



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN INGENIERÍA
INGENIERÍA QUÍMICA – INGENIERÍA DE PROCESOS

ANÁLISIS DE INTERCAMBIADORES DE MASA

TESIS
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:
MAESTRO EN INGENIERÍA

PRESENTA:
I.Q. VÍCTOR ALFONSO GRACIA MEDRANO BRAVO

TUTOR PRINCIPAL
Dr. ÁNGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS, FACULTAD DE QUÍMICA

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD.MX. 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

JURADO ASIGNADO:

Presidente: Dr. Federico Méndez Lavielle
Secretario: I.Q. Manuel Vázquez Islas
Vocal: Dr. Rafael Herrera Nájera
1^{er.} Suplente: Dr. Martin Riviera Toledo
2^{d o.} Suplente: Dr. Juan Pablo Aguayo Vallejo

Facultad de Química Edificio E

TUTOR DE TESIS:

ANGEL ENRIQUE CHÁVEZ CASTELLANOS

FIRMA

Hoja dejada intencionalmente en blanco

Hoja dejada intencionalmente en blanco

Resumen

El problema de Graetz es ampliamente utilizado en la ingeniería química en los procesos de transferencia de energía y masa, como es el caso de intercambiadores de calor y destilación por membranas. Sin embargo, en estos equipos antes mencionados no se toma en cuenta las contribuciones radiales en su diseño, esto no es siempre válido para procesos con números de Péclet muy bajos.

En el presente trabajo se analiza cómo afecta el arreglo de un intercambiador de masa al proceso de transferencia tomando en cuenta las contribuciones radiales, mediante la inclusión de pasos o de reflujos en distintas etapas.

El objetivo es encontrar un arreglo que mejora el proceso de transferencia, usando un modelado con la ecuación constitutiva de transferencia de masa. Para resolver el modelo se empleó una solución por métodos numéricos para evaluar las concentraciones del intercambiador; usando estimados iniciales a base de prueba y error. En lugar de un método analítico con el uso de expansiones ortogonales, cómo el propuesto en la literatura (Ho *et. al.*).

Los resultados obtenidos muestran información útil y rápida del proceso, que podría ayudar a tomar una mejor decisión en el diseño de un intercambiador de masa. El presente trabajo expone un espectro de concentraciones a la salida de los intercambiadores a diferentes números de Graetz. En dichos intercambiadores se aprecia que a bajos valores de Gz_m la concentración aumenta y a altos Gz_m disminuye. Sin embargo, la inclusión de un reflujo y de pasos adicionales mejora el proceso debido al incremento en el tiempo de residencia del equipo.

Esto genera una competencia entre el efecto deseable de aumentar el flujo (mediante la inclusión de un reflujo) para incrementar el tiempo de residencia contra el efecto indeseable de reducir la concentración a la salida por incrementar indirectamente el número de Graetz, que es función del flujo.

Finalmente este trabajo concluye que se debe de tener un flujo constante en todo el intercambiador. También se encontró que el equipo se beneficia de la inclusión de un reflujo y de pasos incrementando así el tiempo de residencia y además de que se incrementa la concentración de salida a altos números de Gz_m .

Todas las Figuras fueron hechas por el autor en Microsoft Viso 2013
Los cálculos fueron realizados en MATLAB 2013
For English version [click here](#)

Índice

Capítulo I Introducción

1 Separación con Membranas	7
2 Naturaleza de las Membranas	8
3 Procesos de separación con membranas	10
Permeación de Gases	10
Ósmosis y ósmosis inversa	12
Diálisis	14
Electrodiálisis	16
Pervaporación	18
Ultrafiltración y Microfiltración	18
4 Problema de Graetz	20
Problema extendido	25
5 Problema de Sturm-Liouville	27

Capítulo II Metodología y Resultados

1 Objetivos	32
2 Metodología	33
Caso Base	33
Transferencia interfacial	38
Inserción de Reflujos	39
Inserción de Pasos	44
Propuesta con 3 pasos	52

Capítulo III Conclusiones

Conclusiones	57
--------------	----

Apéndices

1 Balance de Momentum	59
2 Adimensionalización de las ecuaciones constitutivas	61
3 Constantes de la función H_n	62
4 Programas en Matlab	63

1*Separación con membranas

Hoy en día con los altos estándares de vida que se tienen, existen diversos problemas por la alta producción de bióxido de carbono, escasez en los suministros de agua y altos consumos de energía. Lo anterior requiere que el crecimiento humano e industrial sea sustentable con procesos eficientes. [1]

Actualmente los procesos de separación más comunes como destilación, absorción, agotamiento, extracción líquido-líquido entre otros, se han estado mejorando tanto en su tecnología como en su operación debido a los problemas antes mencionados. La separación con membranas es un proceso con menor consumo energético, creado hace más de 100 años pero se empezó a aplicar a escala industrial a finales de los años 40s. Esta nueva tendencia podría mejorar los procesos convencionales ya antes mencionados.

En los inicios (1947) de los procesos de separación con membranas se usaban fluorocarbonos porosos para separar isótopos de fluoruro de Uranio ($^{236}\text{UF}_6$ de $^{238}\text{UF}_6$). A mitades de los años 60s se utilizó por primera vez acetato de celulosa para desalinizar agua y producir agua potable mediante ósmosis inversa. En 1979 Monsanto introdujo una membrana de fibra hueca hecha de polisulfonato para separar mezclas de gases y con ello enriquecer corrientes de proceso con hidrógeno y dióxido de carbono. La comercialización de alcohol deshidratado por pervaporación comenzó a finales de los 80s e igualmente la aplicación a gran escala de remoción de metales y compuestos orgánicos de agua residual mediante emulsión de membranas líquidas. [2]

La historia y aplicación de las membranas tiene el potencial de reemplazar los procesos de separación más comunes y salvar grandes cantidades de energía. Sin embargo esto requiere de tecnología de membranas que incremente el flujo de transporte de masa, sea de una alta duración y sea capaz de manipularse en gran escala.

Actualmente existen 8 tipos de procesos de separación con membranas, los cuales se explican más adelante, estos son: permeación de gases, ósmosis, diálisis, electrólisis, pervaporación, ultrafiltración, microfiltración y procesos por membranas líquidas. Estos se agrupan en un solo proceso que por practicidad se identifican como intercambiadores de masa.

También se tienen estos procesos que aún no han sido llevados a gran escala pero se espera que se comercialicen en un futuro, estos son: destilación por membranas, absorción y agotamiento por membranas, extracción por membranas y pestración por membranas.

2*Naturaleza de las membranas

Para estudiar la separación por membranas es necesario definir la nomenclatura y estructura del proceso.

La operación tiene como alimentación 2 componentes, normalmente miscibles, que pasan por una barrera semipermeable. La cual dificulta la salida de uno de los productos (rechazo) mientras que el otro puede moverse a través de ella (permeado), como se aprecia en la Figura 1.2.1.

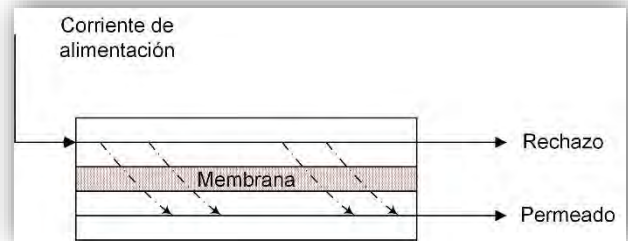


Figura 1.2.1 Esquema de separación por membranas

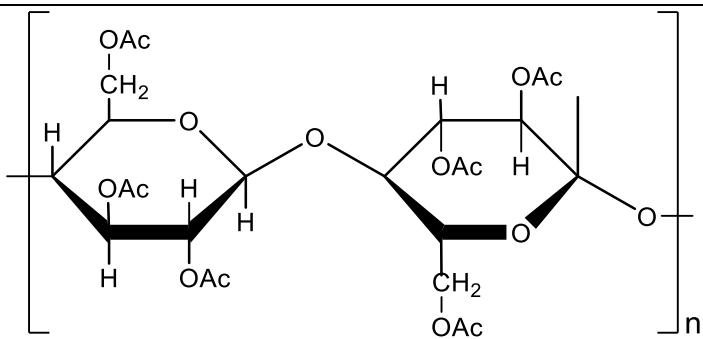
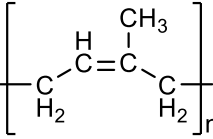
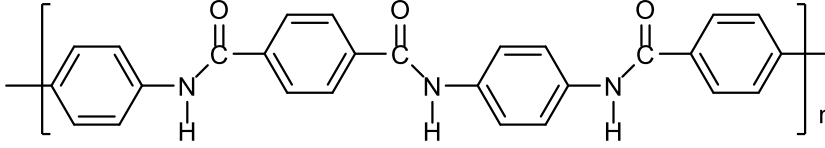
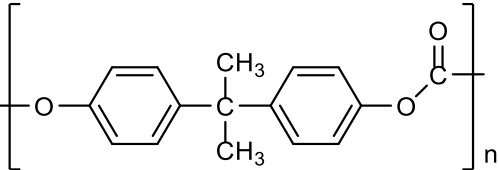
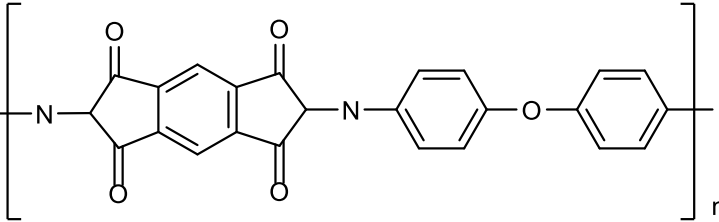
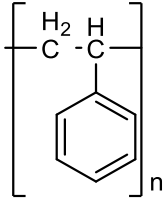
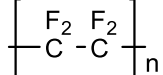
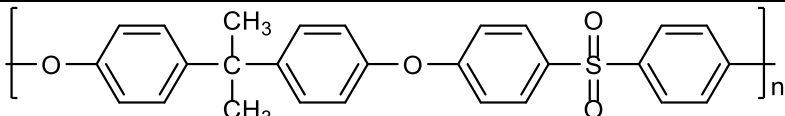
La barrera permeable normalmente es un polímero natural como lana, caucho o celulosa, o un polímero sintético. Desde 1930 se han desarrollado y comercializado un gran número de polímeros, como los mostrados en la Tabla 1.1. La manera más común de sintetizar polímeros es mediante la polimerización de un monómero por condensación, adición o la polimerización de dos monómeros. [2]

En general se busca que las membranas tengan una buena permeabilidad, alta selectividad, compatibilidad química y mecánica con el ambiente del proceso, fácil fabricación y manejo, evitar la acumulación de sales y tener la habilidad de resistir presiones muy altas.

Las formas más comunes de las membranas son: planas asimétricas, tubulares, fibra hueca y monolítica. Las membranas planas tienen dimensiones de 1 mm por 1 mm por 200 μm , las membranas tubulares tienen un diámetro de 0.5 a 5 cm y un largo de hasta 6 metros. Debido al espesor tan delgado que tienen las membranas es necesario añadir un soporte poroso el cual puede estar hecho de fibra de vidrio, metal perforado o cualquier otro medio poroso que se adecue al proceso.

En procesos de desalinización, las membranas planas se fabrican en forma de módulos en espiral y son puestos uno sobre otros. Se hace pasar una corriente de agua salada por el eje de la espiral como se muestra en la Figura 1.2.1 y el rechazo se sigue de largo mientras que el permeado se mueve de manera radial ya sea por el centro o los extremos de la espiral.

Tabla 1.1 Polímeros comunes usados en membranas [2]

Polímero	Apariencia	Monómero
Acetato de celulosa	Cristalino	
Poliisopreno	Plástico	
Aramida	Cristalino	
Policarbonato	Vidrioso	
Poliimida	Vidrioso	
Poliestireno	Vidrioso	
Politetrafluoroetileno	Cristalino	
Polisulfonato	Vidrioso	

3*Procesos de separación con membranas

A continuación se explican algunos de los procesos por separación de membranas más comunes.

Permeación De Gases

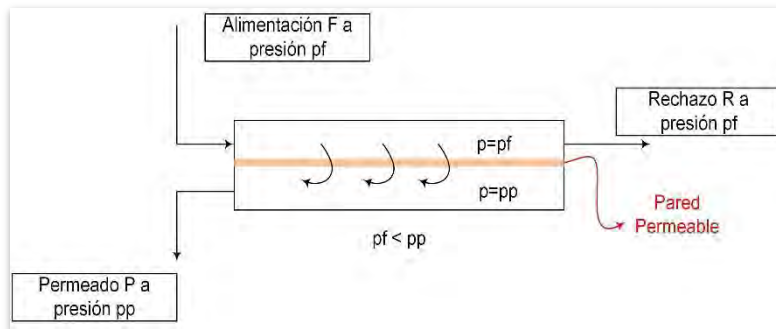


Figura 1.3.1. Proceso de Permeado de Gases

La permeación de gases se utiliza desde 1980 para purificar gases con membranas poliméricas densas. Como ejemplo se tiene la separación de: hidrógeno del metano, hidrógeno del monóxido de carbono, oxígeno del aire, dióxido de carbono del aire, secado de aire, remoción de helio y compuestos orgánicos del aire.

El proceso se lleva a cabo mediante diferencias de presión como se muestra en la Figura 1.3.1. Una corriente de gas F ingresa al intercambiador de masa con una presión p_f , después la membrana deja pasar al gas de interés y este se mueve debido a que del otro lado se tiene una presión menor de permeado p_p y el rechazo sigue su camino por el equipo, así logrando la separación de los gases.

El proceso se tiene que llevar a cabo en fase gas, si se tiene un equilibrio líquido-vapor o una condensación por el cambio de presión. La permeación ocurrirá hasta obtener la misma concentración y presión parcial del gas de interés en ambos lados de la membrana. Esto anula cualquier tipo de separación, por esa razón se tiene que alejar al sistema lo más posible del equilibrio. [3]

La diferencia de presión es la fuerza motriz que rige el proceso de separación y depende de la selectividad de la membrana y la rapidez con la que se puede mover el permeado a través de la misma. Termodinámicamente en sistemas de varios componentes, el proceso de difusión en la membrana ocurre si el cambio del potencial químico es negativo. Si suponemos gas ideal se escribe el potencial químico de la siguiente forma:

$$\mu_i = \mu_i^\circ(T) + RT \cdot \ln(p_i) \quad (1-3-1)$$

Dónde: “i” es la especie, μ es el potencial químico en la mezcla, μ° es el potencial químico de la sustancia pura a la temperatura T y p_i es la presión parcial del proceso.

Si se obtiene el potencial químico del proceso (asumiendo equilibrio) se obtiene que:

$$\Delta\mu_i = \mu_{ip} - \mu_{if} \quad (1-3-2)$$

Dónde: μ_{ip} es el potencial químico en la mezcla en el permeado y μ_{if} es el potencial químico en la mezcla en la alimentación.

Y para que esto ocurra se debe tener un cambio en el potencial químico negativo, entonces:

$$\Delta\mu_i < 0$$

$$\Delta\mu_i = RT \cdot [\ln(p_{ip}) - \ln(p_{if})]$$

$$\Delta\mu_i = RT \cdot \ln\left(\frac{p_{ip}}{p_{if}}\right)$$

$$RT \cdot \ln\left(\frac{p_{ip}}{p_{if}}\right) < 0$$

$$p_{ip} < p_{if} \quad (1-3-2)$$

Con la ecuación 1-3-2 se demuestra que la fuerza motriz que rige el proceso se puede expresar como la diferencia de presión parcial del componente de interés. Sin embargo la termodinámica clásica no puede predecir la rapidez con la que ocurre la difusión por la membrana debido a que es un proceso fuera del equilibrio.

Para calcular la rapidez con la que se transfiere la masa por la membrana se utiliza la ley de Fick y un cociente para determinar qué tan rápido se difunde una especie por la membrana a comparación de las demás. El flujo de masa queda definido de esta forma:

$$J_i = \left(\frac{P_i}{l}\right)(p_{if} - p_{ip}) \quad (1-3-3)$$

Dónde: J_i es el flux de la especie i , P_i es la permeabilidad de la especie y l es la longitud de la membrana.

Si comparamos con la especie j obtenemos la siguiente expresión:

$$\frac{J_i}{J_j} = \frac{P_i(p_{if} - p_{ip})}{P_j(p_{jf} - p_{jp})}$$

Definiendo las siguientes variables, y sabiendo que la fracción mol es proporcional a la presión parcial se tiene que:

$$K_1 = \frac{P_i}{P_j}; K_2 = \frac{p_f}{p_p}$$

$$\frac{J_i}{J_j} = K_1 p_f \frac{\left(x_{if} - \frac{1}{K_2} x_{ip}\right)}{\left(x_{jf} - \frac{1}{K_2} x_{jp}\right)} \quad (1-3-4)$$

La ecuación 1-3-4 da una idea más general de las variables que afectan el proceso de permeación. K_1 se refiere a que tan permeable es el gas i con el gas j y K_2 es la relación de presiones. Si aumenta la permeabilidad del componente "i", o bien, aumenta la diferencia de presiones, entonces, aumentará la difusión.

Ósmosis y Ósmosis inversa

La ósmosis inversa es el proceso de separación con membranas más común y el primero en comercializarse a nivel industrial. Fue utilizado por primera vez en 1790 por Jean-Antoine Nollet, quien separó una mezcla de agua-alcohol con la ayuda de la vejiga de un animal como membrana. Recientemente se han hecho mejoras en el material de las membranas haciéndolas más resistentes a pH, temperatura y resistentes a iones de cloro.

El proceso de ósmosis consiste en dos soluciones, cuyas concentraciones de soluto son diferentes y están separadas por una barrera permeable al solvente pero no al soluto disuelto. Por ello el solvente se mueve hacia la solución más concentrada buscando el equilibrio de concentraciones entre ambas soluciones. Este movimiento de solvente genera un cambio de presión "π" (Pi) conocida como presión osmótica.

Este proceso de ósmosis no puede ser usado para separar componentes de dos corrientes, ya que el solvente va a la dirección contraria a la deseada. Pero si se aplica una presión mayor a la osmótica puede revertirse el flujo de solvente. Este fenómeno es conocido como *ósmosis inversa*.

La ósmosis inversa es comúnmente utilizada en la purificación de agua de mar para obtener agua potable, como se muestra en la Figura 1.3.2. Donde una alimentación de agua a alta presión se hace pasar sobre la superficie de una membrana dejando pasar sólo el agua por el permeado e impidiendo pasar el rechazo de una solución con una concentración alta de sales, compuestos orgánicos, coloides y microorganismos.

La fuerza motriz de este proceso está expresado por la actividad de las soluciones, pero en la práctica es más sencillo usar la presión osmótica. Considerando las soluciones en el equilibrio:

$$f_i^1 = f_i^2 \quad (1-3-5)$$

Donde f es la fugacidad, el subíndice indica la especie y el superíndice el lado de la membrana. 1 el rechazo y 2 el permeado. Reescribiendo la ecuación 1-3-5 en términos de las actividades de las especies y la fugacidad estándar.

$$a_i^1 f_i^\circ(T, P_1) = a_i^2 f_i^\circ(T, P_2) \quad (1-3-6)$$

Suponiendo que el permeado es una sustancia pura su actividad es de 1, y la actividad del rechazo se puede expresar como el producto de la concentración por el coeficiente de actividad

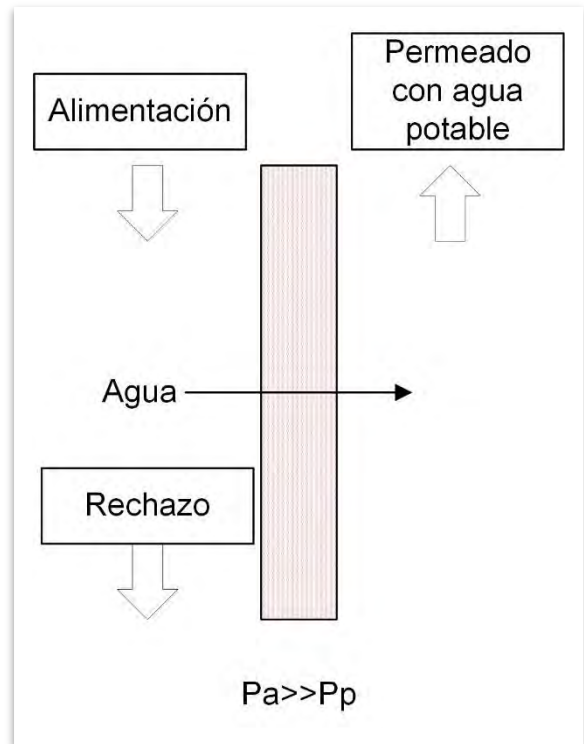


Figura 1.3.2. Ósmosis Inversa

de la especie i.

$$f_i^\circ(T, P_2) = x_i^1 \gamma_i^1 f_i^\circ(T, P_1) \quad (1-3-7)$$

Sabiendo que la actividad del rechazo es menor que uno y que la fugacidad aumenta a medida que la presión, se deduce que:

$$P_1 > P_2 \quad (1-3-8)$$

Y la diferencia de presiones define la presión osmótica como:

$$\pi = P_1 - P_2 \quad (1-3-8)$$

Usando la corrección de Poynting [5] para relacionar la presión osmótica como función de la concentración:

$$\ln \left(\frac{f_i^\circ(T, P_2)}{f_i^\circ(T, P_1)} \right) = \frac{v_L}{RT} (P_2 - P_1) \quad (1-3-9)$$

Se obtiene:

$$\begin{aligned} \pi &= \frac{RT}{v_L} \ln \left(\frac{f_i^\circ(T, P_2)}{f_i^\circ(T, P_1)} \right) \\ \pi &= -\frac{RT}{v_L} \ln \left(\frac{x_i^1 \gamma_i^1 f_i^\circ(T, P_2)}{f_i^\circ(T, P_1)} \right) \\ \pi &= P_1 - P_2 = -\frac{RT}{v_L} \ln(x_i^1 \gamma_i^1) \end{aligned} \quad (1-3-10)$$

Aproximando una solución diluida se obtiene

$$\begin{aligned} \pi &= P_1 - P_2 = -\frac{RT}{v_L} \ln(x_i^1) \\ \pi &= P_1 - P_2 = -\frac{RT}{v_L} \ln(1 - x_j^1) \end{aligned}$$

Sabiendo que:

$$\begin{aligned} \ln(1 - x_j^1) &\approx -x_j^1 \\ \pi &= \frac{RT}{v_L} x_j^1 \end{aligned}$$

$$\pi = \frac{RT}{V} \frac{n_j}{n_i + n_j} \approx \frac{RT}{V} \frac{n_j}{n_{\pm}}$$

$$\pi = RT C_i \quad (1-3-11)$$

La ecuación (1-3-11) nos indica la presión mínima que se tiene que aplicar para que se lleve a cabo la separación.

Diálisis

El proceso de diálisis consiste en utilizar altas diferencias de concentración para generar una fuerza motriz que induzca la transferencia de masa a través de una membrana.

Si se observa la Figura 1.3.3 se aprecia que la fuerza motriz que rige el proceso es la presión, pero si se mantienen a ambas cámaras a la misma presión por una membrana selectiva el soluto se va a mover hacia la región de menor concentración. Si se moviese el disolvente se tendría un proceso de osmosis. Los productos derivados de la diálisis se le conocen como difusato (permeado) y dialisato (concentrado).

