00521
105

# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE QUIMICA

## "DETERMINACION EXPERIMENTAL DE COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA PARA EL SISTEMA DIOXIDO DE CARBONO Y AGUA EN UNA TORRE DE ABSORCION CON RECIRCULACION"

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:

INGENIERO QUIMICO

P R E S E N T A:

*JOSE O'GORMAN MERINO*

MEXICO, D.F. 2003

EXAMENES PROFESIONALES
FACULTAD DE QUIMICA

Universidad Nacional Autónoma de México
UNAM
Biblioteca Central
Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**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.

Jurado asignado:

| | |
|---|---|
| Presidente | ANTONIO VALIENTE BARDERAS |
| Vocal | MARÍA LUISA GALICIA PINEDA |
| Secretario | MARIANO PÉREZ CAMACHO |
| 1er Suplente | MARTHA IMELDA MORENO BRAVO |
| 2° Suplente | AÍDA GUTIÉRREZ ALEJANDRE |

FACULTAD DE QUÍMICA, CIUDAD UNIVERSITARIA

ASESOR: Mariano Pérez Camacho

SUSTENTANTE: José O'Gorman Merino

NOMBRE: José O'Gorman Merino
FECHA: 13 de Noviembre de 2003
FIRMA:

*Dedico esta tesis no sólo a aquellas personas que colaboraron en su realización, sino a todas aquellas gracias a las cuales termino esta etapa de mi vida:*

- *A Dios, por obvias razones.*

- *A mis padres Tomás O'Gorman y María Emilia Merino por inculcarme los valores que me hacen ser y hacer lo que soy y hago.*

- *A Caro y a mis hermanos Tomás y Lucía, Juan y Mary, y Emilia.*

- *A mis amigos: Carlos O, Sando, Panino, Frank, Lily, Nacho, Inos, Milo, Santiago, Carlos López, Rubén, Negro, Iraní, Ñañel, Ray, Chillón, Campoch, Jaime, Mare, Drupy, Satur y Xavier N., a todos ellos por su cariño y apoyo.*

- *Al Ingeniero Mariano Pérez Camacho por su paciencia y ayuda en la realización de este trabajo.*

- *A la Facultad de Química por la experiencia que me ha dejado.*

- *En especial a tres ángeles que tengo como amigos: Piro†, Héctor† y Ramón†.*

# ÍNDICE


**CAPÍTULO I: INTRODUCCIÓN** 1

I.1. MOTIVACIÓN 1
I.2. OBJETIVOS 2

**CAPÍTULO II: CONCEPTOS BÁSICOS** 3

II.1. EQUILIBRIO DE FASES 4
II.2. TRANSPORTE DE MASA 8
II.2.1. Ley de Fick 8
II.2.2. Convección 10
II.3. TRANSFERENCIA DE MASA 11
II.3.1. Difusión en una película con disolución del soluto en las fronteras 12
II.3.2. Transferencia de masa en una película fija 14
II.3.3. Teoría de la doble película y sus coeficientes de transferencia de masa 16
II.3.4. Fase controlante 23
II.4. BALANCE DE MATERIA EN UNA TORRE DE ABSORCIÓN PARA UN SISTEMA BINARIO. 25
II.5. NÚMERO DE UNIDADES DE TRANFERENCIA Y LA ALTURA DE LA UNIDAD DE TRANSFERENCIA 28
II.6. CORRELACIONES 32
II.6.1. Método para calcular el coeficiente de difusividad 32
II.6.2. Correlación de Sherwood y Holloway 33
II.6.3. Correlación de Onda 33

**CAPÍTULO III: MODELO PROPUESTO** 34

III.1. SUPUESTOS 35
III.2. PLANTEAMIENTO DEL MODELO MATEMÁTICO 35
III.2.1. Transporte de masa en el volumen de control 36
III.2.2. Transferencia de masa interfasial en el volumen de control 37
III.2.3. Acumulación en el volumen de control 38

III.2.4. Balance de masa en el volumen de control, modelo para toda la columna 38
III.3. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN QUE DESCRIBE EL MODELO 39

**CAPÍTULO IV: CARACTERÍSITICAS, PARÁMETROS FÍSICOS Y OPERATIVOS DEL EQUIPO 46**

IV.1. DESCRIPCIÓN FÍSICA DEL EQUIPO 46
IV.2. PARÁMETROS OPERATIVOS 47
IV.2.1. Fracción de huecos entre empaque 47
IV.2.2. Velocidad intersticial del líquido 48
IV.2.3. Tiempo de residencia del líquido en la columna 49
IV.2.4. Tiempo de residencia del líquido en el tanque de almacenamiento 49
IV.2.5. Presión en la entrada y salida de la columna 50

**CAPÍTULO V: DESARROLLO EXPERIMENTAL 51**

V.1. MÉTODO DE TITULACIÓN 51
V.2. MATERIAL Y SOLUCIONES EMPLEADAS EN LA EXPERIMENTACIÓN 52
V.2.1. Preparación de las soluciones 53
V.3. PROCEDIMIENTO OPERATIVO 54

**CAPÍTULO VI: RESULTADOS EXPERIMENTALES Y CÁLCULOS 56**

VI.1. CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE $CO_2$ 56
VI.2. SOLUCIÓN AL MODELO TEÓRICO, ECUACIÓN III.52 58
VI.3. DETERMINACIÓN DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA 62
VI.3.1. Gasto de 15 LPH de agua y 1.772 KPH de $CO_2$ 62
VI.3.2. Gasto de 20 LPH de agua y 1.772 KPH de $CO_2$ 63
VI.3.3. Gasto de 25 LPH de agua y 1.772 KPH de $CO_2$ 64

**CAPÍTULO VII: INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS** 65

VII.1. RESULTADOS 65

VII.2. CORRELACIONES 67

VII.2.1. Correlación de Sherwood y Holloway 67

VII.2.2. Correlación de Onda 68

VII.3. CORRELACIÓN PROPUESTA Y ANÁLISIS 69

**CAPÍTULO VIII: CONCLUSIONES** 72

VIII.1. CONCLUSIONES AL MODELO TEÓRICO 72

VIII.2. CONCLUSIONES AL DESARROLLO EXPERIMENTAL 73

**ANEXO** 75

A.1. DESARROLLO MATEMÁTICO

A.1.1. De la ecuación III.44 a la III.45 75

A.1.2. De la ecuación III.46 a la III.47 76

A.1.3. De la ecuación III.48 a la III.49 77

**NOMENCLATURA** 80

**BIBLIOGRAFÍA** 83

# CAPÍTULO I

# INTRODUCCIÓN

El presente trabajo tiene como objetivo principal el desarrollo de un método para determinar coeficientes de transferencia de masa para sistemas donde la fase gaseosa es poco soluble en la fase líquida. Los resultados se compararán con los datos reportados en la literatura y se propondrá una correlación para el sistema.

El trabajo consiste básicamente en el tratamiento teórico y experimental de un proceso de absorción de $CO_2$ en agua destilada, en una torre empacada de absorción. Tiene la peculiaridad de que la fase líquida se recircula en la torre porque el $CO_2$ presenta baja solubilidad en la fase líquida.

Este trabajo expone un modelo donde el único fenómeno que se estudia es la absorción de $CO_2$ en agua destilada. Primero se desarrolla todo el modelo teórico en el capítulo III: MODELO PROPUESTO, que se basa en el capítulo II: CONCEPTOS BÁSICOS. Después, en los siguientes tres capítulos, se trata el trabajo experimental. Finalmente se unen los dos modelos y se calcula el coeficiente de transferencia de masa.

De la misma manera en que los estudios de transferencia de energía necesitan el coeficiente de transferencia de energía, todos los estudios de transferencia de masa requieren el coeficiente de transferencia de masa para predecir la cantidad de masa transferida de un punto a otro. La correlación que se propone al final del trabajo simplificará todos los estudios futuros sobre el tema. Como se revisará con detenimiento en el capítulo II: CONCEPTOS BÁSICOS, el transporte de masa, que consiste en el movimiento de masa en una sola fase, puede ocurrir por dos mecanismos diferentes: convección y difusión. Sin embargo, cuando exista una interfase habrá dos fenómenos: transporte de masa, explicado por difusión y convección, y transferencia de masa a través de la interfase.

El desarrollo experimental que requirió el trabajo se efectuó en la columna empacada de absorción marca Pignat que se encuentra en el Laboratorio de Ingeniería Química de la Facultad de Química en Ciudad Universitaria.

## I.1. MOTIVACIÓN

Se propone un modelo matemático muy elaborado, este modelo matemático tiene involucrados muchos conceptos teóricos que lo hacen interesante.

a. El sistema es un estudio a régimen no estacionario; es decir, no hay acumulación. Será interesante verificar cómo cambia la concentración a lo largo del tiempo. Esto hace que el desarrollo matemático y experimental sean más complejos.

b. Se plantea una recirculación de la fase líquida. El modelo teórico se elabora resolviendo primero un modelo para la columna y después se incluye en un balance hecho al tanque.

Será muy interesante realizar un trabajo profundo de experimentación y verificar cómo la experimentación y la teoría se acoplan en los resultados.

## I.2. OBJETIVOS

Para la realización del trabajo se espera cumplir con al menos cinco objetivos básicos que se enlistan a continuación.

a. Desarrollo de un modelo matemático que prediga el perfil de concentración para el sistema propuesto. Primero se hará un balance másico en una columna de absorción y se resolverá la ecuación resultante del balance. Después se hará un balance másico en el tanque de almacenamiento y finalmente se sustituirá la solución del balance en la columna, en el balance másico del tanque.

b. Desarrollo experimental para el sistema propuesto. Se realizará la experimentación en una columna de absorción tratando de que todos los supuestos establecidos para el desarrollo del modelo teórico se cumplan.

c. Acoplar los dos desarrollos para calcular el coeficiente de transferencia de masa. La variable desconocida del modelo teórico es el coeficiente de transferencia de masa, cuando se logra el acople con menor error con el modelo experimental, el coeficiente de transferencia de masa quedará resuelto.

d. Calcular una correlación para el coeficiente de transferencia de masa como función del gasto volumétrico de agua en el sistema. El desarrollo de la correlación propuesta será válida sólo para el equipo utilizado y sistemas donde la fase gaseosa es poco soluble en la fase líquida.

e. Comparar los datos obtenidos del coeficiente de transferencia de masa con los datos reportados en la literatura. Se espera que los resultados sean del orden a los reportados en la literatura teniendo en cuenta los diferentes factores que pueden afectar estos; el más evidente es la presión atmosférica.

# CAPÍTULO II

# CONCEPTOS BÁSICOS

La absorción es un proceso de separación muy utilizado en la industria actual, es una operación de transferencia de masa que involucra el contacto de dos fases: líquida y gaseosa, y por lo tanto, una interfase, que será de gran importancia en el estudio del proceso. La transferencia de masa sucede de la fase gaseosa a la fase líquida, de lo contrario, se llamaría al proceso desorción. La absorción se realiza en columnas o torres de absorción, existen dos tipos de columnas: de platos y empacadas; en la primera, el contacto entre las fases existe sólo en el plato, de aquí se dice que el contacto es discontinuo; en la segunda, existe interfase en toda la columna y por lo tanto, el contacto de las fases para la transferencia de masa es continuo.

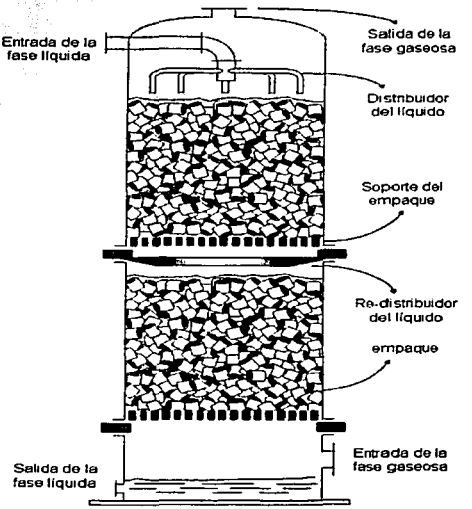



Figura II.1. Torre empacada para absorción

TESIS con FALLA DE ORIGEN

Las columnas empacadas, Figura II.1, son cilindros verticales rellenos de algún material químicamente inerte con las fases y los compuestos de interés, tiene dos entradas y dos salidas: dos líquidas y dos gaseosas. En la parte superior de la columna entra la fase líquida que absorberá el compuesto, o los compuestos, de interés; ésta escurrirá por la columna y mojando todo el empaque formará una gran área o interfase para la transferencia de masa. También en la parte superior de la columna está la salida gaseosa, con menor concentración del componente de interés que cuando entró a la columna, en la parte inferior, ascendiendo por un gradiente de presión; está claro que el movimiento de fases tiene un arreglo a contracorriente. La otra corriente, situada en la parte inferior, es la salida de la fase líquida, rica en el compuesto de interés. Sin embargo, existe un límite para la absorción, cuando la fase líquida ya no puede absorber más, es decir, se ha alcanzado el equilibrio entre fases, la transferencia de masa cesará.

## II.1. EQUILIBRIO DE FASES

A lo largo del presente trabajo, el término de fase se repetirá en variadas ocasiones, por lo que es necesario el entendimiento completo de ésta, así, se presentan algunas definiciones.

"Una fase puede definirse como una porción física distinta y homogénea de un sistema, ya sea un sólido, un líquido o un gas.", en realidad, existen más fases en la naturaleza además de las citadas aquí, "Pueden coexistir muchas fases sólidas y líquidas, pero debido a que los gases son totalmente miscibles entre sí, únicamente puede haber una fase gaseosa." [3].

"Una fase es un parte homogénea de un sistema, separada de las otras partes por fronteras físicas. Un sistema es simplemente la porción de materia que estamos considerando" [4]

"Un sistema es una cantidad de materia (formada por una o varias sustancias) considerada separadamente del resto del universo para su estudio" [6]

En un sistema de dos componentes: A y B, y dos fases: líquida y gaseosa, Figura II.2, constantemente, las moléculas de A de la fase líquida se están evaporando y las de la fase gaseosa se están condensando. El mismo patrón presentan las moléculas del componente B. Cuando por primera vez se juntan los dos

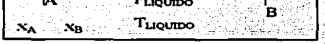



**Figura II.2. Sistema cerrado con dos componentes y dos fases. Existen concentraciones únicas para cada temperatura y presión.**



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

componentes empieza el transporte y la transferencia de masa ocasionados por un gradiente de concentración. De la misma manera que un gradiente de temperatura es el responsable del transporte de energía, un gradiente de concentración es el responsable del movimiento de masa, siempre el movimiento será de mayor a menor concentración porque tiende al equilibrio. Es importante aclara que transporte de masa y transferencia de masa no es lo mismo; el primero sucede cuando el movimiento se da en una sola fase; la transferencia de masa es cuando hay movimiento de masa a través de una interfase. Después de un tiempo, el sistema llegará al equilibrio y no habrá transferencia ni transporte de masa. En realidad si lo hay, pero el resultado neto es cero, es decir, las moléculas de A de la fase líquida que se evaporan son las mismas, que de la fase gaseosa, se condensan, y para el componente B es lo mismo. El equilibrio de fases existe cuando las composiciones de las diferentes fases que componen un sistema no cambian dados otros equilibrios, presión y temperatura constantes. O como establece Hougen y Watson [6]: "Cuando un gas se pone en contacto con la superficie de un líquido, se disolverán algunas de las moléculas que chocan con la superficie del líquido. Estas moléculas que se disuelven continúan moviéndose en el estado disuelto, algunas de las cuales alcanzan la superficie de nuevo y retornan al estado gaseoso. La disolución del gas en el líquido continuará hasta que el número de moléculas de gas que abandonan el líquido sea igual al de las que retornan. Se establece así un estado dinámico de equilibrio y no habrá cambios de concentración de las moléculas de gas en ambas fases líquida y gaseosa" [6].

La relación general para el equilibrio vapor líquido esta dada por la relación [1]

$$\left(\frac{f}{P}\right)_j Py_j = p_j^o x_j \gamma_j \qquad \text{(II.1)}$$

La parte derecha de la ecuación II.1 representa a la fase líquida y la parte izquierda representa a la fase gaseosa. Están relacionadas por la presión de vapor de la especie *j*. Los otros términos corrigen la no idealidad de las fases, así, si la fase gaseosa se comporta idealmente, la razón de fugacidad de la especie *j* a la presión total será igual a uno; y si la fase líquida se comporta idealmente, el coeficiente de actividad de la especie *j* será igual a uno. Si las dos fases se comportan idealmente, se llega a la ley de Raoult:

$$Py_j = p_j^o x_j \qquad \text{(II.2)}$$

De esta ley se establece: "la presión parcial de un componente es igual a su presión de vapor multiplicada por su fracción molar en el líquido" [12]. Como la presión de vapor está en función de la temperatura, esta ley está regida por la temperatura y la presión.

Para sistemas de un solo componente y dos fases, la ley de Raoult funciona, predice el equilibrio del sistema con precisión. Sin embargo, no es común un sistema de un solo componente, para el presente trabajo bastará con la siguiente explicación de un sistema de dos componentes.

Si en el sistema propuesto, Figura II.2, el coeficiente de actividad de las especies es igual a la unidad, el equilibrio está regido por la ley de Raoult. No obstante, no siempre se puede suponer que la fase líquida es ideal. Si de la ecuación II.1 sólo se considera la idealidad en la fase gaseosa:

$$Py_j = p_j^o x_j \gamma_j \qquad \text{(II.3)}$$

A presiones bajas se puede aplicar la ley de Dalton:

$$Py_j = p_j \qquad \text{(II.4)}$$

Si no se considera a la fase líquida como ideal, el coeficiente de actividad es diferente de uno y la ecuación II.3 no se simplifica. Cuando se quiere una fase líquida real se involucra el coeficiente de partición $K$ en lugar de las variables $p_j^o \gamma_j$, entonces:

$$K_j = p_j^o \gamma_j \qquad \text{(II.5)}$$

Sustituyendo la ecuación II.4 y II.5 en la ecuación II.3:

$$p_j = K_j x_j \qquad \text{(II.6)}$$

Está ecuación es muy parecida a la ley de Raoult (ecuación II.2), la diferencia es que la ecuación II.6 no considera a la fase líquida como una fase ideal. Como $K_j$ está en función del coeficiente de actividad y éste está en función de la concentración, la ecuación II.6 está: en función de la presión, por la ley de Dalton; en función de la temperatura, por la presión de vapor; y en función de la concentración de la fase líquida, por el coeficiente de actividad.

Esta relación lineal sólo es válida a bajas concentraciones [10] y el coeficiente de partición es la constante de la ley de Henry: He.

Finalmente, sólo para bajas concentraciones:

$$p_j = \mathrm{He} x_j \qquad \text{(II.7)}$$

Esta ley es aplicable en el presente trabajo porque se tiene un sistema de dos componentes, $CO_2$ y Agua, y dos fases; la cantidad de $CO_2$ que el agua puede absorber es pequeña y la ley de Henry se puede aplicar para el sistema $CO_2$-$H_2O$

Es importante resaltar que la constante de Henry tiene diferentes formas para los diferentes sistemas posibles, existen 3 tipos de sistemas:

a. Líquidos parcialmente solubles [15,12]: para líquidos orgánicos (a condiciones ambientales) que son parcialmente solubles en el agua existen tres fases: orgánica, acuosa y gaseosa.

$$\mathrm{He}_j = p_j^o / x_j \qquad \text{(II.8)}$$

b. Líquidos totalmente solubles [15]: para líquidos orgánicos (a condiciones ambientales) que son totalmente solubles en el agua existen dos fases: líquida y gaseosa.

$$He_j = \gamma_j^{\infty} p_j^0 \qquad (II.9)$$

c. Gases [15]: Para gases orgánicos (a condiciones ambientales) que se encuentran en contacto con el agua hay dos fases: líquida, compuesta básicamente por agua, y la gaseosa, compuesta básicamente por el gas orgánico.

$$He_j = \frac{(1 - y_{H2O})}{x_j} \qquad (II.10)$$

Este es el caso para el sistema $CO_2$-$H_2O$ que se analizará en el presente trabajo.

Los equilibrios de fases pueden ser representados en diferentes diagramas, los más comunes son diagramas donde en el eje de las ordenadas se representa a la fracción mol $y$ o a la presión parcial $p$. En el eje de las abscisas se representa a la fracción mol $x$. La relación se denomina línea o curva de equilibrio y representa los posibles pares de concentraciones del sistema gas-líquido que pueden existir a una temperatura y presión fija.

Si el sistema se rige por ley de Henry, la ecuación de la curva de equilibrio será:

$$y_j = He x_j \qquad (II.11)$$

Y será válida sólo a bajas concentraciones, Figura II.3

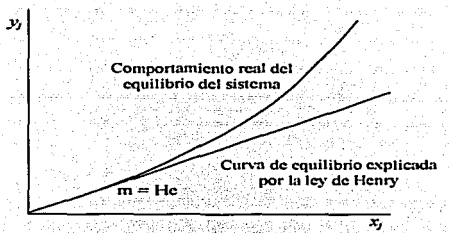



Figura II.3. Diagrama de equilibrio para la especie $j$. El comportamiento real puede ser explicado por la ley de Henry sólo a bajas concentraciones y su pendiente será la constante de Henry.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

## II.2. TRANSPORTE DE MASA

El transporte de masa, al igual que el movimiento de energía, puede ocurrir por dos mecanismos diferentes: difusión y convección, esta última puede ser de dos tipos: forzada o natural.

Al igual que el movimiento de energía, el movimiento de masa por difusión se debe a un gradiente; de temperatura y de concentración respectivamente. El flujo de energía siempre es de mayor a menor temperatura y el transporte de masa por difusión será siempre de mayor a menor concentración.

El transporte de masa debido a la convección consiste en el movimiento masivo, macroscópico, de un fluido. Si el movimiento del fluido se debe a una diferencia de densidades, ocasionada por diferencia de concentración o diferencia de temperatura, el proceso se llama convección natural o libre. Si una fuerza externa al movimiento de masa es la que ocasiona el movimiento del fluido, el proceso se llama convección forzada. No es importante diferenciar que tipo de convección es la causante del movimiento de masa, de cualquier manera, en todos los cálculos y estudios sólo se trabaja con un flux convectivo total.

### II.2.1. LEY DE FICK

"Ya en el año de 1815, Parrot observó cuantitativamente que cuando una mezcla de gases contiene dos o más especies moleculares cuyas concentraciones relativas varían de un punto a otro, resulta un proceso, aparentemente natural, que tiende a disminuir cualesquiera desigualdades de composición." [13]

Se considera el siguiente sistema, Figura II.4, como un modelo fenomenológico para el estudio de la difusión [8]. Dos recipientes de igual volumen conectados por un tubo capilar largo. El sistema se mantiene a una temperatura fija y presión fija. En un principio, un recipiente contiene oxígeno y el otro nitrógeno. Después de un tiempo, el oxígeno se habrá difundido al recipiente del nitrógeno por medio del tubo capilar y viceversa. Se propone que la concentración varía linealmente con el tiempo.

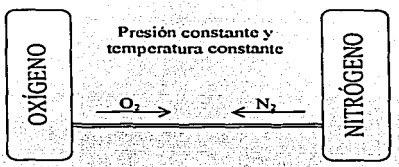



Figura II.4. Dos recipientes conectados por un tubo capilar. Habrá un movimiento de masa por difusión en el tubo.

$$\text{Flujo difusivo de oxígeno} = \frac{\text{cantidad de oxigeno transferida}}{\text{tiempo}} \qquad \text{(II.12)}$$



TESIS CON
F. LLA DE ORIGEN

Para hacer que la relación propuesta sea independiente del sistema, es decir, del área del capilar, se debe dividir el flujo entre el área de sección transversal al flujo, esta relación se denomina como flux.

$$\text{Flux difusivo de oxígeno} = \frac{\text{Flujo difusivo de oxígeno}}{\text{área transversal al flujo}} = \frac{\text{cantidad de oxígeno transferida}}{\text{tiempo} \cdot \text{área transversal al flujo}} \quad \text{(II.13)}$$

El movimiento de masa existe porque hay un gradiente de concentración, entre más grande sea, mayor será el movimiento, es lógico suponer entonces que el flux difusivo de oxígeno es proporcional al gradiente o diferencia de concentraciones.

$$\text{Flux difusivo de oxígeno} = D\,(\text{diferencia de concentración de oxígeno}) \quad \text{(II.14)}$$

El flux difusivo dependerá también de la longitud del capital y es preciso que a mayor longitud, menor transporte difusivo de masa. Se propone una relación inversa lineal.

$$\text{Flux difusivo de oxígeno} = D\frac{(\text{diferencia de concentración de oxígeno})}{\text{longitud del capilar}} \quad \text{(II.15)}$$

Esta relación la propuso Ann A. Fick en 1855 y es conocida como la ley de Fick, la constante D se le denomina coeficiente de difusión o difusividad. Con el ejemplo anterior se han introducido las características básicas del modelo mediante el cual se puede cuantificar la difusión. Sin embargo, todo el desarrollo anterior es intuitivo y conviene formalizar el modelo, para esto se propone el siguiente sistema.

