

SEP INSTITUTO TECNOLÓGICO de celaya

I.Q./112/98

Asunto: Aprobación de Impresión
de Tesis de Maestría

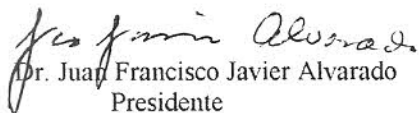
4 de Diciembre de 1998.

M.C. J. Guadalupe Michel Nava
Jefe del Depto. de Ingeniería Química.
Presente

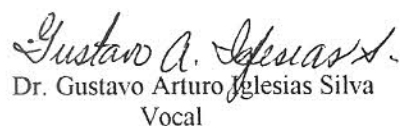
De acuerdo con la convocatoria hecha por esa Jefatura a su digno cargo con el fin de determinar la aprobación de impresión del Proyecto de Tesis de Maestría, titulado: " *ESTUDIO DE CONDENSACION DE MEZCLAS*" presentado por él (la) **ING. PEDRO SANCHEZ VAZQUEZ**, comunico a usted que esta Comisión Revisora de tesis ha tenido a bien aprobar la impresión de este trabajo.

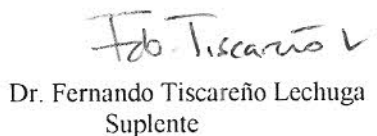
Lo anterior, para los efectos consiguientes.

Atentamente,


Dr. Juan Francisco Javier Alvarado
Presidente


Dr. Rafael Chávez Contreras
Secretario


Dr. Gustavo Arturo Iglesias Silva
Vocal


Dr. Fernando Tiscareño Lechuga
Suplente

Ilc*



Estudio de Condensación de Mezclas

Por:

Pedro Sánchez Vázquez

Resumen

En el presente estudio, un análisis teórico fue desarrollado para la condensación de mezclas de vapor en estado estable en un condensador vertical concéntrico, en donde el vapor en flujo descendente condensa en el interior del tubo interno. Un modelo de transferencia simultánea de masa y calor bajo la teoría de película fue formulado y un algoritmo de cálculo fue desarrollado para predecir los fluxes molares de los componentes de la mezcla en cada punto del condensador. Se seleccionaron veintidós mezclas binarias y ocho mezclas ternarias, las cuales incluyen componentes aromáticos, alcanos y cicloalcanos normales, cetonas, alcoholes, y agua, para conocer las condiciones de condensación bajo las cuales el flux molar toma valores negativos, en vez de valores positivos, en algún punto del condensador. Un flux molar negativo es sinónimo de que un componente está evaporando, aún cuando globalmente la mezcla esté condensando.

La condensación de las mezclas se efectuó para tres diferentes composiciones molares del vapor de entrada bajo condiciones válidas del modelo. Los resultados indican que la composición del vapor no modifica la dirección de transferencia de los componentes, estos siempre condensan.

Con la composición molar constante, la temperatura del vapor, el flujo de vapor y la temperatura del agua de enfriamiento fueron variadas independientemente uno del otro. En el intervalo de valores seleccionados para las anteriores variables, no fue posible encontrar que alguno de los componentes evaporara.

Dirigida por:

Dr. Juan Francisco Javier Alvarado

DEDICATORIAS

A DIOS: no tengo palabras para agradecer lo que he recibido de él: la vida, mi familia, la amistad.

A MIS PADRES:

Cristina Vázquez Almanza y Pedro Sánchez Esquivel

Con profundo amor, por su ejemplo, perseverancia y apoyo incondicional, simplemente :
GRACIAS.

A MIS HERMANOS:

Lauro, Joel, Efraín, Verónica, Carlos Noé, Marisela, Javier y Rosario

Por todo su apoyo, los momentos compartidos y los más invaluable: su cariño. Sin omitir a: Martha, Andrea, Pita, Moreno, Susy, Cris, Eva, Diana, Toño, Chillón, Lety, Gaby, Pepe, Gordito, Vero, Faty, Paty, Carmelita, Lole, Nanda y ?.

A MIS ABUELITOS:

Ma'Bina(†) y Pa'Toño(†), Yaxis y Güeyo

Por su amor, mis recuerdos de niño a su lado nunca voy a olvidarlos.

A MIS AMIGOS:

Elías, Josefa(†) ,Omar, Roberto, Maricruz, Verónica, Mónica, Claudia N., Diana y Rocío.

Por su amistad, su apoyo y por motivarme siempre a superarme, nuevamente gracias.

A mi tía Alicia, por las vivencias y su cariño. A su familia: Davis, Hilda, David, Karina y Juan. Con cariño a mi tío Filemon (†) y familia, y mi tía Seferina y familia.

A todos mis demás tíos, primos y primas, gracias por todo.

AGRADIMIENTOS

A mi asesor:

Dr. Juan Francisco Javier Alvarado

Por sus valiosas aportaciones al dirigir esta tesis, su amistad y ejemplo.

A los Drs. Rafael Chávez, Fernando Tiscareño y Gustavo Iglesias, por sus comentarios y colaboración en esta tesis

A los profesores que a través del tiempo me han transmitido sus conocimientos y me han brindado su amistad: Ofelia Hernández, Lorenzo García, Efrén García, Lucy Valádez, Margarita Durán, Teresa Pérez, Alicia Alejos, Salvador León, Lupita Almanza, Carlos, Guillermo González, Eleazar Escamilla y Toño Rocha.

A mis compañeros de generación: Angel, Cesar, Vladimir, Martín, Mauricio, Julio, Lety Ernesto y José Luis, por su amistad y vivencias compartidas.

A todos mis compañeros que durante mi estancia me brindaron su amistad: José Luis, Jacinto, Gerardo, Ruy, Juan Manuel M., Glafiro, Marco Tulio, Ramón Alfaro, Arturo, Argentina, Ramón, Raúl, Blanca, Carlos Manuel, Alejandro P., Eriberto, Silvia, Alberto, Claudia, Víctor A., Daniel, Botello, Alex, Raquel, Juan B., Mary, Eusebio, Alan, Fabiola, Gaspar, Juanita, Lydia y Omar.

A Carmen A., Celina A., Gonzalo, Rosy, Leonor, Claudia Cristina, Elena, Gina, Claudia A., Emma, Yolanda, Julio J., María Elena, Oscar H., Alex M., Mauro, Liliana, Oscar L., Rita M, Ruth M., Amparo, Concha y Alicia por su amistad.

A Lorena, July, Gloria, Eréndira y Lety, por su amistad y disponibilidad al momento de solicitar su ayuda.

A Claudia I., Toño, Ceci, Juan Manuel, Jorge B., Martín y Selvas, por su amistad y recibimiento.

A CONACYT y DGIT por el apoyo económico durante el desarrollo de este trabajo.

Capítulo 1

Introducción

La condensación de mezclas es una operación de importancia en la industria de los procesos químicos. Por ejemplo, el reflujo es una parte indispensable en los procesos de destilación. Un condensador total se utiliza para producir el reflujo líquido, pero un condensador parcial, en el cual una parte del vapor abandona el equipo, se utiliza algunas veces. La razón de utilizar un condensador parcial se debe a la separación adicional que toma lugar fuera de la columna, la cual se considera como una etapa de separación.

En la formulación de un modelo para describir el proceso de condensación se requiere establecer el tipo de condensación: estática o dinámica. Diferencias relevantes existen entre un proceso de condensación estática; vapor estático que condensa y permanece en equilibrio con el líquido condensado, y uno de condensación dinámica; vapor fluyendo sobre una superficie fría al mismo tiempo que condensa. Este último generalmente llamado proceso de condensación local.

Alvarado y Eubank [1] derivaron una relación termodinámica general para la relación de las cantidades de los Componentes 1 y 2 condensados diferencialmente, o relación de fluxes molares N_2/N_1 , en el caso de condensación estática de una mezcla binaria. Estos autores demostraron que la relación de fluxes N_2/N_1 sólo resulta igual a la relación de fracción molar del líquido x_2/x_1 en el punto de rocío e igual a la relación de fracción molar del vapor y_2/y_1 en el punto de burbuja. Alvarado y Eubank [1] determinaron que la relación de fluxes N_2/N_1 varía durante la condensación diferencial estática y resulta siempre positiva, lo cual

Índice General

Resumen	i
Índice general	ii
Índice de figuras	iv
Índice de tablas	vii
Nomenclatura	ix
1 Introducción	
1.1 Objetivo	2
1.2 Justificación	3
1.3 Descripción del Trabajo	3
2 Revisión Bibliográfica	
2.1 Condensación de mezclas de vapor	4
2.2 Modos de condensación	5
2.3 Equipo de condensación	7
2.4 Patrón de flujo en condensadores verticales	8
2.5 Condensación local de mezclas binarias	9
2.6 Condensación local de mezclas multicomponentes	11
3 Transferencia de Masa y Calor	
3.1 Teoría de película para la transferencia de masa y energía en la condensación local	13
3.2 Transferencia de masa en la fase vapor	16
3.2.1 Transporte de masa en una mezcla binaria	18
3.2.2 Transporte de masa en una mezcla ternaria	22
3.3 Transporte de masa en la fase líquida	27
3.4 Modelo de equilibrio interfacial	29

3.5	Trasferencia de energía	30
3.6	Modelo para el cálculo de los fluxes	34
4	Modelo Matemático	
4.1	Balances de masa y energía en un condensador	36
4.2	Modelo de condensación de mezclas	40
4.3	Solución al sistema de ecuaciones	43
4.4	Procedimiento de cálculo	44
5	Resultados y Discusión	
5.1	Casos de estudio	47
5.2	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar	49
5.3	Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar	65
5.4	Relación de fluxes molares	72
5.4.1	Efecto de la composición inicial del vapor en la relación de fluxes	72
5.4.2	Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de fluxes	82
5.5	Relación flux de difusión a flux convectivo	88
5.5.1	Efecto de la composición inicial del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo	89
5.5.2	Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flux de difusión a flux convectivo	99
5.6	Eficiencia en el proceso de condensación	102
6	Conclusiones y Recomendaciones	106
	Apéndice A. Métodos de cálculo de propiedades	109
	Apéndice B. Parámetros del modelo	13
	Referencias	120

Índice de Figuras

2.1	Modos de condensación.	5
2.2	Sentido de circulación del flujo de vapor en un tubo vertical.	9
3.1	Perfil de composición y de temperatura en un punto de un condensador vertical concéntrico	14
3.2	Perfiles de composición representativos para mezclas binarias y ternarias.	24
4.1	Sección diferencial de condensador concéntrico vertical operando en estado estable	37
4.2	Variables de entrada y salida en una sección j de un condensador concéntrico dividido en s segmentos.	39
5.1	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).	50
5.2	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).	51
5.3	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar total para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)..	52
5.4	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar total para la mezcla etanol(1)-benceno(2).	54
5.5	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del metanol para la mezcla metanol(1)-clorobenceno(2).	55
5.6	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del metanol para la mezcla metanol(1)-agua(2).	56
5.7	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	57
5.8	Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	58

- 5.9 Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del clorobenceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 59
- 5.10 Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del etanol para la mezcla metanol(1)-etanol(2)-agua(3). 61
- 5.11 Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar total para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 62
- 5.12 Efecto de la composición inicial del vapor en la temperatura del tubo interno del condensador para la mezcla benceno(1)-tolueno(2). 64
- 5.13 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.50$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2). 66
- 5.14 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del tolueno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.50$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2). 67
- 5.15 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3) 58
- 5.16 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del tolueno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 69
- 5.17 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del clorobenceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 70
- 5.18 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes para la mezcla benceno(1)-tolueno(2). 73
- 5.19 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes para la mezcla etanol(1)-benceno(2). 74

5.20 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes para la mezcla etanol(1)-agua(2).	75
5.21 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes para la mezcla metanol(1)-clorobenceno(2).	76
5.22 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes de tolueno a benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	79
5.23 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes de clorobenceno a benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	80
5.24 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes de clorobenceno a tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	81
5.25 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes de agua a metanol para la mezcla metanol(1)-etanol(2)-agua(3).	83
5.26 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el la relación de fluxes a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.50$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).	84
5.27 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de fluxes de tolueno a benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	85
5.28 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de fluxes de clorobenceno a benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	86
5.29 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de fluxes de clorobenceno a tolueno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).	87
5.30 Efecto de la composición inicial del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).	90

- 5.31 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flux de difusión a flux convectivo del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2). 91
- 5.32 Efecto del EVL y componentes de la mezcla en la relación de flux difusivo a flux convectivo del componente ligero a la composición inicial de vapor $y_{1o}^V = 0.25$ para las mezclas benceno(1)-tolueno(2), etanol(1)-benceno(2), etanol(1)-agua(2) y metanol(1)-clorobenceno(2).. 94
- 5.33 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flux difusivo a flux convectivo del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 96
- 5.34 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flux difusivo a flux convectivo del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 97
- 5.35 Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flux difusivo a flux convectivo del clorobenceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 93
- 5.36 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno a la composición inicial de vapor $y_{1o}^V = 0.25$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2). 100
- 5.37 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 101
- 5.38 Efecto del flujo del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno a la composición inicial de vapor $y_{1o}^V = 0.25$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2). 103
- 5.39 Efecto del flujo del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3). 104

Índice de Tablas

5.1 Mezclas de estudio para la simulación de condensación parcial.	43
5.2 Relación de fracción molar para el vapor de entrada y el líquido en equilibrio para las mezclas de estudio.	78
5.3 Eficiencia en el proceso de condensación de mezclas binarias.	105
5.7 Eficiencia en el proceso de condensación de mezclas ternarias.	105

Nomenclatura

A	Área del condensador, m^2
ΔA	Área interfacial en la sección j del condensador, m^2
$[B]$	Matriz de combinación de coeficientes de difusión de Stefan-Maxwell
c_t	Densidad molar de la mezcla, $Kmol\ m^{-3}$
C_p	Capacidad calorífica molar, $J\ Kmol^{-1}$
d	Diámetro del tubo, m
D	Coefficiente de difusión binario, $m^2\ s^{-1}$
D_{ieff}	Coefficiente de difusión efectivo del componente i en una mezcla multicomponente, $m^2\ s^{-1}$
D_{ij}	Coefficiente de difusión de Fick del par ij , $m^2\ s^{-1}$
\mathcal{D}_{ij}	Coefficiente de difusión de Stefan-Maxwell del par ij , $m^2\ s^{-1}$
$[D]$	Matriz de coeficientes de difusión de Fick, $m^2\ s^{-1}$
$Dipm_i$	Momento dipolar del componente i , Db
e	Error relativo
\mathcal{E}	Eficiencia
E	Flux de energía respecto a un sistema de coordenadas fijo, $KJ\ s^{-1}\ m^{-2}$ Ecuación de balance de energía
E	Factor de rapidez de transferencia de masa de Colburn y Drew
f	Factor de fricción de fanning
(F)	Vector de ecuaciones independientes
F	Coefficiente de transferencia de masa de Colburn y Drew, $Kmol\ s^{-1}\ m^{-2}$
G	Flux másico, $Kg\ s^{-1}\ m^{-2}$
h	Coefficiente de transferencia de calor, $KJ\ s^{-1}\ K^{-1}$

H	Entalpía molar de la mezcla, KJ Kmol^{-1}
\bar{H}	Entalpía molar parcial del componente i , KJ Kmol^{-1}
ΔH_{vap}	Calor de vaporización molar, KJ Kmol^{-1}
$[I]$	Matriz identidad
J_D	Factor j de Chilton y Colburn para transferencia de masa
J_H	Factor j de Chilton y Colburn para transferencia de calor
J	Flux molar de difusión, $\text{Kmol s}^{-1} \text{m}^{-2}$
(J)	Vector de flux molar de difusión, $\text{Kmol s}^{-1} \text{m}^{-2}$
$[J]$	Jacobiano
k	Coefficiente de transferencia de masa en una mezcla binaria, $\text{Kmol s}^{-1} \text{m}^{-2}$
$[k]$	Matriz de coeficientes de transferencia de masa multicomponente, $\text{Kmol s}^{-1} \text{m}^{-2}$
K_i	Relación de equilibrio de fases del componente i
ℓ	Espesor de película estancada, m
l	Flujo molar del componente i en la fase líquida, Kmol s^{-1}
L	Flujo molar de la mezcla en la fase líquida, Kmol s^{-1} Flujo másico de la mezcla en la fase líquida, Kg s^{-1}
L_C	Flujo molar del fluido de enfriamiento, Kmol s^{-1} Flujo másico del fluido de enfriamiento, Kg s^{-1}
M_i	Peso molecular del componente, Kg Kmol^{-1}
M	Ecuación de balance de masa
n	Número de componentes en la mezcla
N_i	Flux molar del componente i respecto a un sistema de coordenadas fijo, $\text{Kmol s}^{-1} \text{m}^{-2}$
N_t	Flux molar de la mezcla respecto a un sistema de coordenadas fijo, $\text{Kmol s}^{-1} \text{m}^{-2}$
P	Presión, $\text{Kg s}^{-2} \text{m}^{-1}$
q	Flux de calor conductivo, $\text{KJ s}^{-1} \text{m}^{-2}$
Q	Ecuación de equilibrio
r	Radio del tubo, m Coordenada radial

R	Ecuación de transferencia de masa
Re	Número de Reynolds
s	Número de secciones
S	Ecuación de suma de fracciones molares
T	Temperatura, K
v	Flujo molar del componente i en la fase vapor, Kmol s^{-1}
	Flujo molar de la mezcla en la fase vapor, Kmol s^{-1}
	Flujo másico de la mezcla en la fase vapor, Kg s^{-1}
v_{ci}	Volumen específico del componente i en el punto crítico, $\text{m}^3 \text{Kmol}^{-1}$
w_i	Factor acéntrico del componente i
x_i	Fracción molar del componente i en la fase líquida
(X)	Matriz de variables independientes
y_i	Fracción molar del componente i en la fase vapor
z	Coordenada axial
z_i	Fracción molar del componente i en la cantidad total de condensado
Z	Longitud del tubo, m
	Factor de compresibilidad
ΔZ	Incremento de longitud, longitud de la sección j del condensador, m

Símbolos griegos

ϕ	Coeficiente de fugacidad
γ	Coeficiente de actividad
	Longitud adimensional de la película estancada
κ	Conductividad térmica, $\text{KJ m}^{-1} \text{K}^{-1} \text{s}^{-1}$
μ	Viscosidad dinámica, $\text{Kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
π	Constante 3.1416
ρ	Densidad másica, Kg m^{-3}
H	Factor de rapidez de transferencia de calor

- [Φ] Matriz de factores de rapidez de transferencia de masa
 ε^H Factor de corrección para transferencia de calor a flux molar finito
 [ε] Matriz de factores de corrección para transferencia de masa a flux molar finito

Subíndices

- b* Punto de burbuja
c Punto crítico
C Fluido de enfriamiento
eff Parámetro “efectivo”
ext Tubo externo
i Índice de componentes
 Propiedad o parámetro del componente *i*
int Tubo interno
I Interfase
j Propiedad o parámetro en la sección *j* de condensador
k Iteración
L Fase líquida
m Índice de componentes
n Componente *n*-ésimo
o Parámetro global
 Condición inicial
s Propiedad o parámetro en la última sección del condensador
t Mezcla total
 Fase vapor
 Pared del tubo

Superíndices

- C* Fluido de enfriamiento
H Transferencia de calor

<i>I</i>	Interfase
<i>L</i>	Fase líquida
<i>M</i>	Transferencia de masa
<i>r</i>	Punto de rocío
<i>ref</i>	Estado de referencia
<i>sat</i>	Estado de saturación
<i>T</i>	Temperatura
	Fase vapor
	Pared del tubo
•	Parámetro bajo condición de flux molar total finito

Misceláneos

—	Propiedad parcial, parámetro promedio
	Valor absoluto del parámetro

indica que los componentes de la mezcla se transfieren en la misma dirección, es decir, estos condensan.