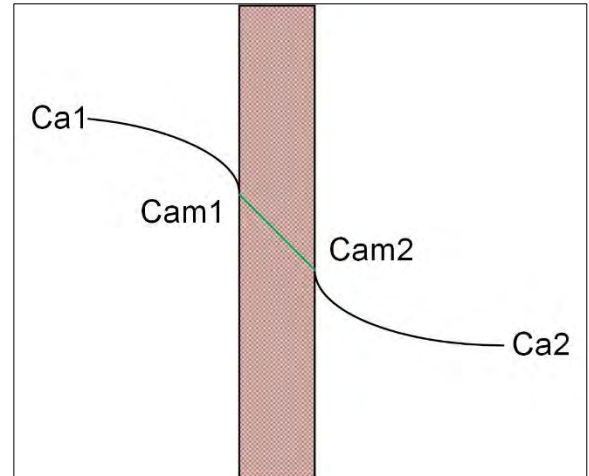


Figura 1.3.3. Proceso de Diálisis

El proceso de diálisis se ha empleado en diferentes procesos químicos como son [2]:

- Recuperación de hidróxido de sodio de hemicelulosa.
- Recuperación de ácidos de contaminantes metálicos.
- Recuperación de ácido sulfúrico de sulfato de níquel.
- Remoción de alcohol de cerveza.
- Purificación de farmacéuticos.

Si suponemos un proceso de diálisis como el que se muestra en la Figura 1.3.3. Se puede utilizar la ecuación de conservación de masa para obtener el flux de masa a través de ella:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + \left(\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x} + \frac{\partial N_{Ay}}{\partial y} + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} \right) = R_A \quad (1-3-12)$$

Considerando que no hay dependencia con el tiempo y que no hay reacción química y que sólo varía el componente A en el eje "y" se obtiene:

$$\frac{dN_{Ay}}{dy} = 0 \quad (1-3-13)$$

Y la ecuación 1-3-13 indica que el flux de masa es constante a través de la membrana en un proceso de diálisis. Si se define el flux de masa como una suma entre difusión y convección

obtenemos que:

$$N_{Ay} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{dc_A}{dy} + x_A(N_{Ay} + N_{By}) \quad (1-3-14)$$

Asumiendo que las fuerzas difusivas son la fuerza motriz del proceso se reduce la ecuación 1-3-14, la Ley de Fick:

$$N_{Ay} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{dc_A}{dy} \quad (1-3-15)$$

Combinando ecuaciones 1-3-13 y 1-3-15:

$$N_{Ay} = -\mathcal{D}_{AB} \frac{dc_A}{dy} = cte$$
$$\mathcal{D}_{AB} \frac{dc_A}{dy} = \mathcal{D}_{AB} \frac{(c_{Am2} - c_{Am1})}{l}$$
$$N_{Ay} = \mathcal{D}_{AB} \frac{(c_{Am2} - c_{Am1})}{l} \quad (1-3-16)$$

La ecuación 1-3-16 expresa la fuerza motriz del proceso de diálisis y esta debe ser lo suficientemente grande para vencer la resistencia de la membrana. Es por ello que la diferencia entre concentraciones en los extremos de la membrana debe ser muy grande para garantizar una separación en el equipo.

Electrodiálisis

La electrodiálisis es un proceso similar a la diálisis, pero en éste se incrementa la fuerza motriz mediante un campo eléctrico el cual induce una difusión forzada. Para que se lleve a cabo la electrodiálisis se debe tener una solución acuosa con un electrolito fuerte y una membrana selectiva de iones.

En la Figura 1.3.4 se observa un proceso de electrodiálisis. Una corriente de alimentación pasa por una serie de membranas cargadas las cuales son impermeables al agua y solo dejan pasar aquellos iones con cargas contrarias. Una vez que atraviesa un ion la membrana se queda atrapado entre dos barreras, las cámaras de los costados, en donde se recolecta el concentrado. Y por la cámara de en medio se recolecta la solución diluida.

Normalmente se utilizan mallas poliméricas para este tipo de diálisis, y tienen una separación entre 50 y 90%. Los ánodos y cátodos están hechos de metales neutrales que no se reducen u oxidan. Sin embargo, ocurren medias reacciones en ambos electrodos.

Cabe destacar que en la electrodiálisis la fuerza motriz se sigue expresando por diferencias de concentración, pero en este caso está siendo inducida por un campo eléctrico.

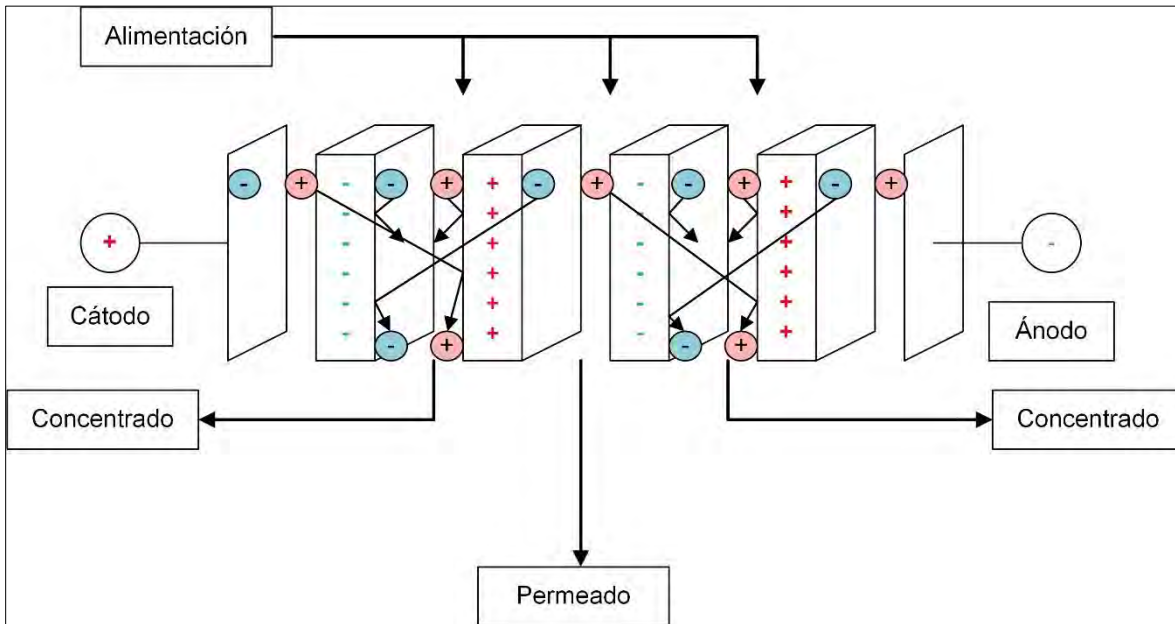


Figura 1.3.4. Esquema de Electrodiálisis

Pervaporación

La palabra pervaporación viene de combinar los términos *permeado* y *evaporación*. El proceso consiste en la remoción de un soluto en disolución mediante una membrana selectiva y bajas presiones. A diferencia de otros procesos de separación de membranas, se requiere que haya dos fases distintas (líquido-vapor) en las cámaras del intercambiador de masa.

Normalmente se alimenta una mezcla de azeótropos al intercambiador de masa con una presión P_1 representado en la Figura 1.3.5, como por ejemplo la mezcla etanol-agua, esta mezcla se hace pasar por una membrana selectiva la cual solo deja pasar uno de los componentes. Del otro lado de la cámara se tiene una presión P_2 que está por debajo de la presión de rocío de la alimentación. Esto implica que dentro de la membrana se lleva a cabo un proceso flash, y están presentes ambas fases. [4]

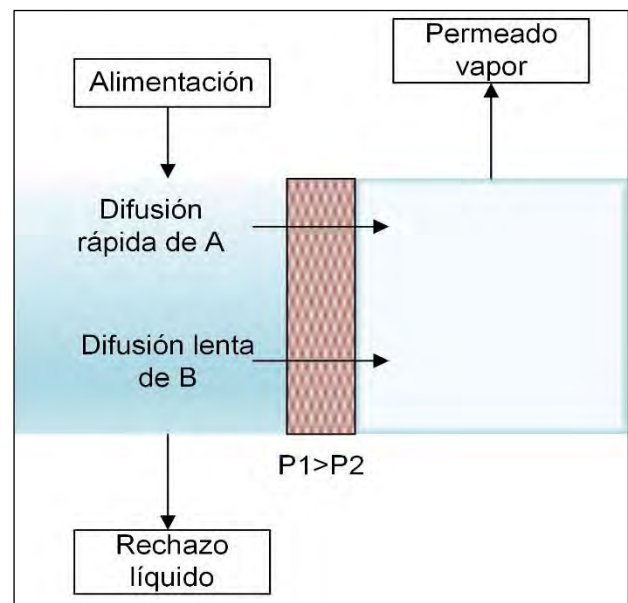


Figura 1.3.5. Pervaporación

A pesar de que exista una diferencia de presión entre las cámaras de la membrana, incluso que P_2 se encuentre a una presión exageradamente baja (vacío). La fuerza motriz que genera la transferencia de masa es la diferencia de potenciales químicos en la membrana.

Si expresamos el flux de masa a través de la membrana, sin reacción química y con solo transferencia por difusión en el eje "x", se obtiene la siguiente expresión:

$$J_i = -\mathcal{D}_i \frac{d\left(\frac{c_i \mu_i}{RT}\right)}{dx} \quad (1-3-17)$$

En la ecuación 1-3-17 se ha expresado dentro de la derivada, la fracción mol del componente “i” en función de la temperatura y el potencial químico. Recordando que para soluciones concentradas se expresa el potencial químico en términos de la actividad. Entonces modificando la ecuación 1-3-1 se obtiene:

$$\mu_i = \mu_i^\circ(T) + RT \cdot \ln(a_i)$$

$$J_i = -c_i \mathcal{D}_i \frac{d(\ln(a_i))}{dx} \quad (1-3-18)$$

La ecuación 1-3-18 nos muestra que la fuerza motriz va a estar dada por la actividad y la difusión de la especie “i”. [3]

A grandes rasgos la pervaporación se utiliza para la deshidratación de etanol, deshidratación de productos orgánicos y la remoción de orgánicos para potabilizar agua.

Como ya se ha mencionado el proceso de separación del azeotropo etanol-agua es el ejemplo más común de pervaporación y normalmente se integra a una columna de destilación. Esto purifica la mezcla de alimentación de un 60% en peso de etanol hasta un 99.5% en peso.

En la Figura 1.3.6 se muestra a detalle este proceso híbrido. Comienza con una alimentación de etanol-agua al 60% en peso a una columna de destilación, la cual tiene unos fondos que son prácticamente agua. [6]

En el domo se tiene una corriente enriquecida de etanol con 95% en peso, este destilado está limitado por el azeotropo a 95.6%. Posteriormente pasa a un intercambiador de masa donde el rechazo tiene un 99.5% de etanol y el permeado (en fase gas) tiene un contenido de 25%. Este se recicla mediante una condensación y un tanque “flash” el cuál recupera el permeado rico en agua a la torre de destilación.

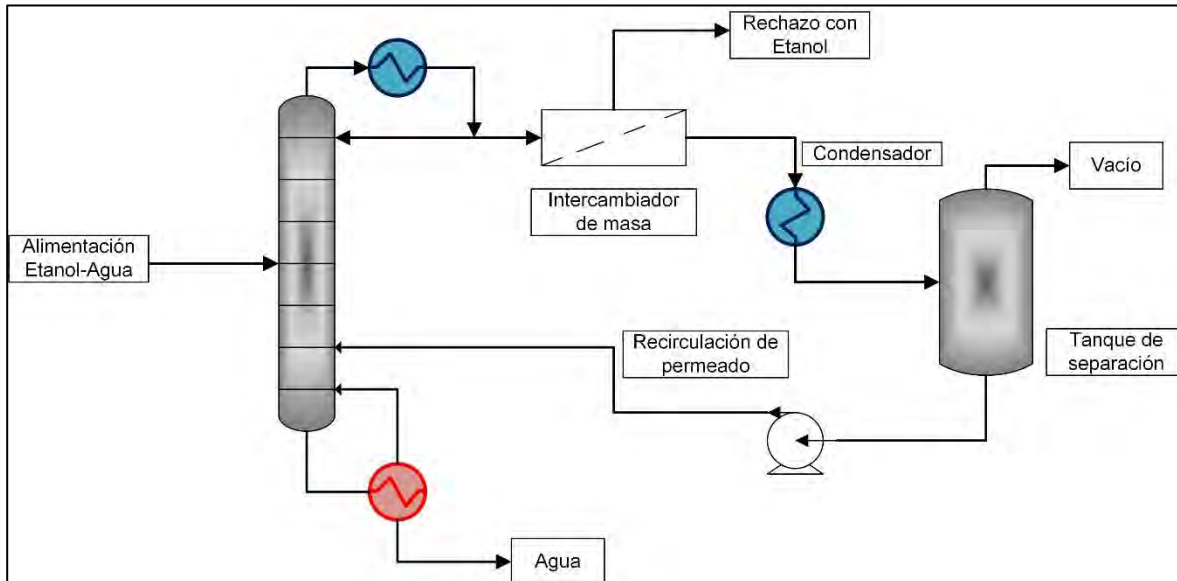


Figura 1.3.6. Proceso híbrido de destilación-pervaporación.

Ultrafiltración y Microfiltración

Al igual que el proceso de osmosis inversa, los procesos de ultrafiltración y microfiltración utilizan una membrana para separar un soluto de una disolución. Pero en este caso el soluto no se encuentra disuelto.

El permeado está compuesto por partículas disueltas y disolvente y el rechazo contiene en mayor proporción sólidos suspendidos como: bacterias, células de sangre o incluso moléculas grandes e.g. proteínas.

La fuerza motriz es nuevamente expresado por el gradiente de presión y la membrana permite el paso de moléculas con un peso menor a 300-500,000 u para ultrafiltración y para microfiltración se tienen partículas del orden de micrómetros. [2]

La microfiltración puede retener partículas de hasta 0.02 μm de diámetro, esto con la ayuda de membranas de alta porosidad como ester-celulosa y de baja porosidad como policarbonato. El proceso de microfiltración se puede realizar de dos formas, como se muestra en la Figura 1.3.7.

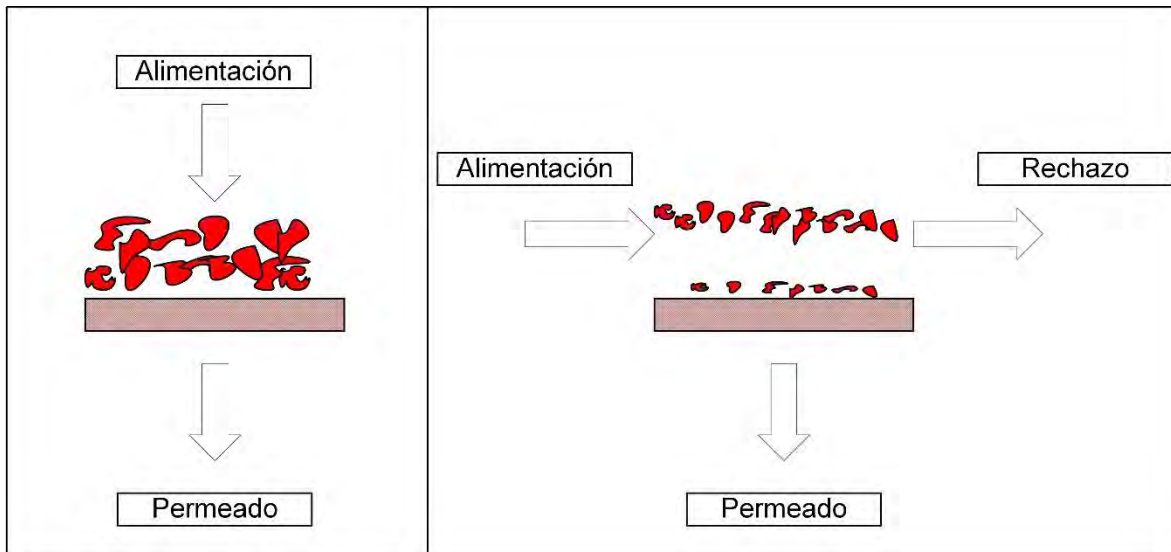


Figura 1.3.7 Sin salida

Flujo tangencial

La filtración sin salida que es conveniente cuando se opera con lotes («batch») o semicontinuo. A medida que se completa el proceso se van acumulando las partículas y se requiere una mayor presión para completar la filtración o se puede obtener un flujo menor de salida, dependiendo de lo que sea más conveniente.

La filtración de flujo tangencial se utiliza para procesos a mayor escala de forma continua. El flujo va de forma paralela a la membrana permitiendo que solo una fracción pase a través de ella. Normalmente se tienen altos reflujos para esta configuración.

El objetivo de presentar los procesos anteriores es para modificar las ecuaciones de transferencia de masa dependiendo del tipo de flux que se tenga (fuerza motriz). En el estudio que se hizo se plantearon las ecuaciones con un proceso de diálisis, sin embargo en trabajos futuros se pueden reescribir las ecuaciones para satisfacer la física del intercambiador de masa.

Las consideraciones para los intercambiadores de masa que se estudiaron en el presente trabajo requirieron tomar en consideración las fuerzas convectivas del proceso de transferencia de masa, algo que no se ha comentado en los puntos anteriores. La combinación de los dos mecanismos de transferencias de masa se engloba en el problema de Graetz el cual se presenta en la siguiente sección y es la base teórica de los cálculos realizados.

4*Problema de Graetz

En 1880 Leo Graetz publicó un artículo sobre un análisis para obtener los coeficientes de difusión de calor de forma experimental.

En su publicación hizo un desarrollo matemático para el equipo que utilizó. Debido a las limitaciones de su época el equipo era muy simple. Constaba de unos tubos concéntricos donde pasaba por la parte exterior un fluido que se utilizaba para calentar, y por la parte interior el fluido que deseaba estudiar. Además, a cierta distancia se colocaban termómetros para saber la diferencia de temperaturas.

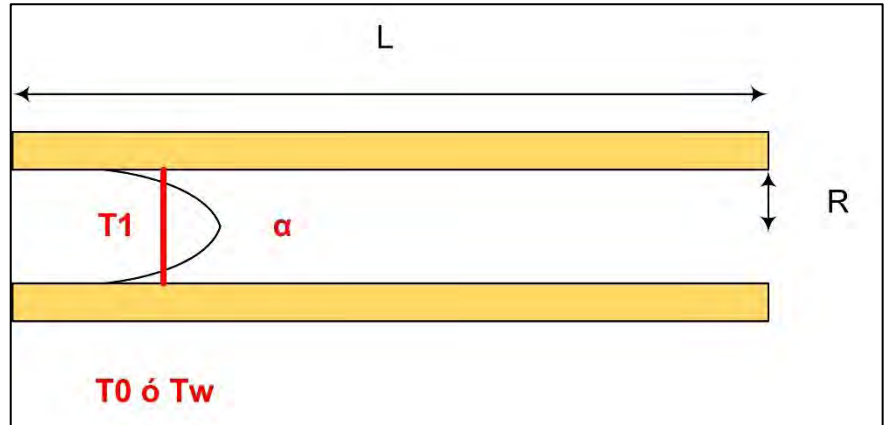


Figura 1-4-1 Experimento Graetz

Este problema donde se tiene un flujo en un área confinada con la inserción de un flux de calor a cierta distancia se conoce como el problema de Graetz. En esta sección se resolverá este problema para después hacer un símil con la transferencia de masa. Se puede hacer esa analogía si se considera que en lugar de que el fluido recorra una tubería que conduce el calor, fluya por una que tenga una membrana que permita la difusión de alguna especie contenida por el fluido. Por lo anterior se podrían utilizar las mismas consideraciones que aquí se plantean.

La metodología empleada por Graetz consiste en hacer fluir el líquido de interés a una temperatura T_1 y presión constante a lo largo de una tubería de latón, que se mantiene a una temperatura T_0 . Como se muestra en la Figura 1.4.1

La conductividad térmica se calcula con los datos antes mencionados, junto con constantes de su aparato de medición y del fluido.

Utilizando las ecuaciones de transferencia de energía térmica, se dice que:

$$\rho \widehat{C}_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = -\nabla \cdot \underline{q} - \underline{\tau} : \nabla \underline{v} \quad (1-4-1)$$

Y sabiendo que:

- el proceso no depende del tiempo,
- propiedades físicas constantes,
- la velocidad sólo tiene una componente, en la dirección "z", $v_z = \alpha$,
- y el fluido no va lo suficientemente rápido para tener pérdidas por disipación viscosa.

Se reduce la ecuación 1-4-1 a:

$$\alpha \rho \widehat{C}_p \frac{\partial T}{\partial z} = -\nabla \cdot \underline{q} \quad (1-4-2)$$

También se asume que el calor puede estar dado en forma de ley de Fourier:

$$\rho \widehat{C}_p \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (1-4-3)$$

Suponiendo que no hay contribución angular:

$$\rho \widehat{C}_p \left(\alpha \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right] \quad (1-4-4)$$

Las condiciones de frontera son:

1. Para $z=0$, $T=T_1$
2. Para $r=R$, $T=T_w$

Usando una escala de temperatura promedio $u=(T-T_w) / T_w$ y definiendo el coeficiente de difusión de calor como $a^2=k/\rho C_p$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{a^2}{\alpha} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right] \quad (1-4-5)$$

Las nuevas condiciones de frontera son:

1. Para $z=0$, $u=\text{cte.}=u_1$ en $0 \leq r \leq R$.
2. Para $r=R$, $u=0$ en $0 \leq z \leq L$.
3. Para $r=0$, $u'=0$ en $0 \leq z \leq L$.

Usando una solución propuesta de la forma

$$u = A e^{-\beta z} V(r) \quad (1-4-6)$$

Donde β es una la longitud característica del problema

Sustituyendo 1-4-6 en 1-4-5 se obtiene que:

$$\frac{d^2 V}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} + \left(\frac{\alpha}{a^2} \beta + \beta^2 \right) V = 0 \quad (1-4-7)$$

La ecuación 1-4-7 es fácilmente reconocible como una ecuación de Bessel de orden cero, cuya solución ya es conocida. De la condición de frontera 3 se deduce que $C_2=0$ para evitar una indeterminación.

$$V = C_1 J_0 \left(r \sqrt{\frac{\alpha}{a^2} \beta + \beta^2} \right) + C_2 Y_0 \left(r \sqrt{\frac{\alpha}{a^2} \beta + \beta^2} \right) \quad (1-4-8)$$

De la segunda condición de frontera se obtiene la siguiente ecuación:

$$J_0 \left(R \sqrt{\frac{a^2}{\alpha} \beta + \beta^2} \right) = 0$$

$$J_0(s_n) = 0$$

Donde “s_n” son las raíces de la función Bessel de primer tipo de orden cero

$$R \sqrt{\frac{\alpha}{a^2} \beta_n + \beta_n^2} = s_n$$

Reescribiendo la ecuación

$$\beta_n^2 + \frac{\alpha}{a^2} \beta_n - \frac{s_n^2}{R^2} = 0 \quad (1-4-9)$$

La ecuación 1-4-9 tiene un número infinito de raíces, al igual que el número de raíces de la función Bessel.

Si la variable “β” se hace adimensional al multiplicarla por la longitud de la tubería se encuentra que:

$$(\beta_n L)^2 + \frac{\alpha L^2}{a^2} \beta_n - \left(\frac{L s_n}{R} \right)^2 = 0$$

Donde “L” es la longitud del tubo

$$b_n^2 + \frac{\alpha L}{a^2} b_n - \left(\frac{L s_n}{R} \right)^2 = 0; b = L \beta \quad (1-4-10)$$

Despejando “b_n”

$$b = \frac{-\left[\frac{\alpha L}{a^2} \right] + \sqrt{\left[\frac{\alpha L}{a^2} \right]^2 + 4 \left(\frac{L s_n}{R} \right)^2}}{2} \quad (1-4-11)$$

La solución de “b” siempre tiene que ser positiva. Si se observa la ecuación 1-4-6 la exponencial positiva hace que diverja la solución, por ello solo se toma un valor de cada solución.

