arranque).

2.- La temperatura y la concentración de la solución que se alimenta - al generador son variables.

Los cambios en estas propiedades son consecuencia de la llegada de la so lución débil generada (vía intercambiador helicoidal) y de la solución rectificada que viene por el embudo. Además, aunque inicialmente los valores de T y x son los mismos para toda la solución es posible que, como consecuencia de la geometría especial del equipo, se establezcan diferentes valores locales de am bas propiedades conforme transcurre el tiempo.

3.- El nivel de la solución que se encuentra en el recipiente principal - varía con el tiempo.

4.- La temperatura y el gasto del medio de calentamiento son funciones del tiempo.

En el caso de que se utilice como medio de calentamiento un fluido previa mente calentado en colectores solares, la temperatura y el gasto pueden variar en el transcurso del tiempo.

Desde el punto de vista de un modelo matemático del sistema de gene ración, lo importante es que éste proporcione el comportamiento global del sistema y que suministre información de los cambios que va sufriendo durante la o-

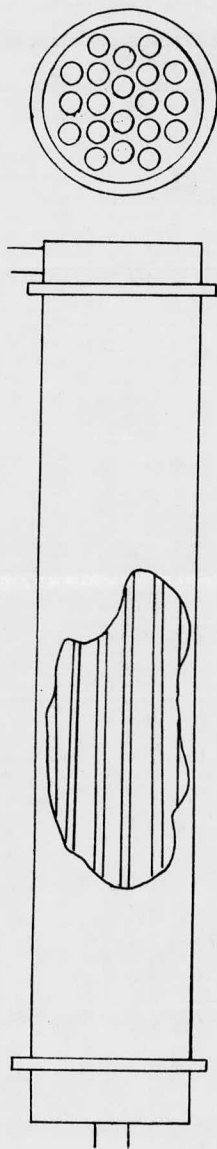


TABLA 3.1

Características del Generador

Número de Tubos 20
 Diámetro nominal $\frac{1}{4}$ in Ced. 40
 Diámetro interno 0.364 in externo 0.54 in
 Longitud de tubos 3.9307 ft
 Área de transferencia total 11.11 ft²

Diámetro de la Coraza
 Interno 5 in externo 5.125 in

Diámetro brazo de alimentación 1 in Ced. 40

Diámetro brazo de salida 1 in Ced. 40

Material Acero comercial

peración. En otras palabras, dadas las condiciones iniciales y el comportamiento del medio de calentamiento, lo importante es que se pueda conocer el valor de los diversos parámetros en el transcurso del tiempo (presiones, temperaturas, gastos, etc.) y los resultados globales del sistema de generación (condiciones finales, cantidad total de refrigerante generado, etc.).

Dada la naturaleza del problema, es muy difícil resolverlo analíticamente, por lo que se introduce un sistema numérico que consiste esencialmente en tomar intervalos de tiempo, en los cuales se puede suponer que las condiciones de operación permanecen constantes y resolver en cada uno de ellos el sistema, considerándolo como si se encontrara a régimen permanente. Con la información obtenida se calculan los nuevos valores de las variables (condiciones de operación) y el proceso se continúa hasta llegar al fin del período.

Este método puede representarse de una manera gráfica como lo indica la Fig. 3.2

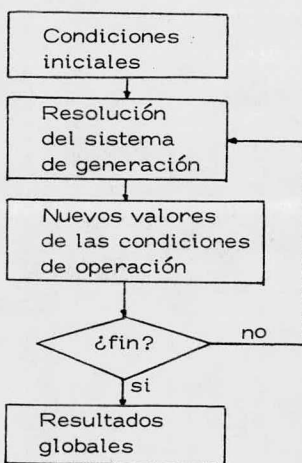


Fig. 3.2 Secuencia de cálculo para la integración del modelo global a través del tiempo.

Del planteamiento anterior se deduce que uno de los puntos fundamentales consiste en contar con un modelo que simule el sistema de generación en un instante dado.

En virtud de la importancia de contar con un modelo que simule la operación instantánea del sistema de generación, no sólo por su aplicación directa en el contexto en el que se le ha discutido, sino porque también es útil como modelo de un sistema que funcione bajo los mismos principios (rehervidores,

evaporadores, termosifones, etc.), el presente trabajo se ha enfocado al desarrollo de un modelo de este tipo.

3.2.2 Problema específico

En el inciso anterior se ha discutido el problema a resolver. Como puede concluirse de tal discusión, el problema es esencialmente de análisis, ya que se pretende obtener información sobre el comportamiento de un equipo existente.

La importancia del modelo radica en poder predecir, a partir de las características físicas del equipo y de las condiciones bajo las cuales opera, la manera como el equipo trabajará. Bajo este criterio, se considera disponible la siguiente información:

- 1.- Geometría del equipo (disposición, dimensiones, materiales de construcción, etc.)
- 2.- Medios para predecir las propiedades termodinámicas y termofísicas de la mezcla refrigerante-absorbente en cuestión.
- 3.- Condiciones de operación:
 - presión en el recipiente principal
 - temperatura y concentración de la solución que se alimenta al generador
 - gasto y temperatura de entrada del medio de calentamiento

Para conocer la operación del sistema, lo que básicamente interesa saber es:

- Gasto de la mezcla refrigerante en el sistema
- Cantidad de refrigerante generado
- Condiciones a las que se encuentra la mezcla bifásica descargada por el generador
- Flujo de calor que se presenta en el sistema
- Condiciones de salida del medio de calentamiento

Lo anterior se representa esquemáticamente en la Fig. 3.3

Para encontrar estos resultados, es necesario plantear una serie de ecuaciones y de suposiciones que describan, de la manera más adecuada posible, el funcionamiento del equipo. Al resolver las ecuaciones se obtiene el valor de las variables no conocidas, y es este conjunto de valores de salida el que "dice" cómo trabaja el sistema bajo las condiciones fijadas de antemano.

A este conjunto de ecuaciones y suposiciones sobre el comportamiento del equipo es lo que se conoce como el modelo matemático del mismo.

3.3 EL MODELO MATEMATICO

Se puede establecer que el aspecto básico de lo que ocurre en el sistema

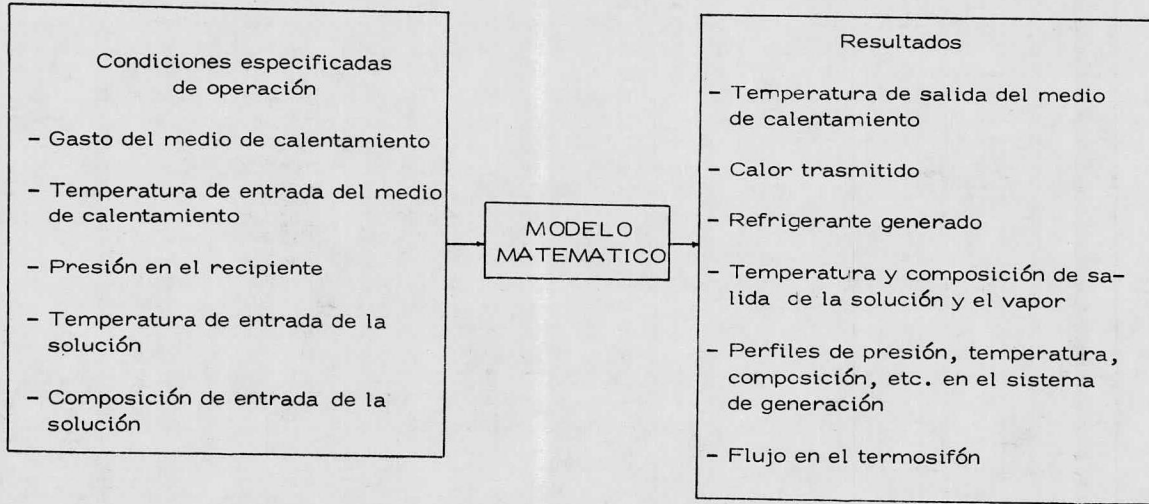


Fig. 3.3 Datos de entrada y Resultados del Modelo

de generación es el siguiente: circulación natural de la solución refrigerante a través del generador, en donde recibe energía calorífica que produce la formación de cierta cantidad de refrigerante en fase gaseosa. Por lo tanto, los fenómenos más importantes son:

- Flujo de fluidos
- Transferencia de calor

En consecuencia, las ecuaciones básicas que describen el funcionamiento del sistema son:

- Balance de materia
- Balance de energía total
- Balance de energía mecánica
- Ecuaciones de transferencia de energía

Con el objeto de facilitar la creación del modelo matemático del sistema de generación, se hace una división en cuatro partes:

- Brazo de alimentación
- Zona de calentamiento sensible
- Zona de dos fases
- Brazo de salida

En cada una de ellas se hacen las consideraciones necesarias, se plantean los balances fundamentales y se discute la metodología de solución. Posteriormente se integran las cuatro partes para constituir el modelo total.

A continuación se describen cada una de estas partes.

3.3.1 Brazo de alimentación

3.3.1.1 Consideraciones

No existe intercambio de calor con los alrededores

La temperatura y composición son homogéneas en este elemento

3.3.1.2 Ecuaciones

Por las consideraciones hechas, sólo es importante el balance de energía mecánica. Efectuando el balance entre los puntos A y B (Fig. 3.4) se obtiene:

$$-L_w - \underline{W} - \int_A^{P_B} \underline{v} dP - \Delta \left(\frac{u^2}{2g_c} + \frac{gz}{g_c} \right) = 0 \quad (3.1)$$

pero como

$$\underline{W} = 0 \quad (3.2)$$

$$u_A = 0 \quad (3.3)$$

$$-\Delta \frac{gz}{g_c} = \frac{gz_A}{g_c} - \frac{gz_0}{g_c} = \frac{g}{g_c} (z_A - z_0) = \frac{gh}{g_c} \quad (3.4)$$

y $\frac{V}{v}$ es constante (pues t y x lo son y se desprecia el efecto del cambio de presión), la ecuación (4.1) queda como

$$P_B = P_A + \frac{1}{v} \left(\frac{gh}{g_c} - \frac{u_B^2}{2g_c} - \underline{L}_W \right) \quad (3.5)$$

El trabajo perdido (\underline{L}_W) puede evaluarse de acuerdo con la ecuación de Fanning como

$$\underline{L}_W = \frac{f' u_B^2 L_{eq}}{2g_c D} \quad (3.6)$$

En virtud de las suposiciones hechas, se tienen las dos siguientes condiciones adicionales

$$t_B = t_A \quad (3.7)$$

$$x_B = x_A \quad (3.8)$$

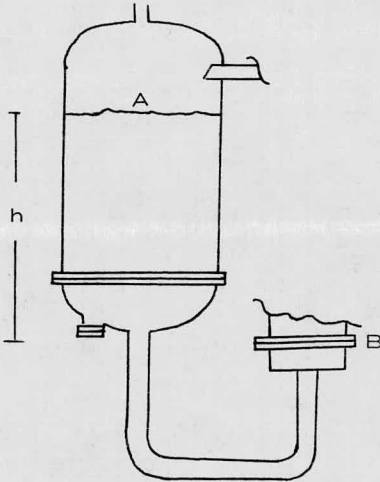


Fig. 3.4 Esquema del brazo de alimentación

3.3.1.3 Metodología de solución

Para resolver el componente formado por el brazo de alimentación se necesita encontrar las condiciones de la mezcla refrigerante-absorbente en la salida de dicho componente.

Lógicamente, los datos necesarios para realizar los cálculos son:

- Condiciones de la mezcla en el recipiente A (presión, temperatura y composición)
- Características físicas del componente (diámetros, longitudes, alturas, materiales, etc.)
- Gasto de la solución refrigerante (o una variable relacionada, como la velocidad)
- Propiedades termodinámicas y termofísicas de la mezcla considerada

Un diagrama que muestra la solución de este componente se representa en la Fig. 3.5

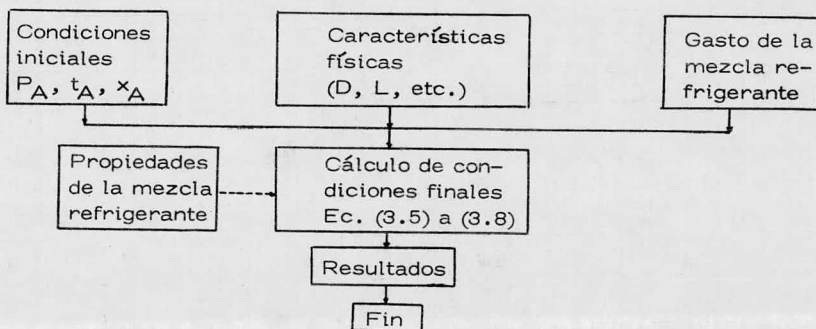


Fig. 3.5 Solución del brazo de alimentación

3.3.2 Zona de calentamiento sensible

3.3.2.1 Consideraciones

Los tubos son equivalentes

El calor perdido por el medio de calentamiento hacia los alrededores es despreciable

La composición permanece constante a lo largo de la zona considerada

Dado que las condiciones en esta zona varían de punto a punto (la temperatura como consecuencia del intercambio de calor y la presión debido al flujo y a las diferencias de altura) el método de solución consiste en dividir a la zona sensible en una serie de incrementos iguales de longitud Δz , en los cuales se consideran propiedades promedio y en ellos se plantean las diferentes ecuaciones.

Se establece la siguiente convención: dado el intervalo i , las propiedades i -ésimas son las del final del intervalo

3.3.2.2 Ecuaciones

Las propiedades a la entrada del generador (intervalo 1) son iguales a las de salida del brazo de alimentación, a excepción de la velocidad, que de acuerdo a un balance de masa puede calcularse como

$$\mu_0 = \frac{\mu_B S_B}{N_T S_T} \quad (3.9)$$

Si se consideran las Fig. 3.6 y 3.7 se pueden establecer las siguientes ecuaciones

Balance de Masa

- Para la mezcla refrigerante-absorbente

$$\omega_{i-1} = \omega_i = \omega_T \quad (3.10)$$

de la cual se obtiene

$$\mu_i = \frac{\mu_{i-1} \rho_{i-1}}{\rho_i} \quad (3.11)$$

- Para el fluido de calentamiento

$$\omega_{c,i-1} = \omega_{c,i} = \omega_c \quad (3.12)$$

Balance de Energía

- Mezcla refrigerante-absorbente

$$\left(H + \frac{\mu^2}{2g_c} + \frac{gZ}{g_c} \right)_{i-1} \omega_{i-1} - \left(H + \frac{\mu^2}{2g_c} + \frac{gZ}{g_c} \right)_i \omega_i + Q_i - W_i = 0 \quad (3.13)$$

considerando que

$$W_i = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{\mu_{i-1}^2}{2g_c} - \frac{\mu_i^2}{2g_c} \approx 0 \quad (3.15)$$

$$\frac{gZ_i}{g_c} - \frac{gZ_{i-1}}{g_c} = \frac{g \Delta Z_i}{g_c} \quad \text{puede despreciarse con respecto a los otros términos} \quad (3.16)$$

la ecuación (3.13) puede reducirse, con ayuda de (3.10), a

$$Q_i = \omega_T (H_i - H_{i-1}) \quad (3.17)$$

- Fluido de calentamiento

De una manera análoga a la anterior se llega a

$$Q_c = \omega_c (H_{c_{i-1}} - H_{c_i}) \quad (3.18)$$

Balance de Energía Mecánica

Sólo se necesita para el fluido interno y se tiene

$$-L_{w_i} - W_i - \int_{P_{i-1}}^{P_i} \frac{V}{\rho_i} dP - \Delta \left(\frac{u^2}{2g_c} + \frac{gZ}{g_c} \right) = 0 \quad (3.19)$$

aprovechando las condiciones discutidas anteriormente y considerando los siguientes valores promedio

$$V_{mi} = \frac{V_{i-1} + V_i}{2} \quad (3.20)$$

$$u_{mi} = \frac{u_{i-1} + u_i}{2} \quad (3.21)$$

la ecuación (3.19) se reduce a

$$P_i = P_{i-1} + \frac{1}{V_{mi}} \left(-L_{w_i} - \frac{g \Delta Z}{g_c} \right) \quad (3.22)$$

en donde L_{w_i} puede calcularse de acuerdo a Fanning como

$$L_{w_c} = \frac{f u_{mi} L_{eq_i}}{2g_c D_T} \quad (3.23)$$

Ecuaciones de Transferencia de Energía

$$Q_i = U_i A_i \text{LMTD}_i \quad (3.24)$$

$$\text{LMTD} = \frac{(T_i - t_i) - (T_{i+1} - t_{i+1})}{\ln \frac{T_i - t_i}{T_{i+1} - t_{i+1}}} \quad (3.25)$$

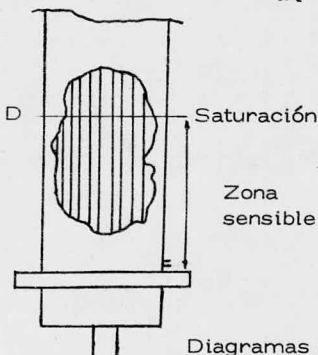


Fig 3.6

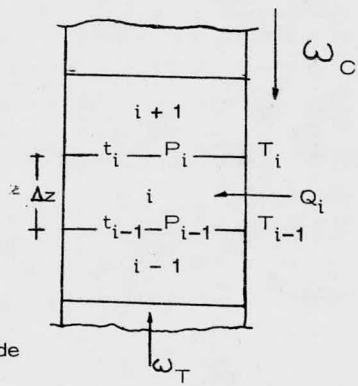


Fig 3.7

3.3.2.3 Metodología de solución

Para resolver la zona de calentamiento sensible de una manera rigurosa se necesita obtener el valor de las variables no conocidas en cada uno de los puntos de dicha zona. De acuerdo al planteamiento de considerar intervalos, aquí se requiere encontrar los valores de las siguientes variables en los extremos de cada intervalo:

- presión
- temperatura de la mezcla
- temperatura del medio de calentamiento

Cualquier otra propiedad que se requiera dependerá de éstas o de otras ya conocidas.

Lo que interesa básicamente es obtener las condiciones a las que se encuentran la mezcla refrigerante y el medio de calentamiento al final de dicha zona.

Los datos necesarios para realizar este proceso son:

- La geometría del sistema (# de tubos, diámetros, longitudes, materiales, etc.)
- El tamaño de los incrementos Δz
- Los valores de las siguientes variables al inicio del primer intervalo: temperatura, presión y gasto de la mezcla
temperatura y gasto del medio de calentamiento
- Propiedades termodinámicas y termofísicas de ambos fluidos

Para encontrar las condiciones finales de un intervalo a partir de las iniciales, se utiliza un procedimiento iterativo hasta encontrar un conjunto de variables (P_i , t_i , T_i) que satisfaga las ecuaciones que rigen en esta zona.

El final de la zona sensible está dado por la condición en la que la temperatura de la solución refrigerante sea igual (o ligeramente mayor) a la temperatura de saturación de la mezcla a la presión existente (punto D).

La metodología de cálculo se representa en la Fig. 3.8

3.3.3 Zona de dos fases

3.3.3.1 Consideraciones

Equilibrio termodinámico entre las fases líquida y vapor a la temperatura y presión del punto considerado

La mezcla a dos fases puede ser considerada como una pseudofase
Tubos equivalentes y ausencia de pérdidas de calor al exterior

En forma semejante a la zona de calentamiento sensible, esta sección también se divide en una serie de incrementos iguales de longitud $\Delta z'$ en los que se consideran propiedades promedio. Aquí resulta más imperativo hacerlo debido a que no sólo la temperatura y la presión varían a lo largo de la zona, -

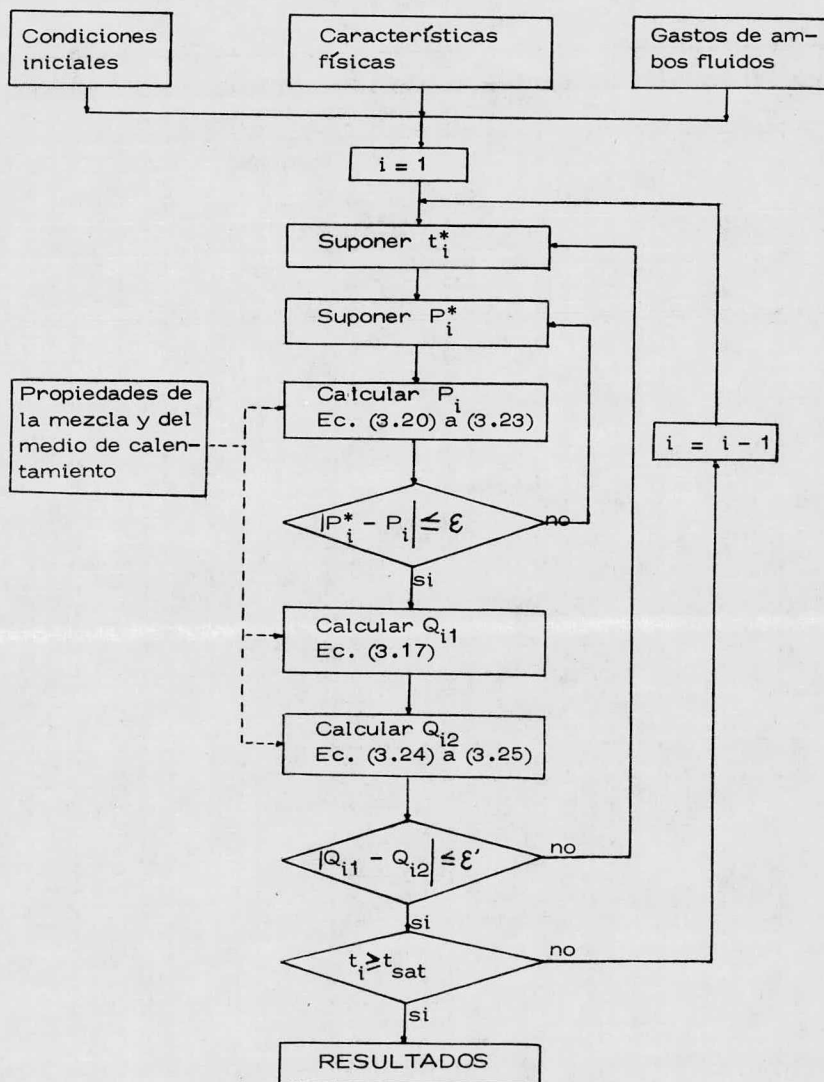


Fig. 3.8 Metodología de solución de la zona de calentamiento sensible

sino que también lo hacen la composición en ambas fases, la relación líquido - vapor, etc.

3.3.3.2 Ecuaciones

Tomando un intervalo j de la zona de dos fases se pueden establecer las siguientes ecuaciones

Balance de Masa

- Fluido interno

$$\omega_{j-1} = \omega_j = \omega_T \quad (3.26)$$

$$\omega_j = \omega_{v_j} + \omega_{L_j} \quad (3.27)$$

$$\omega_{v_{j-1}} y_{j-1} + \omega_{L_{j-1}} X_{j-1} = \omega_{v_j} y_j + \omega_{L_j} X_j \quad (3.28)$$

- Fluido externo

Rigen las mismas ecuaciones que en la zona de calentamiento sensible (Ec. (3.12))

Balance de Energía

- Fluido interno

Partiendo de una ecuación similar a la (3.13) y haciendo las mismas suposiciones que en la zona de calentamiento sensible se obtiene (Fig. 3.9 y 3.10)

$$Q_{trj} = \omega_T (H_j - H_{j-1}) \quad (3.29)$$

y puesto que

$$H_j = (1 - f_j) H_{L_j} + f_j H_{v_j} \quad (3.30)$$

entonces la ecuación (3.29) se puede escribir como

$$Q_{trj} = \omega_T \left\{ (1 - f_j) H_{L_j} + f_j H_{v_j} - (1 - f_{j-1}) H_{L_{j-1}} - f_{j-1} H_{v_{j-1}} \right\} \quad (3.31)$$

- Fluido externo

Rige la ecuación (3.18)

Balance de Energía Mecánica

Sólo se establece para el fluido interno. Partiendo de una ecuación similar a la ecuación (3.19) pero escrita en forma diferencial

$$-\delta \underline{L}_{w_{tr}} - \delta \underline{W} - \underline{V}_{tr} dP - d \left(\frac{u_{tr}^2}{2g_c} + \frac{gz}{g_c} \right) = 0 \quad (3.32)$$

y debido a que

$$\delta \underline{W} = 0 \quad (3.33)$$

se obtiene

$$-dP = \rho_{tr} \delta \underline{L}_{w_{tr}} + \rho_{tr} \frac{u_{tr} du_{tr}}{g_c} + \rho_{tr} \frac{g}{g_c} dz \quad (3.34)$$

Al integrarse esta última ecuación entre las condiciones $j-1$ y j se obtiene

$$P_j = P_{j-1} - \int_{\text{cond. } j-1}^{\text{cond. } j} \left(\rho_{tr} \delta \underline{L}_{w_{tr}} + \rho_{tr} \frac{u_{tr} du_{tr}}{g_c} + \rho_{tr} \frac{g}{g_c} dz \right) \quad (3.35)$$

La última ecuación es la ecuación fundamental del balance de energía mecánica en la zona de dos fases y la evaluación de los diversos términos que aparecen en la integral se realiza de acuerdo a los diferentes modelos de flujo a dos fases que se encuentran en la literatura (ver apéndice B)

Ecuaciones de Transferencia de Energía

$$Q_{tr,j} = U_{tr,j} A_j \text{LMTD}_j \quad (3.36)$$

$$\text{LMTD}_j = \frac{(T_j - t_j) - (T_{j-1} - t_{j-1})}{\ln \frac{T_j - t_{j-1}}{T_{j-1} - t_j}} \quad (3.37)$$

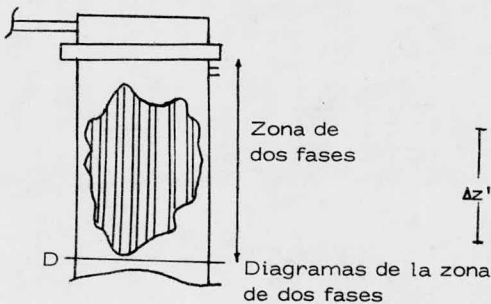


Fig. 3.9

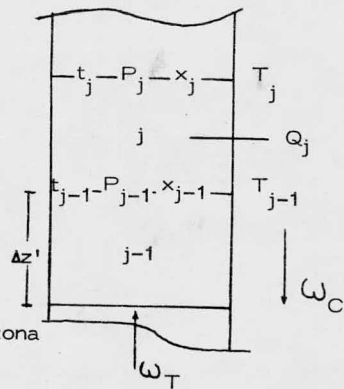


Fig. 3.10

3.3.3.3 Metodología de solución

Básicamente la metodología de solución es igual a la utilizada para la zona de calentamiento sensible. Sin embargo existe la necesidad de conocer la composición en ambas fases y la cantidad de cada una de ellas (relación L/V).

Dado que esta zona va desde el punto en donde la mezcla alcanza su temperatura de saturación hasta el final de los tubos, se prefiere especificar de antemano el número de intervalos en que se divide dicha zona y la longitud del intervalo se calcula como el cociente entre la zona disponible para dos fases y el número de intervalos.

$$\Delta Z' = \frac{L_{tp}}{N_{tp}} = \frac{L_T - L_{ss}}{N_{tp}} \quad (3.38)$$

El diagrama de solución para esta zona se encuentra representada en la Fig. 3.11

3.3.4 Brazo de Salida

3.3.4.1 Consideraciones

No existe intercambio de calor con los alrededores

La cantidad de vapor generada como consecuencia del "flasheo" es despreciable

3.3.4.2 Ecuaciones

Refiriéndose a la Fig. 3.12 y de acuerdo a las consideraciones hechas en el inciso anterior se tiene

$$t_E = t_D' \quad (3.39)$$

$$x_E = x_D' \quad (3.40)$$

$$y_E = y_D' \quad (3.41)$$

El único balance importante es el de energía mecánica que se reduce a

$$P_E = P_D' - \int_{\text{cond } D'}^{\text{cond } E} \left(f_{tp} \delta L w_{tp} + f_{tp} \frac{\mu_{tp}}{g_c} d\mu_{tp} \right) = P_D' - \int_{\text{cond } D'}^{\text{cond } E} \left(\frac{\partial P}{\partial L} \right)_{tp} dL \quad (3.42)$$

en donde los términos dentro de la integral se evalúan de acuerdo a los diferentes modelos propuestos para flujo en dos fases (Apéndice B).

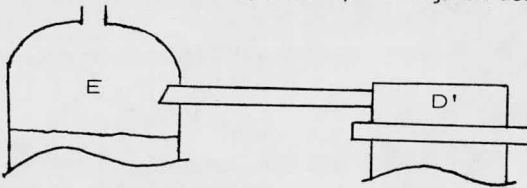


Fig. 3.12 Brazo de salida

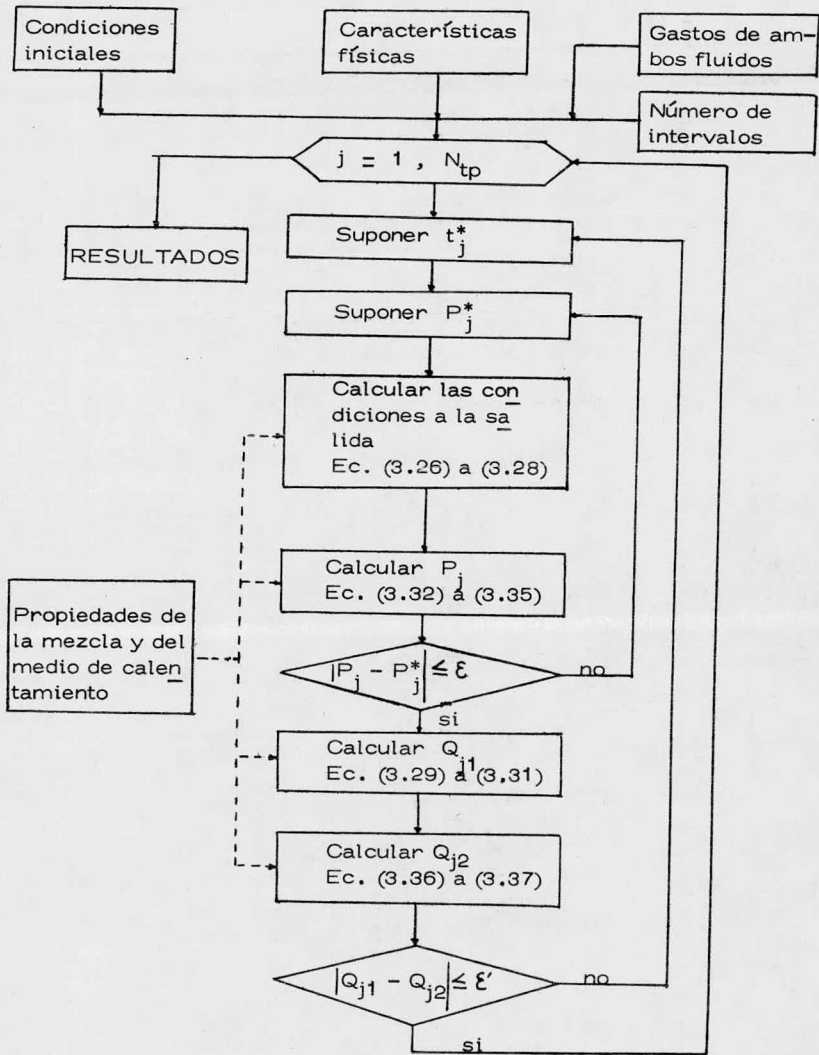


Fig. 3.11 Metodología de solución para la zona de dos fases

3.3.4.3 Metodología de solución

El objetivo de resolver el brazo de salida consiste en encontrar las condiciones a las que se encuentra la mezcla bifásica refrigerante en la salida de dicho componente. Los datos necesarios para realizar lo anterior son:

- Condiciones de la mezcla en el inicio del brazo de salida
- Características físicas de dicho componente
- Gasto total de la mezcla
- Propiedades termodinámicas y termofísicas de la solución

La metodología a seguir se muestra en la Fig. 3.13

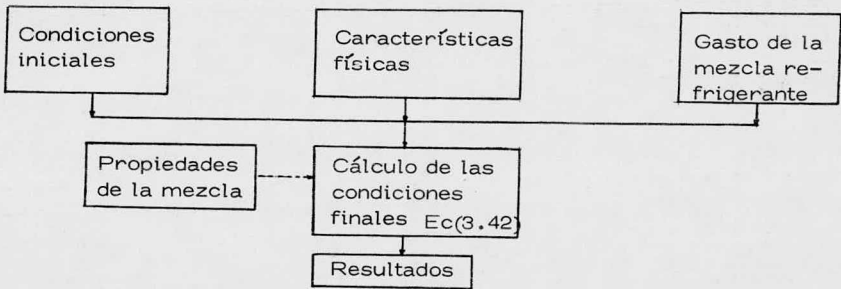


Fig. 3.13 Solución del brazo de salida

3.3.5 Integración del Modelo Total

En los incisos anteriores se han discutido, como entidades autónomas y separadas, cada una de las cuatro partes en las que se ha dividido el sistema de generación. En cada una de ellas se ha mencionado cuales son los datos que se necesitan para la resolución del modelo y se ha indicado que información se obtiene de la misma.

Sin embargo dentro del equipo real dichas partes no son independientes, sino que interaccionan entre sí y se hallan colocadas en un orden definido. Por tanto, ahora es necesario integrar las cuatro partes en un modelo total para que represente al sistema de generación como un todo.

La integración consiste en la solución secuencial de las partes ya mencionadas, de manera que la información que proporciona cada una de ellas sirva como entrada al componente que le sigue.

Es preciso contar con ciertos datos iniciales para la solución del sistema de generación, y éstos pueden resumirse como:

- Todo lo referente a la geometría del equipo
- Condiciones de operación:

Presión en el recipiente principal
 Temperatura de la solución entrante al generador
 Composición de la solución entrante al generador
 Información sobre el medio de calentamiento:
 Naturaleza
 Gasto
 Temperatura de entrada

También es necesario disponer de los medios adecuados para predecir - las propiedades termodinámicas y termofísicas de la mezcla refrigerante en - cuestión.

El modelo es capaz de calcular, a partir de los datos anteriores, el funcionamiento del equipo. Sin embargo, debido a que las ecuaciones que describen el sistema son no-lineales y además están fuertemente relacionadas entre sí (Ej. el calor transmitido depende del flujo y viceversa), no es posible llevar a cabo una solución analítica y debe optarse por una solución numérica que es necesariamente iterativa.

De la discusión de cada una de las partes puede apreciarse que siempre - es necesario contar con el gasto (o una variable relacionada a éste, como la velocidad) de la mezcla refrigerante para la solución del sistema. Sin embargo, dado que el conocer dicho gasto es uno de los objetivos principales del modelo, no se cuenta con dicho valor. Se ha optado entonces por crear un método iterativo en el cual se suponga inicialmente el valor de dicha variable.

En la discusión de la zona de calentamiento sensible se indica que uno de los datos necesarios para su resolución es la temperatura del medio de calentamiento a la entrada del intervalo uno, que corresponde a la temperatura de salida del medio de calentamiento y que lógicamente tampoco se tiene, pues es - función del calor que se transmite en el sistema. Por lo tanto, también es necesario suponer el valor inicial (de salida) de esta variable.

Con estas dos suposiciones y los datos suministrados, es posible resolver en forma secuencial las cuatro partes individuales del sistema y por tanto el - modelo global. El valor de las dos variables supuestas es el adecuado si se cumplen simultáneamente las siguientes condiciones:

El valor de la temperatura de entrada calculado del medio de calentamiento (al final del último intervalo en la zona de dos fases) es igual al valor de la misma variable que se ha proporcionado como dato.

El valor de la presión calculado al final del brazo de salida (P_e) es igual a la presión en el recipiente principal, la cual ha sido proporcionada como dato (P_A). Esto se debe de cumplir ya que P_A y P_e se refieren al mismo valor, lo cual es consecuencia de la forma de funcionamiento del equipo, en el cual la circulación de la mezcla es de tipo natural o sea debida a la diferencia de densidades entre los brazos del sistema.

Cuando se satisfacen estas dos condiciones simultáneamente, los valores de gasto y temperatura de salida supuestos son los correctos y todos los térmi

nos calculados a partir de estos valores, junto con los datos, representan la operación del sistema.

El método empleado en la integración del modelo total se encuentra en forma de diagrama en la Fig. 3.14

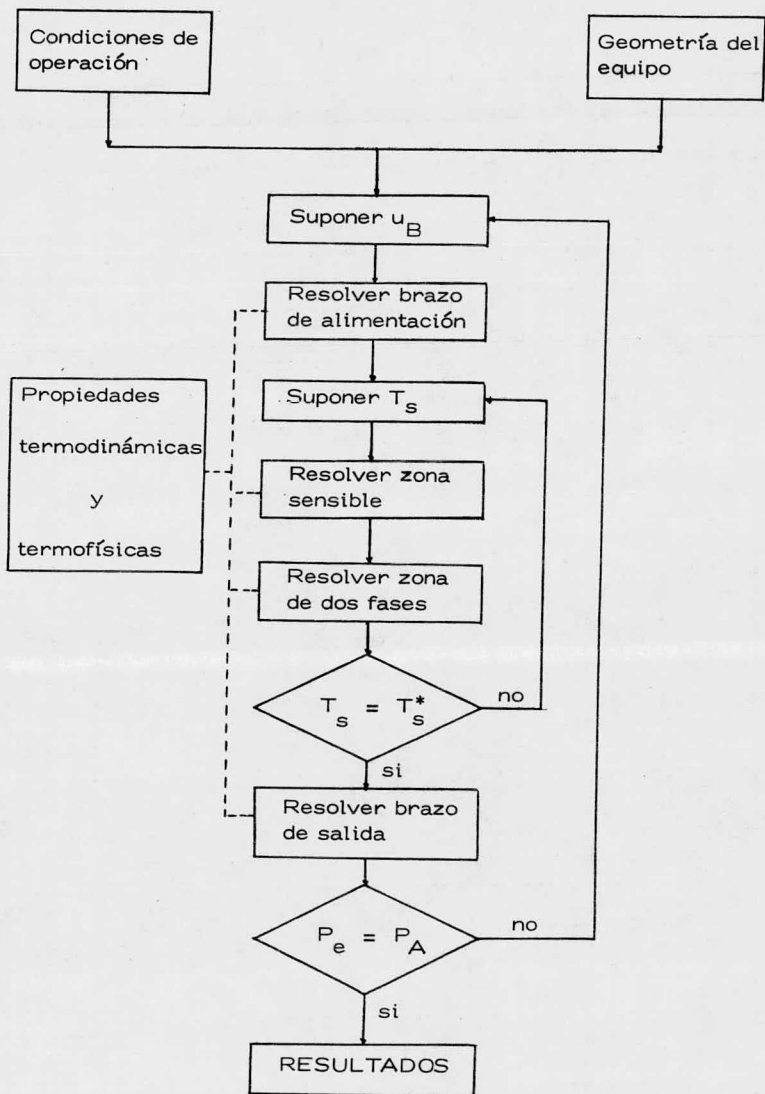


Fig. 3.14 Metodología de Solución Global

SIMBOLOGIA EMPLEADA (Capítulo 3)

A	Area de transferencia de calor
D	Diámetro
f	Fracción vapor (flujo másico de vapor / flujo total)
f'	Factor de fricción de Darcy
g	Aceleración de la Gravedad
g_c	Constante dimensional
h	Diferencia de alturas
H	Entalpías
L	Longitud
L_w	Trabajo perdido
LMTD	Diferencia de temperaturas media logarítmica
NT	Número de tubos
P	Presión
Q	Calor transferido (por unidad de tiempo)
S	Area de flujo
t	Temperatura de la mezcla refrigerante-absorbente
T	Temperatura del medio de calentamiento
u	Velocidad de la mezcla
U	Coefficiente total de transferencia de calor
V	Volumen
W	Trabajo
x	Fracción de refrigerante en la mezcla líquida
y	Fracción de refrigerante en la mezcla vapor
z	Altura
\dot{W}	Gasto de la mezcla
\dot{W}_c	Gasto del medio de calentamiento

Subíndices

-	Propiedad específica (molar o másica)
eq	Equivalente
i	Referente al "i-ésimo" intervalo
j	Referente al "j-ésimo" intervalo
L	De la fase líquida
m	Propiedad media
SS	Zona sensible
T	Tubos
TP	Zona de dos fases
V	De la fase vapor

CAPITULO 4.- PREDICCIÓN DE PROPIEDADES

En el presente capítulo se hace un estudio de la predicción de propiedades termodinámicas y termofísicas de dos sistemas particulares. En primer lugar se estudia la predicción de propiedades termodinámicas para la solución amoníaco-agua, partiendo de las expresiones de energía libre propuestas por S.C. G. Schulz. Se deducen expresiones para las demás propiedades mencionando los algoritmos de solución y se comparan los resultados obtenidos con las ecuaciones deducidas y los valores experimentales reportados en la literatura. A continuación se proponen ecuaciones para la predicción de las propiedades termofísicas de la citada solución. Por último se mencionan expresiones para la predicción de las propiedades termofísicas del segundo sistema, agua.