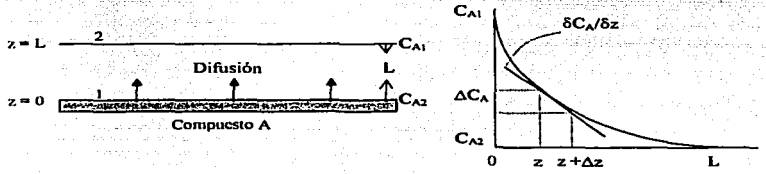



Figura II.5. Sistema donde el compuesto A se difunde por el medio B en una longitud total L.

Una capa estática de líquido B sobre una superficie sólida de un compuesto A que es ligeramente soluble en B, Figura II.5, es el nuevo sistema para deducir de manera formal la ley de Fick.

En base a la ecuación II.15, el flux será proporcional a la diferencia de concentraciones, por medio de $D$, e inversamente proporcional a la distancia donde se lleva a cabo el transporte de masa por difusión. Para el sistema propuesto, la relación del flux difusivo será:

$$J_A = D\frac{C_{A1} - C_{A2}}{L} = D\frac{\Delta C_A}{L} \quad \text{(II.16)}$$

Para una distancia $\Delta z$, la diferencia de concentraciones será el siguiente gradiente:



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$\Delta C_A = C_A(z+\Delta z) - C_A(z) \qquad \text{(II.17)}$$

Si se sustituye la ecuación II.17 en la II.16 y se toma el límite cuando Δz tiende a cero, se tendrá el flux difusivo en cualquier distancia.

$$\lim_{\Delta z \to 0} -D\frac{\Delta C_A}{\Delta z} = \lim_{\Delta z \to 0} -D\frac{C_A(z+\Delta z) - C_A(z)}{\Delta z} = -D\frac{dC_A}{dz} = J_A \qquad \text{(II.18)}$$

Esta es la ecuación formal que expresa la ley de Fick.

Lobo [8] resume el significado físico de la ley de Fick en los siguientes puntos:

a. "Existe una tendencia natural (espontánea) para que cualquier soluto se difunda desde la región de alta concentración a la región de baja concentración.
b. Esta tendencia depende de la naturaleza de la mezcla, esto es, del coeficiente de difusión.
c. La magnitud del flux difusivo es directamente proporcional a la magnitud del gradiente de concentración.
d. El flux difusivo y el gradiente de concentración tienen signos opuestos." y es una convención cuál lleve el signo negativo.

### II.2.2. CONVECCIÓN

El transporte total de masa está explicado por dos mecanismos: difusivo y convectivo, entonces:

$$\begin{pmatrix}\text{Transporte total}\\ \text{de masa}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\text{Transporte de masa}\\ \text{por difusión}\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\text{Transporte de masa}\\ \text{por convección}\end{pmatrix} \qquad \text{(II.19)}$$

Ya se explicó cómo el transporte de masa por difusión está modelado por la ley de Fick, ecuación II.18. Se necesita una ecuación para modelar el transporte de masa por convección y así, sumándola con la ley de Fick, tener un modelo que represente el transporte total de masa en una fase, ecuación II.19.

Se estableció que la convección consiste en el movimiento masivo, macroscópico, de un fluido; es decir, el fluido se está moviendo y se puede observar a simple vista. La manera más lógica de hacer esta observación es con la velocidad, el fluido tendrá una velocidad. Si el fluido es una solución de concentración $A^\circ$ con unidades de moles por volumen habrá entonces un flux convectivo para el soluto que dependerá de dos variables. La primera es la velocidad de la solución porque si la velocidad es muy alta, el transporte de soluto, disuelto en la solución, lo será también, y viceversa. La segunda variable es la concentración de la solución porque si ésta está muy concentrada, habrá más transporte de soluto, y viceversa. Entonces, el flux convectivo es la relación que hay entre la velocidad de un fluido y su concentración:

$$[\text{Flux convectivo}] = A^\circ v \qquad \text{(II.20)}$$

$$\text{Flux convectivo } [=]\left(\frac{\text{moles}}{\text{volumen}}\right)\left(\frac{\text{distancia}}{\text{tiempo}}\right) = \frac{\text{moles}}{\text{tiempo} * \text{área}}$$

Para tener un flux total de masa que represente el transporte total, se suman los dos fluxes: el difusivo y el convectivo:

$$\left[\begin{matrix}\text{Flux total}\\ \text{de masa}\end{matrix}\right] = \left[\begin{matrix}\text{Flux difusivo}\\ \text{de masa}\end{matrix}\right] + \left[\begin{matrix}\text{Flux convectivo}\\ \text{de masa}\end{matrix}\right] = -D\frac{dC_A}{dz} + A^{\circ}v \qquad \text{(II.21)}$$

## II.3. TRANSFERENCIA DE MASA

En una torre de absorción, dos fases están en contacto todo el tiempo y forman una interfase muy grande. Se llevan a cabo dos fenómenos muy importantes de movimiento de masa. El primero es el transporte de masa, explicado por dos mecanismos: difusión y convección. Esto se revisó en la sección II.2. El segundo fenómeno es la transferencia de masa a través de la interfase. Se han propuestos varias teorías. La teoría de la doble película propuesta por Whitman [14] en 1923 supone que existen a ambos lados de la interfase películas fijas compuestas de las moléculas de la misma fase que representan, mientras que en el resto del fluido la mezcla es completa; la velocidad del fenómeno está controlada por la difusión molecular a través de las películas. La teoría de la difusividad turbulenta considera que en la transferencia de materia en régimen estacionario colaboran simultáneamente la difusividad molecular y la turbulenta. Higbie [5] propuso la teoría de la penetración, en la que se supone que la absorción tiene lugar durante una serie de breves contactos entre los fluidos; antes de alcanzar la homogeneidad de la disolución, el soluto se difunde una corta distancia en el absorbente. La teoría de la penetración con renovación superficial de Danckwerts [1] se diferencia de la de Higbie en que la renovación de la superficie en contacto con la interfase se realiza en régimen no estacionario, lo que supone la creación continua de nuevas interfases. La teoría dualista película-penetración de Toor y Marchello [11] considera que la renovación de la película laminar se realiza a velocidad suficientemente rápida como para evitar que se establezca un gradiente de concentración estacionario. Por último, King [7] ha propuesto un modelo de transporte en régimen no estacionario en el que se juntan las teorías de Toor y Marchello y la de difusividad turbulenta.

Antes de revisar la teoría de la doble película que se usará como mecanismo de transferencia de masa en el presente trabajo, se debe entender el concepto de disolución en la interfase y para esto se propone el siguiente tema donde una película de polímero simula a la interfase.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

### II.3.1. DIFUSIÓN EN UNA PELÍCULA CON DISOLUCIÓN DEL SOLUTO EN LAS FRONTERAS [8]

En el siguiente sistema, Figura II.6, se simula, mediante una película de polímero, una interfase, las propiedades que resulten de este sistema se podrán aplicar a una interfase real en la teoría de la doble película. El sistema consiste en una película de polímero permeable, de espesor L, que separa dos soluciones agitadas de A con composición constante pero diferente una de la otra ($C_{A1} > C_{A2}$), Figura II.6, de tal manera que habrá transferencia de masa a través de la película. Es necesario identificar cual será el flux difusivo de masa del sistema.

Haciendo un balance de masa en la sección diferencial de la película de polímero:

$$[A_S J_A]_z - [A_S J_A]_{z+\Delta z} = 0 \qquad \text{(II.22)}$$

Si divide la ecuación II.22 por $A_S \Delta z$ y se elimina $A_S$, se puede tomar el límite cuando $\Delta z$ tiende a cero:

$$\lim_{\Delta z \to 0} -\left(\frac{J_A|_{z+\Delta z} - J_A|_z}{\Delta z}\right) = -\frac{dJ_A}{dz} = 0 \qquad \text{(II.23)}$$

La ecuación II.23 explica que el flux de masa es constante en la dirección $z$. Como el transporte sólo puede ser explicado por el mecanismo de difusión porque las moléculas del polímero están fijas, se puede sustituir la ley de Fick, ecuación II.18, en la ecuación II.23:

$$D\frac{d^2C_A}{dz^2} = 0 \qquad \text{(II.24)}$$

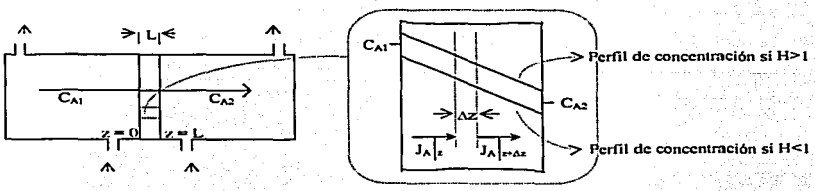



Figura II.6. Difusión de un soluto A que se disuelve en las fronteras de una película de polímero para después transportarse por difusión. Antes de ingresar al segundo cuarto debe disolverse en el solvente.

Es necesario, para conocer la cantidad de masa que atraviesa la película, resolver la ecuación II.24: realizar la integral y sustituir las condiciones a la frontera, $z = 0$ y $z = L$, para eliminar las constantes de intergración. Sin embargo, aquí conviene hacer una pausa sobre las condiciones a la frontera. Éstas no pueden ser las concentraciones $C_{A1}$ y $C_{A2}$ porque éstas son las de la solución, se necesitan las



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

concentraciones en el polímero porque la ecuación II.24 aplica sólo en el polímero. Entonces, es necesaria una relación que exprese la concentración del soluto A en el la orilla del polímero en función de la concentración en el seno de la solución. La forma de obtener esta relación es suponiendo que en las interfases solución-polímero, y sólo en las interfases, existe equilibrio; esta hipótesis ha sido experimentalmente verificada. "Se ha demostrado (Emmert y Pigford, 1954) que sólo en casos excepcionales, cuando la transferencia de masa entre las fases en contacto es muy alta, existe una desviación significativa del equilibrio" [8]. Ya que el modelo de absorción que se presentará en el presente trabajo involucra sólo concentraciones diluidas, la hipótesis es válida. Se pueden escribir las condiciones de frontera:

$$z = 0 \qquad C_A = HC_{A1} \tag{II.25}$$

$$z = L \qquad C_A = HC_{A2} \tag{II.26}$$

$H$ es el coeficiente de partición, es una propiedad de equilibrio del sistema polímero-solución. En el sistema gas-líquido recibe el nombre de *valor K* , y en ciertas circunstancias, anteriormente tratadas, como sistemas diluidos, es la constante de Henry, ecuación II.7. Para sistemas sólido-gas se denomina coeficiente de distribución.

La ecuación II.25 explica que la concentración del soluto A en el polímero en z = 0 está en equilibrio con la concentración del mismo soluto en la solución 1, $C_{A1}$. La ecuación II.26 explica que la concentración del soluto A en el polímero en z = L está en equilbrio con la concentración del mismo soluto en la solución 2, $C_{A2}$. Si se conoce el coeficiente de partición, entonces la hipótesis de existencia de equilibrio en la interfase nos permite conocer las concentraciones en las fronteras del polímero.

Integrando la ecuacion II.24 y sustituyendo las condiciones a la frontera II.25 y II.26 se llega a:

$$C_A = HC_{A1} - H(C_{A1} - C_{A2})\frac{z}{L} \tag{II.27}$$

Para obtener el flux de masa a través de la película, se sustituye la ecuación II.27 en la ley de Fick, II.18:

$$J_A = -D\frac{dC_A}{dz} = -D\frac{d\left(HC_{A1} - H(C_{A1} - C_{A2})\frac{z}{L}\right)}{dz} = \left(\frac{DH}{L}\right)(C_{A1} - C_{A2}) \tag{II.28}$$

El coeficiente de partición merece algunas atenciones más. H puede tomar valores mayores o menores de 1. Si H>1, el soluto tiene mayor afinidad por el polímero que por las disoluciones; su concentración en las fronteras del polímero será mayor que en las solución, Figura II.6. Cuando H<1, el soluto tendrá mayor afinidad por las soluciones que por el polímero y su concentración en éstas será mayor. En la frontera z = 0, para H>1, la concentración del soluto es mayor en el polímero que en la solución, hecho que aparentemente contradice la afirmación de que la difusión ocurre de mayor a menor concentración; el paso del soluto de la

solución al polímero no es un proceso difusivo, sino uno de solubilización, y por tanto, se rige por leyes diferentes.

Cuando hay una interfase se forman dos pequeñas películas a cada lado de ésta, es indispensable revisar como es el movimiento de masa en una película fija y que mecanismos rigen el proceso para después integrarlas con el concepto de disolución en la interfase, y poder explicar la teoría de la doble película.

### II.3.2. TRANSFERENCIA DE MASA EN UNA PELÍCULA FIJA

Supongase una capa de líquido B sobre una superficie sólida de un compuesto A que es ligeramente soluble en B, Figura II.7. La teoría de la película establece que cuando hay una interfase se forma una película fija compuesta por la fase fluida, tan pequeña como cuando $dz \rightarrow 0$. Una molécula de A, una vez que se encuentre disuelta en B, deberá moverse por difusión porque se encuentra en una película muy delgada de moléculas de B que están fijas y por lo tanto no hay movimiento másico del fluido. En este sistema se desconoce la distancia sobre la cual ocurre la difusión, y por lo tanto no es posible aplicar la ley de Fick para explicar el movimiento de A en B.

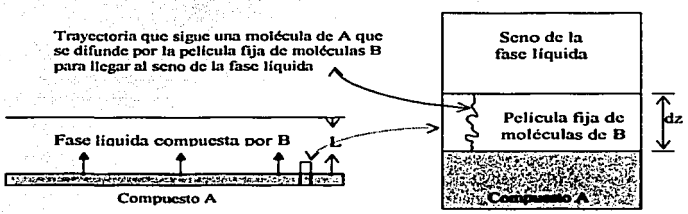



Figura II.7. Sistema donde el compuesto A debe de difundirse en la película fija de B. La película fija compuesta por moléculas de B es tan delgada como cuando $dz \rightarrow 0$

Es necesario un modelo para la transferencia de masa en la película. Este nuevo modelo es el que utiliza coeficientes de transferencia de masa. Existen muchos problemas de movimiento de masa donde es impráctico, o en muchos casos, imposible, conocer las concentraciones puntuales del sistema, la longitud sobre la cual ocurre la difusión o el área transversal al movimiento de masa. En estos casos, se utiliza el modelo de coeficientes de transferencia de masa.

El modelo utiliza el mismo principio de movimiento de masa originado por un gradiente de concentración que tuvo como principio la ley de Fick, ecuación II.18. La diferencia radica en la constante



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

de proporcionalidad, aquí llamada coeficiente de transferencia de masa, que engloba variables como la longitud sobre la cual ocurre la difusión.

$$N_A = k(\Delta C_A) \qquad \text{(II.29)}$$

En está ecuación, $N_A$ es el flux total de masa y $k$, el coeficiente de transferencia de masa.

Para explicar el movimiento de una sustancia desde una interfase hasta el seno de la fase, Figura II.7, es decir, el movimiento a través de la película fija, se utiliza el modelo de coeficientes de transferencia de masa. Para plantear formalmente el modelo aplicado a la teoría de la película fija, considérese el mismo sistema, ahora explicado por la Figura II.8, donde el gradiente será la diferencia entre la concentración del seno del fluido B y la concentración en la interfase:

$$N_{Ai} = k(C_{Ai} - C_A) \qquad \text{(II.30)}$$

Esta ecuación explica que la cantidad de masa de A que se transfiere a través de la interfase por unidad de tiempo y por unidad de área es proporcional al gradiente de concentración que hay en la interfase.

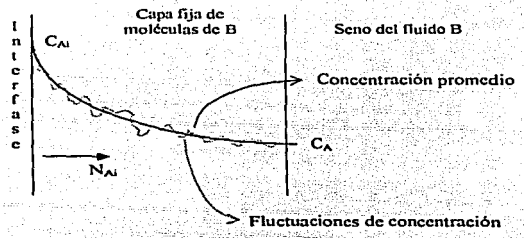



**Figura II.8. El movimiento de masa de la interfase al seno del fluido está explicado por la teoría de la película y usa los coeficientes de transferencia de masa con el respectivo potencial.**

Ya que se tienen tres conceptos fundamentales: disolución en la interfase, sección II.3.1; teoría de la película y coeficiente de transferencia de masa, sección II.3.2; se puede tratar con profundidad la teoría de la doble película en la siguiente sección.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

### II.3.3. TEORÍA DE LA DOBLE PELÍCULA Y SUS COEFICIENTES DE TRANSFERENCIA DE MASA

Cuando se forma la interfase para la transferencia de masa en la absorción, se forman dos pequeñísimas capas a cada lado de la interfase, una líquida y otra gaseosa, Figura II.9. Sin importar el mecanismo por el cual las moléculas del compuesto de interés se *trans*portan en el seno de la fase gaseosa y el mecanismo por el cual las moléculas del compuesto de interés se transportan en el seno de la fase líquida, el mecanismo en las dos capas es sólo difusivo. Como la longitud de cada película es desconocidas, no se puede utilizar la ley de Fick. Esto se explicó con más detalle en la sección II.3.2 y se propusieron los coeficientes de transferencia de masa.

Con estos se explica cómo la molécula se transfiere por la capa gaseosa y la capa líquida. Sin embargo hay un concepto clave para esta teoría explicado en la sección II.3.1, la manera en la cual las moléculas

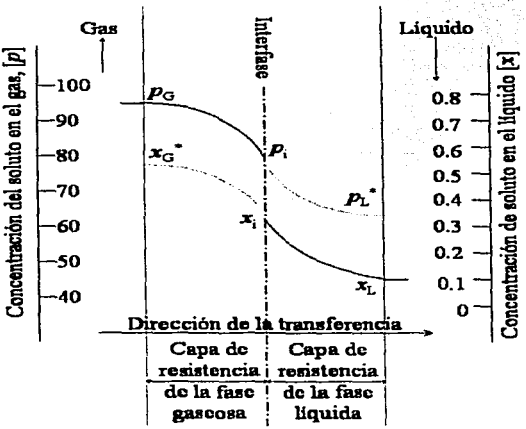



**Figura II.9.** Teoría de la doble película o doble capa. (Two-film theory). Hay dos nanocapas a cada lado de la interfase por donde las moléculas se transfieren por difusión. Existe un proceso de disolución justo en la interfase.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

presentes en la interfase del lado de la película gaseosa se disolverán en la película líquida. Como nuestro caso es de bajas concentraciones, aplica la ley de Henry para explicar este proceso de disolución, donde hay equilibrio sólo en la interfase.

Existen muchas maneras de expresar la concentración. En la fase gaseosa se pueden utilizar fracciones molares ($y$) y presiones parciales ($p$), para la fase líquida se pueden utilizar fracciones molares ($x$) y moles por unidad de volumen ($A^{\circ}$). En el desarrollo del presente trabajo se utilizan las cuatro maneras.

Para expresar el movimiento de masa en la película gaseosa se aplica la ecuación II.29 a la figura II.9:

$$N_A = k_G(p_G - p_i) \tag{II.31}$$

Para la fase líquida será:

$$N_A = k_x(x_i - x_L) \tag{II.32}$$

Donde $k_x$ es el coeficiente de transferencia de masa para la fase líquida y $k_G$ es el coeficiente de transferencia de masa para la fase gaseosa.

Las ecuaciones II.31 y II.32 tienen una concentración interfasial. La concentración interfasial, que sí existe en el sistema, es imposible de medir. Lo que se busca en el siguiente procedimiento es eliminar esta concentración, para esto necesitamos sumar los potenciales de las dos ecuaciones. El resultado será un potencial que exprese la transferencia de masa en las dos películas, este potencial es llamado potencial global y no está en función de concentraciones interfasiales. Para poder hacer esta sumatoria, los dos potenciales deben de tener las mismas unidades. Para esto, se utiliza el coeficiente de partición que para el caso de la absorción a dilución baja es la constante de Henry, de la misma manera que se hizo en las ecuaciones II.25 y II.26, se pueden, en base a la figura II.9, los siguientes casos:

$$p_L^* = \mathrm{He}x_L \tag{II.33}$$

$$p_i = \mathrm{He}x_i \tag{II.34}$$

$$p_G = \mathrm{He}x_G^* \tag{II.35}$$

Si la ecuación II.32 se multiplica por la constante de Henry:

$$\mathrm{He}\frac{N_A}{k_x} = \mathrm{He}x_i - \mathrm{He}x_L \tag{II.36}$$

Y se sustituyen las ecuaciones II.33 y II.34:

$$p_i - p_L^* = \mathrm{He}\frac{N_A}{k_x} \tag{II.37}$$

Las ecuaciones II.32 y II.37 expresan el potencial de transferencia de la película líquida, la diferencia es que la primera lo hace en función de las concentraciones de la fase líquida y la segunda en función de las concentraciones de la fase gaseosa.

De la ecuación II.31 se despeja el potencial $p_G - p_i$:

$$p_G - p_i = \frac{N_A}{k_G} \qquad \text{(II.38)}$$

La ecuación II.38 representa el potencial de transferencia de la película gaseosa en función de la concentración de la fase gaseosa.

Dado que en las ecuaciones II.37 y II.38, los potenciales de transferencia de masa están expresados en las mismas unidades de concentración, ya es posible sumar las ecuaciones para tener un solo potencial que exprese la transferencia de masa, potencial global, y que no incluya una concentración interfasial.

$$p_G - p_L^* = N_A\left(\frac{\text{He}}{k_x} + \frac{1}{k_G}\right) \qquad \text{(II.39)}$$

Despejando el flux:

$$N_A = \frac{p_G - p_L^*}{\left(\frac{\text{He}}{k_x} + \frac{1}{k_G}\right)} \qquad \text{(II.40)}$$

"La cantidad de sustancia transportada, por unidad de tiempo y por unidad de área de contacto entre fases, aparece así en función de la resistencia total y del potencial global de difusión, expresado este en unidades de la fase gaseosa" [9].

Físicamente la concentración $p_L^*$ no existe en el sistema y por lo tanto no se puede medir. Es simplemente la presión parcial que tendría la fase gaseosa si se encontrara en equilibrio con una fase líquida de concentración $x_L$, ecuación II.33. Si la torre, en algún punto, llegara al equilibrio, la transferencia de masa cesaría y la fase gaseosa tendría la presión parcial $p_L^*$.

En el procedimiento anterior, se eliminó la concentración interfasial referida a la fase gaseosa $p_i$, se puede realizar un procedimiento similar y eliminar la concentración interfasial referida a la fase líquida $x_i$. Para esto, en lugar de expresar la ecuación II.32 en función de las unidades de la fase gaseosa, se expresa la ecuación II.31 en función de las unidades de la fase líquida con la ayuda de las ecuaciones II.34 y II.35:

$$\frac{1}{\text{He}}\frac{N_A}{k_G} = x_G^* - x_i \qquad \text{(II.41)}$$

Las ecuaciones II.31 y II.41 expresan el potencial de transferencia de la película gaseosa, la diferencia es que la primera lo hace en función de las concentraciones de la fase gaseosa y la segunda en función de las concentraciones de la fase líquida.

De la ecuación II.32 se despeja el potencial $(x_i - x_L)$:

$$x_i - x_L = \frac{N_A}{k_x} \qquad \text{(II.42)}$$

La ecuación II.42 representa el potencial de transferencia de la película líquida en función de la concentración de la fase líquida.

Dado que en las ecuaciones II.41 y II.42, los potenciales de transferencia de masa están expresados en las mismas unidades de concentración, es posible sumar las ecuaciones para tener un solo potencial que exprese la transferencia de masa, potencial global, y que no incluya una concentración interfasial.

$$N_A = \frac{x_G^* - x_L}{\left(\frac{1}{k_x} + \frac{1}{\mathrm{He}k_G}\right)} \qquad \text{(II.43)}$$

La ecuación II.43 representa el mismo flux que la ecuación II.40, pero ahora el potencial global de difusión está expresado en unidades de la fase líquida. La fracción molar $x_G^*$ no es una concentración real en la torre, es la fracción molar que tendría la fase líquida si se encontrara en equilibrio con una fase gaseosa con una presión parcial de $p_G$, ecuación II.35. Si la torre llegara al equilibrio en algún punto, la transferencia de masa cesaría y la fase líquida tendría la concentración $x_G^*$.