El término adimensional que se encuentra entre corchetes en la ecuación 1-4-11 es conocido como el número de Graetz. Éste determina si se transfiere la energía por convección o por difusión dentro del sistema. Si predomina la difusión en número de Graetz es pequeño, pero si predomina la convección el número de Graetz es grande.

Si las propiedades físicas se mantienen constantes, se alcanza un punto donde el valor de “ $s_n L/R$ ” es más pequeño que el número de Graetz, entonces se puede llegar al siguiente valor aproximado de “ b ” si se elimina el término cuadrático en 1-4-10:

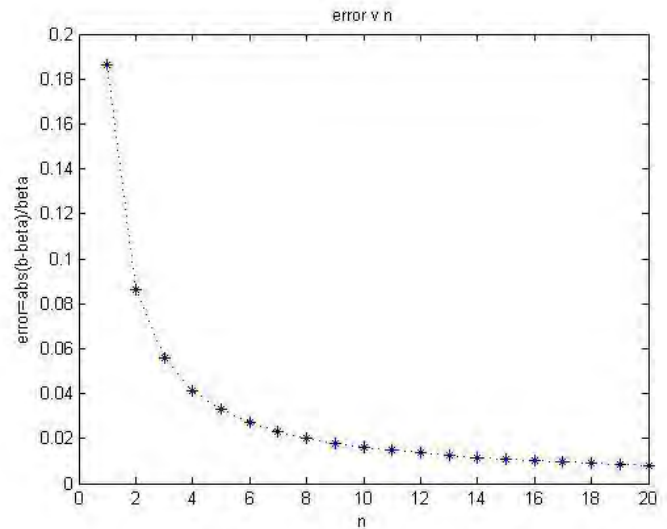


Figura 1-4-2

$$(1-4-12)$$

$$b_n = \left(\frac{Ls_n}{R}\right)^2 \frac{1}{Gz}$$

Graficando los valores se encuentra que esta aproximación es válida a partir del sexto valor de las raíces “ b_n ” donde se obtiene un error del ~2%. Como se muestra en la Figura 1-4-2.

Incorporando la solución aproximada en 1-4-14, y reescribiendo la solución de “ u ” como una suma de funciones:

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \exp\left[-\left(\frac{Ls_n}{R}\right)^2 \frac{1}{LGz} z\right] J_0\left(s_n \frac{r}{R}\right) \quad (1-4-13)$$

Para obtener las constantes A_n de la suma. Se tiene que utilizar la propiedad de ortogonalidad de la función Bessel y la primera condición de frontera, obteniendo:

$$u(0, r) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n J_0\left(s_n \frac{r}{R}\right) = u_1 \quad (1-4-14)$$

$$A_n = u_1 \frac{\int_0^R r J_0\left(s_n \frac{r}{R}\right) dr}{\int_0^R r \left[J_0\left(s_n \frac{r}{R}\right)\right]^2 dr}$$

Al resolver las integrales en 1-4-14, se calculan todos los valores de A_n . Recordando propiedades de la función Bessel, [8]

$$\int_0^z t [J_0(t)]^2 dt = \frac{z^2}{2} (J_0(z)^2 + J_1(z)^2) \quad (1-4-15)$$

$$\int_0^z t J_0(t) dt = z J_1(z) \quad (1-4-16)$$

$$-\frac{dJ_0(t)}{dt} = J_1(t) \quad (1-4-17)$$

se simplifica a:

$$A_n = -\frac{2u_1}{s_n} \left[\frac{1}{J'_0(s_n)} \right] \quad (1-4-18)$$

Obteniendo así la solución:

$$\frac{u(r, z)}{u_1} = \sum_{n=0}^{\infty} -\frac{2}{s_n} \left[\frac{1}{J'_0(s_n)} \right] \exp \left[-\left(\frac{L s_n}{R} \right)^2 \frac{1}{Gz} \left(\frac{z}{L} \right) \right] J_0 \left(s_n \frac{r}{R} \right) \quad (1-4-19)$$

La solución es válida solamente cuando se tiene la misma velocidad en todo el tubo. Lo cual implica altas velocidades dentro del mismo. Si se tuviese una velocidad que se comportara conforme a la ley de Poiseuille, es decir si se tuviese un campo de velocidades en la tubería, se tendría **el problema extendido de Graetz**, el cual es la base del presente trabajo.

Pero a diferencia del problema original, en la metodología empleada se basa en la transferencia de masa. La cual con ciertas consideraciones puede llegarse a las mismas ecuaciones.

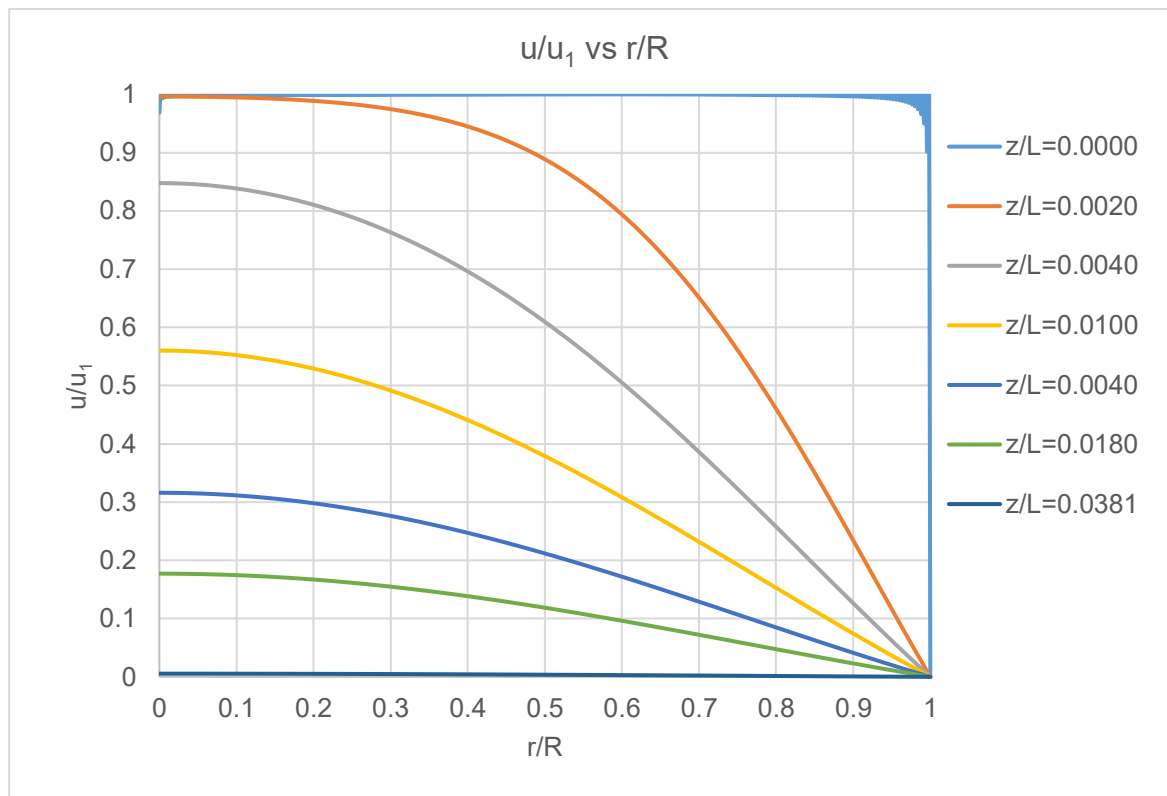


Figura 1-4-3 Curvas de nivel para u/u_1

El problema de Graetz extendido consiste en insertar un perfil de velocidades a las ecuaciones de conservación. Observando la ecuación 1-4-4 y los resultados de la Figura 1-4-3 podemos asumir que la mayor parte de la difusión está dada por la parte radial, así mismo la transferencia de energía se da prioritariamente en las contribuciones axiales. Por ello se reduce la ecuación 1-4-4 a la siguiente expresión:

$$\rho \widehat{C}_p \left(v_z \frac{\partial u}{\partial z} \right) = k \left[\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right] \quad (1-4-20)$$

Asumiendo un perfil de velocidades “ v_z ”

$$v_z = 2\alpha \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (1-4-21)$$

$$\rho \widehat{C}_p \left(2\alpha \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \frac{\partial u}{\partial z} \right) = k \left[\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} \right] \quad (1-4-22)$$

Para resolver la ecuación 1-4-22, se propone la siguiente solución [7],

$$u = A \exp \left(-\frac{a^2}{2\alpha} \beta^2 z \right) V(r) \quad (1-4-23)$$

Sustituyendo 1-4-23 en 1-4-22 y simplificando la expresión se obtiene:

$$\frac{d^2 V}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} + \beta^2 \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] V = 0 \quad (1-4-22)$$

Haciendo un cambio de variable con “ r ” y las raíces de la función “ V ”

$$\frac{d^2 V}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial V}{\partial x} + \left[1 - \left(\frac{x}{\mu} \right)^2 \right] V = 0; \beta r = x; R\beta = \mu \quad (1-4-23)$$

Para resolver la ecuación 1-4-23, se utiliza el método de Frobenius [10] con una función “ V ” de la siguiente forma

$$V(x) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k x^{k+r} \quad (1-4-24)$$

Con esta solución se llega a las siguientes conclusiones

$$C_3 = -\frac{C_1}{4}; C_0 = -C_2; r = -1$$

Y la relación de recurrencia queda como

$$C_{k+4} = \frac{C_k}{\mu^2(k+3)^2} - \frac{C_{k+2}}{(k+3)^2}$$

Sin perder generalidad, se asume que $C_0=0$ y que $C_1=1$. Sabiendo esto, se puede hacer una aproximación a n términos de la ecuación 1-4-23

$$V(x) = 1 - \frac{x^2}{4} + \left(\frac{2^2}{\mu^2} + 1\right) \frac{x^4}{(2 \cdot 4)^2} - \left(\frac{2^2 + 4^2}{\mu^2} + 1\right) \frac{x^6}{(2 \cdot 4 \cdot 6)^2} + \dots \quad (1-4-25)$$

Utilizando una de las condiciones de frontera, se pueden calcular los valores de las constantes " μ ". Para obtener la función " V " completa,

$$u(z, R) = Ae^{-\frac{a^2}{2\alpha}\beta^2 z} V(\mu_i) = 0$$

$$V(\mu_i) = 0$$

$$V(\mu_i) = 1 - \frac{12}{(2 \cdot 4)^2} \mu_i^2 + \frac{1}{(2 \cdot 4)^2} \mu_i^4 + \dots = 0 \quad (1-4-26)$$

Encontrando las raíces de la ecuación 1-4-26 se obtienen las " μ_i ".

En la Figura 1-4-4 se muestran los valores de las raíces reales. Sólo se calculan raíces hasta -3.4. Esto es debido a que en la exponencial de la solución 1-4-23, " μ " se encuentra elevada al cuadrado y resultaría un valor muy bajo en la solución general de u .

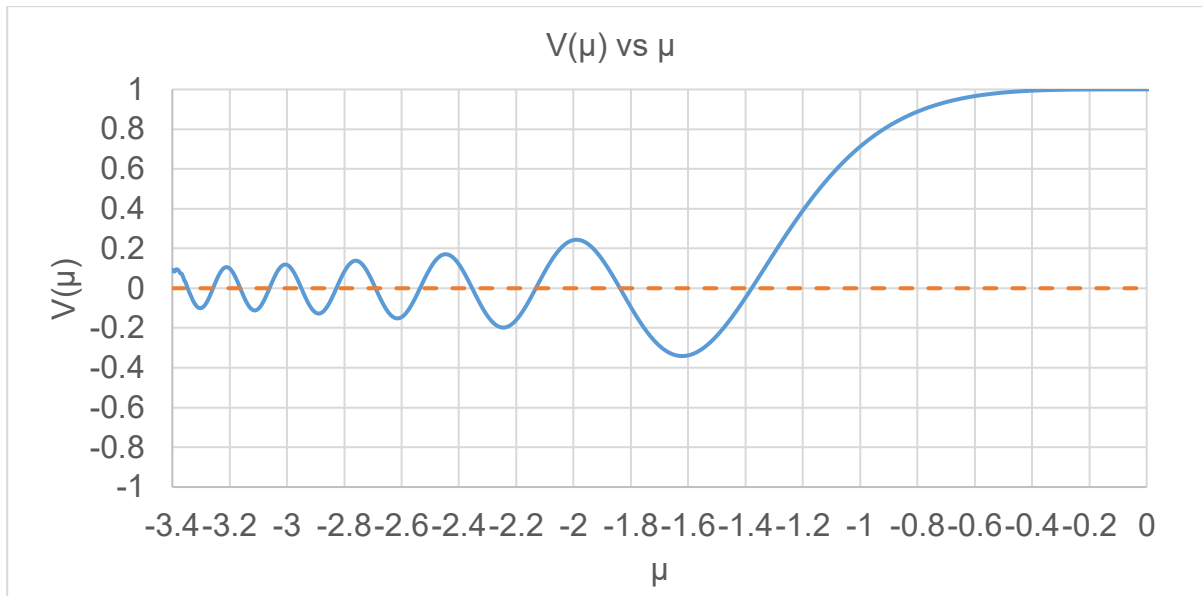


Figura 1-4-4 Valores obtenidos de " μ " aproximado al término $i=270$, donde ya no se tienen variaciones.

Finalmente se toma la primera condición de frontera para obtener la constante " A ".

$$u(0, r) = \sum_{i=0}^{\infty} A_i \cdot V\left(\mu_i \frac{r}{R}\right) = u_1 \quad (1-4-27)$$

A la ecuación 1-4-27 se le aplica la condición de ortogonalidad para encontrar los valores de "A_i"

$$A_i = u_1 \frac{\int_0^R r \cdot V\left(\mu_i \frac{r}{R}\right) dr}{\int_0^R r \cdot \left[V\left(\mu_i \frac{r}{R}\right)\right]^2 dr} \quad (1-4-27)$$

Obteniendo así la ecuación final

$$\frac{u(z, r)}{u_1} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\int_0^R r \cdot V\left(\mu_i \frac{r}{R}\right) dr}{\int_0^R r \cdot \left[V\left(\mu_i \frac{r}{R}\right)\right]^2 dr} \cdot \exp\left[-\frac{\mu_i^2}{2Gz} \left(\frac{L}{R}\right)^2 \left(\frac{z}{L}\right)\right] \cdot V\left(\mu_i \frac{r}{R}\right) \quad (1-4-27)$$

5 Problema de Sturm-Liouville

El problema extendido de Graetz tiene una solución de tipo ortogonal, que cualquiera de sus variantes podría caer en un caso de Sturm-Liouville. Es por ello que se debe tomar en cuenta la solución del mismo [10]. Suponiendo que se tiene una ecuación diferencial ordinaria de la forma

$$\frac{d}{dx}[r(x)\dot{y}] + [q(x) + \lambda p(x)]y = 0 \quad (1-5-1)$$

Continua y derivable en todo el intervalo [a, b], sujeta a:

$$A_1 y(a) + B_1 \dot{y}(a) = 0 \quad (1-5-2)$$

$$A_2 y(b) + B_2 \dot{y}(b) = 0 \quad (1-5-3)$$

Se dice entonces que los coeficientes de las condiciones a la frontera son dependientes de λ . Sin embargo la solución de los coeficientes no es tan importante como saber los valores de λ , valores propios, que son necesarios para la resolución de la ecuación 1-5-1. Para un caso regular de Sturm-Liouville se tienen las siguientes propiedades de los valores λ .

1. Se tiene un número infinito de valores que se pueden acomodar en orden creciente.
2. Para cada uno de estos valores propios se tiene una y solo una función propia.
3. Las funciones propias son linealmente independientes.
4. El conjunto de funciones propias son ortogonales con respecto a las funciones peso $p(x)$ en el intervalo [a, b].

Probando las propiedades anteriores se tiene que

$$\frac{d}{dx}[r(x)y_n] + [q(x) + \lambda_n p(x)]y_n = 0 \quad (1-5-4)$$

$$\frac{d}{dx}[r(x)y_m] + [q(x) + \lambda_m p(x)]y_m = 0 \quad (1-5-5)$$

Aplicando el método de suma resta para encontrar y_n y y_m

$$y_m \frac{d}{dx}[r(x)y_n] - y_n \frac{d}{dx}[r(x)y_m] = (\lambda_m - \lambda_n)p(x)y_n y_m \quad (1-5-6)$$

Integrando sobre el intervalo por partes

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b p(x)y_n y_m dx = \int_a^b \left[y_m \frac{d}{dx}[r(x)y_n] - y_n \frac{d}{dx}[r(x)y_m] \right] dx$$

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b p(x)y_n y_m dx = \int_a^b y_m \frac{d}{dx}[r(x)y_n] dx - \int_a^b y_n \frac{d}{dx}[r(x)y_m] dx$$

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b p(x)y_n y_m dx = r(x)[y_m y_n - y_n y_m]_a^b - \left[\int_a^b \left[r(x)y_n \frac{d}{dx}[y_m] - r(x)y_m \frac{d}{dx}[y_n] \right] dx \right]$$

$$(\lambda_m - \lambda_n) \int_a^b p(x)y_n y_m dx = r(x)[y_m y_n - y_n y_m]_a^b \quad (1-5-7)$$

Usando las condiciones a la frontera 1-5-2

$$\int_a^b p(x)y_n y_m dx = 0 \quad (1-5-8)$$

Siempre y cuando “n” no sea igual a “m”.

Esta propiedad ya es muy conocida en problemas de transferencia de energía y masa. Pero la aplicación inmediata está en la expansión ortogonal de dos funciones para la solución de una ecuación diferencial parcial. Y para ello es necesario aplicar la condición de 1-5-7 y encontrar los coeficientes de la expansión.

En los trabajos mencionados [11,12] es un poco más sencillo obtener las constantes si se considera a la función “y”, de la expresión 1-5-1, como una función de “x” y de “λ”.

Suponiendo que se tiene una solución de la forma:

$$F(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n z_n(t) y_n(x) \quad (1-5-9)$$

Con la condición inicial

$$F(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n y_n(x) \quad (1-5-10)$$

Se puede aplicar la condición ortogonal para encontrar S_n

$$\int_a^b S_n y_n^2(x) p(x) dx = \int_a^b y_n(x) p(x) dx$$

$$S_n = \frac{\int_a^b y_n(x) p(x) dx}{\int_a^b y_n^2(x) p(x) dx} \quad (1-5-11)$$

Para una $q(x)=0$, de la ecuación 1-5-4 se obtiene:

$$\int_a^b \lambda_n p(x) y_n dx = - \int_a^b d[r(x) y_n]$$

$$\int_a^b \lambda_n p(x) y_n dx = - r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \Big|_a^b \quad (1-5-12)$$

Para la segunda integral se necesita usar integración por partes y derivar respecto al valor propio

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_n} \left\{ y_n \frac{d}{dx} [r(x) y_n] + \lambda_n p(x) y_n^2 \right\} = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_n} \left\{ y_n \frac{d}{dx} [r(x) y_n] \right\} + p(x) y_n^2 + 2 \lambda_n p(x) y_n \frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} = 0$$

$$\int_a^b p(x) y_n^2 dx = - \int_a^b \left(2 \lambda_n p(x) y_n \frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} + \frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} \frac{d}{dx} [r(x) y_n] + y_n \frac{d}{dx} \left[r(x) \frac{\partial^2 y_n}{\partial \lambda_n \partial x} \right] \right) dx$$

Primero se integra el término en rojo por partes

$$\int_a^b 2 \lambda_n p(x) y_n \frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} dx = 2 \left\{ - \left[r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \right] \left[\frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} \right] \Big|_a^b + \int_a^b r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \frac{\partial^2 y_n}{\partial \lambda_n \partial x} dx \right\} \quad (1-5-13)$$

$$\int_a^b \left(\frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} \frac{d}{dx} [r(x) y_n] \right) dx = \left[r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \right] \left[\frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} \right] \Big|_a^b - \int_a^b r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \frac{\partial^2 y_n}{\partial \lambda_n \partial x} dx \quad (1-5-14)$$

$$\int_a^b y_n \frac{d}{dx} \left[r(x) \frac{\partial^2 y_n}{\partial \lambda_n \partial x} \right] dx = \left[r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \right] [y_n] \Big|_a^b - \int_a^b r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \frac{\partial^2 y_n}{\partial \lambda_n \partial x} dx \quad (1-5-15)$$

Si se tiene la solución trivial en las fronteras, $y(a)=0$, $y(b)=0$, $y'(a)=0$

$$\int_a^b p(x) y_n^2 dx = \left[r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \right] \left[\frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} \right] \Big|_b$$

$$S_n = \frac{1}{\lambda_n} \frac{-r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \Big|_b}{\left[r(x) \frac{dy_n(x)}{dx} \right] \left[\frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} \right] \Big|_b}$$

$$S_n = \frac{-1}{\lambda_n \left[\frac{\partial y_n}{\partial \lambda_n} \right] \Big|_b} \quad (1-5-11)$$

Las soluciones antes mencionadas son necesarias para la metodología que se empleará en el siguiente capítulo, donde se resolverá el problema extendido de Graetz con una geometría distinta mediante el uso de expansiones ortogonales. Los resultados obtenidos en esta sección también servirán como punto de comparación para saber si el modelo se comporta como en el problema original y tener así una guía que nos permita aceptar las soluciones que se obtengan.

Referencias:

- [1] Khayet, M. Matsuura, T. *Membrane Distillation Principles and Applications*. Elsevier. **2011**
- [2] Seader, J.D. Healy, E. J. *Separation Process Principles*. Wiley. EEUU. **2006**
- [3] Ho, W.S. Sirkar, K. *Membrane Handbook*. Springer. New York. **1992**
- [4] Baker, R. W. *Membrane Separation Systems*. **1991**.
- [5] Poynting, J. H. *Radiation-pressure*. Philosophical Magazine. 9. **1905**. 393-406
- [6] Wesslein, M., et al, *J. Membrane Sci.*, **51**, 169. 1990.
- [7] Graetz, L. *Ann. Phys. Chem.*, **18**, 79–94. 1885
- [8] M. Abramowitz, I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, NY, 1970
- [9] Eckert, E.R. Drake, R. *Analysis of Heat and Mass Transfer*. Hemisphere, NY, 1982
- [10] Warren S., Zill, D. *Advanced Engineering Mathematics*. Jones & Bartlett 5th. 2013.
- [11] Singh, S.N. The Determination of Eigen-functions of a certain Sturm-Liouville Equation and its application to problems of Heat-Transfer. *Appl. Sci. Res. A* (7). **1970**. 237-250.
- [12] Sellars, J.R., M. Tribus, and J.S. Klein. "Heat transfer to laminar flow in a round tube or flat conduit—The Graetz problem extended". *Trans. Am. Soc. Mech. Engrs.*, **78**, 441 (1956).