INTRODUCCION

En el capítulo anterior se hace mención de la necesidad de contar en el modelo matemático del sistema de generación con medios para predecir las propiedades termodinámicas y termofísicas de la mezcla refrigerante-absorbente y del medio de calentamiento, sin referirse a la identidad de estas últimas de modo particular.

En este punto se realiza el estudio de la predicción de tales propiedades, con el objeto de incorporarlas al modelo matemático, considerando dos sistemas muy particulares que son:

- solución amoníaco-agua como mezcla refrigerante-absorbente
- agua como medio de calentamiento

La mezcla amoníaco-agua ha sido seleccionada en virtud de que en el CIM existe la necesidad de contar con medios para predecir las propiedades termodinámicas de dicha mezcla por la afinidad con los trabajos que allí se desarrollan.⁽ⁱⁱ⁾ Se ha pensado en la utilidad de contar con programas implementados en la computadora que sirvan para proporcionar la información anterior de modo adecuado y rápido.

Se ha seleccionado al agua como medio de calentamiento porque el poder utilizar como fuente calorífica a un fluido (específicamente agua) calentado previamente en colectores solares, es la situación que más interesa en el Centro de Materiales.

4.1 PROPIEDADES TERMODINAMICAS DE LA SOLUCION AMONIACO-AGUA

Del análisis de las ecuaciones desarrolladas en el capítulo anterior se -

concluye que es necesario contar en el modelo con la siguiente información termodinámica:

- Equilibrio líquido-vapor
- Entalpías (ambas fases)
- Volúmenes específicos (ambas fases)
- Capacidades caloríficas (ambas fases)

todas en función de la presión, temperatura y composición de la mezcla - refrigerante-absorbente.

Para los diversos proyectos que se desarrollan en el CIM es necesario - contar además con la Entropía de ambas fases como función de las mismas variables.

Por lo tanto, se considera que es conveniente contar con medios a partir de los cuales se pueda calcular de modo confiable cualquier propiedad termodinámica, ya sea de la fase líquida o vapor, como función de la presión, temperatura y composición.

En la Literatura se encuentra abundante información sobre ciertas propiedades termodinámicas (específicamente lo referente al equilibrio líquido-vapor y entalpías de ambas fases) de esta mezcla⁽¹⁾. Sin embargo, dicha información tiene el gran inconveniente de encontrarse ya sea en diagramas o en tablas de - valores, lo que es poco apropiado para su implementación como programas en una computadora.

Existen por otra parte diversas ecuaciones⁽²⁾ que proporcionan información sobre las mismas propiedades termodinámicas, pero que tienen la limitante de poderse aplicar en rangos bastante reducidos de valores de las variables independientes.

Para salvar estas dificultades, se han adoptado las ecuaciones de energía libre propuestas por S.C.G. Schulz⁽³⁾ para el sistema amoníaco-agua (para el - desarrollo de estas expresiones referirse al Apéndice A).

En el presente trabajo se derivan, a partir de dichas ecuaciones, expresiones para el cálculo de las propiedades termodinámicas que interesan, se presentan algoritmos para el cálculo sistemático de las mismas y se comparan los valores calculados con los valores reportados en la Literatura.

A continuación se presenta el procedimiento seguido para la predicción de propiedades termodinámicas.

4.1.1 Expresiones de Energía Libre propuestas por S.C.G. Schulz

Schulz obtiene las siguientes expresiones, en forma adimensional, para la energía libre de Gibbs en función de la presión, temperatura y composición.

Fase vapor

$$G_R^V = (1-y) G_{RH_2O}^V + y G_{RNH_3}^V + \theta(1-y) \ln(1-y) + \theta y \ln y \quad (4.1)$$

Fase líquida

$$G_R^L = (1-x) G_{RH_2O}^L + x G_{RNH_3}^L + \theta(1-x) \ln(1-x) + \theta x \ln x + \left[F_1 + F_2 \pi + \frac{F_3 + F_4 \pi}{\theta} + \frac{F_5 + F_6 \pi}{\theta^2} + \left(F_7 + F_8 \pi + \frac{F_9 + F_{10} \pi}{\theta} \right) (2x-1) \right] x(1-x) \quad (4.2)$$

Componentes puros

$$G_{R_i}^V = H_0^V - \theta S_0^V + \int_{\theta_0}^{\theta} c_{R_i}^V d\theta - \theta \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{c_{R_i}^V}{\theta} d\theta + \theta \ln \frac{\pi}{\pi_0} + A_1 \theta (\pi - \pi_0) + A_2 (\pi - \pi_0) + A_3 \left(\frac{\pi}{\theta} + \frac{\theta \pi_0}{\theta_0^2} - \frac{2\pi_0}{\theta_0} \right) \quad (4.3)$$

$$c_{R_i}^V = B_1 + B_2 \theta + B_3 \theta^2 + B_4 \theta^3 \quad (4.4)$$

$$G_{R_i}^L = H_0^L - \theta S_0^L + \int_{\theta_0}^{\theta} c_{R_i}^L d\theta - \theta \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{c_{R_i}^L}{\theta} d\theta + C_1 (\pi - \pi_0) + \frac{C_2}{2} (\pi - \pi_0) + C_3 \theta (\pi - \pi_0) + C_4 \theta^2 (\pi - \pi_0) \quad (4.5)$$

$$c_{R_i}^L = D_1 + D_2 \theta \quad (4.6)$$

donde:

$$\theta = \frac{I}{T_S} \quad (4.7)$$

$$\pi = \frac{P}{P_S} \quad (4.8)$$

$$G_R^j = \frac{G^j}{RT_S} \quad (4.9)$$

En la tabla (4.1) se muestran los valores de todas las constantes que intervienen en las ecuaciones anteriores.

4.1.2 Equilibrio Líquido - Vapor

De acuerdo a lo establecido por la Termodinámica, el equilibrio entre dos fases (I y II) se alcanza cuando y únicamente cuando se cumple que

$$\bar{G}_i^I = \bar{G}_i^{II} \quad \text{para toda } i \quad (4.10)$$

o sea que los potenciales químicos para cada componente son iguales en ambas fases.

De acuerdo a lo anterior, el equilibrio líquido-vapor para las soluciones de amoníaco-agua se establece cuando el potencial químico del amoníaco en fase vapor es igual al potencial químico del amoníaco en fase líquida y lo mismo para el agua.

TABLA 4.1 Constantes de las Expresiones de Energía Libre

	AGUA	AMONIACO
A ₁	-0.049731	-0.159379
A ₂	1.04617	1.63843
A ₃	-5.20084	-4.50079
B ₁	4.14441	4.32139
B ₂	-0.140368	-0.462406
B ₃	0.040182	0.194902
B ₄	-0.001673	-0.014597
C ₁	0.0242044	0.0386536
C ₂	-0.00000458	-0.00011033
C ₃	-0.00263238	-0.0125573
C ₄	0.00059429	0.00371324
D ₁	7.72211	6.18881
D ₂	0.393864	1.26706
θ ₀	5.0699	3.2515
π ₀	3.0000	2.1410
H ₀ ^v	60.744	26.476
H ₀ ^l	21.849	5.1289
S ₀ ^v	13.403	8.2657
S ₀ ^l	5.7314	1.7003

 $T_s = 100^\circ \text{K}$
 $P_s = 10 \text{ bar}$

F ₁	18.1901
F ₂	-0.121603
F ₃	-99.5037
F ₄	0.672809
F ₅	84.4263
F ₆	-1.02601
F ₇	2.43329
F ₈	0.026458
F ₉	-1.28324
F ₁₀	-0.106125

Por lo tanto, para la predicción del equilibrio líquido-vapor, el primer paso es la obtención de los potenciales químicos de todos los componentes en cada una de las fases. Para esto se comienza con la definición de Potencial Químico dada por:

$$\bar{G}_R^j = \mu_i^j = \left(\frac{\partial G^j}{\partial n_i} \right)_{P, T, n_{R \neq i}} \quad (4.11)$$

que expresa que el potencial químico del componente i en la fase j es la energía libre molar parcial de dicho componente en la fase considerada.

Si se reorganiza la ecuación (4.11) para obtener potenciales químicos adimensionales, se llega a

$$\mu_{R,i}^j = \frac{\mu_i^j}{RT} = \left(\frac{\partial n_T \bar{G}_R^j}{\partial n_i} \right)_{T, \theta, n_{R \neq i}} \quad (4.12)$$

que es la ecuación que se empleará para el cálculo de dichos potenciales adimensionales.

4.1.2.1 Fase vapor

De la ecuación (4.1) y observando que

$$n_T y = n_{NH_3} \quad (4.13)$$

$$n_T (1-y) = n_{H_2O} \quad (4.14)$$

$$n_T = n_{NH_3} + n_{H_2O} \quad (4.15)$$

se tiene que:

$$n_T \bar{G}_R^V = n_{H_2O} \bar{G}_{R,H_2O}^V + n_{NH_3} \bar{G}_{R,NH_3}^V + n_{H_2O} \theta \ln \frac{n_{H_2O}}{n_{H_2O} + n_{NH_3}} + n_{NH_3} \theta \ln \frac{n_{NH_3}}{n_{H_2O} + n_{NH_3}} \quad (4.16)$$

Si se usa (4.12) en combinación con (4.16) se obtiene que

$$\mu_{R,NH_3}^V = \bar{G}_{R,NH_3}^V + \theta \ln y \quad (4.17)$$

$$\mu_{R,H_2O}^V = \bar{G}_{R,H_2O}^V + \theta \ln (1-y) \quad (4.18)$$

4.1.2.2 Fase líquida

A partir de la ecuación (4.2) y con argumentos semejantes a los de las ecuaciones (4.13) a (4.15) se obtiene:

$$n_T \bar{G}_R^L = n_{H_2O} \bar{G}_{R,H_2O}^L + n_{NH_3} \bar{G}_{R,NH_3}^L + n_{H_2O} \theta \ln \frac{n_{H_2O}}{n_{H_2O} + n_{NH_3}} + n_{NH_3} \theta \ln \frac{n_{NH_3}}{n_{H_2O} + n_{NH_3}} + \left[F_1 + F_2 \Pi + \frac{F_3 + F_4 \Pi}{\theta} + \frac{F_5 + F_6 \Pi}{\theta^2} + \left(F_7 + F_8 \Pi + \frac{F_9 + F_{10} \Pi}{\theta} \right) \left(\frac{2 n_{NH_3}}{n_{H_2O} + n_{NH_3}} - 1 \right) \right] \frac{n_{NH_3} n_{H_2O}}{n_{H_2O} + n_{NH_3}} \quad (4.19)$$

Si se usa (4.12) en combinación con (4.19) se obtiene

$$\mu_{RNH_3}^L = G_{RNH_3}^L + \theta \ln x + (1-x)^2 [\alpha + \beta(4x-1)] \quad (4.20)$$

$$\mu_{RNH_2O}^L = G_{RNH_2O}^L + \theta \ln(1-x) + x^2 [\alpha + \beta(4x-3)] \quad (4.21)$$

en donde

$$\alpha = F_1 + F_2 \Pi + \frac{F_3 + F_4 \Pi}{\theta} + \frac{F_5 + F_6 \Pi}{\theta^2} \quad (4.22)$$

$$\beta = F_7 + F_8 \Pi + \frac{F_9 + F_{10} \Pi}{\theta} \quad (4.23)$$

Las ecuaciones (4.17), (4.18), (4.20) y (4.21) son las fundamentales para el cálculo del equilibrio, como se describe a continuación.

Casos considerados

Para la determinación del equilibrio se cuenta con cuatro variables independientes que son: Presión, temperatura, composición de la fase líquida y composición de la fase vapor (P , T , x , y).

De acuerdo a la regla de las fases de Gibbs, el número de grados de libertad que tiene un sistema formado por dos componentes en donde coexisten dos fases en equilibrio viene dado por:

$$F = C - P + 2 = 2 - 2 + 2 = 2 \quad (4.24)$$

o sea que se tienen que fijar los valores de dos de las cuatro variables independientes para describir unívocamente el equilibrio entre ambas fases (los otros dos valores se obtienen al resolver el problema).

De acuerdo a las variables independientes que se tienen en este caso, existen seis posibles combinaciones para fijar el valor de dos de ellas, a saber:

- P , T
- P , x
- P , y
- T , x
- T , y
- x , y

En el presente estudio, por tratarse de los casos que interesan en el modelo matemático, así como por ser las situaciones más útiles que se presentan en cualquier predicción de equilibrio al trabajar con el sistema amoníaco-agua, puesto que los casos en donde interviene la composición del vapor "y" como variable independiente dan por lo general resultados poco precisos, se han considerado las situaciones de equilibrio en donde se tienen como variables independientes conocidas a las siguientes:

- Presión y temperatura (P , T)
- Presión y composición de la fase líquida (P , x)
- Temperatura y composición de la fase líquida (T , x)

La metodología para resolver cada uno de los tres casos anteriores se explica a continuación.

En primer lugar, de acuerdo a la ecuación (4.10), la condición básica de equilibrio es la igualdad de potenciales químicos. Efectuando esto para el amoníaco y el agua se llega a:

$$\mathcal{M}_{\text{RNH}_3}^{\text{V}} = \mathcal{M}_{\text{RNH}_3}^{\text{L}} \quad (4.25)$$

$$\mathcal{M}_{\text{RH}_2\text{O}}^{\text{V}} = \mathcal{M}_{\text{RH}_2\text{O}}^{\text{L}} \quad (4.26)$$

usando las ecuaciones (4.1) a (4.6) y (4.17) a (4.23) se llega a que:

$$\begin{aligned} \ln y = & \left[M_1 + M_2 \Pi + M_3 \Pi^2 \right] \frac{1}{\theta} + \left[M_4 + M_5 \Pi - \ln \Pi + \ln x \right] + \left[M_6 + M_7 \Pi \right] \theta \\ & + M_8 \theta^2 + M_9 \theta^3 + M_{10} \ln \theta + M_{11} \frac{\Pi}{\theta^2} + \frac{F_1 (1-x)^2}{\theta} + \frac{F_2 (1-x)^2 \Pi}{\theta} + \\ & \frac{F_3 (1-x)^2}{\theta^2} + \frac{F_4 (1-x)^2 \Pi}{\theta^2} + \frac{F_5 (1-x)^2}{\theta^3} + \frac{F_6 (1-x)^2 \Pi}{\theta^3} + \frac{F_7 (1-x)^2 (4x-1)}{\theta} + \\ & \frac{F_8 (1-x)^2 (4x-1) \Pi}{\theta} + \frac{F_9 (1-x)^2 (4x-1)}{\theta^2} + \frac{F_{10} (1-x)^2 (4x-1) \Pi}{\theta^2} \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \ln(1-y) = & \left[N_1 + N_2 \Pi + N_3 \Pi^2 \right] \frac{1}{\theta} + \left[N_4 + N_5 \Pi - \ln \Pi + \ln(1-x) \right] + \\ & \left| N_6 + N_7 \Pi \right| \theta + N_8 \theta^2 + N_9 \theta^3 + N_{10} \ln \theta + N_{11} \frac{\Pi}{\theta^2} + \frac{F_1 x^2}{\theta} + \frac{F_2 x^2 \Pi}{\theta} \\ & + \frac{F_3 x^2}{\theta^2} + \frac{F_4 x^2 \Pi}{\theta^2} + \frac{F_5 x^2}{\theta^3} + \frac{F_6 x^2 \Pi}{\theta^3} + \frac{F_7 x^2 (4x-3)}{\theta} + \frac{F_8 x^2 (4x-3) \Pi}{\theta} \\ & + \frac{F_9 x^2 (4x-3)}{\theta^2} + \frac{F_{10} x^2 (4x-3) \Pi}{\theta^2} \end{aligned} \quad (4.28)$$

en donde

$$M_1, N_1 = H_0^{\text{L}} - H_0^{\text{V}} + \left((B_1 - D_1 + \theta_0 \left(\frac{B_2 - D_2}{2} + \theta_0 \left(\frac{B_3}{3} + \frac{B_4 \theta_0}{4} \right) \right) \right) \theta_0 - \left(C_1 - A_2 + \frac{C_2 \Pi_0}{2} - \frac{2A_3}{\theta_0} \right) \quad (4.29)$$

$$M_2, N_2 = C_1 - A_2 \quad (4.30)$$

$$M_3, N_3 = \frac{C_2}{2} \quad (4.31)$$

$$M_4, N_4 = S_0^{\text{V}} - S_0^{\text{L}} + (A_1 - \theta_1) (1 + \ln \theta_0) + (D_2 - B_2 - \theta_0 \left(\frac{B_3}{2} + \frac{B_4 \theta_0}{3} \right)) \theta_0 + \ln \Pi_0 + \left(A_1 - C_3 - \frac{A_3}{\theta_0^2} \right) \Pi_0 \quad (4.32)$$

$$M_5, N_5 = C_3 - A_1 \quad (4.33)$$

$$M_6, N_6 = \frac{B_2 - D_2}{2} - C_4 \Pi_0 \quad (4.34)$$

$$M_7, N_7 = C_4 \quad (4.35)$$

$$M_8, N_8 = \frac{B_3}{6} \quad (4.36)$$

$$M_9, N_9 = \frac{B_4}{12} \quad (4.37)$$

$$M_{10}, N_{10} = B_1 - D_1 \quad (4.38)$$

$$M_{11}, N_{11} = -A_3 \quad (4.39)$$

refiriéndose los valores de las constantes a las del amoníaco si se usa la letra M y a las del agua si se usa N.

Las ecuaciones (4.27) y (4.28) son las básicas para el desarrollo de los algoritmos para los tres diferentes casos considerados.

Presión y composición de la fase líquida (P, x) conocidas

El objetivo es encontrar la temperatura de saturación de una mezcla líquida de composición x, que se encuentra a una presión P. También se desea hallar la composición del vapor en equilibrio con el mencionado líquido.

Puesto que se conocen los valores de P y x (π y x), las ecuaciones (4.27) y (4.28) pueden reescribirse como:

$$\ln y = E_0 + E_1 \ln \theta + \frac{E_2}{\theta} + \frac{E_3}{\theta^2} + \frac{E_4}{\theta^3} + E_5 \theta + E_6 \theta^2 + E_7 \theta^3 \quad (4.40)$$

$$\ln(1-y) = G_0 + G_1 \ln \theta + \frac{G_2}{\theta} + \frac{G_3}{\theta^2} + \frac{G_4}{\theta^3} + G_5 \theta + G_6 \theta^2 + G_7 \theta^3 \quad (4.41)$$

en donde

$$E_0 = M_4 + M_5 \pi - \ln \pi + \ln x \quad (4.42)$$

$$E_1 = M_{10} \quad (4.43)$$

$$E_2 = M_1 + M_2 \pi + M_3 \pi^2 + (F_1 + F_2 \pi + (F_7 + F_8 \pi)(4x-1))(1-x)^2 \quad (4.44)$$

$$E_3 = M_{11} \pi + (F_3 + F_4 \pi + (F_9 + F_{10} \pi)(4x-1))(1-x)^2 \quad (4.45)$$

$$E_4 = (F_5 + F_6 \pi)(1-x)^2 \quad (4.46)$$

$$E_5 = M_6 + M_7 \pi \quad (4.47)$$

$$E_6 = M_8 \quad (4.48)$$

$$E_7 = M_9 \quad (4.49)$$

$$G_0 = N_4 + N_5 \pi - \ln \pi + \ln(1-x) \quad (4.50)$$

$$G_1 = N_{10} \quad (4.51)$$

$$G_2 = N_1 + N_2 \pi + N_3 \pi^2 + (F_1 + F_2 \pi + (F_7 + F_8 \pi)(4x-3))x^2 \quad (4.52)$$

$$G_3 = N_{11} \pi + (F_3 + F_4 \pi + (F_9 + F_{10} \pi)(4x-3))x^2 \quad (4.53)$$

$$G_4 = (F_5 + F_6 \pi) x^2 \quad (4.54)$$

$$G_5 = N_6 + N_7 \pi \quad (4.55)$$

$$G_6 = N_8 \quad (4.56)$$

$$G_7 = N_9 \quad (4.57)$$

En las ecuaciones (4.40) y (4.41) se tienen dos incógnitas θ , y. Recordando que cuando se llegue a los valores correctos de dichas variables debe su ceder que

$$\sum y_i = y + (1-y) = 1 \quad (4.58)$$

es posible eliminar a "y" entre ambas ecuaciones y de este modo se obtiene

$$H(\theta) = E(\theta) - G(\theta) = 0 \quad (4.59)$$

en donde

$$E(\theta) = \text{EXP} \left(E_0 + E_1 \theta + \frac{E_2}{\theta} + \frac{E_3}{\theta^2} + \frac{E_4}{\theta^3} + E_5 \theta + E_6 \theta^2 + E_7 \theta^3 \right) \quad (4.60)$$

$$G(\theta) = 1 - \text{EXP} \left(G_0 + G_1 \theta + \frac{G_2}{\theta} + \frac{G_3}{\theta^2} + \frac{G_4}{\theta^3} + G_5 \theta + G_6 \theta^2 + G_7 \theta^3 \right) \quad (4.61)$$

Se ha reducido el problema a encontrar un valor de θ que se denominará θ_s (Temperatura de saturación adimensional) que satisfaga la ecuación (4.59), o sea, que cumpla

$$H(\theta_s) = 0 \quad (4.62)$$

En vista de la naturaleza exponencial de dicha ecuación, no se intenta una solución analítica de la misma, sino que se procede a una solución numérica de tipo iterativo utilizando el método de Newton-Raphson. En vista de la necesidad de contar con la derivada de la función H , hay que calcularla y resulta

$$\begin{aligned} H'(\theta) &= E'(\theta) - G'(\theta) \\ H'(\theta) &= E(\theta) \left(\frac{E_1}{\theta} - \frac{E_2}{\theta^2} - \frac{2E_3}{\theta^3} - \frac{3E_4}{\theta^4} + E_5 + 2E_6\theta + 3E_7\theta^2 \right) + \\ &\quad \left(1 - G(\theta) \right) \left(\frac{G_1}{\theta} - \frac{G_2}{\theta^2} - \frac{2G_3}{\theta^3} - \frac{3G_4}{\theta^4} + G_5 + 2G_6\theta + 3G_7\theta^2 \right) \end{aligned} \quad (4.63)$$

Una vez que se halle, dentro de una cierta tolerancia, el valor correcto θ_s , el valor de "y" puede calcularse como

$$y = \frac{E(\theta_s) + G(\theta_s)}{2} \quad (4.64)$$

El algoritmo de solución empleado se encuentra en la Fig. 4.2

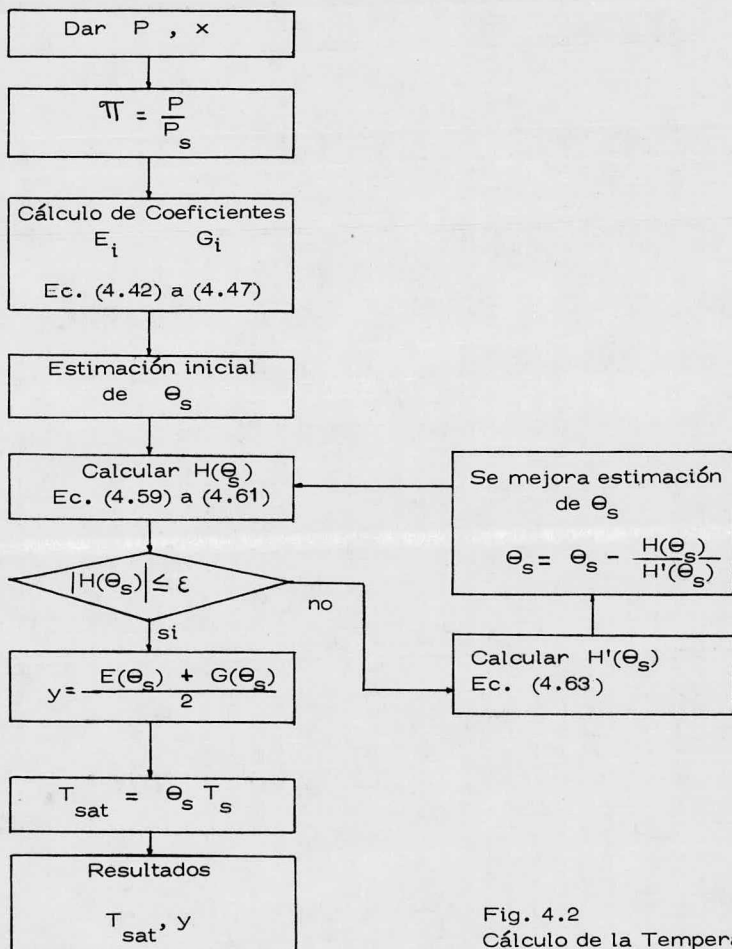


Fig. 4.2
Cálculo de la Temperatura de saturación y "y", a partir de P, x

Temperatura y composición de la fase líquida (T , x) conocidas

El problema consiste en encontrar la presión de saturación y la composición del vapor que está en equilibrio con un líquido de composición x a una temperatura T .

Como se conocen los valores de T y x (θ y x), las ecuaciones (4.27) y (4.28) se escriben como:

$$\ln y = R_1 + R_2 \pi + R_3 \pi^2 - \ln \pi \quad (4.65)$$

$$\ln(1-y) = S_1 + S_2 \pi + S_3 \pi^2 - \ln \pi \quad (4.66)$$

en donde

$$R_1 = \frac{M_1}{\theta} + M_4 + \ln x + M_6 \theta + M_8 \theta^2 + M_9 \theta^3 + M_{10} \ln \theta + \left(F_1 + \frac{F_2}{\theta} + \frac{F_3}{\theta^2}\right) \frac{(1-x)^2}{\theta} + \left(F_7 + \frac{F_8}{\theta}\right) \frac{(1-x)^2 (4x-1)}{\theta} \quad (4.67)$$

$$R_2 = \frac{M_2}{\theta} + M_7 \theta + \frac{M_{11}}{\theta^2} + \left(F_2 + \frac{F_3}{\theta} + \frac{F_4}{\theta^2}\right) \frac{(1-x)^2}{\theta} + \left(F_8 + \frac{F_{10}}{\theta}\right) \frac{(1-x)^2 (4x-1)}{\theta} + M_5 \quad (4.68)$$

$$R_3 = \frac{M_3}{\theta} \quad (4.69)$$

$$S_1 = \frac{M_1}{\theta} + M_4 + \ln(1-x) + N_6 \theta + N_8 \theta^2 + N_9 \theta^3 + N_{10} \ln \theta + \left(F_1 + \frac{F_2}{\theta} + \frac{F_3}{\theta^2}\right) \frac{x^2}{\theta} + \left(F_7 + \frac{F_8}{\theta}\right) \frac{x^2 (4x-3)}{\theta} \quad (4.70)$$

$$S_2 = \frac{M_2}{\theta} + N_5 + N_7 \theta + \frac{M_{11}}{\theta^2} + \left(F_2 + \frac{F_3}{\theta} + \frac{F_4}{\theta^2}\right) \frac{x^2}{\theta} + \left(F_8 + \frac{F_{10}}{\theta}\right) \frac{x^2 (4x-3)}{\theta} \quad (4.71)$$

$$S_3 = \frac{N_3}{\theta} \quad (4.72)$$

Eliminando a la variable "y" entre las ecuaciones (4.65) y (4.66), se obtiene que:

$$T(\pi) = R(\pi) - S(\pi) = 0 \quad (4.73)$$

en donde

$$R(\pi) = \text{EXP} \left(R_1 + R_2 \pi + R_3 \pi^2 - \ln \pi \right) \quad (4.74)$$

$$S(\pi) = 1 - \text{EXP} \left(S_1 + S_2 \pi + S_3 \pi^2 - \ln \pi \right) \quad (4.75)$$

Para resolver la ecuación (4.73) se usa el método de Newton-Raphson. Para aplicarlo se requiere T' , que puede expresarse como

$$T'(\pi) = R(\pi) \left(R_2 + 2R_3 \pi - \frac{1}{\pi} \right) + \left(1 - S(\pi) \right) \left(S_2 + 2S_3 \pi - \frac{1}{\pi} \right) \quad (4.76)$$

Una vez hallado el valor de la presión de saturación adimensional π_s , el valor de "y" se calcula como:

$$y = \frac{R(\pi_s) + S(\pi_s)}{2} \quad (4.77)$$

El algoritmo de solución se encuentra en la Fig. 4.3

Presión y Temperatura de saturación (P, T) conocidas

El problema es hallar las composiciones (x, y) de las fases líquida y va - por que se encuentran en equilibrio a la presión P y a la temperatura T.

Las ecuaciones (4.27) y (4.28) se reducen a:

$$\ln y = U_1 + U_2 X + U_3 X^2 + U_4 X^3 + \ln X \quad (4.78)$$

$$\ln(1-y) = V_1 + V_3 X^2 + V_4 X^3 + \ln(1-X) \quad (4.79)$$

en donde

$$U_1 = \left[M_1 + M_2 \Pi + M_3 \Pi^2 \right] \frac{1}{\theta} + \left[M_4 + M_5 \Pi - \ln \Pi \right] + \left[M_6 + M_7 \Pi \right] \theta + M_8 \theta^2 + M_9 \theta^3 + M_{10} \ln \theta + M_{11} \frac{\Pi}{\theta^2} + \frac{\alpha - \beta}{\theta} \quad (4.80)$$

$$U_2 = \frac{(6\beta - 2\alpha)}{\theta} \quad (4.81)$$

$$U_3 = \frac{(\alpha - 9\beta)}{\theta} \quad (4.82)$$

$$U_4 = \frac{4\beta}{\theta} \quad (4.83)$$

$$V_1 = \left[N_1 + N_2 \Pi + N_3 \Pi^2 \right] \frac{1}{\theta} + \left[N_4 + N_5 \Pi - \ln \Pi \right] + \left[N_6 + N_7 \Pi \right] \theta + N_8 \theta^2 + N_9 \theta^3 + N_{10} \ln \theta + N_{11} \frac{\Pi}{\theta} \quad (4.84)$$

$$V_3 = \frac{(\alpha - 3\beta)}{\theta} \quad (4.85)$$

$$V_4 = \frac{4\beta}{\theta} \quad (4.86)$$

Combinando (4.78) y (4.79) se obtiene que

$$W(X) = U(X) - V(X) = 0 \quad (4.87)$$

en donde

$$U(X) = \text{EXP} \left(U_1 + U_2 X + U_3 X^2 + U_4 X^3 + \ln X \right) \quad (4.88)$$

$$V(X) = 1 - \text{EXP} \left(V_1 + V_3 X^2 + V_4 X^3 + \ln(1-X) \right) \quad (4.89)$$

Para obtener x, se utiliza nuevamente el método de Newton-Raphson. La derivada W' está dada por

$$W'(X) = U(X) \left(U_2 + 2U_3 X + 3U_4 X^2 + \frac{1}{X} \right) + \left(1 - V(X) \right) \left(2V_3 X + 3V_4 X^2 - \frac{1}{1-X} \right) \quad (4.90)$$

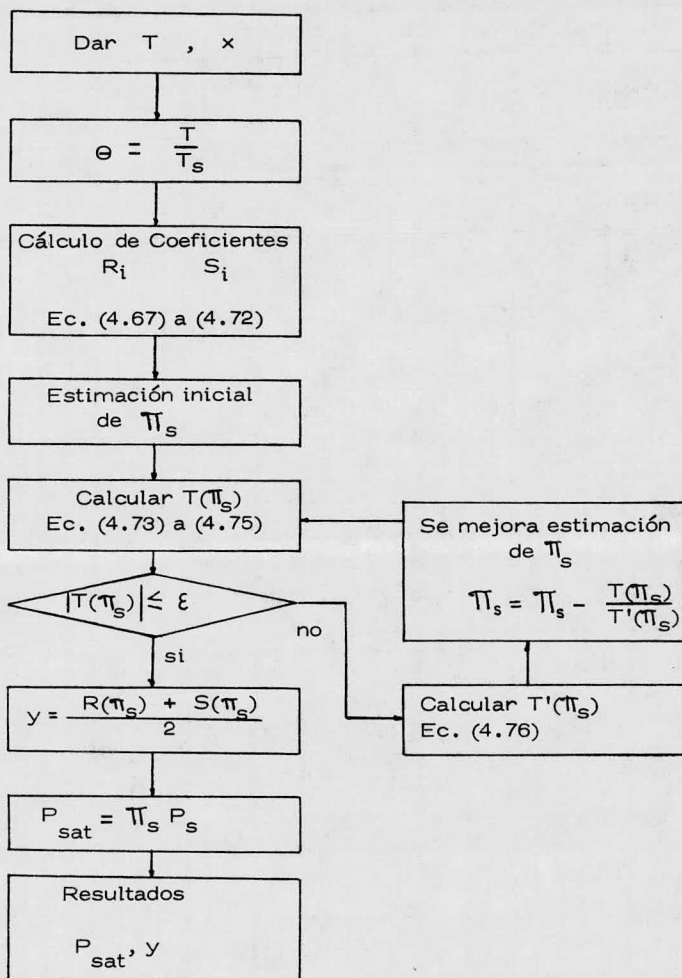


Fig. 4.3
Cálculo de la Presión de saturación y "y", a partir de T , x

Al encontrarse el valor x_s que satisfaga a W , "y" se calcula como:

$$y = \frac{U(x_s) + V(x_s)}{2} \quad (4.91)$$

El algoritmo utilizado se encuentra en la Fig. 4.4

4.1.3 Entropía

Para el cálculo de entropías de cada una de las fases, como función de la presión, temperatura y composición, se parte de

$$dG = -S dT + V dP + \sum \mu_i dn_i \quad (4.92)$$

De la expresión anterior se deduce que

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_{P, \text{comp}} \quad (4.93)$$

Con el objeto de obtener entropías adimensionales, se puede demostrar - que a partir de la ecuación anterior es posible obtener

$$S_R = \frac{S}{R} = - \left(\frac{\partial G_R}{\partial \theta} \right)_{\pi, \text{comp}} \quad (4.94)$$

que será la ecuación básica para la obtención de entropías.

4.1.3.1 Fase vapor

$$S_R^V = - \left(\frac{\partial G_R^V}{\partial \theta} \right)_{\pi, y} \quad (4.95)$$

Si se utilizan las ecuaciones (4.3) y (4.4) en combinación con la anterior, se obtiene lo siguiente

$$S_R^V = (1-y) S_{R_{H_2O}}^V + y S_{R_{NH_3}}^V - (1-y) \ln(1-y) - y \ln y \quad (4.96)$$

en donde

$$S_{R_i}^V = - \left(\frac{\partial G_{R_i}^V}{\partial \theta} \right)_{\pi} = S_{0_i}^V + \int_{\theta_{0_i}}^{\theta} \frac{c_{p,i}^V}{\theta} d\theta - \ln \frac{\pi}{\pi_{0_i}} - A_1 (\pi - \pi_0) + A_3 \left(\frac{\pi}{\theta^2} - \frac{\pi_{0_i}}{\theta_{0_i}^2} \right) \quad (4.97)$$

4.1.3.2 Fase líquida

$$S_R^L = - \left(\frac{\partial G_R^L}{\partial \theta} \right)_{\pi, X} \quad (4.98)$$

Combinando la ecuación anterior con (4.5) y (4.6), se llega a la siguiente expresión

$$S_R^L = (1-x) S_{R_{H_2O}}^L + x S_{R_{NH_3}}^L - (1-x) \ln(1-x) - x \ln x + \left[\frac{F_3 + F_4 \pi}{\theta} + \frac{2(F_5 + F_6 \pi)}{\theta^3} + \frac{F_7 + F_8 \pi}{\theta^2} (x-1) \right] x(1-x) \quad (4.99)$$

en donde se tiene que

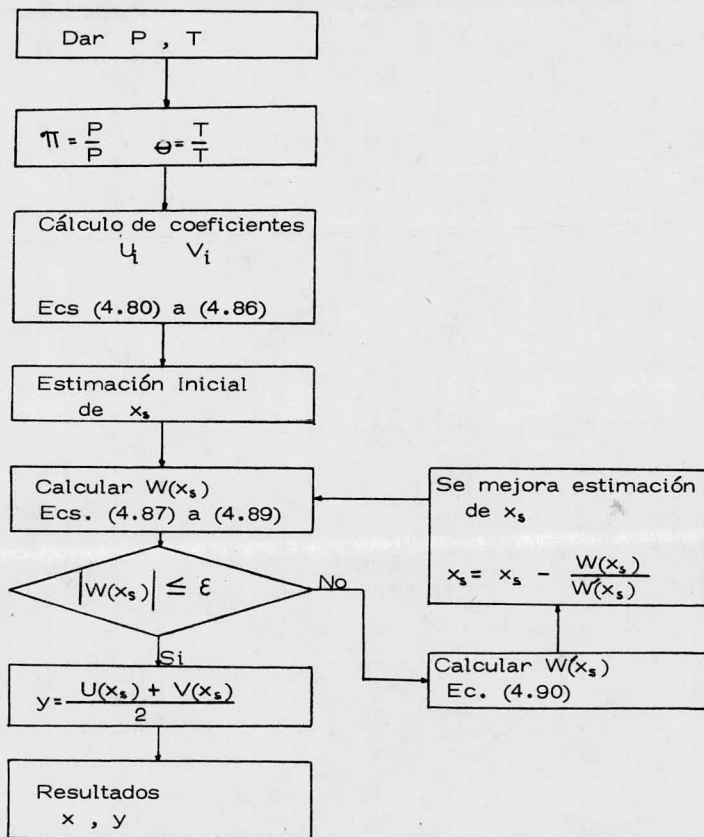


Fig. 4.4
Cálculo de composiciones x, y
conocidas Presión y Temperatura

$$S_{Ri}^L = S_{oi}^L + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{C_{pi}^L}{\theta} d\theta - C_{3i} (\pi - \pi_{oi}) - 2C_{4i} \theta (\pi - \pi_{oi}) \quad i = H_2O, NH_3 \quad (4.100)$$

Las ecuaciones básicas para el cálculo de entropías son (4.96) y (4.97) - para la fase vapor y (4.99) junto con (4.100) para la fase líquida.

Se han desarrollado subrutinas para proporcionar los valores de entropía en la fase deseada con sólo especificar la presión, la temperatura y la composición.