A diferencia de las ecuaciones II.31 y II.32, las ecuaciones II.40 y II.43 tiene una gran ventaja, no son necesarias las concentraciones de interfase; pero ahora se tienen dos coeficientes. Para simplificar éstas, se definen los coeficientes de transferencia globales:

$$N_A = \frac{p_G - p_L^*}{\left(\frac{\mathrm{He}}{k_x} + \frac{1}{k_G}\right)} = \frac{p_G - p_L^*}{\frac{1}{K_G}} \qquad \text{(II.44)}$$

$$N_A = \frac{x_G^* - x_L}{\left(\frac{1}{k_x} + \frac{1}{\mathrm{He}k_G}\right)} = \frac{x_G^* - x_L}{\frac{1}{K_x}} \qquad \text{(II.45)}$$

Entonces, los coeficientes globales se expresan como:

$$\frac{1}{K_G} = \frac{1}{k_G} + \frac{\mathrm{He}}{\mathrm{k_x}} \quad \text{o} \quad K_G = \frac{k_G k_x}{k_x + k_G \mathrm{He}} \qquad \text{(II.46)}$$

$$\frac{1}{K_x} = \frac{1}{k_x} + \frac{1}{\mathrm{He}k_G} \quad \text{o} \quad K_x = \frac{\mathrm{He}k_G k_x}{k_x + k_G \mathrm{He}} \qquad \text{(II.47)}$$

donde $K_x$ es el coeficiente de transferencia global en función de las unidades de concentración de la fase líquida, $K_G$ es el coeficiente de transferencia global en función de las unidades de concentración de la fase gaseosa.

Dividiendo la ecuación II.47 entre la ecuación II.46, se obtiene:

$$\frac{K_x}{K_G} = \frac{\dfrac{\mathrm{He}k_G k_x}{\mathrm{He}k_G + k_x}}{\dfrac{k_G k_x}{\mathrm{He}k_G + k_x}} \quad \text{o bien:} \quad \frac{K_x}{K_G} = \mathrm{He} \tag{II.48}$$

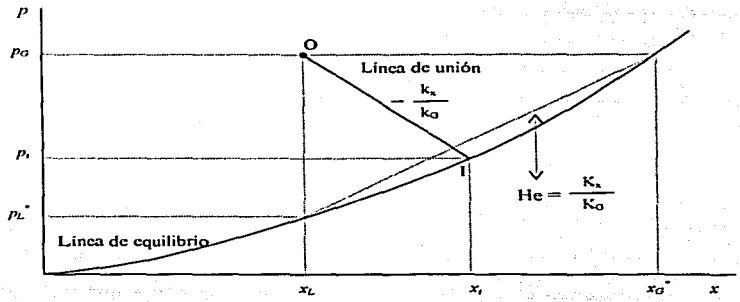
De las ecuaciones II.44 y II.45 se despejan los coeficientes globales y se realiza el cociente $\frac{K_x}{K_G}$:

$$\frac{K_x}{K_G} = \frac{p_G - p_L^*}{x_G^* - x_L} = \mathrm{He} \tag{II.49}$$

De las ecuaciones II.31 y II.32 se puede obtener la relación $-\frac{k_x}{k_G}$:

$$-\frac{k_x}{k_G} = \frac{p_G - p_i}{x_L - x_i} \tag{II.50}$$

La ecuación II.49 y II.50 están representadas en la Gráfica II.1. La ecuación II.50 representa la línea de unión. La utilidad de esta línea es alta porque por medio de ella podemos conocer las concentraciones en la interfase, imposibles de medir. El punto O de la gráfica representa las concentraciones de las fases en algún punto de la torre y es variable dependiendo de la altura de la torre; cada punto O tendrá un punto I, que




**Gráfica II.1. Línea de equilibrio y la línea de unión. El punto I corresponde sólo a las condiciones de interfase para el punto O. Para sistemas de concentraciones bajas, donde la ley de Henry es válida, la diferencia entre la línea de equilibrio real y la constante de Henry es mínima. En este ejemplo se exagera la separación entre una y otra.**



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

representa las condiciones de interfase, que se puede calcular con la línea de unión. En las ecuaciones II.48 y II.49 se demostró que la relación de coeficientes de transferencia globales no es otra cosa que la constante de Henry y también la relación de los potenciales, Gráfica II.1. La línea recta medio paralela a la línea de equilibrio es la constante de Henry. Para sistemas de concentraciones bajas, la diferencia entre estas líneas será despreciable. Las ecuaciones II.31, II.32, II.44, II.45 se pueden reescribir como:

$$N_A = \frac{(p_G - p_L^*)}{\frac{1}{K_G}} = \frac{(x_G^* - x_L)}{\frac{1}{K_x}} = \frac{(p_G - p_i)}{\frac{1}{k_G}} = \frac{(x_i - x_L)}{\frac{1}{k_x}} \qquad \text{(II.51)}$$

El flux, que expresa la cantidad de masa transferida por unidad de tiempo y por unidad de área, tiene como fuerza motriz el gradiente de concentraciones y como impedimento, la resistencia de la capa a la difusión. Entonces, los inversos de los coeficientes de transferencia de masa son las diferentes resistencias existentes. En algunas ocasiones, a la teoría de la doble película se le ha llamado teoría de las dos resistencias. La resistencia de la capa gaseosa y la resistencia de la capa líquida.

Existen entonces, según la Figura II.9, seis potenciales y solo cuatro coeficientes de transferencia de masa. La tabla II.1 presenta estos casos.

| | | POTENCIAL | COEFICIENTE UTILIZADO |
|---|---|---|---|
| EN FUNCIÓN DE LAS UNIDADES DE LA FASE GASEOSA | Potencial desde el seno de la fase gaseosa a la interfase | $p_G - p_i$ | $k_G$, ec. (II.31) |
| | Potencial desde la interfase al seno de la fase líquida | $p_i - p_L^*$ | Ninguno |
| | Potencial Total desde el seno de la fase gaseosa a la líquida | $p_G - p_L^*$ | $K_G$, ec. (II.44) |
| EN FUNCIÓN DE LAS UNIDADES DE LA FASE LÍQUIDA | Potencial desde el seno de la fase gaseosa a la interfase | $x_G^* - x_i$ | Ninguno |
| | Potencial desde la interfase al seno de la fase líquida | $x_i - x_L$ | $k_x$, ec. (II.32) |
| | Potencial Total desde el seno de la fase gaseosa a la líquida | $x_G^* - x_L$ | $K_x$, ec. (II.45) |

Tabla II.1. Resumen de los seis potenciales en la teoría de la doble película y los cuatro coeficientes de transferencia utilizados.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Para la fase gaseosa, se pueden tener los coeficientes referidos a unidades de concentración diferentes, algunos autores utilizan fracciones molares como concentración de la fase gaseosa los coeficientes de transferencia los registran con la letra "y". En la tabla II.2 se presentan estos coeficientes con sus respectivos potenciales.

Para el caso de la fase líquida se pueden utilizar las moles por unidad de volumen como unidades de concentración. Las unidades de concentración serían A° (A* para el equilibrio) y los coeficientes de transferencias se registran con la letra L, tabla II.2.

| | | POTENCIAL | COEFICIENTE UTILIZADO |
|---|---|---|---|
| EN FUNCIÓN DE LAS UNIDADES DE LA FASE GASEOSA | Potencial desde el seno de la fase gaseosa a la interfase | $y_G - y_i$ | $k_y$ |
| | Potencial desde la interfase al seno de la fase líquida | $y_i - y_L^*$ | Ninguno |
| | Potencial Total desde el seno de la fase gaseosa a la líquida | $y_G - y_L^*$ | $K_y$ |
| EN FUNCIÓN DE LAS UNIDADES DE LA FASE LÍQUIDA | Potencial desde el seno de la fase gaseosa a la interfase | $A_G^* - A^\circ_i$ | Ninguno |
| | Potencial desde la interfase al seno de la fase líquida | $A^\circ_i - A^\circ_L$ | $k_L$ |
| | Potencial Total desde el seno de la fase gaseosa a la líquida | $A_G^* - A^\circ_L$ | $K_L$ |

Figura II.2. Coeficientes de transferencia de masa, para la fase gaseosa con unidades de fracción molar y para la fase líquida con unidades de moles por unidad de volumen.



TESIS CON
FA. LA DE ORIGEN

### II.3.4. FASE CONTROLANTE

No siempre las resistencias $1/k_x$ y $1/k_G$ son iguales. Si el soluto contenido en la fase gaseosa es muy soluble en la fase líquida, una vez que la molécula de soluto haya recorrido la capa gaseosa y esté justo en la interfase se disolverá rápidamente y se moverá con mayor velocidad en esta capa. Se dice que la resistencia ofrecida por la capa gaseosa es mucho mayor a la ofrecida por la capa líquida. En este caso, la curva de equilibrio estará muy desplazada hacia el eje de las abscisas pues con un cambio muy pequeño en la presión parcial, el cambio en la concentración en la fase líquida será grande. Resulta entonces:

$$p_G - p_i \cong p_G - p_L^*$$

De la ecuación II.51 se concluye:

$$\frac{1}{K_G} \cong \frac{1}{K_g}$$

y de la ecuación II.46:

$\frac{He}{k_x} \cong 0$, entonces:

1) $He \cong 0$, lo cual indica que la solubilidad es alta o

2) $k_x$ es grande, lo cual indica que la resistencia de la capa líquida es mínima; es decir, un gradiente mínimo ocasionará un gran movimiento de masa en la capa del líquido.

De cualquier manera, se concluye que la fase gaseosa rige el fenómeno.

De la otra manera, cuando se tiene un soluto poco soluble en la fase líquida, la línea de equilibrio estará cerca del eje de las ordenadas, Gráfica II.2. Se observa en ésta que los potenciales de la fase líquida son prácticamente iguales.

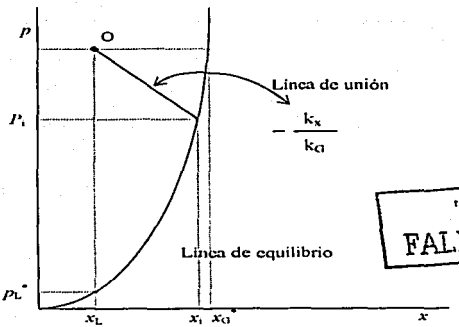
$$x_i - x_L \cong x_g^* - x_L$$

De la ecuación II.51 se concluye:

$$\frac{1}{K_x} \cong \frac{1}{k_x}$$

Y de la ecuación II.47:

$\frac{1}{He k_G} \cong 0$, entonces:




TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Gráfica II.2. Caso donde el componente de interés es muy soluble en la fase gaseosa o es el mismo componente. El potencial total de la fase líquida es similar al potencial parcial. El potencial total de la fase gaseosa es mucho mayor que su potencial parcial.

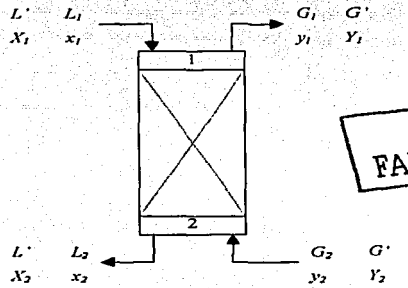
1) He es grande, lo cual indica que la solubilidad es muy baja o

2) $k_G$ es grande, lo cual indica que la resistencia de la fase gaseosa es mínima; es decir, es necesario un gran gradiente en la capa gaseosa $p_G - p_i$ para tener un poco de transferencia de masa; esto es, un ligero gradiente en la capa líquida $x_i - x_G^*$.

Hasta aquí se han revisado dos conceptos fundamentales que son de vital importancia para el trabajo que se presenta: el transporte de masa y la transferencia de masa. En las siguientes dos secciones se presentan procedimientos y conceptos de diseño para torres de absorción que son importantes para el tema.

## II.4. BALANCE DE MATERIA EN UNA TORRE DE ABSORCIÓN PARA UN SISTEMA BINARIO

Una vez establecido el equilibrio del sistema, se elabora la línea de operación haciendo un balance de materia sobre una torre de absorción, figura II.10; esta línea representa los pares de composiciones del




TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Figura II.10. Torre de absorción empacada. Para realizar un balance se pueden utilizar los flujos y fracciones mol o los flujos de inerte y las relaciones mol.

sistema gas-líquido existentes a lo largo de la columna. En la gráfica II.1 se había localizado un punto O que representaba las concentraciones de las fases en la torre, el conjunto de todos los puntos O en la torre es la línea de operación. Sin embargo es conveniente concluir con una ecuación que la represente y para esto se realiza el siguiente balance:

$$[\text{Entradas}] = [\text{Salidas}]$$

$$L_1 + G_2 = L_2 + G_1 \qquad \text{(II.52)}$$

Para el componente que se absorbe, el balance será:

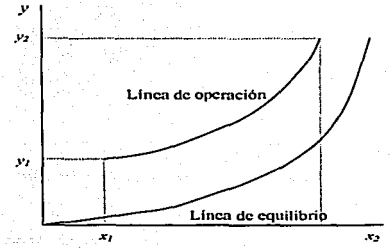
$$L_1 x_1 + G_2 y_2 = L_2 x_2 + G_1 y_1 \qquad \text{(II.53)}$$

Despejando la variable $y_2$:

$$y_2 = \frac{L_2}{G_2} x_2 + \frac{G_1 y_1 - L_1 x_1}{G_2} \qquad \text{(II.54)}$$

Las ecuaciones II.54 y II.55 representan la línea de operación. En la Gráfica II.3 se representa la línea de equilibrio y la línea de operación.

La pendiente de la línea de operación es el cociente $L_2/G_2$, debido a que tanto $L_2$ como $G_2$ están variando constantemente, el cociente tendrá un valor diferente para cada altura de la torre. Sin embargo, se puede simplificar el problema utilizando como base del balance el flujo de inertes $L'$ y $G'$, Figura II.10, que son constantes en toda la columna porque no se absorben, entonces, se tendrá una línea de operación recta. Esta simplificación es de gran importancia porque se podrán conocer todos los pares de concentraciones de las fases para cualquier altura de la torre si se conocen tan solo las concentraciones de entrada y salida o el




Gráfica II.3. La línea de equilibrio tiene siempre una forma caprichosa. A una presión y temperatura fija, la línea de equilibrio será inamovible.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

flujo de inertes y sólo un par de concentraciones: entrada o salida. Para realizar el balance, será necesario utilizar, como medida de concentración, las relaciones mol, definidas como:

$$\frac{y}{(1-y)} = Y \qquad \text{y} \qquad y = \frac{Y}{1+Y} \tag{II.55}$$

$$\frac{x}{(1-x)} = X \qquad \text{y} \qquad x = \frac{X}{(1+X)} \tag{II.56}$$

Las relaciones molares son concentraciones expresadas en relación a las moles de inertes de la corriente: moles de componente que se absorbe entre moles de componente inerte. El balance general, en base a la Figura II.10, será:

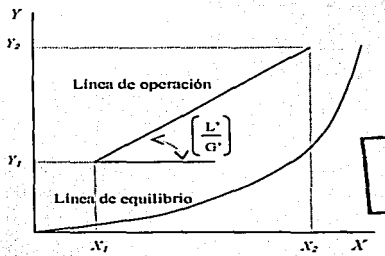
$$L'X_1 + G'Y_2 = L'X_2 + G'Y_1 \tag{II.57}$$

Despejando $Y_2$:

$$Y_2 = \frac{L'}{G'}X_2 + \left(Y_1 - \frac{L'}{G'}X_1\right) \tag{II.58}$$

La pendiente de la línea de operación es ahora $\frac{L'}{G'}$ y es constante para toda la torre. Para obtener la línea de equilibrio en relaciones mol son indispensables las ecuaciones II.55 y II.56.

Para una X cualquiera, Gráfica II.4, habrá una Y de operación y una Y de equilibrio. Es claro que la Y de operación es mayor, por lo tanto lo transferencia de masa será de la fase gaseosa a la fase líquida como se esperaba. La línea de operación siempre estará arriba de la línea de equilibrio para absorción, lo contrario




TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

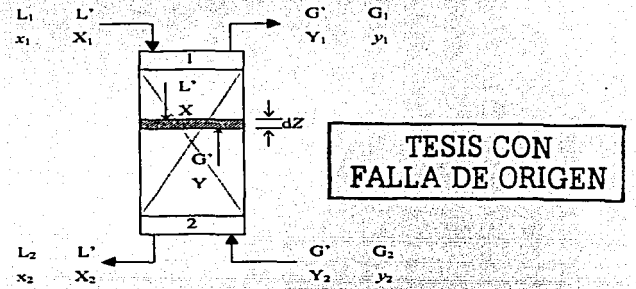
**Gráfica II.4.** La línea de equilibrio tiene siempre una forma caprichosa. A una presión y temperatura fija, la línea de equilibrio será inamovible.

sería un desorción. Las líneas de equilibrio y operación jamás pueden cruzarse, pues implica que el movimiento de masa puede ser de menor a mayor concentración.

Es conveniente aclarar que existen dos casos límite. El primer caso es cuando la parte inferior de la columna esta en equilibrio; el límite es el propio equilibrio. La pendiente de la línea de operación tendrá un valor mínimo. La línea de operación y la línea de equilibrio tendrán un punto en común: $(Y_2, X_2)$. El segundo caso es cuando la parte superior de la columna se encuentra en equilibrio. La pendiente de la línea de operación tendrá un valor máximo. El punto en común será en este caso: $(Y_1, X_1)$.

## II.5. NÚMERO DE UNIDADES DE TRANSFERENCIA Y LA ALTURA DE LA UNIDAD DE TRANSFERENCIA

En una torre de absorción de altura Z, los potenciales y coeficientes de transferencia de masa tienen un valor diferente para cada altura, esto hace que los cálculos para diseño y operación sean muy complicados. Existe un procedimiento que lo simplifica, se describe la transferencia de masa para un elemento diferencial y luego se integra para toda la columna. Las moles del componente de interés transferido por unidad de




TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Figura II.11. Torre de absorción con elementos diferenciales.

tiempo y por sección transversal de área se definieron utilizando dos conceptos distintos: balance de masa, sección II.4 y transferencia de masa, sección II.3. En este procedimiento se integran los dos conceptos. Realmente se está separando a la torre en varias "capas" llamadas unidades de transferencia. Cada una de éstas tendrá una altura llamada altura individual de la unidad de transferencia, de manera que:

$$Z = H_G N_G \qquad \text{(II.59)}$$

$H_G$ es la altura individual de la unidad de transferencia y $N_G$ es el número de unidades de transferencia.

El subíndice $G$ indica que $N$ y $H$ están referidos a la fase gaseosa, se verá más adelante que hay cuatro maneras de referirlos y cada una corresponde a un coeficiente de transferencia de masa.

El primer paso es hacer un balance diferencial sobre un elemento de control de una torre de absorción, figura II.11.

La diferencia entre el flujo del líquido debe de ser la misma que la diferencia del flujo de la fase gaseosa ya que no hay reacción ni acumulación:

$$dL = dG \qquad \text{(II.60)}$$

Haciendo un balance por unidad de sección normal al flujo para el soluto que se difunde:

$$d\left(\frac{W_A}{S}\right) = dN_A = d(G'Y) = G'dY \qquad \text{(II.61)}$$

Para la fase líquida:

$$d\left(\frac{W_A}{S}\right) = dN_A = d(L'X) = L'dX \qquad \text{(II.62)}$$

Derivando la ecuación II.56 se obtiene:

$$Y = \frac{y}{(1-y)} \quad \Rightarrow \quad dY = \frac{dy}{(1-y)^2} \qquad \text{(II.63)}$$

Además tomando el significado de los flujos de inertes:

$$G' = G(1-y) \qquad \text{(II.64)}$$

Sustituyendo la ecuación II.63 y II.64 en la ecuación II.61:

$$d\left(\frac{W_A}{S}\right) = dN_A = G'dY = G(1-y)\frac{dy}{(1-y)^2} = \frac{G}{1-y}dy \qquad \text{(II.65)}$$

Esta ecuación es el flux diferencial proveniente del balance de masa y es la diferencia entre la cantidad de soluto en la fase gaseosa que entra al elemento diferencia y la cantidad de soluto en la fase gaseosa que sale del elemento diferencial, no puede ser cero porque no habría absorción. Como no hay acumulación ni reacción química, la única explicación es que esta diferencia corresponde a lo absorbido por la fase líquida. Este flux diferencial tiene que ser igual al de la ecuación II.31: $N_A = k_G(p_G - p_i)$ porque es el modelo que se utilizó para la transferencia de masa.

El volumen de la torre esta dado por la expresión:

$V = SZ$ , y su diferencial será: $dV = Sdz$ (II.66)

Si se define la variable $a$, llamada fracción de área para la transferencia de masa por unidad de volumen y representa la superficie total del empaque por unidad de volumen empacado. La fracción de área es dependiente del tipo de empaque y de su densidad o arreglo, se encuentra reportada por los fabricantes de empaques para absorción. Al multiplicar el volumen por ésta se obtiene el área total para la transferencia de masa:

$A = Va = SaZ$ , y su diferencial será: $dA = Sadz$ (II.67)

Multiplicando la ecuación II.31, para tener un flujo y no un flux, por la ecuación II.67:

$$N_A dA = (Sadz)k_G(p_G - p_i) = (dAN_A) = dW_A \qquad \text{(II.68)}$$

Despejando $\frac{dW_A}{S}$ e incluyendo S dentro del término diferencial y cambiando las unidades de concentración de la fase gaseosa por fracciones mol:

$$d\left(\frac{W_A}{S}\right) = a(dz)k_G(p_G - p_i) = a(dz)k_y(y_G - y_i) \qquad \text{(II.69)}$$

Ahora ya se puede, igualar la ecuación proveniente del balance de masa y la ecuación proveniente del modelo de transferencia de masa, ecuación II.65 y II.69, respectivamente:

$$\frac{G}{1-y}\,dy = adzk_y(y - y_i) \qquad \text{(II.70)}$$

Despejando dz e integrando entre los límites de la torre $(z = 0 \quad y = y_2)$ y $(z = Z \quad y = y_1)$:

$$\int_0^Z dz = Z = \int_{y_2}^{y_1} \frac{G}{k_y a}\frac{dy}{(1-y)(y-y_i)} \qquad \text{(II.71)}$$

Si se quiere sacar el primer término fuera de la integral [13,9] se debe de dividir entre $(1-y)_{log}$. Si la concentración varía mucho de un extremo al otro de la torre, el valor de $\frac{G}{k_y a(1-y)_{log}}$ no varía tanto como el valor de $\frac{G}{k_y a}$, entonces conviene multiplicar la ecuación II.65 por el término $(1-y)_{log}$:

$$Z = \left(\frac{G}{k_y a(1-y)_{log}}\right)\left(\int_{y_2}^{y_1} \frac{(1-y)_{log}}{(1-y)(y-y_i)}dy\right) \qquad \text{(II.72)}$$

donde:

$$(1-y)_{log} = \frac{(1-y_i)-(1-y)}{\ln\frac{(1-y_i)}{(1-y)}} \qquad \text{(II.73)}$$

La ecuación II.72 tiene la forma de la ecuación II.59, entonces:

$$H_G = \frac{G}{k_y a(1-y)_{log}} \qquad \text{(II.74)}$$

y

$$N_G = \int_{y_2}^{y_1} \frac{(1-y)_{log}}{(1-y)(y-y_i)}dy \qquad \text{(II.75)}$$

Si en lugar de utilizar las ecuaciones II.61 y II.31 se utilizan las ecuaciones II.62 y II.32, se obtienen los mismos resultados pero referidos a la fase líquida. El procedimiento es el mismo. También se podría utilizar, la ecuación II.44 en lugar de la II.31 y se obtendría el número y altura globales (porque utiliza el coeficiente global y su respectivo potencial) referidos a la fase gaseosa. Con la ecuación II.45, lo mismo para la fase líquida. Tabla II.3.

| Unidad de transferencia | Altura de la Unidad | Media logarítmica | Potencial |
|---|---|---|---|
| $N_G = \int_{y_2}^{y_1} \frac{(1-y)_{log}}{(1-y)(y-y_i)} dy$ | $H_G = \frac{G}{k_y a (1-y)_{log}}$ | $(1-y)_{log} = \frac{(1-y_i)-(1-y)}{\ln \frac{(1-y_i)}{(1-y)}}$ | $(y-y_i)$ |
| $N_L = \int_{x_2}^{x_1} \frac{(1-x)_{log}}{(1-x)(x_i-x)} dx$ | $H_L = \frac{L}{k_x a (1-x)_{log}}$ | $(1-x)_{log} = \frac{(1-x_i)-(1-x)}{\ln \frac{(1-x_i)}{(1-x)}}$ | $(x_i-x)$ |
| $N_{OG} = \int_{y_2}^{y_1} \frac{(1-y)_{log}}{(1-y)(y-y_L^*)} dy$ | $H_{OG} = \frac{G}{K_y a (1-y)_{log}}$ | $(1-y)_{log} = \frac{(1-y_L^*)-(1-y)}{\ln \frac{(1-y_L^*)}{(1-y)}}$ | $(y-y_L^*)$ |
| $N_{OL} = \int_{x_2}^{x_1} \frac{(1-x)_{log}}{(1-x)(x_G^*-x)} dx$ | $H_{OL} = \frac{L}{K_x a (1-x)_{log}}$ | $(1-x)_{log} = \frac{(1-x)-(1-x_G^*)}{\ln \frac{(1-x)}{(1-x_G^*)}}$ | $(x_G^*-x)$ |

Tabla II.3. Las cuatro unidades de transferencia, correspondientes a los cuatro coeficientes de transferencia de energía, con sus respectivas alturas, medias logarítmicas y potenciales.