En casos dinámicos (condensación local), tales como la condensación de una película líquida sobre la pared interna de un tubo de condensador, el equilibrio de fases se supone prevalece sólo en la interfase vapor-líquido. Colburn y Drew [2] derivaron las ecuaciones para el cálculo del flux molar de cada componente en la condensación local de una mezcla binaria. En base al análisis cualitativo de estas expresiones, Colburn y Drew [2] dedujeron la posible existencia de la evaporación de un componente y condensación de otro simultáneamente, esto es, una relación de fluxes negativa $N_2/N_1 < 0$. En el caso estático esta relación negativa no es posible. Sin embargo, Colburn y Drew [2] no presentaron información sobre el flux molar de cada componente, o la relación de fluxes, que demostrara la existencia de este fenómeno en alguna mezcla. Por otra parte, el trabajo de Colburn y Drew [2] mostró que el líquido condensado no permanece en equilibrio con el vapor. Por lo tanto, la suposición de despreciar la transferencia de masa debido al contacto entre las fases no es válida, como se ha supuesto tradicionalmente en los textos de Procesos de Separación [3].

Lo que se intenta en este trabajo es el re-desarrollo del trabajo de Colburn y Drew [2], y su complementación con el caso de mezclas multicomponentes [4], particularmente de tres componentes, para determinar las condiciones de condensación bajo las cuales es posible que un componente evapore, aún cuando globalmente la mezcla este condensando

1.1 Objetivo

El objetivo del presente trabajo es comprobar si un componente evapora en el proceso de condensación local de mezclas binarias y ternarias en algún punto de un condensador vertical de tubos concéntricos. Particularmente, establecer la influencia de la termodinámica de las fases (equilibrio vapor-líquido), composición molar inicial del vapor, condición térmica del vapor, flujo de vapor y temperatura del agua de enfriamiento, en la posible existencia de esta evaporación.

1.2 Justificación

La justificación de este trabajo se debe a que se ha especulado sobre la existencia de evaporación de un componente en el proceso de condensación de una mezcla binaria [2]. Sin embargo, no se ha presentado evidencia teórica ni experimental que compruebe tal aseveración. En la condensación de mezclas gas-vapor, la información hasta hoy existente no ha mostrado que este fenómeno ocurra.

1.3 Descripción del trabajo

En el capítulo 2 se describe brevemente el proceso de condensación de mezclas de vapores. Se presenta una descripción básica de la hidrodinámica del vapor y líquido condensado, analizándose los modos de condensación y patrones de flujo presentes en condensadores verticales. Asimismo, se describe brevemente los diferentes modelos existentes para la predicción de los fluxes molares en la condensación de mezclas binarias y multicomponentes. Dentro del capítulo 3 se establecen las ecuaciones de transferencia de masa y calor para sistemas binarios y ternarios de componentes condensables bajo la teoría de película.

En el capítulo 4 se formula el modelo matemático para el condensador vertical y se presenta el algoritmo de solución. El capítulo 5 presenta los casos de estudio y se analizan los resultados obtenidos. En el capítulo 6 se presentan las conclusiones y recomendaciones.

Capítulo 2

Revisión Bibliográfica

En este capítulo se presenta una introducción general al proceso de condensación de mezclas de vapores. Además, se exponen los modos de condensación, patrón de flujo y equipo de condensación. Asimismo, se describe brevemente la condensación local de mezclas binarias y multicomponentes, tanto de mezclas de componentes condensables como de mezclas con presencia de incondensables (gas-vapor).

2.1 Condensación de mezclas de vapores

La condensación es un proceso de transferencia de masa y calor simultáneos que implica un cambio de la fase vapor a la fase líquida con la substracción de cantidades considerables de energía calorífica [3]. La rapidez de cambio de fase en la condensación está influenciada por: la rapidez de transferencia de calor, el comportamiento de la fase vapor y el comportamiento de la nueva fase formada, el líquido condensado.

La condensación de vapores sobre superficies tubulares más frías que la temperatura de condensación del vapor es de gran importancia en los procesos que intervienen vapores tales como los de hidrocarburos, agua y otras sustancias volátiles. El vapor que condensa puede ser una sustancia pura o una mezcla.

El término mezcla de vapores cubre un amplio intervalo de situaciones [4]. Una situación límite es cuando todos los componentes que forman la mezcla tienen sus temperatu-

ras de ebullición mayores a la temperatura de la superficie fría y la mezcla es condensada totalmente. El límite opuesto ocurre cuando al menos un componente de la mezcla tiene su temperatura de ebullición menor a la temperatura mínima de la superficie fría y su solubilidad en el condensado resulta despreciable. En tal caso, lo tanto, todos los componentes no pueden ser condensados. Por ejemplo, el nitrógeno y el helio presentan este comportamiento y son llamados gases no condensables o inertes. Un caso intermedio es el de una mezcla de sustancias volátiles donde los componentes más ligeros no son condensados a las temperaturas presentes en la superficie fría, pero pueden disolverse en los componentes más pesados que forman el líquido condensado.

Las pérdidas por fricción en un condensador son generalmente muy pequeñas, de forma que la condensación es esencialmente un proceso a presión constante. La temperatura de condensación de una sustancia pura depende exclusivamente de la presión, y por consiguiente la condensación de una sustancia pura es un proceso isotérmico.

La condensación de una mezcla de vapores, a presión constante, se produce en un intervalo de temperaturas y genera un condensado cuya composición va variando hasta que condensa todo el vapor, momento en que la composición del condensado es igual a la del vapor original. La fase del líquido condensado depende del tipo de sustancias que conforman la mezcla. Las sustancias miscibles forman un condensado homogéneo mientras que las sustancias inmiscibles (parcial o totalmente) forman un condensado heterogéneo. La condensación de líquidos inmiscibles requiere un análisis del proceso de formación de las diferentes fases, así como un análisis del patrón de flujo de las mismas [5].

2.2 Modos de condensación

Un vapor puede condensar sobre una superficie tubular fría en una de dos formas: en película o en gotas, como se muestra en la Figura 2.1. En la condensación en película, que es más frecuente en las aplicaciones industriales, el líquido condensado forma una película continua cubriendo la superficie del tubo y fluye por acción de la gravedad [3,4]. Esta capa de líquido interpuesta entre el vapor y la pared del tubo proporciona una resistencia al flujo de

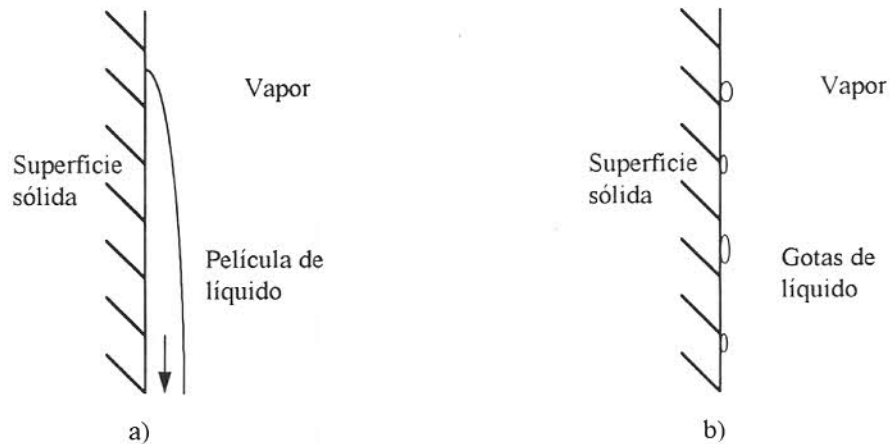


Figura 2.1: Modos de condensación: (a) Condensación en película y (b) en gotas sobre una superficie vertical.

calor que se traduce en un coeficiente de transferencia de calor. La condensación en película se produce en las superficies de metales comunes, aún cuando la condensación inicie en gotas sobre la superficie ocurre una rápida transición a la condensación en película.

En la condensación en gotas el condensado comienza a formarse en puntos microscópicos de nucleación. Las gotas crecen y se juntan con otras que están en sus inmediaciones para formar pequeñas gotas visibles. Las gotas finas se reúnen a su vez formando arroyuelos que fluyen hacia abajo por acción de la gravedad, barren el condensado y dejan la superficie libre para la formación de nuevas gotas. Esta acción permite que una gran parte de la superficie fría esté desnuda y expuesta directamente al vapor. Como no hay película de líquido la resistencia a la transferencia de calor es pequeña, por tanto, manifestando un coeficiente de transferencia de calor de valor elevado.

La aparición de condensación en gotas depende fundamentalmente de que el líquido no moje a la superficie fría. Para lograrlo se requiere de una o combinación [3,6] de las siguientes situaciones: (1) superficies muy lisas y pulidas (difíciles de encontrar en procesos comunes); (2) tasas de condensación bajas; y (3) adición de un promotor sobre la superficie fría que provoque la formación de gotas.

La resistencia de la capa del condensado, aún para la condensación en película, es generalmente pequeña en comparación con la resistencia del lado del fluido refrigerante, de forma que con la condensación en gotas se consigue un incremento relativamente pequeño del coeficiente global. Por ello, en las operaciones normales de simulación y de diseño se supone que la condensación se produce en forma de película [7].

2.3 Equipo de condensación

La condensación se efectúa en una gran variedad de equipos. La selección del equipo de condensación depende de las propiedades de la mezcla y la aplicación. Los procesos industriales usan intercambiadores de calor de tubos y coraza los cuales permiten áreas de intercambio de varios cientos de metros cuadrados. La superficie de enfriamiento puede ser de cualquier orientación, pero los arreglos horizontal y vertical son los más comunes.

Los condensadores de tubos verticales presentan coeficientes de transferencia de calor menores a los obtenidos en tubos horizontales. Además, tienen problemas para la limpieza y mantenimiento de los tubos [6]. Sin embargo, los tubos verticales son preferibles cuando hay que subenfriar considerablemente el condensado por debajo de su temperatura de condensación. Las mezclas de vapores y gases no condensables se enfrían y condensan habitualmente en el interior de tubos verticales, de forma que la corriente que llega barre continuamente el gas inerte de la superficie de transferencia de calor.

Los intercambiadores de tubos concéntricos son útiles cuando no se requiere de una superficie de transferencia superior a 15 m^2 [3]. Los trabajos experimentales sobre condensación utilizan esta configuración por la facilidad en el control de las condiciones del proceso. El arreglo permite el flujo a contracorriente, el patrón más utilizado, y el flujo en corrientes paralelas.

El flujo en corrientes paralelas se utiliza muy poco en el intercambiador concéntrico por que no es posible conseguir que la temperatura de salida de un fluido se aproxime a la temperatura de entrada del otro. Otro inconveniente es la cantidad de calor transferido, la cual en corrientes paralelas resulta menor a la obtenida con flujo en contracorriente [3].

2.4 Patrón de flujo en condensadores verticales

La condensación en dispositivos verticales de tubos concéntricos se efectúa tanto dentro como fuera del tubo interno. En ambos casos la película de condensado desciende bajo la influencia de la gravedad. Sin embargo, se prefiere que el vapor fluya por la sección del tubo interno y el fluido refrigerante por la sección anular (espacio comprendido entre el tubo interno y el externo).

El espesor de la película de condensado aumenta en la dirección del flujo debido al incremento continuo del líquido condensado. En el punto de formación de la película de condensado, el régimen de flujo es laminar y permanecerá como tal hasta que la velocidad de flujo del líquido condensado llegue a ser lo suficientemente alta para que se inicie la transición a régimen turbulento [7].

El líquido condensado siempre desciende por la superficie vertical, pero el vapor tiene dos formas de circular por el interior del tubo: ascendente o descendente, como se representa en la Figura 2.2. La circulación ascendente presenta una limitante especial respecto a la circulación descendente; la inundación. Este fenómeno se presenta cuando la velocidad de flujo del vapor es tan elevada que arrastra a la película de condensado, el flujo se vuelve inestable y presenta el arrastre de porciones de líquido en forma de flujo “tapón” en algún momento. La circulación descendente se prefiere en la condensación de vapores y la circulación ascendente se prefiere en la destilación adiabática [8,9] (un líquido de composición conocida se alimenta por la zona superior del tubo a manera de reflujo para lograr una separación más selectiva del vapor que asciende).

La condensación del vapor puede ser total o parcial. En la condensación total se efectúa una rápida substracción de calor desde la entrada del tubo lo cual provoca una condensación “bruta” (una considerable cantidad de vapor pasa al estado líquido), de forma que todo el vapor se condensa en una porción del área total disponible. Los intercambiadores horizontales son preferidos a los verticales para la condensación total a menos que un subenfriamiento del líquido condensado sea requerido.

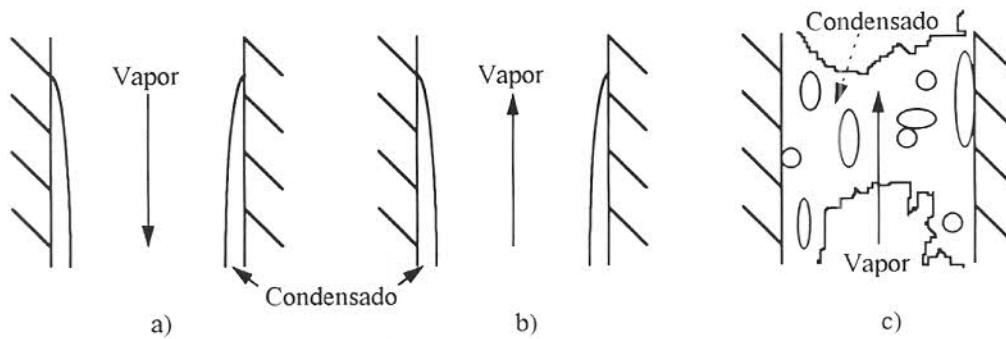


Figura 2.2: Sentido de circulación del flujo de vapor por el interior de un tubo vertical: (a) descendente y (b) ascendente del vapor. (c) La inundación presenta "tapones" de líquido que son desalojados por el vapor al ir ascendiendo.

En una condensación parcial sólo una parte del vapor total se condensa. Esto permite que por el fondo del tubo se retiren vapor y líquido en alguna composición. El régimen de flujo del vapor se modifica a medida que la condensación ocurre a lo largo del tubo; el vapor que entra en flujo turbulento, dependiendo de la cantidad condensada, presenta al salir, una o otra de estas situaciones, un flujo que permanece turbulento o un flujo con un valor de número de Reynolds cercano a régimen laminar.

La hidrodinámica del vapor y el líquido condensado no es el único aspecto importante del proceso de condensación; sin embargo, el conocimiento del régimen de flujo dominante permite seleccionar el método de cálculo del coeficiente de transferencia de calor.

2.5 Condensación local de mezclas binarias

Colburn y Hougen [9] fueron pioneros en el establecimiento de las bases para la descripción fundamental de la condensación de mezclas binarias gas-vapor. El método de Colburn y Hougen sólo se usó para el cálculo del área superficial requerida por un enfriador-condensador. Sin embargo, las consideraciones teóricas son limitadas y están basadas como caso especial de la deshumidificación de un gas permanentemente saturado por contacto con una superficie fría.

La ecuación básica del método de Colburn y Hougen fue derivada para un condensador tubular enfriado por agua y establecida a partir del balance de energía en la interfase gas-

líquido, ningún análisis a la transferencia de masa que ocurre en el proceso fue efectuado. La solución a la ecuación por prueba y error permite obtener los perfiles de temperatura de la mezcla gas-vapor, condensado y fluido de enfriamiento como función de la longitud del tubo vertical. Aún cuando el método de Colburn y Hougen analiza de manera simple la condensación, este puede ser empleado en el diseño preliminar de condensadores [10, 11, 12].

Los aspectos de transferencia de masa de la aproximación de Colburn y Hougen fueron generalizados por Colburn y Drew [2]. El trabajo de Colburn y Drew marcó el inicio del análisis del proceso de condensación local considerando la transferencia de masa y calor simultánea. Estos autores incluyeron tanto el caso de una mezcla saturada de dos vapores condensables como la extensión a mezclas binarias sobrecalentadas. El estudio de Colburn y Drew para la transferencia de masa fue basado en la teoría clásica de dos películas de Lewis-Whitman que establece la presencia de resistencia a la transferencia de masa y calor en ambos lados de la interfase. Cada resistencia se ve influenciada por términos de transporte molecular (conducción y difusión) y convectivo. En esta superficie interfacial se supone que las fases se encuentran en equilibrio.