4.1.4 Entalpía

La ecuación básica que permite la evaluación de entalpías a partir de la energía libre de Gibbs es

$$H = G + TS \quad (4.101)$$

que en términos de variables adimensionales puede escribirse como

$$H_R = G_R + \theta S_R \quad (4.102)$$

4.1.4.1 Fase vapor

A partir de las ecuaciones (4.1), (4.96) y (4.102) se llega a

$$H_R^V = (1-y) H_{RH_2O}^V + y H_{RNH_3}^V \quad (4.103)$$

en donde

$$H_{Ri}^V = G_{Ri}^V + \theta S_{Ri}^V = H_{oi}^V + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} C_{pi}^V d\theta + A_{2i} (\pi - \pi_{oi}) + A_{3i} \left(\frac{\pi}{\theta} - \frac{\pi_{oi}}{\theta_{oi}} \right) \quad (4.104)$$

De la ecuación (4.103) se observa que la entalpía de la mezcla en fase vapor es únicamente la suma ponderada de las entalpías de los componentes puros. Esto es consecuencia de la suposición de que la mezcla en fase vapor es una solución ideal.

4.1.4.2 Fase líquida

La entalpía de esta fase puede calcularse combinando las ecuaciones (4.2), (4.99) y (4.102). Se llega al siguiente resultado:

$$H_R^L = (1-X) H_{RH_2O}^L + X H_{RNH_3}^L + \left[F_1 + F_2 \pi + \frac{2(F_3 + F_4 \pi)}{\theta} + \frac{3(F_5 + F_6 \pi)}{\theta^2} + (F_7 + F_8 \pi + \frac{2(F_9 + F_{10} \pi)}{\theta}) (2X - 1) \right] X (1-X) \quad (4.105)$$

en donde se ha definido

$$H_{Ri}^L = G_{Ri}^L + \theta S_{Ri}^L = H_{oi}^L + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} C_{pi}^L d\theta + C_{1i} (\pi - \pi_{oi}) + \frac{C_{2i}}{2} (\pi^2 - \pi_{oi}^2) - C_{4i} \theta^2 (\pi - \pi_{oi}) \quad (4.106)$$

Como puede observarse de la ecuación (4.105), la entalpía de la mezcla líquida, además de contar con la contribución de las entalpías de los componentes puros (ec. 4.106), recibe una contribución adicional, como resultado de la fuerte desviación con respecto a la solución ideal que existe en las mezclas líquidas amoníaco-agua.

De manera similar a la entropía, se dispone de subrutinas que proporcionan la entalpía de mezclas tanto en fase vapor como en fase líquida, al especificarse la presión, temperatura y composición correspondientes.

4.1.5 Capacidad Calorífica

Si se parte de la definición de C_p

$$C_p = \left(\frac{\partial H}{\partial T} \right)_{P, \text{comp}} \quad (4.107)$$

en términos de variables adimensionales se tiene que

$$C_{pR} = \left(\frac{\partial H_R}{\partial \theta} \right)_{\Pi, \text{comp}} \quad (4.108)$$

que es la ecuación básica para evaluar el C_p .

4.1.5.1 Fase vapor

De la ecuación (4.103), en combinación con (4.108) se obtiene

$$C_{pR}^v = (1-y) C_{pR_{H_2O}}^v + y C_{pR_{NH_3}}^v \quad (4.109)$$

en donde

$$C_{pRi}^v = {}^*C_{pRi}^v - \frac{2A_{3i}\Pi}{\theta^2} \quad (4.110)$$

4.1.5.2 Fase líquida

De las ecuaciones (4.105) y (4.108)

$$C_{pRi}^L = (1-x) C_{pR}^L + x C_{pR_{NH_3}}^L - \left[\frac{2(F_3 + F_4\Pi)}{\theta^2} + \frac{6(F_5 + F_6\Pi)}{\theta^3} + \frac{2(F_9 + F_{10}\Pi)}{\theta^2} (2x-1) \right] x(1-x) \quad (4.111)$$

en donde se define

$$C_{pRi}^L = {}^*C_{pRi}^L - 2c_{4i}\theta(\Pi - \Pi_{oi}) \quad (4.112)$$

4.1.6 Volumen específico

La base de cálculo es la ecuación (4.92), de donde se tiene que

$$v = \left(\frac{\partial G}{\partial P} \right)_{T, \text{comp}} \quad (4.113)$$

que puede transformarse en

$$V_R = \left(\frac{\partial G_R}{\partial T} \right)_{\theta, \text{comp}} \quad (4.114)$$

en donde V_R es el volumen adimensional.

$$V_R = \frac{V P_0}{R T_0} \quad (4.115)$$

4.1.6.1 Fase vapor

A partir de las ecuaciones (4.1) y (4.114), el volumen adimensional de la mezcla en fase vapor puede expresarse como

$$V_R^V = (1-y) V_{R_{H_2O}}^V + y V_{R_{NH_3}}^V \quad (4.116)$$

en donde $V_{R_i}^V$ es el volumen del componente i puro en fase vapor, que puede calcularse de acuerdo a

$$V_{R_i}^V = \left(\frac{\partial G_{R_i}}{\partial T} \right)_{\theta} = \frac{\theta}{T} + \lambda_{1i} \theta + \lambda_{2i} + \frac{A_{3i}}{\theta} \quad i = H_2O, NH_3 \quad (4.117)$$

4.1.6.2 Fase líquida

De las ecuaciones (4.2) y (4.114)

$$V_R^L = (1-X) V_{R_{H_2O}}^L + X V_{R_{NH_3}}^L + \left[F_2 + \frac{F_4}{\theta} + \frac{F_6}{\theta^2} + \left(F_8 + \frac{F_{10}}{\theta} \right) (2X-1) \right] X(1-X) \quad (4.118)$$

en donde $V_{R_i}^L$ es el volumen del componente i puro en fase líquida, expresado como

$$V_{R_i}^L = \left(\frac{\partial G_{R_i}}{\partial T} \right)_{\theta} = C_{1i} + C_{2i} T + C_{3i} \theta + C_{4i} \theta^2 \quad (4.119)$$

También se han implementado subrutinas para el cálculo de capacidades caloríficas y volúmenes específicos de ambas fases como funciones de la presión, temperatura y composición.

4.1.7 Otras propiedades termodinámicas

Aunque no se ha hecho en el presente estudio, fácilmente se pueden calcular las siguientes propiedades termodinámicas

Energía interna

$$U_R = H_R - T V_R \quad (4.120)$$

Energía libre de Helmholtz

$$A_R = G_R - T V_R \quad (4.121)$$

4.1.8 Comparación de los valores calculados con los valores experimentales

En los apartados anteriores se ha discutido la obtención de las diferentes propiedades termodinámicas a partir de las ecuaciones de energía libre y se ha llegado a la elaboración de diversos programas para la predicción de las mismas. Ahora lo importante es ver la confiabilidad de dichas ecuaciones para la predicción de las diversas propiedades.

Para lo anterior, se van a comparar los valores calculados con las ecuaciones obtenidas anteriormente con los valores experimentales que se encuentran reportados en la literatura.

Los datos experimentales considerados son los que se encuentran en el estudio publicado por el Institute of Gas Technology (IGT) titulado "Physical and Thermodynamic Properties of Ammonia-Water Mixtures", por ser hasta la fecha la recopilación más completa y autorizada sobre las propiedades termodinámicas de la mezcla considerada.

Las propiedades que se prestaron a una comparación, por estar disponibles explícitamente en forma tabular sus valores en la obra antes mencionada, fueron:

- Temperatura de Saturación
- Presión de Saturación
- Composición del líquido saturado
- Composición del vapor saturado
- Entalpía del líquido saturado
- Entalpía del vapor saturado

La comparación se llevó a cabo de la siguiente manera:

Se trabajó con desviaciones absolutas entre los valores experimentales y valores calculados

$$d_i = |A_{Ei} - A_{Ci}| \quad (4.122)$$

en donde

- A es la propiedad considerada
- d_i es el valor absoluto de la desviación de la propiedad considerada
- E se refiere a un valor experimental
- C significa un valor calculado

El promedio de las desviaciones absolutas se calculó como

$$E(A) = \frac{\sum_{i=1}^n d_i}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n |A_{Ei} - A_{Ci}|}{n} \quad (4.123)$$

en donde $E(A)$ representa el promedio de las desviaciones absolutas, considerando la propiedad A.

La desviación standard de dichas propiedades se calculó como

$$S(A) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n d_i^2 - \left(\frac{\sum_{i=1}^n d_i}{n}\right)^2}{n-1}} \quad (4.124)$$

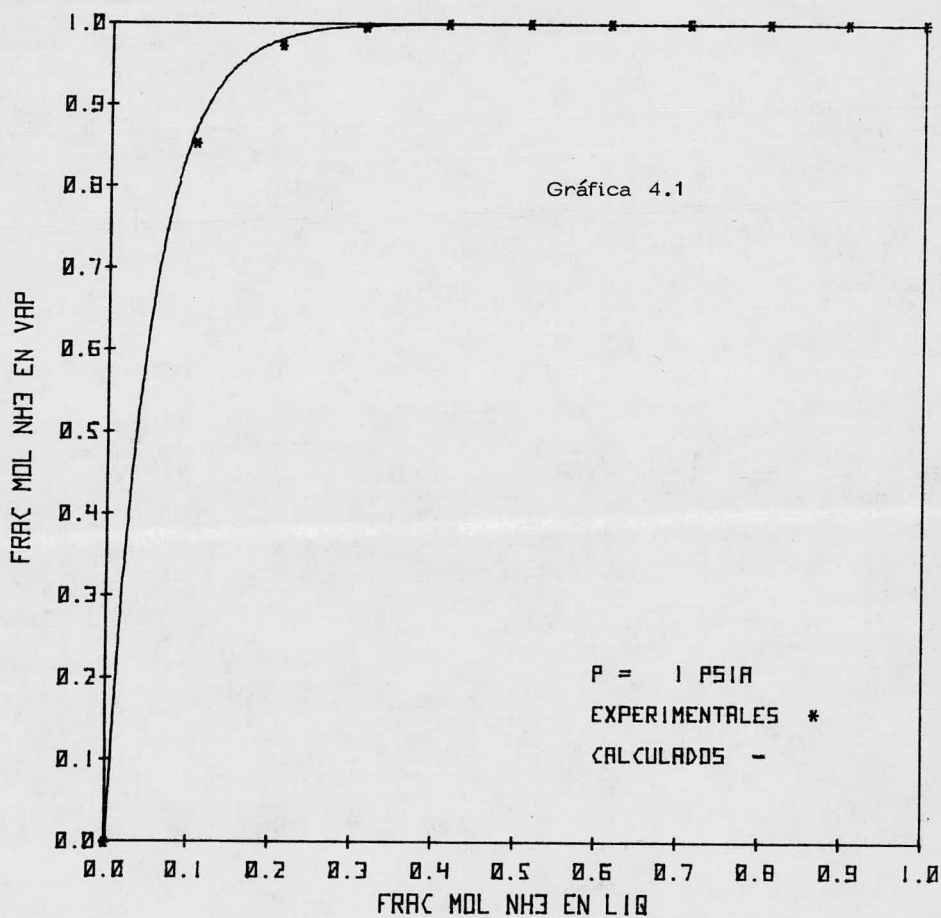
en donde $S(A)$ representa la desviación standard de las desviaciones absolutas, tomando en cuenta la propiedad A .

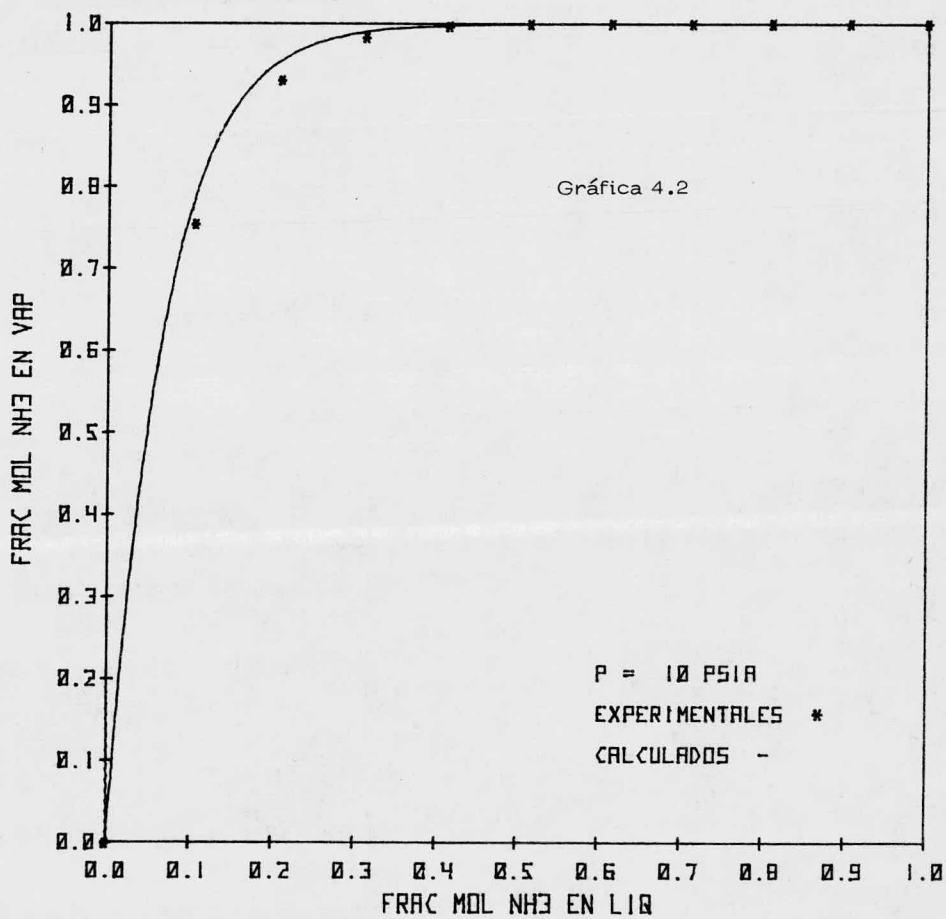
Al aplicar este tratamiento a las propiedades antes mencionadas, se obtuvo la siguiente tabla.

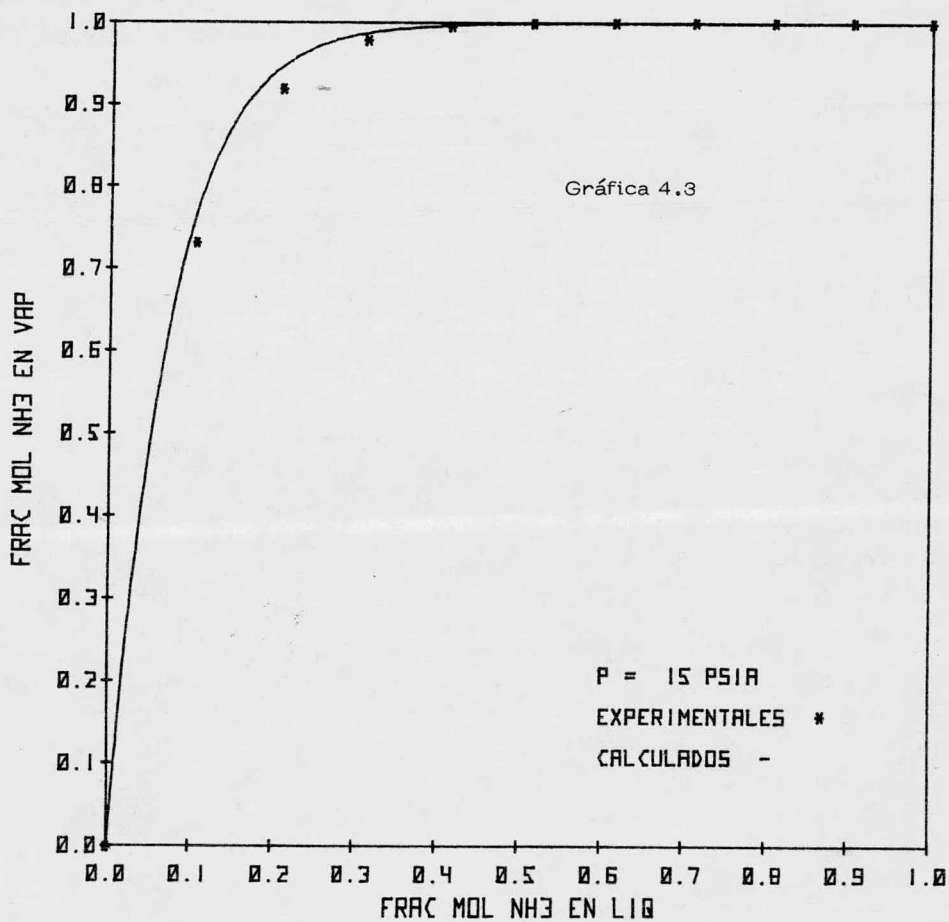
DESVIACIONES ABSOLUTAS

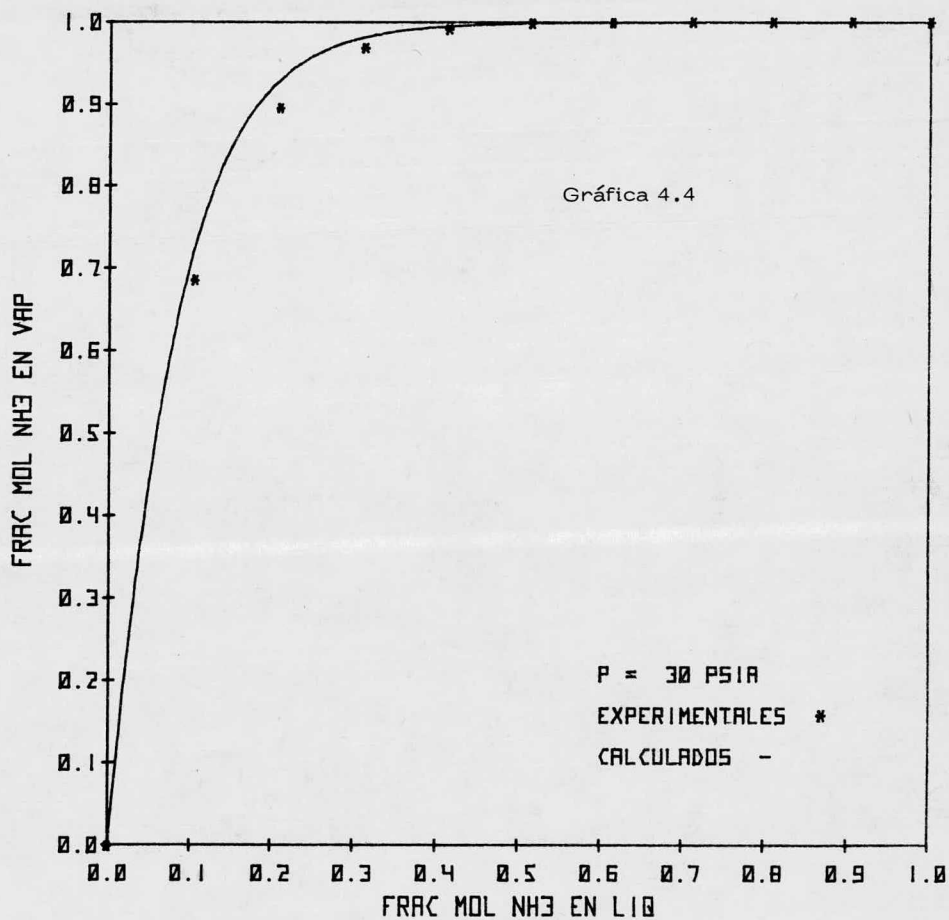
PROPIEDAD	PROMEDIO	DESVIACION STANDARD
Temperatura ($^{\circ}\text{F}$)	4.65	4.92
Presión (psia)	7.34	9.87
Composición líquido (x)	0.0187	0.0155
Composición vapor (y)	0.0094	0.0142
Entalpía del líquido (Btu/lb)	5.55	5.12
Entalpía del vapor (Btu/lb)	4.94	4.90

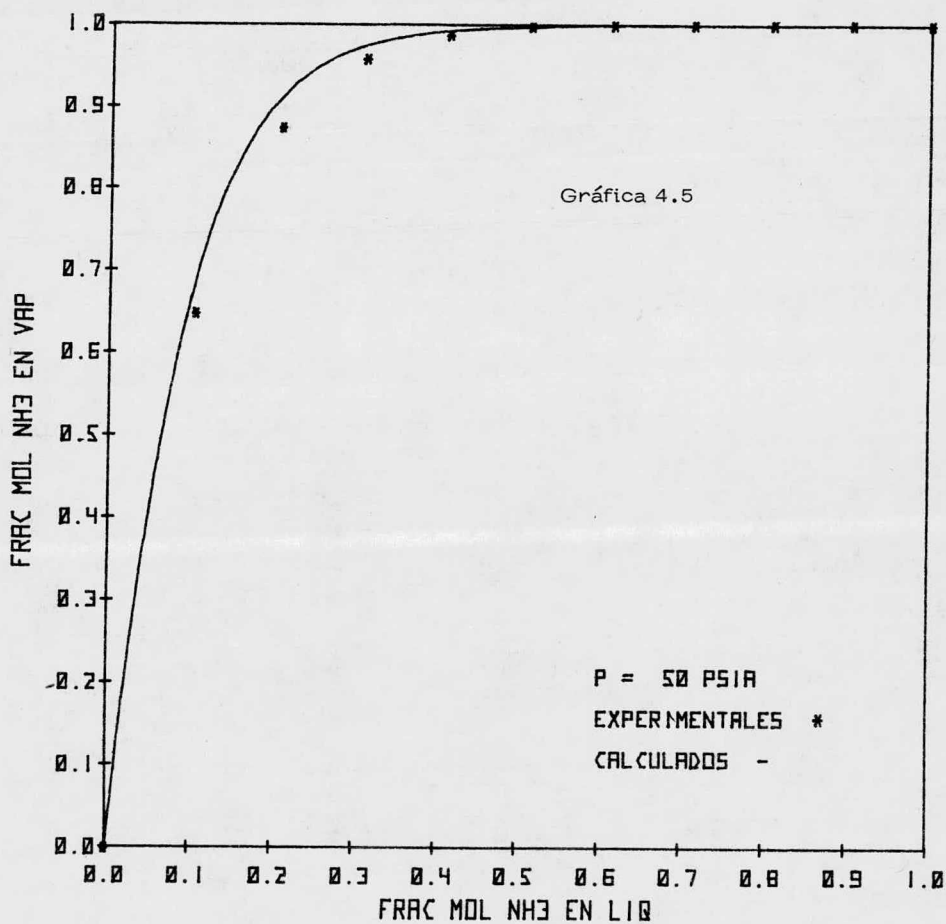
A continuación se presenta una serie de gráficas en donde se muestran - tanto los valores experimentales reportados en la literatura como los valores - calculados con las ecuaciones y algoritmos desarrollados en este capítulo, para diversas propiedades termodinámicas de la solución amoníaco-agua.