$N_G$ = Unidad individual de transferencia referida a la fase gaseosa
$N_L$ = Unidad individual de transferencia referida a la fase líquida
$N_{OG}$ = Unidad global de transferencia referida a la fase gaseosa
$N_{OL}$ = Unidad global de transferencia referida a la fase líquida

$H_G$ = Altura de la unidad individual de transferencia referida a la fase gaseosa
$H_L$ = Altura de la unidad individual de transferencia referida a la fase líquida
$H_{OG}$ = Altura de la unidad global de transferencia referida a la fase gaseosa
$H_{OL}$ = Altura de la unidad global de transferencia referida a la fase líquida

Existen entonces cuatro maneras de calcular la altura $Z$, en la ecuación II.59 se mostró una de ellas, aquí, las cuatro:

$$Z = H_G N_G \qquad \text{(II.76)}$$

$$Z = H_L N_L \qquad \text{(II.77)}$$

$$Z = H_{OG} N_{OG} \qquad \text{(II.78)}$$



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$Z = H_{OL} N_{OL} \tag{II.79}$$

Finalmente, existe relación entre las alturas de las unidades individuales y de las unidades globales [3,9]:

$$H_{OG} = H_G + \frac{H_L}{A} \tag{II.80}$$

$$H_{OL} = H_L + A H_G \tag{II.81}$$

La variable A en las ecuaciones II.80 y II.81 es el coeficiente de absorción y se expresión es:

$$A = \left( \frac{L}{HeG} \right) \tag{II.82}$$

Si el valor del coeficiente de absorción es muy grande significa que la constante de Henry es despreciable y por tanto la fase que rige el fenómeno es la gaseosa. Si el coeficiente de absorción es de valores pequeños la fase líquida rige el fenómeno.

## II.6. CORRELACIONES PARA EL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA

Algunos autores han realizado estudios experimentales y han desarrollado correlaciones para calcular coeficientes de transferencia de masa para las dos fases, así como para calcular las diferentes alturas de la unidad de transferencia. En esta sección se presentan dos correlaciones que se utilizarán más adelante para comparar el coeficiente de transferencia obtenido.

Para el uso de estas correlaciones será necesario el coeficiente de difusividad. Existen en la literatura datos reportados, pero para tener mayor precisión es conveniente usar el método propuesto por el Dr. Antonio Valiente Barderas en su libro "Introducción a la transferencia de masa".

### II.6.1. MÉTODO PARA CALCULAR EL COEFICIENTE DE DIFUSIVIDAD

Este método sirve para calcular el coeficiente de difusividad $D_{AB}$ para sistemas de dos fases: líquida y gaseosa a 20° C. La ecuación es:

$$D_{AB} = \frac{0.000001}{A + B\sqrt{\mu}} \times \frac{\left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{0.5}}{\left( (\Sigma v_i)_A^{1/3} + (\Sigma v_i)_B^{1/3} \right)^2} \tag{II.83}$$

donde $(\Sigma v_i)_A$ y $(\Sigma v_i)_B$ son la suma de los volúmenes de difusión de los átomos i que componen las moléculas A y B, estos valores están reportados en la literatura. $M_A$ y $M_B$ son los pesos moleculares de las

moléculas A y B respectivamente. A = 1 para gases y B = 4.7 para agua. El coeficiente $D_{AB}$ tiene unidades de $m^2/s$.

### II.6.2. CORRELACIÓN DE SHERWOOD Y HOLLOWAY

La correlación está expresada por la siguiente ecuación [1]:

$$k_L a = D_{AB}\alpha\left(\frac{L}{\mu_L}\right)^{1-n}\left(\frac{\mu_L}{\rho_L D_{AB}}\right)^{0.5} \qquad \text{(II.84)}$$

donde $\alpha$ y n son constantes dependiente del tipo de empaque y están reportadas en la literatura. Las variables deben estar en unidades de libra, pie y segundo. El coeficiente $k_L a$ tiene unidades de $h^{-1}$.

### II.6.3. CORRELACIÓN DE ONDA

Esta correlación es utilizada para cualquier absorción a contracorriente. Las ecuaciones [10] son:

$$k_L a = (k_L)(a_w) \qquad \text{(II.85)}$$

$$k_L = 0.005\left(\frac{\rho_L}{\mu_L g}\right)^{-1/3}\left(\frac{L}{\mu_L a_w}\right)^{2/3}\left(\frac{\mu_L}{\rho_L D_{AB}}\right)^{-1/2}(a_p d_p)^{0.4} \qquad \text{(II.86)}$$

$$a_w = a_p\left[1 - e^{-1.45\left(\frac{\sigma_c}{\sigma}\right)^{0.75}\left(\frac{L}{a_p\mu_L}\right)^{0.1}\left(\frac{L^2 a_p}{\rho_L^2 g}\right)^{-0.05}\left(\frac{L}{\rho_L \sigma a_p}\right)^{0.2}}\right] \qquad \text{(II.87)}$$

donde $\sigma_c$ es la tensión superficial crítica del empaque. 61 para cerámica, 75 para metal y vidrio, 33 para polietileno y 40 para PVC. Las tres ecuaciones son dimensionalmente consistentes.

# CAPÍTULO III

# MODELO PROPUESTO

En este capítulo se presenta y describe el sistema que se pretende estudiar para poder determinar los coeficientes de transferencia de masa para la absorción de dióxido de carbono en agua. Se plantearán supuestos que servirán para acotar el problema y así poder hacer un modelo matemático que describa al sistema. La Figura III.1 representa el sistema, consiste en una torre de absorción empacada que opera isotérmicamente en la que circulan a contracorriente las cuatro corrientes que se esperan: las dos corrientes

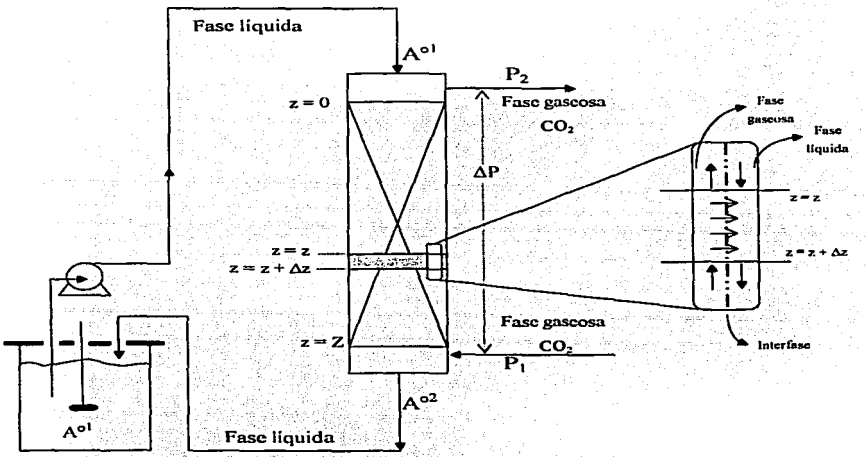



**Figura III.1. Sistema de absorción con recirculación de la fase líquida. En el aumento se ve la transferencia y el transporte de masa**

gaseosas y las dos corrientes líquidas. La corriente gaseosa es dióxido de carbono puro. La corriente líquida que entra es agua con dióxido de carbono disuelto, escurre por el empaque formando una gran interfase para la transferencia de masa y enriqueciéndose de dióxido de carbono, cuando sale de la torre se dirige a un recipiente perfectamente agitado donde no hay desorción y sale de éste para entrar una vez más a la



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

columna. La solubilidad del dióxido de carbono en el agua a presión y temperatura ambientales es muy baja, por esta razón, se debe de recircular el agua para que se enriquezca gradualmente y absorba una cantidad considerable de $CO_2$.

## III.1. SUPUESTOS

Al igual que todos los modelos matemáticos, se deben de plantear supuestos que acoten el sistema y hagan más sencilla la solución, para el sistema presentado, se establecen 7 supuestos.

a. La concentración del líquido $A°$ en la columna es constante para una distancia x y tiempo $t$; es decir, no hay gradientes en la dirección $r$ o $\theta$. Por lo tanto, sólo se estudia el transporte de masa en la dirección $z$.
b. En el recipiente hay agitación perfecta; es decir, no hay ningún gradiente de concentración, por lo tanto no hay transporte de masa en el recipiente y la concentración es siempre $A°^1$.
c. No hay desorción en el recipiente. El $CO_2$ que se transfiere a la fase líquida permanecerá en ésta.
d. El soluto es poco soluble en la fase líquida; es decir, la resistencia de la capa líquida es grande. Por lo tanto, la fase controlante es la fase líquida (sección II.3.4: FASE CONTROLANTE).
e. En el seno de las fases, el mecanismo de transporte de masa que predomina es la convección. Es lógico este planteamiento pues las fases están en constante movimiento.
f. La presión en la columna depende linealmente de la posición $z$.
g. La columna opera isotérmicamente.

## III.2. PLANTEAMIENTO DEL MODELO MATEMÁTICO

El modelo que se obtiene en esta sección será sólo para la columna de absorción, en la sección III.3, después de la solución matemática se introduce la condición de recirculación para tener el modelo final de todo el sistema

En base al supuesto g, operación isotérmica, no habrá balance de energía para el sistema. El único balance que se realiza es el balance másico. Este balance se realizará en un elemento diferencial de la columna y después se aplicará la definición de derivada en la ecuación que rige el comportamiento del volumen de control para obtener el comportamiento de la columna. Para realizar el balance, primero se debe entender que sucede dentro del elemento diferencial desde el punto de vista de la fase líquida, la fase gaseosa será siempre $CO_2$ puro y no tiene sentido estudiarla, además, la fase líquida es la fase controlante. En base al aumento de la Figura III.1, las entradas son: la fase líquida que entra al volumen diferencial y el $CO_2$ que se transfiere por la interfase; la salida es la fase líquida que sale del volumen de control; además se debe de

considerar la acumulación en el volumen diferencial. No hay reacción. Si se hace un balance de materia en el volumen de control se tiene:

$$\begin{pmatrix}\text{Flujo de } CO_2 \text{ que entra}\\ \text{en el volumen diferencial}\\ \text{en la fase líquida}\\ 1\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Flujo de } CO_2 \text{ que}\\ \text{entra a la fase líquida a}\\ \text{través de la interase}\\ 2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\text{Flujo de } CO_2 \text{ que sale}\\ \text{del volumen diferencial}\\ \text{en la fase líquida}\\ 3\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}\text{Flujo de } CO_2\\ \text{que se acumula en}\\ \text{el volumen de control}\\ 4\end{pmatrix} \qquad \text{(III.1)}$$

El término 1 y 3 representan el transporte de masa en la entrada y salida respectivamente, hay dos mecanismos que explican el transporte de masa: difusión y convección (sección II.2.1. LEY DE FICK y sección II.2.2. CONVECCIÓN, respectivamente). El término 2 es la transferencia de masa a través de la interfase explicada por la teoría de la doble película (sección II.3.3. TEORÍA DE.....). El cuarto término está siempre presente cuando no existe régimen permanente, es el término para la acumulación.

## III.2.1. TRANSPORTE DE MASA EN EL VOLUMEN DE CONTROL

En esta sección se tratarán los términos 1 y 3 de la ecuación III.1. Cada término estará formado por dos ecuaciones: la ecuación para la difusión y la ecuación para la convección, de manera general:

$$W_A = W_A^D + W_A^C \qquad \text{(III.2)}$$

Para la difusión se tiene la ley de Fick, ecuación II.18, aplicada al volumen diferencial:

$$J_{Az} = -D_{AL}\frac{\partial A^\circ}{\partial z} \qquad \text{(III.3)}$$

Como el balance se hará en unidades de flujo (moles/tiempo), es necesario multiplicar el flux por el área de flujo de la torre $\varepsilon S$ , donde S corresponde al área transversal de la columna. Debido a que la columna está empacada y el empaque ocupa cierto espacio, es necesario multiplicar el área $S$ por un número, menor de uno, que involucre la fracción del área transversal de la columna que está libre para el flujo. Este número es $\varepsilon$ , fracción de huecos, y es dependiente del tipo de empaque y arreglo.

$$W_A^D = J_{Az}(\varepsilon\, S) = -D_{AL}(\varepsilon\, S)\frac{\partial A^\circ}{\partial z} \qquad \text{(III.4)}$$

La ecuación III.4 representa el flujo difusivo de masa en la fase líquida.

Para la convección se tiene la ecuación II.20:

$$[\text{Flux convectivo}] = A^\circ v \qquad \text{(III.5)}$$

Es necesario, como se hizo para la ecuación III.3, convertir el flux en flujo:

$$W_A^C = [\text{Flux convectivo}](\varepsilon\, S) = vA^\circ(\varepsilon\, S) \qquad \text{(III.6)}$$

La ecuación III.6 representa el flujo convectivo de masa en la fase líquida.

Sumando las ecuaciones III.4 y III.6 y evaluándolas cuando $z = z$ para tener el flujo de masa que entra en el volumen diferencial en la fase líquida:

$$W_A|_z = W_A^D|_z + W_A^C|_z = -D_{AL}(\varepsilon S)\frac{\partial A^\circ}{\partial z}\Big|_z + vA^\circ(\varepsilon S)_z \qquad \text{(III.7)}$$

Sumando las ecuaciones III.4 y III.6 y evaluándolas cuando $z = z + \Delta z$ para tener el flujo de masa que sale del volumen diferencial en la fase líquida:

$$W_A|_{z+\Delta z} = W_A^D|_{z+\Delta z} + W_A^C|_{z+\Delta z} = -D_{AL}(\varepsilon S)\frac{\partial A^\circ}{\partial z}\Big|_{z+\Delta z} + vA^\circ(\varepsilon S)_{z+\Delta z} \qquad \text{(III.8)}$$

La ecuación III.7 y III.8 es el primer y el tercero término, respectivamente, de la ecuación III.1. Ahora se necesitan el término 2 y el 4.

## III.2.2. TRANSFERENCIA DE MASA INTERFASIAL EN EL VOLUMEN DE CONTROL

Para la transferencia de masa se obtuvieron cuatro ecuaciones en la sección II.3.3, ecuación II.31, II.32, II.44 y II.45. La primera y la tercera no son de interés porque están en función de unidades de la fase gaseosa, la ecuación II.32 está en función de una concentración de interfase y no tiene sentido trabajar con esta porque no se pueden medir las concentraciones de interfase. La ecuación II.45 es la que se utilizará pero con unidades de mol por volumen, Tabla II.2:

$$N_A = K_L\left(A_G^* - A^\circ{}_L\right) \qquad \text{(III.9)}$$

Para hacer los cálculos menos tediosos con la nomenclatura, se eliminarán los subíndices de las concentraciones: $A_G^* = A^*$ y $A^\circ{}_L = A^\circ$ entonces:

$$N_A = K_L\left(A^* - A^\circ\right) \qquad \text{(III.10)}$$

Es necesario convertir el flux en flujo para poder integrar el término a la ecuación III.1. Para esto, se debe multiplicar el flux por el área de transferencia de masa del volumen de control. El volumen es:

$$\Delta V = S\Delta z \qquad \text{(III.11)}$$

Se multiplica el volumen diferencial por la fracción de área para la transferencia de masa por unidad de volumen empacado para tener el área de transferencia de masa:

$$A = \Delta V a = aS\Delta z \qquad \text{(III.12)}$$

La ecuación II.12 es el área de transferencia de masa. Multiplicando la ecuación III.10 por la III.12:

$$\mathrm{N_A A} = \mathrm{W_A} = K_L\left(aS\Delta z\right)\left(A^* - A^\circ\right) \qquad \text{(III.13)}$$

Bajo el supuesto d, la fase líquida es la controlante y por lo tanto $K_L \cong k_L$, entonces la ecuación III.13 se convierte en:

$$W_A = k_L a (\Delta z S)(A^* - A^\circ) \qquad \text{(III.14)}$$

La ecuación III.14 es el flujo de masa que entra a la fase líquida a través de la interfase y corresponde al segundo término de la ecuación III.1.

### III.2.3. ACUMULACIÓN EN EL VOLUMEN DE CONTROL

Si la columna estuviera en régimen permanente no habría cambios de concentración con el tiempo, sólo con la posición. El sistema que se plantea trabaja a régimen dinámico y se necesita un término que justifique el cambio de concentración de $CO_2$ en la fase líquida en el tiempo, el $CO_2$ se está acumulando. El término es:

$$\text{Acumulación} = \frac{\partial A^\circ}{\partial t} \qquad \text{(III.15)}$$

Como el fenómeno de acumulación se da en el volumen de control $\Delta V = S\Delta z$, pero sólo en el volumen que no ocupa el empaque $\varepsilon$ ; se multiplica la ecuación III.15 por el volumen:

$$W_A = \varepsilon (\Delta z S) \frac{\partial A^\circ}{\partial t} \qquad \text{(III.16)}$$

La ecuación III.16 es el flujo de masa que se acumula en el volumen de control y corresponde al término 4 de la ecuación III.1.

### III.2.4. BALANCE DE MASA EN EL VOLUMEN DE CONTROL, MODELO PARA LA COLUMNA

Ahora que ya se tienen todos los términos necesarios para realizar el balance en el volumen de control de la torre, Figura III.1, se sustituyen las ecuaciones III.7, III.8, III.14 y III.16 en la ecuación III.1.

$$(\varepsilon S) v A^\circ\Big|_z - D_{AL}(\varepsilon S)\frac{\partial A^\circ}{\partial z}\Big|_z + k_L a(\Delta z S)(A^* - A^\circ) =$$

$$(\varepsilon S) v A^\circ\Big|_{z+\Delta z} - D_{AL}(\varepsilon S)\frac{\partial A^\circ}{\partial z}\Big|_{z+\Delta z} + \varepsilon(\Delta z S)\frac{\partial A^\circ}{\partial t} \qquad \text{(III.17)}$$

Se divide la ecuación entre $\varepsilon \Delta z S$ y se agrupan términos:

$$\left(-\frac{D_{AL}}{\Delta z}\frac{\partial A^\circ}{\partial z}\Big|_z + \frac{D_{AL}}{\Delta z}\frac{\partial A^\circ}{\partial z}\Big|_{z+\Delta z}\right) =$$

$$\left(\frac{v A^\circ}{\Delta z}\Big|_{z+\Delta z} - \frac{v A^\circ}{\Delta z}\Big|_z\right) + \frac{\partial A^\circ}{\partial t} - \frac{k_L a}{\varepsilon}(A^* - A^\circ) \qquad \text{(III.18)}$$

Tomando el límite cuando $\Delta z \rightarrow 0$ en la ecuación III.18 para que el modelo prediga el movimiento de masa en toda la columna:

$$D_{AL}\frac{\partial^2 A^\circ}{\partial z^2} = v\frac{\partial A^\circ}{\partial z} + \frac{\partial A^\circ}{\partial t} - \frac{k_L a}{\varepsilon}\left(A^* - A^\circ\right) \qquad \text{(III.19)}$$

Por la consideración e, se pude despreciar el mecanismo de difusión en relación al de convección:

$$v\frac{\partial A^\circ}{\partial z} + \frac{\partial A^\circ}{\partial t} - \frac{k_L a}{\varepsilon}\left(A^* - A^\circ\right) = 0 \qquad \text{(III.20)}$$

La ecuación III.20 es el modelo matemático que explica el comportamiento de la columna. Es una ecuación parcial lineal no homogénea. El primer término explica el transporte convectivo de masa en la fase líquida, el segundo representa a la acumulación en la columna y el tercero modela la transferencia de masa a través de la interfase formada por el agua y el dióxido de carbono.

## III.3. SOLUCIÓN DE LA ECUACIÓN QUE DESCRIBE EL MODELO

Si se resuelve la ecuación III.20, la solución estará en función de la concentración de equilibrio $A^*$, esta variable no es deseable porque no se puede calcular o estimar fácilmente, se tiene que encontrar una relación que la sustituya. Como se revisó en la sección II.3.3, la fuerza motriz, expresada en unidades de concentración de la fase líquida, para la transferencia de masa a través de la interfase es $\left(A^* - A^\circ\right)$. Es necesario expresar la concentración de equilibrio del gradiente de otra manera.

Si se utiliza la ley de Henry para relacionar la concentración de equilibrio de la fase líquida con la concentración de la fase gaseosa:

$$p_i = \mathrm{He}\, A^* \qquad \text{(III.21)}$$

Como la fase gaseosa es $CO_2$ puro, $y = 1$ se puede sustituir en la ley de Dalton, ecuación II.4:

$$P = p_i \qquad \text{(III.22)}$$

Se sustituye esta condición en la ley de Henry, ecuación III.21:

$$P = \mathrm{He}\, A^* \qquad \text{(III.23)}$$

La ecuación III.23 es la concentración de equilibrio para la fase líquida y está en función de la concentración de la fase gaseosa.

Bajo el supuesto f, se puede plantear la siguiente forma para estimar la presión total P a lo largo de la columna:

$$P = P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z \qquad \text{(III.24)}$$

Al sustituir la ecuación III.24 en la III.23 y se despeja la concentración de equilibrio:

$$A^* = \frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) \qquad \text{(III.25)}$$

La ecuación III.25 es la concentración que tendría la fase líquida si se encontrara en equilibrio en la torre y está en función de la altura en la torre. Se puede sustituir la ecuación III.25 en la ecuación III.20:

$$v\frac{\partial A^\circ}{\partial z} + \frac{\partial A^\circ}{\partial t} - \frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - A^\circ\right] = 0 \qquad \text{(III.26)}$$

Esta ecuación representa lo mismo que la ecuación III.20 y el tercer término sigue siendo el que modela la transferencia de masa en la interfase. El gradiente entre corchetes sigue siendo el gradiente total de la interfase, pero ahora la concentración de equilibrio de la fase líquida $A^*$ está en función de la posición z a lo largo de la torre.

La ecuación III.26 tiene la forma $a(D_z A^\circ) + b(D_t A^\circ) + c(A^\circ) = d$, donde $(D_z A^\circ)$ es la derivada de $A^*$ respecto a $z$; y por lo tanto es una ecuación diferencial parcial lineal no homogénea. Antes de resolverla, conviene realizar un cambio de variable que la simplifique y la convierta en una ecuación homogénea con solución más sencilla.