Nomenclatura de símbolos:

T	Temperatura
R	Constante de Gas ideal
β	Valor propio en 1-4-7
p	Presión
J	Flux de Masa
P	Subíndice: Permeado Permeabilidad
i	Subíndice: Componente o Término "i"-ésimo.
L	Longitud axial
μ	Potencial químico en la ecuación 1-3-1. Raíces de la ecuación 1-4-26
K	Coefficiente de repartición Fracción mol
x	Variable muda en la ecuación 1-4-23 Fugacidad
f	Subíndice: alimentación
a	Actividad
π	Presión Osmótica
γ	Coefficiente de actividad
v_L	Volumen molar
C	Concentración Constantes de la expansión en 1-4-24
t	Tiempo
N	Flux molar
k	Conductividad térmica
Gz	Número de Graetz
A	Constante
s	Raíces de la función Bessel de Orden cero
D	Difusión
q	Flux de calor
R	Radio
ρ	Densidad
a^2	Coefficiente de difusión de energía
C_p	Capacidad calorífica
v	Velocidad
z	Longitud axial
τ	Tensor de esfuerzos
α	Velocidad Promedio
W	Subíndice: Propiedad en el muro
u	Temperatura Promedio
V	Función radial para la temperatura promedio

1 Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es obtener un modelo matemático que pueda predecir las concentraciones a la salida de diferentes intercambiadores de masa. Además de obtener un arreglo óptimo, mediante la inclusión de pasos dentro del equipo y de varios reflujos, comparando su efectividad con el problema de Graetz extendido como referencia (caso base).

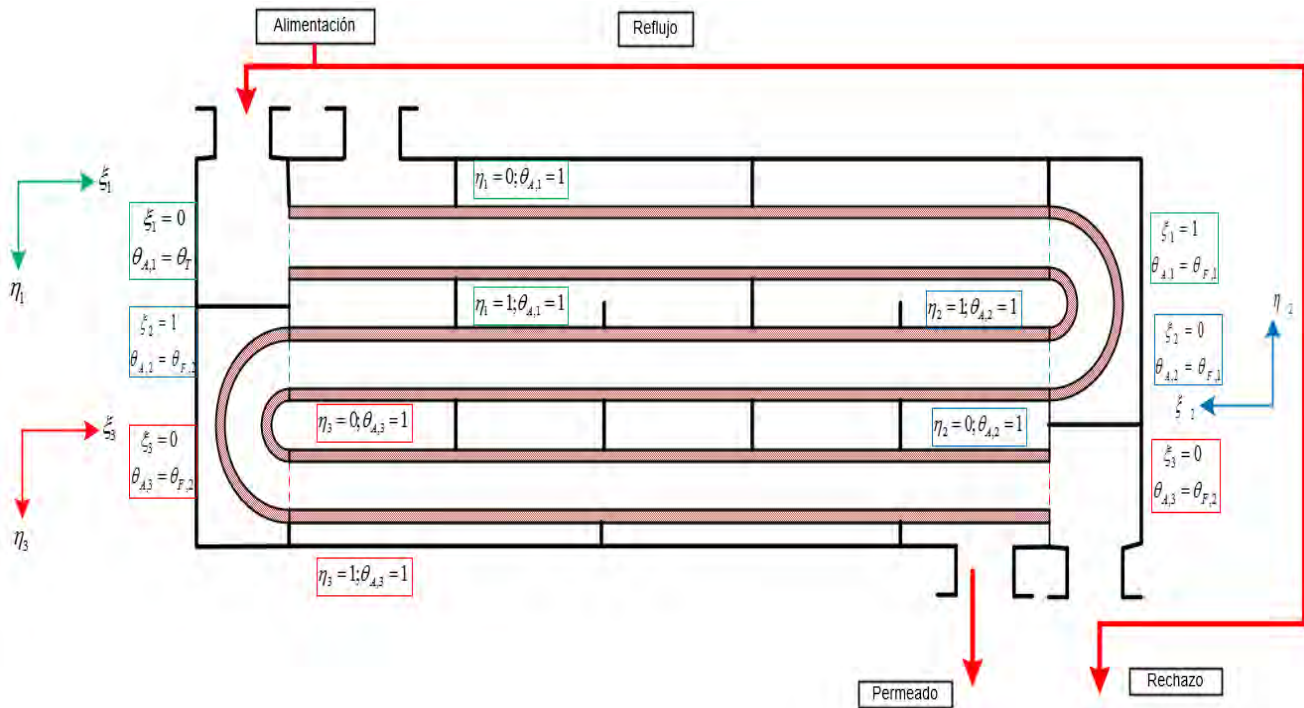


Figura 2-1-1. Intercambiador de masa propuesto

El equipo propuesto por el Dr. Chávez, mostrado en la Figura 2-1-1, es el que se analizará más a fondo, comparándolo con diferentes propuestas de distintos autores en la literatura [1-4].

Los equipos de proceso se ven beneficiados por la recirculación de sus corrientes de salida, los ejemplos más comunes son: columnas de destilación, reactores catalíticos, absorbedores de gas, filtros, entre otros. El reflujo es un factor muy importante que se debe considerar en el diseño de los equipos antes mencionados [1]. Es por ello que en la propuesta dada se han incluido los reflujos (flechas en rojo).

En este capítulo se plantean: las soluciones obtenidas para el modelo matemático de los intercambiadores de masa, y también relacionar la eficiencia, comparaciones para la concentración de salida con la de superficie, con en el número de pasos y los reflujos insertados.

La eficiencia se evaluará como la concentración a la salida de un intercambiador de masa a las mismas condiciones de velocidad y dimensiones con respecto al caso base. Si la concentración de salida tiene un valor más cercano a la de superficie que la del caso base, se considera que ese intercambiador de masa es más eficiente.

2 Metodología

Caso Base

La efectividad de la propuesta dada solo se puede verificar comparando con otros arreglos. Por ello se debe plantear primeramente el caso base, y a partir de este se incluyen pasos y reflujos hasta llegar al intercambiador de masa deseado. Con una referencia bien establecida se puede tener un estudio más completo de la eficiencia de los equipos. [1]

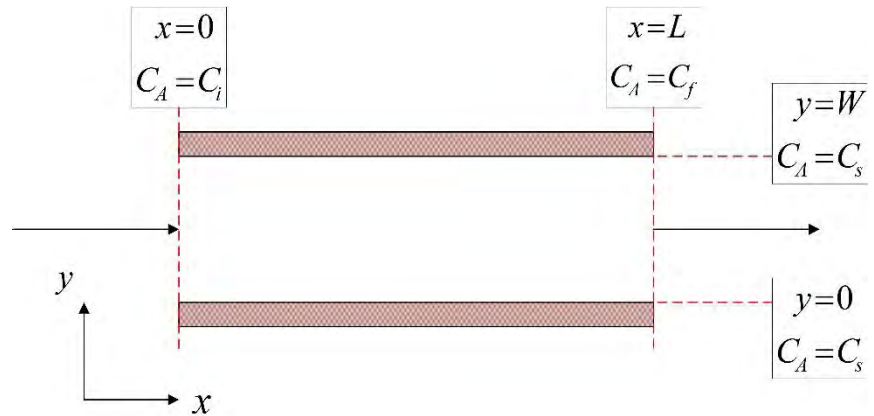


Figura 2-2-1. Caso Base.

El caso base se muestra en la Figura 2-2-1, este es el problema extendido de Graetz ya discutido en el capítulo anterior. Para modelarlo se utiliza la ecuación de conservación de masa:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + v_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + v_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right) + r \quad (2-2-1)$$

Y se hacen las siguientes consideraciones:

- La geometría es cartesiana (rectangular)
- Velocidad solo en “x”
- El perfil de velocidad está completamente desarrollado
- Las propiedades físicas son constantes
- No hay reacción química
- La masa se transfiere tanto por difusión como por convección
- La pared es permeable solamente a la especie de interés “A”
- No hay contribuciones por parte del eje “z”
- Régimen permanente

Lo que da como resultado:

$$v_x(y) \frac{\partial C_A}{\partial x} = D \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} \right) \quad (2-2-2)$$

Se puede simplificar la ecuación 2-2-2, si se considera que la masa se difunde más en dirección radial que en dirección axial, en otras palabras

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \ll \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2}$$

$$v_x(y) \frac{\partial C_A(x, y)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C_A(x, y)}{\partial y^2} \quad (2-2-3)$$

Con las condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} \text{CF1: } & x = 0 \quad \forall y \in [0, W], C_A = C_i \\ \text{CF2: } & y = 0 \quad \forall x \in [0, L], C_A = C_s \\ \text{CF3: } & y = W \quad \forall x \in [0, L], C_A = C_s \end{aligned}$$

Analizando físicamente la ecuación 2-2-3 se puede observar, que del lado derecho se tiene la transferencia por difusión contribuida por la parte “radial” y a la izquierda la transferencia por convección dado por la parte axial. Esto indica que ambos procesos de transferencia son necesarios para modelar el proceso completo, como se explica en el problema extendido de Graetz.

La ecuación 2-2-3 es el modelo que describe el problema base y se seguirá un procedimiento similar a los reportados en la literatura [1-3] para su resolución.

Primeramente, se adimensionaliza la ecuación 2-2-3 con las siguientes definiciones. Asumiendo una concentración de superficie (C_s) constante.

$$\eta = \frac{y}{W}; \xi = \frac{x}{L}; \gamma = \frac{z}{B}; \psi_A = \frac{C_A - C_s}{C_i - C_s}; u = \frac{v_x(y)}{\bar{v}} \quad (2-2-3.1)$$

$$\left\{ \frac{VW}{DLB} \right\} u \frac{\partial \psi_A(\eta, \xi)}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \psi_A(\eta, \xi)}{\partial \eta^2} \quad (2-2-4)$$

Con las condiciones de frontera:

$$\begin{aligned} \text{CF1: } & \xi = 0 \quad \forall \eta \in [0, 1], \psi_A = 1 \\ \text{CF2: } & \eta = 0 \quad \forall \xi \in [0, 1], \psi_A = 0 \\ \text{CF3: } & \eta = 1 \quad \forall \xi \in [0, 1], \psi_A = 0 \end{aligned}$$

Con la adimensionalización se observa un cociente similar al número de Graetz, pero en lugar de tener difusión de energía se tiene de masa, por ello se le agrega el subíndice “m”. También se puede expandir y expresar el cociente de otras formas,

$$Gz_m = \frac{VW}{DLB} = \frac{D_H}{L} ReSc = \frac{W}{L} \left(\frac{\bar{v}\rho W}{\mu} \right) \left(\frac{\mu}{\rho D_H} \right) \quad (2-2-5)$$

Las relaciones en 2-2-5 son importantes porque del número de Graetz masa va a contener toda la información física del sistema, o sea la competencia de los dos procesos de transferencia de masa.

Para la resolución se utiliza una solución en expansión ortogonal en forma de separación de variables:

$$\psi_A(\eta, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n H_n(\eta) E_n(\xi) \quad (2-2-6)$$

Sustituyendo 2-2-6 en 2-2-4 se obtienen las ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\frac{d^2 H_n(\eta)}{d\eta^2} - \lambda_n 6[\eta - \eta^2] Gz_m H_n(\eta) = 0 \quad (2-2-7)$$

$$\frac{d\Xi_n(\xi)}{d\xi} - \lambda_n \Xi_n(\xi) = 0 \quad (2-2-8)$$

Sencillamente se puede resolver la ecuación 2-2-8, integrando directamente la ecuación:

$$\Xi_n(\xi) = \exp(\lambda_n \xi) \quad (2-2-9)$$

Desafortunadamente no es el caso para la ecuación 2-2-7. Para resolverlo se propone una solución en forma de expansión en series de potencias

$$H_n(\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k,n} \eta^k \quad (2-2-10)$$

Sustituyendo 2-2-10 en 2-2-7 se llega a la siguiente relación de recurrencia:

$$a_{k,n} = \frac{6Gz_m}{k(k-1)} \lambda_n [a_{(k-3),n} - a_{(k-4),n}] \quad (2-2-11)$$

Con la expresión 2-2-11 se pueden calcular las constantes de la serie conociendo los valores de los valores propios λ_n . Sin perder generalidad [3] se puede asumir los valores para $a_{1,n}=0$ y $a_{0,n}=1$, y con las condiciones de frontera se puede encontrar una expresión la cual permita obtener λ_n .

$$H_n(1, Gz_m, \lambda_n) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k,n} = 0 \quad (2-2-12)$$

La ecuación anterior se utiliza en mucho en la literatura mencionada [4, 5, 6], sin embargo está limitada por el número de términos que se considere para la serie. En la Figura 2-2-2 se encuentran graficados los valores obtenidos a $k=300$.

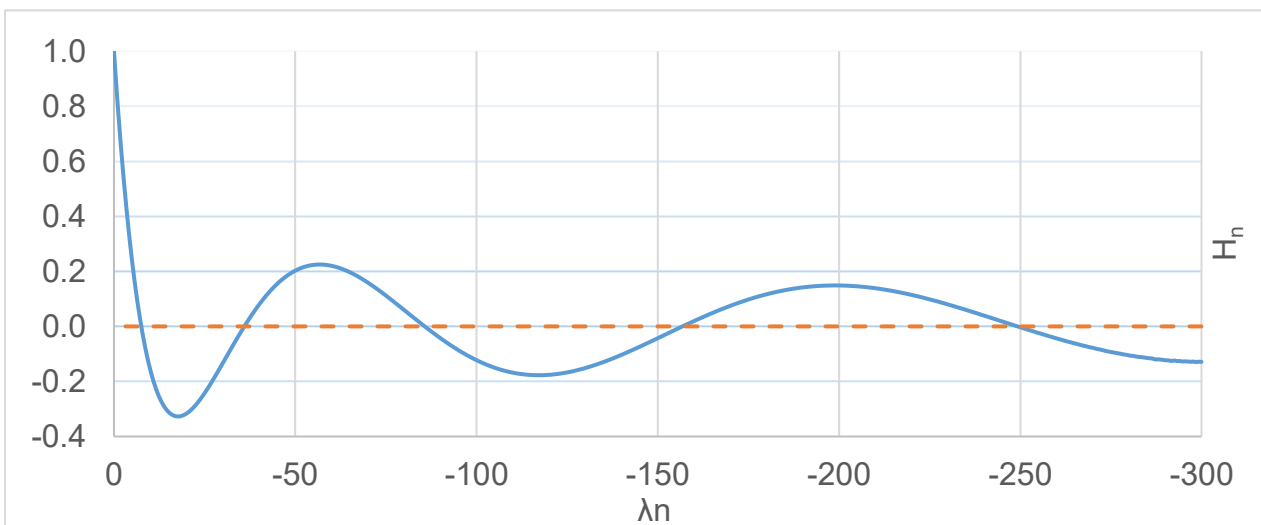


Figura 2-2-2. Valores de λ_n

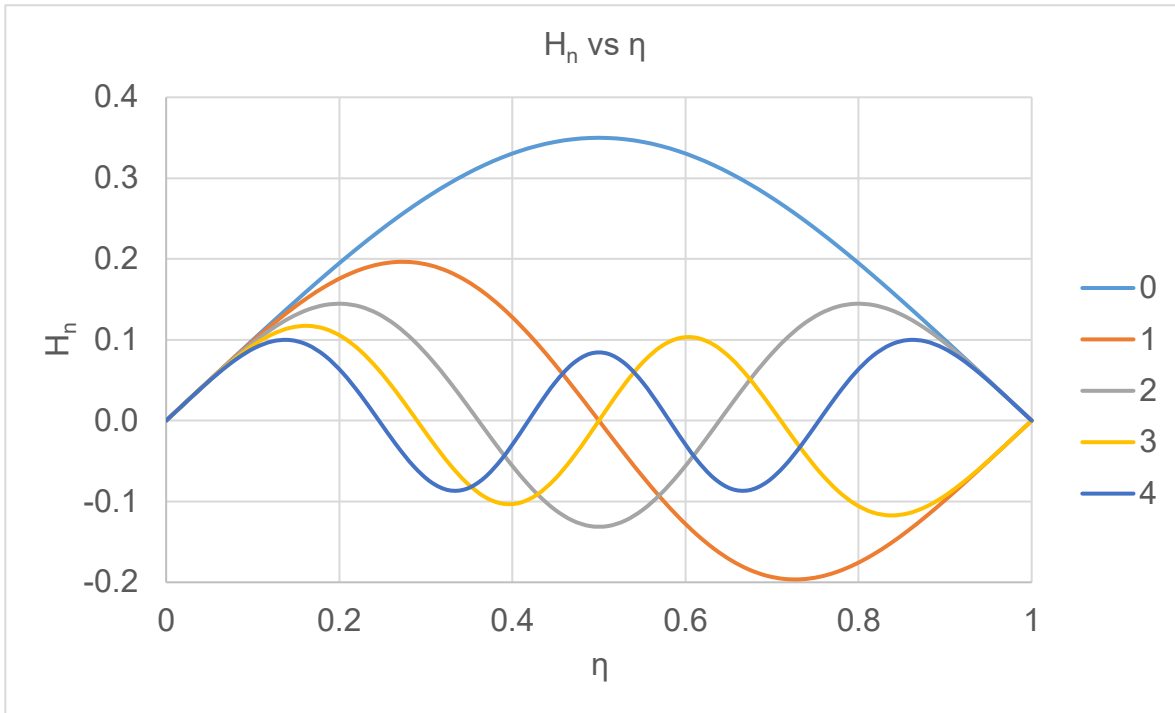


Figura 2-2-3. Curvas solución de H_n

Con esta información ya se puede completar las funciones propias H_n que se muestran en la Figura 2-2-3, desde H_0 hasta H_4 . Para obtener la concentración a la salida del equipo es necesario obtener las constantes S_n . Para esto se usa la condición de frontera y la propiedad de ortogonalidad [7,8] de las funciones propias H_n . Es decir:

$$\psi_A(\eta, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} S_n H_n(\eta, Gz_m, \lambda_n) = 1$$

$$\int_0^1 \sum_{n=0}^{\infty} S_n u H_n H_m d\eta = \int_0^1 u H_m d\eta$$

$$S_n = \frac{\int_0^1 u H_n d\eta}{\int_0^1 u H_n^2 d\eta} \quad (2-2-13)$$

Sustituyendo 2-2-13 en 2-2-6 se obtiene la expresión para la concentración adimensional

$$\psi_A(\eta, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\int_0^1 u H_n d\eta}{\int_0^1 u H_n^2 d\eta} \exp(\lambda_n \xi) H_n(\eta) \quad (2-2-14)$$

Como se obtiene un perfil de concentraciones a la salida, no se puede tener un valor puntual de ψ_A . Por ello se toma un promedio de flujo para obtener una concentración de bulto a la salida del equipo, definido de la siguiente forma:

$$\bar{\psi}_A(\xi) = \frac{\int_0^1 \int_0^1 u \psi_A(\eta, \xi) d\eta d\gamma}{\int_0^1 \int_0^1 u d\eta d\gamma} \quad (2-2-15)$$

Simplificando:

$$\theta(\xi) = 1 - \bar{\psi}_A(\xi) = 1 + \int_1^0 u \psi_A(\eta, \xi) d\eta \quad (2-2-16)$$

Evaluando a distintos números de Gz_m obtenemos la gráfica, mostrada en la Figura 2-2-4

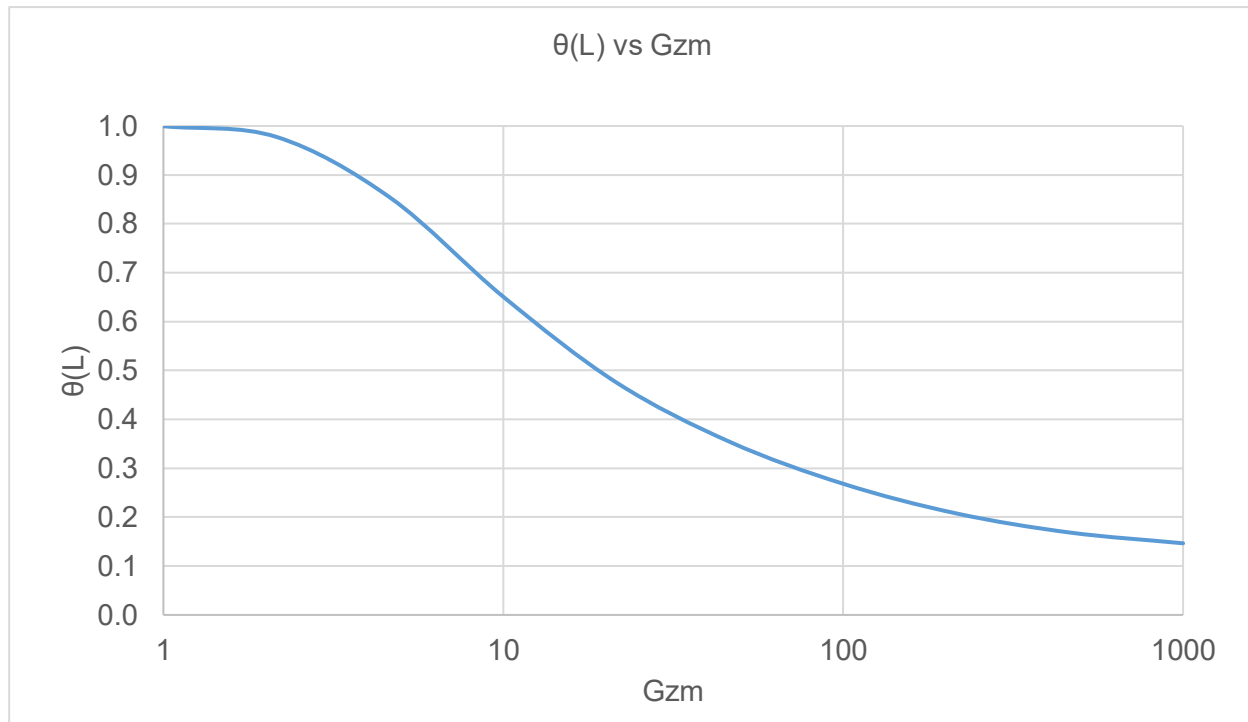


Figura 2-2-4. Concentraciones a la salida a diferentes Gz_m

Esta solución se utilizará como comparación para el resto de los cálculos, como ya se había mencionado en los objetivos del presente trabajo.

En primera instancia se puede apreciar que a valores del orden de uno (1-9) de Gz_m la concentración promedio a la salida del equipo (C_f) es similar a la concentración de la superficie (C_s). Recordando que la definición de Gz_m es una comparación de la transferencia por convección y difusión. A bajos valores de Gz_m se tiene una contribución mayoritariamente por difusión, el equivalente físico sería a que se tuviese a ambos fluidos en reposo separados por la membrana y dejarlos por un tiempo muy largo hasta que se alcance el equilibrio entre la concentración de superficie y la promedio (bulto) como se muestra en el proceso de diálisis y presión osmótica del capítulo anterior. A altos valores de Gz_m se tiene una concentración promedio de salida similar a la de entrada indicando que no se realizó el proceso de transferencia. Esto se debe a que se tienen altos valores de flujo (velocidad media) dentro del equipo y no tiene suficiente tiempo para interactuar con la membrana y por lo tanto no se transfiere masa.

Transferencia interfacial

En ingeniería de calor es muy útil calcular el número de Nusselt para el diseño de los intercambiadores. Este número nos indica cuanta energía se está transfiriendo por convección hacia afuera del sistema respecto a la difusión en el bulto del fluido.

En los intercambiadores de masa se puede hacer un símil utilizando el número de Sherwood. Sabiendo que en las fronteras verticales del equipo el flux de masa tiene una concentración C_s , la cual se puede asumir como la misma del otro lado de la membrana y en toda la longitud del intercambiador de masa. Se puede decir que el flujo de la sustancia de interés se calcula de la siguiente manera:

$$\omega_p = \bar{k}_m A (C_s - C_i) \quad (2-2-17)$$

Como la concentración de bulto va cambiando a lo largo del equipo, se aproxima a un coeficiente de transferencia de masa promedio, con el gradiente de concentración de la entrada.