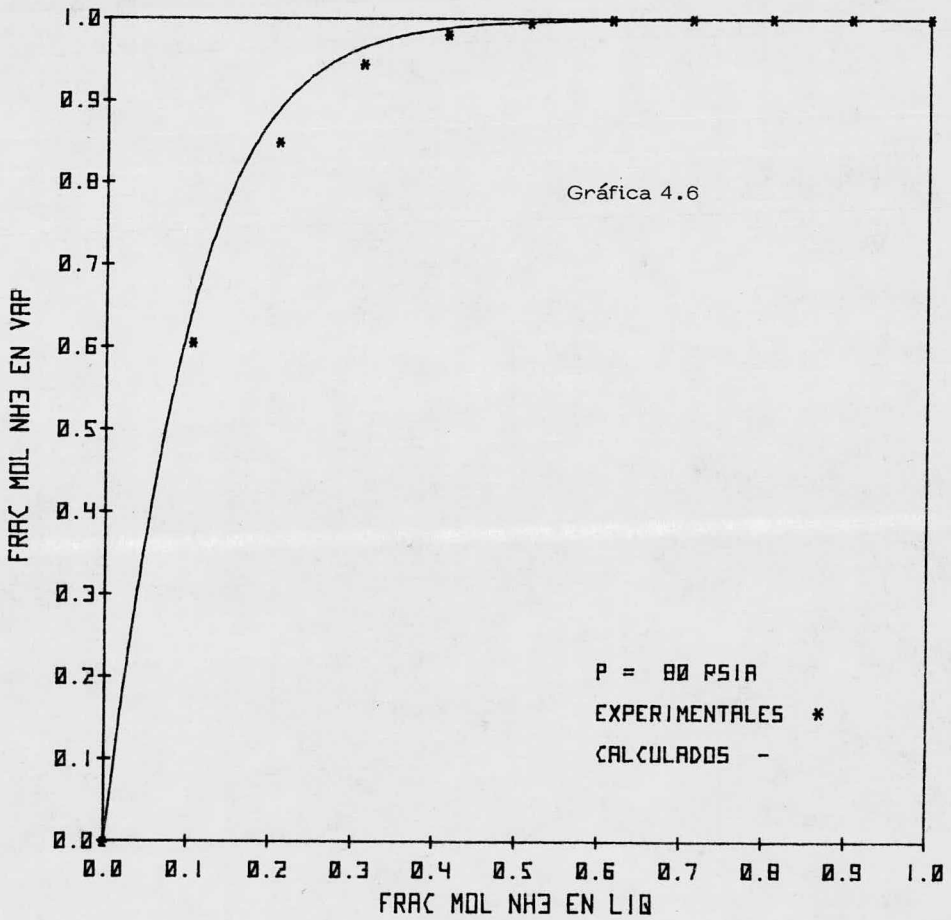


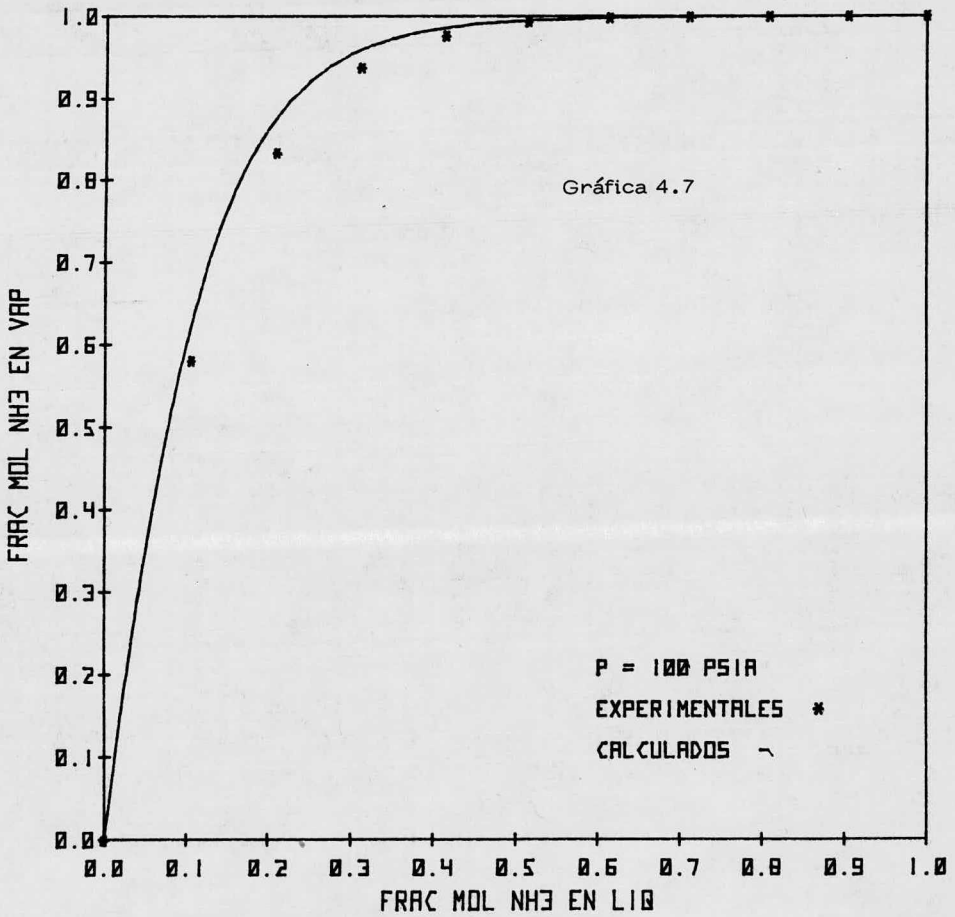


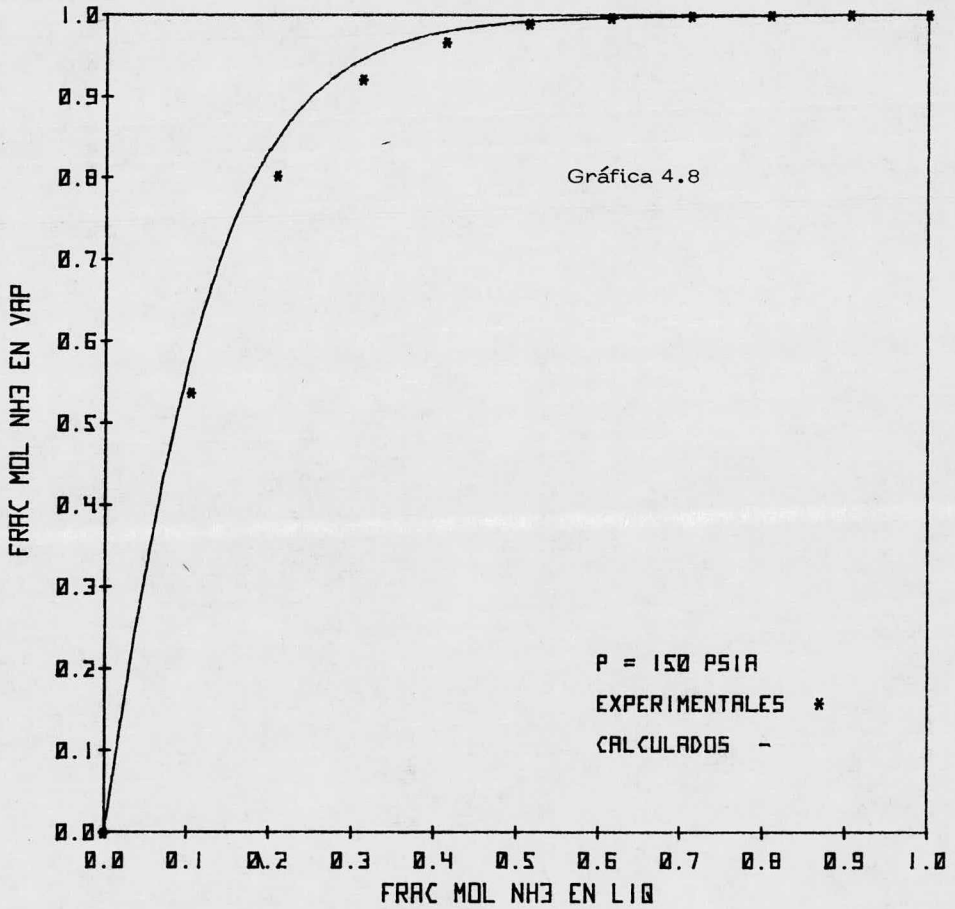


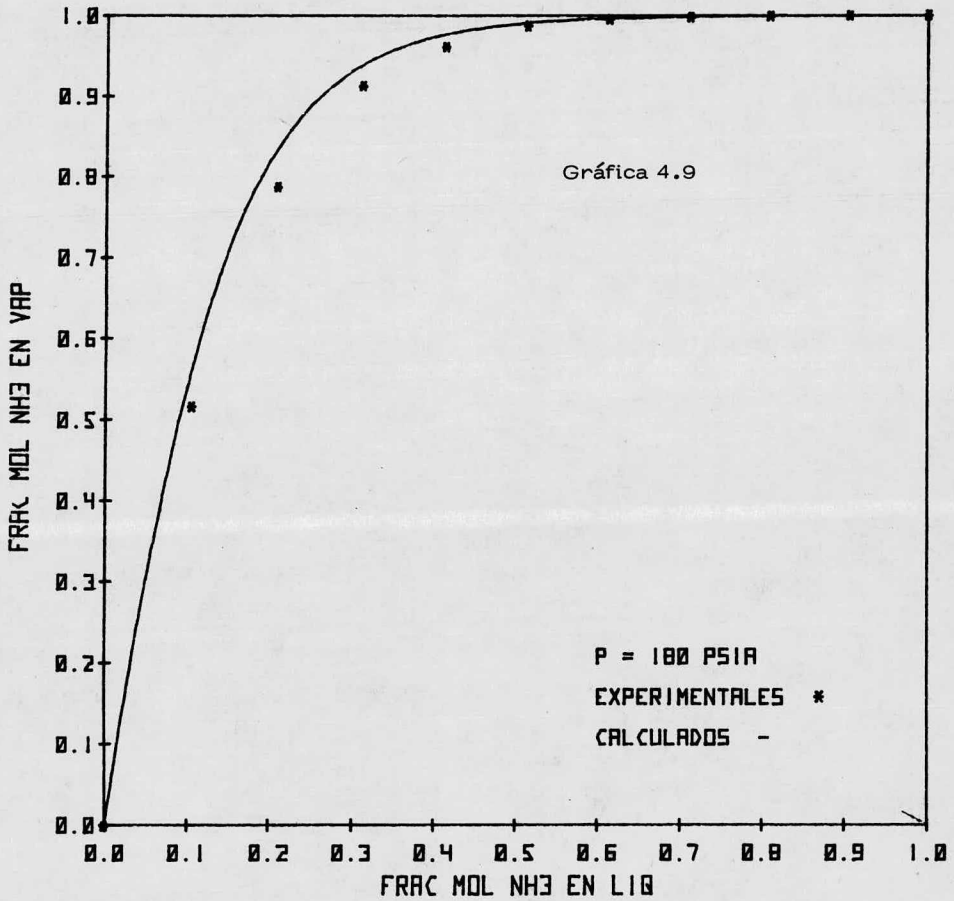


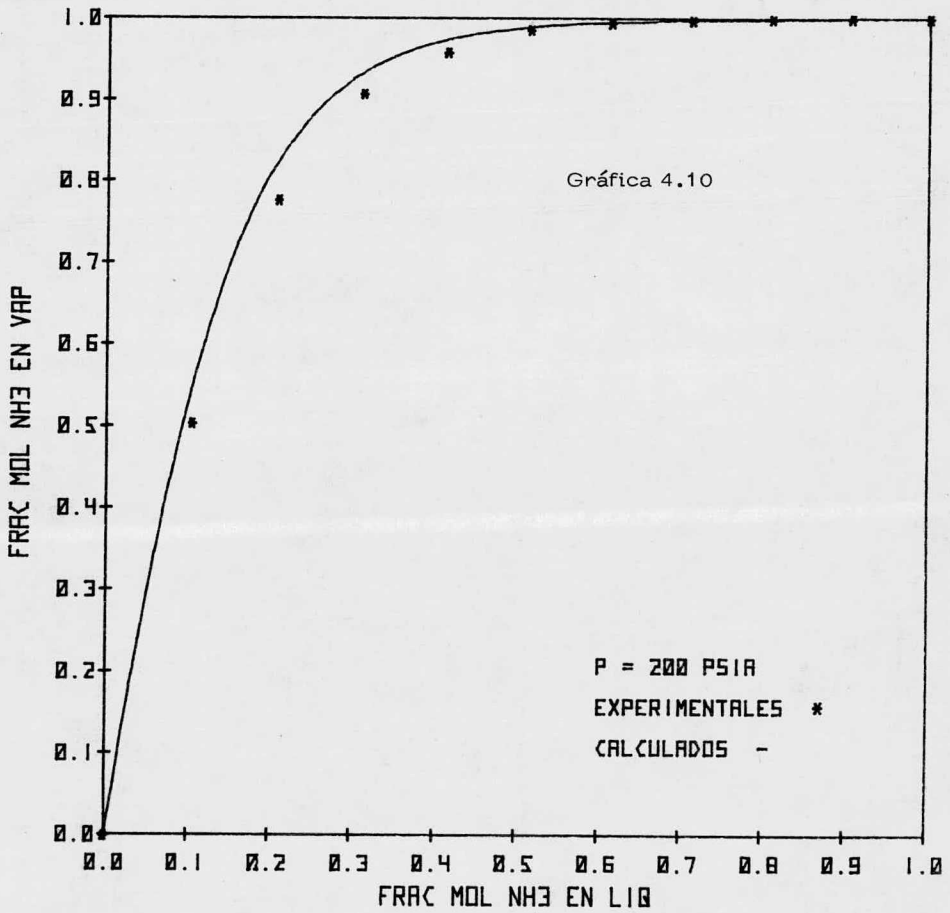


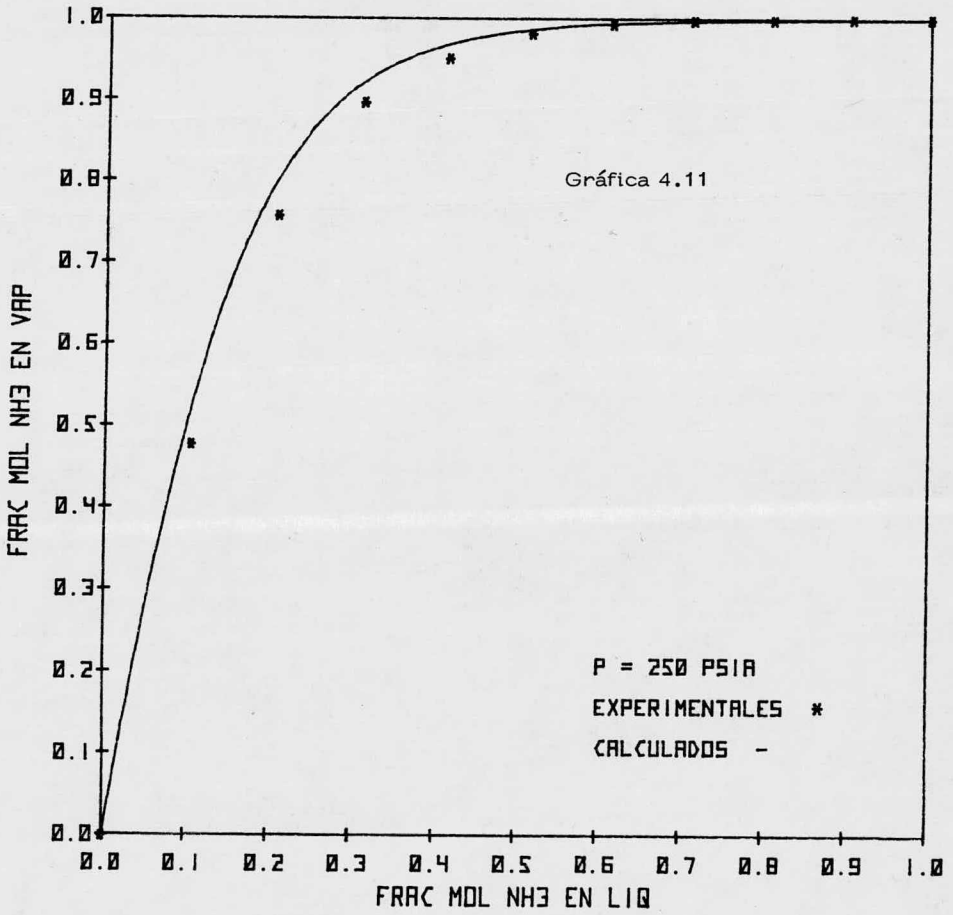


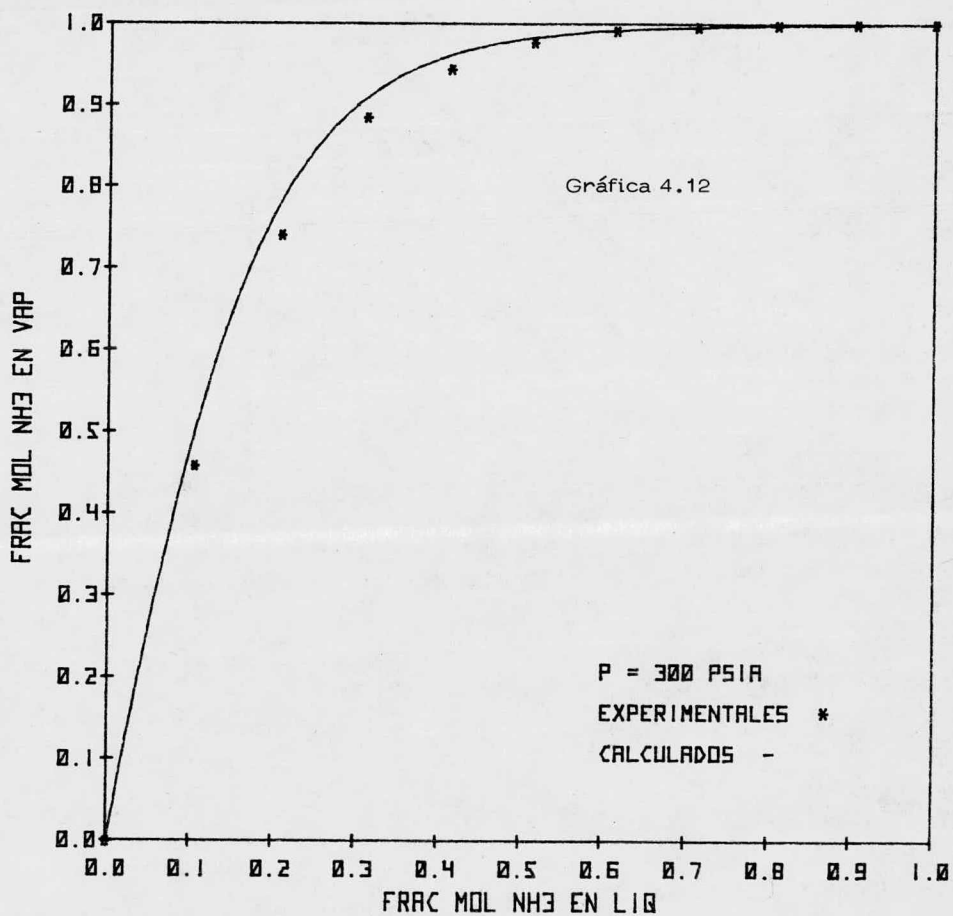


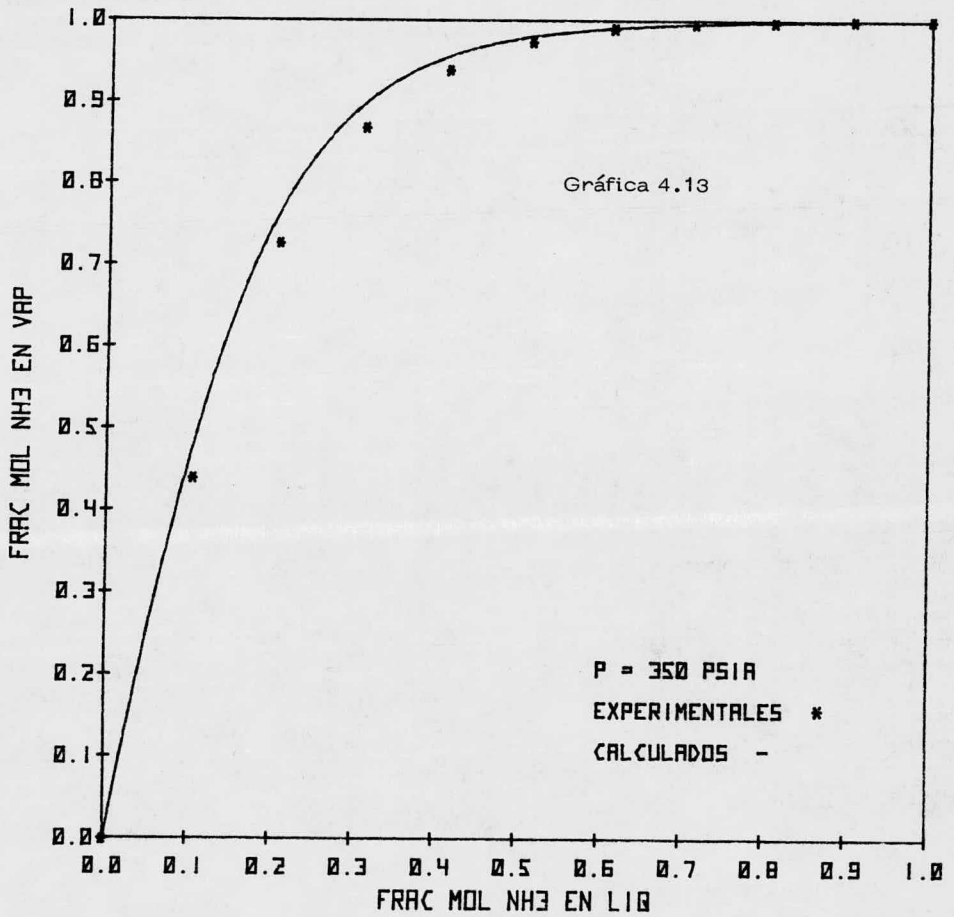


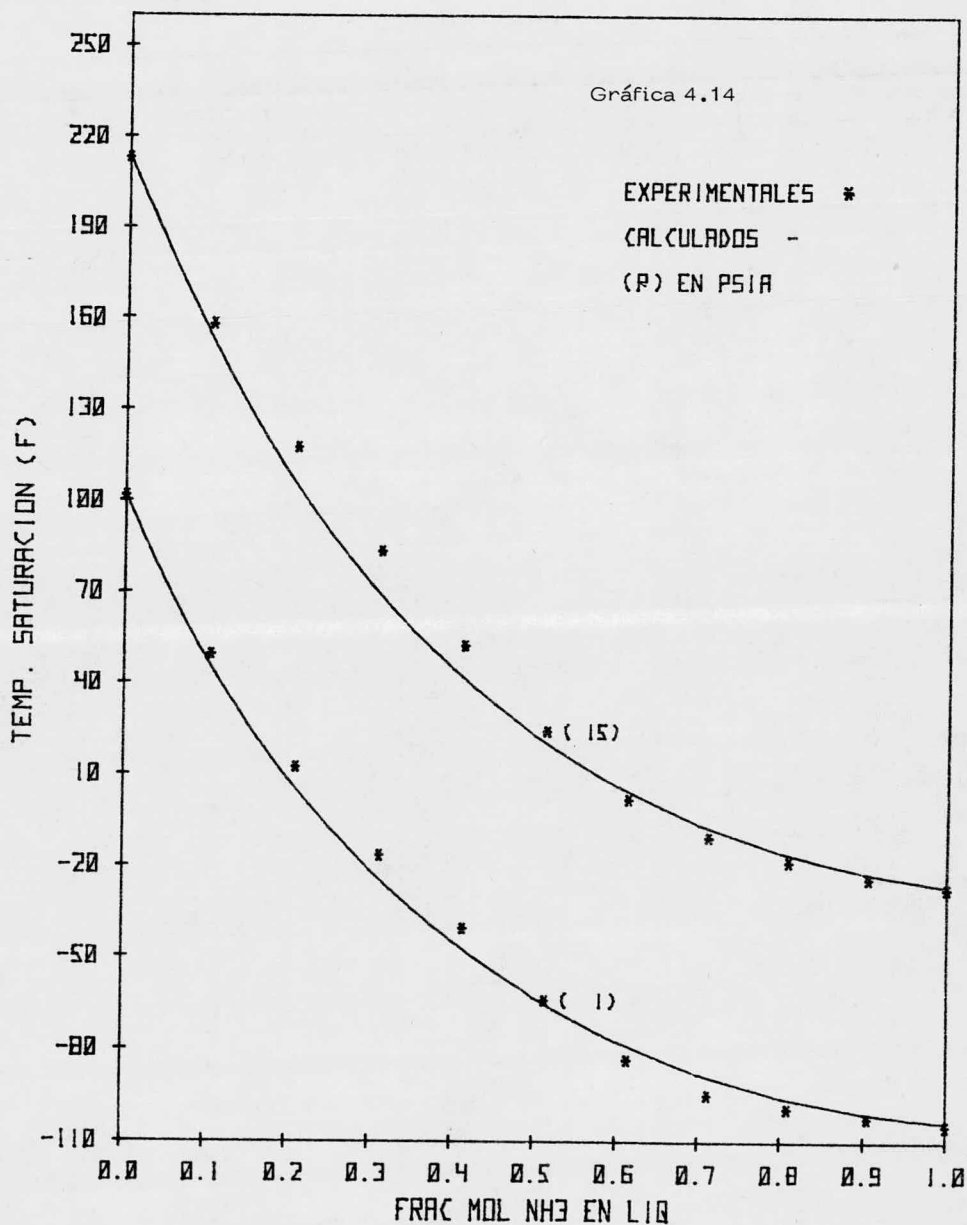


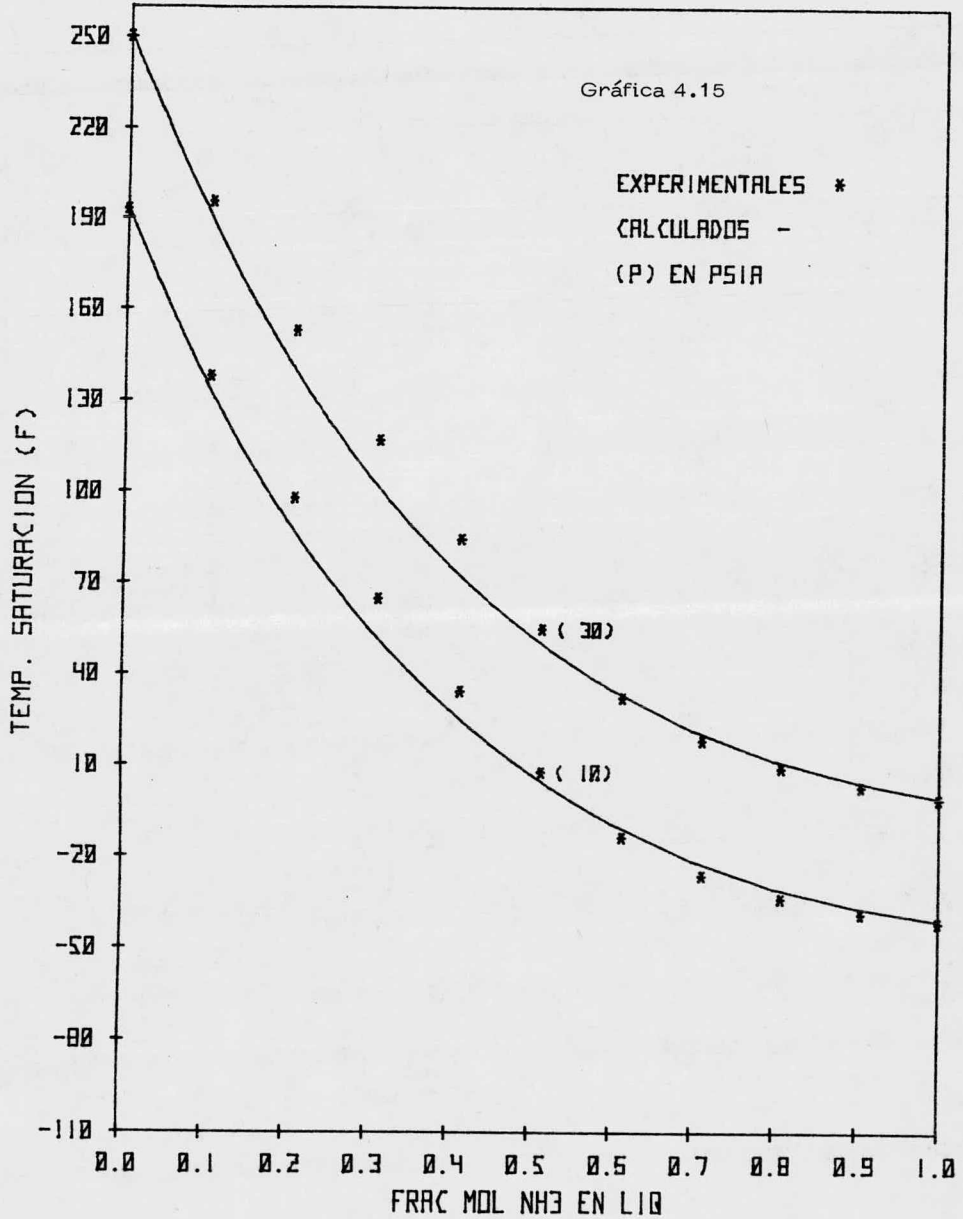


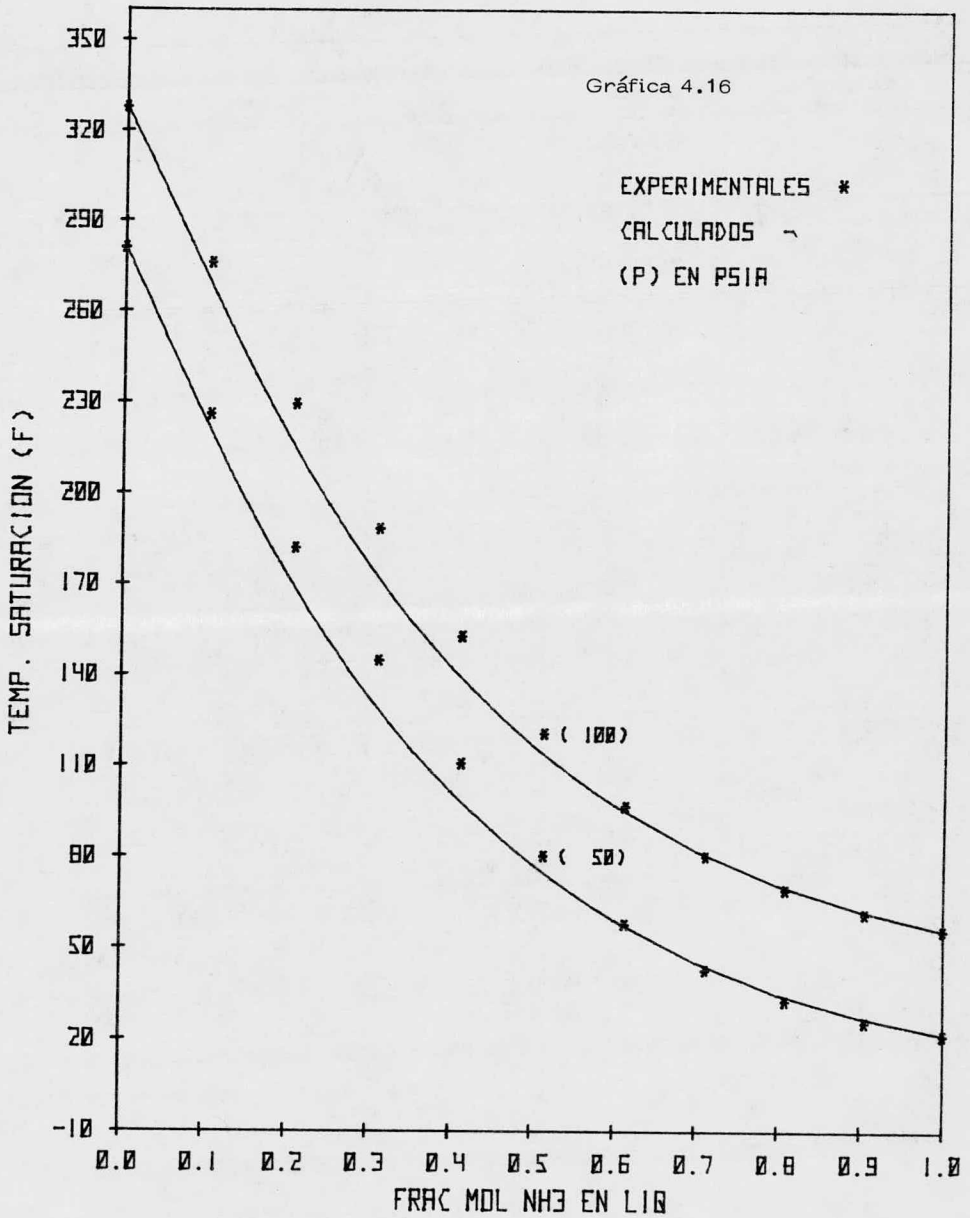


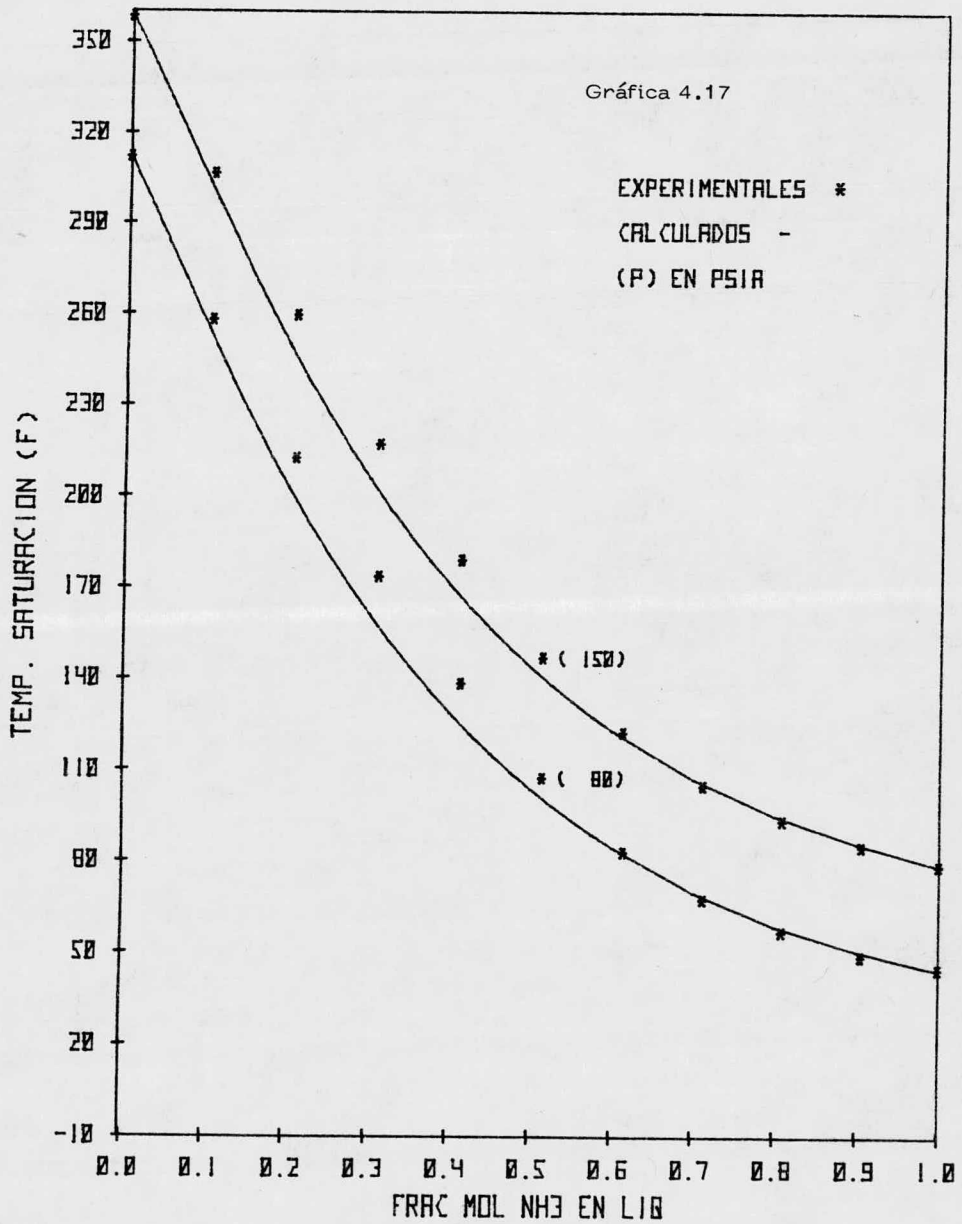


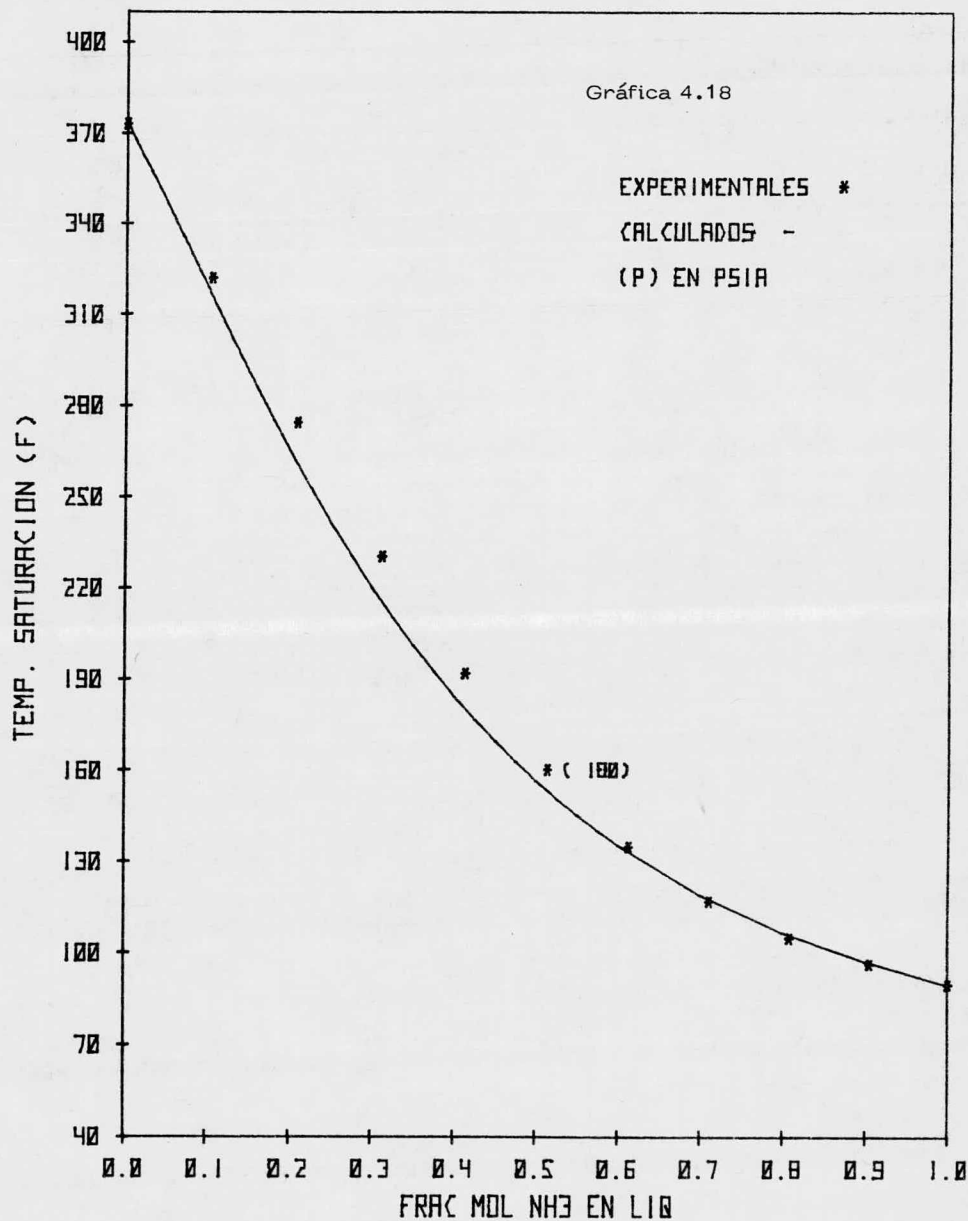


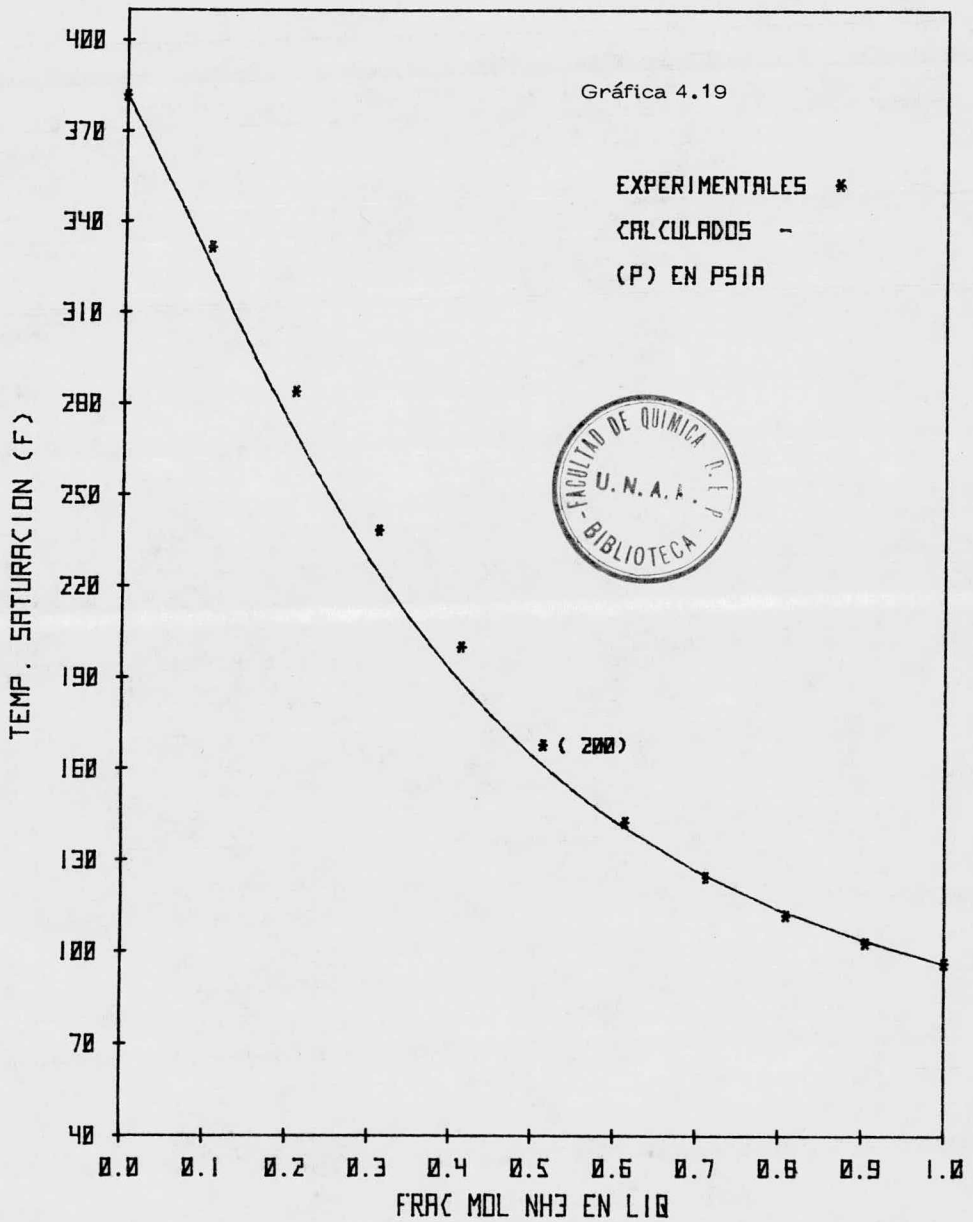


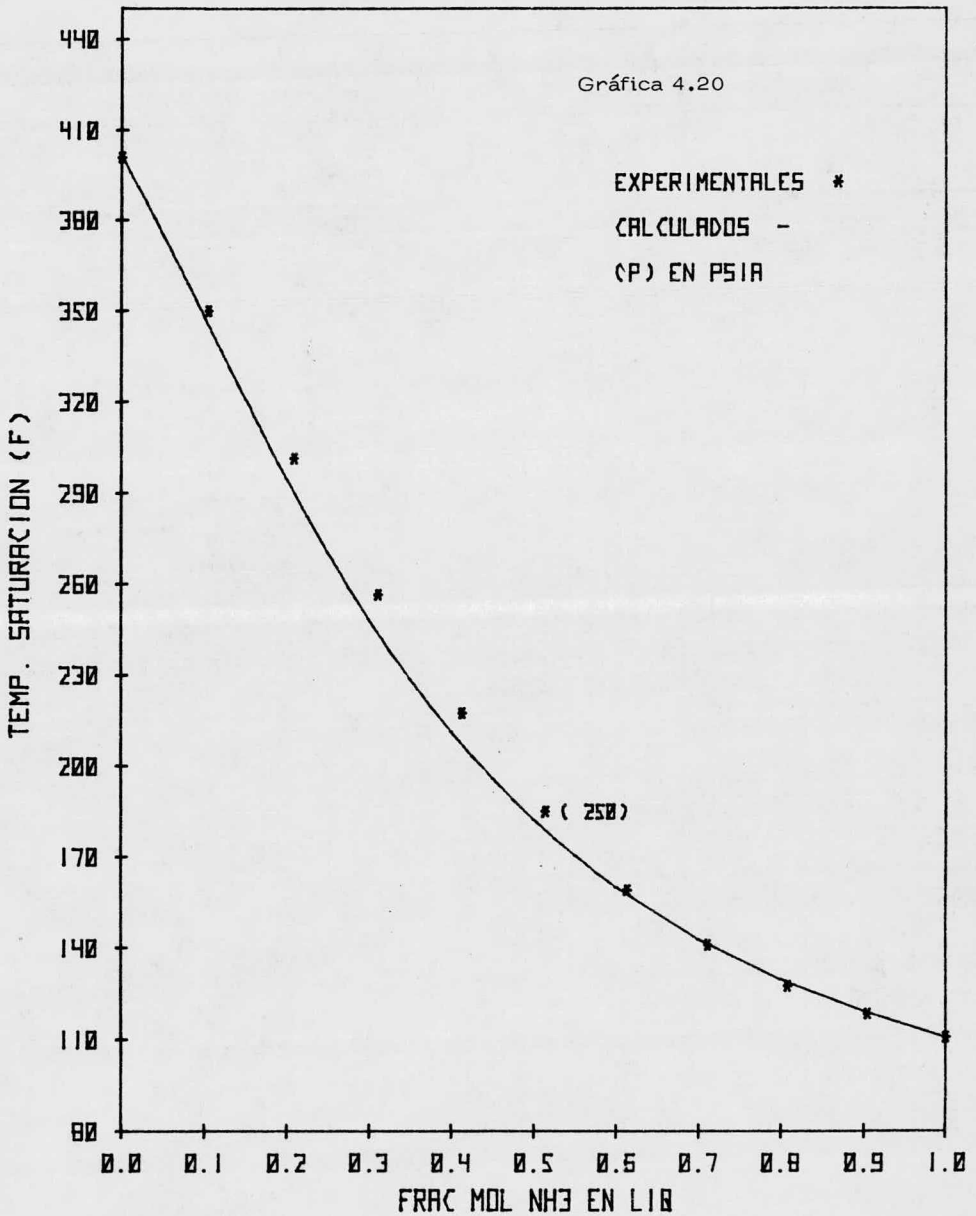


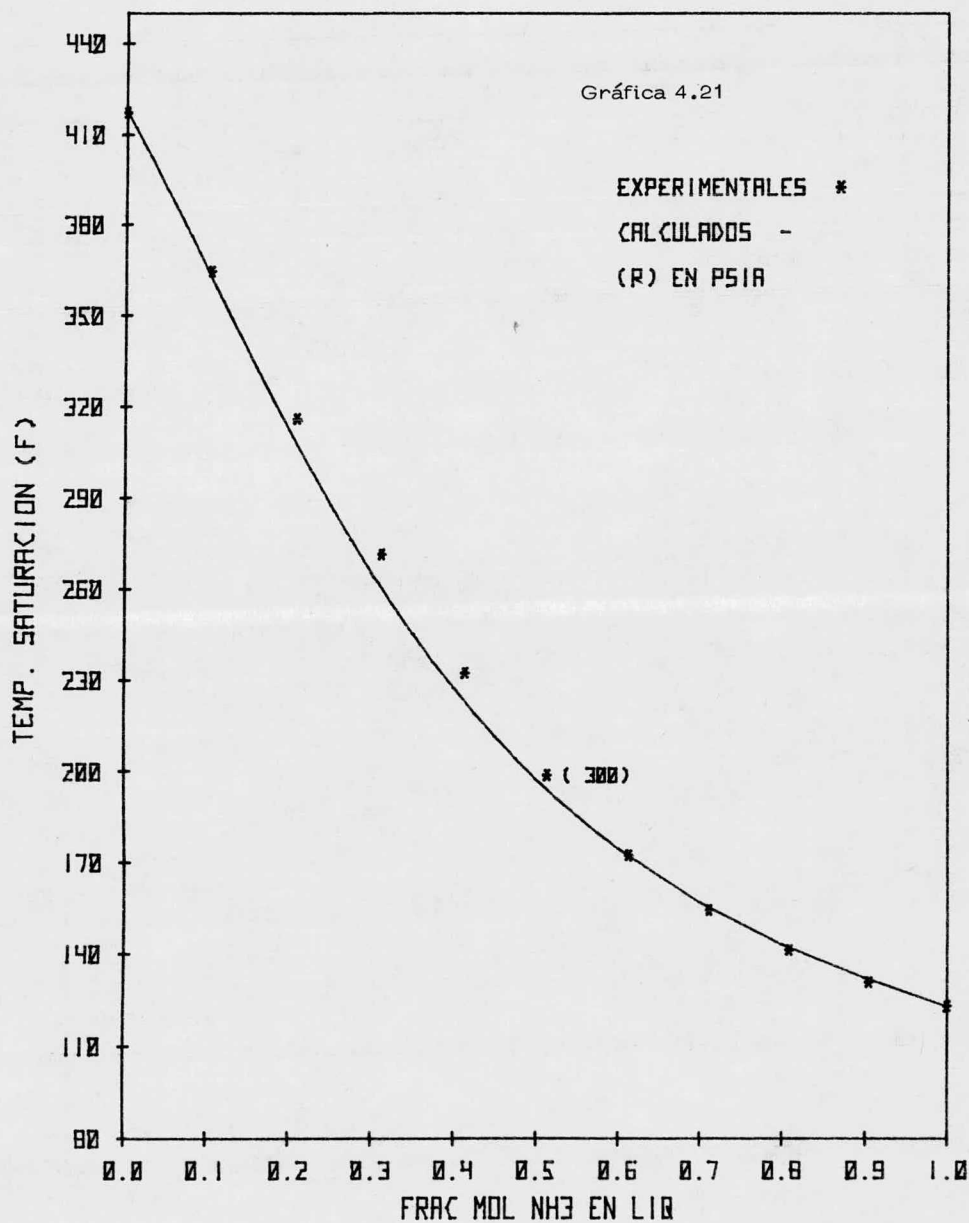


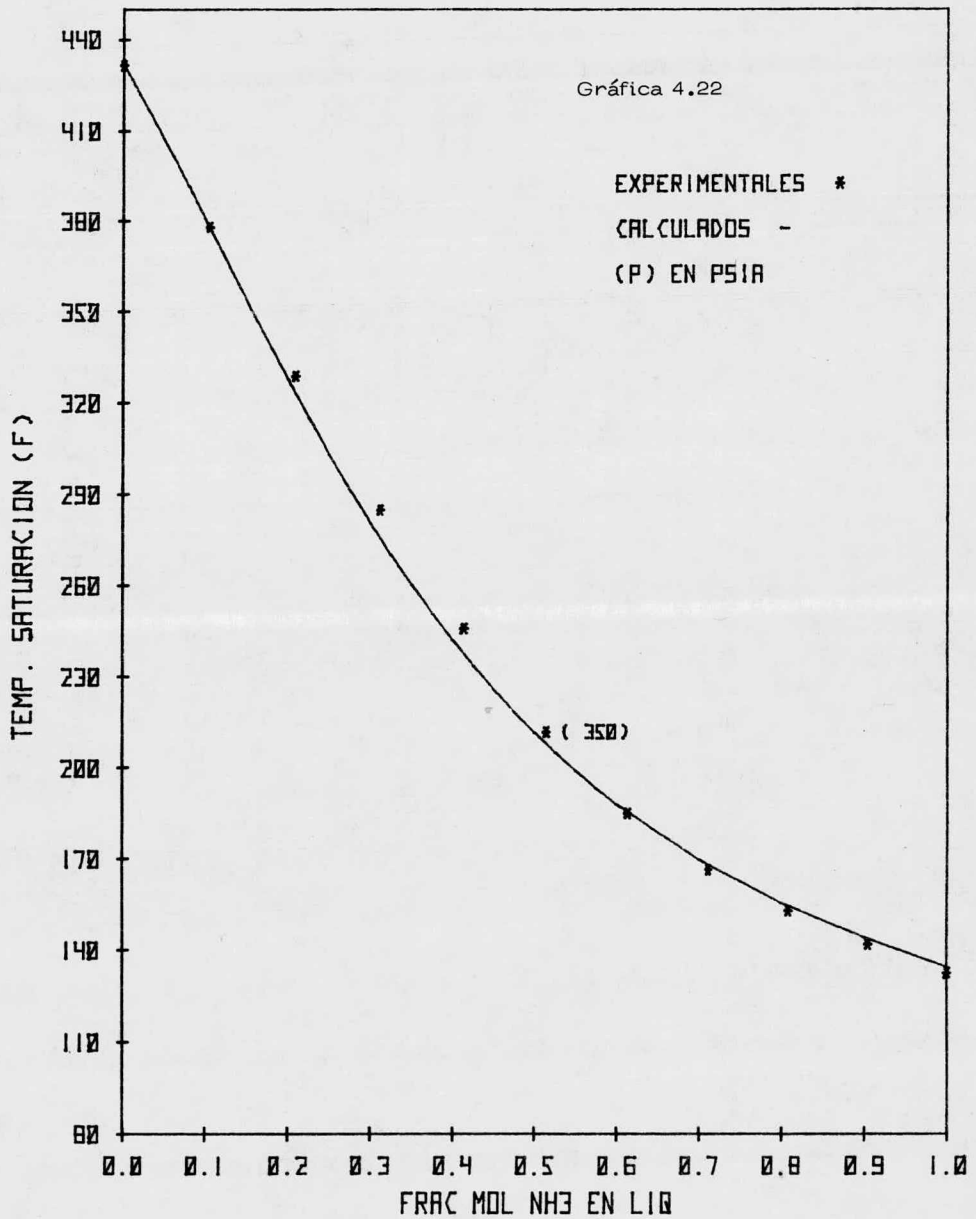


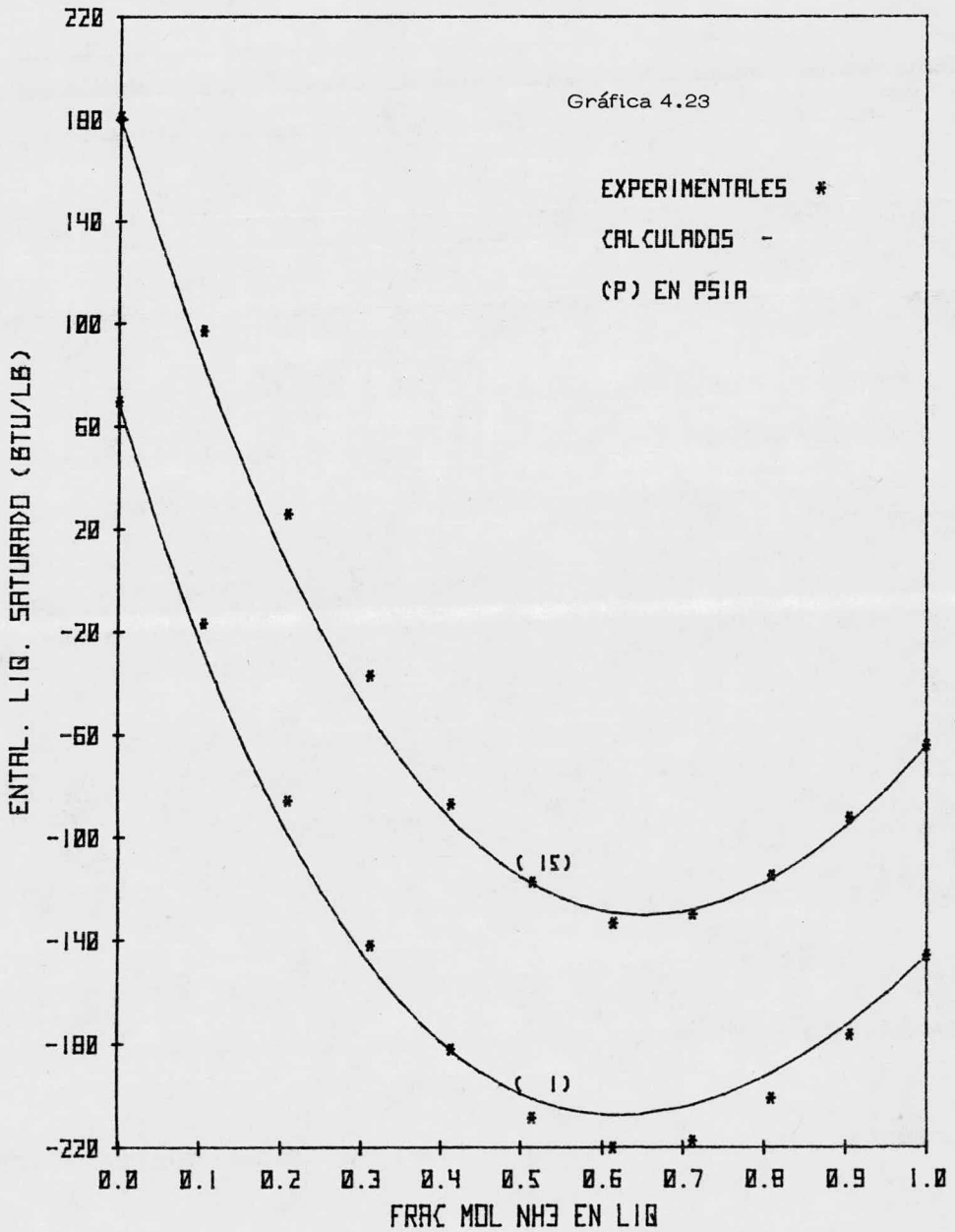


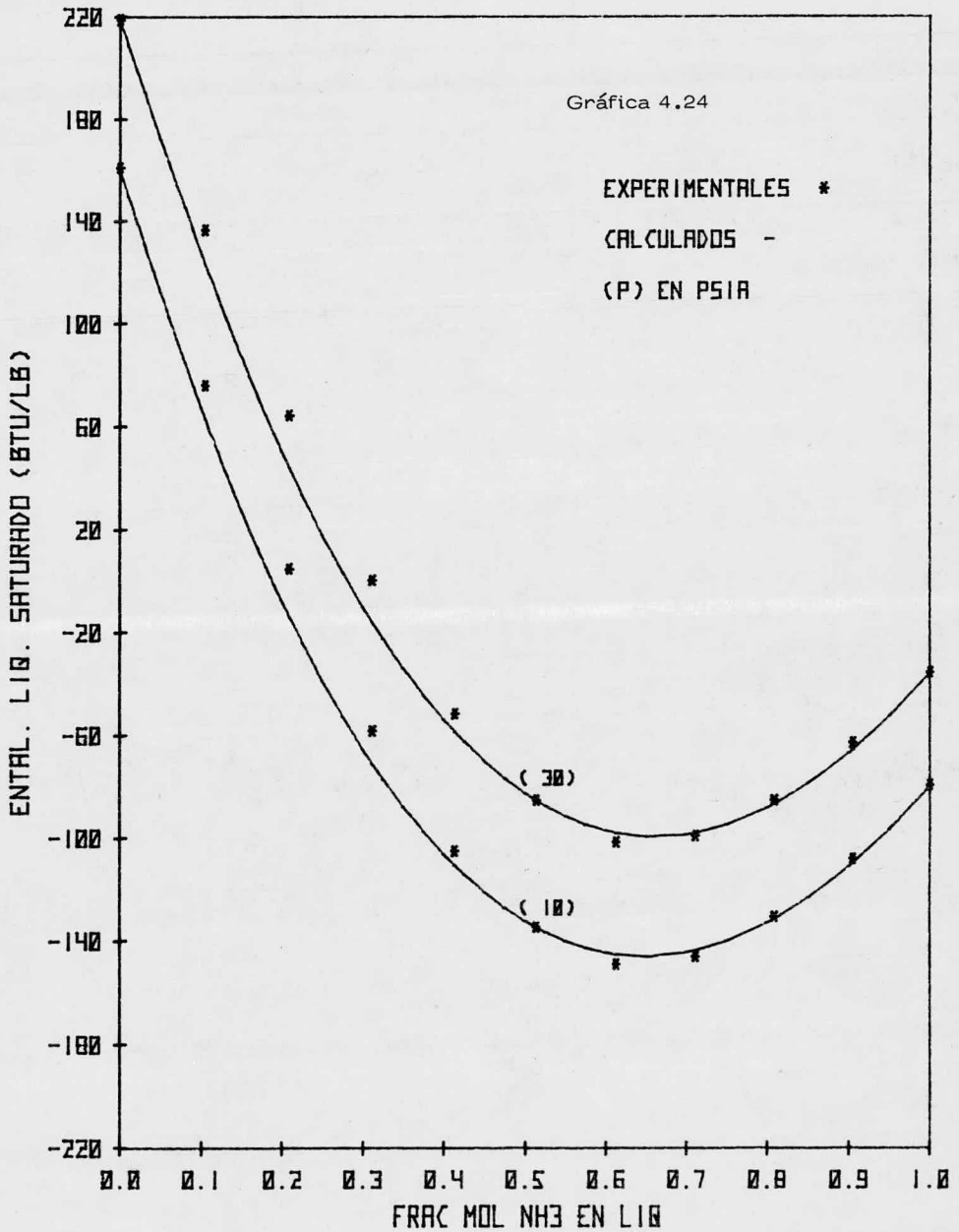


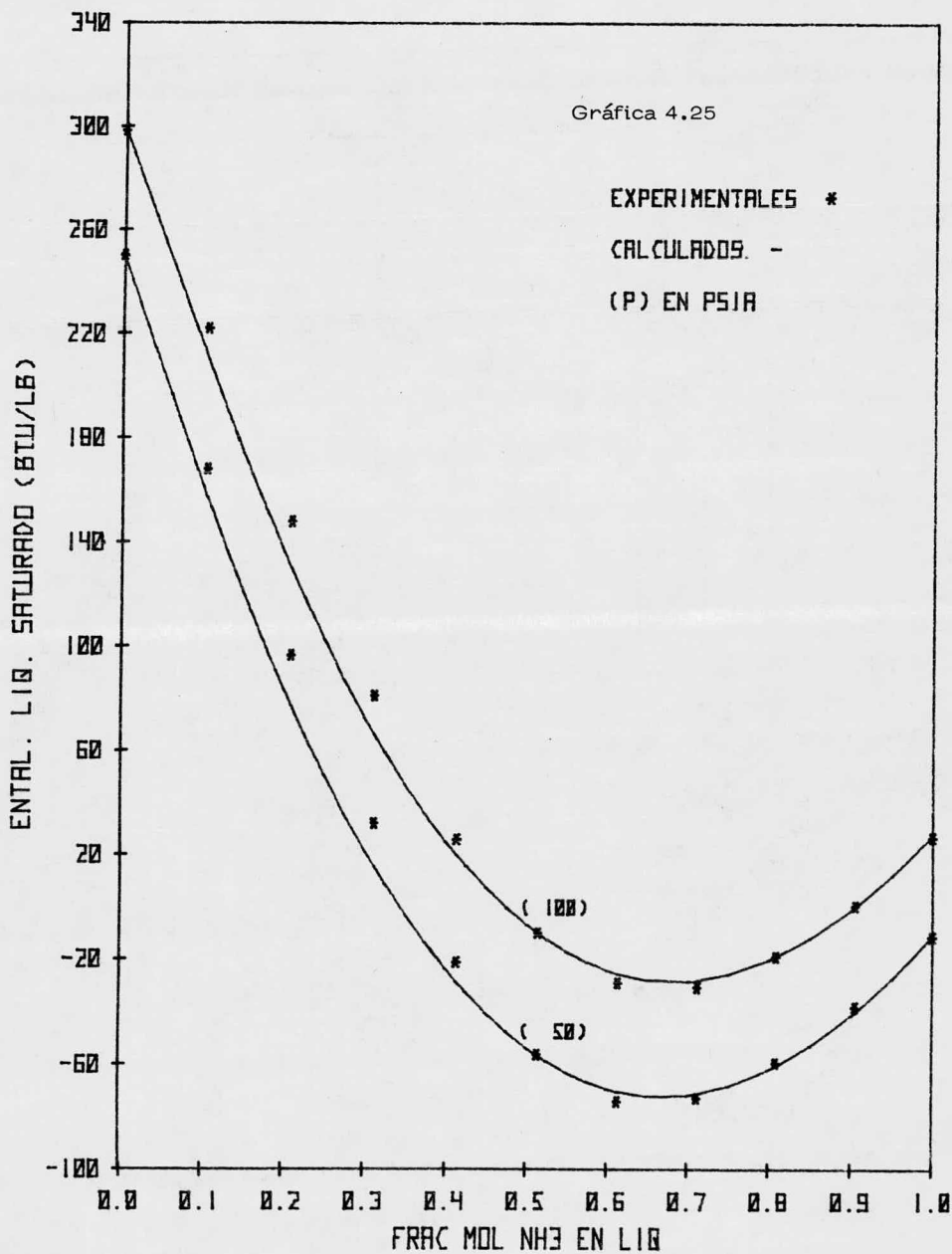


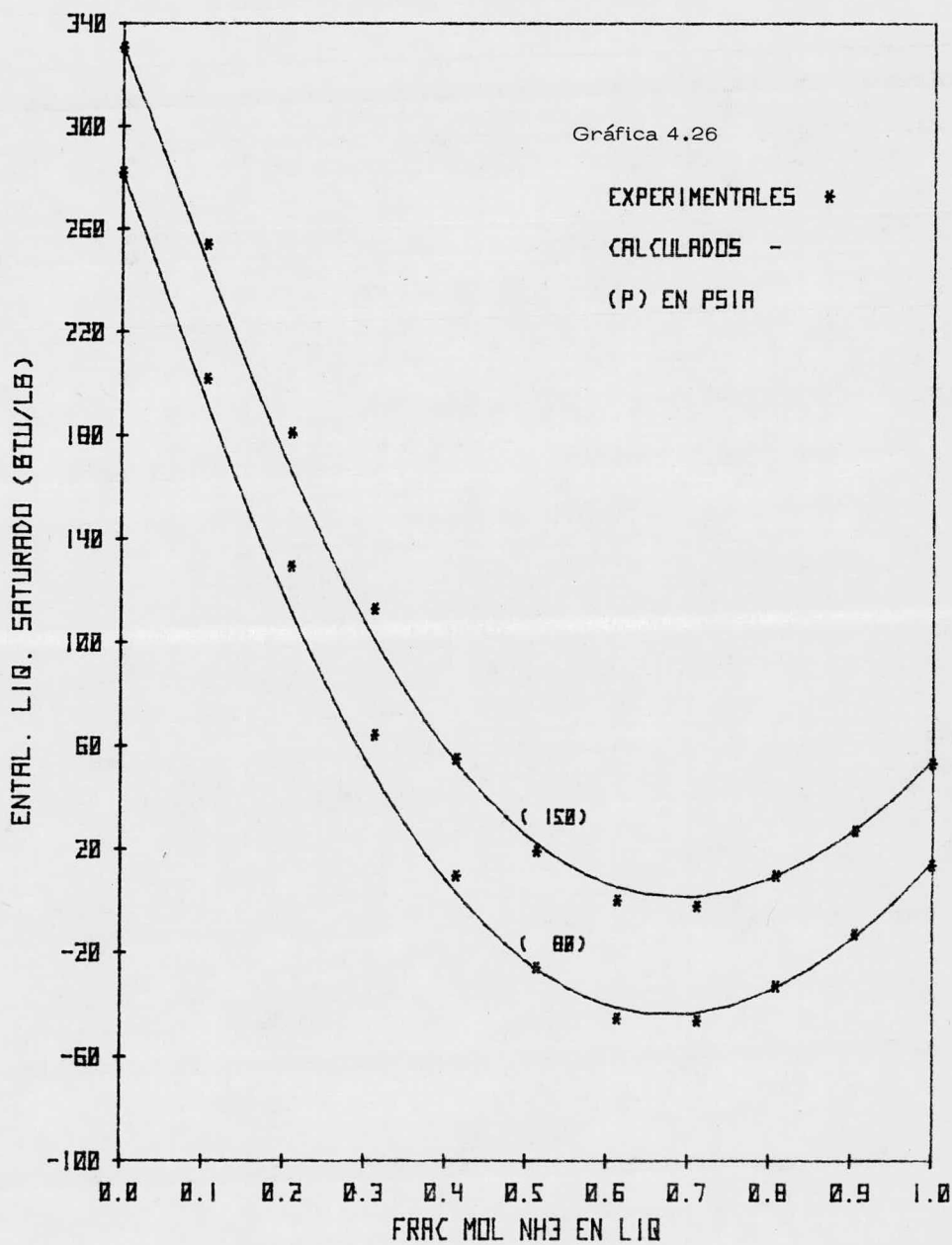


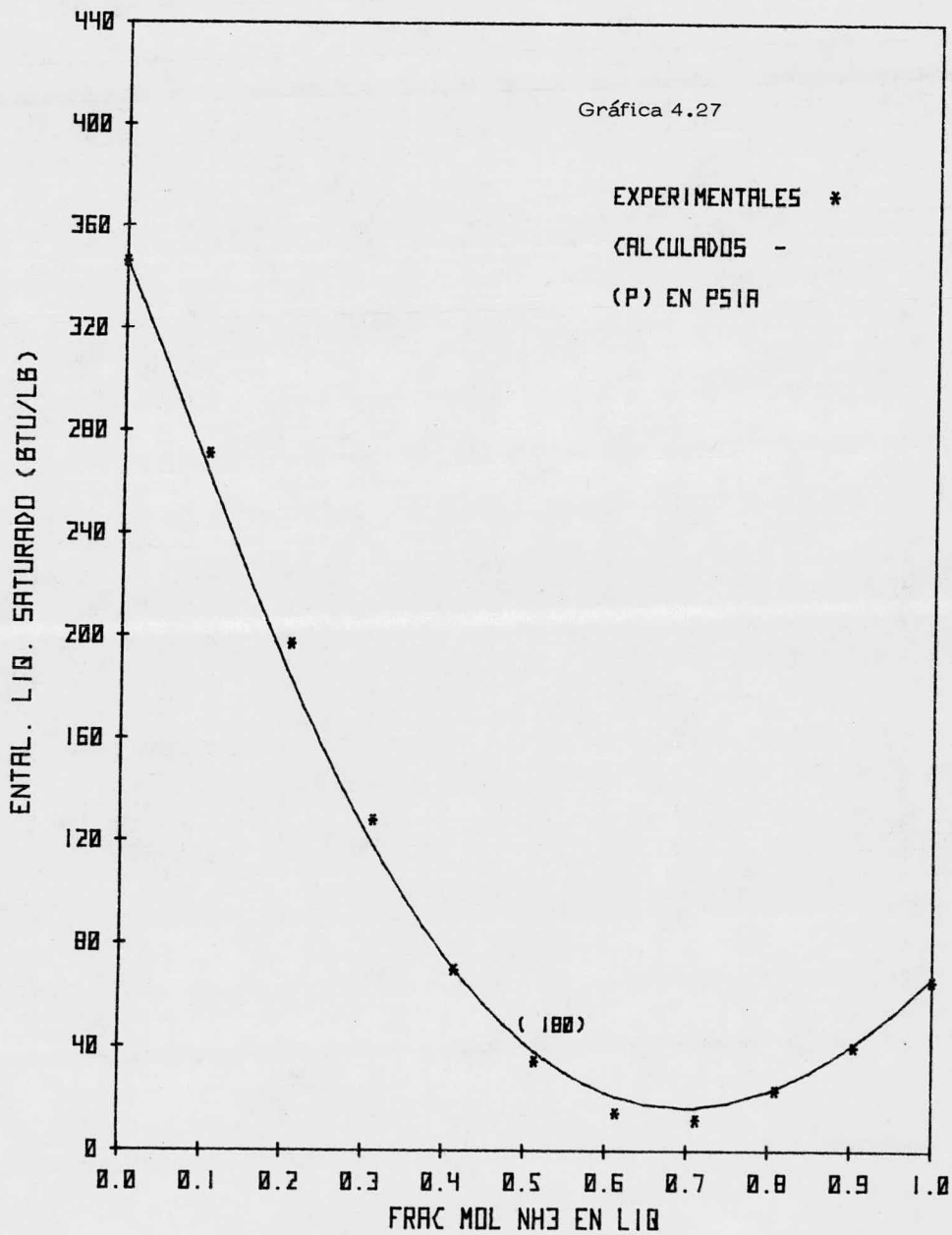


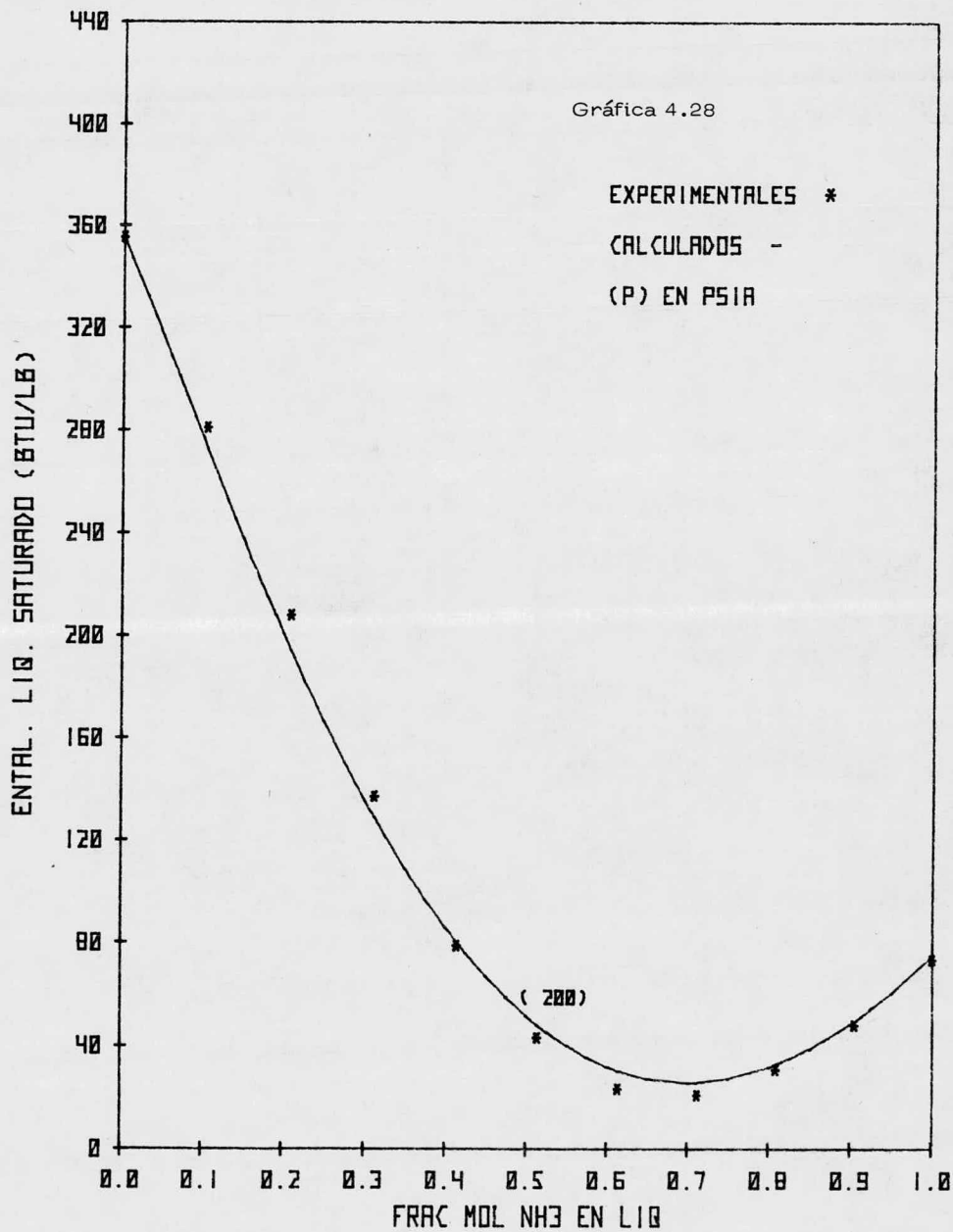


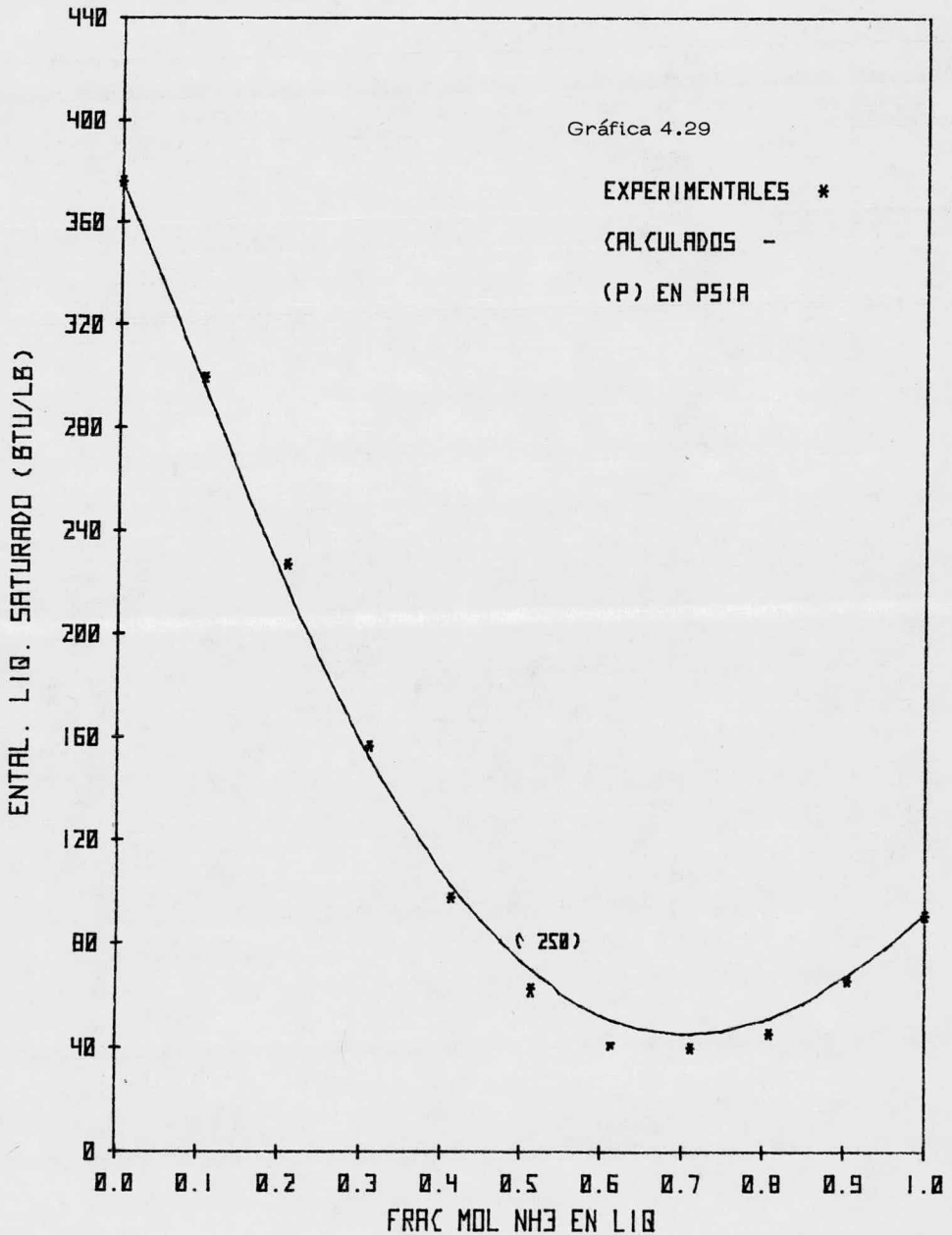


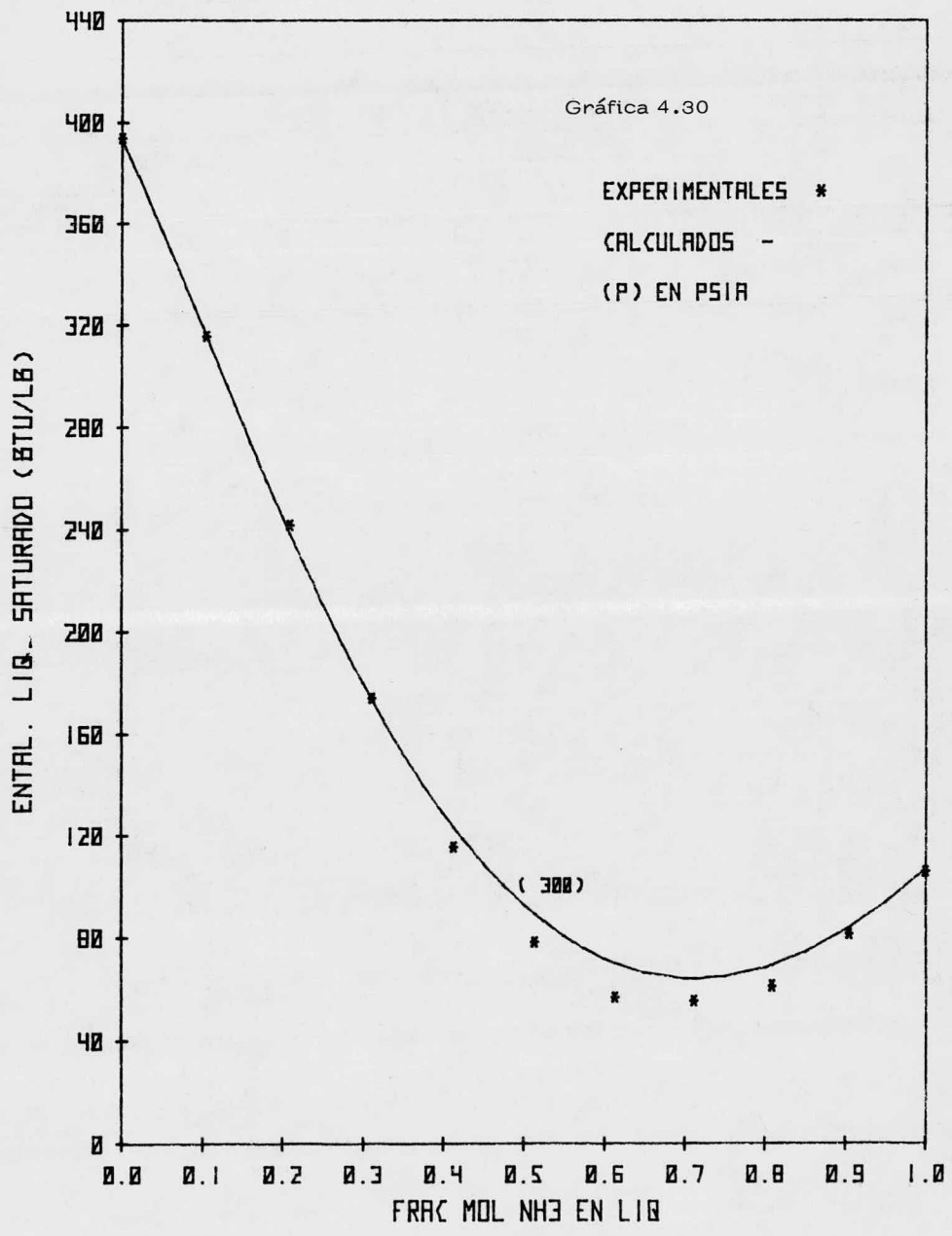


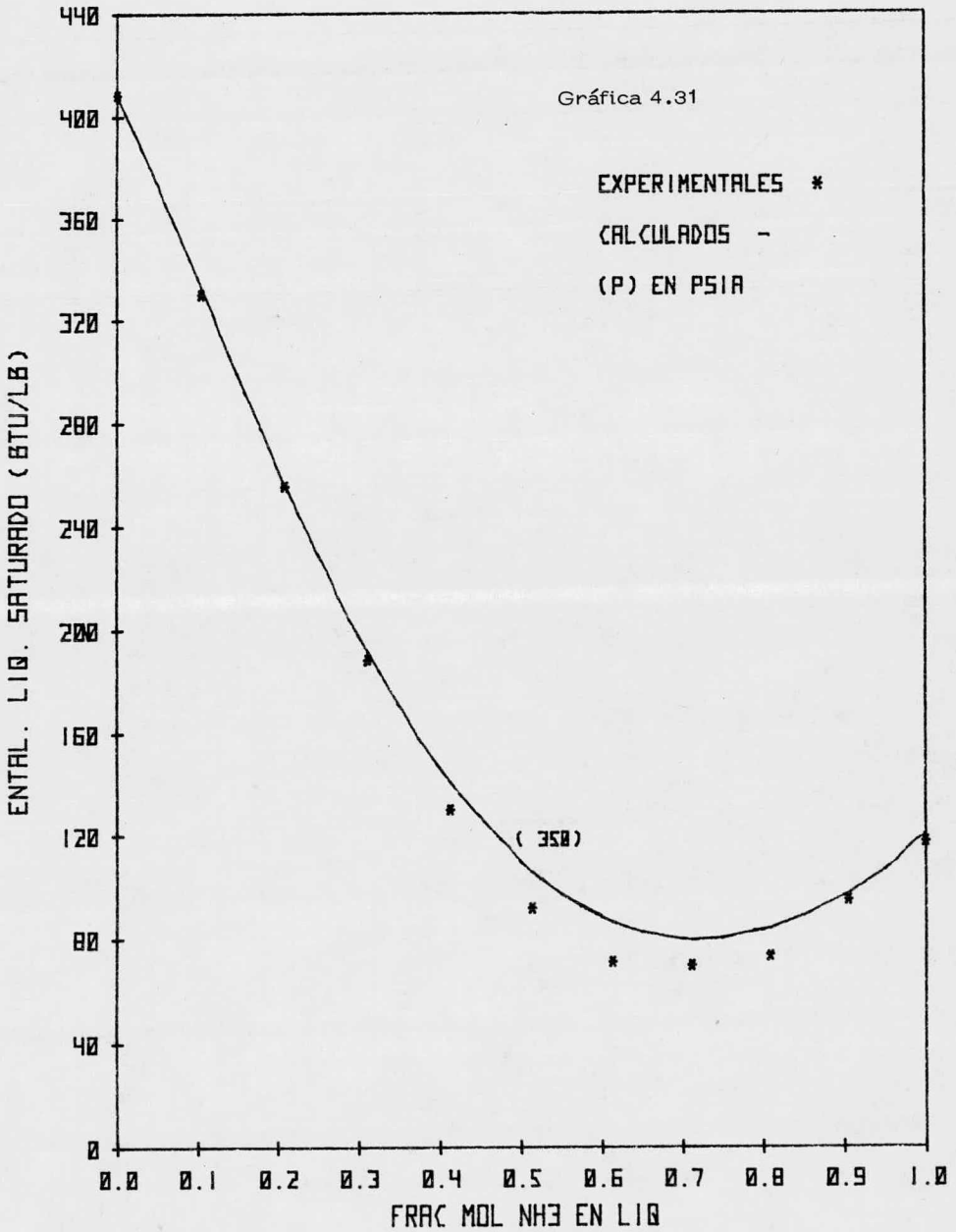












4.2 PROPIEDADES TERMOFÍSICAS AMONÍACO - AGUA

Se tiene la necesidad de predecir los valores de las siguientes propiedades como funciones de la presión, temperatura y composición para la solución amoníaco-agua:

- Viscosidad de la fase líquida
- Viscosidad de la fase vapor
- Conductividad de la fase líquida
- Conductividad de la fase vapor.

Debido a que la información sobre los valores de dichas propiedades para la solución considerada es muy escasa en la literatura, puesto que sólo existen valores para condiciones de presión, temperatura y composición muy particulares, se ha optado por utilizar las reglas de mezclado más idóneas existentes en la literatura para calcular los valores de la mezcla a partir de los valores de los componentes puros, sobre los que existe abundante información.

4.2.1 Viscosidad de la fase líquida

En virtud de que el efecto de la presión sobre la viscosidad de los líquidos es despreciable a presiones menores de 40 atm.⁽⁹⁾ y ya que el rango de trabajo considerado está muy por debajo de este valor, se hace la consideración de que la viscosidad del líquido sólo es función de la composición y de la temperatura.

La ecuación utilizada para predecir la viscosidad de la fase líquida en función de las dos variables anteriores es:⁽¹⁾

$$\mu_{mezL}(T, x) = \frac{\mu_{NH_3} \mu_{H_2O}}{(1-W)\mu_{NH_3} + W\mu_{H_2O}} \quad (4.125)$$

en donde w es la fracción peso de amoníaco en la mezcla y μ_{NH_3}, μ_{H_2O} son las viscosidades de los componentes puros a la temperatura T . Las expresiones para predecir estos últimos valores se obtuvieron a partir de datos experimentales y son:

$$\mu_{NH_3} = \text{EXP}(-1.6128 - 0.0093T + 1.013 \times 10^{-5} T^2) \quad (4.126)$$

$$\mu_{H_2O} = \left[0.021482 \left(\frac{T}{1.8} - 26.2128 + (8078.4 + \frac{T}{1.8} - 26.2128)^2 \right)^{0.5} - 1.2 \right]^{-1} \quad (4.127)$$

En estas tres ecuaciones la temperatura (T) está dada en $^{\circ}\text{F}$ y la viscosidad se obtiene en centipoises (cp). Su rango de aplicación es el intervalo de temperaturas comprendido entre 32°F y 280°F y presión inferior a 40 atm.

4.2.2 Viscosidad de la fase vapor

Si se hace la consideración de que la viscosidad del vapor es independiente de la presión (lo que es válido para presiones inferiores a 15 atm.⁽⁹⁾), la viscosidad de la mezcla en fase vapor puede expresarse como función de la temperatura y de la composición de la siguiente manera:

$$\mu_{mez} (T, y) = \frac{\sum y_i \mu_i (M_i)^{1/2}}{\sum y_i (M_i)^{1/2}} \quad (4.128)$$

que para este caso particular se reduce a:

$$\mu_{mez} (T, y) = \frac{y \mu_{NH_3} (M_{NH_3})^{1/2} + (1-y) \mu_{H_2O} (M_{H_2O})^{1/2}}{y (M_{NH_3})^{1/2} + (1-y) (M_{H_2O})^{1/2}} \quad (4.129)$$

Estas ecuaciones son una expresión de la regla de mezclado propuesta por Hering y Zipper⁽¹⁴⁾, conocida como la "Regla de la Raíz Cuadrada". Ha sido utilizada para la predicción de viscosidades de mezclas gaseosas a baja presión - con gran éxito y se han reportado como desviaciones máxima y media 5 y 1.5 % respectivamente, para una gran cantidad de mezclas analizadas.