Se propone una variable nueva C:

$$C = \frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - A^\circ\right] - \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2 - P_1)}{Z} v \qquad \text{(III.27)}$$

Es necesario despejar de la ecuación III.27 a la concentración $A^\circ$ y resolver las derivadas $\frac{\partial A^\circ}{\partial t}$ y $\frac{\partial A^\circ}{\partial z}$ para sustituirlas en la ecuación III.26. Despejando:

$$C + \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2 - P_1)}{Z} v = \frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - A^\circ\right] \qquad \text{(III.28)}$$

Finalmente:

$$A^\circ = \frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - \left[\left(C + \left(\frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2 - P_1)}{Z} v\right)\right)\frac{\varepsilon}{k_L a}\right] \qquad \text{(III.29)}$$

Derivando la ecuación III.29 con respecto a $t$ y $z$ respectivamente:

$$\frac{\partial A^\circ}{\partial t} = -\frac{\varepsilon}{k_L a}\frac{\partial C}{\partial t} \qquad \text{(III.30)}$$

$$\frac{\partial A^\circ}{\partial z} = \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2 - P_1)}{Z} - \frac{\varepsilon}{k_L a}\frac{\partial C}{\partial z} \qquad \text{(III.31)}$$

Se sustituyen las ecuaciones III.28, III.30 y III.31 en la ecuación III.26:

$$v\left(\frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2-P_1)}{Z} - \frac{\varepsilon}{k_L\, a}\frac{\partial C}{\partial z}\right) - \frac{\varepsilon}{k_L\, a}\frac{\partial C}{\partial t} - \left(C + \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2-P_1)}{Z}v\right) = 0 \qquad \text{(III.32)}$$

Rearreglando:

$$v\frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2-P_1)}{Z} - v\frac{\varepsilon}{k_L\, a}\frac{\partial C}{\partial z} - \frac{\varepsilon}{k_L\, a}\frac{\partial C}{\partial t} - C - v\frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2-P_1)}{Z} = 0 \qquad \text{(III.33)}$$

Se puede eliminar el término $v\frac{1}{\mathrm{He}}\frac{(P_2-P_1)}{Z}$ y después multiplicar la ecuación por $\frac{k_L\, a}{\varepsilon}$:

$$v\frac{\partial C}{\partial z} + \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{k_L\, a}{\varepsilon}C = 0 \qquad \text{(III.34)}$$

Esta ecuación es el resultado de haber hecho un cambio de variable en la ecuación III.26, tiene la forma $a\,(D_z C)+b(D_t C)+c\,(C)=0$. Es una ecuación diferencial parcial lineal homogénea, y por lo tanto, se puede utilizar el método de separación de variables para su solución, este método propone la solución como un producto de dos variables, cada una de ellas en función de una variable independiente de la ecuación original. De tal forma que para la ecuación III.34 se propone la solución:

$$C = \Psi(z)\cdot T(t) \qquad \text{(III.35)}$$

Si se toman las derivadas parciales:

$$\frac{\partial C}{dz} = T\frac{\partial \Psi}{\partial z} \qquad \text{y} \qquad \frac{\partial C}{dt} = \Psi\frac{\partial T}{\partial t}$$

Se pueden sustituir en la ecuación III.34:

$$v\,T\frac{\partial \Psi}{\partial z} + \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{k_L\, a}{\varepsilon}T\Psi = 0 \qquad \text{(III.36)}$$

Se divide por el producto $(\Psi T)v$:

$$\frac{1}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial z} + \frac{1}{T}\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{k_L\, a}{\varepsilon v} = 0 \qquad \text{(III.37)}$$

Como la ecuación III.37 está igualada a cero, si se separan términos, éstos tienen que ser iguales.

$$\frac{1}{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial z} = -\frac{1}{v\,T}\frac{\partial T}{\partial t} - \frac{k_L\, a}{\varepsilon v} \qquad \text{(III.38)}$$

Puesto que el lado izquierdo de la ecuación es independiente de $t$ e igual al lado derecho, que es independiente de $z$, se llega a la conclusión de que ambos términos son independientes. En otras palabras, cada lado de la ecuación debe ser una constante Esta incógnita es la constante de separación $-\lambda^2$, entonces:

$$\frac{1}{\Psi}\frac{d\Psi}{dz} = -\lambda^2 \qquad \text{y} \qquad -\frac{1}{v}\frac{dT}{dt} - \frac{k_L a}{\varepsilon v} = -\lambda^2$$

Ahora se tienen dos ecuaciones diferenciales ordinarias que pueden ser resultas fácilmente:

1) $$\int \frac{\partial \Psi}{\Psi} = -\lambda^2 \int z \qquad \Rightarrow \text{solución} \Rightarrow \qquad \Psi = B_1 e^{-\lambda^2 z} \qquad \text{(III.39)}$$

2) $$\int \frac{\partial T}{T} = \left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)\int t \qquad \Rightarrow \text{solución} \Rightarrow \qquad T = B_2 e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} \qquad \text{(III.40)}$$

Donde $B_1$ y $B_2$ son las constates de integración.

Dado que la solución de la ecuación II.34 es la ecuación III.35, se sustituye la ecuación III.27 en el primer término de la III.35, y las ecuaciones III.39 y III.40 en el segundo término de la III.35:

$$\frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\text{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - A^{\circ}\right] - \frac{1}{\text{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z} v = B_1 B_2 \cdot e^{-\lambda^2 z} e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} \qquad \text{(III.41)}$$

La ecuación III.41 es la solución de la ecuación III.26, sólo resta emplear las condiciones a la frontera y la condición inicial para eliminar las constantes $B_1$, $B_2$ y $-\lambda^2$.

Con la condición inicial donde $t = 0$:

$z = 0$ y $A^{\circ} = 0$ se sustituyen en la ecuación III.41:

$$\frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{P_1}{\text{He}}\right] - \frac{1}{\text{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z} v = B_1 B_2 \qquad \text{(III.42)}$$

Se sustituye ecuación III.42 en la ecuación III.41:

$$\frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\text{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - A^{\circ}\right] - \frac{1}{\text{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z} v = e^{-\lambda^2 z} e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} \cdot \left(\frac{k_L a}{\varepsilon}\frac{P_1}{\text{He}} - \frac{1}{\text{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z} v\right) \qquad \text{(III.43)}$$

Sustituyendo la primera condición de frontera: $z = 0$ y $A^{\circ} = A^{\circ 1}$ en la ecuación III.43:

$$\frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\mathrm{He}}P_1 - A^{\circ 1}\right] - \frac{1}{\mathrm{He}}\left(\frac{P_2 - P_1}{Z}\right)v \;=\; e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} \cdot \left(\frac{k_L a}{\varepsilon}\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z}v\right) \qquad \text{(III.44)}$$

Despejando $\lambda^2$, se llega a, ver anexo:

$$\lambda^2 \;=\; \frac{k_L a}{\varepsilon v} + \ln\left[1 - \left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi\left(P_2 - P_1\right)}{\mathrm{He}}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}} \qquad \text{(III.45)}$$

Donde $\Phi = \dfrac{\varepsilon v}{k_L a Z}$

Se puede sustituir la ecuación III.45 y la ecuación III.42 en la ecuación III.41 para eliminar las constantes de integración $B_1$ y $B_2$, y la constante de separación $-\lambda^2$.

$$\frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z}z\right) - A^{\circ}\right] - \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z}v \;=\; \left(\frac{k_L a}{\varepsilon}\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z}v\right) \times$$

$$e^{-\frac{k_L a}{\varepsilon v} - \ln\left[1 - \left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi\left(P_2 - P_1\right)}{\mathrm{He}}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}} z} \times e^{\frac{vtk_L a}{\varepsilon v} + vt\ln\left[1 - \left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi\left(P_2 - P_1\right)}{\mathrm{He}}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}} - \frac{k_L a t}{\varepsilon}} \qquad \text{(III.46)}$$

Si se despeja $A^{\circ}$ de la ecuación III.46, ver anexo, se llega a:

$$A^{\circ} \;=\; \left[\frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z}z\right) - \left(\Phi\frac{P_2 - P_1}{\mathrm{He}}\right)\right] - \left(\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{\mathrm{He}}\right)\left[1 - \left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi\left(P_2 - P_1\right)}{\mathrm{He}}}\right)\right] \cdot$$

$$e^{\left\{-\frac{k_L a}{\varepsilon v} - \ln\left[1 - \left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi\left(P_2 - P_1\right)}{\mathrm{He}}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}}\right\}z} \qquad \text{(III.47)}$$

La ecuación III.47 describe la concentración $A^{\circ}$ en cualquier altura de la columna, $z$; es la ecuación que modela la transferencia de masa a lo largo de toda la columna.

Lo que resta es sustituir la segunda condición a la frontera en la ecuación III.47 para conocer la concentración de salida de la fase líquida $A^{o2}$.

Segunda condición a la frontera: $z = Z$ y $A^{\circ} = A^{o2}$

$$A^{o2} = \left\{ \frac{1}{\mathrm{He}}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} Z\right) - \left(\Phi \frac{P_2 - P_1}{\mathrm{He}}\right)\right\} - \left(\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \Phi \frac{P_2 - P_1}{\mathrm{He}}\right)\left[1 - \left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{\mathrm{He}}}\right)\right] \cdot$$

$$e^{\left\{ -\frac{k_L a}{\varepsilon v} - \ln\left[1 - \left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{\mathrm{He}}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}} \right\} Z}$$

(III.48)

Arreglando la ecuación III.48 se llega a, ver anexo:

$$A^{o2} = \frac{P_2}{\mathrm{He}} - \Phi \frac{P_2 - P_1}{\mathrm{He}} - \left\{ e^{-\frac{1}{\Phi}\left[\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \Phi \frac{P_2 - P_1}{\mathrm{He}} - A^{o1}\right]} \left(1 - \frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{\mathrm{He}}}\right)^{-\frac{\tau_e}{t}} \right\}$$

(III.49)

donde $\tau_e = \frac{Z}{v}$ y es definido como el tiempo de residencia en la columna.

La ecuación III.49 es la concentración de salida de la torre. Sin embargo, la absorción de bióxido de carbono en agua en muy baja y se planteó una recirculación que no se ha tomado en cuenta y se debe incluir. Para tal caso, se hará un balance de masa dentro del recipiente, Figura III.1:

Entradas = Salidas + Acumulación

$$F_v A^{o2} = F_v A^{o1} + V_R \frac{dA^{o1}}{dt} \qquad \text{(III.50)}$$

Si se introduce el término de tiempo de residencia en el recipiente $\tau_R = \frac{V_R}{F_v}$ en la ecuación III.50:

$$\frac{dA^{o1}}{dt} = \frac{1}{\tau_R}\left(A^{o2} - A^{o1}\right) \qquad \text{(III.51)}$$

Esta ecuación describe como cambia la concentración $A^{o1}$ dentro del recipiente en función del tiempo de residencia y la concentración de la fase líquida $A^{o2}$ que sale de la torre después de haber absorbido $CO_2$. Esta concentración está representada por la ecuación III.49, sustituyéndola en la ecuación III.51, se tendrá todo el modelo completo, figura III.1.

$$\frac{dA^{o1}}{dt} = \frac{1}{\tau_R}\left\{\frac{P_2}{\text{He}} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{\text{He}} - \left[e^{-\frac{1}{\Phi}}\left[\frac{P_1}{\text{He}} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{\text{He}} - A^{o1}\right]\left(1 - \frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{\text{He}} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{\text{He}}}\right)^{-\frac{\tau_c}{t}}\right] - A^{o1}\right\} \qquad \text{(III.52)}$$

En la ecuación III.52 hay tres términos que engloban variables:

$$\tau_R = \frac{V_R}{F_v} \qquad \text{(III.53)}$$

$$\tau_c = \frac{Z}{v} \qquad \text{(III.54)}$$

$$\Phi = \frac{\varepsilon v}{k_L a Z} \qquad \text{(III.55)}$$

La solución matemática del sistema, figura III.1, es la ecuación III.52. La variable independiente es el tiempo y la variable dependiente es la concentración $A^{o1}$. Esta ecuación es muy compleja y se debe resolver por un método numérico y no por métodos matemáticos.

# CAPÍTULO IV

# CARACTERÍSTICAS, PARÁMETROS FÍSICOS Y OPERATIVOS DEL EQUIPO

En el capítulo anterior, capítulo III: MODELO PROPUESTO se desarrolló el modelo que explica el comportamiento de la transferencia de $CO_2$ para el sistema propuesto con base en el marco teórico desarrollado en el capítulo II: CONCEPTOS BÁSICOS. En el presente capítulo y los siguientes dos se tratará todo el trabajo experimental.

El desarrollo experimental del presente trabajo se realizó en una columna de absorción marca Pignat empacada con anillos raschig de vidrio. Primero se describe físicamente el equipo y después se presentan y calculan los parámetros operativos que se utilizan.

## IV.1. DESCRIPCIÓN FÍSICA DEL EQUIPO

El equipo consta básicamente de 3 secciones: columna empacada, circuito para la fase líquida y circuito para la fase gaseosa.

a) Columna empacada. La columna empacada consta de 5 secciones cilíndricas de vidrio con un diámetro interno de 5.05 cm. Cada 20 centímetros hay una unión de sección con un redistribuidor para la fase líquida, una salida de fase líquida para muestrear y un termómetro. La altura total de la columna empacada Z es de 101 cm. La columna esta empacada con anillos raschig de vidrio de diámetro nominal de ¼ de pulgada. El área transversal de la columna será:

$$\left(\begin{matrix}\text{Área transversal}\\ \text{de la columna}\end{matrix}\right) = a_T = \frac{\pi}{4}d^2 = \frac{3.1416}{4}(5.05)^2 = 20.03cm^2 \qquad \text{(IV.1)}$$

| ANILLOS RASCHIG DE VIDRIO | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Tamaño Nominal | | Espesor de pared | | No. de empaques por: | | Área superficial | | $d_e$ | |
| pulgadas | mm | pulgadas | mm | $ft^3$ | $m^3$ | $ft^2/ft^3$ | $m^2/m^3$ | ft | m |
| 1/4 | 6 | 1/32 | 0.794 | 88000 | 3,105,305 | 236 | 774 | 0.029 | 0.009 |

b) Circuito para la fase líquida. La fase líquida es bombeada desde el tanque de almacenamiento por una bomba de pistón que opera con frecuencias de 20 a 120 ciclos por segundo. La fase líquida, agua destilada para este trabajo, es pasada por un rotámetro con una escala de 5 a 25 litro por hora. El agua es llevada a la parte superior de la columna donde fluye por gravedad mojando el empaque y cayendo hasta el tanque de almacenamiento.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

c) Circuito para la fase gaseosa. Este circuito tiene dos partes, la primera es para el aire y la segunda para el $CO_2$. La primera es impulsada por un compresor y la segunda por un tanque bajo presión. El $CO_2$ pasa por un rotámetro con una escala de 0 a 240, para calcular el flujo másico de $CO_2$ se utiliza la siguiente relación obtenida de la gráfica de calibración del equipo:

$$G = \frac{\text{Lectura en el rotámetro}}{69.666} = \left[\frac{kg}{h}\right] \qquad \text{(IV.2)}$$

El $CO_2$ se introduce en la parte inferior de la columna y asciende por gradiente de presión hasta salir en la parte superior de la columna. En la entrada y salida de la fase gaseosa en la columna hay dos tomas que se conectaron a un micromanómetro para medir la el gradiente de presión en milímetros de agua.

## IV.2. PARÁMETROS OPERATIVOS

Son todos aquellos que se ponen de manifiesto al operar el equipo y son necesarios ya que cada un de ellos representa una variable en el modelo matemático. Es importante mencionar que estos parámetros variarán de acuerdo con las características de cada equipo.

### IV.2.1. FRACCIÓN DE HUECOS ENTRE EMPAQUE

Este parámetro permite conocer qué porcentaje del volumen de la columna no está ocupado por los empaques, es importante señalar que la fracción de huecos es dependiente únicamente del tipo de empaque así que se pude calcular en cualquier columna y se hace de la siguiente manera:

$$\varepsilon = \frac{\text{Volumen de espacios vacíos}}{\text{Volumen total}} \qquad \text{(IV.3)}$$

donde el volumen de espacios vacíos será:

$$\text{Volumen de espacios vacíos} = \begin{pmatrix}\text{Volumen}\\ \text{total}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\text{Volumen del}\\ \text{empaque}\end{pmatrix} \qquad \text{(IV.4)}$$

Para el cálculo del volumen del empaque se realiza:

$$\text{Volumen del empaque} = (\text{Volumen de un empaque})(\#\text{ de empaques}) \qquad \text{(IV.5)}$$

El volumen del empaque se obtuvo por desplazamiento de agua. En una probeta de vidrio se colocó un volumen de agua, después, un número contado de anillos rashig de vidrio de ¼ de pulgada y se midió el nuevo volumen. El volumen de un empaque será:

$$\begin{pmatrix}\text{Volumen de}\\ \text{un empaque}\end{pmatrix} = \frac{\text{Vol final - Vol inicial}}{\#\text{ de empaques}} = \frac{541.4cm^3 - 500cm^3}{300empaques} = 0.138cm^3 \qquad \text{(IV.6)}$$

Una probeta se llenó con 600 empaques y su volumen era de 256 $cm^3$, con la ecuación IV.4 se calcula el volumen de espacios vacíos y con la ecuación IV.3 la fracción de huecos vacíos:

$$\text{Volumen de espacios vacios} = 256\text{cm}^3 - (0.138cm^3)(600) = 173.2cm^3 \qquad \text{(IV.7)}$$

$$\varepsilon = \frac{173.2cm^3}{256cm^3} = 0.6766 \qquad \text{(IV.8)}$$

### IV.2.2. VELOCIDAD INTERSTICIAL DEL LÍQUIDO

Es la velocidad a la cual fluirá el líquido en la columna y se calcula con la siguiente relación:

$$v = \frac{F_v}{a_{FL}} \qquad \text{(IV.9)}$$

donde $a_{FL}$ es el área real por donde fluye el líquido. Es evidente que esta área cambia puntualmente en la columna, pero el dato es un promedio de todas las áreas a lo largo de la columna, su cálculo es sencillo:

$$a_{FL} = \frac{\text{Volumen retenido en la columna } (V_{retenido})}{h} = \frac{235cm^3}{101cm} = 2.327cm^2 \qquad \text{(IV.10)}$$

El volumen retenido se midió en la columna. Con la ecuación IV.9:

$$v = \frac{F_v}{a_{FL}} = \frac{4.1667\,cm^3/s}{2.327cm^2} = 1.7908\,\frac{cm}{s} \qquad \text{(IV.11)}$$

Este cálculo se presento para un flujo volumétrico de 4.1667 $cm^3/s$, es decir, 15 l/h. En el trabajo se realizaron experimentos a tres diferentes flujos volumétricos (15, 20 y 25 l/h) y por lo tanto es necesario calcular la velocidad para los tres casos, en la tabla IV.1 se presentan los resultados.

| $F_V$ [l/h] | $F_V$ [$cm^3/s$] | $V_{retenido}$ [$cm^3$] | $H$ [cm] | $a_{FL}$ [$cm^2$] | $v$ [cm/s] |
|---|---|---|---|---|---|
| 15 | 4.167 | 235 | 101 | 2.327 | 1.7908 |
| 20 | 5.556 | 295 | 101 | 2.921 | 1.9021 |
| 25 | 6.944 | 350 | 101 | 3.465 | 2.0040 |

Tabla IV.1. Velocidades intersticiales para los diferentes flujos.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

### IV.2.3. TIEMPO DE RESIDENCIA DEL LÍQUIDO EN LA COLUMNA

El tiempo de residencia $\tau_e$ en la columna es el tiempo en el que todo el líquido retenido en la columna es reemplazado, también se puede entender como el tiempo que una molécula de la fase líquida tarda en recorrer toda la columna. Se utiliza la siguiente expresión para su cálculo:

$$\tau_e = \frac{V_{retenido}}{F_V} = \frac{235cm^3}{4.167cm^3/s} = 56.4s \qquad \text{(IV.12)}$$

En la tabla IV.2 se presentan los tiempos de residencia en la columna para los diferentes flujos.

| $F_V$ [l/h] | $F_V$ [cm³/s] | $V_{retenido}$ [cm³] | $\tau_e$ [s] |
|---|---|---|---|
| 15 | 4.167 | 235 | 56.4 |
| 20 | 5.556 | 295 | 53.1 |
| 25 | 6.944 | 350 | 50.4 |

Tabla IV.2. Tiempo de residencia en la columna para los diferentes flujos.

### IV.2.4. TIEMPO DE RESIDENCIA DEL LÍQUIDO EN EL TANQUE DE ALMACENAMIENTO

El tiempo de residencia en el tanque o recipiente $(\tau_R)$ es el tiempo en el que el volumen total del tanque se renueva, o visto de otra manera, el tiempo promedio que una molécula está en el tanque. Se calcula con la siguiente expresión:

$$\tau_R = \frac{5000cm^3 - V_{retenido}}{F_V} = \frac{5000cm^3 - 235cm^3}{4.167cm^3/s} = 1143.51s \qquad \text{(IV.13)}$$

Este es el cálculo para el primer flujo volumétrico, en la tabla IV.3 se presentan los tiempos de residencia en el tanque o recipiente para los diferentes flujos. El valor de 5,000cm³ es el volumen inicial de agua destilada en el recipiente sin operar el equipo.

| $F_V$ [l/h] | $F_V$ [cm³/s] | $V_{retenido}$ [cm³] | $\tau_R$ [s] |
|---|---|---|---|
| 15 | 4.167 | 235 | 1143.6 |
| 20 | 5.556 | 295 | 846.9 |
| 25 | 6.944 | 350 | 669.6 |

Tabla IV.3. Tiempo de residencia en la columna para los diferentes flujos.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

## IV.2.5. PRESIONES EN LA ENTRADA Y SALIDA DE LA COLUMNA

La presión en la parte inferior de la columna es $P_1$ y en la parte superior es $P_2$. Es claro que $P_1$ es mayor a $P_2$ porque el flujo de gas es ocasionado por el gradiente $P_1 - P_2$. La presión en la parte superior de la columna es la presión atmosférica de la Ciudad de México, $P_2 = 585 mmHg$. La presión $P_1$ se calcula con la siguiente expresión:

$$P_1 = \Delta P + P_2 = (4.2 mmH_2O)\left(\frac{1 atm}{10332.56 mmH_2O}\right) + (585 mmHg)\left(\frac{1 atm}{760 mmHg}\right) = 0.7701 atm \quad \text{(IV.14)}$$

Este es el cálculo para el primer flujo volumétrico, en la tabla IV.4 se presentan las presiones en los tres diferentes gastos que se trabajaron.

| $F_V$ [l/h] | $DP$ [$mmH_2O$] | $P_{atm}$ [atm] | $P_1$ [atm] |
|---|---|---|---|
| 15 | 4.2 | 585 | 0.77014 |
| 20 | 4.6 | 585 | 0.77018 |
| 25 | 5 | 585 | 0.77022 |

Tabla IV.4 presión de entrada en la columna para los diferentes flujos

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

# CAPÍTULO V

# DESARROLLO EXPERIMENTAL

En este capítulo se describirá la forma en que se desarrolló la experimentación. Primero se tratará todo lo referente a la técnica que se utilizó para medir la concentración de $CO_2$ absorbido en el agua, después la preparación de los reactivos utilizados y finalmente el procedimiento operativo.

## V.1. MÉTODO DE TITULACIÓN

El modelo teórico del sistema, ecuación III.52, donde la variable independiente es la concentración y la variable dependiente es el tiempo, explica cómo cambia la concentración respecto al tiempo. Es por esta razón que es necesario medir la concentración de $CO_2$ a lo largo del tiempo durante la experimentación, para después comparar los resultados con el modelo teórico. La técnica que se presenta para medir la concentración es la titulación volumétrica basada en la siguiente serie de reacciones.