También se puede obtener el flujo de permeado mediante la siguiente expresión:

$$\omega_p = \int_0^B \int_0^L \left(-D \frac{\partial C_A}{\partial x} \right) dz dy = V (C_F - C_i) \quad (2-2-18)$$

Igualando 2-2-17 y 2-2-18

$$\bar{k}_m (2BL) (C_s - C_i) = V (C_F - C_i)$$

$$\bar{k}_m \left(\frac{W}{D} \right) = \frac{V}{(2BL)} \left(\frac{W}{D} \right) \frac{(C_F - C_i)}{(C_s - C_i)}$$

Usado la definición del número de Sherwood promedio

$$\bar{Sh} = \frac{\bar{k}_m}{D} W$$

$$\bar{Sh} = \frac{1}{2} \frac{VW}{DBL} [1 - \bar{\psi}_A(L)]$$

$$\bar{Sh} = \frac{1}{2} Gz_m \theta(L) \quad (2-2-19)$$

Inclusión de reflujos

Para añadir los reflujos en el sistema se tiene que hacer una suposición a la entrada del equipo. El sistema para un solo paso queda como en la Figura 2-2-5

Se puede simplificar el problema si se supone que en los nodos la concentración es uniforme (mezclado perfecto). Asumiendo esto, se puede hacer un balance de masa a la entrada del equipo de la siguiente manera considerando una densidad constante,

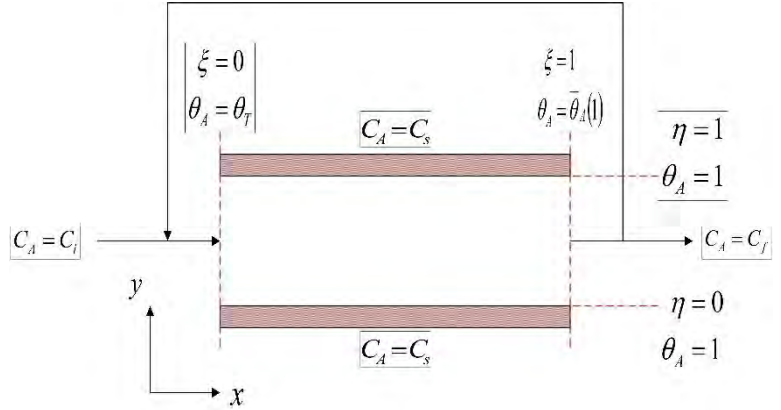


Figura 2-2-5. Intercambiador de masa de un solo paso con reflujo

$$V_T = V + V_R \quad (2-2-20)$$

Definiendo el reflujo como:

$$R = \frac{V_R}{V} \quad (2-2-21)$$

$$V_T = V(1 + R) \quad (2-2-22)$$

Haciendo el balance por componente se obtiene:

$$C_T V_T = C_i V + C_f V_R$$

$$C_T V(1 + R) = C_i V + C_f R V$$

$$C_i - C_T = \frac{R}{1 + R} (C_i - C_f) \quad (2-2-23)$$

Con el resultado anterior se puede escribir la concentración adimensional para el caso con un solo paso y un reflujo como:

$$\theta_A = \frac{C_i - C_A}{C_i - C_s} \quad (2-2-24)$$

La expresión anterior se podría obtener también de combinar las expresiones 2-2-3.1 y 2-2-16. Con ello se llega a la condición de entrada del equipo:

$$\theta_T = \frac{R}{1 + R} \left(\frac{1}{C_i - C_s} \right) \left(C_i - \frac{\int_0^B \int_0^W v_x C_A(\eta, L) dy dz}{\int_0^B \int_0^W v_x dy dz} \right)$$

$$\theta_T = \frac{R}{1+R} \left(\frac{1}{C_i - C_s} \right) \left(\frac{\int_0^B \int_0^W C_i v_{x_A} dy dz}{\int_0^B \int_0^W v_x dy dz} - \frac{\int_0^B \int_0^W v_x C_A(\eta, L) dy dz}{\int_0^B \int_0^W v_x dy dz} \right)$$

Cambiando las variables independientes por las definiciones en 2-2-3.1

$$\theta_T = \frac{R}{1+R} \left(\frac{\int_0^1 \int_0^1 u \left[\frac{C_i - C_A(\eta, L)}{C_i - C_s} \right] d\eta d\gamma}{\int_0^1 \int_0^1 u d\eta d\gamma} \right)$$

$$\theta_T = \frac{R}{1+R} \left(\frac{\int_0^1 \int_0^1 u \theta_A(\eta, 1) d\eta d\gamma}{\int_0^1 \int_0^1 u d\eta d\gamma} \right)$$

$$\theta_T = \frac{R}{1+R} \bar{\theta}_A(1) = \frac{R}{1+R} \theta_F \quad (2-2-25)$$

Ya definiendo el valor de concentración a la entrada se “ θ_T ” pueden definir las condiciones a la frontera, junto con la ayuda de la Figura 2-2-5.

$$\text{CF1: } \xi = 0 \quad \forall \eta \in [0,1], \theta_A = \theta_T$$

$$\text{CF2: } \eta = 0 \quad \forall \xi \in [0,1], \theta_A = 1$$

$$\text{CF3: } \eta = 1 \quad \forall \xi \in [0,1], \theta_A = 1$$

La dificultad del problema anterior recae en obtener las concentraciones a la salida sin conocer las concentraciones a la entrada. Si se resolviese con la metodología del caso base aumentaría más el trabajo y dificultad debido a que se tienen que obtener las constantes “ S_n ” y los vectores propios a diferentes Gz_m . Por esa razón se prefiere continuar este trabajo por métodos numéricos y no por la solución analítica con expansiones ortogonales.

La ecuación a resolver es la expresión 2-2-4, con las nuevas condiciones a la frontera e inicial. Rescribiéndola con la variable adimensional “ θ_A ”.

$$uGz_m \frac{\partial \theta_A(\eta, \xi)}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \theta_A(\eta, \xi)}{\partial \eta^2} \quad (2-2-26)$$

El problema recursivo de las condiciones iniciales se puede solucionar de la siguiente forma:

1. Suponer una concentración de entrada θ_T .
2. Resolver la ecuación diferencial parcial 2-2-26 numéricamente.
3. Calcular el valor de la concentración promedio θ_F .
4. Comparar θ_T con θ_F , utilizando la expresión 2-2-22.
5. Si es cierta se termina el problema, de lo contrario se debe suponer otro valor de θ_T . Este nuevo valor se encuentra mediante sustitución directa.

En la Figura 2-2-6 se observa el procedimiento para obtener las concentraciones de salida y resolver el caso con reflujo. Gracias a este nuevo método se puede obtener más información física y de operación del proceso, sin perderse en la resolución de las ecuaciones que lo rigen. [8,9]

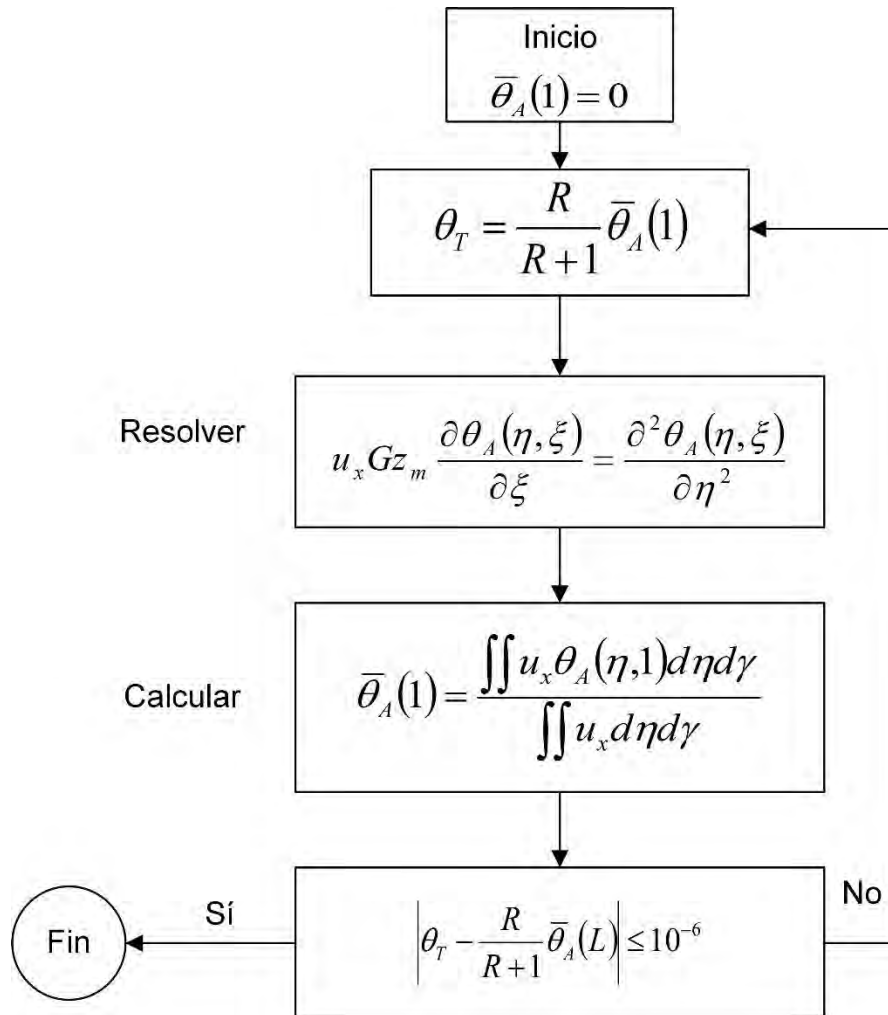


Figura 2-2-6. Procedimiento para obtener las concentraciones a la entrada

Para la suposición de los valores de θ_T se intentó con los métodos de Wegstein, Secante y Newton, pero se encontró que con sustitución directa el problema convergía en menos de 4 iteraciones. Por lo que se utilizó ese método, para éste y el resto de los casos.

Los resultados de la metodología empleada en la Figura 2-2-6, se pueden apreciar en la Figura 2-2-7. Si uno supone que el reflujo es cero, la concentración será la inicial. Esto último verifica nuestra metodología al reducirse el problema al caso base con un reflujo de cero. También cabe destacar que la concentración de entrada se aproxima al valor de superficie conforme aumenta el reflujo.

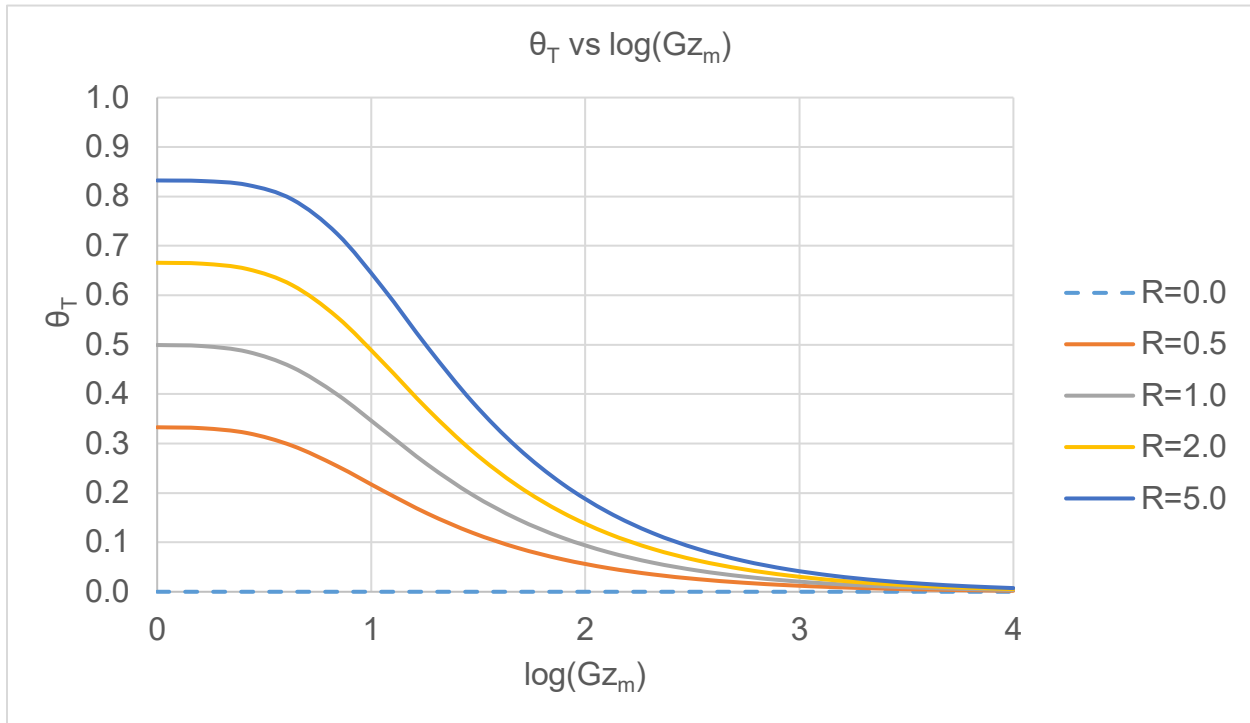


Figura 2-2-7. Concentraciones a la entrada del equipo con un solo paso

Conclusiones Parciales: Caso a un solo paso con reflujo.

Con las concentraciones de la Figura 2-2-7 se puede obtener la solución particular de la ecuación 2-2-23. Evaluando la concentración promedio a la salida como se muestra en la Figura 2-2-8, se aprecia que para el mismo número de Graetz se obtiene una concentración más cercana a la de superficie conforme aumenta el reflujo.

Se puede decir a medida que aumenta el reflujo, la concentración de entrada aumenta debido a que entra más fluido al equipo y hay un incremento en el tiempo de residencia que permite prolongar el contacto con la membrana mejoran el proceso de transferencia. Lo cual también genera mejores concentraciones a la salida.

Sin embargo a medida que aumenta el número de Graetz disminuyen las concentraciones a la entrada y salida del equipo. Lo anterior genera un conflicto de operación, entre el efecto deseable de incrementar la concentración adimensional "θ" a la entrada, y aumentar la producción del equipo (disminuir los tiempos de residencia).

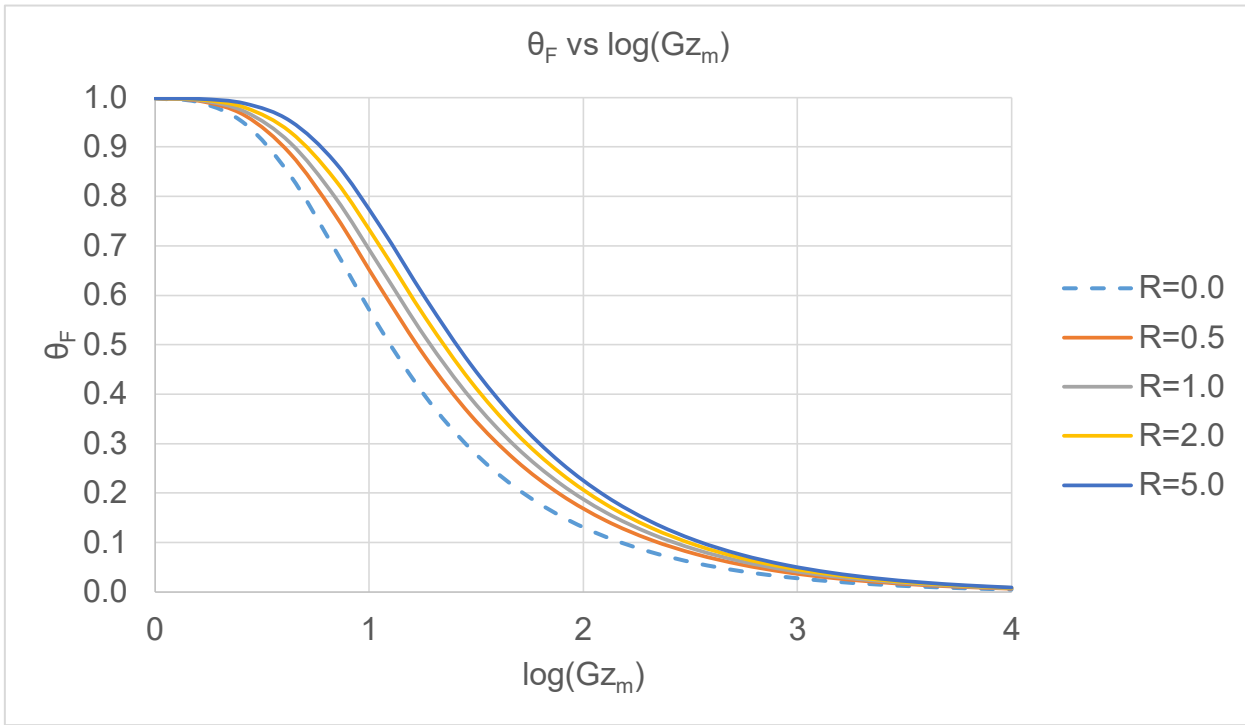


Figura 2-2-8. Concentraciones a la salida del equipo con un solo paso

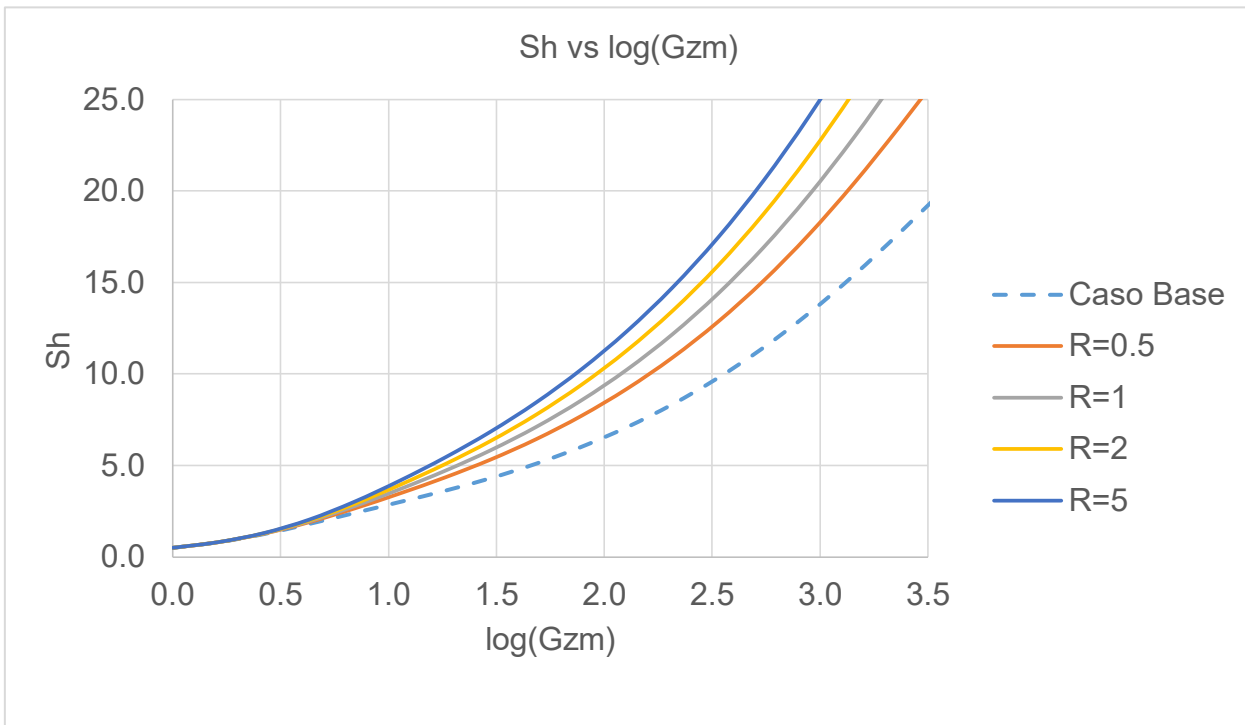


Figura 2-2-9. Sherwood a un solo paso

Inserción de pasos

Al inicio de este caso, se pensó partir de modelos ya reportados en la literatura para después realizar el modelo propuesto, sin embargo, estos modelos como se muestran en la Figura 2-2-10 carecen de contacto con la pared permeable. Esto provocaba que la transferencia de masa se redujese a la mitad, por ello se replanteó el equipo con 2 pasos con contacto en ambas paredes para realizar un análisis más eficiente.

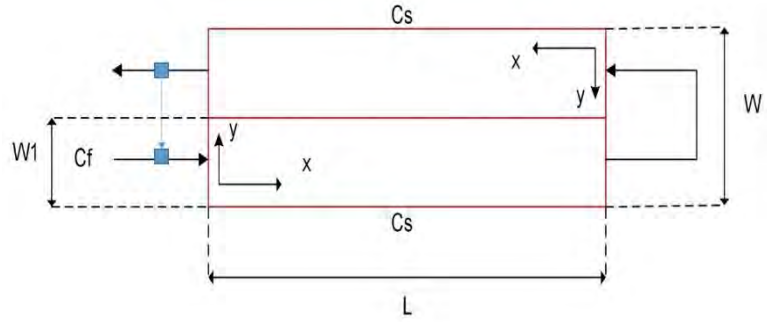


Figura 2-2-10. Intercambiador de masa a dos pasos con reflujo y una pared impermeable.

Además de los fenómenos de transferencia de masa en el equipo, no se debe olvidar que el número de Graetz masa también contiene un parámetro geométrico. El cuál influye en el proceso global de transferencia. Si consideramos el nuevo paso, este puede tener las mismas dimensiones del paso anterior o no. Para acotar el problema se opta por mantener ambos pasos con las mismas dimensiones para no depender de una nueva variable. En trabajos posteriores se recomienda estudiar diferentes dimensiones y diferentes geometrías para conocer el impacto que tienen las dimensiones sobre los intercambiadores de masa.

Se plantearon dos opciones para el arreglo del intercambiador de masa con dos pasos y con reflujo. El primero mostrado en la Figura 2-2-11 implica que solamente el reflujo volverá a pasar por el proceso de transferencia, mientras que en 2-2-12 el reflujo va directamente a la alimentación.