La viscosidad de cada uno de los componentes puros en función de la temperatura puede predecirse de acuerdo a las siguientes expresiones, obtenidas a partir de datos experimentales:

$$\mu_{NH_3} = 0.00225 T^{0.2215} \quad (4.130)$$

$$\mu_{H_2O} = 0.00237 T^{0.3165} \quad (4.131)$$

Para estas expresiones T está en °F, la viscosidad en centipoises y su rango de aplicación está comprendido entre 32°F y 250°F, siempre que la presión sea inferior a 15 atm.

4.2.3 Conductividad Térmica de la fase líquida

Puesto que la influencia de la presión sobre la conductividad térmica de - los líquidos es despreciable a presiones inferiores a 500 psia (33 atm.), se va a suponer que dicha propiedad sólo depende de la temperatura y la composición.

La ecuación utilizada para correlacionar la conductividad térmica de la - solución líquida es:

$$k_{mezL} = \frac{k_{NH_3} \operatorname{senh}(100wb) + k_{H_2O} \operatorname{senh}(100(1-w)b)}{\operatorname{senh}(100b)} \quad (4.132)$$

en donde w es la fracción masa del amoníaco en la mezcla y "b" es una - constante independiente de la temperatura, que para este caso específico tiene un valor de 9.2539062×10^{-3}

A partir de datos experimentales se obtienen las expresiones para las con- ductividades de los componentes puros, que resultan ser:

$$k_{NH_3} = -0.2728 + 4.7353 \times 10^{-3} T - 12.3897 \times 10^{-6} T^2 \quad (4.133)$$

$$k_{H_2O} = 0.2876 + 10.0678 \times 10^{-3} T - 27.8823 \times 10^{-7} T^2 \quad (4.134)$$

En estas expresiones las unidades utilizadas son:

T en °F

k en Btu/hr ft °F

y los rangos de aplicación son:

k_{NH_3} en $20 < T < 270$, $P < 40$ atm

$k_{\text{H}_2\text{O}}$ en $50 < T < 400$, $P < 40$ atm

La regla de mezclado usada en este caso es la propuesta por Barratt y Nettleton⁽¹⁷⁾, que ha sido ampliamente probada en la literatura y se supone bastante precisa (un error promedio de 2 %).

4.2.4 Conductividad Térmica de la fase vapor

Haciendo la suposición de independencia de la conductividad térmica con respecto a la presión (lo que provoca un error máximo de 10% a presiones inferiores a 15 atm.), la expresión que proporciona la conductividad térmica de la fase vapor es:

$$k_{\text{mezv}} = \frac{k_{\text{NH}_3}}{1 + A_{12} \frac{(1-x)}{x}} + \frac{k_{\text{H}_2\text{O}}}{1 + A_{21} \frac{x}{(1-x)}} \quad (4.135)$$

La regla de mezclado aquí empleada es la debida a Lindsay y Bromley⁽¹⁷⁾, que ha sido considerada como la más exacta disponible para la predicción de conductividades de mezclas en fase vapor a presiones bajas y medias.

Las constantes que aparecen en la ecuación pueden evaluarse como:

$$A_{ij} = 0.25 (1 + \sqrt{a})^2 b \quad (4.136)$$

en donde

$$a = \frac{\mu_i}{\mu_j} \left(\frac{M_j}{M_i} \right)^{0.75} \frac{(1 + S_i/T)}{(1 + S_j/T)} \quad (4.137)$$

$$b = \left(1 + \frac{S_{ij}/T}{1 + S_i/T} \right) \quad (4.138)$$

siendo S_i la constante de Sutherland para el componente i y S_{ij} ($= S_{ji}$) la constante para la mezcla de ambos componentes. En este caso particular

$$S_{\text{NH}_3} = 679 \text{ } ^\circ\text{R}, \quad S_{\text{H}_2\text{O}} = 983 \text{ } ^\circ\text{R}, \quad S_{ij} = 0.733 (S_i S_j)^{1/2} \quad (4.139)$$

Las conductividades de los componentes puros en función de la temperatura pueden expresarse como:

$$k_{\text{NH}_3} = \text{EXP}(0.002 T - 4.4171) \quad (4.140)$$

$$k_{\text{H}_2\text{O}} = \text{EXP}(0.0016 T - 4.6185) \quad (4.141)$$

Las unidades de estas ecuaciones son las mismas que para la conductividad del líquido y los rangos en que se aplican son: temperatura entre 32°F y 270°F, presión inferior a 15 atm.

4.3 PROPIEDADES DEL AGUA

Para el agua que va a servir como medio de calentamiento, se necesita contar con medios para predecir las siguientes propiedades:

- Capacidad Calorífica
- Viscosidad
- Conductividad Térmica

En la literatura existe información muy abundante sobre los valores de dichas propiedades, tanto de tipo experimental como correlaciones para su predicción.