Cuando el $CO_2$ ya se absorbió en el agua se forma ácido carbónico:

$$CO_2 + H_2O \longleftrightarrow H_2CO_3 \qquad (V.1)$$

Si se agrega una base en exceso, todo el ácido carbónico proveniente del $CO_2$ absorbido reaccionará y se formará una sal. La base que se utiliza es NaOH en una solución 0.05 Molar. Las reacciones son:

$$H_2CO_3 + NaOH \longleftrightarrow NaHCO_3 + H_2O \qquad (V.2)$$

$$NaHCO_3 + NaOH \longleftrightarrow Na_2CO_3 + H_2O \qquad (V.3)$$

Sumando las reacciones V.2 y V.3 se tendrá la reacción total del hidróxido de sodio y el ácido carbónico:

$$H_2CO_3 + 2NaOH \longleftrightarrow Na_2CO_3 + 2H_2O \qquad (V.4)$$

Es importante recordar que el hidróxido de sodio está en exceso y que reaccionan sólo las moles necesarias, quedando el medio básico. El carbonato de sodio es una sal que tiene alta solubilidad en el agua, si se agrega cloruro de bario se forma un precipitado. La ventaja de la reacción es que es irreversible. Se utiliza un exceso de una solución de $BaCl_2$ 0.1 molar.

$$Na_2CO_3 + BaCl_2 \longrightarrow BaCO_3 \downarrow + 2NaCl \qquad (V.5)$$

Las moles de precipitado serán las mismas moles que el agua había absorbido de $CO_2$, de la reacción V.4 se concluye que las moles de hidróxido de sodio que reaccionaron son la mitad de las moles del carbonato de sodio y por tanto de las moles de $CO_2$ que se absorbió en el agua. El medio sigue siendo básico porque hay

un exceso de NaOH que no reaccionó se puede titular fácilmente con una solución de ácido clorhídrico 0.03 molar y fenolftaleína como indicador.

$$HCl + NaOH \longrightarrow NaCl + H_2O \qquad (V.6)$$

Como se conoce el volumen de HCl utilizado para la reacción V.6 y la concentración de la solución se puede calcular el número de moles que reaccionaron, y por lo tanto el número de moles de NaOH que había en exceso, es decir, las moles de NaOH que no se convirtieron en la reacción V.4.

$$(V_{HCl})(C_{HCl}) = \text{Moles de HCl} = \text{Moles de NaOH que no reaccionaron en V.4} \qquad (V.7)$$

Por otra parte, se conoce el volumen de NaOH 0.05M que se agregó para la reacción V.4 entonces:

$$(V_{NaOH})(C_{NaOH}) = \text{Moles totales de NaOH} \qquad (V.8)$$

Restando las moles de NaOH que no reaccionaron a las moles totales se obtienen las moles que sí reaccionaron en V.4:

$$\begin{pmatrix}\text{Moles totales}\\ \text{de NaOH}\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\text{Moles de NaOH}\\ \text{que no reaccionaron}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\text{Moles de NaOH que}\\ \text{reaccionaron en V.4}\end{pmatrix} \qquad (V.9)$$

Y por estequiometría:

$$\begin{pmatrix}\text{Moles de}\\ \text{NaOH en V.4}\end{pmatrix} \times \frac{1\ \text{mol}\ H_2CO_3}{2\ \text{mol NaOH}} \times \frac{1\ \text{mol}\ CO_2}{1\ \text{mol}\ H_2CO_3} \qquad (V.10)$$

Finalmente, se puede conocer la concentración de $CO_2$ dividiendo las moles entre el volumen de la muestra inicial:

$$C_{CO_2} = \frac{\text{Moles de}\ CO_2}{\text{Volumen de la muestra}} \qquad (V.11)$$

Juntando las ecuaciones V.7, V.8, V.9, V.10, V.11:

$$C_{CO_2} = \frac{\frac{1}{2}[(V_{NaOH})(C_{NaOH}) - (V_{HCl})(C_{HCl})]}{\text{Volumen de la muestra}} \qquad (V.12)$$

## V.2. MATERIAL Y SOLUCIONES EMPLEADAS EN LA EXPERIMENTACIÓN

El material utilizado para realizar la experimentación es:

- 12 matraces Erlen Meyer de 125 mL
- 3 vasos de precipitados de 100 mL
- 1 pipeta volumétrica de 2 mL
- 1 pipeta volumétrica de 5 mL

- 1 pipeta volumétrica de 10 mL
- 1 pipeta volumétrica de 50 mL
- 2 propipetas
- 1 bureta de 25 mL
- 1 soporte universal
- 1 pinza
- 1 probeta de 2 litros
- 2 parrillas de agitación
- 2 imanes
- 3 matraces aforados de 1 litro
- 1 micromanómetro
- 1 cronómetro
- balanza granataria
- espátula
- varilla de vidrio

Las soluciones empleadas son:

- Solución de hidróxido de sodio 0.05 M
- Solución de ácido clorhídrico 0.03 M
- Solución de cloruro de bario 0.1 M
- Agua destilada
- Fenolftaleína

### V.2.1. PREPARACIÓN DE LAS SOLUCIONES

La solución de hidróxido de sodio 0.05 M se preparó a partir de una solución 1 molar mediante el siguiente cálculo:

$$V_1 = \frac{V_2 C_2}{C_1} = \frac{(1litro)(0.05molar)}{(1molar)} = 0.05litros \qquad (V.13)$$

En un matraz aforado de un litro se colocaron 50 mililitros de la solución 1 M y se llevo hasta el aforo con agua destilada.

La solución de ácido clorhídrico 0.03 M se preparó a partir de una solución 1 molar mediante el siguiente cálculo:

$$V_1 = \frac{V_2 C_2}{C_1} = \frac{(1litro)(0.03molar)}{(1molar)} = 0.03litros \qquad (V.14)$$

En un matraz aforado de un litro se colocaron 30 mililitros de la solución 1 M y se llevo hasta el aforo con agua destilada.

La solución de Cloruro de Bario se preparó con $BaCl_2 \cdot 2H_2O$ con peso molecular de 244.28 g/gmol:

$$1M = \frac{1\ \text{mol de } BaCl_2}{1\ \text{litro de solución}} = \frac{224.28g}{litro} \qquad (V.15)$$

Se disolvieron 224.28 gramos de cloruro de bario en 600 mL de agua, se colocaron en un matraz aforado de 1 L y se llevo hasta el aforo con agua destilada.

## V.3. PROCEDIMIENTO OPERATIVO

Se realizó la experimentación para tres diferentes gastos de agua: 15, 20 y 25 litros por hora. Se tomaron muestras de 2 mililitros al tiempo 0, 1, 2, 3, 4, 6, 10, 15, 20, 35, 50, 65, 80 y 95 minutos. En un matraz Erlen Meyer de 125 mL con 5 mililitros de $BaCl_2$ 1M y 10mL de NaOH 0.05M se recibió la muestra. Se dejó en reposo de 15 a 20 minutos para que todo el $CO_2$ absorbido reaccionara. Transcurrido este tiempo se titularon las muestras con HCl 0.03M y fenolftaleína como indicador.

El procedimiento operativo se puede listar en los siguientes puntos:

1. Se coloca el tanque arriba de las parrillas de agitación, debajo de la columna.
2. Se conecta el micromanómetro a las tomas de entrada y salida de la columna.
3. Se conecta la bomba y se abre el cilindro de dióxido de carbono.
4. Se agregan 5 litros de agua destilada al tanque y se encienden las parrillas de agitación.
5. Se enciende la bomba y se regula el gasto volumétrico (15, 20 y 25 litros por hora).
6. En los matraces Erlen Meyer se colocan 10 mL de la solución de NaOH, 5 mL de la solución de $BaCl_2$ y dos gotas de fenolftaleína.
7. Se verifica el flujo volumétrico de la corriente líquida y se corrige si es necesario.
8. Ya que se estabilizó el sistema, se toma una muestra de 2 mL del tanque y se colocan en un matraz Erlen Meyer con las soluciones. Se tiene que agitar muy suavemente para que no se desorba el $CO_2$. Se deja reposar durante 20 minutos antes de titular.
9. Se abre la válvula de la línea de $CO_2$ y se regula lo más rápido posible el flujo de dióxido de carbono en la marca de 120 del rotámetro que equivale a $G = \frac{120}{69.66} = 1.7226 kg/h$, ecuación IV.2. Al mismo tiempo que se hace lo anterior, se enciende el cronómetro.
10. Al minuto 1 se empieza a muestrear el agua con $CO_2$ del tanque.
11. Al minuto 16 se titula la primera muestra que se tomo en t = 0.

12. La secuencia de muestreo y titulación es la siguiente:

| Muestra # | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Tiempo [minuto] | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 | 6 | 10 | 15 | 20 | 35 | 50 | 65 | 80 | 95 |
| Titulación [minuto] | 16 | 17 | 18 | 19 | 21 | 22 | 26 | 31 | 36 | 51 | 66 | 81 | 96 | 111 |

13. Se toma la lectura del $\Delta P$ en algún momento de la experimentación.
14. Cuando se haya tomado la muestra 14 en el minuto 90, se cierra la válvula de entrada de $CO_2$, se apaga la bomba y las parrillas de agitación.
15. Se desconecta el micromanómetro.
16. Una vez que la columna no gotee agua, se puede retirar el tanque y las parrillas de agitación.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

# CAPÍTULO VI

# RESULTADOS EXPERIMENTALES Y CÁLCULOS

El principal objetivo del trabajo es determinar el coeficiente de transferencia de masa. En el capítulo III: MODELO PROPUESTO, se obtuvo el modelo teórico del sistema propuesto en la figura III.1, ecuación III.52. La solución de este modelo es el perfil de la concentración de $CO_2$ en el tanque y está en función del coeficiente de transferencia de masa.

Cuando se realiza la experimentación se obtiene volúmenes de HCl de la titulación. En el capítulo V se desarrolló la ecuación para calcular la concentración de $CO_2$ en el tanque a partir del volumen de HCl de la titulación, ecuación V.12. En la primera sección de este capítulo se aplicará dicha ecuación para obtener los perfiles experimentales. Una vez que se tengan éstos, se obtendrá el perfil del modelo teórico resolviendo la ecuación III.52 usando el método numérico Runge-Kutta de cuarto orden. Después, para cada gasto de agua, los dos perfiles se compararán y se ajustará el perfil teórico con el experimental cambiando el coeficiente de transferencia de masa $k_L$ hasta que el error cuadrado de los puntos experimentales y el modelo teórico sea el mínimo.

## VI.1.CÁLCULO DE LA CONCENTRACIÓN DE $CO_2$

De la experimentación se tienen los siguientes datos:

| | Gasto Volumétrico de agua [litros/hora] | | |
|---|---|---|---|
| | 15 | 20 | 25 |
| Tiempo [minutos] | Volumen HCl [mL] | Volumen HCl [mL] | Volumen HCl [mL] |
| 0 | 15.55 | 15.30 | 15.05 |
| 1 | 15.35 | 14.80 | 14.85 |
| 2 | 15.05 | 14.40 | 14.10 |
| 3 | 14.85 | 14.10 | 13.60 |
| 4 | 14.65 | 13.70 | 13.40 |
| 6 | 14.40 | 13.50 | 13.00 |
| 10 | 13.65 | 12.90 | 12.80 |
| 15 | 13.10 | 12.15 | 12.40 |
| 20 | 12.60 | 12.30 | 12.50 |
| 35 | 12.00 | 11.65 | 12.40 |
| 50 | 11.80 | 11.10 | 12.10 |
| 65 | 11.45 | 11.15 | 12.00 |
| 80 | 11.35 | 11.05 | 12.00 |
| 95 | 11.30 | 11.05 | 12.00 |

Tabla VI.1. Resultados experimentales, volumen de HCl para cada corrida.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Dado que en la sección III.3 cuando se resuelve la ecuación se introduce la condición inicial $t = 0$, $z = 0$ y $A^{\circ} = 0$ es necesario hacer un ajuste a los resultados experimentales de la tabla VI.1 para hacer cumplir esta condición. Si la concentración inicial fuera cero, toda la sosa que se agrega sería la que reaccionaría con el HCl. Se agregaron en todos los casos 10 mL de NaOH 0.05M; es decir, 0.0005 moles de NaOH. Si la concentración de HCl que se utilizó fue de 0.03M el volumen necesario de HCl para reaccionar con los 0.0005 moles de NaOH será: (0.0005 moles /0.03M) = 16.66 mL. Entonces a todos los datos de la corrida de gasto volumétrico de 15 litros por hora se le sumará (16.66-15.55) = 1.11. Para los datos de la corrida de 20 litros por hora: (16.66-15.30) = 1.36. Y para los datos de la corrida de 25 litros por hora: (16.66-15.05) = 1.61. Este ajuste se hace para que el modelo experimental pueda ser comparado con el modelo teórico. Más adelante se evaluará cualitativamente este ajuste. Haciendo el ajuste a la tabla VI.1 resulta la tabla VI.2:

| | Gasto Volumétrico [litros/hora] | | |
|---|---|---|---|
| | 15 | 20 | 25 |
| Tiempo [minutos] | Volumen HCl [mL] | Volumen HCl [mL] | Volumen HCl [mL] |
| 0 | 16.66 | 16.66 | 16.66 |
| 1 | 16.46 | 16.16 | 16.46 |
| 2 | 16.16 | 15.76 | 15.71 |
| 3 | 15.96 | 15.46 | 15.21 |
| 4 | 15.76 | 15.06 | 15.01 |
| 6 | 15.51 | 14.86 | 14.61 |
| 10 | 14.76 | 14.26 | 14.41 |
| 15 | 14.21 | 13.49 | 13.99 |
| 20 | 13.69 | 13.66 | 14.09 |
| 35 | 13.09 | 12.99 | 14.01 |
| 50 | 12.89 | 12.46 | 13.69 |
| 65 | 12.56 | 12.49 | 13.59 |
| 80 | 12.46 | 12.39 | 13.61 |
| 95 | 12.39 | 12.39 | 13.61 |

Tabla VI.1. Resultados experimentales, volumen de HCl para cada corrida

Si se aplica la ecuación V.12. para calcular la concentración de $CO_2$ para la corrida de 15 litros por hora de agua en el tiempo cero se tiene:

$$C_{CO_2} = \frac{\frac{1}{2}[(V_{NaOH})(C_{NaOH}) - (V_{HCl})(C_{HCl})]}{\text{Volumen de la muestra}} \qquad \text{(VI.1)}$$

El volumen de la muestra es 0.002 L, $C_{HCl} = 0.03\,M$, $C_{NaOH} = 0.05\,M$, $V_{NaOH} = 10\,mL$ y de la tabla VI.2. $V_{HCl} = 16.66\,mL$, sustituyendo en la ecuación VI.1:



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$C_{co_2} = \frac{\frac{1}{2}[(10\,\text{mL})(0.05\,\text{M}) - (16.66\,\text{mL})(0.03\,\text{M})]}{2\,\text{mL}} = 0.00005\text{M} \qquad \text{(VI.2)}$$

Para cambiar las unidades a moles por centímetro cúbico:

$$0.00005\,\frac{\text{moles}}{\text{L}} * \frac{1\,\text{L}}{1000\,\text{cm}^3} = 0.00000005\,\frac{\text{moles}}{\text{cm}^3} \approx 0\,\frac{\text{moles}}{\text{cm}^3}$$

Si se aplica el procedimiento a toda la tabla VI.2.:

| | Gasto Volumétrico [litros/hora] | | |
|---|---|---|---|
| | 15 | 20 | 25 |
| Tiempo [minutos] | Concentración de $CO_2$ [moles/cm$^3$] | Concentración de $CO_2$ [moles/cm$^3$] | Concentración de $CO_2$ [moles/cm$^3$] |
| 0 | 0.000000000 | 0.000000000 | 0.000000000 |
| 1 | 0.000001500 | 0.000003725 | 0.000001500 |
| 2 | 0.000003750 | 0.000006725 | 0.000007125 |
| 3 | 0.000005250 | 0.000008975 | 0.000010875 |
| 4 | 0.000006750 | 0.000011975 | 0.000012375 |
| 6 | 0.000008625 | 0.000013475 | 0.000015375 |
| 10 | 0.000014250 | 0.000017975 | 0.000016875 |
| 15 | 0.000018375 | 0.000023750 | 0.000020000 |
| 20 | 0.000022250 | 0.000022475 | 0.000019250 |
| 35 | 0.000026750 | 0.000027500 | 0.000019875 |
| 50 | 0.000028250 | 0.000031475 | 0.000022875 |
| 65 | 0.000030750 | 0.000031250 | 0.000020625 |
| 80 | 0.000031500 | 0.000032000 | 0.000022875 |
| 95 | 0.000032000 | 0.000032000 | 0.000022875 |

Tabla VI.3. Resultados experimentales, concentración de $CO_2$ para cada corrida.

## VI.2. SOLUCIÓN AL MODELO TEÓRICO, ECUACIÓN III.52

Para encontrar la solución del modelo teórico se utilizará el método numérico Runge-Kutta de cuarto orden:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \qquad \text{(VI.3)}$$

donde

$$k_1 = f(x_i, y_i) \qquad \text{(VI.4)}$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{hk_1}{2}\right) \qquad \text{(VI.5)}$$



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{hk_2}{2}\right) \qquad \text{(VI.6)}$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3) \qquad \text{(VI.7)}$$

$$x_{i+1} = xi \ + h \qquad \text{(VI.8)}$$

La variable $y$ es simplemente la variable dependiente, $x$ es la variable independiente. La variable $h$ es el tamaño de paso y tienen unidades de $x$, por lo tanto un valor aceptable es $h = 0.5$ segundos.

La ecuación diferencial a resolver es la ecuación III.52.

$$\frac{dA^{o1}}{dt} = \frac{1}{\tau_R}\left\{\frac{P_2}{\text{He}} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{\text{He}} - \left[e^{-\frac{1}{\Phi}}\left[\frac{P_1}{\text{He}} - \Phi\frac{P_2 \to P_1}{\text{He}} - A^{o1}\right]\left(1 - \frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{\text{He}} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{\text{He}}}\right)^{-\frac{\tau_e}{t}}\right] - A^{o1}\right\} \qquad \text{(VI.9)}$$

donde:

$$\Phi = \frac{\varepsilon v}{k_L a Z} \qquad \text{(VI.10)}$$

Para el gasto de 15 litros por hora de agua se tienen los siguientes datos calculados en el capitulo IV, sección IV.2.

$\varepsilon = 0.6766$

$v = 1.7908\frac{cm}{s}$ $\qquad \tau_e = 56.4\,s$ $\qquad \tau_R = 1143.6\,s$ $\qquad P_1 = 0.77014$ atm $\qquad P_2 = 0.76974$ atm

El valor de la constante de Henry consultada en la literatura [15]: $\text{He} = 21820\frac{atm\ cm^3}{mol}$ y la altura de la torre Z es 101 centímetros.

Si se sustituyen los datos y la ecuación VI.10 en la ecuación VI.9 se tiene:

$$\frac{dA^{o1}}{dt} = -\left[e^{-\frac{0.012}{k_L a}}\left[3.53*10^{-5} - \frac{2.2*10^{-10}}{k_L a} - A^{o1}\right]\left(\frac{3.53*10^{-5}k_L a - 2.2*10^{-10} - (k_L a)A^{o1}}{3.53*10^{-5}k_L a - 2.2*10^{-10}}\right)^{-\frac{56.4}{t}}\right]$$
$$+\left(3.08*10^{-8}\right) - \left(\frac{1.924*10^{-13}}{k_L a}\right) - 0.000874\left(A^{o1}\right) \qquad \text{(VI.11)}$$

De la ecuación VI.11 parte la solución por iteraciones. Primero se supone $k_L a = 0.07$ por ejemplo. La ecuación se reduce a:

$$\frac{dA^{o1}}{dt} = -\left[\left(3.47*10^{-5} - 0.983A^{o1}\right)\left[1 - 28328A^{o1}\right]^{\frac{56.9}{t}}\right] + \left(3.08*10^{-8}\right) - A^{o1} \qquad \text{(VI.12)}$$

Para resolver con Runge-Kutta se establecen los valores iniciales $t = 0 \quad A^{o1} = 0$, tabla VI.3, y se calculan las k's de las ecuaciones VI.4, VI.5, VI.6 y VI.7, donde la función a evaluar es la ecuación VI.12.

$$k_1 = f(0\ ,\ 0.000000) = 3.681*10^{-8} \qquad \text{(VI.13)}$$

$$k_2 = f\left(0 + \frac{0.5}{2},\ 0 + \frac{(0.5)(3.681*10^{-8})}{2}\right) = 3.653*10^{-8} \qquad \text{(VI.14)}$$

$$k_3 = f\left(0 + \frac{0.5}{2},\ 0 + \frac{(0.5)(3.653*10^{-8})}{2}\right) = 3.653*10^{-8} \qquad \text{(VI.15)}$$

$$k_4 = f\left(0 + 0.5,\ 0 + (0.5)(3.653*10^{-8})\right) = 3.652*10^{-8} \qquad \text{(VI.16)}$$

Ahora se evalúa la ecuación VI.3 y la VI.8:

$$\left(A^{o1}\right)_{t+1} = 0 + \frac{0.5}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = 0.000000018 \qquad \text{(VI.17)}$$

$$(t)_{t+1} = 0 + 0.5 = 0.5 \qquad \text{(VI.18)}$$

Los valores del cálculo VI.17 y VI.18 serán el nuevo punto en el perfil teórico de concentración de $CO_2$ en el tanque. Para realizar la segunda iteración se aplican nuevamente las ecuaciones VI.4, VI.5, VI.6 y VI.7 pero ahora con: $t = 0.5 \quad A^{o1} = 0.000000018$:

$$k_1 = f(0.5,\ 0.000000018) = 3.652*10^{-8} \qquad \text{(VI.19)}$$

$$k_2 = f\left(0.5 + \frac{0.5}{2},\ 0.000000018 + \frac{(0.5)(3.652*10^{-8})}{2}\right) = 3.651*10^{-8} \qquad \text{(VI.20)}$$

$$k_3 = f\left(0.5 + \frac{0.5}{2},\ 0.000000018 + \frac{(0.5)(3.651*10^{-8})}{2}\right) = 3.651*10^{-8} \qquad \text{(VI.21)}$$

$$k_4 = f\left(0.5 + 0.5,\ 0.000000018 + (0.5)(3.651*10^{-8})\right) = 3.650*10^{-8} \qquad \text{(VI.22)}$$

Ahora se evalúan las ecuaciones VI.3 y VI.8:

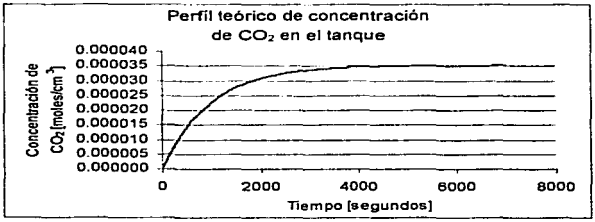
$$\left(A^{o1}\right)_{t+1} = 0.000000018 + \frac{0.5}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) = 0.000000037 \qquad \text{(VI.23)}$$

$$(t)_{t+1} = 0.5 + 0.5 = 1 \qquad \text{(VI.24)}$$

Los valores del cálculo VI.23 y VI.24 serán el nuevo punto en el perfil teórico de concentración de $CO_2$ en el tanque. Para realizar la tercera iteración se aplican nuevamente las ecuaciones VI.4, VI.5, VI.6 y VI.7 pero ahora con $t = 1$ $A^{o1} = 0.000000037$. El cálculo es una simple repetición de las ecuaciones V.19 a V.24. En la tabla VI.4 se muestran las primeras 10 iteraciones (hasta 5 segundos). Y se grafican todos los puntos obtenidos en cada iteración, en la gráfica VI.1 se muestra el perfil de concentración de $CO_2$ en el tanque para el gasto de 15 litros por hora y una $k_La$ de 0.07 $s^{-1}$.

| Iteración | t | A°1 | $K_1$ | $K_2$ | $K_3$ | $K_4$ | A°1 | t |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 0.0 | 0.000000000 | 3.681 E-08 | 3.653 E-08 | 3.653 E-08 | 3.652 E-08 | 0.000000018 | 0.5 |
| 1 | 0.5 | 0.0000000183 | 3.652 E-08 | 3.651 E-08 | 3.651 E-08 | 3.650 E-08 | 0.000000037 | 1.0 |
| 2 | 1.0 | 0.000000037 | 3.650 E-08 | 3.649 E-08 | 3.649 E-08 | 3.648 E-08 | 0.000000055 | 1.5 |
| 3 | 1.5 | 0.000000055 | 3.648 E-08 | 3.647 E-08 | 3.647 E-08 | 3.646 E-08 | 0.000000073 | 2.0 |
| 4 | 2.0 | 0.000000073 | 3.646 E-08 | 3.645 E-08 | 3.645 E-08 | 3.644 E-08 | 0.000000091 | 2.5 |
| 5 | 2.5 | 0.000000091 | 3.644 E-08 | 3.643 E-08 | 3.643 E-08 | 3.642 E-08 | 0.000000109 | 3.0 |
| 6 | 3.0 | 0.000000109 | 3.642 E-08 | 3.641 E-08 | 3.641 E-08 | 3.640 E-08 | 0.000000128 | 3.5 |
| 7 | 3.5 | 0.000000128 | 3.640 E-08 | 3.640 E-08 | 3.640 E-08 | 3.639 E-08 | 0.000000146 | 4.0 |
| 8 | 4.0 | 0.000000146 | 3.639 E-08 | 3.638 E-08 | 3.638 E-08 | 3.637 E-08 | 0.000000164 | 4.5 |
| 9 | 4.5 | 0.000000164 | 3.637 E-08 | 3.636 E-08 | 3.636 E-08 | 3.635 E-08 | 0.000000182 | 5.0 |
| 10 | 5.0 | 0.000000182 | 3.635 E-08 | 3.634 E-08 | 3.634 E-08 | 3.633 E-08 | etcétera | etcétera |

Tabla VI.4. Resultados de las primeras 10 iteraciones para un gasto de 15 litros por hora y un valor de $k_La$ de 0.07




Gráfica VI.1. Perfil teórico para gasto de 15 litros por hora y $k_La$ de0.07 $s^{-1}$.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

## VI.3.DETERMINACIÓN DEL COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MASA

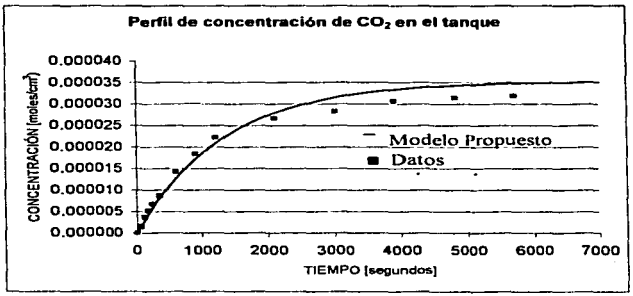
En la primera sección del presente capítulo se obtuvo el perfil de concentración experimental para cada gasto. En la segunda sección se explicó cómo se obtiene el perfil teórico a partir de la ecuación III.52 con el método Runge-Kutta y se ejemplificó para un gasto de 15 litros por hora y un $k_La$ de 0.07 $s^{-1}$. En esta sección se presentan los resultados de cada gasto. Se determina el coeficiente de transferencia de masa que mejor ajusta el modelo teórico a los datos experimentales.