Para el caso “a” y “b” se tiene que resolver un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas por su condición inicial y cada una con su propia geometría. En otras palabras:

$$u_1 G Z_m^1 \frac{\partial \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \xi_1} = \frac{\partial^2 \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \eta_1^2} \quad (2-2-27)$$

$$u_2 G Z_m^2 \frac{\partial \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \xi_2} = \frac{\partial^2 \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \eta_2^2} \quad (2-2-28)$$

Con las condiciones de frontera para ambos casos

- CF1: $\xi_1 = 0 \forall \eta_1 \in [0,1], \theta_{A,1} = \theta_T$
- CF2: $\eta_1 = 0 \forall \xi_1 \in [0,1], \theta_{A,1} = 1$
- CF3: $\eta_1 = 0 \forall \xi_1 \in [0,1], \theta_{A,1} = 1$
- CF4: $\xi_2 = 0 \forall \eta_2 \in [0,1], \theta_{A,2} = \theta_{F,1}$
- CF5: $\eta_2 = 0 \forall \xi_2 \in [0,1], \theta_{A,2} = 1$
- CF6: $\eta_2 = 0 \forall \xi_2 \in [0,1], \theta_{A,2} = 1$

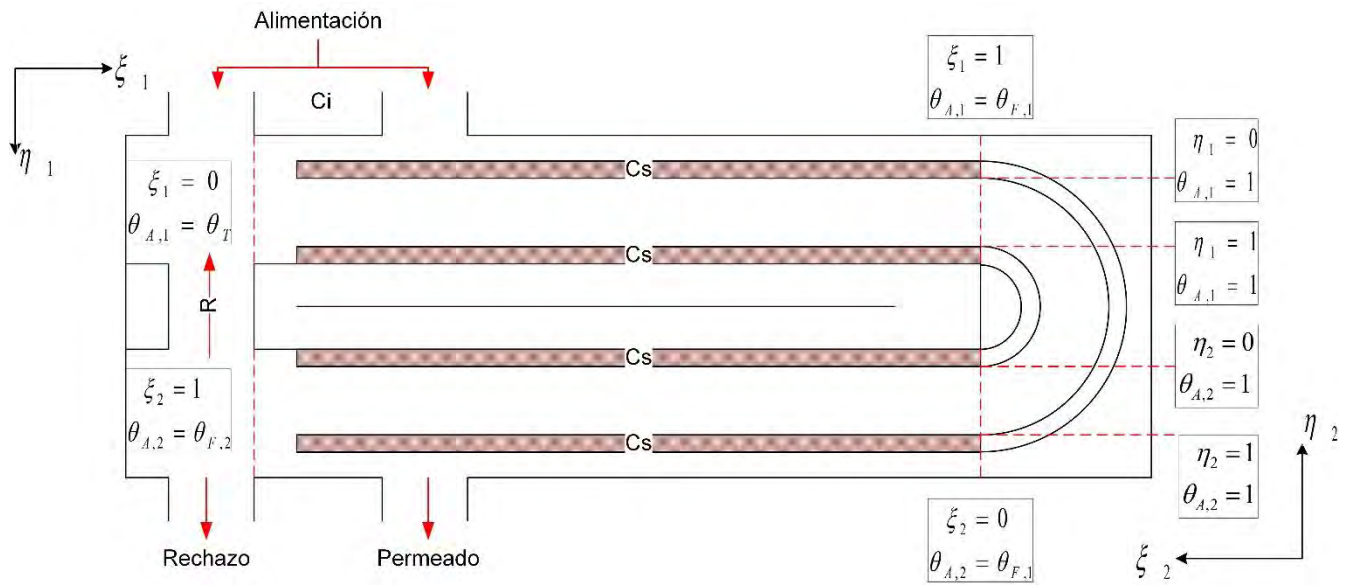


Figura 2-2-11. Caso "a"

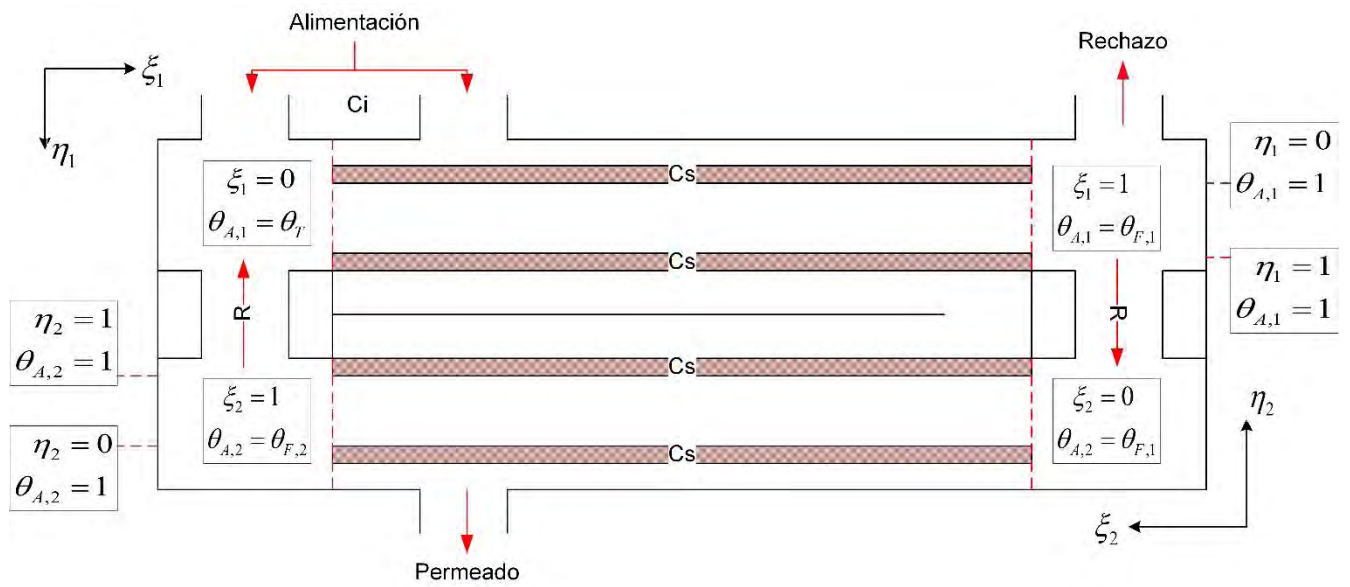


Figura 2-2-12. Caso "b"

Para los nodos de “a” y “b” se hace el balance de masa partiendo de la ecuación 2-2-20.

$$\theta_T = \frac{R}{1+R} \left(\frac{1}{C_i - C_s} \right) \left(\frac{\int_0^B \int_0^{W_2} C_i v_x^2 dy_2 dz_2}{\int_0^B \int_0^{W_2} v_x^2 dy_2 dz_2} - \frac{\int_0^B \int_0^{W_2} C_{A,2}(L, y_2) v_x^2 dy_2 dz_2}{\int_0^B \int_0^{W_2} v_x^2 dy_2 dz_2} \right) \quad (2-2-29)$$

En términos de variables adimensionales

$$\theta_T = \frac{R}{1+R} \left(\frac{\int_0^1 \int_0^1 u_2 \theta_{A,2}(1, \eta) d\eta_2 d\gamma_2}{\int_0^1 \int_0^1 u_2 d\eta_2 d\gamma_2} \right) = \frac{R}{1+R} \overline{\theta_{A,2}}(1) = \frac{R}{1+R} \theta_{F,2} \quad (2-2-30)$$

Para ambos casos la integral de flujo es diferente, en “a” no fluye la misma cantidad de fluido. En otras palabras la velocidad promedio es diferente. Del balance de momentum, desarrollado en el apéndice 1:

$$v_x(y) = \bar{v} \left[6 \left(\frac{y}{W} \right) - 6 \left(\frac{y}{W} \right)^2 \right] \quad (2-2-31)$$

Obteniendo el flujo:

$$Q = \int_0^B \int_0^W v_x(y) dy dz \quad (2-2-32)$$

Pero del balance de masa en el nodo sabemos que el resultado de esa integral debe de ser el flujo de recirculación para el caso “a” en el paso inferior y la suma del reflujo y la alimentación para el paso superior, lo que resulta:

$$Q = \int_0^B \int_0^{W_2} v_x^2 dy_2 dz_2 = V_R$$

$$BW_2 \bar{v} = VR$$

$$\bar{v}_2 = \frac{V}{BW_2} R \quad (2-2-33)$$

Mientras que en el paso superior

$$\bar{v}_1 = \frac{V(1+R)}{BW_1} \quad (2-2-34)$$

Esto último hace que los números de Graetz sean distintos en las ecuaciones 2-2-27 y 2-2-28.

$$Gz_m^1 = \frac{V(1+R)W_1}{DLB} \quad (2-2-35)$$

$$Gz_m^2 = R \frac{VW_2}{DLB} \quad (2-2-36)$$

$$Gz_m^2 = \frac{R}{(1+R)} Gz_m^1 \quad (2-2-37)$$

Con esto podemos referenciar los resultados a un Gz_m global (paso superior). Y las ecuaciones a resolver serían:

$$Gz_m(6\eta_1 - 6\eta_1^2) \frac{\partial \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \xi_1} = \frac{\partial^2 \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \eta_1^2} \quad (2-2-38)$$

$$\frac{R}{R+1} Gz_m(6\eta_2 - 6\eta_2^2) \frac{\partial \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \xi_2} = \frac{\partial^2 \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \eta_2^2} \quad (2-2-39)$$

Se puede utilizar el método de solución para el caso con un paso con reflujo para resolver 2-2-31a y b. Recordando que el valor de concentración promedio a la salida del paso superior es el valor de la concentración de entrada del paso inferior. Siguiendo este esquema puede encontrar la solución de las ecuaciones:

1. Suponer una concentración de entrada θ_T .
2. Resolver simultáneamente las ecuaciones 2-2-38 y 2-2-39.
3. Calcular el valor de la concentración promedio $\theta_{F,2}$.
4. Comparar θ_T con $\theta_{F,2}$, utilizando la expresión 2-2-30.
5. Si es cierta se termina el problema, de lo contrario se debe suponer otro valor de θ_T y regresar al punto 1.

Para el caso "b" se sigue exactamente la misma metodología, recordando que en este intercambiador el número de Graetz no cambia entre pasos, ambos pasos tienen el mismo flujo, por lo tanto, tendrían la misma velocidad. Sus ecuaciones a resolver serían:

$$Gz_m(6\eta_1 - 6\eta_1^2) \frac{\partial \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \xi_1} = \frac{\partial^2 \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \eta_1^2} \quad (2-2-40)$$

$$Gz_m(6\eta_2 - 6\eta_2^2) \frac{\partial \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \xi_2} = \frac{\partial^2 \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \eta_2^2} \quad (2-2-41)$$

Empleando la metodología mencionada anteriormente se obtienen las concentraciones para el caso a en la Figura 2-2-13 y para el caso b en la Figura 2-2-14. Las soluciones obtienen el mismo comportamiento que en el caso de un solo paso. Conforme disminuye el número de Graetz aumenta la concentración

Conclusiones parciales para los intercambiadores a dos pasos

Lo importante de los resultados obtenidos en las Figuras 2-2-15 y 16 es la comparación de los posibles arreglos, la mayoría de la literatura sugiere modelos similares a los del caso "a" [1-5]. Sin embargo, se encuentra que el caso "a" no da las concentraciones tan altas a bajos números de Graetz.

De hecho, el caso base tiene concentraciones más altas a la salida a bajos Gz_m . Esto se debe a que en los pasos no circula la misma cantidad de fluido y por ello el tiempo de residencia se reduce. En otras palabras, uno de los pasos está deteniendo al otro por tener un tiempo de residencia distinto.

Mientras que el caso "b" tiene concentraciones siempre más altas que en el caso base, y además son más altas que el caso "a" un solo paso. Por ello se puede concluir que un intercambiador de masa debe tener un arreglo con un flujo constante y además un segundo paso tiene un efecto favorable.