El modelo analítico genera una expresión para el cálculo del flux total N_t (cantidad total de los componentes que es condensada diferencialmente) en función de la composición entre la interfase y la corriente de vapor, además de un coeficiente de transferencia de masa que resulta ser igual al coeficiente de transferencia de masa definido por Bird et al. [13].

Colburn y Drew analizaron la condensación de la mezcla metanol-agua a presión atmosférica en la entrada del tubo. Señalaron que el equilibrio estático resulta cuando la superficie fría está a una temperatura cercana a la temperatura de rocío de la mezcla. En este caso el rocío (primer traza de condensado sobre la superficie) está en equilibrio con el vapor porque $N_t \rightarrow 0$. Indicaron que la existencia de una diferencia de temperatura finita, esto es, una temperatura de la superficie fría menor a la temperatura del vapor, conlleva a un equilibrio dinámico (condensación local). El rocío por equilibrio dinámico resulta considerablemente más rico en el componente más volátil que para el equilibrio estático. Para el caso de una diferencia de temperatura grande y una rápida condensación, esto es, $N_t \rightarrow \infty$, la composición del rocío dinámico se aproxima a la composición del vapor.

Colburn y Drew generaron una expresión simple para el cálculo de la fracción molar del metanol en la cantidad total de condensado $z_1 = N_1/N_t$, estableciendo que esta fracción molar puede resultar negativa. Un valor negativo de z_1 indica la evaporación del metanol y la condensación simultánea del agua en el proceso de condensación.

Los métodos de no-equilibrio o diferenciales, como son denominados los trabajos para simulación o diseño de condensadores siguiendo el trabajo original de Colburn y Drew, consisten de un sistema de ecuaciones diferenciales unidimensionales correspondientes a los balances de masa y energía en una sección de condensador. Estas ecuaciones diferenciales se integran numéricamente a lo largo del condensador y en cada etapa de integración las ecuaciones de transferencia de masa y calor son resueltas [14, 15, 16, 17, 18]. La solución a las ecuaciones permite conocer la variación de los perfiles de temperatura y composición de las fases, así como la variación en los fluxes y en la relación de fluxes a lo largo del condensador.

Algunos métodos de no equilibrio basados sobre la teoría de capa límite están limitados a mezclas binarias gas-vapor y no se han desarrollado al punto tal de usarse en el diseño (o simulación) de condensadores de geometría compleja [4].

2.6 Condensación local de mezclas multicomponentes

El trabajo de Colburn y Drew [2] para el caso de mezclas binarias fue extendido a mezclas multicomponentes por Schrod [19] empleando el concepto de difusividad efectiva. Sin embargo, esta simplificación para describir el proceso de transferencia de masa multicomponente ignora la existencia de interacciones difusionales en la fase vapor.

Toor [20] y Stewar y Prober [21] mostraron que las ecuaciones de Stefan-Maxwell pueden ser usadas para describir la transferencia de masa multicomponente. Un sistema de ecuaciones para el cálculo del flux de cada componente se obtiene en función del gradiente de concentración, pero los coeficientes de difusión requeridos son dependientes de la concentración de forma que las ecuaciones son no lineales. Su técnica de solución depende de la

linearización de estas ecuaciones. Krishna y Standart [22] mostraron que el procedimiento de la linearización no es esencial y que la solución exacta puede ser obtenida. El modelo de película multicomponente de Krishna y Standart [22], basado en la solución analítica exacta a las Ecuaciones de Stefan-Maxwell, ha sido incorporado por Taylor y Krishna [7] en los procesos de simulación y diseño de equipos de separación, entre estos la condensación parcial de mezclas de vapor.

La comparación del método de Schrodtt y el método de Krishna y Standart para la transferencia de masa fue efectuado por Webb et al. [23], y Krishna y Panchal [19] para el caso de una mezcla de vapores en presencia de un componente incondensable, indicando que ambos métodos son equivalentes en mezclas diluidas de todos los componentes condensables en el gas incondensable. Sólo bajo esta condición los efectos de interacción son de poca importancia.

Taylor et al. [3] efectuaron una revisión y comparación de los modelos de condensación de no-equilibrio. Particularmente, analizaron las diferencias en la transferencia de masa en la fase vapor bajo: (1) el modelo de película de difusividad efectiva [19]; (2) los modelos de película que cuantifican los efectos de interacción [20, 21, 22]; y (3) un modelo de difusividad de remolino turbulento. La aplicación de los modelos fue probada sobre datos experimentales de condensación y de columnas de destilación adiabática. Taylor et al. [3] concluyeron que los modelos de película de interacción no mostraron diferencias significativa con el modelo de difusividad de remolino turbulento, pero notorias diferencias se presentaron con el modelo de difusividad efectiva principalmente en los casos de mezclas con todos los componentes condensables. Estos autores mostraron la importancia de las interacciones difusionales en la condensación de mezclas de tres o mas componentes.

Capítulo 3

Transferencia de masa y calor

Este capítulo describe brevemente la teoría de película para la transferencia simultánea de masa y energía en un punto local de un condensador. En particular, se establecen las ecuaciones para la transferencia de masa de mezclas binarias y ternarias en la fase vapor, las ecuaciones para la transferencia de masa en el líquido condensado, el modelo de equilibrio interfacial, la ecuación para el transporte de energía y por último se presenta el modelo matemático para el cálculo del flux molar y de energía, composiciones molares y temperatura en la interfase.

3.1 Teoría de película para la transferencia de masa y energía en la condensación local

La condensación local de una mezcla de vapores sobre la superficie interna de un condensador vertical concéntrico se ilustra en la Figura 3.1, el proceso se efectúa en estado estable. El fluido de enfriamiento L_C asciende por la sección anular a la temperatura T^L y la mezcla de vapor V desciende (en contracorriente) por la sección interna a la temperatura T^V con una fracción molar y_i^V del componente i . La corriente de vapor es separada de la superficie del tubo interno por una corriente de condensado L que fluye paralelamente a la temperatura T^L y presenta una fracción molar x_i^L para el componente i .

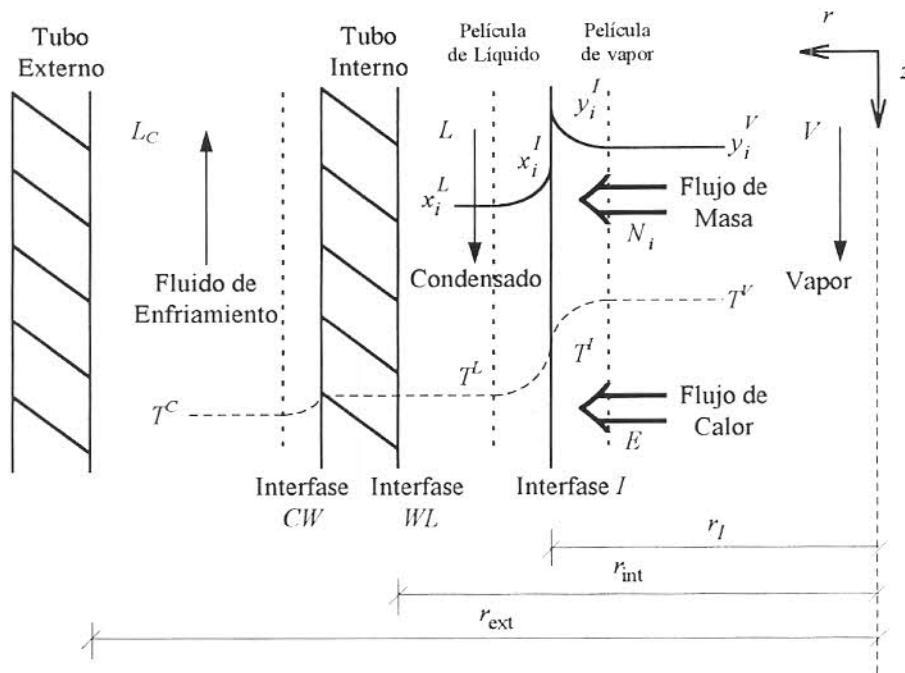


Figura 3.1: Perfil de composición y temperatura en un punto de un condensador vertical concéntrico

Las variaciones por la temperatura en las propiedades físicas, termodinámicas y de transporte pueden ser tomadas en cuenta por introducción de funciones de las propiedades dependientes de la temperatura o por uso de valores promedio de las propiedades en un intervalo de temperaturas predeterminado (como se efectúa en este trabajo). El análisis de transferencia de masa y energía en condensación es una extensión de las ecuaciones generales de transferencia de masa y energía simultánea, la complicación adicional es la presencia de transferencia de energía (pero no de masa) a través del tubo interno hacia el fluido de enfriamiento.

Las variaciones en las fases vapor y líquido condensado (sistemas de n componentes) en el transporte interfacial se describen mediante las ecuaciones de continuidad y de energía unidimensional bajo las condiciones hidrodinámicas prevalecientes en cada fase [7]. Esta simplificación en el transporte interfacial permite encontrar una solución preferentemente analítica. El modelo más simple para transporte interfacial es el fundamentado sobre la teoría de película. En este modelo se supone que toda la resistencia a la transferencia de masa esta

concentrada en una película delgada a la interfase y el transporte ocurre en esta película por difusión molecular y conduce a la interfase y el transporte ocurre en esta corriente de la fase los gradientes de temperatura y concentración son eliminados por el alto nivel de mezclado (turbulencia), estas películas delgadas se ilustran en la Figura 3.1.

Taylor et al. [4] encontraron diferencias poco significativas entre los resultados obtenidos por el modelo de película y el modelo de difusividad de remolino turbulento para la transferencia de masa de la fase vapor en la condensación de mezclas multicomponentes. Una desventaja de este último método es la necesidad de conocer el campo de velocidad desde la interfase hasta la corriente del fluido (el problema se elimina frecuentemente al considerar el perfil de velocidad de von Karman para flujo turbulento) y la expresión de la difusividad de remolino turbulento. Para una descripción detallada del método refiérase a Taylor y Krishna [7].

Para la transferencia de calor en estado estable en la película, el balance de energía se simplifica a

$$\frac{dE}{dr} = 0 \quad (3.1)$$

esto es, el flux de energía E (densidad de flujo de energía relativo a un sistema coordenado fijo) permanece constante a través de la película.

Para el transporte de masa en estado estable en la película, la ecuación de continuidad para cada componente se simplifica a

$$\frac{dN_i}{dr} = 0 \quad (3.2)$$

esto es, el flux molar N_i (densidad de flujo de masa relativo a un sistema de coordenadas fijo en unidades molares) es invariable a través de la película. Estrictamente un sistema de coordenadas cilíndricas debe ser empleado, pero como mostraron Taylor y Krishna [7] la simplificación de transporte unidireccional permite que la solución de la película plana se aplique esencialmente sin cambio a una película cilíndrica o esférica.

La teoría de dos películas de Lewis-Whitman establece que la resistencia a la transporte interfacial reside sólo en las películas de vapor y líquido, por tanto la interfase I es una superficie que no ofrece resistencia, y en la cual prácticamente prevalece el equilibrio de fá-

ses. Como el transporte toma lugar en dirección normal a la interfase, la condición frontera en la superficie interfacial vapor-líquido para el flux molar es

$$N_i^L = N_i = N_i^V \quad (3.3)$$

esto es, el flux molar es continuo a través de la interfase. De igual forma, la continuidad se satisface para el flux molar total

$$N_t^L = N_t = N_t^V \quad (3.4)$$

La condición de frontera que el flux de energía satisface es

$$E^L = E = E^V \quad (3.5)$$

lo cual muestra la continuidad del flux de energía a través de la interfase vapor-líquido. Generalmente en los problemas de condensación se desprecia la resistencia al transporte de energía del tubo y el perfil de temperatura se considera constante desde la corriente de líquido condensado hasta la superficie interfacial tubo-fluido de enfriamiento, como se ilustra en la Figura 3.1. Esta simplificación permite extender la igualdad de la Ecuación 3.5 a

$$E^C = E^L = E^V = E \quad (3.6)$$

esto es, el calor por la condensación se transfiere a través del líquido condensado y del tubo hasta el fluido refrigerante.

3.2 Transferencia de masa en la fase vapor

El flux molar N_i^V en la fase vapor es resultado de dos magnitudes: el flux molar de difusión que resulta de la difusión superpuesta al flujo global J_i^V , y el flux molar convectivo $y_i^V N_t^V$ que resulta del movimiento global del fluido

$$N_i^V = J_i^V + y_i^V N_t^V \quad (3.7)$$

donde el flux molar total es

$$N_t^V = \sum_{i=1}^n N_i^V \quad (3.8)$$

El flux molar difusivo J_i^V es referido a la velocidad media molar del vapor, un sistema de n componentes debe satisfacer la condición de

$$\sum_{i=1}^n J_i^V = 0 \quad (3.9)$$

la cual establece que sólo $n-1$ de los fluxes son independientes

$$J_n^V = -\sum_{i=1}^{n-1} J_i^V \quad (3.10)$$

La relación entre los fluxes difusivos en un sistema de n componentes, expresada mediante una matriz cuadrada $n-1$ dimensional de coeficientes de transferencia de masa $[k_i^\bullet]$ y una matriz columna $n-1$ dimensional de diferencias de composición $(y^V - y^I)$ entre el vapor de la interfase y_i^I y el vapor en la corriente y_i^V es

$$(J^V) = [k_V^\bullet](y^V - y^I) \quad (3.11)$$

En donde el superíndice \bullet en la matriz de coeficientes de transferencia de masa $[k_i^\bullet]$ sirve para indicar que los coeficientes son dependientes de los fluxes molares N_i^V . Estos coeficientes son llamados coeficientes de transferencia a flux finito y son usualmente relacionados a los coeficientes de transferencia a flux cero $[k_V]$ por la siguiente relación general

$$[k_V^\bullet] = [k_V][\mathcal{E}_V^M] \quad (3.12)$$

donde $[\mathcal{E}_V^M]$ es un factor de corrección. El flujo de los componentes hacia la interfase produce una distorsión de los perfiles de velocidad, composición y temperatura. Estos perfiles permanecen invariables ante un flux total N_t^V cero o casi cero por que el transporte se vuelve sólo difusivo al cancelarse el término convectivo. Este efecto de distorsión se cuantifica mediante los factores de corrección [13].

El flux molar de cada componentes N_i^V en una mezcla de n componentes es calculado al resolver el sistema de $n-1$ ecuaciones definido por

$$(N^V) = [k_V^\bullet](y^V - y^I) + (y^V)N_t^V \quad (3.13)$$

donde (N^V) representa una matriz columna $n-1$ dimensional de flux molar, (y^V) representa una matriz columna $n-1$ dimensional de composición global y N_t^V representa un escalar. Para el cálculo de los fluxes molares se requiere conocer los $(n-1)^2$ elementos de la matriz $[k_i^\bullet]$. Esta matriz de coeficientes de transferencia de masa bajo el modelo de película se calcula por diferentes métodos. Estos métodos de solución están basados en las distintas maneras de describir el transporte molecular de materia.

La difusión ordinaria, como es llamado a menudo el transporte molecular de materia, puede describirse por un planteamiento mecanístico (Ecuaciones de Stefan-Maxwell) en el cual es importante una consideración del movimiento molecular, o mediante un planteamiento continuo (“ley” generalizada de Fick, difusividad efectiva) donde no se hace ninguna consideración respecto al mecanismo real por el cual ocurre la transferencia molecular [7,24]. Ambos planteamientos establecen las relaciones entre los fluxes molares por difusión y los gradientes de concentración. Estas relaciones reciben del nombre de ecuaciones constitutivas de difusión. El cálculo de los fluxes molares de difusión resulta simple para una mezcla binaria, pero se vuelve complicado para una mezcla de tres o mas componentes.

3.2.1 Transporte de masa en una mezcla binaria

Para una mezcla binaria, la Ecuación 3.11 se reduce a

$$J_1^V = k_{V1}^{\bullet} (y_1^V - y_1^I) \quad (3.14)$$

porque sólo un flux es independiente.

En una mezcla binaria la Ecuación 3.10 establece la igualdad

$$J_2^V = -J_1^V \quad (3.15)$$

por lo tanto

$$k_{V2}^{\bullet} (y_2^V - y_2^I) = -k_{V1}^{\bullet} (y_1^V - y_1^I) \quad (3.16)$$

y

$$k_{V1}^{\bullet} = k_{V2}^{\bullet} = k_V^{\bullet} \quad (3.17)$$

Esto muestra que el valor del coeficiente de transferencia es el mismo al calcular el flux difusivo de uno u otro componente. La igualdad es posible porque la suma de las composiciones de los dos componentes en la interfase y la corriente global debe ser la unidad. Por tanto, en una mezcla binaria el problema se reduce a obtener la solución de una ecuación. El flux del componente uno (componente ligero) es

$$N_1^V = k_V^{\bullet} (y_1^V - y_1^I) + y_1^V N_t \quad (3.18)$$

con

$$k_V^{\bullet} = k_V \Xi_V^M \quad (3.19)$$

El cálculo del flux molar del componente uno N_1^V (o dos) es posible, si se conoce el valor (o el método de cálculo) del coeficiente de transferencia a flux cero k_v y el factor de corrección Ξ_v^M por la transferencia de masa.