### VI.3.1. GASTO DE 15 LPH DE AGUA Y 1.772 KPH DE $CO_2$

El $k_La$ que mejor ajusta a los primeros 6 datos experimentales y el modelo es 0.023 $s^{-1}$ o 82.80 $h^{-1}$. El ajuste se hace tomando los primeros 6 datos porque aquí el error es mínimo, en los siguientes datos existe se considera que existe un error mayor que se discute en el último capítulo. En la tabla VI.5 se resumen las variables que se utilizaron. En la gráfica VI.2 se ve el perfil teórico y los puntos experimentales.

| Variables medidas | | | Calculo de Variables | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $Z$ | 101 | [cm] | $\tau_R$ | 1143.6000 | [s] |
| Hc | 21820 | [atm cm$^3$ /mol] | $v$ | 1.7908 | [cm/s] |
| $F_V$ | 4.1667 | [cm$^3$/s] | $\tau_C$ | 56.4000 | [s] |
| $V_R$ | 4765.00 | [cm$^3$] | $\varepsilon$ | 0.6666 | [-] |
| $\Delta P$ | 0.0005806 | [atm] | $P_2$ | 0.7697 | [atm] |
| $P_{atm}$ | 0.769736 | [atm] | $P_1$ | 0.7703 | [atm] |
| $A^*_{(t=0)}$ | 0 | [moles/cm$^3$] | $\Phi$ | 0.513884 | [-] |

Tabla VI.5. Variables que se utilizaron para la solución del modelo.




Gráfica VI.2. Modelo teórico y concentraciones experimentales.



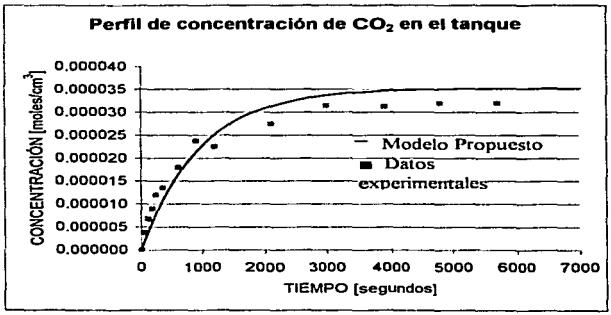
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

### VI.3.2. GASTO DE 20 LPH DE AGUA Y 1.772 KPH DE $CO_2$

El $k_La$ que minimiza el error cuadrado entre los datos experimentales y el modelo es 0.027 $s^{-1}$ o 97.20 $h^{-1}$. En la tabla VI.6 se resumen las variables que se utilizaron para resolver el modelo teórico. En la gráfica VI.3 se ve el perfil teórico y los puntos experimentales.

| Variables medidas | | | Calculo de Variables | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $Z$ | 101 | [cm] | $\tau_R$ | 846.9 | [s] |
| He | 21820 | [atm cm$^3$ /mol] | $v$ | 1.9021 | [cm/s] |
| $F_V$ | 5.5556 | [cm$^3$/s] | $\tau_C$ | 53.1 | [s] |
| $V_R$ | 4705.0 | [cm$^3$] | $\varepsilon$ | 0.6766 | [-] |
| $\Delta P$ | 0.0001742 | [atm] | $P_2$ | 0.7697 | [atm] |
| $P_{atm}$ | 0.76973684 | [atm] | $P_1$ | 0.7699 | [atm] |
| $A^{*1}_{(t=0)}$ | 0 | [moles/cm$^3$] | $\phi$ | 0.464959 | [-] |

Tabla VI.6. Variables que se utilizaron para la solución del modelo.




Gráfica VI.3. Modelo teórico y concentraciones experimentales.



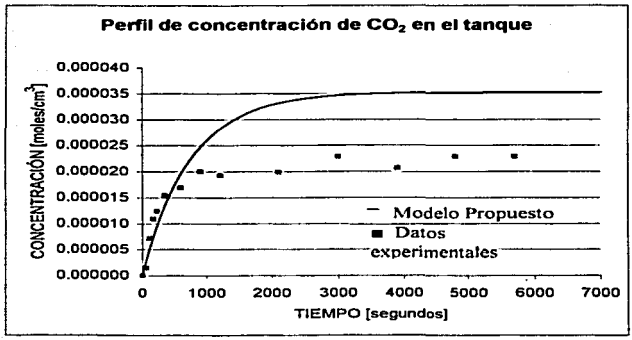
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

### VI.3.3. GASTO DE 25 LPH DE AGUA Y 1.772 KPH DE $CO_2$

El $k_La$ que minimiza el error cuadrado entre los datos experimentales y el modelo es 0.031 $s^{-1}$ o 111.6 $h^{-1}$. En la tabla VI.7 se resumen las variables que se utilizaron para resolver el modelo teórico. En la gráfica VI.4 se ve el perfil teórico y los puntos experimentales.

| Variables medidas | | | Calculo de Variables | | |
|---|---|---|---|---|---|
| $Z$ | 101 | [cm] | $\tau_R$ | 669.6 | [s] |
| He | 21820 | [atm cm$^3$ /mol] | $\nu$ | 2.0040 | [cm/s] |
| $F_V$ | 6.9444 | [cm$^3$/s] | $\tau_C$ | 50.4 | [s] |
| $V_R$ | 4650 | [cm$^3$] | $\varepsilon$ | 0.6766 | [-] |
| $\Delta P$ | 0.00048391 | [atm] | $P_2$ | 0.7697 | [atm] |
| $P_{atm}$ | 0.76973684 | [atm] | $P_1$ | 0.7702 | [atm] |
| $A^{*1}_{(t=0)}$ | 0 | [moles/cm$^3$] | $\Phi$ | 0.4286598 | [-] |

Tabla VI.7. Variables que se utilizaron para la solución del modelo.




Gráfica VI.4. Modelo teórico y concentraciones experimentales.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

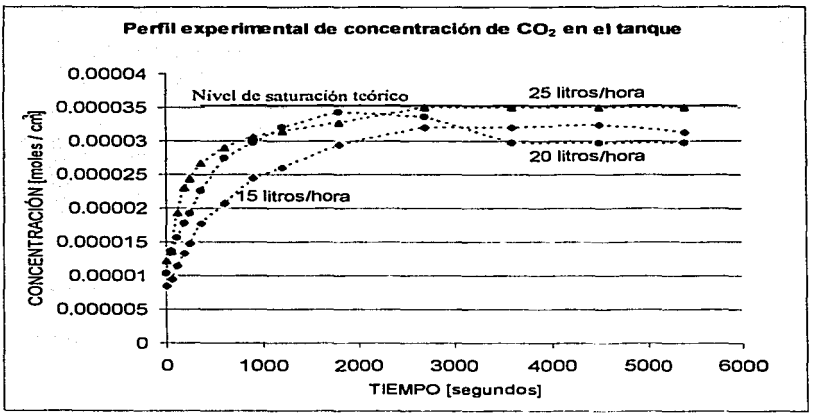
# CAPÍTULO VII

# INTERPRETACIÓN DE LOS RESULTADOS

En el capítulo anterior se obtuvo el perfil teórico y experimental para cada gasto de agua y se determinó el valor del coeficiente de transferencia de masa que mejor ajusta los primeros seis datos experimentales con la curva teórica. En este capítulo se interpretan los resultados, se aplican las dos correlaciones revisadas en el capítulo II, sección II.6. y se obtendrá una correlación para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa para la columna del laboratorio de Ingeniería Química y para el sistema agua y dióxido de carbono.

## VII.1. RESULTADOS

La gráfica VII.1 muestra los tres perfiles experimentales obtenidos sin ajuste alguno porque se analizará sólo la parte experimental, es importante recordar que el ajuste es sólo para hacer compatible el modelo teórico y el experimental. A primera instancia se observa que no se alcanza el nivel de saturación




Gráfica VII.1. Perfiles experimentales para los tres gastos de agua.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

teórica. La saturación teórica se calcula utilizando la ecuación II.7. La presión es la atmosférica en la Ciudad de México: 0.7697 atmósferas y la constante de Henry que se obtuvo de la literatura [15]:

$$He = 21820 \frac{atm\ cm^3}{mol}.$$

$$x_j = \frac{p_j}{He} = \frac{0.769736\,\text{atm}}{21820 \frac{\text{atm cm}^3}{\text{mol}}} = 0.0000353 \frac{\text{mol}}{\text{cm}^3} \qquad \text{(VII.1)}$$

La respuesta más razonable a este patrón es que el $CO_2$ se desorbe. El equipo utiliza una bomba de pistón, esta es la principal razón de la desorción. Después de la bomba hay un tanque pequeño cerrado para amortiguar el gasto, para que varíe menos; dependiendo del volumen contenido en este recipiente, la desorción será mayor o menor. La mejor parte de la experimentación son los primeros 1000 segundos porque la desorción es despreciable.

El gasto que refleja menor absorción es el gasto de 15 litros por hora, el más pequeño; por otra parte, el gasto que refleja mayor absorción es el gasto de 25 litros por hora, el más grande; esto es perfectamente compatible con la teoría y repercutirá en que el coeficiente de transferencia de masa. En el perfil de concentración para el gasto de 20 litros por hora, la desorción es significativa. Lo más probable es que el tanque de amortiguamiento del equipo haya tenido un volumen bajo, permitiendo una mayor desorción.

El perfil de concentración para el gasto de 25 litros por hora presenta un comportamiento, después de los 2500 segundos, muy aceptable y casi alcanza el valor de la saturación teórica. Esto es debido a que la desorción se presenta entre 1000 y 2500 segundos, después de este tiempo, el tanque se encuentra bajo presión, porque ahí se acumula el $CO_2$ desorbido, y no permite mayor desorción de $CO_2$.

Los valores del coeficiente se presentan en la tabla VII.1 para cada gasto. Como la fase controlante es la fase líquida, es totalmente aceptable que a mayor gasto de ésta, exista mayor transferencia de masa, es decir, que haya mayor absorción. Si existe una mayor transferencia de masa, entonces el coeficiente de transferencia de masa será mayor porque es directamente proporcional con el flux, ecuación II.29:

$$N_A = k(\Delta C_A) \qquad \text{(VII.2)}$$

Se espera entonces que entre más grande sea el gasto de agua, mayor sea el coeficiente. Los resultados concuerdan con la predicción teórica.

| Gasto volumétrico de agua [l/h] | Gasto másico de $CO_2$ [kg/h] | $k_La$ hora$^{-1}$ |
|---|---|---|
| 15 | 1.77 | 82.8 |
| 20 | 1.77 | 97.2 |
| 25 | 1.77 | 111.6 |

Tabla VII.1. Coeficiente de transferencia de masa experimental para cada gasto de agua.

## VII.2. CORRELACIONES

Para poder comparar los resultados obtenidos del coeficiente de transferencia, se utilizaran las correlaciones propuestas en el capítulo II, sección II.6. Estas correlaciones son experimentales y están en función del coeficiente de difusión, éste se calcula con la ecuación II.83:

$$D_{AB} = \frac{0.000001}{A + B\sqrt{\mu}} \times \frac{\left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}\right)^{0.5}}{\left((\Sigma v_i)_A^{1/3} + (\Sigma v_i)_B^{1/3}\right)^2} \qquad \text{(VII.3)}$$

Los valores $(\Sigma v_i)_{CO_2}$ y $(\Sigma v_i)_{H_2O}$ están reportados en la literatura [8] y son: 26.9 y 13.1 respectivamente. A A = 1 para gases, B = 4.7 para agua y la viscosidad es 1.029 cP. Si se sustituyen los valores:

$$D_{CO_2-H_2O} = \frac{0.000001}{1+4.7\sqrt{1.029}} \times \frac{\left(\frac{1}{18} + \frac{1}{44}\right)^{0.5}}{\left(26.9^{1/3} + 13.1^{1/3}\right)^2} = 1.67 * 10^{-9}\ \frac{m^2}{s} \qquad \text{(VII.4)}$$

### VII.2.1. CORRELACIÓN DE SHERWOOD Y HOLLOWAY

La correlación está expresada por la ecuación II.84

$$k_L a = D_{AB}\alpha\left(\frac{L}{\mu_L}\right)^{1-n}\left(\frac{\mu_L}{\rho_L D_{AB}}\right)^{0.5} \qquad \text{(VII.5)}$$

Se utilizan valores en unidades de libras, pies y segundo. La ecuación no es adimensionalmente correcta. Las variables están reportadas en la literatura. Para anillos raschig de vidrio de ¼ de pulgada $\alpha = 1029.3$ y $n = 0.605$. [1]. Se sustituyen los valores para dejar la ecuación VII.5 sólo en función del gasto L en litros por hora.

$$k_L a = 1.1332 L^{0.395} \qquad \text{(VII.6)}$$

La unidad del coeficiente $k_L a$ de la ecuación VII.6 es $hora^{-1}$. En la tabla VII.2 se presentan los valores del coeficiente para los tres gastos experimentales.

| Gasto volumétrico de agua [l/h] | Gasto másico de $CO_2$ [kg/h] | $k_L a$ $hora^{-1}$ |
|---|---|---|
| 15 | 1.77 | 20.5 |
| 20 | 1.77 | 22.9 |
| 25 | 1.77 | 25.1 |

Tabla VII.2. Coeficiente de transferencia de masa de la correlación de Sherwood y Holloway

### VII.2.2. CORRELACIÓN DE ONDA

La correlación está expresada por las ecuaciones II.85, II.86 y II.87:

$$k_L a = (k_L)(a_w) \qquad \text{(VII.7)}$$

$$k_L = 0.005\left(\frac{\rho_L}{\mu_L g}\right)^{-1/3}\left(\frac{L}{\mu_L a_w}\right)^{2/3}\left(\frac{\mu_L}{\rho_L D_{AB}}\right)^{-1/2}(a_p d_p)^{0.4} \qquad \text{(VII.8)}$$

$$a_w = a_p\left[1 - e^{-1.45\left(\frac{\sigma_c}{\sigma}\right)^{1.75}\left(\frac{L}{a_p \mu_L}\right)^{0.1}\left(\frac{L^2 a_p}{\rho_L^2 g}\right)^{-0.05}\left(\frac{L}{\rho_L \sigma a_p}\right)^{0.2}}\right] \qquad \text{(VII.9)}$$

Las tres ecuaciones son adimensionalmente correctas. Las propiedades de la fase fluida se calcularon a una temperatura de 20 °C [15]:

$$\sigma_L = 73.56\,\frac{\text{dinas}}{\text{cm}} \qquad \rho_L = 1032\,\frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \qquad \mu_L = 0.001029\,\frac{\text{kg m}}{\text{s}}$$

Las propiedades del empaque son:

$$\sigma_c = 75\,\frac{\text{dinas}}{\text{cm}} \qquad a_p = 774\,\frac{\text{m}^2}{\text{m}^3} \qquad d_p = 0.006\text{m}$$

Además:

$$g = 9.8\,\frac{\text{m}}{\text{s}}$$

$$D_{AB} = 1.67 * 10^{-9}\,\frac{\text{m}^2}{\text{s}}$$

Si se sustituyen los valores en la ecuación VII.9 y se arregla:

$$a_w = 774\left(1 - EXP\left(-0.04526 L^{0.2}\right)\right) \qquad \text{(VII.10)}$$

Si se sustituyen los valores en la ecuación VII.8 y se arregla:

$$k_L = 0.000793283\left(\frac{L}{a_w}\right)^{2/3} \times \frac{3600\,\text{s}}{1\,\text{h}} \qquad \text{(VII.11)}$$

Sustituyendo las ecuaciones VII.10 y VII.11 en la ecuación VII.7:

$$k_L a = 26.223(L)^{2/3}\left[1 - EXP\left(-0.04526 L^{0.2}\right)\right]^{1/3} \qquad \text{(VII.12)}$$

La unidad del coeficiente $k_L a$ de la ecuación VII.12 es hora$^{-1}$. En la tabla VII.3 se presentan los valores del coeficiente para los tres gastos experimentales.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

| Gasto volumétrico de agua [l/h] | Gasto másico de $CO_2$ [kg/h] | $k_La$ $hora^{-1}$ |
|---|---|---|
| 15 | 1.77 | 15.8 |
| 20 | 1.77 | 19.5 |
| 25 | 1.77 | 22.9 |

Tabla VII.3. Coeficiente de transferencia de masa de la correlación de Onda.

## VII.3. CORRELACIÓN PROPUESTA Y ANÁLISIS

Los valores del coeficiente de transferencia de masa de las correlaciones son del orden de los coeficientes experimentales. En la tabla VII.4 están los coeficientes de correlaciones y el experimental para cada gasto.

| Gasto volumétrico de agua [l/h] | Gasto másico de $CO_2$ [kg/h] | $k_La$ experimental $hora^{-1}$ | $k_La$ Corr. Sherwood $hora^{-1}$ | $k_La$ Corr. Onda $hora^{-1}$ |
|---|---|---|---|---|
| 15 | 1.77 | 82.8 | 20.5 | 15.8 |
| 20 | 1.77 | 97.2 | 22.9 | 19.5 |
| 25 | 1.77 | 111.6 | 25.1 | 22.9 |

Tabla VII.4. Coeficientes de transferencia de masa para cada gasto de agua.

En la gráfica VII.2 se observan los resultados experimentales y las dos correlaciones utilizadas. En el eje de las ordenadas se representa al coeficiente de transferencia de masa y en el eje de las absisas el gasto volumétrico de agua. Para la correlación de Sherwood y Hollaway se utiliza la fórmula VII.6 y se extiende la relación desde 10 litros por hora hasta 30; para la correlación de Onda, fórmula VII.12, se hace lo mismo.

Se cree que la correlación más adecuada es la correlación de Onda por dos razones fundamentales: es resultado de un estudio más extenso y más novedoso, e incluye el área real interfasial. Esta área no es ni la transversal al flujo, ni el área formada por el empaque. El área real interfasial es la que forma el líquido al escurrir y por tanto el área transversal de transferencia de masa.

De los tres puntos obtenidos en la gráfica VII.2. que corresponden a los coeficientes de transferencia de masa para los tres diferentes gastos de 15, 20 y 25 litros por hora, se puede sacar una correlación lineal con las siguientes expresiones:

$$\beta_0 = \frac{\sum_1^n k_L a - \beta_1 \sum_1^n L}{n} \qquad \text{(VII.13)}$$



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$\beta_1 = \frac{\sum_1^n k_L a \sum_1^n L - n\sum_1^n (k_L a)(L)}{\left(\sum_1^n L\right)^2 - n\sum_1^n L^2} \qquad \text{(VII.14)}$$

$$k_L a = \beta_1 L + \beta_0 \qquad \text{(VII.15)}$$

La ecuación VII.15 es la forma general de una línea recta donde $\beta_0$ es la ordenada al origen y está representada por la ecuación VII.13; $\beta_0$ es la pendiente y su expresión es la ecuación VII.14.
En la tabla VII.5 se presentan los datos para las ecuaciones VII.13, VII.14 y VII.15

| | $k_L a$ experimental $hora^{-1}$ | L [l/h] | $(L)(k_L a)$ | $L^2$ |
|---|---|---|---|---|
| | 82.8 | 15 | 1242 | 225 |
| | 97.2 | 20 | 1944 | 400 |
| | 111.6 | 25 | 2790 | 625 |
| Σ | 291.6 | 60 | 5976 | 1250 |
| | $\Sigma^2$ | 3600 | | |

Tabla VII.5. Sumatorias para calcular la correlación.

Sustituyendo las sumatorias en la ecuación VII.14:

$$\beta_1 = \frac{(291.6)(60) - 3(5976)}{(3600) - 3(1250)} = 2.88 \qquad \text{(VII.16)}$$

Ahora se puede sustituir este valor y las sumatorias en la ecuación VII.13:

$$\beta_0 = \frac{(291.6) - (2.88)(60)}{3} = 39.6 \qquad \text{(VII.17)}$$

Utilizando la ecuación VII.15 para plantear la correlación:

$$k_L a = 2.88L + 39.6 \qquad \text{(VII.18)}$$

La ecuación VII.18 es la correlación experimental para flujos entre 15 y 25 litros de agua por hora para la columna de absorción marca Pignat del laboratorio de Ingeniería Química para el sistema $CO_2$-$H_2O$.
Para verificar que la correlación no tenga alta varianza se calcula la $R^2$, la medida de bondad de ajuste del modelo, mediante la siguiente expresión:

$$R^2 = \frac{\sum_1^n (k_L a - \overline{k_L a})^2}{\sum_1^n (k_L a - \overline{k_L a})^2} \qquad \text{(VII.19)}$$

Para poder aplicar la ecuación VII.19 es necesario valerse de la tabla de errores, tabla VII.6:



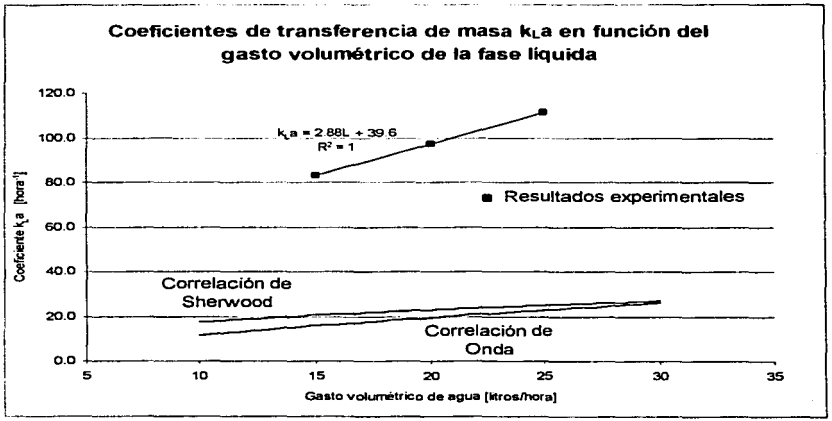
TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$R^2 = \frac{415}{415} = 1 \qquad \text{(VII.20)}$$

Este valor indica que la varianza de $k_La$ predicha por la ecuación VII.18. está explicada en un 100% por el modelo y 0% por el error. Es aceptable el valor.

| L [l/h] | $k_La$ hora$^{-1}$ | $\hat{k}_La$ hora$^{-1}$ | $(k_La - \overline{k_La})^2$ hora$^{-2}$ | $(k_La - \overline{k_La})^2$ hora$^{-3}$ |
|---|---|---|---|---|
| 15 | 82.8 | 82.8 | 207 | 207 |
| 20 | 97.2 | 97.2 | 0 | 0 |
| 25 | 111.6 | 111.6 | 207 | 207 |
| $\overline{k_La}$ | 97.20 | $\Sigma$ | 1031479 | 415 |

Tabla VII.6. Sumatorias para calcular la $R^2$.




Gráfica VII.2. Coeficientes de transferencia de masa.



TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

# CAPÍTULO VIII

# CONCLUSIONES

En este capítulo se presentan las conclusiones generales del trabajo. El trabajo consistió, primeramente, en un desarrollo teórico para obtener el perfil de concentración teórico: capítulo III, basado en un marco teórico: capítulo II. La segunda parte expone el trabajo experimental para obtener el perfil de concentración experimental en los capítulos IV, V y VI. En el capítulo VII se unieron el trabajo experimental y el trabajo teórico para obtener el coeficiente de transferencia de masa $k_La$ para cada gasto volumétrico de agua utilizado en la parte experimental; también en este capítulo se aplicaron las correlaciones planteadas para obtener el coeficiente de transferencia de masa en el capítulo II, sección II.6., y se compararon con los resultados. Finalmente se obtuvo una correlación lineal para los tres datos de coeficientes de transferencia de masa obtenidos en le presente trabajo y se verificó su bondad de ajuste.

## VIII.1. CONCLUSIONES AL MODELO TEÓRICO

El desarrollo del modelo se realizó bajo ciertos supuestos que hicieron más sencillo el problema. Sin embargo, estos supuestos pueden, o no, ser verdaderos. Después de todo el desarrollo teórico y experimental es posible verificar la veracidad de cada supuesto. Se establecieron 7 supuestos en el capítulo III, sección III.1. No obstante, los supuestos a, d, e y f son parcialmente independientes del sistema, es decir, se toman siempre como ciertos. El supuesto g justifica sólo el estudio de transferencia de masa; de no ser así, se tendría que desarrollar, paralelamente a la ecuación III.52, una ecuación que explique como cambia la temperatura en el tanque respecto al tiempo.