En vista de que las propiedades anteriores en los líquidos son funciones muy débiles de la presión (excepto en el caso de que ésta sea demasiado elevada), las ecuaciones que se presentan a continuación expresan a la propiedad considerada como función de la temperatura exclusivamente.

4.3.1 Capacidad Calorífica

$$C_{p_{H_2O}} = 1.0062 - 0.4982 \times 10^{-3} T + 0.8947 \times 10^{-5} T^2 - 0.345 \times 10^{-7} T^3 \quad (4.142)$$

Cp en Btu/lb, T en °F, 32 < T < 350

4.3.2 Viscosidad

$$\mu_{H_2O} = \left[0.021482 \left(\frac{T}{1.8} - 26.2128 + \left(8078.4 + \frac{T}{1.8} - 26.2128 \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} - 1.2 \right]^{-1} \quad (4.143)$$

en cp, T en °F, 32 < T < 280

4.3.3 Conductividad Térmica

$$k_{H_2O} = 0.2876 + 10.068 \times 10^{-4} T - 27.88 \times 10^{-7} T^2 + 19.54 \times 10^{-10} T^3 \quad (4.144)$$

k en Btu/hr ft °F, T en °F, 50 < T < 400

SIMBOLOGIA EMPLEADA (Capítulo 4)

a	Constante de la ecuación de Lindsay Bromley
A	Energía libre de Helmholtz
A_i	Constantes en la ecuación del 2 ^{do} Coeficiente Virial
b	Constante de la ecuación de Lindsay Bromley
B_i	Constantes en la ecuación del C_p ($P = 0$) de cada componente (vapor)
C_i	Constantes en la ecuación PVT del líquido
C_p	Capacidad calorífica a presión constante
D_i	Constantes en la ecuación del C_p ($P = P_0$) de cada componente (liq.)
E_i	Constantes definidas por las Ec. (4.42) a (4.49)
F	Grados de libertad (Ecuación de la regla de las fases)
F_i	Constantes de la ecuación de la energía libre en exceso
G	Energía libre de Gibbs
G_i	Constantes definidas por las Ec. (4.50) a (4.57)
H	Entalpía
k	Conductividad térmica
M	Peso molecular
M_i	Constantes definidas por las Ec. (4.29) a (4.39)
n_i	Número de moles
N_i	Constantes definidas por las Ec. (4.29) a (4.39)
P	Presión
P	Número de Fases (Ec. de la regla de las fases)
R_i	Constantes definidas por las Ec. (4.67) a (4.69)
S	Entropía
S_i	Constantes definidas por las Ec. (4.70) a (4.72)
S	Constantes de Sutherland
T	Temperatura
U	Energía interna
U_i	Constantes definidas por las Ec. (4.80) a (4.83)
V	Volumen
V_i	Constantes definidas por las Ec. (4.84) a (4.86)
w	Fracción peso de amoníaco
x	Fracción mol de amoníaco en el líquido
y	Fracción mol de amoníaco en el vapor
α	Parámetro definido por la Ec. (4.22)
β	Parámetro definido por la Ec. (4.23)
Θ	Temperatura adimensional (T/T_S)
μ	Potencial Químico (Energía libre molar parcial)
μ	Viscosidad
π	Presión adimensional (P/P_S)

$\bar{\quad}$	Propiedad molar
i	Referente al componente "i-ésimo"
k	Referente al componente "k-ésimo"
L	Fase líquida
mez	De la mezcla
NH ₃	Referente al amoníaco
H ₂ O	Referente al agua
o	En el estado de referencia
R	Propiedad adimensional o "reducida"
s	Temperatura o presión de referencia de propiedades adimensionales
T	Total
V	Fase vapor

Superíndices

$\bar{\quad}$	Propiedad molar parcial
j	Referente a la fase "j-ésima"
L	Fase líquida
V	Fase vapor
I	Fase 1
II	Fase 2

CAPITULO 5.- ELABORACION DE UN PROGRAMA DE COMPUTADORA Y RESULTADOS

El objetivo del presente capítulo es presentar la elaboración de un programa de computadora, basado en lo que se ha desarrollado en los capítulos anteriores.

Se presentan en forma gráfica una serie de resultados obtenidos con el modelo, con el objeto principal de mostrar el funcionamiento del mismo. Las corridas se han realizado usando las características físicas del equipo experimental.

Por último, se mencionan brevemente los pasos necesarios para completar este modelo, primero a nivel sistema de generación y posteriormente a nivel sistema total.

INTRODUCCION

Con el objeto de resolver el problema específico planteado en el Capítulo 3, se ha desarrollado un programa de computadora, escrito en idioma FORTRAN IV, basado en la metodología general propuesta en dicho capítulo.

5.1 ESTRUCTURA DEL PROGRAMA

El programa que ha sido desarrollado tiene la estructura que se muestra en la Fig. 5.1

5.1.1 Programa Principal

Realiza la lectura de las características del equipo y de las condiciones especificadas de operación a las que se desea realizar la simulación. Su misión es lograr la convergencia de las variables supuestas. Para esto se vale de la subrutina Genera.

5.1.2 Subrutina Genera

Esta subrutina realiza la simulación del sistema global a partir de los valores de las variables supuestas que le proporciona el programa principal. Su objetivo es regresar a este último los valores calculados (P_e , T_{ent}) para que pueda llevar a cabo la convergencia. La simulación del sistema global se realiza con la ayuda de las subrutinas que describen el comportamiento de cada una de las partes que componen el sistema de generación.

5.1.3 Subrutinas de los componentes del sistema de generación

En cada una de ellas se resuelven los balances y ecuaciones que describen

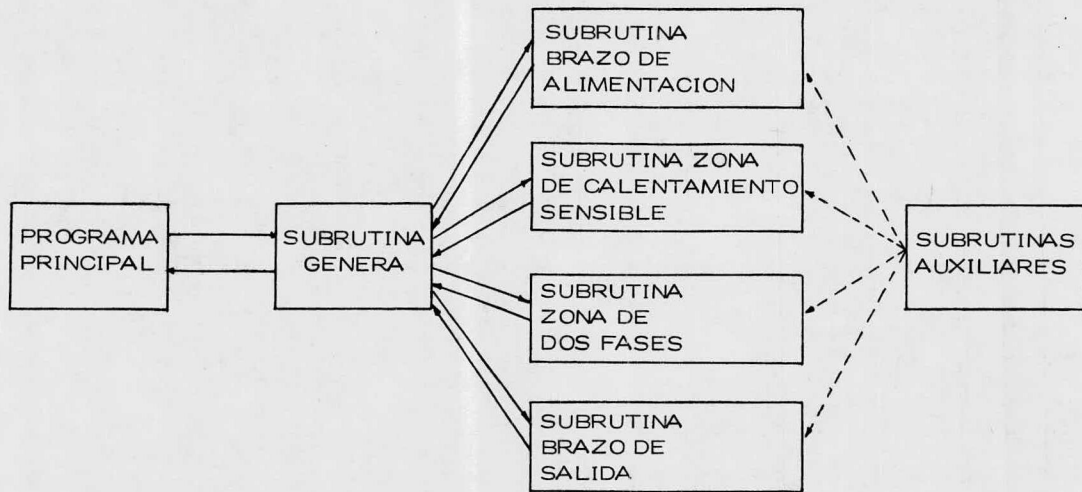


Fig. 5.1 Estructura del Programa

ben la zona considerada (Cap. 3). Su funcionamiento en conjunto está regido por la subrutina Genera, la que les proporciona las condiciones de entrada a cada una de ellas y a la cual regresan las condiciones de salida respectivas. Para su funcionamiento estas subrutinas establecen comunicación con una serie de subrutinas auxiliares, como se muestra en la Fig. 5.2

5.1.4 Subrutinas auxiliares

5.1.4.1 Subrutina Factor de Fricción. Calcula el factor de fricción de Darcy, necesario para el cálculo de la caída de presión, a partir de la ecuación propuesta por Colebrook.

5.1.4.2 Subrutinas para el cálculo de caída de presión en flujo a dos fases. Su objetivo es el cálculo de la caída de presiones en las regiones en donde se presenta flujo a dos fases líquido-vapor. Se utilizan los métodos propuestos por Dukler y Orkiszewski, modificados por DeGance y Atherton (ver Apéndice B).

5.1.4.3 Subrutinas para el cálculo de coeficientes de transferencia de calor. Esta serie de subrutinas tiene como finalidad el cálculo de coeficientes de transferencia de calor, tanto para la zona sensible como para la zona de dos fases. Para ello se utilizan las correlaciones propuestas por Chen, Densler y Hughmark (ver Apéndice C).

5.1.4.4 Subrutinas para el cálculo de propiedades. Se ha incorporado el paquete de subrutinas desarrollado para la predicción de propiedades de la solución amoníaco-agua, junto con el que predice las del medio de calentamiento (ver Capítulo 4).

5.2 RESULTADOS

En el inicio de este trabajo se plantea que uno de los dos objetivos básicos consiste en comenzar a elaborar un modelo matemático del sistema de refrigeración experimental. Posteriormente en el capítulo 3 se afina dicha idea y se plantea como objetivo específico el desarrollar un modelo matemático que presente la operación del sistema de generación en un instante dado.

A partir de la metodología indicada en el capítulo 3, se desarrolla el modelo y se crea el programa de computadora del mismo, como se indica en el inciso anterior.

Resultaría muy adecuado en este momento el poder comparar los resultados que predice el modelo con los de la operación real del sistema, con objeto de observar la confiabilidad y exactitud del primero. Desgraciadamente esto no ha sido posible por las dificultades técnicas encontradas en el equipo experimental que han impedido el arranque.

Es por ello que se ha optado por realizar una serie de corridas, utilizando las características físicas del equipo experimental, con el fin de mostrar la influencia de las diferentes condiciones de operación:

Presión en el tanque

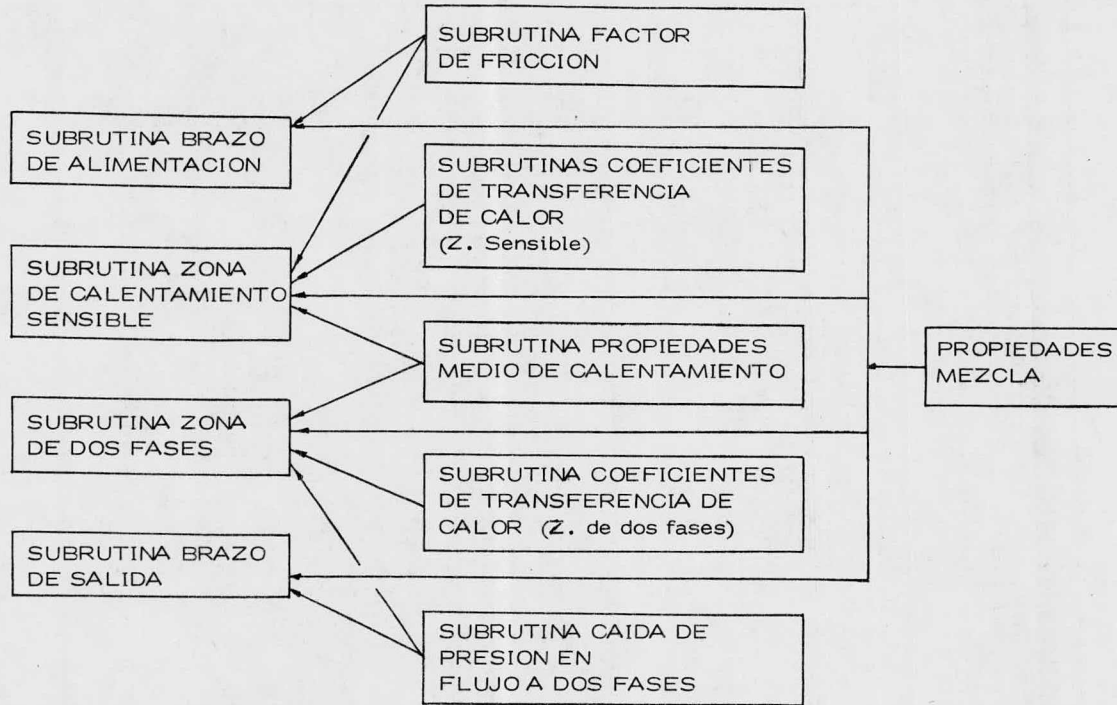


Fig. 5.2 Subrutinas auxiliares

Temperatura de la solución alimentada al generador
 Composición de la solución alimentada al generador
 Gasto del medio de calentamiento
 Temperatura de entrada del medio de calentamiento
 sobre la operación teórica del sistema de generación.

Los intervalos que se han estudiado de las diferentes variables han sido escogidos de acuerdo a los criterios que se exponen a continuación, aunque debe aclarse que en la operación real del equipo los valores de estas variables es tarán fuertemente interrelacionados.

La presión en el tanque ha sido escogida alrededor del valor típico de operación (12 atm.), fijado por la temperatura del medio de enfriamiento de que se disponga para la condensación del refrigerante. La presión mínima utilizada se ha seleccionada de modo que la presión de saturación de la mezcla entrante al generador sea inferior a ella para evitar que la solución hierva en el tanque. La presión máxima ha sido fijada de tal modo que aún exista generación de vapor en el generador, cumpliendo así con las suposiciones del modelo.

De modo similar, el intervalo de temperaturas de solución entrante se si túa en los alrededores de los valores que se piensa tendrá esta variable en la o peración real ($25^{\circ}\text{C} - 70^{\circ}\text{C}$) y de manera que no se vaya a presentar alguna de las siguientes condiciones:

tener una temperatura superior a la de saturación

tener una temperatura con la cual no se presente generación de vapor

El establecimiento del intervalo de concentraciones estudiado está regido por las mismas consideraciones hechas con la temperatura.

Para la temperatura de entrada del medio de calentamiento se selecciona ron valores típicos ($90^{\circ}\text{C} - 110^{\circ}\text{C}$) que puede tener dicha variable, tomando - en cuenta de que se trata de agua previamente calentada en colectores solares planos. Se evita el uso de temperaturas excesivamente altas, pues éstas, al - producir una gran cantidad de evaporación, crean problemas en el modelo por empezarse a apartar de las suposiciones hechas.

Por último, los valores del gasto del medio de calentamiento se fijan por medio de dos criterios básicos:

usar valores razonables, teniendo presentes las limitaciones al traba - jar con colectores solares

garantizar que las correlaciones usadas sean aplicables

Para la representación de la operación del generador se han considerado las siguientes variables dependientes, cuyos valores se obtienen como resultado de la simulación:

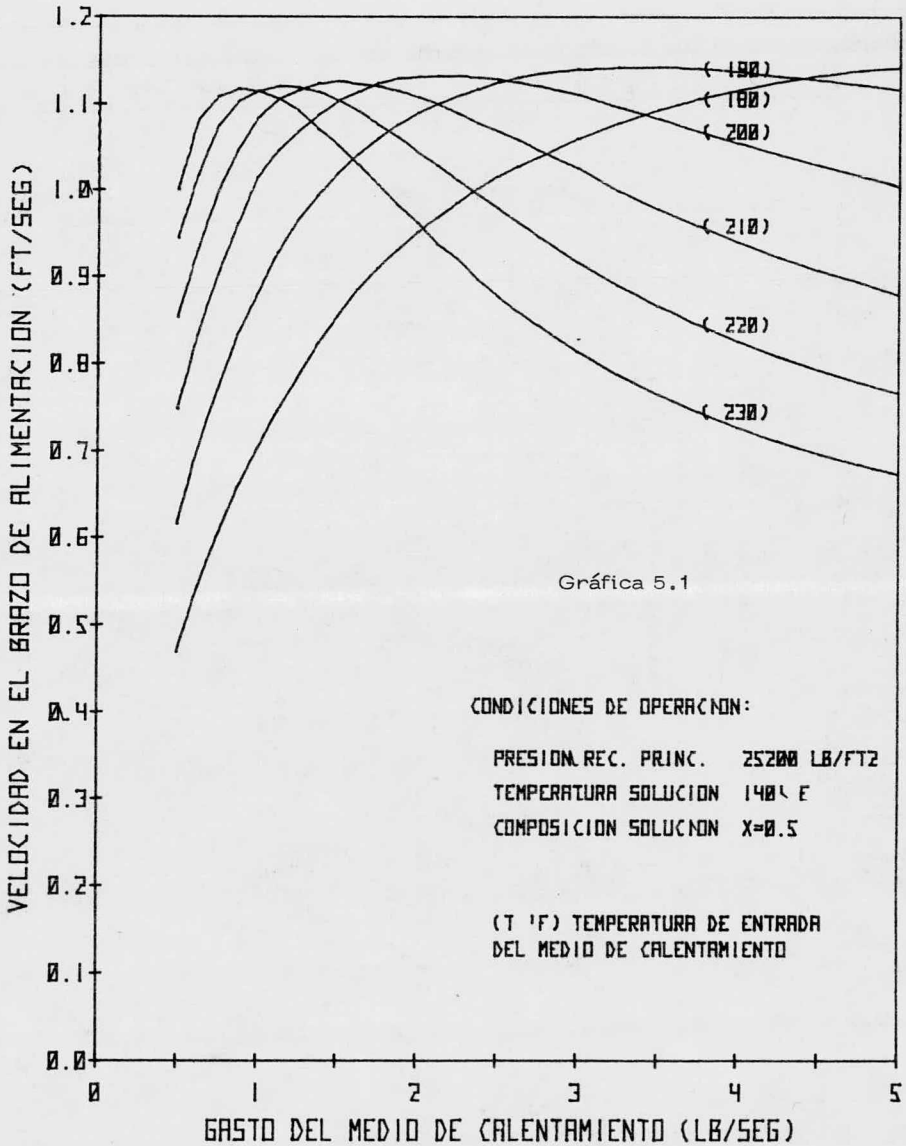
- Gasto en el termosifón (o una variable relacionada, como la velocidad de la mezcla en el brazo de alimentación)

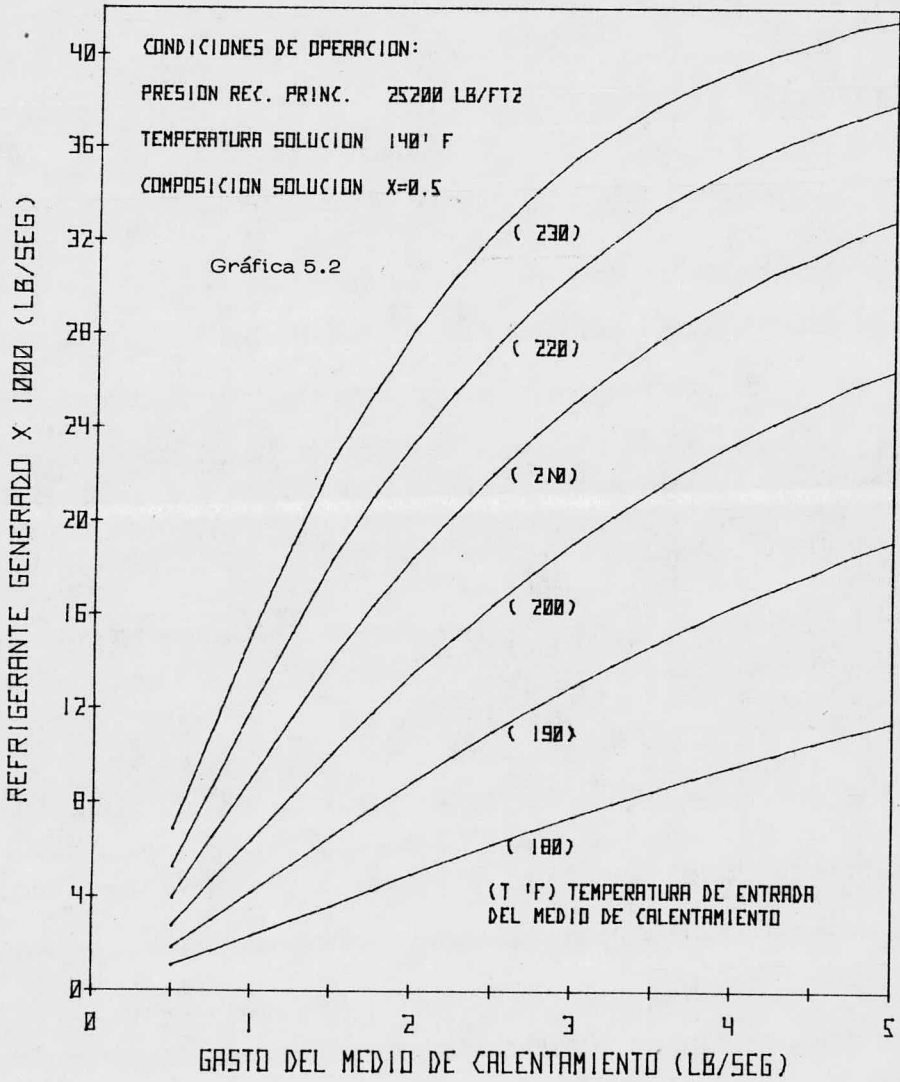
- Porcentaje de longitud total del generador usado en calentamiento sen sible

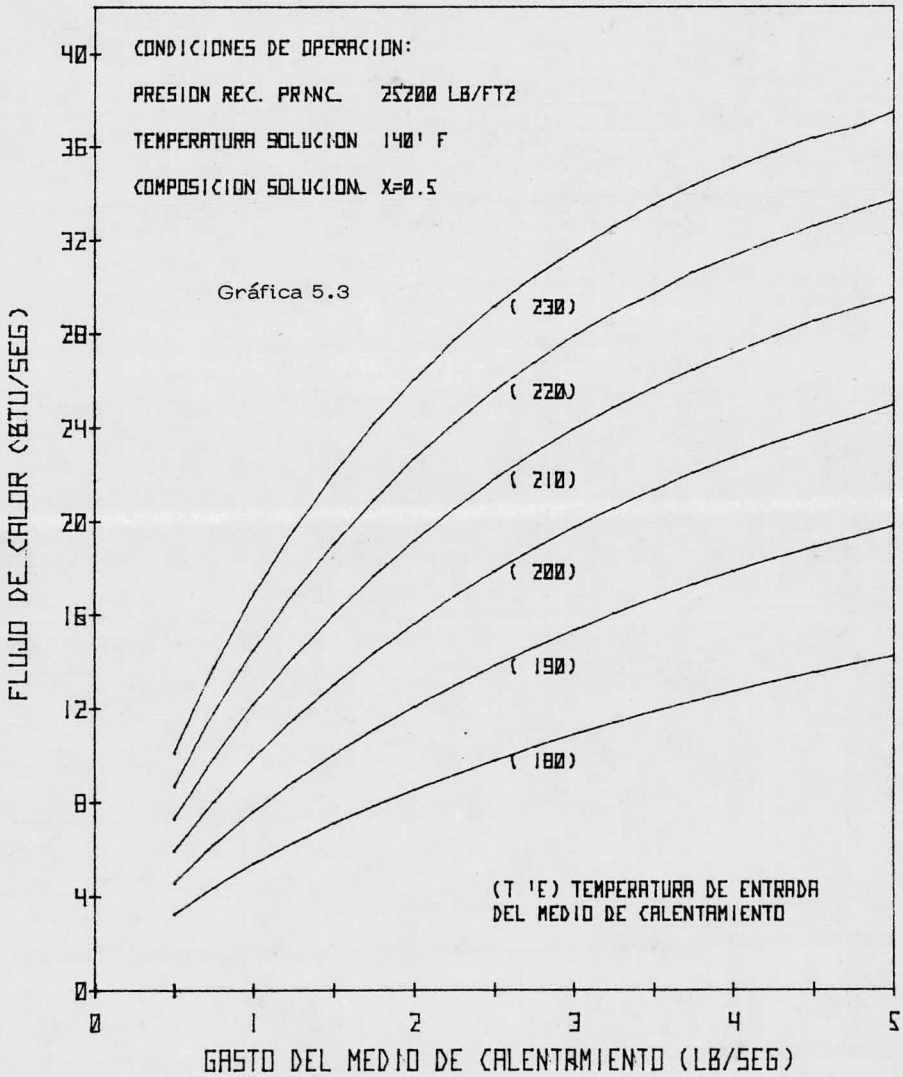
- Calor transmitido en el sistema
- Cantidad generada, composición y temperatura finales de la solución débil y del refrigerante generado
- Temperatura de salida del medio de calentamiento

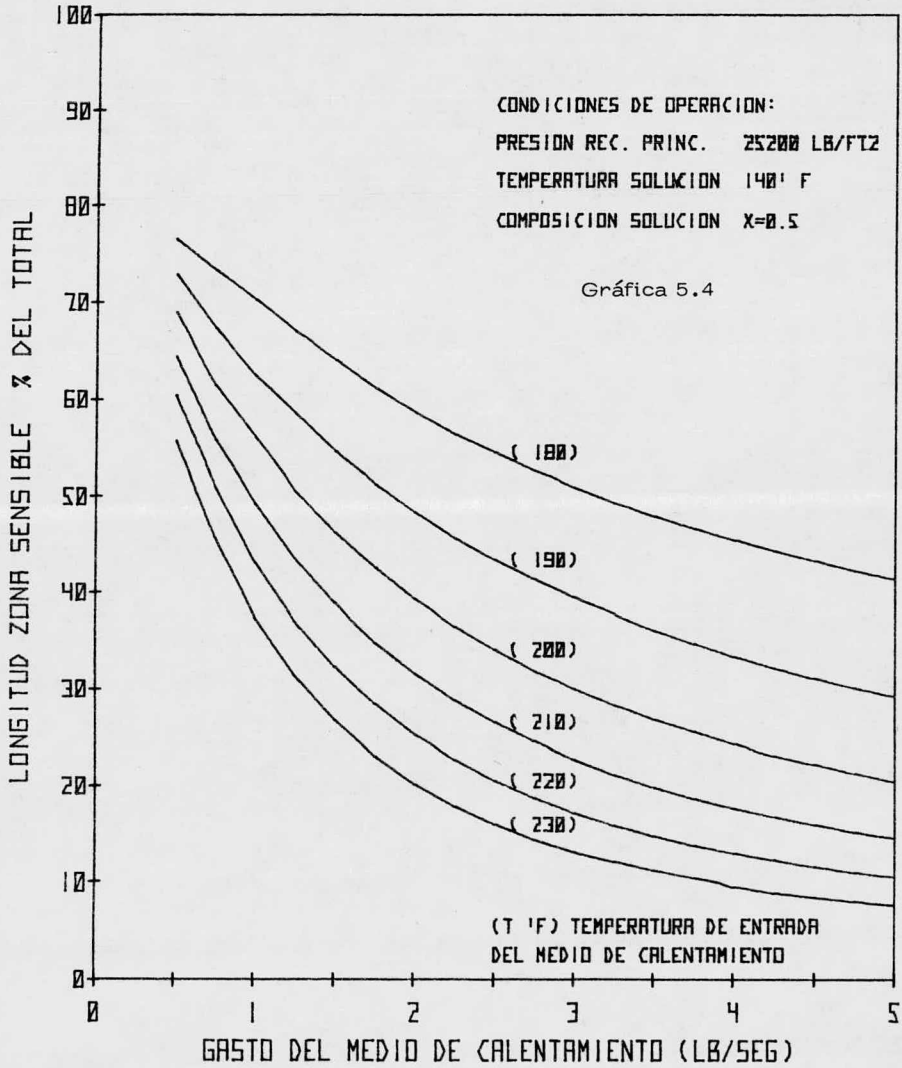
Se han escogido a estas variables como representativas de la operación - del sistema en virtud de que son precisamente sus valores los que interesan co nocer en la operación del sistema (junto con las condiciones de operación).

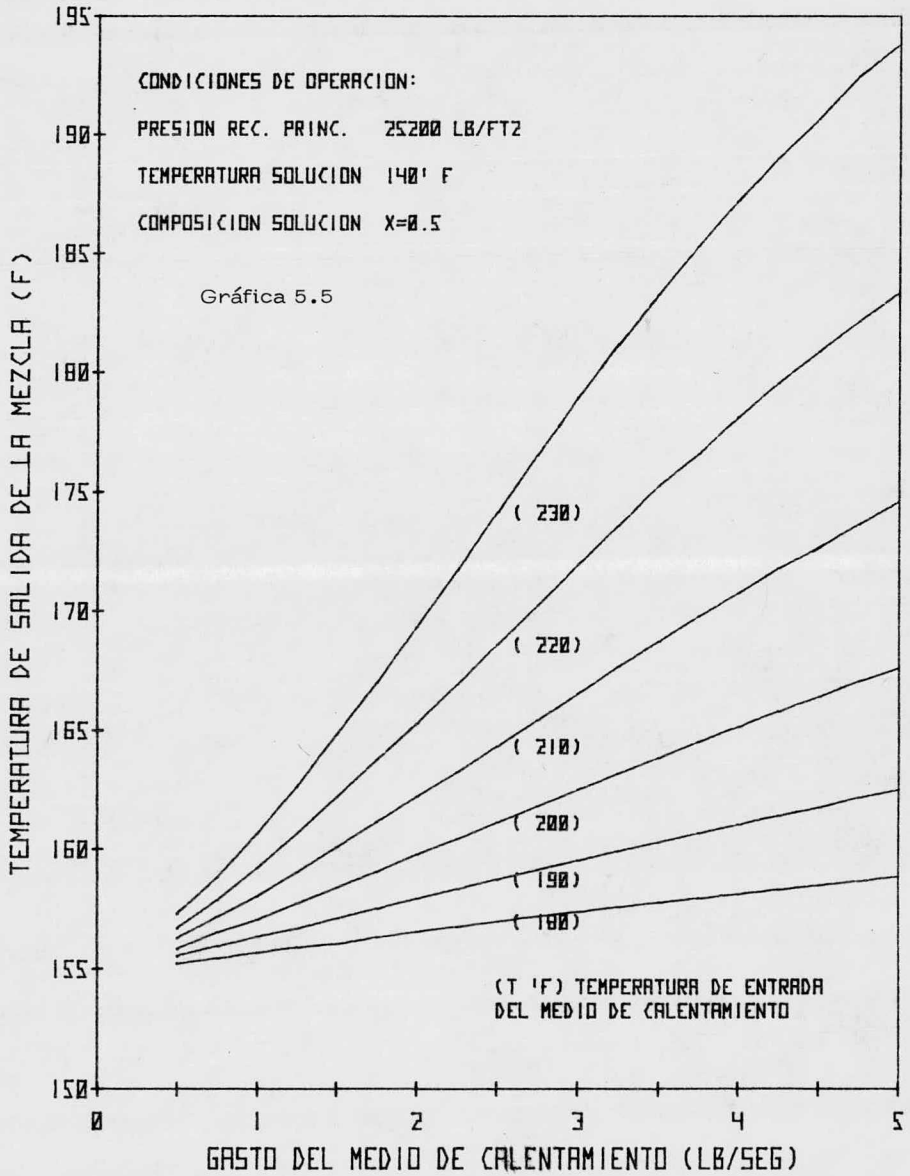
A continuación se presentan una serie de gráficas que muestran los resul tados de las corridas efectuadas.