Las ecuaciones Stefan-Maxwell para la difusión en una mezcla de gas ideal a presión y temperatura constantes fueron desarrolladas bajo una teoría cinética simple y permiten describir la difusión bajo el modelo de película. La ecuación del flux molar de difusión unidimensional para el componente uno en una mezcla binaria es

$$J_1 = -\frac{c_t^V}{\lambda} D_{12} \frac{dy_1}{d\eta} \quad (3.20)$$

donde $\eta = (r - r_o)/\lambda$ representa una longitud adimensional, D_{12} es el coeficiente de difusión de Stefan-Maxwell, dependiente de la temperatura y la presión, pero no de la composición; y λ representa el espesor de la película de vapor. Krishna y Standar [22] evaluaron la derivada $dy_1/d\eta$ con la solución analítica exacta de las ecuaciones de Stefan-Maxwell bajo la condición frontera

$$r = r_o \quad (\eta = 0) \quad y_1 = y_1^V$$

para obtener

$$J_1^V = c_t^V \frac{D_{12}}{\lambda} \left(\frac{\Phi_v^M}{\exp(\Phi_v^M) - 1} \right) (y_1^V - y_1^I) \quad (3.21)$$

donde el término Φ_v^M es un factor de velocidad de transferencia de masa adimensional en el vapor, definido por

$$\Phi_v^M = \frac{N_1^V}{c_t^V D_{12} / \lambda} \quad (3.22)$$

Este resultado obtenido por Krishna y Standar al ser sustituido en la Ecuación 3.7 conduce a

$$N_1^V = c_t^V \frac{D_{12}}{\lambda} \left(\frac{\Phi_v^M}{\exp(\Phi_v^M) - 1} \right) (y_1^V - y_1^I) + y_1^V N_1^V \quad (3.23)$$

La comparación de las Ecuaciones 3.14, 3.19 y 3.21 establece

$$k_V = c_t^V \frac{D_{12}}{\lambda} \quad \Xi_V^M = \frac{\Phi_V^M}{\exp(\Phi_V^M) - 1} \quad (3.24)$$

lo cual expresa la definición del coeficiente de transferencia de masa a flux cero y el factor de corrección por flux finito bajo el modelo de película. Bird et al. [13] mostraron una descripción de la variación del factor de corrección Ξ_V^M respecto a los valores que toma el factor de velocidad Φ_V^M , así como el efecto en los coeficientes k_V y perfiles de composición, velocidad y temperatura. En general, el comportamiento es

$$\begin{aligned} \Phi_V^M < 0 & \quad \Xi_V^M > 1 & \quad k_V^\bullet > k_V \\ \Phi_V^M > 0 & \quad \Xi_V^M < 1 & \quad k_V^\bullet < k_V \\ \Phi_V^M = 0 & \quad \Xi_V^M = 1 & \quad k_V^\bullet = k_V \end{aligned}$$

Bird et al. [8] al expresar el flux molar de difusión de acuerdo a la primera “ley” de Fick de la difusividad, esto es,

$$J_1^V = -\frac{c_t^V}{\lambda} D_{12} \left. \frac{dy_1}{d\eta} \right|_{\eta=0} \quad (3.25)$$

encontraron una expresión similar a la Ecuación 3.23, el flux molar queda expresado por

$$N_1^V = c_t^V \frac{D_{12}}{\lambda} \left(\frac{\Phi_V^M}{\exp(\Phi_V^M) - 1} \right) (y_1^V - y_1^I) + y_1^V N_t^V \quad (3.26)$$

con

$$\Phi_V^M = \frac{N_t^V}{c_t^V D_{12} / \lambda} \quad (3.27)$$

donde D_{12} es el coeficiente de difusión de Fick. Este resultado indica que la “ley” de Fick es equivalente a las ecuaciones de Stefan-Maxwell para describir la difusión en una mezcla binaria. Entonces, en una mezcla binaria de gas ideal un solo coeficiente de difusión describe el proceso de difusión molecular

$$D_{12} = D_{21} = D = D_{21} = D_{21}$$

este coeficiente de difusión binario D en fase gas es independiente de la composición de la mezcla, sólo depende de la temperatura y la presión, y se calcula con cualquier método de

predicción usual. La estimación del espesor de película λ no puede efectuarse la mayoría de las veces, y se debe hacer uso de métodos empíricos de estimación de los coeficientes de transferencia de masa a flux cero. Un gran número de trabajos experimentales se han concentrado en obtener correlaciones para sistemas binarios, pero no existen correlaciones para sistemas multicomponente.

La mayor parte de las correlaciones existentes para la transferencia de masa por convección forzada han sido desarrolladas por analogía a las correlaciones adimensionales de transmisión de calor. El cálculo del coeficiente de transferencia de masa a flux cero k_f para sistemas binarios circulando por tubos puede efectuarse con la analogía de Chilton y Colburn [25] del factor j_D que considera los efectos de flujo, geometría y propiedades del fluido. Esta correlación adimensional es ampliamente utilizada y resulta satisfactoria en muchos casos como señala Bird et al. [13], y Taylor y Krishna [7].

Colburn y Drew [2] efectuaron un desarrollo equivalente al de Bird et al. [13] para obtener una expresión del flux molar total N_t^V . La ecuación es

$$N_t^V = F \ln \left(\frac{z_1 - y_1^I}{z_1 - y_1^V} \right) \quad (3.28)$$

donde z_1 es la fracción molar del componente uno en la cantidad total de condensado (N_1/N_t) y F está definido como un coeficiente característico de la transferencia de masa. F es función de las propiedades físicas de la mezcla y de las condiciones de flujo e involucra implícitamente el espesor de la película. La forma de la Ecuación 3.28 incluye implícitamente el efecto del flux molar total sobre el coeficiente de transferencia F (mediante álgebra puede llevarse la Ecuación 3.28 a la forma de la Ecuación 3.26), estableciendo que $F = k_f$. Esto explica porque Colburn y Drew recomendaron el cálculo de F desde la analogía de Chilton y Colburn la cual permite el cálculo de coeficientes de transferencia de masa a flux cero.

Colburn y Drew [2] al despejar la fracción molar del componente uno z_1 en el condensado de la Ecuación 3.28 obtuvieron la siguiente ecuación

$$z_1 = \frac{y_1^V - E y_1^I}{1 - E} \quad (3.29)$$

con

$$E = \exp\left(-\frac{N_1^V}{F}\right) \quad (3.30)$$

y establecieron:

y_1^V y y_1^I puede tomar cada uno un valor arbitrario entre cero y uno; y entonces z_1 es positivo si la condensación está ocurriendo, E también toma valores entre cero y uno. Esto indica que si y_1^V excede a y_1^I , entonces z_1 es positivo para todas las tasas de condensación [flux molar total N_1^V]. Si, por otra parte, como comúnmente ocurre, y_1^I excede a y_1^V , entonces z_1 es negativo para tasas pequeñas de condensación [$N_1^V \rightarrow 0$] y positivo para tasas grandes de condensación [$N_1^V \rightarrow \infty$]...

Este análisis de la Ecuación 3.29 efectuado por Colburn y Drew muestra que el flux molar del componente uno N_1^V puede ser negativo bajo ciertas condiciones de condensación en una mezcla binaria, esto es, la condensación de un componente y la evaporación simultánea de otro puede suceder durante la condensación.

3.2.2 Transporte de masa en una mezcla ternaria

La Ecuación 3.11 aplicada a una mezcla ternaria se reduce a

$$\begin{pmatrix} J_1^V \\ J_2^V \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} k_{V11}^{\bullet} & k_{V12}^{\bullet} \\ k_{V21}^{\bullet} & k_{V22}^{\bullet} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_1^V - y_1^I \\ y_2^V - y_2^I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_{V11}^{\bullet}(y_1^V - y_1^I) + k_{V12}^{\bullet}(y_2^V - y_2^I) \\ k_{V21}^{\bullet}(y_1^V - y_1^I) + k_{V22}^{\bullet}(y_2^V - y_2^I) \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

donde

$$\begin{bmatrix} k_{V11}^{\bullet} & k_{V12}^{\bullet} \\ k_{V21}^{\bullet} & k_{V22}^{\bullet} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_{V11} & k_{V12} \\ k_{V21} & k_{V22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Xi_{V11}^M & \Xi_{V12}^M \\ \Xi_{V21}^M & \Xi_{V22}^M \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

La Ecuación 3.10 para una mezcla ternaria se simplifica a

$$J_3^V = -J_1^V - J_2^V \quad (3.33)$$

El flux molar difusivo del tercer componente es el negativo de la suma de los fluxes de los Componentes 1 y 2. Por lo tanto, en una mezcla ternaria un sistema de dos ecuaciones de flux molar se resuelven simultáneamente para conocer los n fluxes molares N_i^V

$$\begin{pmatrix} N_1^V \\ N_2^V \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} k_{V11}^{\bullet} & k_{V12}^{\bullet} \\ k_{V21}^{\bullet} & k_{V22}^{\bullet} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} y_1^V - y_1^V \\ y_2^V - y_2^V \end{pmatrix} + N_t^V \begin{pmatrix} y_1^V \\ y_2^V \end{pmatrix} \quad (3.34)$$

La Ecuación 3.34 muestra que las características del transporte de masa en una mezcla de tres componentes son muy diferentes a las exhibidas en una mezcla binaria.

En un sistema de n componentes, el flux molar de difusión J_i^V de un componente depende de $n-1$ diferencias de composición independientes; incluida su propia diferencias. Por lo tanto, el flux molar de difusión de un componente en una mezcla ternaria se relaciona a dos diferencias de composición independientes (Ecuación 3.31), y para una mezcla binaria se relaciona a su propia diferencia de composición (Ecuación 3.14).

El efecto de interacción de diferencias de composición es exhibido sólo por mezclas de tres o más componentes. La Figura 3.2 ilustra la relación de las diferencias de composición en la difusión de una mezcla binaria y ternaria.

En el caso de difusión equimolar, Toor y Sebulsky [26] expusieron que para una mezcla binaria la difusión siempre ocurre en la dirección de mayor a menor concentración, pero que para una mezcla ternaria esta forma de difusión no es la única que ocurre. Toor y Sebulsky señalaron que en una mezcla ternaria pueden presentarse, como consecuencia del efecto de interacción, tres fenómenos: difusión osmótica (difusión de un componente aún cuando su diferencia de composición es cero), difusión de barrido (la transferencia de un componente no se efectúa aún cuando su diferencia de composición no es cero) y difusión inversa (difusión de una especie en dirección opuesta a la dictada por su diferencia de composición). Estos efectos de interacción fueron observados experimentalmente en difusión de mezclas gaseosas por Duncan y Toor[27], y para la transferencia interfacial entre una mezcla ternaria gas-vapor (acetona, benceno y nitrógeno; o helio) y una película de líquido bajante (acetona y benceno) en una columna de pared mojada (destilación adiabática) [26]. Para la mezcla ternaria gas-vapor se encontró que las interacciones de difusión fueron especialmente significativas en situaciones que involucraban una alta concentración de los vapores. Las diferencias encontradas entre la difusión binaria y ternaria para el caso de contradifusión equimolar y destilación adiabática son aplicables a transferencia de masa convectiva.

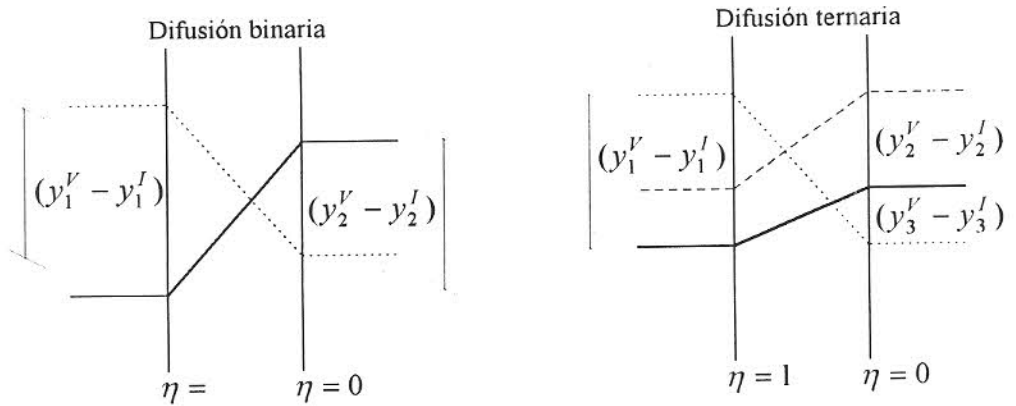


Figura 3.2: Perfiles de composición representativos para mezclas binarias y ternarias. Note que para todos los sistemas $\sum(y_i^V - y_i^I) = 0$. Para sistemas binarios se establece que $(y_1^V - y_1^I) = -(y_2^V - y_2^I)$ pero una igualdad similar no puede existir para mezclas ternarias. Para un valor fijo de diferencia de composición del Componente 1 existen múltiples arreglos de los gradientes de composición de los Componentes 2 y 3 cuya suma sea el negativo del Componente 1.

Los fluxes molares se pueden calcular si se conoce el valor (o método de cálculo) de los coeficientes de transferencia de masa a flux finito k_{Vij}^\bullet , o bien, los respectivos coeficientes de transferencia de masa a flux cero k_{Vij} y los factores de corrección Ξ_{Vij}^M los cuales son referidos como multicomponentes y no deben confundirse con los valores (o métodos de cálculo) de los binarios k_V y Ξ_V^M . El cálculo de los cuatro elementos de la matriz $[k_V^\bullet]$ ha recibido diferentes tratamientos en función de las ecuaciones constitutivas de difusión empleadas.

Las ecuaciones de Stefan-Maxwell en forma de matriz para una mezcla de gases ideales de n componentes bajo el modelo de película permiten expresar el flux molar de difusión por

$$(J^V) = -\frac{c_t^V}{\lambda} [B]^{-1} \frac{d(y)}{d\eta} = -\frac{c_t^V}{\lambda} [D] \frac{d(y)}{d\eta} \quad (3.35)$$

donde la matriz $[B]$ se obtiene con las reglas de combinación de los coeficientes de difusión D_{ij} [22]. Estos coeficientes de difusión D_{ij} del par $i-j$ en la mezcla de multicomponentes son independientes de la composición, simétricos $D_{ij} = D_{ji}$, e idénticos a el coeficiente de difusión binaria D del par $i-j$.

La inversa de $[B]$ es la matriz de coeficientes de difusión multicomponente $[D]$ cuando el flux molar de difusión se expresa por la “ley” generalizada de Fick. Estos elementos D_{ij} son los coeficientes de difusión de Fick multicomponente y no se deben confundir con los coeficientes de difusión binarios D . Los coeficientes D_{ij} toman valores positivos o negativos, no son simétricos $D_{ij} \neq D_{ji}$ y dependen fuertemente de la composición. Además, no tienen un significado físico como D que refleja la interacción del par i - j y su valor numérico depende de la forma particular de numerar los componentes. Los anteriores aspectos reflejan la dificultad para obtener correlaciones tanto de coeficientes de difusión multicomponente como de coeficientes de transferencia de masa multicomponente (si se adopta que $k_{Vij} = c_i^V D_{ij} / \lambda$ resulta imposible calcular un coeficiente de transferencia de masa negativo desde las correlaciones binarias existentes).

La dependencia de los coeficientes de difusión D_{ij} de los gradientes de concentración causan que las ecuaciones de flux molar difusivo sean no lineales. La solución analítica exacta a las ecuaciones de Stefan-Maxwell fue desarrollada por Krishna y Standar [22] y el flux molar de difusión quedo expresado por

$$(J^V) = [k_V] [\Phi_V^M] \left\{ \exp[\Phi_V^M] - [I] \right\}^{-1} (y^V - y^I) \quad (3.36)$$

Esta ecuación de flux molar de difusión multicomponente es análoga a la relación de transferencia de masa binaria clásica (Ecuación 3.21). La matriz de coeficientes de transferencia multicomponente a flux cero se define por

$$[k_V] = \frac{c_i^V}{\lambda} [D] \quad (3.37)$$

y la matriz de factores de corrección para la transferencia de masa es

$$[\Xi_V^M] = [\Phi_V^M] \left\{ \exp[\Phi_V^M] - 1 \right\}^{-1} \quad (3.38)$$

Esta definición de $[\Xi_V^M]$ resulta conveniente porque satisface el comportamiento límite a un flux molar total de cero,

$$\begin{aligned} N_i^V \rightarrow 0 \quad [\Xi_V^M] &= [I] \quad \therefore [k_V^\bullet] = [k_V] \\ i &= 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

Los elementos de la matriz $[k_V]$ se evalúan desde datos de transporte binario (coeficientes de transferencia de masa a flux cero $k_{ij} = c_i^V D/\lambda$ del par $i-j$). Las relaciones entre los coeficientes multicomponentes y binarios desde las ecuaciones de Stefan-Maxwell [22] son

$$k_{V11} = k_{11}(y_1^V k_{23} + (1 - y_1^V)k_{12})/S \quad (3.39)$$

$$k_{V12} = y_1^V k_{23}(k_{13} - k_{12})/S$$

$$k_{V21} = y_2^V k_{13}(k_{23} - k_{12})/S$$

$$k_{V22} = k_{23}(y_2^V k_{13} + (1 - y_2^V)k_{12})/S$$

$$S = y_1^V k_{23} + y_2^V k_{13} + y_3^V k_{12}$$

Los elementos de la matriz $[\Phi_i^M]$ de factores de velocidad de transporte, desde los fluxes molares y coeficientes de transferencia son

$$\Phi_{V11}^M = \frac{N_1^V}{k_{13}} + \frac{N_2^V}{k_{12}} + \frac{N_2^V}{k_{13}} \quad (3.40)$$

$$\Phi_{V12}^M = \frac{N_1^V}{k_{13}} + \frac{N_1^V}{k_{12}}$$

$$\Phi_{V21}^M = \frac{N_2^V}{k_{23}} + \frac{N_2^V}{k_{12}}$$

$$\Phi_{V22}^M = \frac{N_1^V}{k_{23}} + \frac{N_1^V}{k_{12}} + \frac{N_1^V}{k_{23}}$$

Una solución explícita a la matriz de factores de corrección $[\Xi_i^M]$ puede obtenerse con el teorema de Silvester [22]. Esta formulación desarrollada por Krishna y Standai [22] involucra un cálculo iterativo estable y simple de los coeficientes de transferencia.