Lo que realmente interesa es analizar los supuestos que no son totalmente ciertos y estudiar el efecto que tienen en el modelo. El supuesto b: "En el recipiente hay agitación perfecta; es decir, no hay ningún gradiente de concentración, por lo tanto no hay transporte de masa en el recipiente y la concentración es siempre $A^{o1}$." es falso. En el tanque si existen gradientes de concentración pero los despreciamos por ser muy pequeños. Lo que es importante en este caso es que la salida de agua hacia la torre sea siempre en el mismo lugar, así, si existe un error será constante. El muestreo debe hacerse en el mismo lugar por la misma razón.

El supuesto c: "No hay desorción en el recipiente. El $CO_2$ que se transfiere a la fase líquida permanecerá en ésta." no es del todo correcto. Si bien es cierto que no hay desorción en el tanque, o que es despreciable, el $CO_2$ transferido a la fase líquida no permanece en ésta porque si hay desorción, pero no

ocurre en el tanque, sino en la bomba que se utilizó. Esta característica del sistema es operativa y aun sabiéndola con anticipación no se puede cuantificar en el modelo teórico.

El supuesto d establece que la fase controlante es la liquida. Esto es cierto y está basado en simple teoría, sección II.3.4. Es posible, y sería muy bueno, realizar la experimentación fijando un gasto L y variar el gasto de $CO_2$. Si los coeficientes de transferencia de masa resultantes son iguales o muy parecidos, entonces es cierto que la fase controlante es la fase liquida.

El supuesto f sirvió para plantear la concentración en función de la altura de la torre, ecuación III.25, porque supone que la presión depende linealmente de la posición. Este supuesto es cierto y válido. Sin embargo, la experimentación se realizó con gastos pequeños en comparación a los frecuentemente usados en equipos de absorción y el gradiente $P_2 - P_1$ es despreciable. Entonces se puede reducir el modelo teórico, ecuación III.52, sólo para casos donde el gradiente sea insignificante, a la siguiente expresión:

$$\frac{dA^{o1}}{dt} = \frac{1}{\tau_R}\left\{\frac{P_2}{\mathrm{He}} - A^{o1} - e^{-\frac{1}{\Phi}}\left[\frac{P_1}{\mathrm{He}} - A^{o1}\right]\left(\frac{P_1 - \mathrm{He}A^{o1}}{P_1}\right)^{-\frac{\tau_c}{t}}\right\} \qquad \text{(VIII.1)}$$

La ecuación III.43 es el modelo matemático que describe el comportamiento de la columna. En esta ecuación se sustituyeron las condiciones a la frontera y la condición inicial y se obtuvo la ecuación III.49 que es la concentración de $CO_2$ de la fase líquida que sale de la torre. Sin embargo, existe un sesgo porque la condición inicial $t = 0$, $z = 0$ y $A^o = 0$ no es cierta ya que la concentración inicial no es cero. Existen dos soluciones, la primera es teórica y la segunda práctica. La solución teórica sería considerar la condición como $t = 0$, $z = 0$ y $A^o = A^o_{inicial}$ y así desarrollar todo el modelo hasta concluir en una ecuación similar a la III.52. Sería más complicado el desarrollo pero no imposible.

## VIII.2. CONCLUSIONES AL DESARROLLO EXPERIMENTAL.

Se mencionaron dos problemas en la sección anterior que se originan en la parte experimental y repercuten en el desarrollo del modelo teórico. La primera fue la desorción. Después del minuto 15 la cantidad de $CO_2$ absorbido en el agua ya es considerable y por tanto es susceptible de desorberse. La bomba de pistón al contraerse y expandirse crea una presión y un vacío momentáneo que provoca desorción. El $CO_2$ desorbido llega al tanque amortiguador y se acumula ahí. Si el tanque, inicialmente, tiene un volumen alto, pronto se llega a un equilibrio, porque la presión interna hace que lo desorbido por la bomba se vuelva a absorber en el tanque amortiguador por la alta presión adentro. De otra manera, si el volumen es bajo, el tanque amortiguador aceptará mucho $CO_2$ y desplazará el volumen del líquido, a tal grado que el $CO_2$

desorbido puede salir de tanque amortiguador por donde normalmente sólo sale líquido hacia la columna, perdiendo así el $CO_2$ y afectando seriamente los resultados. Si la bomba se cambiara por una de flujo continuo se evitaría este problema.

El agua destilada utilizada tiene ya una cantidad de $CO_2$ disuelto. Si el modelo teórico considera una concentración inicial se puede utilizar esta agua. Si el modelo teórico no considera una concentración inicial, como es el caso, es preciso utilizar agua libre de $CO_2$. De esta manera, en $t = 0$ la concentración teórica y experimental será cero. Para poder usar el modelo teórico que se desarrollo con la condición inicial de concentración cero, fue preciso hacer una ajuste donde se calcularon los mililitros de HCl en la titulación que equivalen en la primera muestra a concentración inicial de cero; después se calculó la diferencia entre los mililitros teóricos y los reales y se sumo este valor a toda la corrida del gasto. Esta ajuste afecta mucho los últimos resultados, pero no los primeros; y es con estos primeros datos que se acoplaron los dos modelos, el teórico y el práctico, para calcular el coeficiente de transferencia de masa.

La constante de Henry es muy importante en este estudio porque limita la absorción, es decir, establece el punto de saturación. El modelo teórico, ecuación III.52. es muy sensible a esta variable. El valor de la constante de Henry se obtuvo de la literatura. Sería bueno obtener este valor experimentalmente. Simplemente en un recipiente cerrado con agua destilada se mete bajo presión $CO_2$ y después de un tiempo, cuando el sistema esté en equilibrio, se mide la concentración de $CO_2$ y se aplica la fórmula II.7.

A pesar de todos los problemas existentes fue posible conjuntar el modelo teórico con la experimentación realizada. Los coeficientes de transferencia de masa encontrados en este trabajo resultan del orden de los coeficientes predichos por las dos correlaciones utilizadas. En la siguiente tabla se presentan los resultados finales del trabajo.

| Método utilizado para cálculo de $k_La$ [hora$^{-1}$] | Gasto volumétrico de la fase líquida | | | |
|---|---|---|---|---|
| | 15 l/h | 20 l/h | 25 l/h | Correlación |
| Desarrollo del trabajo | 82.8 | 97.2 | 111.6 | Ecuación IIV.18 |
| Correlación de Sherwood | 20.5 | 22.9 | 25.1 | Ecuación II.84 |
| Correlación de Onda | 15.8 | 19.5 | 22.9 | Ecuación II.86 |

Tabla VIII.1. Resultados finales del coeficiente de transferencia de masa

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

# ANEXO

## A.1. DESARROLLO MATEMÁTICO

### A.1.1. DE LA ECUACIÓN III.44 A LA III.45

$$\frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{\mathrm{He}}P_1 - A^{o1}\right] - \frac{1}{\mathrm{He}}\left(\frac{P_2 - P_1}{Z}\right)v = e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} \cdot \left(\frac{k_L a}{\varepsilon}\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z}v\right) \qquad \text{(III.44)}$$

Se despeja el término exponencial:

$$e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} = \frac{\frac{k_L a P_1}{\varepsilon \mathrm{He}} - \frac{k_L a A^{o1}}{\varepsilon} - \frac{v}{\mathrm{He}}\left(\frac{P_2 - P_1}{Z}\right)}{\frac{k_L a}{\varepsilon}\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z}v} \qquad \text{(a.1)}$$

Si se aplica la identidad:

$$\frac{a-b-c}{a-c} = 1 - \frac{b}{a-c}$$

Se puede modificar la ecuación a.1:

$$e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} = 1 - \frac{\frac{k_L a A^{o1}}{\varepsilon}}{\frac{k_L a}{\varepsilon}\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{1}{\mathrm{He}}\frac{P_2 - P_1}{Z}v} \qquad \text{(a.2)}$$

Si se multiplica el numerado y denominador por $\frac{\varepsilon}{k_L a}$ y se define el término $\Phi = \frac{\varepsilon v}{k_L a Z}$, se tiene:

$$e^{t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right)} = 1 - \frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \Phi\frac{1}{\mathrm{He}}(P_2 - P_1)} \qquad \text{(a.3)}$$

Se aplica el logaritmo natural de cada lado de la ecuación para poder despejar $\lambda^2$:

$$t\left(v\lambda^2 - \frac{k_L a}{\varepsilon}\right) = \ln\left[1 - \left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{\mathrm{He}} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{\mathrm{He}}}\right)\right] \qquad \text{(a.4)}$$

Se divide entre $t$ y se suma de cada lado $\frac{k_L a}{\varepsilon}$:

$$v\lambda^2 = \frac{k_L a}{\varepsilon} + \frac{1}{t}\ln\left[1-\left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right] \qquad \text{(a.5)}$$

Ahora se puede dividir entre $v$ y se sube como exponente la fracción $\frac{1}{vt}$,

$$\lambda^2 = \frac{k_L a}{\varepsilon v} + \ln\left[1-\left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}} \qquad \text{(III.45)}$$

### A.1.2. DE LA ECUACIÓN III.46 A LA III.47

$$\frac{k_L a}{\varepsilon}\left[\frac{1}{He}\left(P_1+\frac{P_2-P_1}{Z}z\right)-A^{\circ}\right]-\frac{1}{He}\frac{P_2-P_1}{Z}v = \left(\frac{k_L a}{\varepsilon}\frac{P_1}{He}-\frac{1}{He}\frac{P_2-P_1}{Z}v\right)\cdot e^{-\frac{k_L a}{\varepsilon v}-\ln\left[1-\left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}}z}\cdot e^{\frac{vtk_L a}{\varepsilon v}+vt\ln\left[1-\left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}}-\frac{k_L a t}{\varepsilon}} \qquad \text{(III.46)}$$

El primer y tercer término del segundo exponente se elimina.

Si se multiplica la ecuación III.46 por $-\frac{\varepsilon}{k_L a}$:

$$-\frac{1}{He}\left(P_1+\frac{P_2-P_1}{Z}z\right)+A^{\circ}+\frac{\varepsilon}{k_L a}\frac{1}{He}\frac{P_2-P_1}{Z}v = \left(-\frac{P_1}{He}+\frac{\varepsilon}{k_L a}\frac{1}{He}\frac{P_2-P_1}{Z}v\right)\cdot e^{-\frac{k_L a}{\varepsilon v}-\ln\left[1-\left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}}z}\cdot e^{vt\ln\left[1-\left(\frac{A^{\circ 1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}}} \qquad \text{(a.6)}$$

Se puede despejar $A°$, agrupar términos como $\Phi = \frac{\varepsilon v}{k_L a Z}$ y subir como exponente $\frac{1}{vt}$ en el segundo exponencial:

$$A° = \left[\frac{1}{He}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - \left(\Phi \frac{P_2 - P_1}{He}\right)\right] - \left(\frac{P_1}{He} - \Phi \frac{P_2 - P_1}{He}\right) \cdot$$

$$e^{-\frac{k_L a}{\varepsilon v} - \ln\left[1 - \left(\frac{A°^1}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}} z} \cdot e^{\ln\left[1 - \left(\frac{A°^1}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{vt}{vt}}}$$

(a.7)

Se elimina el exponente del segundo exponencial y se elimina el exponencial con el logaritmo:

$$A° = \left[\frac{1}{He}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} z\right) - \left(\Phi \frac{P_2 - P_1}{He}\right)\right] - \left(\frac{P_1}{He} - \Phi \frac{P_2 - P_1}{He}\right)\left[1 - \left(\frac{A°^1}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)\right] \cdot$$

$$e^{\left\{-\frac{k_L a}{\varepsilon v} - \ln\left[1 - \left(\frac{A°^1}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}}\right\} z}$$

(III.47)

### A.1.3. DE LA ECUACIÓN III.48 A LA III.49

$$A°^2 = \left\{\frac{1}{He}\left(P_1 + \frac{P_2 - P_1}{Z} Z\right) - \left(\Phi \frac{P_2 - P_1}{He}\right)\right\} - \left(\frac{P_1}{He} - \Phi \frac{P_2 - P_1}{He}\right)\left[1 - \left(\frac{A°^1}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)\right] \cdot$$

$$e^{\left\{-\frac{k_L a}{\varepsilon v} - \ln\left[1 - \left(\frac{A°^1}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{1}{vt}}\right\} Z}$$

(III.48)

En el primer término se elimina la $Z$ y después $P_1$. En el término exponencial se desarrolla la multiplicación: el primer término será $-\frac{k_L a Z}{\varepsilon v} = -\frac{1}{\Phi}$ y en el segundo, la Z sube como exponente:

$$A^{o2} = \frac{P_2}{He} - \left(\Phi\frac{P_2-P_1}{He}\right) - \left(\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2-P_1}{He}\right)\left[1-\left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]\cdot$$

$$e^{\left\{-\frac{1}{\Phi} - \ln\left[1-\left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]^{\frac{Z}{vt}}\right\}}$$

(a.8)

Si se aplica la propiedad $e^{-a-b} = e^{-a}e^{-b}$ Se puede separar el exponente y eliminar el logaritmo en el segundo término:

$$A^{o2} = \frac{P_2}{He} - \left(\Phi\frac{P_2-P_1}{He}\right) - \left(\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2-P_1}{He}\right)\left[1-\left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]\cdot$$

$$e^{-\frac{1}{\Phi}}\left[1-\left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]^{-\frac{Z}{vt}}$$

(a.9)

Se tratará la primera parte del tercer término del lado derecho de la ecuación a.9 por separado y luego se incluirá el término es:

$$\left(\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2-P_1}{He}\right)\left[1-\left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He}-\frac{\Phi(P_2-P_1)}{He}}\right)\right]$$

Primero se realiza el producto:

$$\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - \frac{P_1}{He}\left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right) + \Phi\frac{P_2 - P_1}{He}\left(\frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right) \quad \text{(a.10)}$$

Luego se eliminan las constantes de Henry:

$$\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - \left(\frac{P_1 A^{o1}}{P_1 - \Phi(P_2 - P_1)}\right) + \left(\frac{(P_2 - P_1)\Phi A^{o1}}{P_1 - \Phi(P_2 - P_1)}\right) \quad \text{(a.11)}$$

Como el tercer y cuarto término tiene el mismo denominador, se puede hacer la suma de estos:

$$\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - \left(\frac{P_1 A^{o1} - \Phi(P_2 - P_1)A^{o1}}{P_1 - \Phi(P_2 - P_1)}\right) \quad \text{(a.12)}$$

Se despeja $A^{o1}$ del numerador del tercer término:

$$\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - A^{o1}\left(\frac{P_1 - \Phi(P_2 - P_1)}{P_1 - \Phi(P_2 - P_1)}\right) \quad \text{(a.13)}$$

Se elimina el término entre paréntesis:

$$\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - A^{o1} \quad \text{(a.14)}$$

Ahora se sustituye el término a.14 en la ecuación a.9:

$$A^{o2} = \frac{P_2}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - \left\{\left[\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - A^{o1}\right]e^{-\frac{1}{\Phi}}\left(1 - \frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)^{-\frac{Z}{v/}}\right\} \quad \text{(a.15)}$$

Si se introduce el tiempo de residencia para la columna de absorción $\tau_c = \frac{Z}{v}$ y se arregla la ecuación:

$$A^{o2} = \frac{P_2}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - \left\{e^{-\frac{1}{\Phi}}\left[\frac{P_1}{He} - \Phi\frac{P_2 - P_1}{He} - A^{o1}\right]\left(1 - \frac{A^{o1}}{\frac{P_1}{He} - \frac{\Phi(P_2 - P_1)}{He}}\right)^{-\frac{\tau_c}{t}}\right\} \quad \text{(III.49)}$$



ESTA TESIS NO SALE

# NOMENCLATURA

| | |
|---|---|
| $A = A_s =$ | Área transversal a la transferencia de masa |
| $A^\circ_l =$ | Concentración (moles por unidad de volumen) de la interfase referida a la fase líquida |
| $A^* =$ | Concentración (moles por unidad de volumen) de equilibrio referida a la fase líquida |
| $A^*_G =$ | Concentración (moles por unidad de volumen) de equilibrio referida a la fase líquida |
| $A^\circ =$ | Concentración (moles por unidad de volumen) en el seno de la fase líquida |
| $A^\circ_L =$ | Concentración (moles por unidad de volumen) en el seno de la fase líquida |
| $A^{\circ 1} =$ | Concentración en la fase líquida, a la entrada de la columna y en el recipiente, en moles por unidad de volumen |
| $A^{\circ 2} =$ | Concentración en la fase líquida a la salida de la columna, en moles por unidad de volumen |
| $a =$ | Fracción de área para la transferencia de masa por unidad de volumen |
| $a_p =$ | Área superficial o interfacial efectiva |
| $a_T =$ | Área transversal de la columna |
| $a_w =$ | Área mojada o área real interfasial |
| $B_1 =$ | Constante de integración |
| $B_2 =$ | Constante de integración |
| $C =$ | Variable definida |
| $C_A =$ | Concentración de la especie A |
| $D =$ | Coeficiente de difusión |
| $D_{AB} =$ | Coeficiente de difusión |
| $D_{AL} =$ | Coeficiente de difusión para el sistema agua y dióxido de carbono |
| $d_s =$ | Diámetro de una esfera con la misma superficie que el empaque |
| $\left(\frac{f}{P}\right)_j =$ | Razón de la fugacidad de $j$ a la presión total |
| $F_v =$ | Flujo volumétrico del líquido |
| $G_n =$ | Flujo molar de la fase gaseosa |
| $G' =$ | Flujo molar de inertes de la fase gaseosa |
| $g =$ | Aceleración de la gravedad |
| $H =$ | Coeficiente de partición |
| He = | Constante de la ley de Henry |
| $H_G =$ | Altura de la unidad individual de transferencia referida a la fase gaseosa |
| $H_L =$ | Altura de la unidad individual de transferencia referida a la fase líquida |
| $H_{OG} =$ | Altura de la unidad global de transferencia referida a la fase gaseosa |
| $H_{OL} =$ | Altura de la unidad global de transferencia referida a la fase líquida |

$J_A$ = Flux difusivo de la especie $A$

$K$ = Coeficiente global de transferencia de masa

$K_G$ = Coeficiente global de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase gaseosa (presión parcial)

$K_j$ = Coeficiente de partición de la especie $j$ en agua

$K_L$ = Coeficiente global de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase líquida (mol por unidad de volumen)

$K_x$ = Coeficiente global de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase líquida (fracción mol)

$K_Y$ = Coeficiente global de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase gaseosa (fracción mol)

$k$ = Coeficiente de transferencia de masa

$k_G$ = Coeficiente de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase gaseosa (presión parcial)

$k_L$ = Coeficiente de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase líquida (mol por unidad de volumen)

$k_x$ = Coeficiente de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase líquida (fracción mol)

$k_Y$ = Coeficiente de transferencia de masa en función de las unidades de concentración de la fase gaseosa (fracción mol)

$L$ = Longitud

$L'$ = Flujo molar de inertes de la fase líquida

$L_M$ = Flujo molar de la fase líquida

$M$ = Peso molecular

$N_A$ = Flux molar total de masa

$N_G$ = Unidad individual de transferencia referida a la fase gaseosa

$N_L$ = Unidad individual de transferencia referida a la fase líquida

$N_{OG}$ = Unidad global de transferencia referida a la fase gaseosa

$N_{OL}$ = Unidad global de transferencia referida a la fase líquida

$P$ = Presión total

$P_1$ = Presión en la parte inferior de la columna, presión de entrada de la fase gaseosa

$P_2$ = Presión en la parte superior de la columna, presión de salida de la fase gaseosa

$p_G$ = Presión parcial en el seno de la fase gaseosa

$p_i$ = Presión parcial en la interfase referida a la fase gaseosa

$p_j$ = Presión parcial de la especie $j$

$p_j^o$ = Presión de vapor de la especie $j$ a la temperatura de equilibrio

$p_L^*$ = Presión parcial de equilibrio referida a la fase gaseosa

$S$ = Área transversal de flujo de la columna

$T$ = Temperatura

$V$ = Volumen

$V_R$ = Volumen del recipiente

$V_{retenido}$ = Volumen de la fase líquida retenida en la columna
$v$ = Velocidad de la fase líquida
$W_A$ = Flujo molar
$W_A^D$ = Flujo molar difusivo
$W_A^C$ = Flujo molar convectivo
$X$ = Relación mol para la fase líquida
$x$ = Fracción mol para la fase líquida
$x_i$ = Fracción mol en la interfase referida a la fase líquida
$x_j$ = Fracción mol de la especie $j$ en el líquido
$x_L$ = Fracción mol en el seno de la fase líquida
$x_O^*$ = Fracción mol de equilibrio referida a la fase líquida
$Y$ = Relación mol para la fase gaseosa
$y$ = Fracción mol para la fase gaseosa
$y_G$ = Fracción mol en el seno de la fase gaseosa
$y_{H_2O}$ = Fracción molar de agua en la fase gaseosa
$y_i$ = Fracción mol en la interfase referida a la fase gaseosa
$y_j$ = Fracción mol de la especie $j$ en la fase gaseosa
$y_L^*$ = Fracción mol de equilibrio referida a la fase gaseosa
$Z$ = Altura de la torre de absorción
$z$ = Dimensión o distancia

*Letras Griegas*

$\gamma_j$ = Coeficiente de actividad de la especie $j$
$\gamma_j^\infty$ = Coeficiente de actividad de la especie $j$ a dilución infinita
$\varepsilon$ = Fracción de huecos
$\Phi$ = Grupo adimensional
$\tau_c$ = Tiempo de residencia en la torre de absorción
$\tau_R$ = Tiempo de residencia en el recipiente
$\mu_L$ = Viscosidad para la fase líquida
$\rho_L$ = Densidad para la fase líquida
$\sigma_c$ = Tensión superficial del empaque
$\sigma$ = Tensión superficial de la fase líquida

*Subíndices*

1 = Condiciones en la parte superior de la torre de absorción, excepto en la presión
2 = Condiciones en la parte inferior de la torre de absorción, excepto en la presión
$G$ = Fase gaseosa
$i$ = Interfase
$j$ = Especie $j$
$L$ = Fase líquida
log = Media logarítmica

# BIBLIOGRAFÍA


[1] DANCKWERTS, P. V., *Ind. Eng. Chem.*, Vol. 43, p. 1460 (1951).

[2] EVREN, Vurual y ÖZDURAL, Ahmet R., *The Chemical Engineering Journal*, Vol. 57. p. 67 (1995).

[3] FOUST, Alan S., PRINCIPIO DE OPERACIONES UNITARIAS, editorial CECSA, México, 7° reimpresión, 1998.

[4] HEIN, Morris, QUÍMICA, Grupo Editorial Iberoamericana, México,1992.

[5] HIGBIE, R., *Trans AIChE*, Vol. 31, p 365 (1935).

[6] HOUGEN O. A., WATSON K. M., RAGATZ R. A., PRINCIPIOS DE LOS PROCESOS QUÍMICOS, Parte II Termodinámica, Editorial Reverté, Barcelona, 1982.

[7] KING, C. J., AIChE J., Vol. 10, p. 671 (1964).

[8] LOBO, Ricardo, PRINCIPIOS DE TRANSFERENCIA DE MASA, Universidad Autónoma Metropolitana, primera edición, México, 1997.

[9] OCÓN GARCÍA, Joaquín, PROBLEMAS DE INGENIERÍA QUÍMICA, Tomo II, editorial Aguilar, Madrid, primera edición, 1980.

[10] PERRY, Robert y GREEN, Don, PERRY'S CHEMICAL ENGINEER'S HANDBOOK, Mc Graw Hill, USA, 7° edición, 1997.

[11] TOOR, H. L., and MARCHELLO, J. M., *AIChE* J., Vol. 4, p. 97 (1958).

[12] WANKAT, Phillip C., EQUILIBRIUM STAGED SEPARATIONS, Prentice Hall, New Jersey, U.S.A., 1988.

[13] WELTY, James R., FUNDAMENTOS DE TRANSFERENCIA DE MOMENTO, CALOR Y MASA, editorial LIMUSA, México, primera edición, 1989.

[14] WHITMAN, W. G., *Chem. Met. Eng.*, Vol. 24, p. 147 (1923).

[15] YAWS, Carl L., CHEMICAL PROPERTIES HANDBOOK, McGraw-Hill, USA, 1999.