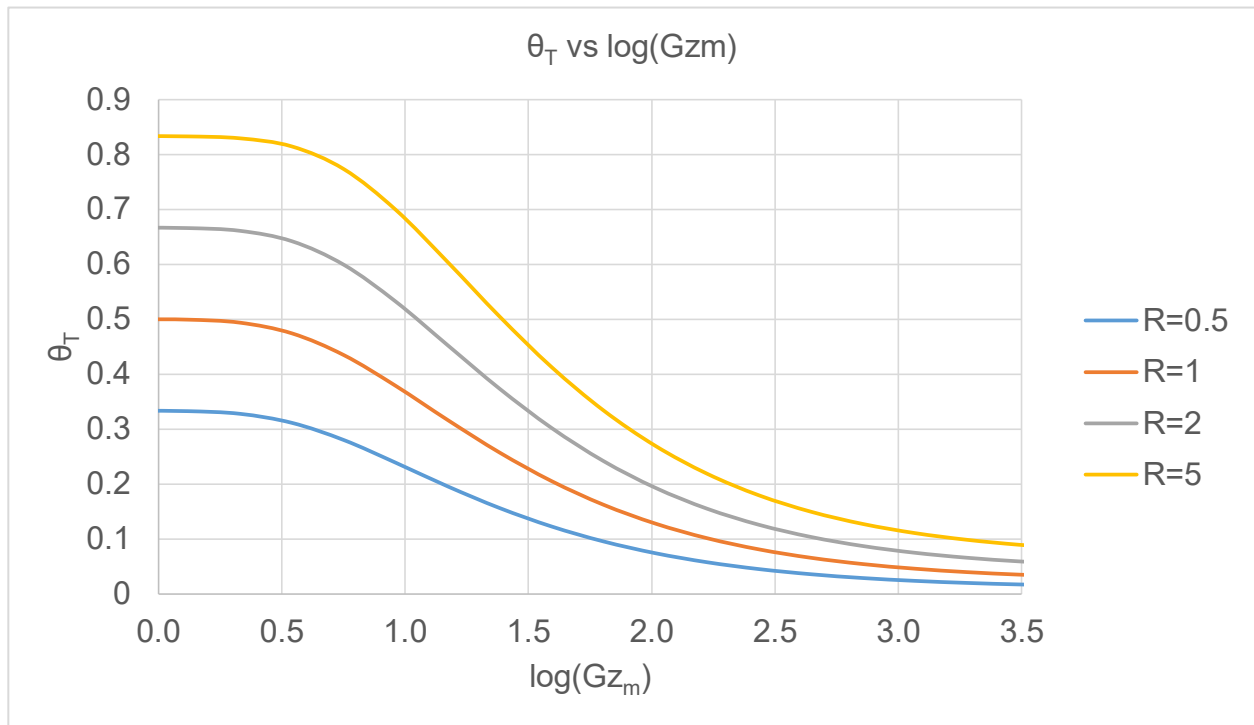


Figura 2-2-13. Concentraciones a la entrada del caso a

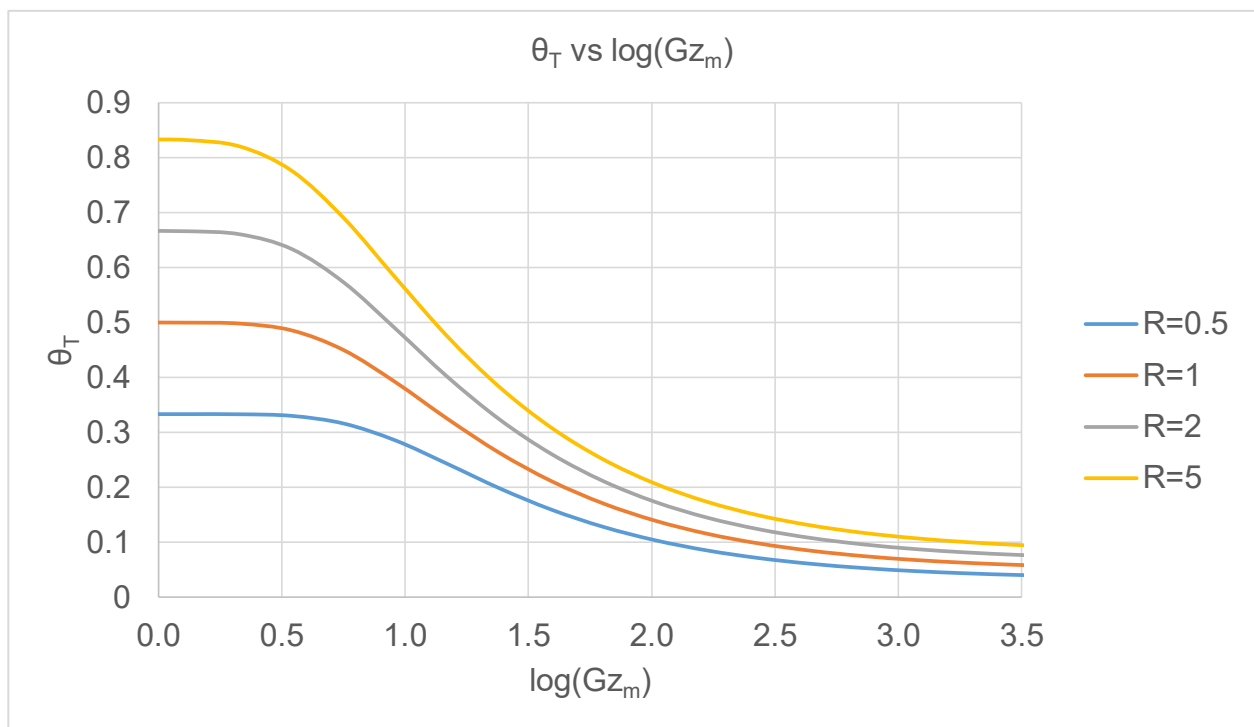


Figura 2-2-14. Concentraciones a la entrada del caso b

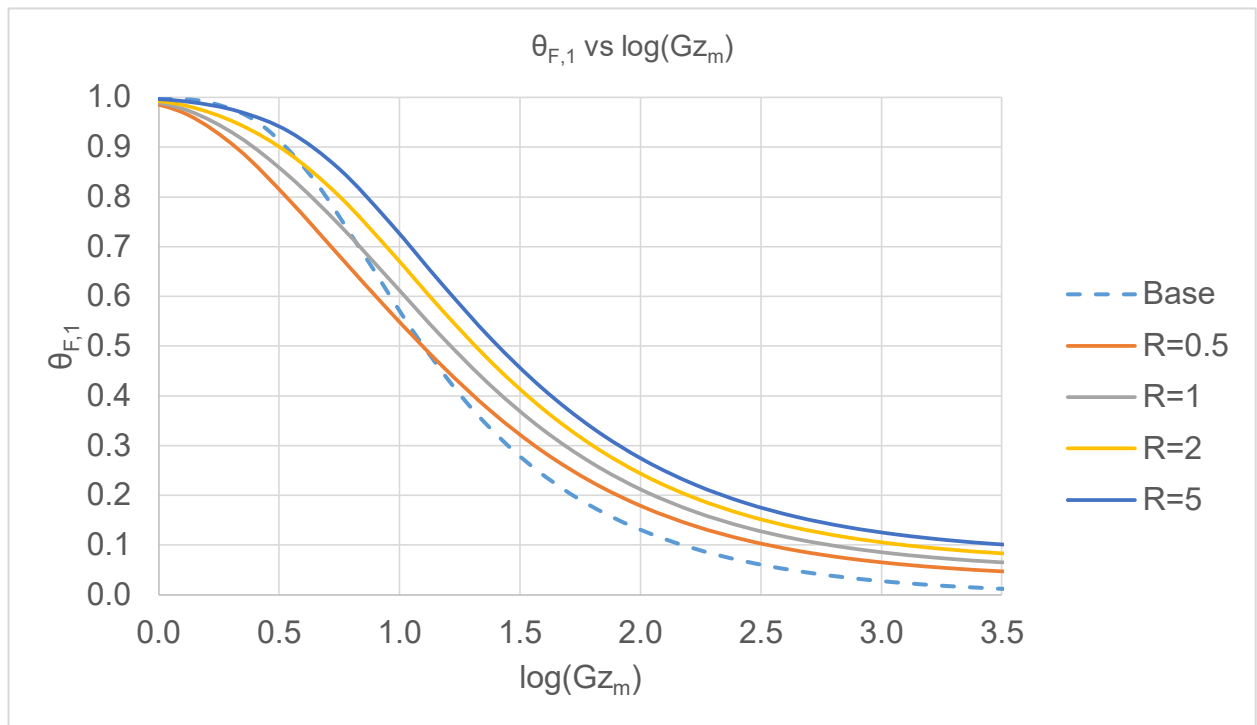


Figura 2-2-15. Concentraciones a la salida del caso a

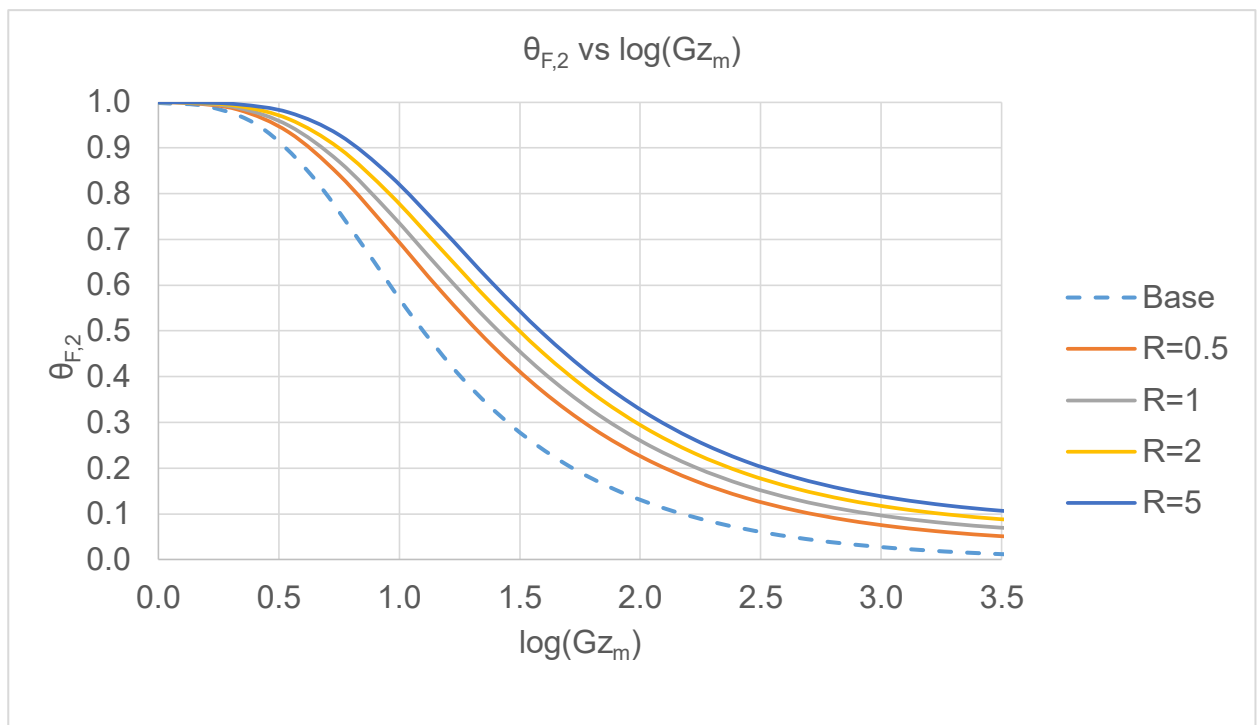


Figura 2-2-16. Concentraciones a la salida caso b

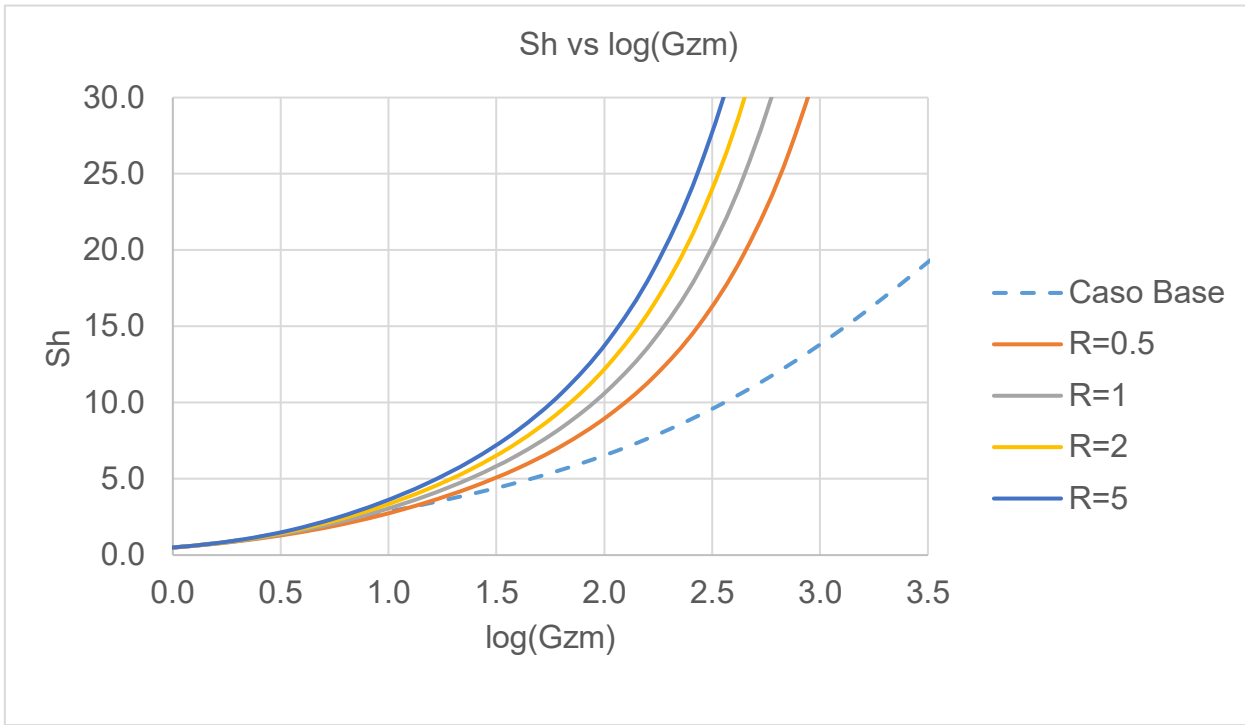


Figura 2-2-17. Sherwood del caso a

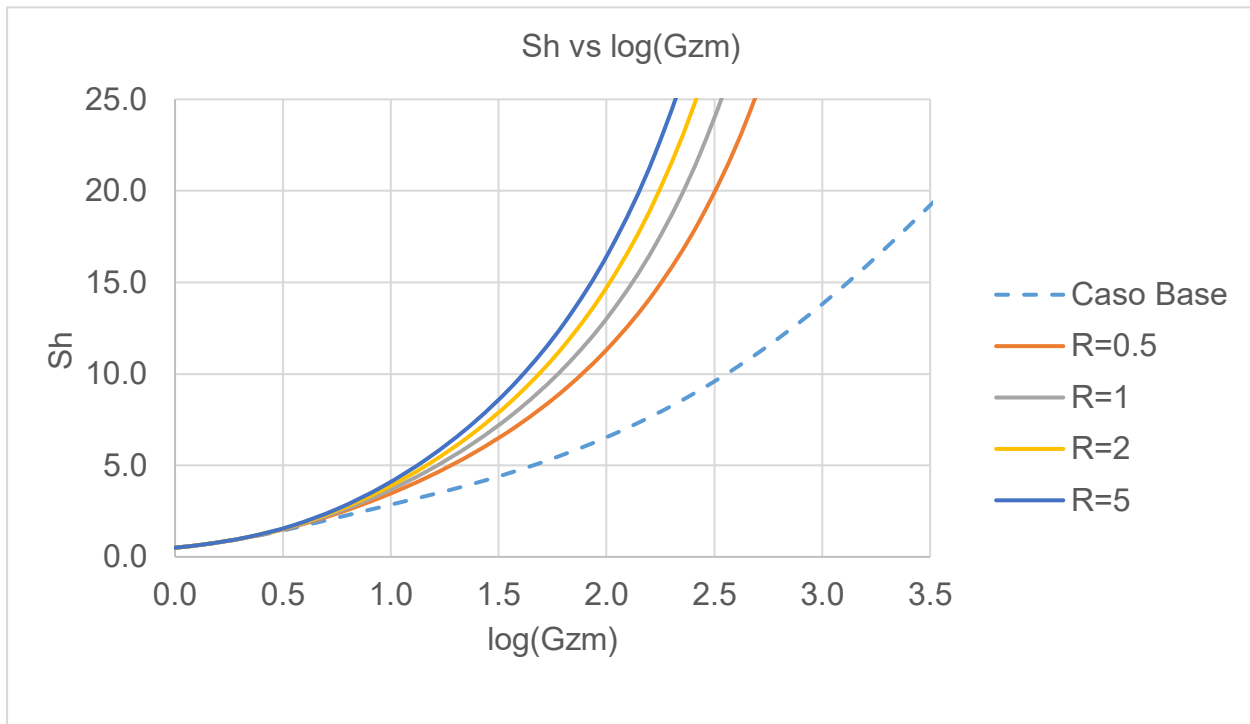


Figura 2-2-18. Sherwood del caso b

Propuesta con tres pasos y reflujo (Figura 2-1-1)

La idea de este intercambiador de masa viene de la experiencia de otros autores en la literatura. Como ya se analizó previamente los intercambiadores de masa de dos pasos tienen una buena mejora debido a que el fluido realiza un recorrido extra en la misma distancia “L” y en un número de Graetz menor debido a la reducción del factor “W_n”. Por ello se piensa que esta nueva configuración mejorará el rendimiento del intercambiador de masa.

La posición del reflujo, similar a la del caso “b”, se decidió debido a los resultados que se tuvieron previamente. En el caso “a” fluye una diferente cantidad de fluido en los pasos y se reduce la eficiencia. Es por ello que el reflujo se toma a la salida del equipo.

Para resolverlo se agrega una tercera ecuación diferencial con 3 nuevas condiciones a la frontera de esta forma:

$$Gz_m(6\eta_1 - 6\eta_1^2) \frac{\partial \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \xi_1} = \frac{\partial^2 \theta_{A,1}(\eta_1, \xi_1)}{\partial \eta_1^2} \quad (2-2-42)$$

$$Gz_m(6\eta_2 - 6\eta_2^2) \frac{\partial \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \xi_2} = \frac{\partial^2 \theta_{A,2}(\eta_2, \xi_2)}{\partial \eta_2^2} \quad (2-2-43)$$

$$Gz_m(6\eta_3 - 6\eta_3^2) \frac{\partial \theta_{A,3}(\eta_3, \xi_3)}{\partial \xi_3} = \frac{\partial^2 \theta_{A,3}(\eta_3, \xi_3)}{\partial \eta_3^2} \quad (2-2-44)$$

$$\text{CF1: } \xi_1 = 0 \quad \forall \eta_1 \in [0,1], \theta_{A,1} = \theta_T$$

$$\text{CF2: } \eta_1 = 0 \quad \forall \xi_1 \in [0,1], \theta_{A,1} = 1$$

$$\text{CF3: } \eta_1 = 0 \quad \forall \xi_1 \in [0,1], \theta_{A,1} = 1$$

$$\text{CF4: } \xi_2 = 0 \quad \forall \eta_2 \in [0,1], \theta_{A,2} = \theta_{F,1}$$

$$\text{CF5: } \eta_2 = 0 \quad \forall \xi_2 \in [0,1], \theta_{A,2} = 1$$

$$\text{CF6: } \eta_2 = 0 \quad \forall \xi_2 \in [0,1], \theta_{A,2} = 1$$

$$\text{CF7: } \xi_3 = 0 \quad \forall \eta_3 \in [0,1], \theta_{A,3} = \theta_{F,2}$$

$$\text{CF8: } \eta_3 = 0 \quad \forall \xi_3 \in [0,1], \theta_{A,3} = 1$$

$$\text{CF9: } \eta_3 = 0 \quad \forall \xi_3 \in [0,1], \theta_{A,3} = 1$$

Se podría pensar que si se aumenta el número de pasos a infinito podría aumentar la transferencia de masa en un 100%. Por desgracia el proceso se encuentra sujeto también a la resistencia de la difusión y la presión. A altas presiones el fluido tendría una velocidad muy baja y sería inconveniente su operación además que los materiales de construcción tendrían que soportar esa presión.

Conclusiones parciales

Al igual que el caso “b” la propuesta tiene un mejor comportamiento, teniendo una concentración más alta al caso base en todo momento. Lo importante de este modelo es la concentración a altos números de Graetz. Como ya se mencionó anteriormente, el proceso está limitado por el efecto deseable de incrementar el tiempo de residencia del equipo, contra el decaimiento de la concentración a altos Gz_m. Al incluir un tercer paso la concentración se reduce el efecto generado por el Gz_m.

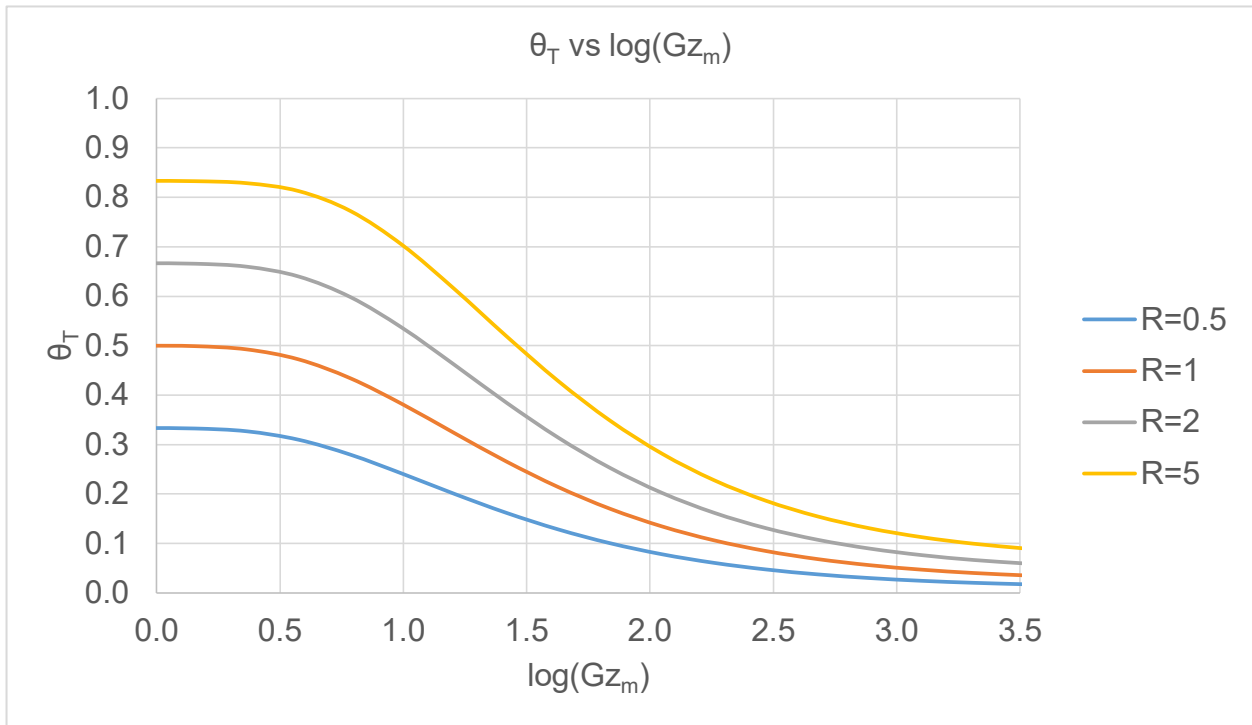


Figura 2-2-19. Concentraciones a la salida de la propuesta

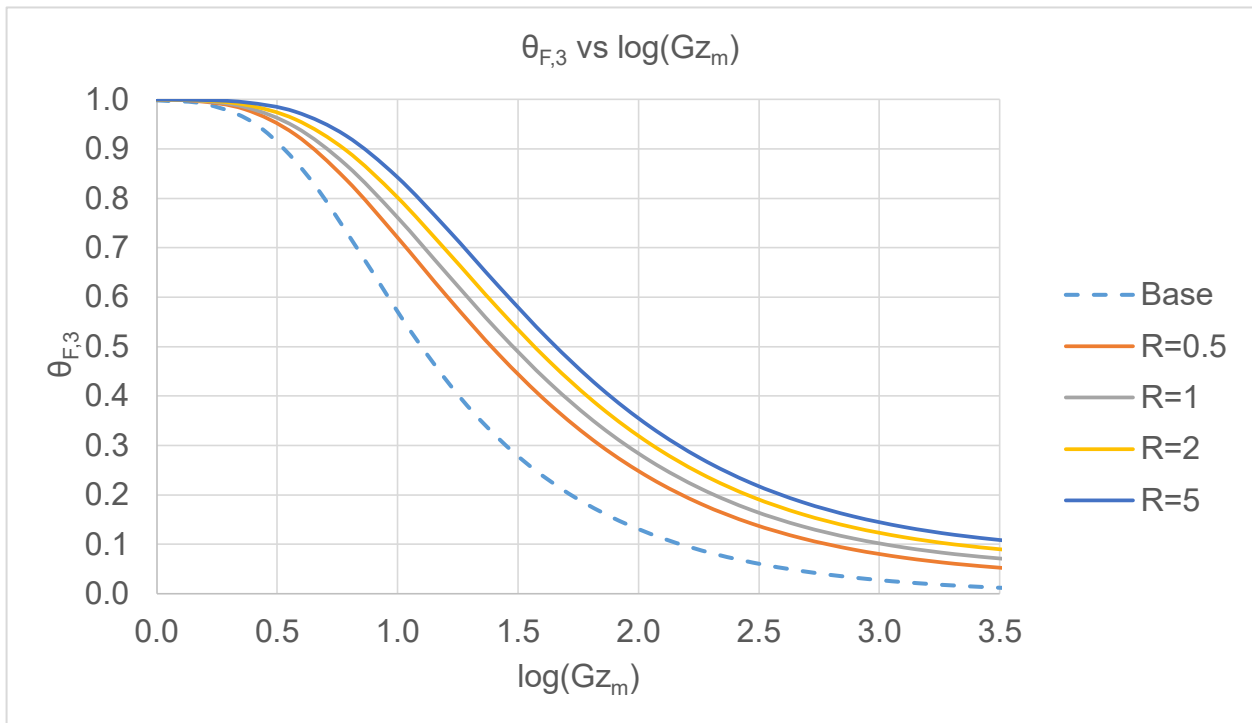


Figura 2-2-20. Concentraciones a la salida de la propuesta

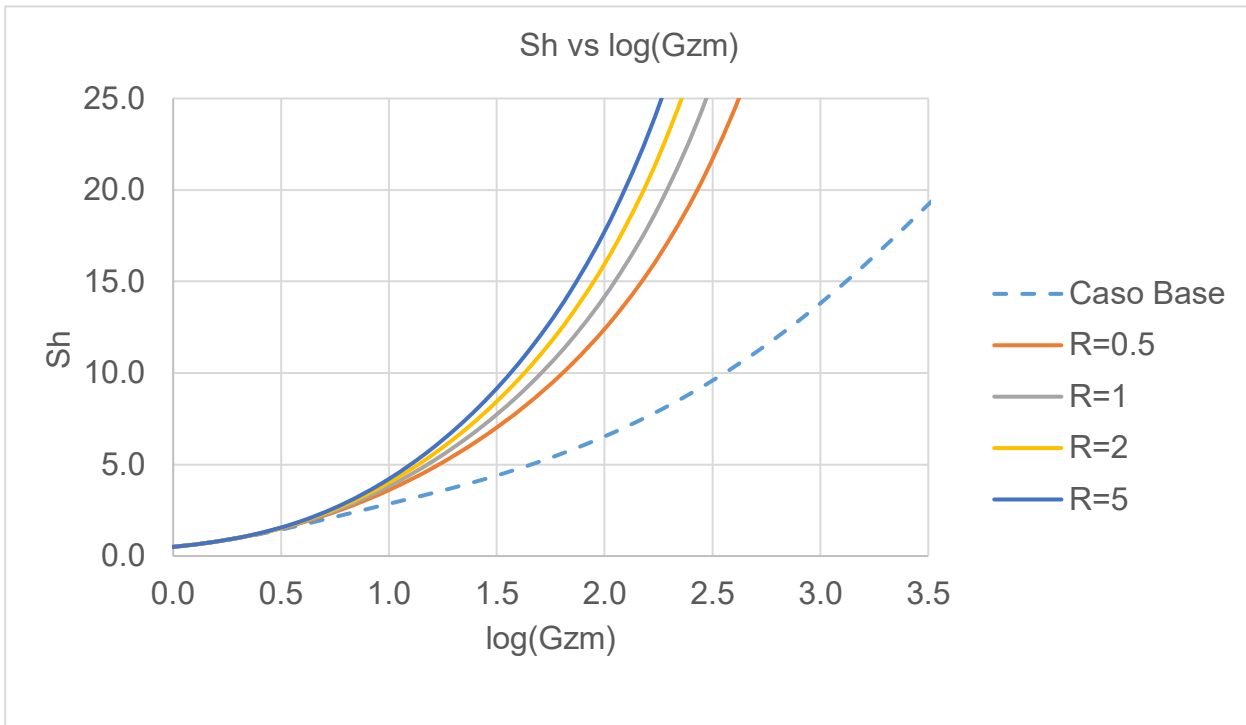


Figura 2-2-21. Sherwood de la propuesta

Referencias

- [1] Ho, C. Yeh H., Sheu W. An analytical study of heat and mass transfer through a parallel plate channel with recycle. *Int. J. Mass. Transfer.* 41(17). p. 2589-2599. **1998**.
- [2] Ho C. Yeh H. Chiang S. Mass-Transfer Enhancement in Double-Pass Mass Exchangers with external Refluxes. *Ind. Eng. Chem. Res.* **40**. p. 5839-5849. **2001**
- [3] Ho, C. Yeh H., Sheu. The influence of recycle on a double-pass heat and mass transfer through a parallel-plate device. *Int. J. of Heat Mass Transfer.* **42**. p. 1707-1722. **1999**.
- [4] Brown, G.M. Heat or Mass Transfer in a Fluid in Laminar Flow in a Circular or Flat Conduit. *A.I.Ch. E. Journal.* 6(2). p. 179-183. **1960**.
- [5] Nunge, R.J. Gill, W.N. Analysis of Heat or Mass Transfer in some Countercurrent flows. *Int. J. Heat Mass Transfer.* **8**. p. 873-886. **1965**
- [6] Davis, E.J. Venkatesh, S. The Solution of Conjugated Multiphase Heat and Mass Transfer Problems. *Chem Eng. Sci.* **34**. p. 775-787. **1979**.
- [7] Davis, E.J. Exact Solutions for a Class of Heat and Mass Transfer Problems. *Can. J. Chem. Eng.* **51**. p. 562-574. **1973**.
- [8] Papoutsakis, E. Ramkrishna, D. Lim. H.C. The extended Graetz Problem with Prescribed Wall Flux. *A.I.Ch.E. Journal.* 26 (5). p. 779-787. **1980**.
- [9] Yeh, H.M. Tsai, S.W. Chiang, C.L. Recycle Effects on Heat and Mass Transfer Through a Parallel-Plate Channel. *A.I.Ch.E. Journal.* 33(10). p. 1743-1746. **1987**.
- [10] Bilir, S. Numerical Solution of Graetz Problem with Axial Conduction. *Numerical Heat Transfer, Part A.* **21**. p. 493-500. **1992**.

Nomenclatura de símbolos

C	Concentración
v	Velocidad
x	Variable axial
y	Variable radial
D	Coefficiente de difusión
r	Velocidad de reacción
i	Subíndice: Propiedad antes de entrar al intercambiador de masa
s	Subíndice: Propiedad en las paredes del intercambiador de masa
W	Distancia radial del equipo
L	Distancia axial del equipo
B	Ancho del equipo
\bar{v}	Velocidad promedio
ξ	Variable axial adimensional
η	Variable radial adimensional
u	Velocidad adimensional
ψ	Concentración adimensional
A	Subíndice: Propiedad de la especie A
V	Flujo volumétrico
G_{z_m}	Número de Graetz masa
Re	Número de Reynolds
Sc	Número de Schmidt
ρ	Densidad
μ	Viscosidad

D_H	Diámetro Hidráulico
n	Subíndice: Número del valor, función o constante dependiente de los valores propios
λ	Valor propio
H	Función propia de la variable radial
Ξ	Función propia de la variable axial
S	Constante de la expansión ortogonal
k	Subíndice de la expansión de la función H
a	Constante de la expansión de la función H
θ	Concentración adimensional
R	Reflujo
T	Subíndice: Propiedad a la entrada
F	Subíndice: Propiedad a la salida
1	Subíndice: Propiedad en el paso superior
2	Subíndice: Propiedad en el paso inferior o paso intermedio (propuesta)
3	Subíndice: Propiedad en el paso inferior (propuesta)
j	Flux de masa
Sh	Número de Sherwood

Capítulo III Conclusiones

Analizando las Figuras 2-3-1 a 2-3-11 se obtuvieron resultados con el mismo comportamiento de diversos autores (Ho *et. al.*). Lo que indica un buen modelado dado por nuestras propuestas de distintos intercambiadores de masa. Cabe resaltar que con excepción del caso base no hay reportados en la literatura ninguno de los modelos que se plantean en el presente trabajo.

Sin embargo, la literatura resuelve analíticamente la mayoría de sus equipos propuestos. A pesar de que en este trabajo también se pudieron resolver las ecuaciones de esa forma, se prefirió utilizar el método numérico para obtener resultados con mayor rapidez. Además si se pensará acoplar este equipo con otra operación unitaria, como por ejemplo con una torre de destilación en un proceso de pervaporación, sería más sencillo programar una torre de destilación y añadir las soluciones de los intercambiadores de masa que ya se tienen en este trabajo.

En primera instancia se observa en los resultados obtenidos, que el reflujo permite llegar a una concentración más cercana a la que se tiene en las paredes del equipo a bajos números de Graetz. Revisando a detalle las Figuras de las páginas 40,41,47,48,49,51 y 52 se ve que a un Gz_m muy pequeño se obtiene una concentración de superficie C_s , esto último se debe a que la fuerza motriz del proceso es la difusión. En otras palabras, el fluido va a una velocidad muy baja y eso permite que la concentración llegue al equilibrio con la que se encuentra en la pared.

A diferencia de los extremos de las gráficas, donde un Gz_m muy grande hace que la convección de masa rija el proceso. Pero a valores muy grandes el fluido va demasiado rápido impidiendo que se transfiera masa con las fronteras, obteniendo una concentración muy parecida a la de la entrada. En otras palabras, el tiempo de residencia en el equipo determina la concentración adimensional " θ " a la salida, a tiempos muy cortos baja la concentración, pero a tiempos largos aumenta.

En menor medida el proceso se benefició mayormente con la inclusión de reflujos. Al principio se plantearon los casos "a" y "b" para saber si había una diferencia en la concentración de salida dependiendo del arreglo de los pasos. Y en los resultados se encontró que el caso "b" obtiene una concentración más alta a la salida que el caso base. Esto es debido a que en los pasos no circula la misma cantidad de fluido y, por tanto, un paso tiene una velocidad más alta que el otro, teniendo tiempos de residencias distintos.

Es por ello que en la propuesta sólo se tiene un reflujo y el fluido recorre el equipo como un intercambiador de calor convencional. En una primera instancia se pensaría que con un gran número de pasos la concentración seguiría subiendo, sin embargo recordando que el equipo reduce su área transversal cada vez que se agrega un paso, pero su velocidad sigue aumentando pudiendo generar problemas en la operación del equipo.

Finalmente, se puede concluir que los resultados obtenidos tienen una representación con la realidad, además de que la inclusión de pasos y reflujo mejora el proceso de transferencia de cada uno los intercambiadores, esto se puede apreciar por el incremento en el número de Sherwood. Pero se debe recordar que a altos números de Gz_m la transferencia de masa disminuye y se tiene una competencia entre el efecto deseable de incrementar el flujo para aumentar el tiempo de residencia del equipo contra el incremento del número de Graetz que disminuye la concentración " θ ". Sin embargo los intercambiadores de masa propuestos aumentan la concentración de masa a altos Gz_m .

Referencias sin Citar.