3.3 Transporte de masa en la fase líquida

Una descripción del proceso de transferencia de masa en la fase líquida no es frecuentemente incluido en los cálculos de condensación porque la principal resistencia a la transferencia de masa y energía reside en la fase vapor [2,4]. Sin embargo, un tratamiento similar al efectuado para la fase vapor se puede exponer para la fase líquida.

El flux molar de cada componente en la fase líquida se expresa por

$$N_i^L = J_i^L + x_i^L N_t^L \quad (3.41)$$

donde el flux molar total es

$$N_t^L = \sum_{i=1}^n N_i^L \quad (3.42)$$

El flux molar de difusión debe satisfacer, al igual que el vapor, la condición

$$J_n^L = \sum_{i=1}^{n-1} J_i^V \quad (3.43)$$

En principio, todos los métodos descriptos para el cálculo del flux molar de difusión de la fase vapor pueden ser extendidos a la fase líquida. En un sistema de n componentes se debe solucionar un sistema de $n-1$ ecuaciones independientes de flux molar en el líquido. Este sistema de ecuaciones independientes, mediante matrices, se expresa en la forma

$$(N^L) = [k_L^\bullet](x^I - x^L) + (x^L)N_t^L \quad (3.44)$$

con

$$[k_L^\bullet] = [k_L][\Xi_L^M] \quad (3.45)$$

donde $[k_L^\bullet]$ representa la matriz de coeficientes de transferencia de masa para la fase líquida a flux finito, $[k_L]$ representa la matriz de coeficientes de transferencia de masa para la fase líquida a flux cero y $[\Xi_L^M]$ representa la matriz de factores de corrección para la fase líquida.

La dificultad para desarrollar una solución exacta a las ecuaciones de Stefan-Maxwell, como en el caso de la fase vapor, radica en la fuerte dependencia de los coeficientes de difusión de la fase líquida a la composición [22]. En esta situación, la suposición de una matriz constante de coeficientes de difusión (teoría de linearización) resulta una buena aproximación. Sin embargo, la parte más incierta en el cálculo de la matriz de coeficientes

de transferencia multicomponente es la imposibilidad de calcular la matriz de coeficientes de difusión multicomponente. Para el caso donde el condensado es un líquido binario, o bien, cuando el condensado está formado de componentes de una serie homóloga de hidrocarburos, una solución simplificada puede efectuarse.

La dificultad de calcular los coeficientes de transferencia obliga generalmente a considerar dos situaciones del comportamiento del condensado:

1. La fase líquida está completamente mezclada con respecto a la composición (pero no respecto a la temperatura), correspondiendo a un coeficiente de transferencia de masa infinito. La Ecuación 3.44 se reduce a

$$(x^I) = (x^L) \quad (3.45)$$

donde la composición del líquido en la interfase x_i^I y la composición del líquido de la corriente de condensado x_i^L son iguales.

2. La fase líquida no está mezclada en absoluto, esto corresponde a un coeficiente de transferencia de masa de valor cero. La Ecuación 3.44 se reduce a

$$(x^I) = \frac{1}{N_i^V} (N^L) = (z) \quad (3.46)$$

donde la composición del líquido en la interfase de cada componente x_i^I es igual a la fracción molar z_i presente en el flux molar total.

Los trabajos sobre condensación han usado una u otra de las suposiciones anteriores a la transferencia de masa en la fase líquida. La primera se prefiere en los condensadores verticales donde las dos fases (vapor y líquido condensado) permanecen siempre en contacto durante la condensación, la segunda se aplica a condensadores horizontales donde el líquido condensado es continuamente retirado.

Sherwood et al. [14] indicaron que, cuando una película laminar desciende, presenta generalmente ondulaciones en la superficie que causan cierta cantidad de mezclado en el líquido cercano a la superficie. Estas ondas incrementan apreciablemente la rapidez de transferencia de masa $[k_L^*] \rightarrow \infty$, pero no aumentan substancialmente la superficie o área interfacial; de forma que no se modifica grandemente la cantidad de masa transferida diferencial-

mente de vapor a líquido. Este efecto y el posible arrastre de la superficie de la película bajante por un flujo elevado de vapor, modifican ligeramente el patrón de flujo, pero el efecto puede despreciarse y considerar a la película en flujo pseudolaminar.

En condensadores verticales, en el inicio de la condensación las dos situaciones son equivalentes por ser la primer cantidad de condensado. Taylor et al. [4] indican que en el caso de la condensación de mezclas con presencia de un componente incondensable ambas situaciones llevan al cálculo de la misma composición del líquido condensado, pero en mezclas donde todos los componentes son condensables, se presentan diferencias significativas entre los dos extremos de transferencia de masa en el líquido condensado cuando un alto porcentaje de vapor se condensa. Sin embargo, el caso de no mezclado, donde la relación de flux N_i/N_t debe ser igual a la composición del líquido interfacial x_i^I , implica que cada componente se transfiere en la misma dirección ($N_2/N_1 > 0$, para una mezcla binaria) por la imposibilidad de existir fracciones molares negativas de líquido interfacial ($x_i^I > 0$). Esto indica que bajo la condición de no mezclado resulta imposible predecir la evaporación de alguno de los componentes ($N_2/N_1 < 0$, para una mezcla binaria). Por lo tanto, la condición de mezclado completo del líquido condensado $x_i^I = x_i^L$ se considerará como condición límite a la transferencia de masa.

3.4 Modelo de equilibrio interfacial

La suposición de equilibrio de fases lleva a establecer una relación entre las concentraciones de cada lado de la interfase I . La ecuación de equilibrio interfacial es

$$y_i^I = K_i x_i^I \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.47)$$

Esta relación de equilibrio denominada K_i es función de la presión, temperatura y composición (en algunas mezclas no es función fuerte de la composición).

Las composiciones de la fase vapor en la interfase debe satisfacer la suma

$$\sum_{i=1}^n y_i^I = 1 \quad (3.48)$$

De manera similar, la composición de la fase líquida en la interfase debe satisfacer

$$\sum_{i=1}^n x_i^I = 1 \quad (3.49)$$

La relación de equilibrio K_i se calcula por métodos diferentes, el procedimiento de cálculo depende del comportamiento de la mezcla [28, 29]. Los métodos desarrollados para el equilibrio de fases son:

- Ley de Raoult-Dalton para comportamiento ideal.
- Formulación Gamma-Phi (γ - ϕ) para comportamiento no ideal a bajas presiones,
- Ecuaciones de Estado con reglas de mezclado para comportamiento no-ideal a altas presiones.

3.5 Transferencia de energía

El flux de energía de la fase vapor con respecto a un sistema de coordenadas fijo [13] es

$$E^V = q^V + \sum_{i=1}^n \bar{H}_i^V(T) N_i^V \quad (3.50)$$

El flux de energía E^V en un sistema de n componentes es resultado de dos contribuciones: el flux de calor conductivo q^V (densidad de flujo de calor conductivo, flujo de calor por unidad de área) y el flux de calor convectivo $\sum_{i=1}^n \bar{H}_i^V(T) N_i^V$.

El flux de calor conductivo q^V es proporcional al gradiente de temperatura, es decir, en un medio isotópico el calor fluye por conducción en la dirección en que el descenso de temperatura es más pronunciado. Para un fluido en movimiento q^V representa el flux de energía calorífica relativa a la velocidad local del fluido. Este flux se representa por la ley de Fourier de conducción de calor

$$q^V = -\kappa^V \frac{dT}{dr} \quad (3.51)$$

El flux de calor convectivo $\sum \bar{H}_i^V(T) N_i^V$ cuantifica el efecto de interdifusión de los componentes $\sum \bar{H}_i^V(T) J_i^V$ y el efecto por el transporte global $\sum \bar{H}_i^V(T) y_i^V N_i^V$. En sustancias puras la contribución por interdifusión es cero y en procesos de contradifusión la con-

tribución por transporte global es cero. La presencia del término convectivo muestra la importancia de considerar la influencia del transporte de masa sobre el transporte de calor, esto es, el transporte de masa ejerce un efecto de distorsión sobre el perfil de temperatura y el flux de calor.

El flux de energía relativo al flux de calor conductivo y convectivo se simplifica a

$$E^V = -\kappa^V \frac{dT}{dr} + \sum_{i=1}^n \bar{H}_i^V(T) N_i^V \quad (3.52)$$

Taylor y Krishna [5] evaluaron la Ecuación 3.50 bajo las condiciones de frontera de la película para así obtener

$$q^V = \frac{\kappa^V}{\lambda} \left(\frac{\Phi_V^H}{\exp(\Phi_V^H) - 1} \right) (T^V - T^I) \quad (3.53)$$

donde Φ_V^H es un factor de velocidad de transferencia de calor adimensional

$$\Phi_V^H = \frac{\sum_{i=1}^n C_{pi}^V N_i^V}{\kappa^V / \lambda} \quad (3.54)$$

La flux de calor conductivo en una fase fluida es proporcional a la diferencia de temperatura en la película, la Ecuación 3.53 expresada mediante una constante de proporcionalidad (ley de enfriamiento de Newton) bajo el modelo de película [8] es

$$q^V = h_v^* (T^V - T^I) = h_v \Xi_V^H (T^V - T^I) \quad (3.55)$$

donde el h_v^* se define como un coeficiente de transferencia de calor para la fase vapor a transferencia de masa finita. Este coeficiente h_v^* se relaciona a el coeficiente de transferencia de calor sin transferencia de masa h_v y el factor de corrección para la transferencia de calor Ξ_V^H , este último cuantifica el efecto de la transferencia de masa en el coeficiente h_v .

La comparación de la Ecuación 3.55 con la Ecuación 3.54 permite definir bajo el modelo de película el coeficiente de transferencia de calor sin transferencia de masa

$$h_v = \kappa^V / \lambda \quad (3.56)$$

y el factor de corrección para la transferencia de calor por influencia de transporte de masa

$$\Xi_V^H = \frac{\Phi_V^H}{\exp(\Phi_V^H) - 1} \quad (3.57)$$

Este factor de corrección Ξ_V^H se comporta en forma similar al factor de corrección para transferencia de masa Ξ_V^M (la expresión matemática es la misma excepto en el factor de velocidad adimensional). Este factor de corrección para el transporte de calor ante la existencia de transporte de masa interfacial se conoce como factor de corrección de Ackerman [7].

El flux de energía en la fase vapor es

$$E^V = h_v^*(T^V - T^I) + \sum_{i=1}^n \bar{H}_i^V(T^V) N_i^V \quad (3.58)$$

En donde el valor de E^V depende de la selección arbitraria de la temperatura de referencia para el cálculo de la entalpía; sin embargo, esta condición no es una desventaja como se verá posteriormente.

El tratamiento efectuado para la fase vapor se aplica exactamente igual al líquido condensado para obtener una expresión similar a la Ecuación 3.58. El flux de energía para el líquido es

$$E^L = h_L^*(T^I - T^L) + \sum_{i=1}^n \bar{H}_i^L(T^L) N_i^L \quad (3.59)$$

donde h_L^* es el coeficiente de transferencia de calor para el líquido a transferencia de masa finita.

La Ecuación 3.5 reescrita con las ecuaciones del flux de energía de cada fase se simplifica a

$$h_v^* + \sum_{i=1}^n \bar{H}_i^V(T^V) N_i = h_L^* + \sum_{i=1}^n \bar{H}_i^L(T^L) N_i \quad (3.60)$$

la cual muestra que un solo estado de referencia para el cálculo de la entalpía es requerido.

La entalpía parcial del componente i en el líquido, despreciando los calores de disolución, se calcula respecto al líquido puro a temperatura T^{ref} por

$$\bar{H}_i^L = C_{pi}^L(T^L - T^{ref}) \quad (3.61)$$

La entalpía parcial del componente i en el vapor, suponiendo comportamiento ideal con la misma referencia, es

$$\bar{H}_i^V = C_{pi}^V(T^V - T^I) + \Delta H_{vap,i}^{T^I} + C_{pi}^L(T^I - T^{ref}) \quad (3.62)$$

La Ecuación 3.60 con el cálculo de la entalpía respecto a el líquido puro a $T^{ref} = T^L$.

(Ecuaciones 3.61 y 3.62), se simplifica a

$$h_V \Xi_V (T^V - T^I) + \sum_{i=1}^n N_i \left\{ C_{pi}^V (T^V - T^I) + \Delta H_{vap,i}^{T^I} + C_{pi}^L (T^I - T^L) \right\} = h_L^* (T^I - T^L) \quad (3.63)$$

donde se considera la continuidad del flux molar y que C_{pi}^V y C_{pi}^L son constantes (promedio) en el intervalo de temperatura requerido. En los trabajos de condensación y bajo la suposición de que el líquido condensado no sufre un cambio de entalpía es común que se desprece el subenfriamiento del condensado hasta la temperatura T^L [7], por lo que el término $C_{pi}^L (T^I - T^L)$ desaparece. La suposición resulta válida ante el hecho de que el término de mayor contribución en el flux de energía convectivo es $\Delta H_{vap,i}^{T^I}$. Esta consideración establecida por Colburn y Drew [2] ha sido punto de partida en los múltiples trabajos de condensación posteriores.

En la condensación de mezclas de vapores saturados el término C_{pi}^V no adquiere gran importancia por lo que en ocasiones es eliminado [2], pero en la condensación de vapores sobrecalentados o mezclas gas-vapor (presencia de al menos un componente incondensable) el despreciar éste ocasiona errores significativos en la descripción del proceso.

La dificultad de estimar la película térmica obliga a calcular los coeficientes de transferencia de calor h_V desde correlaciones empíricas. Un gran número de expresiones para estimar h_V se han desarrollado, la analogía de Chilton y Colburn [25] del factor j_H genera una excelente aproximación del coeficiente de transferencia de calor para la circulación de fluidos (gases, vapores y líquidos) en tubos bajo régimen turbulento.

El coeficiente de calor del líquido h_L^* se calcula con la correlación de Nusselt para una película de condensado en flujo laminar [13].

El flux de energía para el fluido de enfriamiento, usando la Ecuación 3.58, es

$$E^C = h_C (T^L - T^C) \quad (3.64)$$

Esta expresión de flux de energía se simplifica grandemente porque no existe transferencia de masa hacia el fluido de enfriamiento, además, como es una sustancia pura y no in-

cluye ningún término de entalpía. El coeficiente h_C se calcula usando la correlación de Davis [30] para líquidos que se mueven en el espacio anular de dos tubos concéntricos.

En los trabajos de condensación generalmente se asocia la Ecuación 3.64 con la Ecuación 3.63 (por la igualdad de la Ecuación 3.6), de forma que permite definir un coeficiente de transferencia de calor que incluye la resistencia de la película de condensado y el fluido de enfriamiento, esto es

$$h_L^*(T^I - T^L) = h_C(T^L - T^C) = h_o(T^I - T^C) \quad (3.65)$$

donde

$$1/h_o = 1/h_L^* + 1/h_C \quad (3.66)$$

3.6 Modelo para el cálculo de los fluxes

El número de ecuaciones independientes que modelan el proceso de transferencia de masa y energía durante la condensación en un punto local de la superficie son $3n+1$. Las $3n+1$ ecuaciones independientes son:

1. $n-1$ ecuaciones de rapidez de transferencia de masa (flux molar) para la fase vapor.

$$N_i = \sum_{m=1}^{n-1} k_{i,m}^*(y_m^V - y_m^I) + y_i^V N_t \quad i = 1, 2, K, n-1 \quad (3.67)$$

$$\text{con } N_t = \sum_{i=1}^n N_i \quad (3.68)$$

2. $n-1$ ecuaciones de rapidez de transferencia de masa para la fase líquida.

$$x_i^I = x_i^L \quad \text{mezclado completo} \quad i = 1, 2, K, n-1 \quad (3.69)$$

3. n relaciones de equilibrio interfacial.

$$y_i^I = K_i x_i^I \quad i = 1, 2, K, n-1 \quad (3.70)$$

4. Un balance de energía interfacial.

$$h_V \Xi_V^H (T^V - T^I) + \sum_{i=1}^n N_i \{ C_{pi}^V (T^V - T^I) + \Delta H_{vap,i}^{T^I} + C_{pi}^L (T^I - T^L) \} = h_o (T^I - T^C) \quad (3.71)$$

5. Dos sumatorias de fracción molar.

$$\sum_{i=1}^n x_i^I = 1 \quad (3.72)$$

$$\sum_{i=1}^n y_i^I = 1 \quad (3.73)$$

Las $3n+1$ variables que pueden ser determinadas al resolver el sistema de ecuaciones anterior son:

1. $2n$ fracciones molares del vapor y_i^I y el líquido x_i^I en la interfase.
2. n fluxes molares N_i .
3. la temperatura de la interfase T^I .

Las variables normalmente especificadas son la composición de la corriente de vapor y_i^V , la temperatura del vapor T^V , la temperatura del fluido de enfriamiento T^C y la presión del sistema P . Generalmente el valor de la temperatura T^L y la composición del líquido x_i^L condensado no se especifica, sino debe ser determinado.

El sistema de ecuaciones independientes para incluir el cálculo de T^L y x_i^L se completa con

$$h_L^*(T^I - T^L) = h_C(T^L - T^C) \quad (3.74)$$

$$x_i^L = l_i/L \quad (3.75)$$

Las propiedades físicas, de transporte y termodinámicas, y los coeficientes de transferencia de masa y energía a flux cero se evalúan con los métodos del Apéndice A en función de la composición, temperatura y presión de la fase apropiada.

La solución al sistema de ecuaciones algebraicas y no lineales puede efectuarse de diversas maneras como indica Taylor et al. [4]. La mejor manera es la solución simultánea de todas las ecuaciones usando el método de Newton. Este método permite la evaluación de propiedades, los coeficientes de transferencia de calor y la matriz de coeficientes de transferencia de masa multicomponente en cada etapa iterativa.

La descripción del algoritmo se expone en el capítulo 4 en el cual se presenta el modelo completo del proceso de condensación (en toda la superficie).