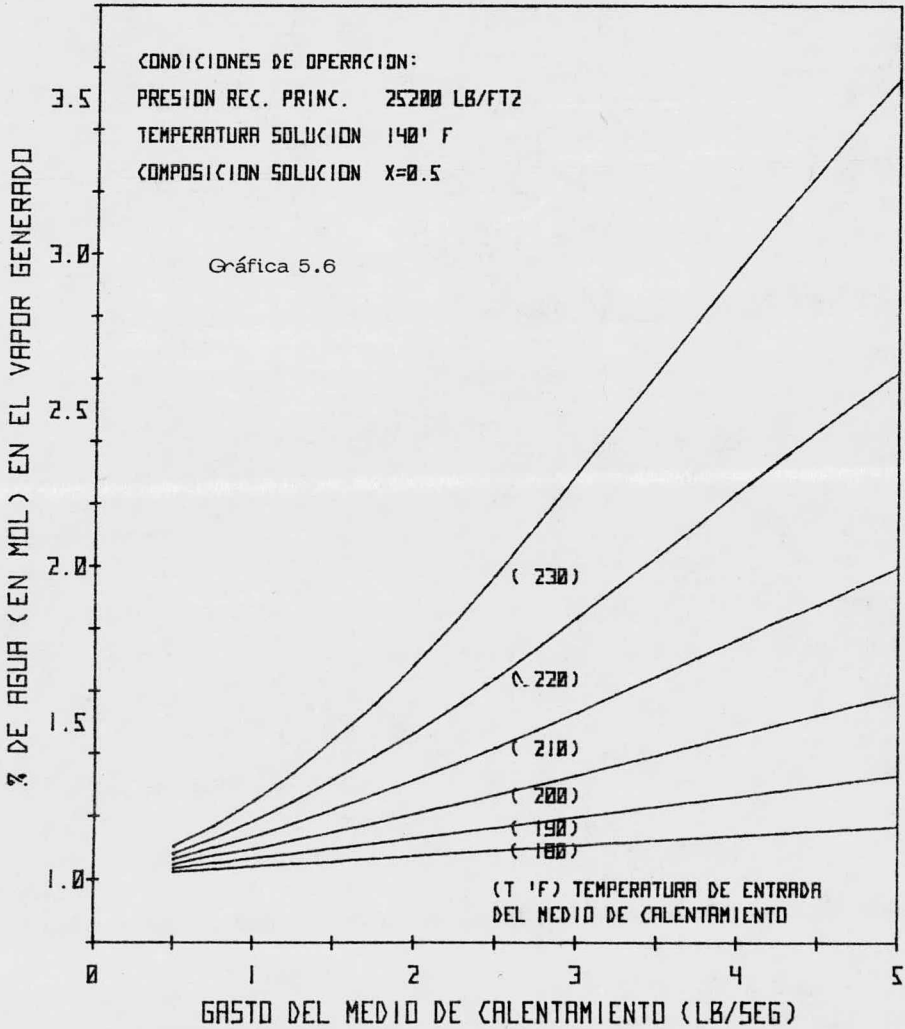


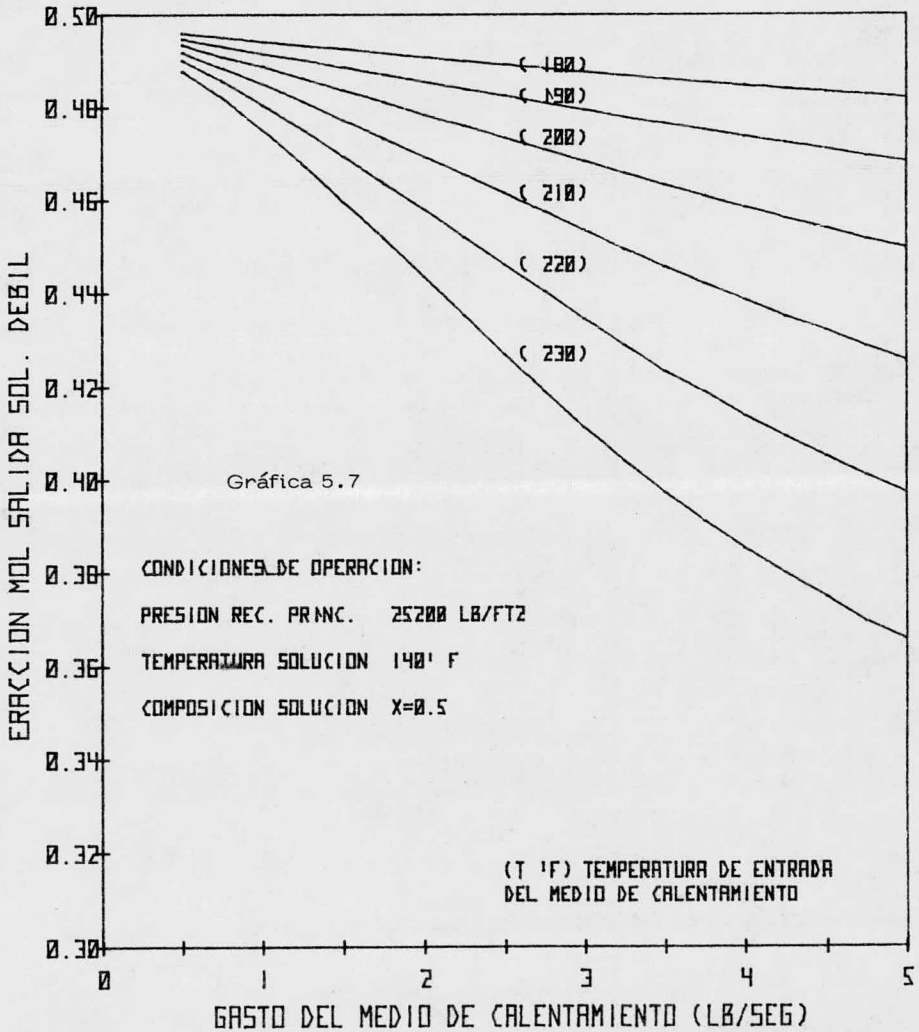


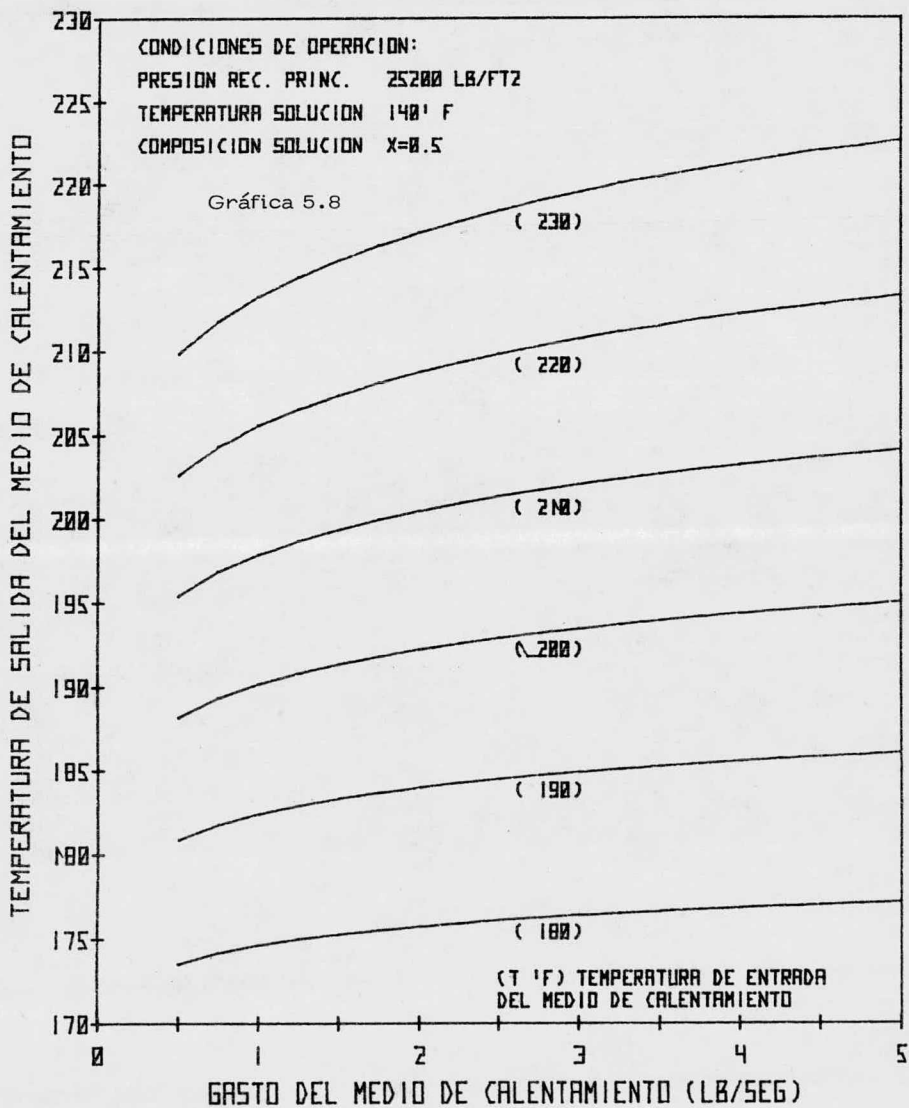


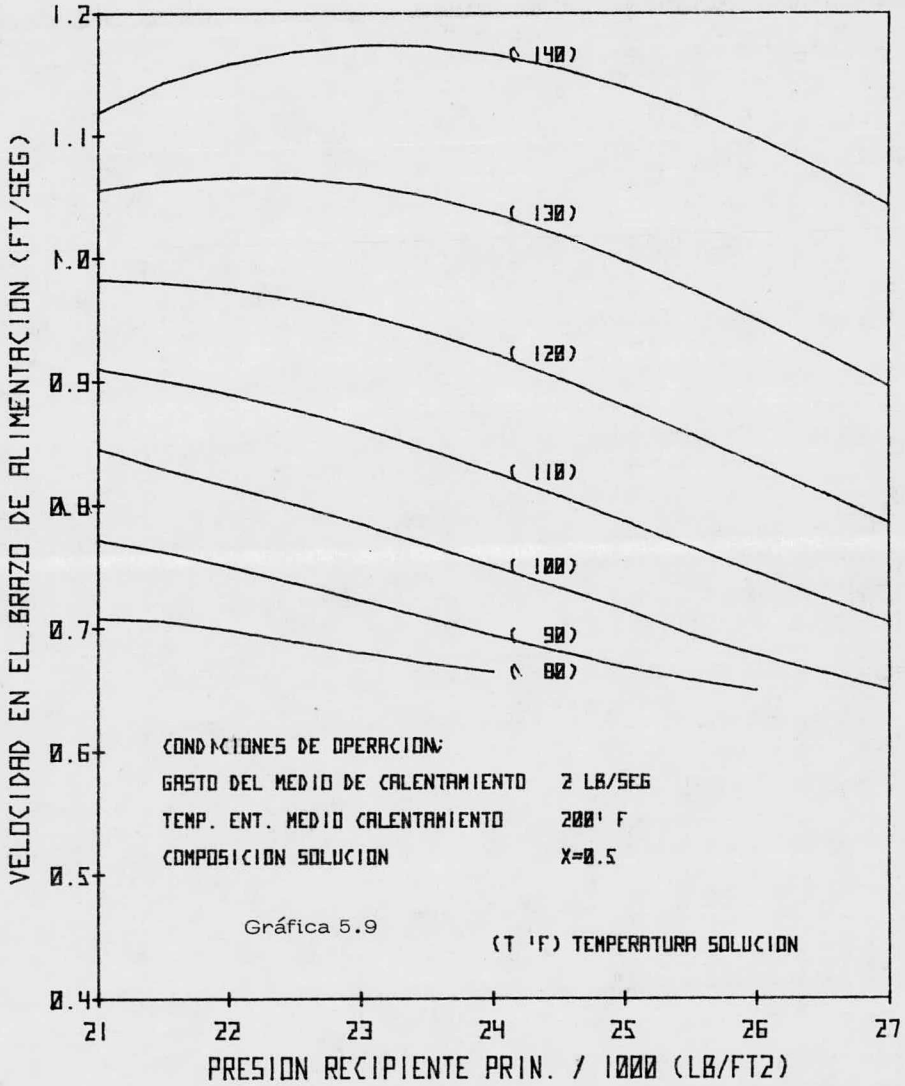


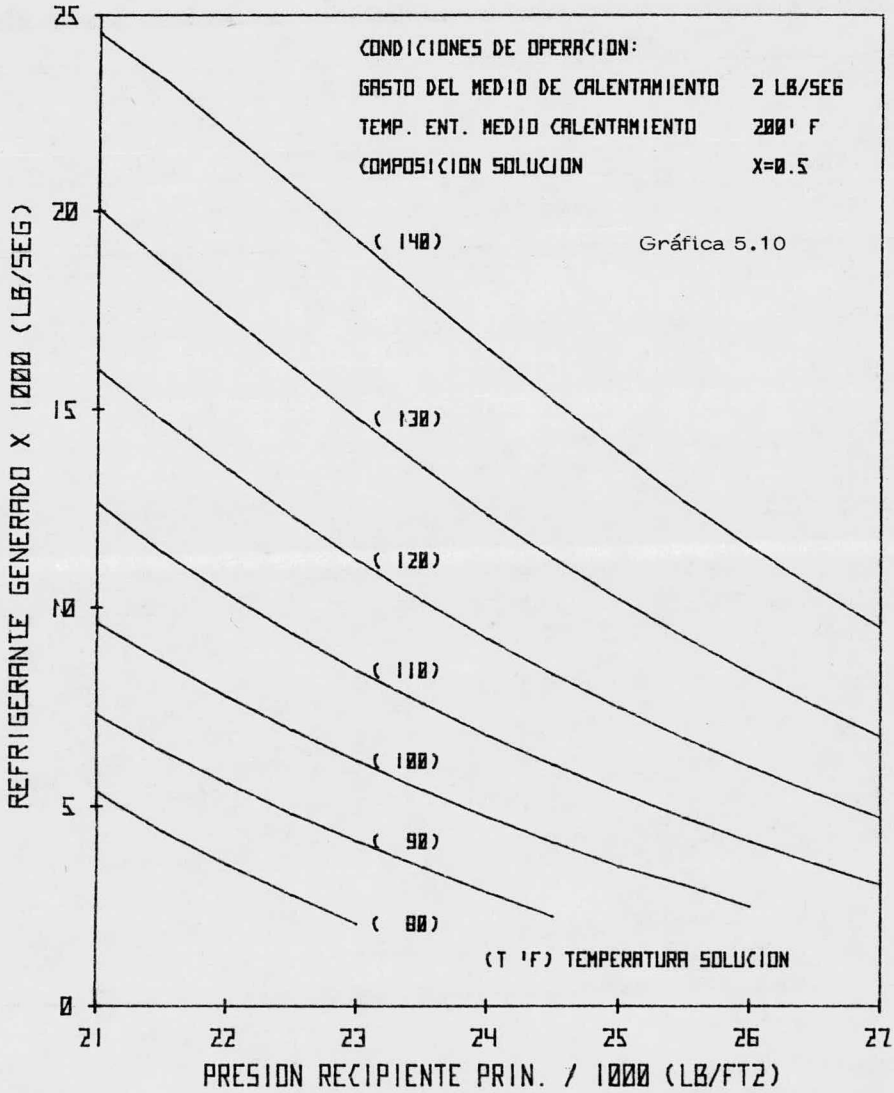


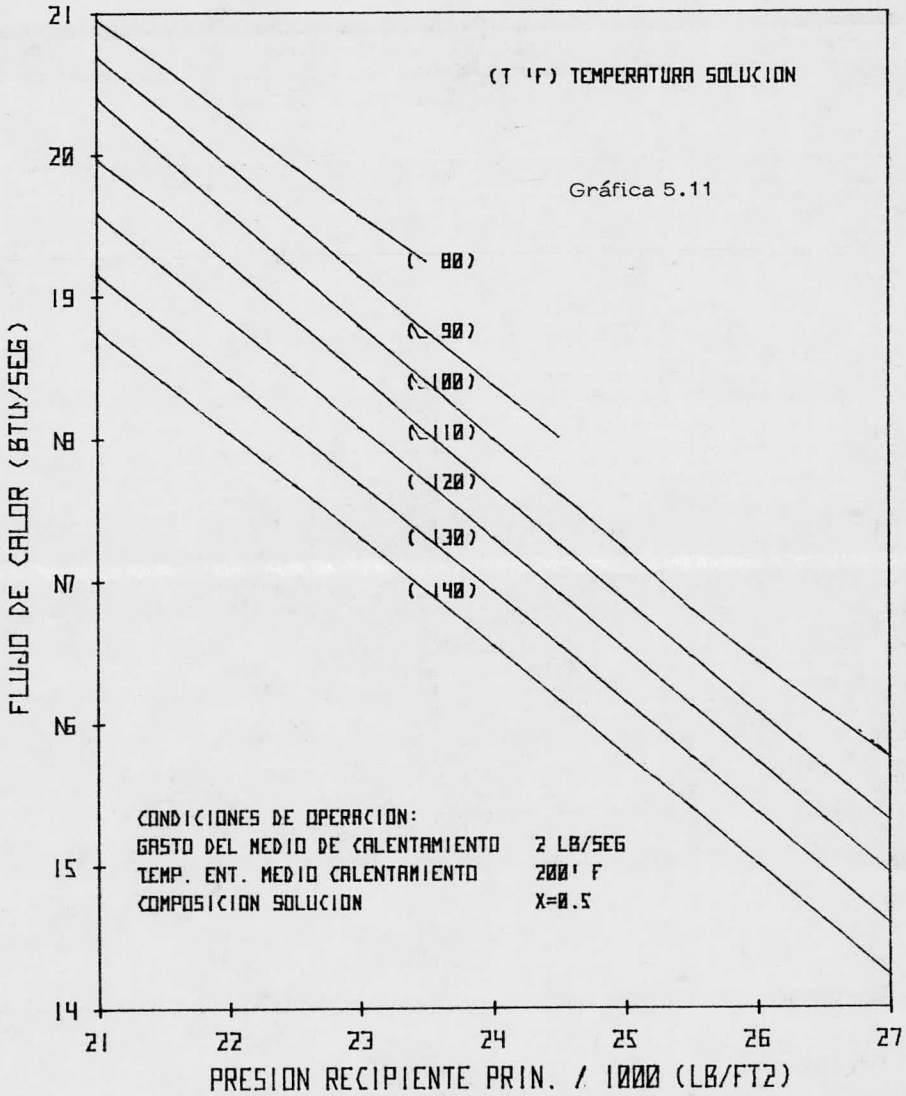


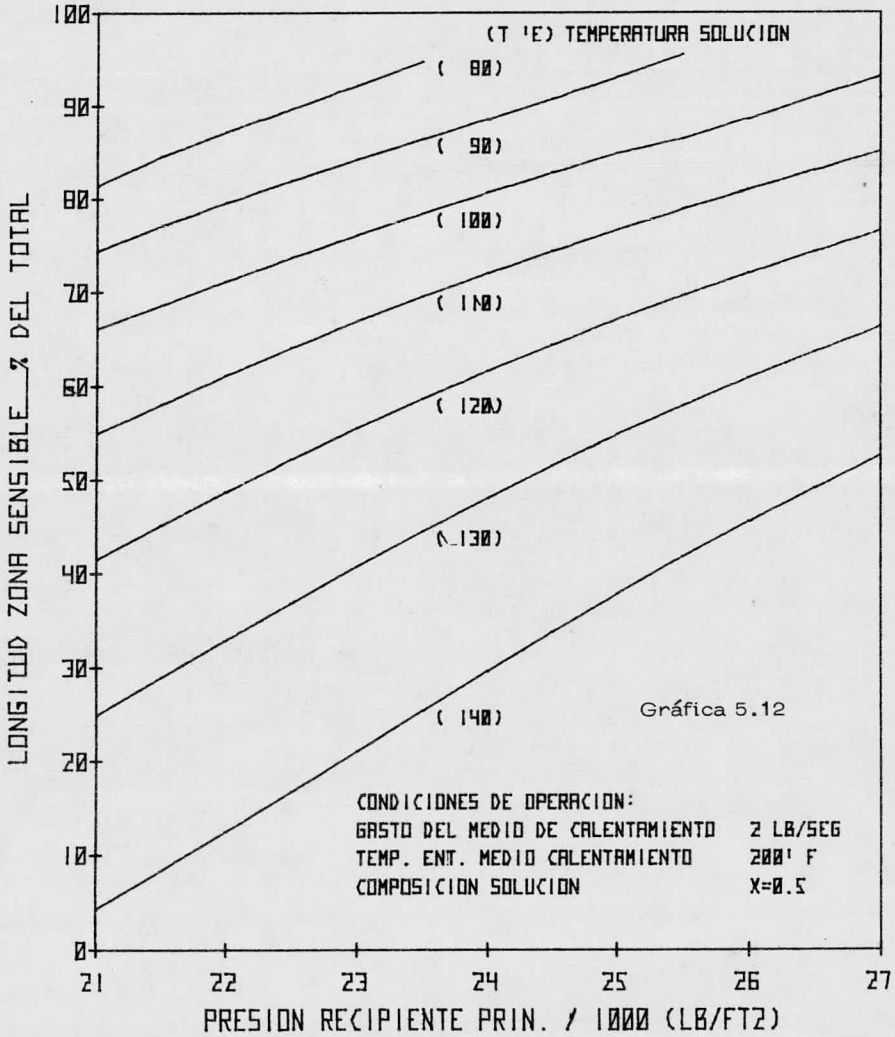


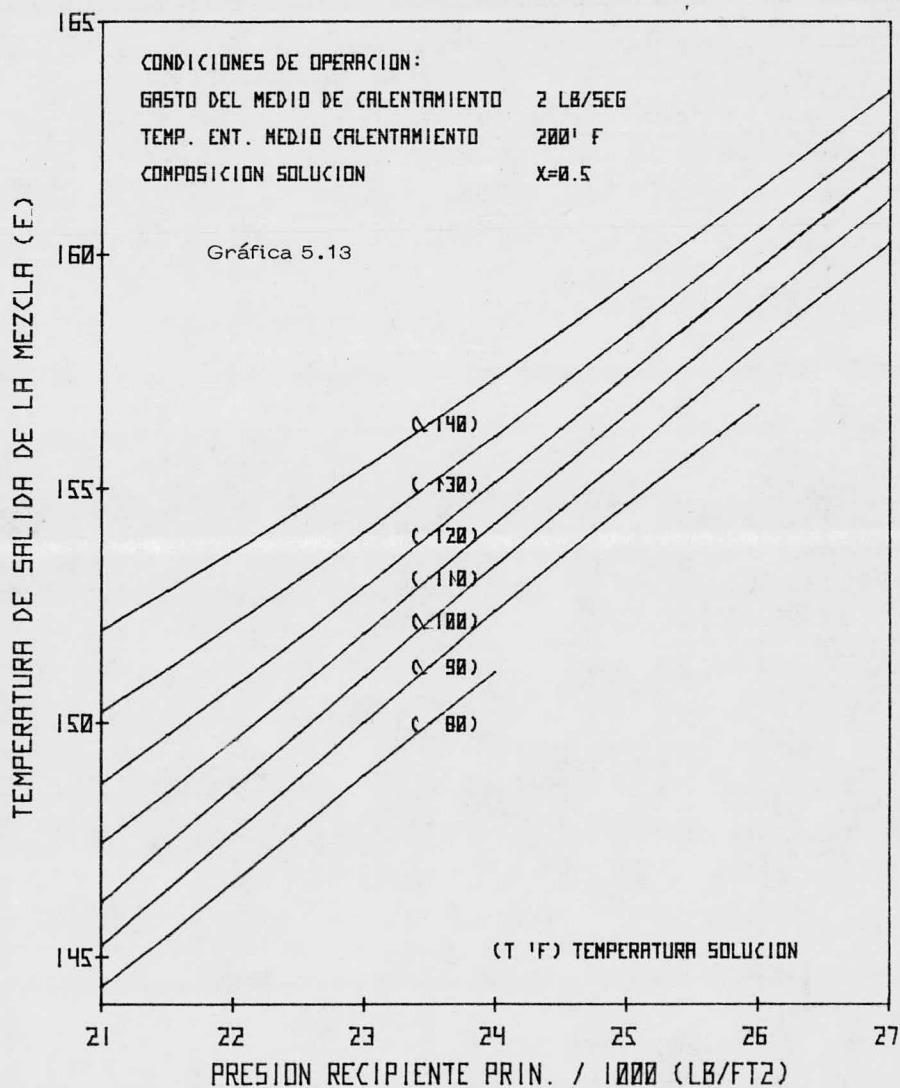


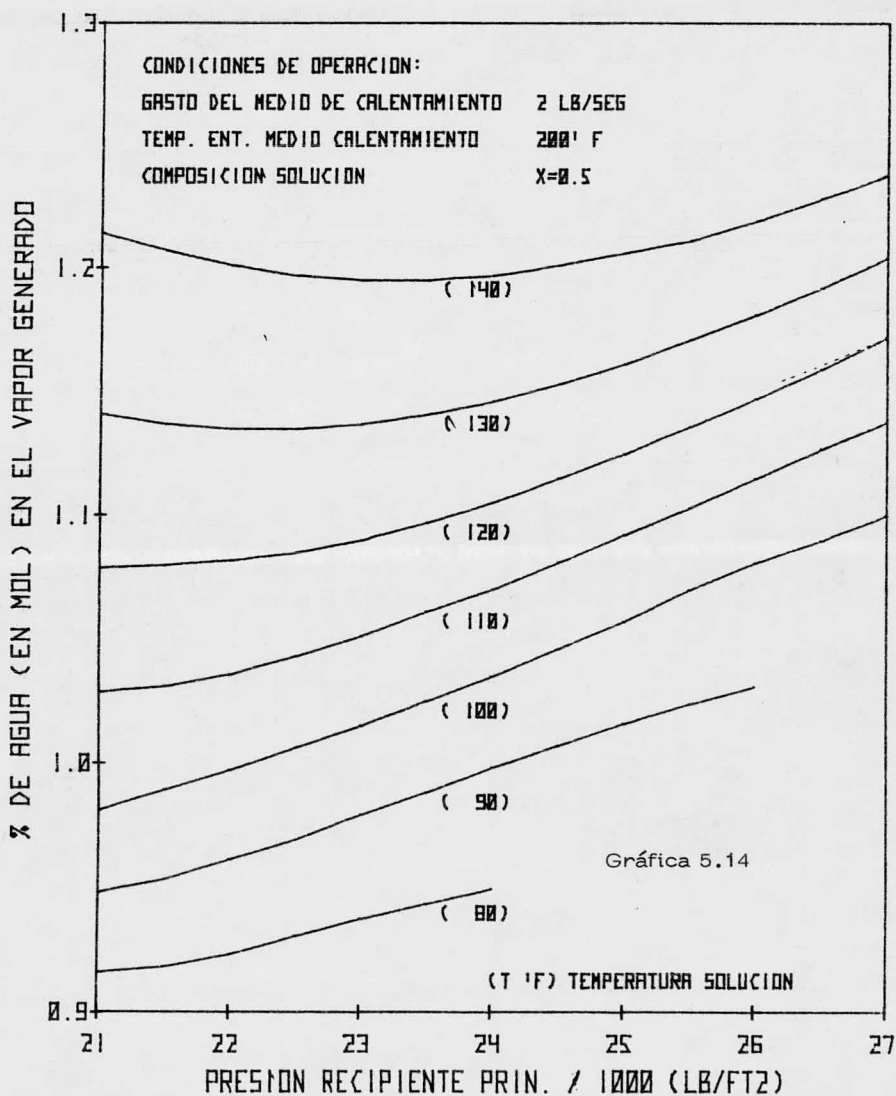


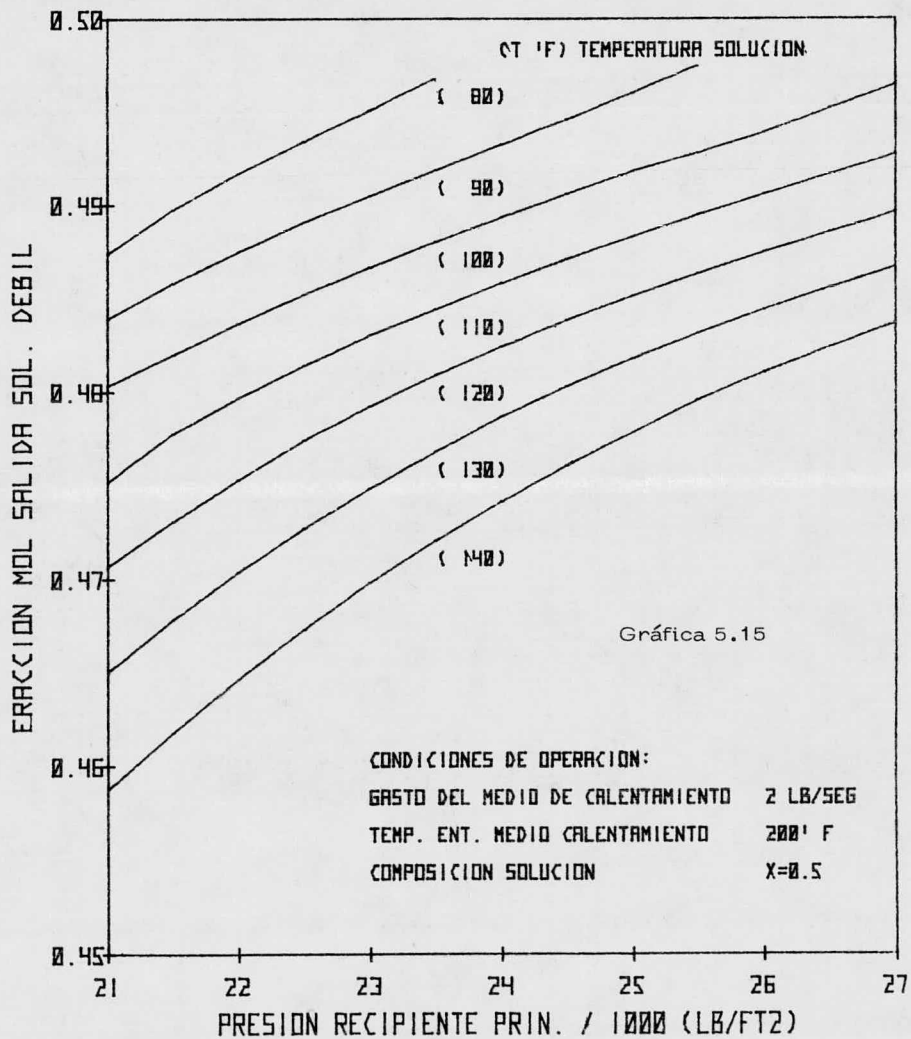


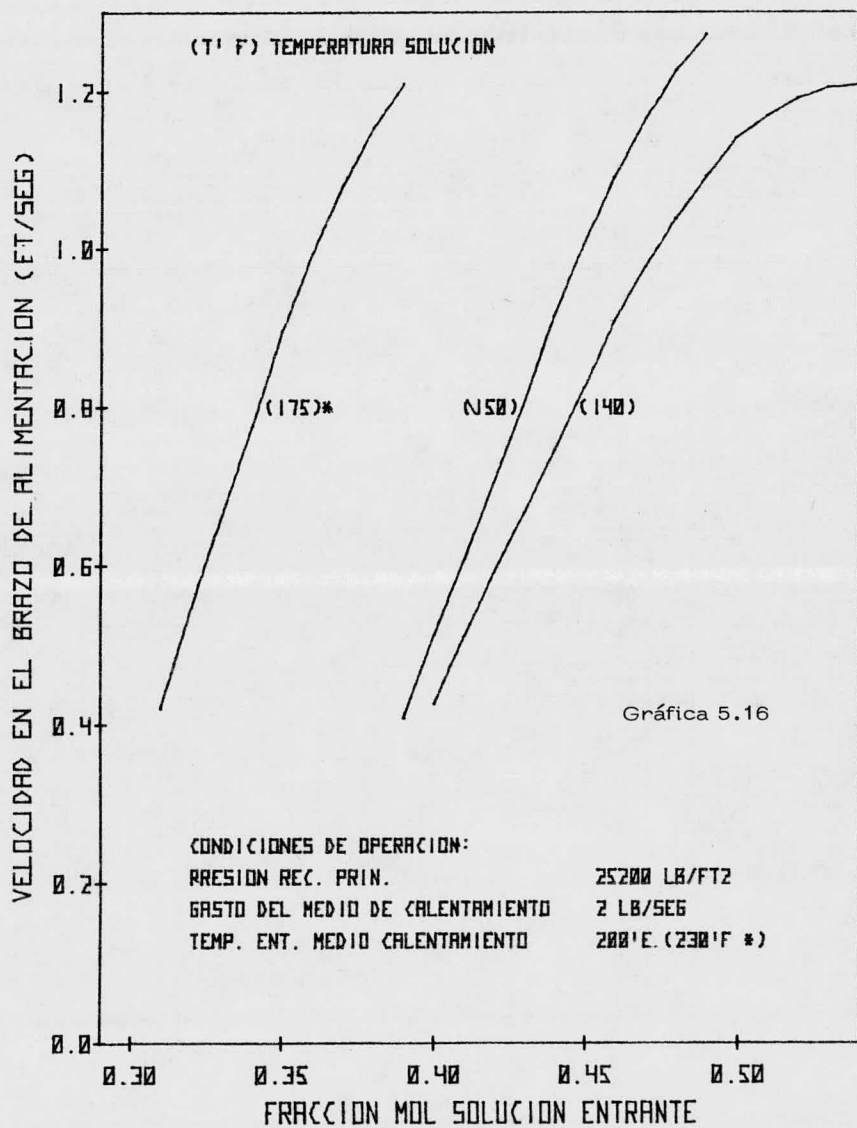


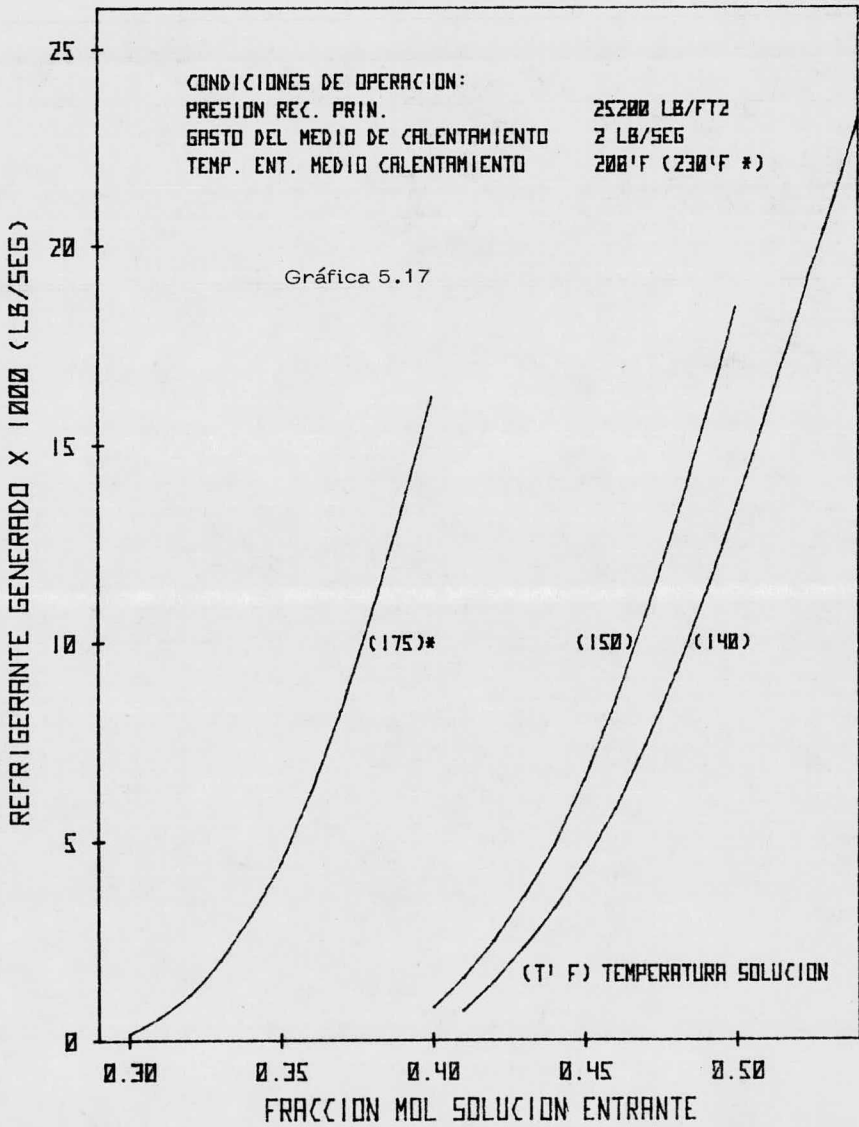


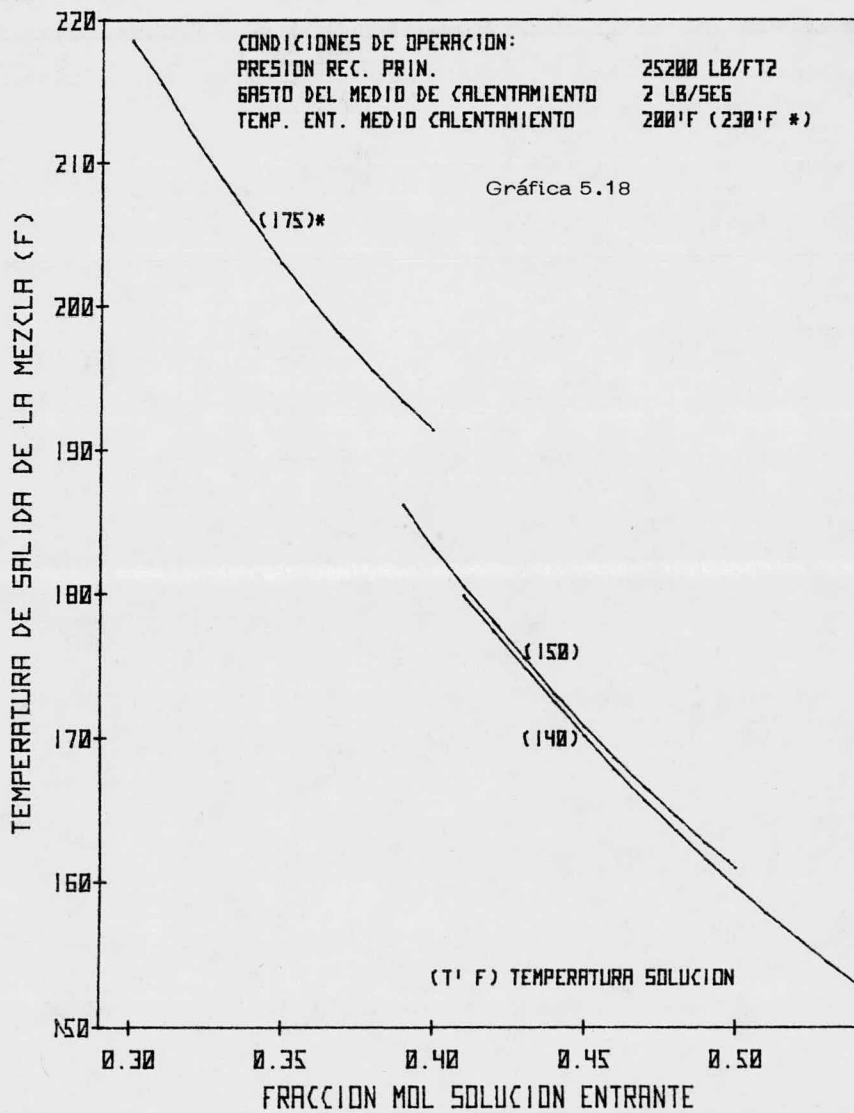












En las gráficas anteriores se ha mostrado la operación del sistema de generación predicha por su modelo, a diferentes condiciones. Dos han sido los fines básicos que se han pretendido cubrir con estas corridas:

- Mostrar el funcionamiento general del modelo creado
- Observar la influencia de los parámetros de operación sobre el funcionamiento del sistema de generación del equipo experimental

De acuerdo al primer fin, el modelo creado funciona de manera adecuada, satisfaciendo de esta manera el primer objetivo general planteado en este trabajo (Objetivos, Cap. 3).

En cuanto al segundo fin, se pueden obtener las siguientes conclusiones - relativas a la influencia de las condiciones de operación sobre el funcionamiento del sistema de generación:

La influencia de las características del medio de calentamiento (temperatura y gasto) es bastante notable sobre la operación del sistema de generación para los valores considerados. Se observa que el variar el gasto del medio de calentamiento tiene una mayor influencia sobre el sistema conforme la temperatura de entrada es mayor y viceversa. En general se nota que el aumentar el valor de cualquiera de estas dos variables, manteniendo la otra (y las demás - condiciones de operación) constante, trae como consecuencia que los parámetros dependientes que definen la operación del sistema muestren un valor mayor o una variación más grande con respecto a sus valores originales.

El variar la presión en el intervalo considerado tiene un efecto poco notable y en general se observa que los parámetros calculados presentan valores menores o variaciones más pequeñas conforme la presión aumenta.

Por último, la temperatura y la concentración de la solución que entra al generador tienen una influencia importante sobre la operación del sistema, aunque quizá no tan importante como la de las características del medio de calentamiento para los casos considerados. En general los valores de los parámetros dependientes calculados presentan variaciones mayores con respecto a sus valores originales conforme se incrementa el valor de alguna de estas dos variables, manteniendo constantes las demás.

Conviene resaltar que los resultados y la discusión de los mismos aquí - presentada es específica para el equipo experimental considerado y los intervalos establecidos. Aunque es de esperarse que los equipos que operen bajo el mismo principio de funcionamiento muestren resultados cualitativos similares, de ningún modo pueden extrapolarse a tales casos los resultados aquí obtenidos.

De acuerdo a la discusión presentada en el capítulo 3, el siguiente punto a trabajar ahora deberá enfocarse a complementar el modelo creado, de manera que pueda llevarse a cabo una simulación dinámica del equipo experimental que permita conocer la operación del mismo en el transcurso del tiempo, para posteriormente crear modelos para las demás partes del sistema de refrigeración, utilizando en lo posible la metodología aquí desarrollada. En este trabajo no se han pretendido cubrir estos últimos puntos, sino que se ha desarrollado una herramienta básica que posteriormente se utilice en su realización.

CAPITULO 6.- CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Al inicio de este trabajo se plantearon dos objetivos básicos a realizar, - que fueron:

- Iniciar un modelo matemático del sistema de generación del equipo - experimental del CIM, como primer paso del modelo total
- Realizar un estudio para la predicción de propiedades (específicamente las termodinámicas) del sistema amoníaco-agua

En lo referente al primer objetivo, se ha desarrollado un modelo del sistema de generación que satisface los lineamientos presentados en el capítulo 3. Su utilidad puede enfocarse desde dos diferentes puntos de vista: en primer lugar, como parte integrante e inicial del modelo total del sistema de refrigeración. Bajo este criterio, el trabajo desarrollado es el primer paso dentro de un proyecto más vasto y no constituye un fin en sí mismo, sino una etapa hacia el logro de un objetivo mayor, el contar con un modelo total que sirva para la complementación de la experimentación.

Como desgraciadamente ha sido imposible comprobar la validez de dicho modelo con datos experimentales, se recomienda que el siguiente paso a realizar sea éste. Una vez concluida esta fase, sería aconsejable el estudio e implementación de los diversos medios para integrar, valiéndose de la herramienta desarrollada, el sistema de generación en el transcurso del tiempo. Posteriormente se recomendaría proseguir con modelos para los otros equipos, para finalmente integrar un modelo total.

La idea es que este modelo total permita un estudio más completo y detallado de los diferentes fenómenos que ocurren, en primer lugar, en el equipo experimental, para que de este modo se pueda lograr la satisfacción de la necesidad real y más importante que ha dado origen a estos trabajos: el disponer de sistemas de refrigeración que se adecúen a las características de las zonas del país que los necesitan y que aprovechen los recursos energéticos que éstas presentan.

Bajo el segundo punto de vista, el modelo elaborado constituye un fin en sí mismo, puesto que puede utilizarse, con adaptaciones mínimas, al diseño y análisis de diferentes equipos que operan bajo el mismo principio. Por otra parte, es también factible utilizar partes del modelo (como la predicción de caudales de presión, etc.) en el estudio de sistemas distintos, pero en los cuales haya coincidencia de fenómenos con el modelo actual.

Hasta el momento presente se considera que las ecuaciones y correlaciones empleadas en el modelo (muchas de ellas de tipo semiempírico o empírico a falta de mejores herramientas) son las más adecuadas, de acuerdo a lo reportado por diversos autores. Sin embargo el modelo puede fácilmente adop -

tar mejores ecuaciones y correlaciones, sustituyendo a las utilizadas.

En cuanto al segundo objetivo, se ha desarrollado un paquete de subrutinas (que ha sido utilizado en el modelo, pero que es independiente de éste) para la predicción de las propiedades termodinámicas del sistema amoníaco-agua. Además se ha realizado un estudio comparativo para determinar la confiabilidad y exactitud de tales medios de cálculo. Las ecuaciones utilizadas, los algoritmos empleados y los resultados obtenidos se muestran en el capítulo 4.- Se considera que la herramienta creada es adecuada para los fines para los que ha sido elaborada, sobre todo porque evita molestas y difíciles lecturas en gráficas, interpolaciones poco exactas a partir de datos tabulados y el uso de ecuaciones con intervalos de aplicabilidad muy estrechos.

BIBLIOGRAFIA

- 1.- A.S.H.R.A.E. Handbook of Fundamentals, 2^a Ed., George Banta Co. Inc., New York, N. Y., USA, 1974
- 2.- Balzhiser R. Termodinámica Química para Ingenieros, 1^a Ed., Prentice Hall Internacional, Madrid, España, 1972
- 3.- Brodkey The Phenomena of Fluid Motion, 1^a Ed., Addison-Wesley, New York, N.Y., USA, 1967
- 4.- Collier J. Convective Boiling and Condensation, 1^a Ed., Mc Graw-Hill Book Co. Ltd., London, England, 1972
- 5.- Dodge B. Chemical Engineering Thermodynamics, 1^a Ed., McGraw-Hill Kogakusha, Ltd., Tokyo, Japan, 1944
- 6.- Faires V. Termodinámica, 2^a Ed., UTEHA, México, D.F., México, 1973
- 7.- Institute of Gas Technology Physical and Thermodynamic Properties of Ammonia-Water Mixtures, Research Bulletin No. 34, - Chicago, Ill., USA, 1964
- 8.- Kern D. Process Heat Transfer, 2^a Ed., McGraw-Hill Kogakusha, Ltd., Tokyo, Japan, 1975
- 9.- Perry J. Chemical Engineer's Handbook, 5^a Ed., McGraw-Hill Kogakusha, Ltd., Tokyo, Japan, 1973
- 10.- Trelkeld J. Thermal Environmental Engineering, 1^a Ed., Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., USA, 1970
- 11.- Best G., Best R., Geffroy E. Refrigeración y Aire Acondicionado Solares en el CIM-UNAM, presentado en el Congreso Latinoamericano de Energía Solar, Joao Pessoa, Brasil, 12 a 18 de febrero de 1978
- 12.- Best G., Geffroy E. Refrigeration from Solar and Residual Energy, International Institute of Refrigeration. Joint Meeting. Melbourne, Australia. September 1976 Pp. 633-640
- 13.- Chen J.C. Correlation for Boiling Heat Transfer to Saturated Fluids in Convective Flow, Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop. 5, 322-329 (1966)

- 14.- DeGance A.E. ,
Atherton R. Chemical Engineering Aspects of Two-Phase Flow
(part I to VII), Chem. Eng. (1970)
- 15.- Dukler A.E. Frictional Pressure Drop in Two-Phase Flow (A,B)
AIChE J., 10, No. 1,38-50 (1964)
- 16.- Fair J. What You Need to Design Thermosiphon Reboilers,
Petrol. Ref., 39, No. 2, 105-122 (1960)
- 17.- Gambill W. How to Predict Physical Properties, (6 art.), Chem.
Eng., (1957-1959)
- 18.- Hughmark G.A. Designing Thermosiphon Reboilers, (I), Chem. Eng.
Progress,60, No. 7,59-61 (1964)
- 19.- Hughmark G.A. Designing Thermosiphon Reboilers, (II), Chem. Eng.
Progress, 65, No. 7,67-70 (1969)
- 20.- Jain P. ,
Gable G. Equilibrium Property Data Equations for Aqua-A -
mmonia Mixtures, Paper presented at the ASHRAE
Semiannual Meeting, Philadelphia, Penn., January
24-28,1971
- 21.- Lee D. , Dorsey J. ,
Moore J. , Drew F. Design Data for Thermosiphon Reboilers , Chem. -
Eng. Progress,52, No. 4, 160-164 (1956)
- 22.- Ruhemann M. The Ammonia Absorption Machine, Transactions of
the Institution of Chemical Engineers, 25,1-20 (1947)
- 23.- Schulz S.C.G. Equations of State for the System Ammonia-Water
for Use with Computers, Int. Congr. of Refr., -
Washington, D.C.,2,431-436 (1971)
- 24.- Stoecker W. R. Effect of Operating Temperature on the Coefficient
of Performance of Aqua-Ammonia Refrigerating -
Systems, Paper presented at the ASHRAE Semi -
annual Meeting in Philadelphia, Penn., January 24-
28, 1971

APENDICE A.- ECUACIONES DE ENERGÍA LIBRE PROPUESTAS
POR S.C.G. SCHULZ

Una ecuación que exprese a la energía libre de Gibbs de un sistema como función de la presión, temperatura y composición es termodinámicamente completa, en el sentido que ella proporciona toda la información termodinámica sobre el sistema en cuestión. Es debido a esto que S.C.G. Schulz ha propuesto expresiones de este tipo para las fases líquida y vapor en el sistema amoníaco-agua.