Ho, C.D. Tu, W. Chuang, Y.C. Lin, C.S. Improvement in Device Performance of Double-Pass Concentric Circular Mass Exchanger with an Idealized Membrane Inserted. *J. App. Sci. Eng.* **15(1)**. p. 49-58. **2012**.

Weigand, B. Wrona. F. The extended Graetz Problem with piecewise constant Wall heat flux for laminar and turbulent flows inside concentric annuli. *Heat and Mass Transfer.* **39**. p. 313-320. **2003**.

Telles, A. Queiroz. E.M. Filho. G.E. Solutions of extended Graetz Problem. *Int. J. Heat Mass Trans.* **44**. p. 471-483. **2001**.

Gassner, G. Weigand. B. The effect of Wall conduction for the extended Gaetz problema for laminar and turbulent cannel flows. *Int. J. Heat Mass Trans.* **50**. p. 1097-1105. **2007**.

Papoutsakis, E. Ramkrishna, D. Conjugated Graetz Problems-I. *Ch. Eng. Sci.* **36**. p. 1381-1391. **1981**.

1*Balance de Momentum en los intercambiadores de masa.

Observando el caso base en la Figura 2-2-1, se sabe que la velocidad únicamente se tiene en el eje "x", se utilizan la ecuación de movimiento

$$\rho \left(\frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) = - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) + g_x \quad (\text{a-1-1})$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (\text{a-1-2})$$

Sabiendo que

- Las propiedades físicas son constantes
- El flujo está completamente desarrollado
- El flujo no depende del tiempo
- El fluido es incompresible
- La velocidad solo depende del eje "y"

De la ecuación de continuidad se obtiene:

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = 0$$

Haciendo las consideraciones anteriores

$$0 = - \frac{\partial P}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) + g_x \quad (\text{a-1-3})$$

Las condiciones a la frontera son:

- $v(0)=0$
- $v(W)=0$

Resolviendo a-1-3

$$\frac{\partial P}{\partial x} + g_x = \mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) = cte = - \frac{\Delta P}{L}$$

Para la velocidad se resuelve la siguiente expresión

$$\mu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} \right) = - \frac{\Delta P}{L} \quad (\text{a-1-4})$$

$$v_x = - \frac{\Delta P}{2\mu L} y^2 + C_1 y + C_2$$

Aplicando condiciones a la frontera

$$v_x = \frac{\Delta PW}{2\mu L} \left(y - \frac{y^2}{W} \right) \quad (\text{a-1-5})$$

Integrando para obtener el flujo volumétrico "V"

$$V = \iint v_x(y) dy dz \quad (\text{a-1-6})$$

$$V = \frac{BW^3\Delta P}{12\mu L} \quad (\text{a-1-7})$$

Definiendo la velocidad promedio como un promedio de área

$$\bar{v} = \frac{\iint v_x(y) dy dz}{\iint dy dz} = \frac{W\Delta P}{12\mu L} \quad (\text{a-1-8})$$

Debido a que es más sencillo trabajar con variables medibles, es preferible cambiar el perfil de velocidades por la siguiente expresión:

$$v_x = 6\bar{v} \left[\frac{y}{W} - \left(\frac{y}{W} \right)^2 \right] \quad (\text{a-1-10})$$

2*Adimensionalización de las ecuaciones constitutivas

Partiendo de la ecuación 2-2-3, se definen las siguientes constantes adimensionales

$$v_x(y) \frac{\partial C_A}{\partial x} = D \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} \right) \quad (\text{a-2-1})$$

$$\eta = \frac{y}{W}; \xi = \frac{x}{L}; \psi_A = \frac{C_A - C_s}{C_i - C_s}; u = \frac{v_x(y)}{\bar{v}} \quad (\text{a-2-2})$$

$$u = 6[\eta - \eta^2] \quad (\text{a-2-3})$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial x} = \frac{\partial C_A}{\partial \psi_A} \frac{\partial \psi_A}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{C_i - C_s}{L} \frac{\partial \psi_A}{\partial \xi}$$

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} = \frac{\partial C_A}{\partial \psi_A} \frac{\partial \psi_A}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 = \frac{C_i - C_s}{W^2} \frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \eta^2}$$

$$v_x(y) \frac{C_i - C_s}{L} \frac{\partial \psi_A}{\partial \xi} = D \frac{C_i - C_s}{W^2} \frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \eta^2}$$

$$\left(\frac{\bar{v} W^2}{DL} \right) u \frac{\partial \psi_A}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \eta^2} \quad (\text{a-2-4})$$

Cambiando la velocidad promedio por el flujo y recordando la definición del número de Graetz de la expresión 2-2-4:

$$\left(\frac{VW}{DLB} \right) u \frac{\partial \psi_A}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \eta^2}$$

$$Gz_m u \frac{\partial \psi_A}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \psi_A}{\partial \eta^2} \quad (\text{a-2-5})$$

3*Coeficientes de la ecuación 2-2-10

Recordando el caso base en la metodología, es necesario calcular los coeficientes de la serie solución para conocer los valores propios y obtener las constantes S_n . Partiendo de la ecuación 2-2-7.

$$\frac{d^2 H_n(\eta)}{d\eta^2} - \lambda_n 6[\eta - \eta^2] Gz_m H_n(\eta) = 0 \quad (\text{a-3-1})$$

Se sustituye la siguiente expresión

$$H_n(\eta) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k,n} \eta^k \quad (\text{a-3-2})$$

$$\sum_{k=2}^{\infty} [a_{k+2,n}(k+2)(k+1) - 6(\lambda_n Gz_m)(a_{k-1,n} - a_{k-2,n})] \eta^k \quad (\text{a-3-3})$$

$a_{0,n} + a_{1,n} \eta = 0$

Sin perder generalidad podemos dar valores a las constantes que se encuentran en rojo, ya que el producto con las "S_n" resultaría en una nueva constante y por tanto complicaría la solución. Por ello se puede decir que $C_0=0$ y $C_1=1$.

Las primeras 7 Constantes se expresan en la tabla a-3-1:

k	C _k
0	0
1	1
2	0
3	0
4	$\frac{6}{12} \lambda_n Gz_m$
5	$-\frac{6}{20} \lambda_n Gz_m$
6	0
7	$\frac{6}{42} \lambda_n Gz_m \left(\frac{6}{12} \lambda_n Gz_m \right)$

Tabla a-3-1. Constantes $a_{k,n}$

4*Programas en Matlab.

A continuación se encuentran los programas necesarios para obtener las Figuras que se encuentran en los resultados. Se explica brevemente que es lo que se hace en cada línea para que sea más sencillo modificar los programas en trabajos futuros.

Caso base por métodos analíticos

Lo primero que se debe de hacer para resolver el problema para el caso base es obtener las constantes de la tabla a-3-1 y los valores propios, con la expresión 2-2-12, para esto se creó una función error como se muestra en el programa:

```
1. function error=valorespropioscasobase(lambda,Gzm)
2. n=500; %Número de términos
3. a=zeros(n,1);
4. a(1)=0; %Constantes definidas
5. a(2)=1; %Constantes definidas
6. a(3)=0;
7. a(4)=0;
8. for i=5:n
9.     a(i)=((6*Gzm)*lambda*(a(i-3)-a(i-4)))/((i-1)*(i-2)); %Relación de Recurrencia
10. end
11. error=sum(a);
12. end
```

Programa a-4-1. Función Error

Esta función requiere un valor de lambda tentativo para generar la función error

$$error(\lambda_n Gz_m) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k,n} \quad (\text{a-4-1})$$

Para obtener las raíces de a-4-1 se requiere de una segunda rutina, que se muestra a continuación

```
1. function lambda=l(Gzm)
2. F = @(x) valorespropioscasobase(x,Gzm); %Definiendo la función a resolver
3. interval = [-300/Gzm, 0]; %Intervalo donde se buscaran raíces
4. N = 500; %Número de valores tentativos de lambda
5. start_pts = linspace(interval(1),interval(2),N);
6. found_roots = [];
7. for i=1:N-1
8. try
9. found_roots(end+1) = fzero(F,[start_pts(i),start_pts(i+1)]);
10. end
11. lambda=fliplr(found_roots);%Valores propios
12. end
```

Programa a-4-2. Valores Propios

Las raíces se obtienen gracias a una rutina ya hecha en Matlab, mostrada en la línea 9 del programa a-4-2.

Es importante mencionar que no se puede dar un valor de k infinito en la ecuación a-4-1, debido a esto se tiene que definir un número finito de términos como en la línea 2 del programa a-4-1.

Cuando se alcanza el valor propio λ_5 los exponentes son muy altos y el programa no puede seguir obteniendo los resultados, pero como se tiene un número negativo muy grande en la exponencial de la expresión 2-2-14, se puede decir que las demás funciones propias “ H_n ” son despreciables a partir de $n=5$.

Ya con los valores propios calculados se pueden obtener las funciones propias con la siguiente rutina:

```
1. function H=Ycasobase(eta,Gzm,lambda)
2. n=300;
3. a=zeros(n,1);
4. a(1)=0;
5. a(2)=1;
6. a(3)=0;
7. a(4)=0;
8. for i=5:n
9. a(i)=((6*Gzm)*lambda*(a(i-3)-a(i-4)))/((i-1)*(i-2));
10. end
11. X=zeros(n,1);
12. for i=1:n
13. X(i)=eta^(i-1);
14. end
15. Y=a.*X;
16. H=sum(Y);
17. end
```

Programa a-4-3. Funciones Propias

Después es necesario obtener las constantes “ S_n ” con la propiedad de ortogonalidad, ecuación 2-2-13. Las integrales en esta expresión son calculadas numéricamente con una rutina ya incorporada a Matlab que utiliza el método del trapecio. A pesar de que Matlab puede resolver integrales analíticamente es preferible calcularlas numéricamente para obtener el resultado de una forma más rápida.

Finalmente se unen todos los programas anteriores en una sola rutina para obtener la función ψ_A en el programa a-4-1. En otro programa se calcula el promedio de flujo para la gráfica de la Figura 2-2-4 y de la misma manera que las integrales de las constantes “ S_n ”, los promedios se calcularon numéricamente.

Es necesario mencionar que los valores que se obtuvieron analíticamente no son los mismo que se obtendría por medio de un método numérico, si un revisa la línea del caso base en los resultados se dará cuenta que no es la misma línea que en la Figura 2-2-4. Esto se debe a la

aproximación de la serie psi a los primeros 5 términos

```
1. function S=Sn(Gzm)
2. lambda=l(Gzm);
3. m=50;
4. chi=linspace(0,1,m)';
5. eta=linspace(0,1,m)';
6. %funcion radial
7. Y=zeros(m,4);
8. u=(eta-eta.^2);
9. for j=1:5
10. for i=1:m
11. Y(i,j)=Ycasobase(eta(i),Gzm,lambda(j));
12. end
13. end
14. %fin de la funcion radial
15. %constantes
16. U=zeros(m,5);
17. D=zeros(m,5);
18. for k=1:5
19. for n=1:m
20. U(n,k)=u(n)*Y(n,k);
21. D(n,k)=u(n)*Y(n,k)*Y(n,k);
22. end
23. end
24. S=zeros(5,1);
25. for j=1:5
26. S(j)=trapz(eta,U(:,j))/trapz(eta,D(:,j));
27. end
28. end
```

Programa a-4-4. Funciones Propias

```
1. function psi=psibase(eta,chi,Gzm)
2. %Calculo de los valores propios
3. lambda=l(Gzm);
4. %fin del calulo de los valores propios
5. %funcion axial
6. Chi=zeros(1,5);
7. for j=1:5
8. Chi(1,j)=exp(lambda(j)*chi);
9. end
10. %fin de la funcion axial
11. %funcion radial
12. Y=zeros(1,4);
13. for j=1:5
14. Y(1,j)=Ycasobase(eta,Gzm,lambda(j));
15. end
16. %fin de la funcion radial
```

```

17. %constantes
18. S=Sn(Gzm);
19. %Fin de las constantes
20. %Funcion Psi
21. X=zeros(1,4);
22. for j=1:5
23. X(1,j)=S(j)*Y(1,j)*Chi(1,j)';
24. end
25. psi=sum(X);
26. %fin funcion psi
27. end

```

Programa a-4-5. Función Psi

```

1. m=20;
2. eta=linspace(0,1,m)';
3. n=10;
4. e=linspace(0,3,n)';
5. G=zeros(n,1);
6. for j=1:n
7. G(j)=10^(e(j));
8. end
9. Psi=zeros(m,2);
10. for i=1:m
11. for j=1:n
12. Psi(i,j)=psibase(eta(i),1,G(j));
13. end
14. end
15. for k=1:n
16. theta(k)=trapz(eta,Psi(:,k));
17. end

```

Programa a-4-6. Concentraciones a la salida del equipo

Un paso con reflujo

Debido al gran esfuerzo para calcular los coeficientes de las series de potencias, se prefirió dar un seguimiento numérico al análisis de los intercambiadores. Para esto se creó una función que resolviera la ecuación diferencial parabólica. Dando como datos la concentración de entrada, el número de Graetz y el reflujo.

```

1. function [thetasal, thetaent]=upcr(Psi0,Gzm,R)
2. m=0;
3. n=linspace(0,1,30); %variable en y
4. z=linspace(0,1,30); %variable en x
5. sol=pdepe(m,@pdez1pde,@pdez1ic,@pdezbc,n,z);
6. g=sol(:,1);
7. h=[g(end,:)];
8. u=[6*(n-n.^2)]';
9. p=h.*u;

```

```

10. thetasal=trapz(n,p);
11. thetaent=(R/((1+R)))*thetasal/trapz(n,u);
12. function [c,f,s]=pdez1pde(n,~,~,DjDn)
13. v=(n-(n^2));
14. c=Gzm*6*v;
15. f=DjDn;
16. s=0;
17. end
18. function j0=pdez1ic(~)
19. j0=Psi0;
20. end
21. function [pl,ql,pr,qr]=pdezbc(~,jl,~,jr,~)
22. pl=jl-1;
23. ql=0;
24. pr=jr-1;
25. qr=0;
26. end
27. end

```

Programa a-4-7. Función ψ_A del equipo con un reflujo y un solo paso

Si se introduce un valor de cero en el reflujo el problema se reduce al caso base, sin embargo tiene discrepancias la solución analítica con la numérica debido a que la analítica se calculó menos términos de la serie y menos valores propios.

Por desgracia el programa necesita la concentración a la salida del equipo para calcular el nodo de la recirculación, un dato que se desconoce y debe ser calculado. Para obtenerlo se sigue la metodología de la Figura 2-2-6. Y para calcular los nuevos valores a la entrada se sigue el método de sustitución directa como se puede ver en el siguiente programa

```

1. format long
2. format compact
3. tol=1e-6;
4. m=20;
5. n=linspace(0,4,m);
6. Gzm=10.^n;
7. R=[0 0.5 1 2 5];
8. x=zeros(m,5);
9. for j=1:5
10. for i=1:m
11. [a(i,j), b(i,j)]=upcr(x(i,j),Gzm(i),R(j));
12. error=abs(b(i,j)-x(i,j))/b(i,j);
13. while error > tol
14. [a(i,j), x(i,j)]=upcr(x(i,j),Gzm(i),R(j));
15. error=abs(b(i,j)-x(i,j))/b(i,j);
16. end
17. end
18. end
19. for j=1:5
20. for i=1:m

```

```

21. [z(i,j), y(i,j)]=upcr(x(i,j),Gzm(i),R(j));
22. end
23. end

```

Programa a-4-8. Concentraciones a la salida y entrada del equipo con un reflujo y un solo paso

Para los otros modelos se utilizaron rutinas similares, cada paso tenía su propia función $\psi_{A,n}$. Y se comparaba la concentración de salida promedio de uno para obtener la entrada del otro. Se optó por tener dos funciones distintas para las dos funciones para agilizar el método numérico. Si se plantea en una sola función la resolución del sistema de ecuaciones diferenciales parciales, a al programa le llevaría más tiempo obtener el perfil de concentraciones.

Los siguientes programas se utilizaron de igual manera que los programas a-4-7 y a-4-8.

```

1. function theta=dpcr1(Psi0,Gzm,R)
2. m=0;
3. n=linspace(0,1,30); %variable en y
4. z=linspace(0,1,30); %variable en x
5. sol=pdepe(m,@pdez1pde,@pdez1ic,@pdezbc,n,z);
6. g=sol(:,1);
7. h=[g(end,:)];
8. u=[6*(n-n.^2)];
9. p=h.*u;
10. theta=trapz(n,p)/trapz(n,u);
11. function [c,f,s]=pdez1pde(n,~,~,DjDn)
12. v=(n-(n.^2));
13. c=Gzm*6*v;
14. f=DjDn;
15. s=0;
16. end
17. function j0=pdez1ic(~)
18. j0=Psi0;
19. end
20. function [pl,ql,pr,qr]=pdezbc(~,jl,~,jr,~)
21. pl=jl-1;
22. ql=0;
23. pr=jr-1;
24. qr=0;
25. end
26. end

```

Programa a-4-9. Función ψ_A paso superior del equipo con un reflujo y dos pasos caso

a

```

1. function [theta, RS]=dpcr2(Psi0,Gzm,R)
2. m=0;
3. n=linspace(0,1,30); %variable en y
4. z=linspace(0,1,30); %variable en x

```

```

5. sol=pdepe(m,@pdez1pde,@pdez1ic,@pdezbc,n,z);
6. g=sol(:,1);
7. h=[g(end,:)]';
8. u=[6*(n-n.^2)]';
9. p=h.*u;
10. RS=trapz(n,p)/trapz(n,u);
11. theta=(R/((1+R)))*RS;
12. function [c,f,s]=pdez1pde(n,~,~,DjDn)
13. v=(n-(n.^2));
14. c=(R/((1+R)))*Gzm*6*v;
15. f=DjDn;
16. s=0;
17. end
18. function j0=pdez1ic(~)
19. j0=Psi0;
20. end
21. function [pl,ql,pr,qr]=pdezbc(~,jl,~,jr,~)
22. pl=jl-1;
23. ql=0;
24. pr=jr-1;
25. qr=0;
26. end
27. end

```

Programa a-4-10. Función ψ_A paso inferior del equipo con un reflujo y dos pasos caso a

```

1. tol=1e-6;
2. n=20;
3. m=linspace(0,4,n);
4. Gzm=10.^m;
5. R=[0.1 0.5 1 2 5];
6. x=0.1*ones(n,5);
7. y=0.1*ones(n,5);
8. Y=0.1*ones(n,5);
9. RS=0.1*ones(n,5);
10. for j=1:5
11. for i=1:n
12. [y(i,j),RS(i,j)]=dpcr2(dpcr1(x(i,j),Gzm(i),R(j)),Gzm(i),R(j));
13. error=abs(x(i,j)-y(i,j))/x(i,j);
14. while error>tol
15. [x(i,j),RS(i,j)]=dpcr2(dpcr1(x(i,j),Gzm(i),R(j)),Gzm(i),R(j));
16. error=abs(x(i,j)-y(i,j))/x(i,j);
17. end
18. Y(i,j)=dpcr1(x(i,j),Gzm(i),R(j));
19. end
20. end

```

Programa a-4-11. Concentraciones a la salida y entrada del equipo con un reflujo y dos pasos caso a

```

1. function theta=dpcr1b(Psi0,Gzm)
2. m=0;
3. n=linspace(0,1,30); %variable en y
4. z=linspace(0,1,30); %variable en x
5. sol=pdepe(m,@pdez1pde,@pdez1ic,@pdezbc,n,z);
6. g=sol(:,:,1);
7. h=[g(end,:)];
8. u=[6*(n-n.^2)];
9. p=h.*u;
10. theta=trapz(n,p)/trapz(n,u);
11. function [c,f,s]=pdez1pde(n,~,~,DjDn)
12. v=(n-(n^2));
13. c=Gzm*6*v;
14. f=DjDn;
15. s=0;
16. end
17. function j0=pdez1ic(~)
18. j0=Psi0;
19. end
20. function [pl,ql,pr,qr]=pdezbc(~,jl,~,jr,~)
21. pl=jl-1;
22. ql=0;
23. pr=jr-1;
24. qr=0;
25. end
26. end

```

Programa a-4-12. Función ψ_A paso superior del equipo con un reflujo y dos pasos caso b

```

1. function [theta, RS]=dpcr2b(Psi0,Gzm,R)
2. m=0;
3. n=linspace(0,1,30); %variable en y
4. z=linspace(0,1,30); %variable en x
5. sol=pdepe(m,@pdez1pde,@pdez1ic,@pdezbc,n,z);
6. g=sol(:,:,1);
7. h=[g(end,:)];
8. u=[6*(n-n.^2)];
9. p=h.*u;
10. RS=trapz(n,p)/trapz(n,u);
11. theta=(R/((1+R)))*RS;
12. function [c,f,s]=pdez1pde(n,~,~,DjDn)
13. v=(n-(n^2));
14. c=Gzm*6*v;
15. f=DjDn;
16. s=0;
17. end
18. function j0=pdez1ic(~)
19. j0=Psi0;
20. end

```

```

21. function [pl,ql,pr,qr]=pdezbc(~,jl,~,jr,~)
22. pl=jl-1;
23. ql=0;
24. pr=jr-1;
25. qr=0;
26. end
27. end

```

Programa a-4-13. Función ψ_A paso inferior del equipo con un reflujo y dos pasos caso b

```

1. tol=1e-6;
2. n=20;
3. m=linspace(0,4,n);
4. Gzm=10.^m;
5. R=[0.5 1 2 5];
6. x=0.1*ones(n,4);
7. y=zeros(n,4);
8. RS=zeros(n,4);
9. for j=1:4
10. for i=1:n
11. [y(i,j),RS(i,j)]=dpcr2b(dpcr1b(x(i,j),Gzm(i)),Gzm(i),R(j));
12. error=abs(x(i,j)-y(i,j))/x(i,j);
13. while error>tol
14. [x(i,j),RS(i,j)]=dpcr2b(dpcr1b(x(i,j),Gzm(i)),Gzm(i),R(j));
15. error=abs(x(i,j)-y(i,j))/x(i,j);
16. end
17. [a(i,j),b(i,j)]=dpcr2b(dpcr1b(x(i,j),Gzm(i)),Gzm(i),R(j));
18. end
19. end

```

Programa a-4-14. Concentraciones a la salida y entrada del equipo con un reflujo y dos pasos caso b

Para la propuesta se utilizaron los mismos programas del caso de dos pasos con reflujo caso b, pero utilizado dos veces el programa a-4-12 de la siguiente forma:

```

1. tol=1e-6;
2. n=20;
3. m=linspace(0,4,n);
4. Gzm=10.^m;
5. R=[0.5 1 2 5];
6. x=0.1*ones(n,4);
7. y=zeros(n,4);
8. RS=zeros(n,4);
9. for j=1:4
10. for i=1:n
11. [y(i,j),RS(i,j)]=dpcr2b(dpcr1b(dpcr1b(x(i,j),Gzm(i)),Gzm(i)),Gzm(i),R(j));
12. error=abs(x(i,j)-y(i,j))/x(i,j);

```



```
13. while error>tol
14. [x(i,j),RS(i,j)]=dpcr2b(dpcr1b(dpcr1b(x(i,j),Gzm(i)),Gzm(i)),Gzm(i),R(j));
15. error=abs(x(i,j)-y(i,j))/x(i,j);
16. end
17. [a(i,j),b(i,j)]=dpcr2b(dpcr1b(dpcr1b(x(i,j),Gzm(i)),Gzm(i)),Gzm(i),R(j));
18. end
19. end
```

Programa a-4-14. Concentraciones a la salida y entrada del intercambiador de masa propuesto.