Capítulo 4

Modelo matemático

En este capítulo se plantean los balances de masa y energía (ecuaciones diferenciales ordinarias) en un condensador concéntrico vertical para describir las variaciones de composición y temperatura de las fases. Además, se describe brevemente la forma de resolver las ecuaciones de los balances. Asimismo se establece el modelo matemático de condensación de mezclas, el método para su solución y el procedimiento de cálculo de las variaciones en las fases desde la entrada hasta el final del condensador.

4.1 Balances de masa y energía en un condensador

La representación esquemática de una sección diferencial de un condensador concéntrico se ilustra en la Figura 4.1. El calor perdido por la condensación es transferido a través del líquido condensado y el tubo interno hasta el fluido de enfriamiento. Este último fluye a contracorriente al vapor y líquido condensado, los cuales fluyen concurrentemente a lo largo del tubo.

El proceso de condensación ilustrado en la Figura 4.1 se considera simétrico en la dirección angular, tal que las variaciones de composición y temperatura de las corrientes de vapor, líquido condensado y fluido de enfriamiento sólo ocurren en la dirección axial. Los balances de materia y energía, establecidos a partir de esta sección diferencial,

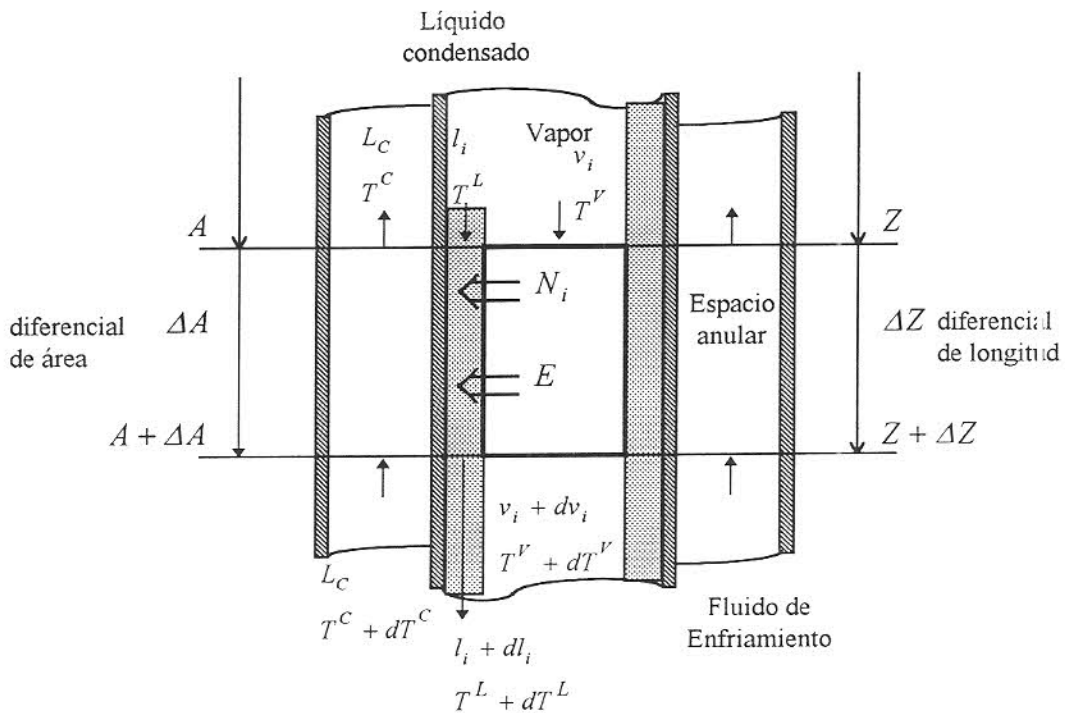


Figura 4.1: Sección diferencial de condensador concéntrico vertical operando en estado estable.

permite determinar las variaciones de las condiciones de las corrientes desde el inicio hasta el final de la superficie de condensación.

El balance de masa del componente i en la fase vapor es

$$\frac{dv_i}{dA} = -N_i \quad i = 1,2,K, n \quad (4.1)$$

El balance de masa del componente i en la fase líquida es

$$\frac{dl_i}{dA} = N_i \quad i = 1,2,K, n \quad (4.2)$$

El balance de masa total para la fase vapor se obtiene por la suma de las Ecuaciones 4.1 aplicadas a los n componentes, esto es

$$\frac{dV}{dA} = -N_t \quad (4.3)$$

y para la fase líquida es

$$\frac{dL}{dA} = N_t \quad (4.4)$$

Un balance de masa para el fluido de enfriamiento no es necesario dado que no existe transferencia de masa hacia él. El término del lado derecho de las Ecuaciones 4.1 y 4.2 es el flux molar del componente i el cual es continuo en las fases vapor y líquido condensado, el término del lado derecho de las Ecuaciones 4.3 y 4.4 es el flux molar total. Se supone que la transferencia es positiva de la fase vapor a la fase líquida.

El balance de energía para la fase vapor es

$$\frac{d(VH^V)}{dA} = -E^V \quad (4.5)$$

donde H^V es la entalpía de la fase vapor. El producto H^V puede ser expresada como

$$H^V = \sum v_i \bar{H}_i^V(T^V) \quad (4.6)$$

La substitución de \bar{H}_i^V como expresa la Ecuación 3.62 y la definición de E^V (Ecuación 3.58) permiten simplificar la Ecuación 4.5 a

$$C_{pi}^V \frac{dT^V}{dA} = -q^V \quad (4.7)$$

El balance de energía para el fluido de enfriamiento es

$$L_C C_p^C \frac{dT^C}{dA} = -q^C \quad (4.8)$$

Un balance de energía para el líquido condensado no se escribe por que la temperatura T^L se calcula desde la Ecuación 3.74.

Las variaciones en los diferenciales de área interfacial se suponen despreciables al escribir las ecuaciones de balance. La estimación del espesor de las películas resulta difícil, por lo que un solo diferencial de área se establece, éste se calcula respecto al diámetro del tubo interno (valor físico). El diferencial de área se calcula por

$$dA = 2\pi r_{ext} dZ \quad (4.9)$$

La solución a las ecuaciones diferenciales de balance (Ecuaciones 4.1, 4.2, 4.7 y 4.8) sólo es posible si se conocen los respectivos valores de flux molar (N_i) y flux de calor conductivo (q^V y q^C) en cada punto de la superficie. Estos fluxes se calculan desde el sistema de ecuaciones algebraicas de transferencia de masa y energía expuestos en el Capítulo 3 (Ecuaciones 3.67 a 3.75).

Una solución analítica al sistema de ecuaciones algebraicas y diferenciales no es posible dada su complejidad y no linealidad, por lo tanto un método numérico apropiado para su solución debe ser seleccionado.

El método de Newton se utiliza para la solución de las ecuaciones algebraicas de transferencia de masa y energía (Ecuaciones 3.67 a 3.75), en tanto las ecuaciones diferenciales se pueden evaluar por un método de integración (Ecuaciones 4.1, 4.2, 4.7 y 4.8); tal como el método de Euler de primer orden o el método de Runge-Kutta. La integración de las ecuaciones diferenciales requiere resolver las ecuaciones de transferencia en cada segmento [4], una vez (Euler) o varias veces (Runge-Kutta). Taylor y Krishna [7] recomiendan reemplazar las derivadas por aproximaciones de diferencias finitas, de forma que las ecuaciones de balance se vuelven algebraicas.

La simplificación de integrar por diferencias finitas permite conjuntar las ecuaciones de balance y de transferencia en un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales que se resuelven simultáneamente. Los fluxes de masa y energía son considerados constantes en el segmento de integración y pueden ser calculados por una combinación de las condiciones al inicio y final del segmento. La implementación del método se aplica al considerar que el condensador total está dividido en s segmentos (secciones), tal como ilustra la Figura 4.2.

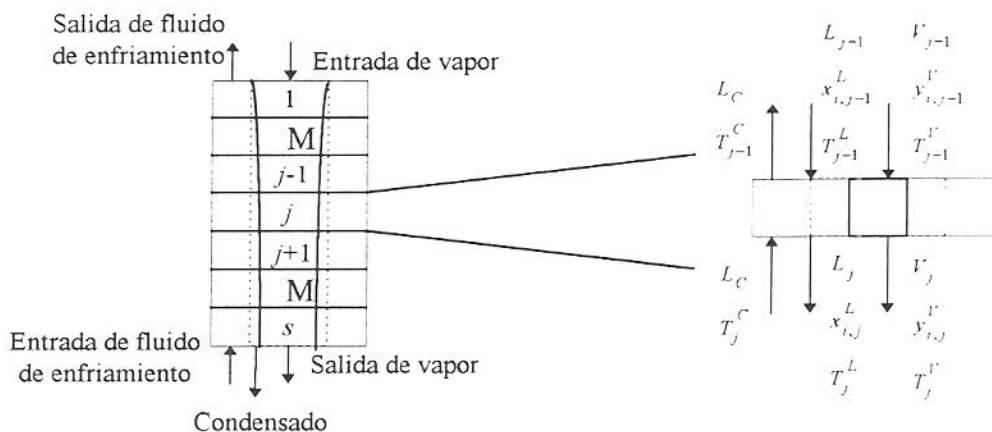


Figura 4.2: Variables de entrada y salida en una sección j de un condensador concéntrico dividido en s segmentos.

4.2 Modelo de condensación de mezclas

Las ecuaciones del modelo matemático de condensación de mezclas de vapores para la sección j son:

i) Balances de masa para la fase vapor

$$M_{ij}^V = v_{ij-1} - v_{ij} - N_{ij} \Delta A = 0 \quad i = 1, 2, K, n \quad (4.10)$$

ii) Balances de masa para la fase líquida

$$M_{ij}^L = l_{ij-1} - l_{ij} - N_{ij} \Delta A = 0 \quad i = 1, 2, K, n \quad (4.11)$$

iii) Balance de energía para la fase vapor

$$E_j^V = \bar{V}_j C_{pj}^V (T_{j-1}^V - T_j^V) + q_j^V \Delta A = 0 \quad (4.12)$$

iv) Balance de energía para el fluido de enfriamiento

$$E_j^C = L_C C_{pj}^C (T_{j-1}^C - T_j^C) + q_j^C \Delta A = 0 \quad (4.13)$$

v) Ecuaciones de flux molar para la fase vapor

$$R_{ij}^V = N_{ij} - \sum_{m=1}^{n-1} k_{vim}^* (\bar{y}_m^V - y_m^L) - N_{ij} \bar{y}_{ij}^V = 0 \quad i = 1, 2, K, n-1 \quad (4.14)$$

vi) Ecuaciones de flux molar para la fase líquida (mezclado completo)

$$R_{ij}^L = x_{ij}^L - x_{ij}^L = 0 \quad i = 1, 2, K, n-1 \quad (4.15)$$

vii) Ecuación para el flux de energía de condensación

$$E_j^I = h_{vj} \bar{\Xi}_{vj}^H (\bar{T}_j^V - T_j^L) + \sum_{i=1}^n N_{ij} \left\{ C_{pj}^V (\bar{T}_j^V - T_j^L) + \Delta H_{vap,ij}^{T^L} + C_{pj}^L (T_j^L - T_j^L) \right\} - h_{oj} (T_j^L - \bar{T}_j^C) = 0 \quad (4.16)$$

viii) Ecuación de flux de energía en el tubo

$$E_j^W = h_{cj} (T_j^L - \bar{T}_j^C) - h_{Lj}^* (T_j^L - T_j^L) = 0 \quad (4.17)$$

ix) Ecuaciones de equilibrio de interfase

$$Q_{ij}^I = K_{ij} x_{ij}^L - y_{ij}^L = 0 \quad i = 1, 2, K, n \quad (4.18)$$

x) Suma de fracciones molares del líquido en la interfase

$$S_j^{LI} = \sum_{i=1}^n x_{ij}^L - 1 = 0 \quad (4.19)$$

xi) Suma de fracciones molares del vapor en la interfase

$$S_j^{VJ} = \sum_{i=1}^n y_{ij}^J - 1 = 0 \quad (4.20)$$

El subíndice j denota la condición al final del segmento, el subíndice $j-1$ denota la condición al inicio del segmento y el subíndice i denota el componente. Las condiciones de la corriente de la fase denotada por una sobrelínea ($\bar{\quad}$) son definidas como el valor promedio de la condición al inicio y final del segmento. Las ecuaciones anteriores se complementan con las siguientes:

1) Flujo de vapor al inicio del segmento

$$V_{j-1} = \sum_{i=1}^n v_{ij-1} \quad (4.21)$$

2) Flujo de vapor al final del segmento

$$V_j = \sum_{i=1}^n v_{ij} \quad (4.22)$$

3) Flujo de vapor promedio

$$\bar{V}_j = 0.5(V_{j-1} + V_j) \quad (4.23)$$

4) Flujo de líquido condensado al inicio del segmento

$$L_{j-1} = \sum_{i=1}^n l_{ij-1} \quad (4.24)$$

5) Flujo de líquido condensado al final del segmento

$$L_j = \sum_{i=1}^n l_{ij} \quad (4.25)$$

6) Flux molar total

$$N_{ij} = \sum_{i=1}^n N_{ij} \quad (4.26)$$

7) Temperatura del vapor promedio

$$\bar{T}_j^V = 0.5(T_{j-1}^V + T_j^V) \quad (4.27)$$

8) Temperatura del fluido de enfriamiento promedio

$$\bar{T}_j^C = 0.5(T_{j-1}^C + T_j^C) \quad (4.28)$$

9) Fracción molar del componente i en el vapor al inicio del segmento

$$y_{ij-1}^V = v_{ij-1} / V_{ij-1} \quad (4.29)$$

10) Fracción molar del componente i en el vapor al final del segmento

$$y_{ij}^V = v_{ij} / V_{ij} \quad (4.30)$$

11) Fracción molar promedio del componente i en el vapor

$$\bar{y}_{ij}^V = 0.5(y_{ij-1}^V + y_{ij}^V) \quad (4.31)$$

12) Fracción molar del componente i en el líquido condensado al inicio del segmento

$$x_{ij-1}^L = l_{ij-1}/L_{ij-1} \quad (4.32)$$

13) Fracción molar del componente i en el líquido condensado al final del segmento

$$x_{ij}^L = l_{ij}/L_{ij} \quad (4.33)$$

14) Incremento de superficie de condensación

$$\Delta A = 2\pi r_{\text{int}} \Delta Z \quad (4.34)$$

15) Incremento de longitud del tubo

$$\Delta Z = L/s \quad (4.35)$$

Las Ecuaciones 4.10 a 4.20 representan un sistema de $5n+4$ ecuaciones independientes, por lo tanto si las condiciones de todas las corrientes que abandonan la sección $j-1$ son conocidas; entonces $5n+4$ cantidades desconocidas en la sección j pueden ser determinadas. Estas incógnitas son los flujos de los n componentes en la fase vapor (v_{ij}), los flujos de los n componentes en la fase líquida (l_{ij}), la temperatura del vapor (T_j^V), la temperatura del líquido condensado (T_j^L), la temperatura de la interfase (T_j^I), la temperatura del fluido de enfriamiento (T_j^C), las composiciones interfaciales del vapor (y_{ij}^I), las composiciones interfaciales del líquido (x_{ij}^I) y los fluxes molares de cada componente (N_{ij}). El resto de variables que aparecen en el sistema de ecuaciones se evalúan por las Ecuaciones 4.21 a 4.35.

Las ecuaciones independientes son ordenadas en un vector de funciones para posteriores referencias al sistemas de ecuaciones

$$(F_j) = (M_{1j}^V, M_{2j}^V, K, M_{nj}^V, M_{1j}^L, M_{2j}^L, K, M_{nj}^L, E_j^V, E_j^C, E_j^I, E_j^W, R_{1j}^V, R_{2j}^V, K, R_{nj}^V, R_{1j}^L, R_{2j}^L, K, R_{nj}^L, Q_{1j}^I, Q_{1j}^I, K, Q_{1j}^I, S_j^{LI}, S_j^{VI}) \quad (4.36)$$

El vector de variables correspondiente a este vector de ecuaciones es

$$(X_j) = (v_{1j}, v_{2j}, K, v_{nj}, l_{1j}, l_{2j}, l_{nj}, T_j^V, T_j^L, T_j^C, T_j^I, N_{1j}, N_{2j}, N_{nj}, x_{1j}^I, x_{2j}^I, K, x_{nj}^I, y_{1j}^I, y_{2j}^I, K, y_{nj}^I) \quad (4.37)$$

4.3 Solución al sistema de ecuaciones

El sistema de ecuaciones algebraicas no lineales se resolvió mediante el método de Newton [7]. Este método consiste en un procedimiento iterativo que calcula las raíces del sistema (X_j) mediante la fórmula recursiva

$$[J]_k(X_{j,k+1} - X_{j,k}) = -(F_j)_k \quad (4.38)$$

donde la matriz $[J]_k$ es el Jacobiano cuyos elementos son las derivadas parciales del vector (F_j) con respecto a las variables del vector (X_j) evaluadas en cada iteración.

La Ecuación 4.38 se resolvió por el método LU [7, 31]. La solución del sistema es el vector de discrepancias $(X_{j,k+1} - X_{j,k})$ con el cual se obtiene el nuevo estimado $(X_j)_{k+1}$ de (X_j) . Si el vector de discrepancias no satisface una tolerancia predeterminada, el proceso se repite usando los nuevos valores $(X_j)_{k+1}$ como el vector $(X_j)_k$ hasta satisfacer la tolerancia.

Taylor et al. [4] indicaron que cuando las unidades del Sistema Internacional son usadas para los cálculos, los valores numéricos de las incógnitas y funciones varían en varios ordenes de magnitud de 10 (10^{-5} a 10^{+5}), por lo cual debe usarse un error relativo como criterio de convergencia.

El error relativo para las incógnitas se calcula por

$$(e_j)_k = \left(\frac{X_{j,k+1} - X_{j,k}}{X_{j,k}} \right) \quad (4.39)$$

El criterio de convergencia (de paro) en cada iteración es

$$|e_j|_k < Tolerancia \quad (4.40)$$

el cual establece que el error relativo absoluto de cada una de las incógnitas debe ser menor a la tolerancia. Se considera en este trabajo una tolerancia de 10^{-8} .