A continuación se presenta la deducción de dichas ecuaciones (en forma adimensional), así como las consideraciones hechas.

1.- Fase vapor

Consideraciones:

a) La conducta PVT de cada uno de los componentes puros puede expresarse por medio de una ecuación virial, truncándose la expresión después del 2º coeficiente:

$$V_{Ri}^v = \frac{V P_s}{R T_s} = \frac{\Theta}{\pi} + B_{Ri}^v \quad (i = NH_3, H_2O) \quad (A.1)$$

en donde π es la presión adimensional (P/P_s) y Θ la temperatura adimensional (T/T_s)

b) El segundo coeficiente virial (adimensional) sólo depende de la temperatura y dicha funcionalidad puede expresarse como

$$B_{Ri}^v = \frac{B_i P_s}{R T_s} = A_{1i} \Theta + A_{2i} + \frac{A_{3i}}{\Theta} \quad (A.2)$$

c) La información térmica sobre cada uno de los componentes puros se encuentra disponible a través de una expresión polinomial (a presión nula) que expresa el C_p como función de la temperatura

$${}^*C_{pRi}^v = B_{1i} + B_{2i} \Theta + B_{3i} \Theta^2 + B_{4i} \Theta^3 \quad (A.3)$$

d) El estado de referencia para cada uno de los componentes es un par de valores π_{0i} y Θ_{0i}

A partir de estas consideraciones, se procede a encontrar la energía libre para los componentes puros. Para ello se parte de la siguiente ecuación básica

$$G_{Ri}^v = H_{Ri}^v + \Theta S_{Ri}^v \quad (A.4)$$

1.1 Evaluación de la Entalpía adimensional del componente puro

Se desea encontrar una expresión que dé la entalpía a unas condiciones - cualesquiera π , θ , utilizando el estado de referencia π_{0i} , θ_{0i}

Esto se lleva a cabo por medio de un procedimiento en tres etapas, como se muestra en la Fig. A.1

En la etapa A, manteniéndose la temperatura constante a θ_0 , se encuentra el cambio de entalpía que se origina al bajar la presión hasta π^* (presión nu la).

En la etapa B, a presión constante π^* , se calcula el cambio de entalpía al pasar de θ_0 a θ .

Por último, en la etapa C, a temperatura constante θ , se calcula el cam bio de entalpía al pasar de π^* a π .

El cambio total de entalpía es la suma de los tres cambios anteriores. Las ecuaciones necesarias para el cálculo de los cambios que se producen durante estas tres etapas son

$$\left(\frac{\partial H_a}{\partial \pi}\right)_\theta \quad \text{y} \quad \left(\frac{\partial H_R}{\partial \theta}\right)_\pi \quad (\text{A.5})$$

De la termodinámica y de las consideraciones hechas, es fácil mostrar - que en este caso

$$\left(\frac{\partial H_{Ri}^v}{\partial \pi}\right)_\theta = v_{Ri}^v - \theta \left(\frac{\partial v_{Ri}^v}{\partial \theta}\right)_\pi = A_{2i} + \frac{2A_{3i}}{\theta} \quad (\text{A.6})$$

$$\left(\frac{\partial H_{Ri}^v}{\partial \theta}\right)_\pi = c_{pRi}^v \quad (\text{A.7})$$

De acuerdo a esto, al efectuar los tres pasos, se obtienen sucesivamente

$$H_{Ri}^v(\pi^*, \theta_{0i}) = H_i^v(\pi_{0i}, \theta_{0i}) + A_{2i}(\pi^* - \pi_{0i}) + \frac{2A_{3i}}{\theta_{0i}}(\pi^* - \pi_{0i}) \quad (\text{A.8})$$

$$H_{Ri}^v(\pi^*, \theta) = H_i^v(\pi^*, \theta_0) + \int_{\theta_0}^{\theta} c_{pRi}^v d\theta = H_i^v(\pi_{0i}, \theta_{0i}) + \left(A_{2i} + \frac{2A_{3i}}{\theta_{0i}}\right)(\pi^* - \pi_{0i}) + \int_{\theta_0}^{\theta} c_{pRi}^v d\theta \quad (\text{A.9})$$

$$H_{Ri}^v(\pi, \theta) = H_{Ri}^v(\pi^*, \theta) + \left(A_{2i} + \frac{2A_{3i}}{\theta}\right)(\pi - \pi^*) = H_i^v(\pi_{0i}, \theta_{0i}) + \int_{\theta_0}^{\theta} c_{pRi}^v d\theta + A_{2i}(\pi - \pi_{0i}) + 2A_{3i}\left(\frac{\pi}{\theta} - \frac{\pi_{0i}}{\theta_{0i}}\right) \quad (\text{A.10})$$

En la última ecuación se ha aprovechado que $\pi^* = 0$, y dicha ecuación es la que da la entalpía adimensional H_R del componente puro en fase vapor a las condiciones π , θ

1.2 Evaluación de la Entropía adimensional del componente puro

Si se lleva a cabo el mismo procedimiento en tres etapas antes descrito y recordando que

$$\left(\frac{\partial S_{Ri}^V}{\partial \Pi}\right)_\theta = -\left(\frac{\partial V_{Ri}^V}{\partial \theta}\right) = -\frac{1}{\Pi} - \left(A_{1i} - \frac{A_{3i}}{\theta^2}\right) \quad (\text{A.11})$$

$$\left(\frac{\partial S_{Ri}^V}{\partial \theta}\right)_\Pi = \frac{C_{F_{Ri}}^V}{\theta} \quad (\text{A.12})$$

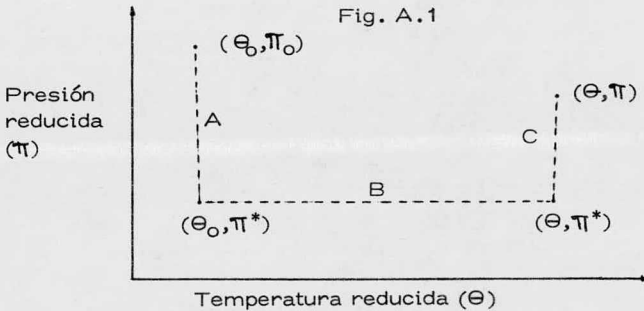
las tres etapas dan sucesivamente los siguientes resultados:

$$S_i^V(\Pi^*, \theta_{oi}) = S_i^V(\Pi_{oi}, \theta_{oi}) - \ln \frac{\Pi^*}{\Pi_{oi}} - \left(A_{1i} - \frac{A_{3i}}{\theta_{oi}^2}\right) (\Pi^* - \Pi_{oi}) \quad (\text{A.13})$$

$$S_i^V(\Pi^*, \theta) = S_i^V(\Pi^*, \theta_{oi}) + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{C_{F_{Ri}}^V}{\theta} d\theta = S_i^V(\Pi_{oi}, \theta_{oi}) - \ln \frac{\Pi^*}{\Pi_{oi}} - \ln \frac{\Pi^*}{\Pi_{oi}} - \left(A_{1i} - \frac{A_{3i}}{\theta_{oi}^2}\right) (\Pi^* - \Pi_{oi}) + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{C_{F_{Ri}}^V}{\theta} d\theta \quad (\text{A.14})$$

$$S_i^V(\Pi, \theta) = S_i^V(\Pi, \theta) - \ln \frac{\Pi}{\Pi^*} - \left(A_{1i} - \frac{A_{3i}}{\theta^2}\right) (\Pi - \Pi^*) = S_i^V(\Pi_{oi}, \theta_{oi}) + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{C_{F_{Ri}}^V}{\theta} d\theta - \ln \frac{\Pi}{\Pi_{oi}} - A_{1i} (\Pi - \Pi_{oi}) + A_{3i} \left(\frac{\Pi}{\theta^2} - \frac{\Pi_{oi}}{\theta_{oi}^2}\right) \quad (\text{A.15})$$

En la última ecuación se tiene a la entropía reducida como función de la presión y la temperatura y en ella de nuevo se ha aprovechado que $\Pi^* = 0$



1.3 Evaluación de la Energía libre adimensional del componente puro.

Si se combinan las ecuaciones (A.4), (A.10) y (A.15) se llega a

$$G_{Ri}^V(\Pi, \theta) = H_{Ri}^V(\Pi, \theta) - \theta S_{Ri}^V(\Pi, \theta) \quad (\text{A.16})$$

y eliminando, por comodidad, la mención explícita de las variables de que depende, se obtiene

$$G_{Ri}^V = H_{oi}^V - \theta S_{oi}^V + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{C_{F_{Ri}}^V}{\theta} d\theta - \theta \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{C_{F_{Ri}}^V}{\theta} d\theta + \theta \ln \frac{\Pi}{\Pi_{oi}} + A_{1i} \theta (\Pi - \Pi_{oi}) + A_{2i} (\Pi - \Pi_{oi}) + A_{3i} \left(\frac{\Pi}{\theta} + \frac{\Pi_{oi} \theta}{\theta_{oi}^2} - \frac{2\Pi_{oi}}{\theta_{oi}}\right) \quad (\text{A.17})$$

La ecuación (A.17) es la que proporciona la energía libre de Gibbs reducida de cada uno de los componentes puros en la fase vapor.

El siguiente paso es la evaluación de la energía libre de la mezcla, a partir de las expresiones para los componentes puros.

1.4 Evaluación de la Energía libre de la mezcla en fase vapor

Consideración: La mezcla en fase vapor es una solución ideal.

De acuerdo a lo anterior y aplicando la Termodinámica, se tiene que

$$G_R^V = \sum (y_i G_{R_i}^V + y_i \theta \ln y_i) \quad (\text{A.18})$$

Por lo tanto, en este caso particular la expresión anterior se reduce a

$$G_R^V = (1-y) G_{R_{H_2O}}^V + y G_{R_{NH_3}}^V + (1-y) \theta \ln (1-y) + y \theta \ln y \quad (\text{A.19})$$

en donde $G_{R_{H_2O}}^V$ y $G_{R_{NH_3}}^V$ se evalúan de acuerdo a la ecuación (A.17)

La ecuación (A.19) junto con las necesarias para definir sus diversos términos, es la que expresa la energía libre de la mezcla en fase vapor y es una de las dos ecuaciones básicas buscadas.

2.- Fase Líquida

Consideraciones:

a) El volumen adimensional de cada uno de los componentes puros puede calcularse, como función de la presión y temperatura, de acuerdo a

$$V_{R_i}^L = C_{1i} + C_{2i} \Pi + C_{3i} \theta + C_{4i} \theta^2 \quad (\text{A.20})$$

b) Para cada uno de los componentes puros se dispone de su capacidad calorífica, a presión Π_{O_i} (la presión de referencia), en función de la temperatura, como:

$$^*C_{P_{R_i}}^L = D_{1i} + D_{2i} \theta \quad (\text{A.21})$$

c) El estado de referencia para cada componente puro es un par de valores Π_{O_i} , θ_{O_i} .

En primer lugar, se va a obtener la expresión para la energía libre de cada componente, a partir de la ecuación (A.4)

2.1 Evaluación de la Entalpía adimensional (componente puro)

Si se utiliza un procedimiento de dos pasos como se indica en la Fig. A.2 y recordando que para este caso

$$\left(\frac{\partial H_{R_i}^L}{\partial \Pi} \right) = V_{R_i}^L - \theta \left(\frac{\partial V_{R_i}^L}{\partial \theta} \right)_{\Pi} = C_1 + C_2 \Pi - C_4 \theta^2 \quad (\text{A.22})$$

$$\left(\frac{\partial H_{Ri}^L}{\partial \theta}\right) = c_{Pr_i}^L \quad (\text{A.23})$$

se obtiene que

$$H_i^L(\pi_{oi}, \theta) = H_i^L(\pi_{oi}, \theta_{oi}) + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} c_{Pr_i}^L d\theta \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} H_i^L(\pi, \theta) &= H_i^L(\pi_{oi}, \theta_{oi}) + c_{1i}(\pi - \pi_{oi}) + \frac{c_{2i}}{2}(\pi^2 - \pi_{oi}^2) - c_{4i}\theta^2(\pi - \pi_{oi}) \\ &= H_i^L(\pi_{oi}, \theta_{oi}) + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} c_{Pr_i}^L d\theta + c_{1i}(\pi - \pi_{oi}) + \frac{c_{2i}}{2}(\pi^2 - \pi_{oi}^2) - c_{4i}\theta^2(\pi - \pi_{oi}) \end{aligned} \quad (\text{A.25})$$

2.2 Evaluación de la Entropía adimensional (componente puro)

Las ecuaciones básicas son

$$\left(\frac{\partial S_{Ri}^L}{\partial \pi}\right)_{\theta} = -\left(\frac{\partial V_{Ri}^L}{\partial \theta}\right)_{\pi} = -c_3 - 2c_4\theta \quad (\text{A.26})$$

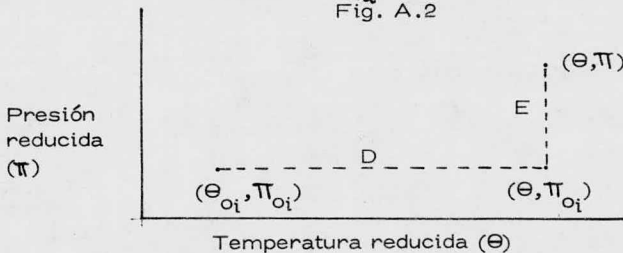
$$\left(\frac{\partial S_{Ri}^L}{\partial \theta}\right)_{\pi} = \frac{c_{Pr_i}^L}{\theta} \quad (\text{A.27})$$

utilizando el procedimiento de dos pasos antes mencionado se obtiene

$$S_{Ri}^L(\pi_{oi}, \theta) = S_{Ri}^L(\pi_{oi}, \theta_{oi}) + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{c_{Pr_i}^L}{\theta} d\theta \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned} S_{Ri}^L(\pi, \theta) &= S_{Ri}^L(\pi_{oi}, \theta) - c_{3i}(\pi - \pi_{oi}) - 2c_{4i}\theta(\pi - \pi_{oi}) \\ &= S_{Ri}^L(\pi_{oi}, \theta_{oi}) + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{c_{Pr_i}^L}{\theta} d\theta - c_{3i}(\pi - \pi_{oi}) - 2c_{4i}\theta(\pi - \pi_{oi}) \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

Fig. A.2



2.3 Evaluación de la Energía libre adimensional para el componente puro

Se parte de

$$G_{Ri}^L = H_{Ri}^L - \theta S_{Ri}^L \quad (\text{A.30})$$

y resulta, a partir de las ecuaciones (A.25) y (A.29) y eliminando la mención explícita de las variables de que dependen, que

$$\begin{aligned} G_{Ri}^L &= H_{oi}^L - \theta S_{oi}^L + \int_{\theta_{oi}}^{\theta} c_{Pr_i}^L d\theta - \theta \int_{\theta_{oi}}^{\theta} \frac{c_{Pr_i}^L}{\theta} d\theta + c_{1i}(\pi - \pi_{oi}) \\ &+ \frac{c_{2i}}{2}(\pi^2 - \pi_{oi}^2) + c_{3i}\theta(\pi - \pi_{oi}) + c_{4i}\theta^2(\pi - \pi_{oi}) \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Ya teniendo expresiones para el cálculo de la energía libre de los componentes puros en la fase líquida, se pasa a la obtención de una expresión de la energía libre para la mezcla.

2.4 Evaluación de la Energía libre para la mezcla líquida

Como las mezclas amoníaco-agua en fase líquida están muy lejos de ser ideales, se parte de la definición de energía libre en exceso, dada por

$$G_R^{LE} = G_R^L - G_R^{LI} \quad (A.32)$$

en donde el primer término del segundo miembro representa la energía libre real de la mezcla, que es lo que se está buscando, mientras que el segundo término representa la energía libre que correspondería a la mezcla (hipotética) si la solución fuese ideal y que por lo tanto puede calcularse usando una ecuaición similar a la (A.18)

$$G_R^{LI} = (1-x) G_{RH_2O}^L + x G_{RNH_3}^L + \theta(1-x) \ln(1-x) + \theta x \ln x \quad (A.33)$$

S.C.G. Schulz propone la siguiente expresión para la energía libre en exceso

$$G_R^{LE} = \left[F_1 + F_2 \Pi + \frac{F_3 + F_4 \Pi}{\theta} + \frac{F_5 + F_6 \Pi}{\theta^2} + \left(F_7 + F_8 \Pi + \frac{F_9 + F_{10} \Pi}{\theta} \right) (2x-1) \right] x(1-x) \quad (A.34)$$

De la combinación de las ecuaciones (A.32) a (A.34), se obtiene la energía libre de Gibbs adimensional para la fase líquida, en función de la presión, temperatura y composición, que resulta

$$G_R^L = (1-x) G_{RH_2O}^L + x G_{RNH_3}^L + \theta(1-x) \ln(1-x) + \theta x \ln x + \left[F_1 + F_2 \Pi + \frac{F_3 + F_4}{\theta} + \frac{F_5 + F_6 \Pi}{\theta^2} + \left(F_7 + F_8 \Pi + \frac{F_9 + F_{10} \Pi}{\theta} \right) (2x-1) \right] x(1-x) \quad (A.35)$$

en donde $G_{RH_2O}^L$ y $G_{RNH_3}^L$ se calculan de acuerdo a la ecuación (A.31).

La ecuación (A.35) es la segunda ecuación básica buscada.

SIMBOLOGIA EMPLEADA (Apéndice A)

A_i	Constantes en la ecuación del 2 ^{do} Coeficiente Virial
B	Segundo Coeficiente Virial
B_i	Constantes en la ecuación del C_p (a $P = 0$) de cada componente (vapor)
C_i	Constantes en la ecuación PVT del líquido
C_p	Capacidad calorífica a presión constante
D_i	Constantes en la ecuación del C_p (a $P = P_0$) de cada componente (liq.)
F_i	Constantes en la ecuación de energía libre de exceso
G	Energía libre de Gibbs
H	Entalpía
P	Presión
R	Constante universal de los gases
S	Entropía
T	Temperatura
V	Volumen
x	Fracción mol de amoníaco en el líquido
y	Fracción mol de amoníaco en el vapor
Θ	Temperatura adimensional (T/T_s)
π	Presión adimensional (P/P_s)

Subíndices

$\bar{\quad}$	Propiedad molar (o másica)
\bar{i}	Referente al componente "i-ésimo"
L	Fase líquida
mez	Mezcla
NH_3	Referente al amoníaco
H_2O	Referente al agua
o	En el estado de referencia
R	Propiedad adimensional o "reducida"
S	Temperatura o presión base de variables adimensionales
T	Total
V	Fase vapor

Superíndices

L	Fase líquida
V	Fase vapor
*	A presión nula (vapor) o a presión de referencia P_0 (líquido)
E	Exceso
I	Ideal

APENDICE B.- CAIDA DE PRESION EN FLUJO A DOS FASES

El conocimiento de lo que sucede realmente durante el flujo bifásico de un líquido y un vapor (o gas) está muy lejos de ser completo. Debido a la necesidad que existe de tener medios para predecir de manera adecuada lo que sucede en situaciones en donde existe este tipo de flujo, en el transcurso de los años han aparecido una serie de métodos y correlaciones de tipo semiempírico o completamente empírico, cuya finalidad ha sido el tratar de predecir el comportamiento de un sistema con flujo a dos fases, a partir de los datos experimentales de que se dispone y en algunas ocasiones, de las bases teóricas con que se cuenta.

El principal problema que padecen la mayoría de las correlaciones hasta ahora desarrolladas es su falta de generalidad. La mayoría son capaces de reproducir de manera adecuada los datos experimentales que se usaron en su desarrollo, pero fallan completamente cuando se aplican en condiciones diferentes a las de la experimentación.

Al llevar a cabo un análisis de similitud en flujo a dos fases, Dukler fue capaz de establecer las condiciones que debe cumplir una correlación para que pueda ser utilizada fuera del rango de condiciones experimentales que le dio origen. DeGance y Atherton, basándose en el trabajo anterior, concluyeron que las correlaciones más adecuadas y que han tenido más éxito en la predicción del flujo a dos fases son: El método de Dukler (caso II) para el flujo horizontal y el método de Orkiszewski para flujo vertical.

La ecuación básica de la que parten ambos métodos es la siguiente, obtenida a partir de un balance de energía mecánica:

$$-\left(\frac{\partial P}{\partial L}\right) = \frac{\zeta_f + \alpha \rho_{fg} \frac{d}{4L}}{1 - A_c} \quad (B.1)$$

1.- Método de Dukler (caso II)

Este método es considerado como el más adecuado para la predicción de caídas de presión en flujo a dos fases (líquido-vapor) horizontal. El método ha sido catalogado como semiteórico, ya que parte de consideraciones teóricas, pero contiene una serie de constantes evaluadas empíricamente.

A partir de la ecuación fundamental (B.1) Dukler realiza su análisis. Para el cálculo de ζ_f (caída de presión asociada a las fricciones), se propone la siguiente expresión:

$$\zeta_f = \frac{\beta f_{ce} G_T^2}{2 g_c \rho_{ms} D} \quad (B.2)$$

Para evaluar los diversos términos de esta ecuación, se define en primer lugar un parámetro λ que se calcula como

$$\lambda = \frac{V_{SL}}{V_{NS}} \quad (B.3)$$

$$V_{SL} = \frac{G_T (1-f)}{\rho_L} \quad V_{SG} = \frac{G_T f}{\rho_G} \quad V_{NS} = V_{SL} + V_{SG} \quad (B.4)$$

A partir de la introducción de este parámetro se tiene que:

$$\beta_{NS} = \beta_L \lambda + \beta_G (1-\lambda) \quad (B.5)$$

$$\beta = \left(\frac{\rho_L}{\beta_{NS}} \right) \left(\frac{\lambda^2}{R_L} \right) + \left(\frac{\rho_G}{\beta_{NS}} \right) \left(\frac{(1-\lambda)^2}{R_G} \right) \quad (B.6)$$

en donde R_L y R_G representan la fracción volumen promedio de líquido y vapor (o gas) respectivamente en un cierto volumen y cuyo cálculo se presentará posteriormente.

Para el cálculo del factor de fricción en la zona de dos fases Dukler propone

$$f_{TP} = f_0 \alpha(\lambda) \quad (B.7)$$

en donde f_0 puede calcularse como

$$\frac{1}{V f_0} = -2 \log \left(\frac{\epsilon}{3.7D} + \frac{2.51}{Re_{TP} V f_0} \right) \quad (B.8)$$

$$Re_{TP} = \frac{\beta D G_T}{\mu_{NS}} \quad (B.9)$$

$$\mu_{NS} = \mu_L \lambda + \mu_G (1-\lambda) \quad (B.10)$$

Para $\alpha(\lambda)$ se propone

$$\alpha(\lambda) = 1 - \frac{\ln \lambda}{\eta} \quad (B.11)$$

en donde

$$\eta = 1.281 + 0.478 \ln \lambda + 0.444 (\ln \lambda)^2 + 0.094 (\ln \lambda)^3 + 0.000843 (\ln \lambda)^4 \quad (B.12)$$

El segundo término de la ecuación B.1 ($\alpha(f_{TP} g/g_c)$), que representa la contribución a la caída de presión de los efectos asociados con la altura, vale cero en este caso, ya que se trata de flujo horizontal ($\alpha = \sin 0^\circ = 0$)

Para el tercer término (efecto de la aceleración) se propone:

$$AC = \frac{G_g^2}{g_c \rho_g P (1-R_L)} \quad (B.13)$$

en donde

$$G_g = G_T f \quad (B.14)$$

2.- Método de Orkiszewski

Orkiszewski ha presentado el método más preciso para el cálculo de la caída de presión en flujo vertical ascendente.

Su método parte de la ecuación básica (B.1) y utiliza el conocimiento sobre los regímenes de flujo y una gran cantidad de datos para el cálculo empírico de los diferentes parámetros.

En primer lugar, define los siguientes números:

$$\begin{aligned}
 N_{lb} &= 1.071 - 0.2218 \frac{V_{ns}^2}{D} \\
 N_{SL} &= 50 + 70 V_{SL} \left(\frac{\rho_L}{\sigma} \right)^{1/4} \\
 N_{Im} &= 75 + 138 \left[V_{SL} \left(\frac{\rho_L}{\sigma} \right)^{1/4} \right]^{0.75} \\
 N_{GV} &= 1.938 V_{SG} \left(\frac{\rho_L}{\sigma} \right)^{1/4}
 \end{aligned}
 \tag{B.15}$$

A partir del valor de estos parámetros, se define la existencia de los siguientes regímenes de flujo:

Flujo burbuja ("Bubble") cuando	$V_{SG} \sqrt{N_{ns}} \leq N_{lb}$	
Flujo tapón ("Slug")	$V_{SG} \sqrt{N_{ns}} > N_{lb}$	
Flujo de transición ("transition")	$N_{Im} > N_{GV} > N_{ls}$	(B.16)
Flujo niebla ("Mist")	$N_{GV} > N_{Im}$	

La evaluación empírica de las diferentes constantes depende del régimen de flujo y puede resumirse de la siguiente manera:

2.1 Flujo burbuja

El término de fricción se calcula a partir de

$$\gamma_f = \frac{f_{TP} \rho_L (V_{SL}/R_L)}{2 g_c D}
 \tag{B.17}$$

en donde el factor de fricción en dos fases se calcula a partir de

$$\frac{1}{\sqrt{f_{TP}}} = -2 \log \left(\frac{\epsilon}{3.7 D} + \frac{2.51}{Re_B \sqrt{f_{TP}}} \right)
 \tag{B.18}$$

$$Re_B = \frac{D V_{SL} \rho_L}{R_L \mu_L}
 \tag{B.19}$$

$$R_L = 0.5 - 0.625 V_{ns} + \left((0.5 + 0.625 V_{ns})^2 - 1.25 V_{SG} \right)^{1/2}
 \tag{B.20}$$

Los parámetros que intervienen en el término asociado con los efectos de altura ($\alpha \rho_{TP} g / g_c$) se calculan como

$$\alpha = 1 (\text{Sen } 90^\circ) \text{ por ser flujo vertical ascendente} \quad (\text{B.21})$$

$$\rho_{TP} = R_L \rho_L + (1 - R_L) \rho_g \quad (\text{B.22})$$

El término que incluye los efectos de la aceleración se evalúa como

$$AC = \frac{G_T V_{sg}}{g_c P} \quad (\text{B.23})$$

2.2 Flujo tapón

El término de las fricciones se calcula como

$$\gamma_f = \frac{f_{TP} \rho_L V_{ns}^2}{2 g_c D} \left[\left(\frac{V_{sl} + V_r}{V_{ns} + V_r} \right) + \Gamma \right] \quad (\text{B.24})$$

en donde f_{TP} se calcula por medio de la ecuación (B.18), cambiando el valor de Re_D por Re_s , que se evalúa a partir de

$$Re_s = \frac{D V_{ns} \rho_L}{\mu_L} \quad (\text{B.25})$$

Para la evaluación de V_r se definen los siguientes parámetros

$$N_1 = 0.372 \times 10^5 \left(-0.35 + \left(0.1225 + \frac{0.04931 V_{ns}}{D^{0.5}} \right)^{0.5} \right) \quad (\text{B.26})$$

$$N_2 = 0.372 \times 10^5 \left(-0.546 + \left(0.9981 + \frac{0.01849 V_{ns}}{D^{0.5}} \right)^{0.5} \right)$$

$$\gamma = \frac{1.423 + 4.958 \times 10^{-5} Re_s}{D^{0.5}}$$

de acuerdo a esto

$$\begin{aligned} V_r &= \left(1.985 + 4.985 \times 10^{-5} Re_s \right) D^{0.5} && \text{si } Re_s > N_1 \\ V_r &= \left(3.097 + 4.985 \times 10^{-5} Re_s \right) D^{0.5} && \text{si } Re_s < N_2 \\ V_r &= 0.5 \gamma + \left(\gamma^2 + \frac{13.59 \mu_L}{\rho_L D^{0.5}} \right)^{0.5} && \text{si } N_2 < Re_s < N_1 \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Para el cálculo del parámetro se tiene

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{0.0127 \log(\mu_L + 1)}{D^{1.415}} - 0.284 + 0.167 \log V_{ns} + 0.113 \log D && \text{si } V_{ns} < 10 \\ \Gamma &= \frac{0.0127 \log(\mu_L + 1)}{D^{1.571}} + 0.161 + 0.599 \log D + \left(\frac{0.01 \log(\mu_L + 1)}{D^{1.571}} \right. && (\text{B.28}) \\ &\quad \left. + 0.397 - 0.63 \log D \right) \log V_{ns} && \text{si } V_{ns} > 10 \end{aligned}$$

En el término asociado a los efectos de altura ($\propto \rho_{TP} g / g_c$) se tiene

$$\rho_{TP} = \rho_L \left(\frac{G_T}{R} + V_T + \Pi \right) \quad (\text{B.29})$$

El término de aceleración se evalúa como

$$AC = \frac{G_T V_{sg}}{g_c D} \quad (\text{B.30})$$

2.3 Flujo niebla

La contribución de las fricciones al gradiente de presión puede calcularse a partir de

$$\zeta_f = \frac{f_{TP} \rho_g V_{sg}^2}{2 g_c D} \quad (\text{B.31})$$

en donde f_{TP} se evalúa de acuerdo a la ecuación (B.18) usando las siguientes expresiones

$$Re_m = \frac{D V_{sg} \rho_g}{\mu_g} \quad (\text{B.32})$$

$$\frac{E}{D} = \frac{0.3859 \sigma N_w^{0.302}}{\rho_g V_{sg}^2 D} \quad \text{si } N_w > 0.005 \quad (\text{B.33})$$

$$\frac{E}{D} = \frac{0.7508 \sigma}{\rho_g V_{sg}^2 D} \quad \text{si } N_w \leq 0.005$$

en donde

$$N_w = 4.52 \times 10^{-7} \frac{452.9 \mu_L V_{sg} \rho_g}{\sigma \rho_L} \quad (\text{B.34})$$

Para la evaluación del término que contiene los efectos asociados a la altura se tiene

$$\rho_{TP} = \lambda \rho_L + (1 - \lambda) \rho_g \quad (\text{B.35})$$

El término de aceleración se evalúa de manera idéntica al caso anterior (Ec. (B.30)).

2.4 Flujo de transición.

Es un flujo intermedio entre el "slug" y el "mist". De acuerdo a esto se tiene la siguiente metodología.

El efecto de las fricciones se calcula como

$$\zeta_f = T_1 \zeta_f(\text{slug}) + (1 - T_1) \zeta_f(\text{mist}) \quad (\text{B.36})$$

en donde

$$T_1 = \frac{N_m - N_{GV}}{N_m - N_s} \quad (\text{B.37})$$

En la contribución de la altura al gradiente de presión se tiene

$$P_{TP} = T_1 P_{TP}(\text{slug}) + (1 - T_1) P_{TP}(\text{mist}) \quad (\text{B.38})$$

El término de aceleración se evalúa nuevamente de acuerdo a la ecuación (B.30)

3.- Cálculo de la Fracción Volumen (Holdup)

La correlación más aceptada para el cálculo de fracciones volumen en flujo a dos fases (R_G y R_L) es la propuesta por Eaton, que puede resumirse de la siguiente manera:

Cálculo de parámetros y números adimensionales

$$N_d = 120.9 D \left(\frac{\rho_L}{\sigma} \right)^{0.5} \quad (\text{B.39})$$

$$N_L = 0.1573 \mu_L \left(\frac{1}{\rho_L \sigma^3} \right)^{0.25} \quad (\text{B.40})$$

$$N_{GV} = 1.938 V_{SG} \left(\frac{\rho_L}{\sigma} \right)^{0.25} \quad (\text{B.41})$$

$$N_{LV} = 1.938 V_{SL} \left(\frac{\rho_L}{\sigma} \right)^{0.25} \quad (\text{B.42})$$

$$N_{sec} = N_{GV} N_L^{0.38} / N_d^{2.14} \quad (\text{B.43})$$

$$N_{hold} = 10^6 \frac{N_{LV}}{N_{GV}^{0.575}} P^{0.1} \frac{C_m}{N_d} \quad (\text{B.44})$$

$$\Psi = 1 + \text{EXP} (6.6598 + 8.8173 \ln N_{sec} + 3.7693 (\ln N_{sec})^2 + 0.5359 (\ln N_{sec})^3) \quad (\text{B.45})$$

$$\Psi = 1 \quad \text{si } N_{sec} < 0.01 \quad (\text{B.46})$$

$$\Psi = 0.82 \quad \text{si } N_{sec} > 0.09 \quad (\text{B.47})$$

$$C_m = \text{EXP} (-4.895 - 1.0775 \ln N_L - 0.8082 (\ln N_L)^2 - 0.1597 (\ln N_L)^3 - 0.01019 (\ln N_L)^4) \quad (\text{B.48})$$

$$C_m = 0.0115 \quad \text{si } N_L > 0.4 \quad (\text{B.49})$$

$$C_m = 0.00195 \quad \text{si } 0.4 > N_L > 0.002 \quad (\text{B.50})$$

De acuerdo a las definiciones anteriores, la fracción volumen del líquido se calcula como

$$R_L = \text{EXP} \left(-3.6372 + 0.8813 \ln N_{\text{hold}} - 0.1335 (\ln N_{\text{hold}})^2 + 0.18534 (\ln N_{\text{hold}})^3 - 0.001066 (\ln N_{\text{hold}})^4 \right) \quad (\text{B.51})$$

$$R_L = \psi \quad \text{si } N_{\text{Hold}} > 4000 \quad (\text{B.52})$$

$$R_L = 0.02633 \quad \text{si } N_{\text{Hold}} < 0.1 \quad (\text{B.53})$$

$$R_L = \lambda \quad \text{si } R_L < \lambda \quad (\text{B.54})$$

Para una descripción general del flujo a dos fases y de los métodos usados, acudir a las referencias citadas en la Bibliografía.^(13, 14, 15)

SIMBOLOGÍA EMPLEADA (Apéndice B)

D	Diámetro
f	Fracción vapor (flujo másico / flujo total)
G	Gas sa velocidad
L	Líquido
P	Presión
RE	Número de Reynolds
V	Velocidad
ϵ	Rugosidad de la tubería
μ	Viscosidad
ρ	Densidad

Subíndices

G	Gas (o vapor)
L	Líquido
T	Total

APENDICE C.- COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE CALOR

Para el cálculo de los coeficientes de transferencia de calor para el fluido que circula por los tubos en un termosifón, Hughmark^(18,19) ha propuesto la siguiente metodología:

1.- Zona de calentamiento sensible

En la zona de una sola fase (líquida), el flujo de calor va a estar constituido por dos contribuciones aditivas, el flujo de calor debido a la convección y el debido a la nucleación. De acuerdo a esto se tiene

$$\left(\frac{Q}{A}\right)_{\text{TOTAL}} = \left(\frac{Q}{A}\right)_{\text{CONVECCION}} + \left(\frac{Q}{A}\right)_{\text{NUCLEACION}} \quad (\text{C.1})$$

lo que en términos de coeficientes y diferencias de temperatura se expresa como

$$h_{\text{TOTAL}} (T_W - T_B) = h_c (T_W - T_B) + h_n (T_W - T_s) \quad (\text{C.2})$$

Para la evaluación del coeficiente total es necesaria la evaluación de los coeficientes individuales y esto se realiza como sigue

1.1 Coeficiente de transferencia de calor por convección

$$\begin{aligned} \frac{h_c D}{k} &= 0.183 (Re)^{0.545} (Pr)^{0.4} && \text{si } RE < 2000 \\ \frac{h_c D}{k} &= 0.077 (Re)^{0.66} (Pr)^{0.4} && \text{si } 2000 < RE < 5000 \\ \frac{h_c D}{k} &= 0.023 (Re)^{0.8} (Pr)^{0.4} && \text{si } RE > 5000 \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

1.2 Coeficiente de transferencia de calor por nucleación

Para que exista la nucleación (y por ende h_n) se debe cumplir que la temperatura de la pared sea mayor que la temperatura de saturación del fluido y además debe suceder que $\delta_H > \delta_{TH}$ (criterio propuesto por Hsu) en donde

$$\begin{aligned} \delta_H &= \frac{5 \mu_L}{\rho_L \nu \sqrt{f/2}} \\ \delta_{TH} &= \frac{0.133 \times 10^{-5} \sigma T_s}{\Delta H \rho_V \Delta T_W} \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Para el cálculo del coeficiente debido a la nucleación, Chen desarrolló la siguiente correlación, a partir del análisis efectuado por Furster y Suber⁽¹⁹⁾

$$h_n = \frac{0.0122 k_L^{0.73} C_{PL}^{0.45} \rho_L^{0.49} g_c^{0.25}}{\sigma^{0.5} \mu_L^{0.25} \Delta H^{0.24} \rho_V^{0.24}} \Delta T_W^{0.24} \Delta P_W^{0.75} S \quad (\text{C.5})$$

Hughmark recomienda tomar el valor de 0.25 para S (factor de supresión)

2.- Zona de dos fases

Existe también para esta zona la contribución de la convección y la nucleación. El coeficiente total se calcula de manera similar al coeficiente total de la zona sensible (Ec. (C.2)).

2.1 Coeficiente de transferencia de calor por convección

Este coeficiente se calcula de acuerdo a

$$h_{c(TP)} = h_L \left(\frac{1}{1-R_G} \right)^{0.8} \quad \text{si } R_G \leq 0.985 \quad (\text{C.6})$$

en donde h_L se calcula conforme a la ecuación (C.3), considerando únicamente las propiedades del líquido.

$$h_{c(TP)} = \left(\frac{1-R_G}{0.015} \right)^5 (h_{0.985} - h_V) + h_V \quad \text{si } R_G > 0.985 \quad (\text{C.7})$$

En esta última ecuación h_V se calcula de acuerdo a la ecuación (C.3), considerando las propiedades del vapor.

2.2 Coeficiente de transferencia de calor por nucleación

Para el cálculo de este coeficiente se utiliza la misma metodología que para el caso de la zona sensible, modificándose únicamente la expresión para calcular δ_H a

$$\delta_H = \frac{5 \mu_L}{\rho_L \left(\frac{V_L}{R_L} \right)^{1/2}} \quad (\text{C.8})$$

SIMBOLOGIA EMPLEADA (Apéndice C)

A	Area de transferencia
Cp	Capacidad calorífica
D	Diámetro
f	Factor de fricción
h	Coefficiente de transferencia de calor
k	Conductividad térmica
PR	Número de Prandtl
Q	Flujo de calor
R	Fracción volumen (holdup)
RE	Número de Reynolds
T	Temperatura
δ_H	Capa límite hidrodinámica
δ_{TH}	Capa límite térmica
μ	Viscosidad
ρ	Densidad
ΔH	Diferencia de entalpías entre líquido y vapor
ΔT_w	$T_w - T_s$
ΔP_w	$P_{s(T_w)} - P_B$

Subíndices

B	Seno del fluido
c	Convección
G, V	Gas (vapor)
L	Líquido
N	Nucleación
s	Saturación
TP	Dos fases
w	Pared