El único problema con el método de Newton para la solución de las ecuaciones se concentra en el cálculo del Jacobiano. En este caso, los elementos de la matriz se calculan

analíticamente incluyendo las derivadas de las relaciones de equilibrio K_{ij} con respecto a la composición interfacial y la temperatura. Los coeficientes de transferencia y factores de corrección en el segmento j se consideran constantes, aún cuando dependen de las incógnitas (X_j), de forma que sus derivadas parciales resultan nulas.

Taylor et al. [7] señalaron que al ignorar esta dependencia puede suceder que el número de iteraciones para converger se incremente, y en algunos casos divergir. Sin embargo, tal aseveración parece resultar cierta cuando las propiedades y los coeficientes de transferencia de las fases son calculados en la primera iteración a las condiciones de inicio del segmento, y permanecen constantes hasta alcanzar convergencia. En el presente modelo, se implementa el cálculo de las propiedades (físicas, de transporte y termodinámicas), coeficientes de transferencia (de masa y calor) y factores de corrección en cada iteración, de forma que los cambios en las incógnitas son inmediatamente considerados.

En el Apéndice A se presenta un resumen de los métodos y correlaciones para el cálculo de las propiedades y los coeficientes de transferencia.

4.4 Procedimiento de cálculo

El modelo desarrollado en la Sección 4.2 se usa para calcular las variaciones en las condiciones de las corrientes (vapor, líquido condensado y fluido de enfriamiento) durante el proceso de condensación de mezclas binarias y ternarias.

Las condiciones iniciales requeridas son:

- 1) Condiciones de la corriente de vapor a la entrada del condensador: número de componentes n , flujo de vapor V_o , presión P , composición molar y_{io}^V y temperatura T_o^V .
- 2) Condiciones de la corriente de fluido de enfriamiento a la salida (punto de entrada del vapor): flujo L_{Co} y temperatura T_o^C .
- 3) El número de secciones s en que se divide el condensador, la geometría (longitud L , radio interno del tubo interior r_{int} y radio interno del tubo exterior r_{ext}), y el cálculo del diferencial de área y de longitud.

4) Modelos para evaluar las propiedades y los coeficientes de transferencia de masa y calor (Apéndice A).

El procedimiento de cálculo se resume en las siguientes etapas:

Etapla 1: Generar estimados iniciales de todas las incógnitas $(X_j)_k$ en la sección j :

- Los flujos de cada componente v_{ij} , temperatura T_j^V y composición del vapor y_{ij}^V se igualan a los de la sección $j-1$ (v_{ij-1} , T_{j-1}^V , y_{ij-1}^V).
- Los flujos de cada componente l_{ij} , temperatura T_j^L y composición del líquido condensado x_{ij}^L se igualan a los de la sección $j-1$ (l_{ij-1} , T_{j-1}^L , x_{ij-1}^L), excepto en $j=1$ donde los flujos son cero, las composiciones se igualan a la composición del líquido x_i^r en equilibrio con el vapor (rocío) y la temperatura con la temperatura de rocío del vapor T^r .
- La temperatura en la interfase T_j^I se iguala con la temperatura de la sección $j-1$ T_{j-1}^I , pero en $j=1$ se iguala a la temperatura de rocío del vapor T^r .
- La composición del vapor en la interfase y_{ij}^I se iguala con la composición de la sección $j-1$ y_{ij-1}^I , pero en $j=1$ se iguala a la composición del vapor y_{ij}^V .
- La composición del líquido en la interfase x_{ij}^I se iguala con la composición de la sección $j-1$ x_{ij-1}^I , pero en $j=1$ se iguala a la composición del líquido en equilibrio x_i^r con el vapor (rocío).
- La temperatura del fluido de enfriamiento T_j^C se iguala a la temperatura de la sección $j-1$ T_{j-1}^C .
- Los fluxes molares N_{ij} se igualan con los fluxes molares de la sección $j-1$ (N_{ij-1}), pero en $j=1$ se igualan con el producto $y_{ij}^V * 10^{-3}$.

Etapla 2: Calcular los valores promedio ($\bar{V}_j, \bar{y}_{ij}^V, \bar{T}_j^V, \bar{T}_j^C$) y el resto de variables que se requieren en las Ecuaciones 4.10 a 4.20 (Ecuaciones 4.21 a 4.35).

Etapa 3: Calcular:

- Las propiedades promedio ($C_{pj}^V, C_{pj}^L, C_{pj}^C, \Delta H_{vap,i}^{T^l}$) que se requieren en las Ecuaciones 4.10 a 4.20.
- Los coeficientes de transferencia de calor ($h_{Vj}, h_{Cj}, h_{Lj}^*, h_{oj}$) y el coeficiente de transferencia de masa k_V , evaluando las propiedades a las condiciones indicadas por cada modelo.
- Los coeficientes de transferencia de masa k_{Vim}^* con el método de Krishna y Standar [11] y el factor de corrección Ξ_{Vj}^H .
- Las relaciones de equilibrio K_{ij} a las condiciones interfaciales con cualesquiera de los modelos del Apéndice A

Etapa 4: Calcular vector de funciones $(F_j)_k$

Etapa 5: Calcular el Jacobiano $[J]_k$

Etapa 6: Calcular el vector de discrepancias $(X_{jk+1} - X_{jk})$ por método LU

Etapa 7: Calcular nuevo estimado de las incógnitas $(X_j)_{k+1}$

Etapa 8: Calcular el error relativo $(e_j)_k$

Etapa 9: Verificar convergencia $|e_j|_k < Tolerancia$, si es falso regresar a la Etapa 2, de lo contrario continuar a la siguiente etapa

Etapa 10: Imprimir resultados de la sección j

Etapa 11: Verificar $j \leq s$, si es verdadero regresar a la Etapa 1 y ejecutar las Etapas 2 a 9, de lo contrario, terminar.

Capítulo 5

Resultados y Discusión

5.1 Casos de estudio

En este trabajo se han seleccionado veintidós mezclas binarias y ocho mezclas ternarias las cuales cubren un amplio comportamiento de las fases, así como la presencia de componentes polares y no polares. La Tabla 5.1 muestra los componentes para cada una de las mezclas seleccionadas y en el apéndice B se indican los criterios utilizados para la selección de las mismas. Un variado grupo de mezclas se ha seleccionado a fin de determinar si existe una influencia significativa en el flujo molar individual por parte de la termodinámica de las fases (equilibrio vapor-líquido) o el tipo de componentes presentes.

Una vez seleccionadas las mezclas de estudio, la solución del modelo matemático de condensación formulado en el capítulo 4 requiere de la especificación de los siguientes parámetros:

1. Presión del condensador P .
2. Geometría del condensador: longitud del tubo L , diámetro interno del tubo interno d_{int} y diámetro interno del tubo externo d_{ext} .
3. Flujo V_o y temperatura T_o^V del vapor de entrada.
4. Flujo L_{Co} y temperatura T_o^C del fluido de enfriamiento a la salida del condensador.

Tabla 5.1 Mezclas de estudio para la simulación de condensación parcial.

Mezclas de Estudio		
Binarias		Ternarias
1) <i>n</i> -hexano-clorobenceno	12) etanol- <i>p</i> -xileno	22) benceno-tolueno-clorobenceno
2) <i>n</i> -hexano-ciclohexano	13) acetona-agua	23) <i>n</i> -hexano-benceno-clorobenceno
3) benceno-tolueno	14) metanol-agua	24) <i>n</i> -pentano- <i>n</i> -hexano- <i>n</i> -heptano
4) benceno-clorobenceno	15) etanol-agua	25) <i>n</i> -hexano-etanol-benceno
5) ciclohexano- <i>n</i> -heptano	16) <i>n</i> -hexano-benceno	26) metanol-etanol-tolueno
6) ciclohexano-tolueno	17) acetona-metanol	27) metanol- <i>n</i> -propanol-agua
7) tolueno- <i>n</i> -octano	18) etanol-benceno	28) acetona-metanol-agua
8) metanol-etanol	19) <i>n</i> -hexano-etanol	29) metanol-etanol-agua
9) metanol- <i>n</i> -propanol	20) <i>n</i> -propanol-agua	
10) metanol-agua	21) benceno- <i>n</i> -propanol	
11) metanol-clorobenceno		

5. Tamaño del incremento de longitud ΔL (número de segmentos s) para la integración.

6. Composición molar inicial del vapor y_{i0}^V .

La presión de operación del condensador se consideró de una atmósfera. Asimismo, para la geometría del condensador concéntrico se consideró un diámetro interno del tubo interno d_{int} de 0.02 m, una relación de diámetros internos del tubo interno a tubo externo d_{int}/d_{ext} de 0.50 y una longitud de tubo L de 0.50 m. La superficie total de condensación fue de 0.0314 m² para esta geometría. En base a experiencias previas se fijó un flujo de vapor másico de entrada V_o de 0.003 Kg/s, una temperatura de entrada del vapor T_o^V igual a su temperatura de rocío (vapor saturado), un flujo másico L_{c_o} de 0.03 Kg/s y temperatura de salida de 308.15 K (35°C) para el agua como fluido de enfriamiento. La longitud del condensador se dividió en 250 segmentos, esto es, un incremento de longitud ΔL de 0.002 m para la integración. El apéndice B muestra los criterios utilizados para seleccionar la geometría del condensador y tamaño en paso de integración.

El modelo de condensación resulta válido bajo la anterior combinación de valores para todas las posibles composiciones del vapor tanto de mezclas binarias como ternarias, ya que no se condensa todo el vapor, la condensación se inicia desde la entrada del tubo, el vapor permanece en régimen de flujo turbulento ($Re_V > 8000$) y la película de líquido condensado es laminar ($Re_L < 1600$) durante todo el proceso de condensación.

5.2 Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar

Una vez seleccionado el flujo y temperatura del vapor, el flujo y temperatura del agua de enfriamiento, la presión y geometría bajo los cuales el modelo de condensación resulta válido, el mayor interés fue conocer el efecto de la composición inicial del vapor sobre el flux molar en cada una de las mezclas.

A continuación se analiza el efecto de la composición del vapor en el flux molar de mezclas binarias. La Figura 5.1 muestra la variación del flux molar del benceno con su composición inicial en el vapor: $y_{1o}^V = 0.25$, $y_{1o}^V = 0.50$ y $y_{1o}^V = 0.75$; en la mezcla benceno-tolueno. Se puede observar que el incremento de concentración del benceno (componente ligero) en el vapor incrementa su rapidez de condensación (flux molar del benceno) cuando se mantienen constantes los restantes parámetros del modelo. Por otra parte, en la Figura 5.2 se puede observar que este incremento de concentración de benceno ocasiona una reducción en el flux molar del tolueno (componente pesado). Un incremento de composición del benceno requiere una disminución en la composición del tolueno a fin de satisfacer la sumatoria de fracciones molares $\sum y_{io}^V = 1.0$. Por lo tanto, se encuentra razonable que el flux molar del tolueno disminuya con el incremento de concentración de benceno porque en realidad su concentración disminuye en la mezcla. La explicación del efecto de la composición es muy simple, una mayor concentración del componente indica una mayor masa a condensar, lo cual se refleja directamente en el flux molar del componente. Este efecto de la composición inicial de vapor se presentó en las restantes mezclas binarias de estudio.

En la Figura 5.3 se puede observar que el incremento de concentración de benceno disminuye invariablemente el flux molar total. Esto es debido a que el incremento de concentración de benceno esta acompañado de una disminución en la temperatura de saturación del vapor [29], como indicaron Colburn y Drew [2], una disminución en la temperatura del vapor disminuye la rapidez de condensación, es decir, el flux molar total. En general, el flux molar total disminuyó con el incremento de concentración del componente ligero. Sin embargo, en mezclas azeotrópicas puede suceder que bajo dos diferentes composiciones el flux

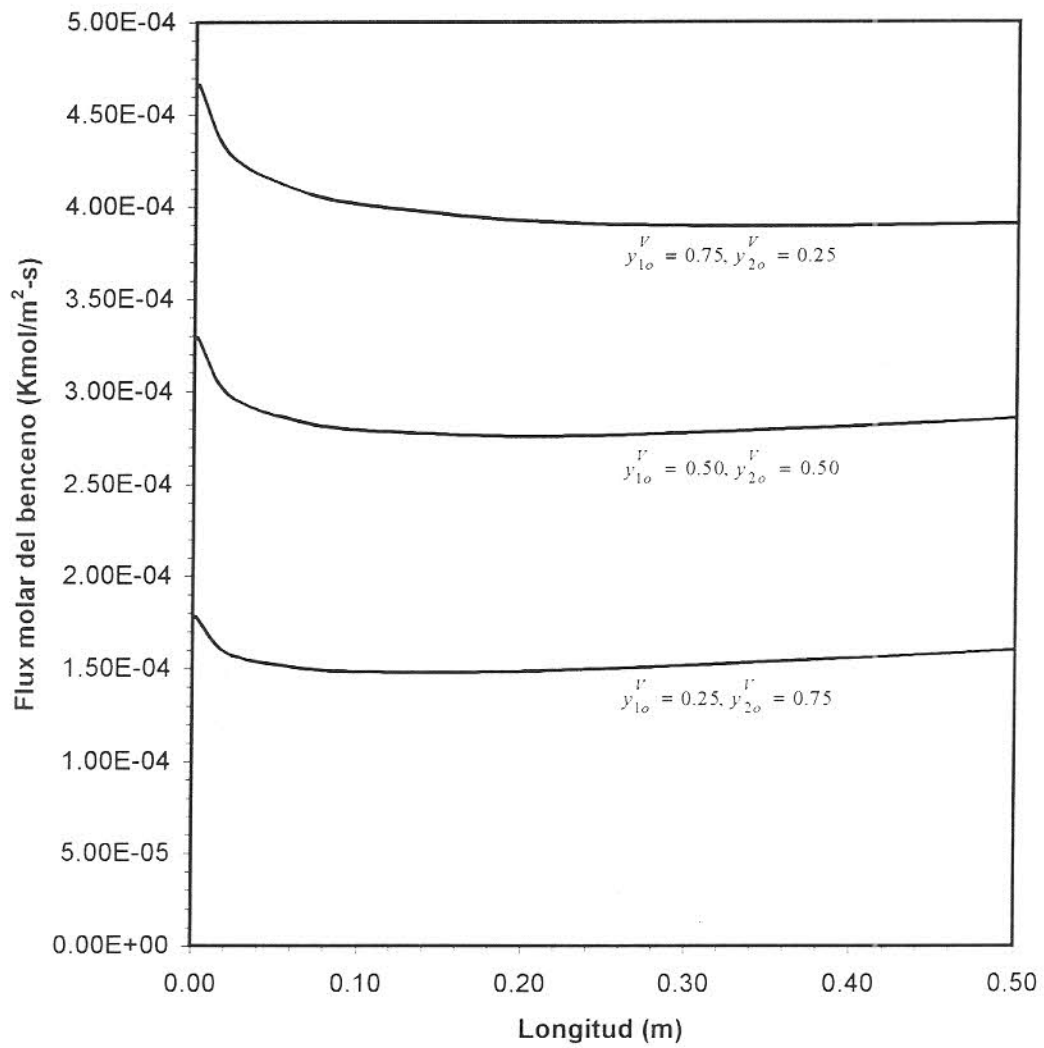


Figura 5.1: Efecto de la composición inicial del vapor en el flujo molar del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

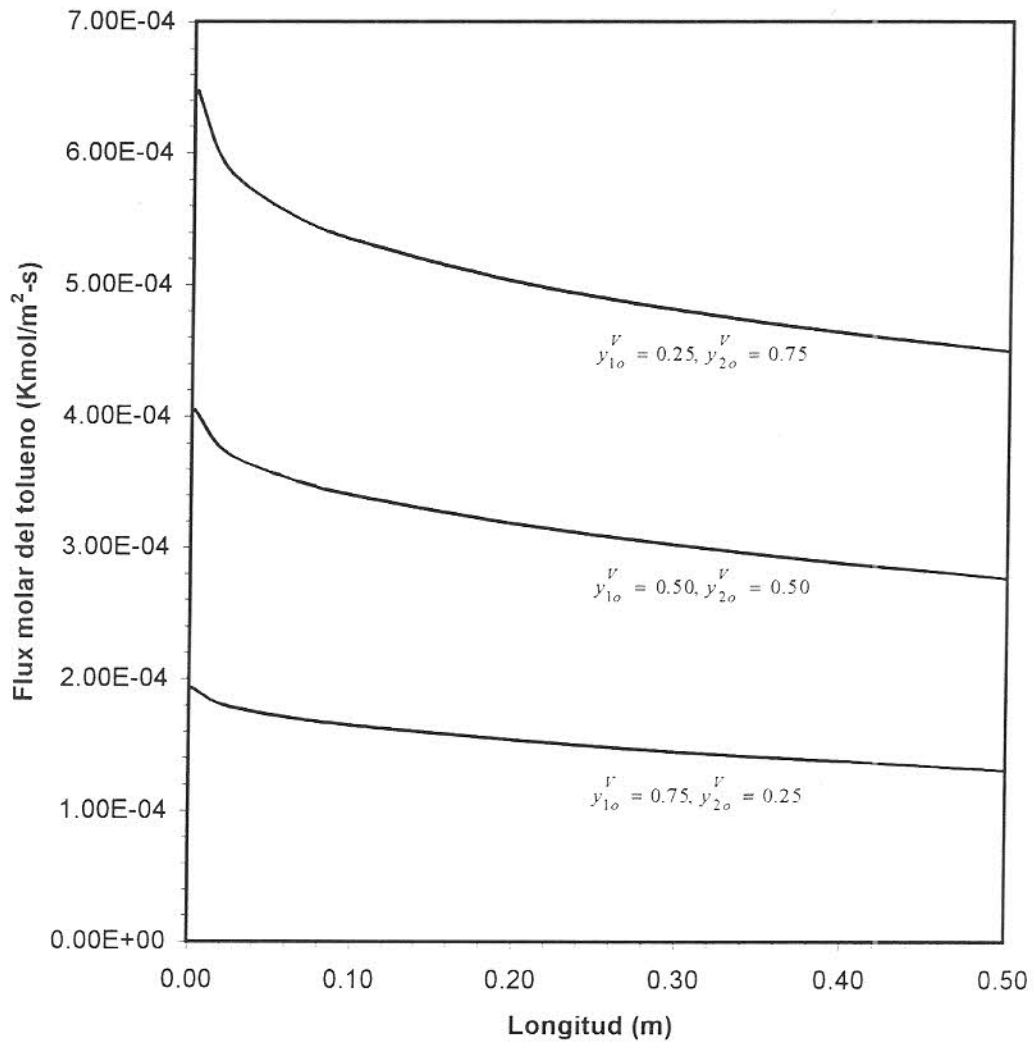


Figura 5.2: Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

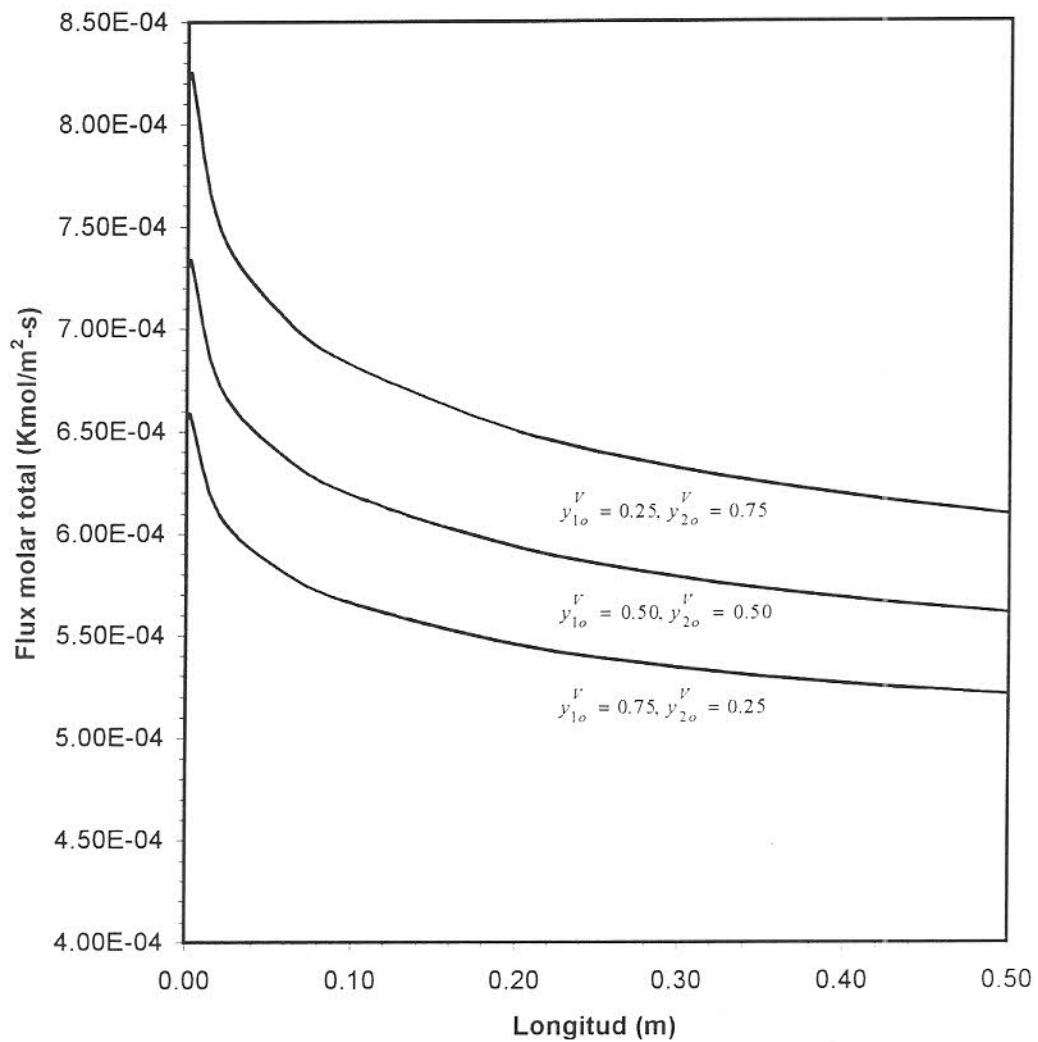


Figura 5.3: Efecto de la composición inicial del vapor en el flujo molar total para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

molar total resulte similar, como se muestra en la Figura 5.4 para la mezcla etanol-benceno, donde las curvas de flux molar total a composición $y_{1o}^V = 0.50$ y $y_{1o}^V = 0.75$ casi se trasapan.

Honda et al. [9] indicaron que en la condensación de mezclas binarias a flujo concurrente entre el vapor y el líquido condensado, el flux molar total disminuye a lo largo del condensador debido principalmente a que la masa de vapor a condensar disminuye. Este comportamiento del flux molar total es razonable y sucede en todas las mezclas binarias. Similar comportamiento presenta el componente pesado, disminuye conforme procede la condensación. Sin embargo, esta afirmación no puede aplicarse al flux molar del componente ligero. En la Figura 5.1 se puede observar que el flux molar del benceno a una composición inicial de $y_{1o}^V = 0.25$ decrece inicialmente y gradualmente se incrementa conforme procede la condensación, pero a una composición de $y_{1o}^V = 0.75$ el incremento es poco significativo. En la Figura 5.5, la mezcla metanol-clorobenceno muestra claramente la presencia de un mínimo en el flux molar del metanol a una composición $y_{1o}^V = 0.75$, además de una amplia región donde el flux molar crece continuamente (final del condensador). Se puede observar que a una baja concentración del metanol $y_{1o}^V = 0.25$, el flux molar casi se incrementa continuamente a lo largo del condensador. Este perfil de flux molar resulta contrario al encontrado por Krishna y Panchal [19] para la mezcla gas-vapor de aire-metanol-agua, donde el flux molar del metanol (componente ligero) presenta un máximo en un punto dentro del condensador. La figura 5.6 muestra la variación del flux molar del metanol con la composición para la mezcla metanol-agua, donde se puede observar una región de gradual incremento del flux molar conforme procede la condensación, pero ningún máximo se presenta en la región interna del condensador. La comparación del flux molar del benceno y metanol en las Figuras 5.1, 5.5 y 5.6, respectivamente, muestran que un componente ligero con una volatilidad relativa grande y bajo peso molecular (e.g. metanol) presentan un incremento de flux molar más significativo que un componente de volatilidad relativa moderada y alto peso molecular (e.g. benceno). Sin embargo, en ninguna de las mezclas binarias bajo estudio se presentó un máximo en el flux molar del componente ligero.

En las Figuras 5.7, 5.8 y 5.9 se muestra el flux molar de cada componente en la condensación de la mezcla benceno-tolueno-clorobenceno para tres diferentes composiciones

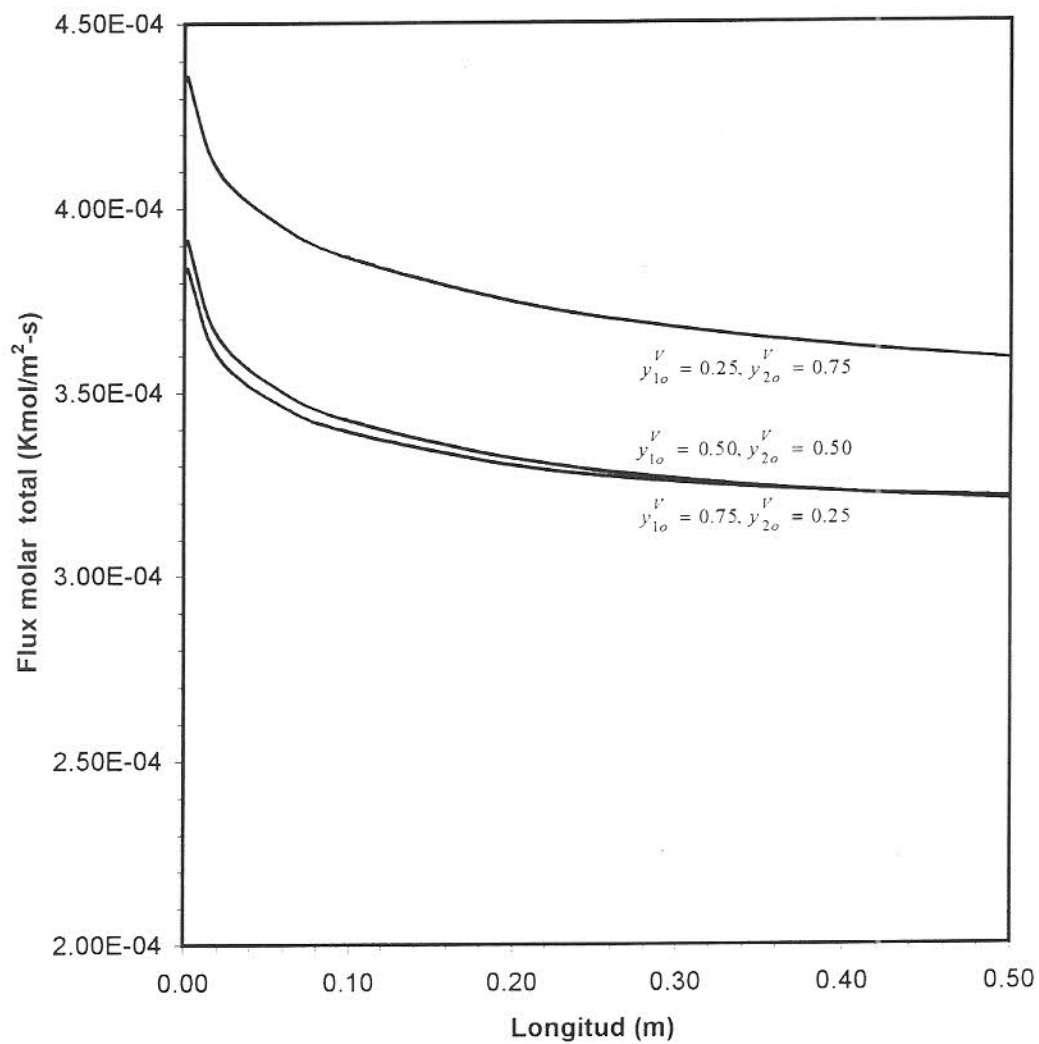


Figura 5.4: Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar total para la mezcla etanol(1)-benceno(2).

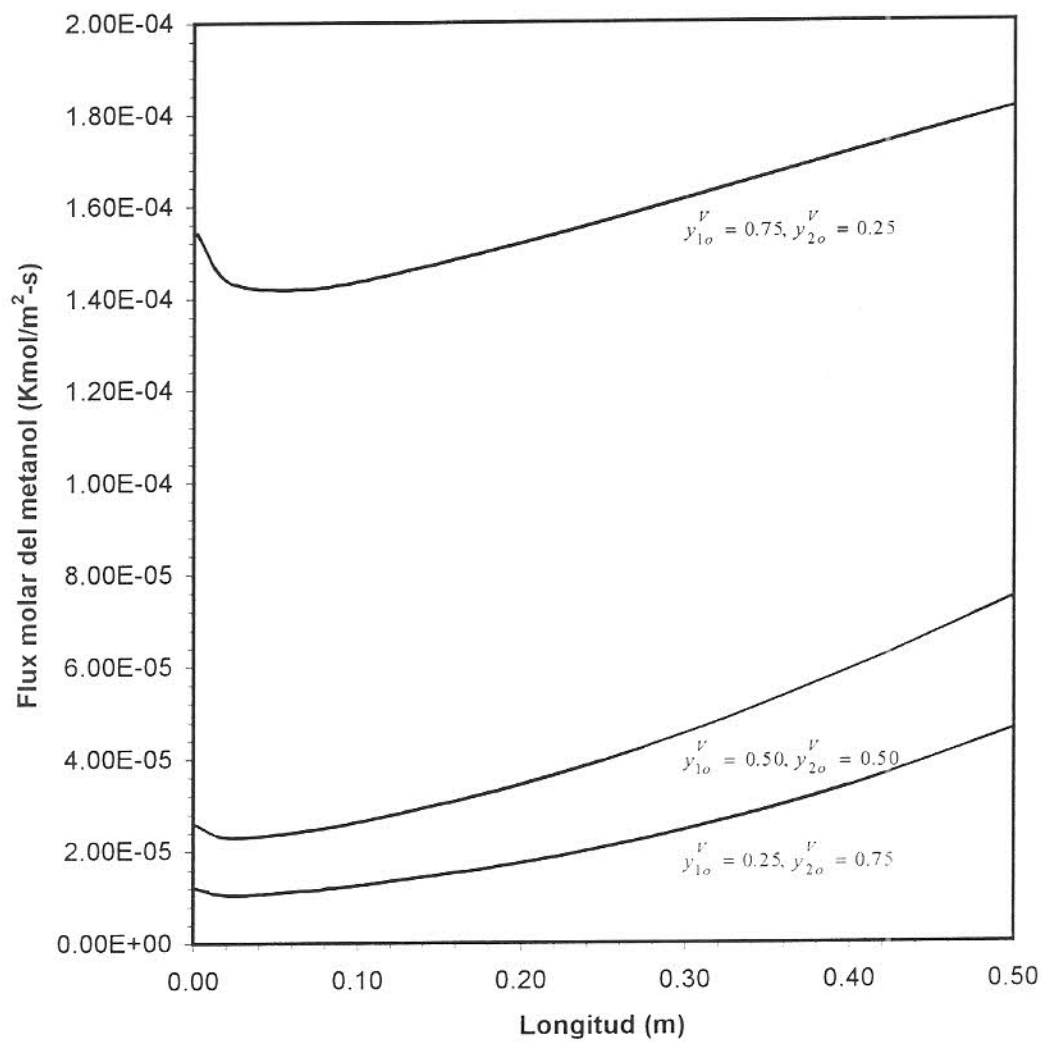


Figura 5.5: Efecto de la composición inicial del vapor en el flujo molar del metanol para la mezcla metanol(1)-clorobenceno(2).

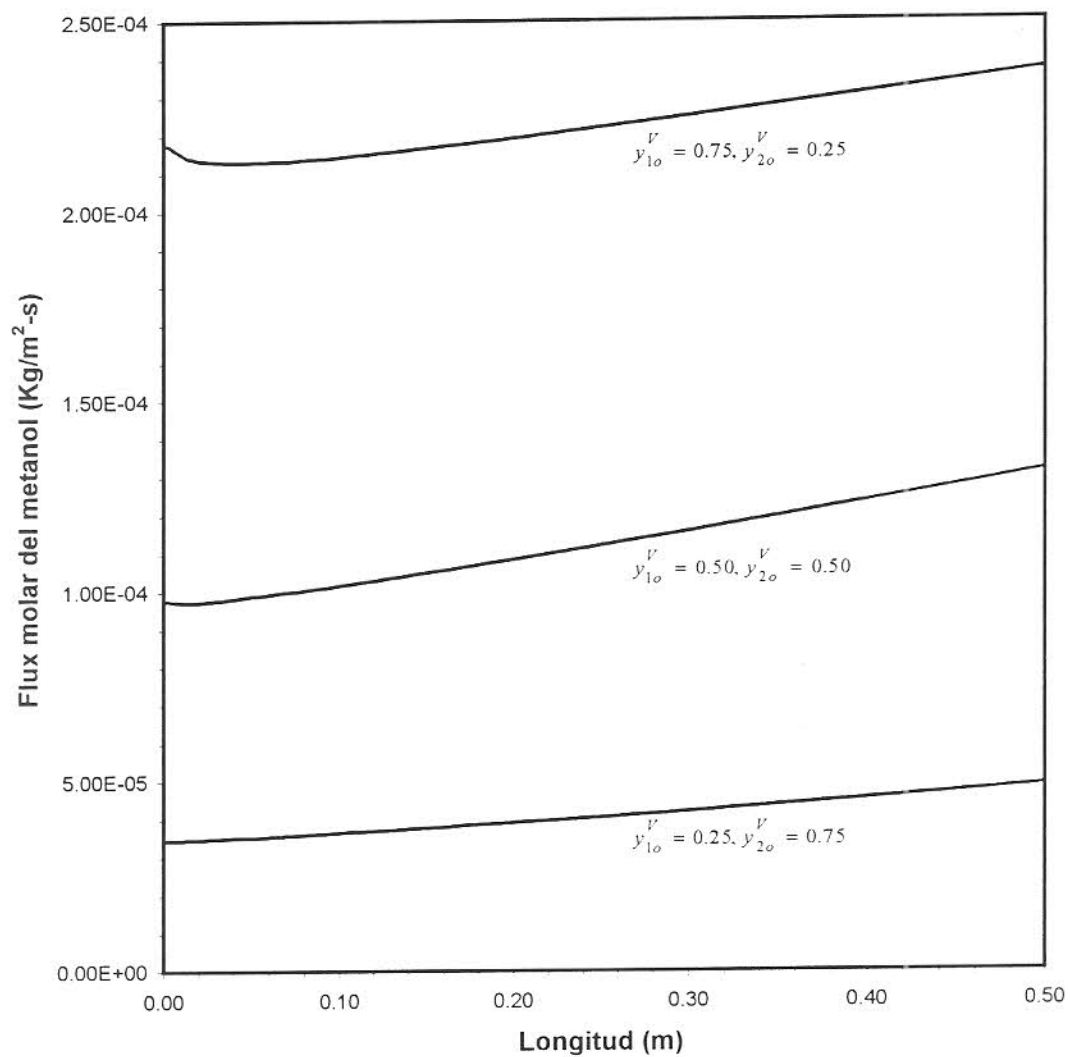


Figura 5.6: Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del metanol para la mezcla metanol(1)-agua(2).

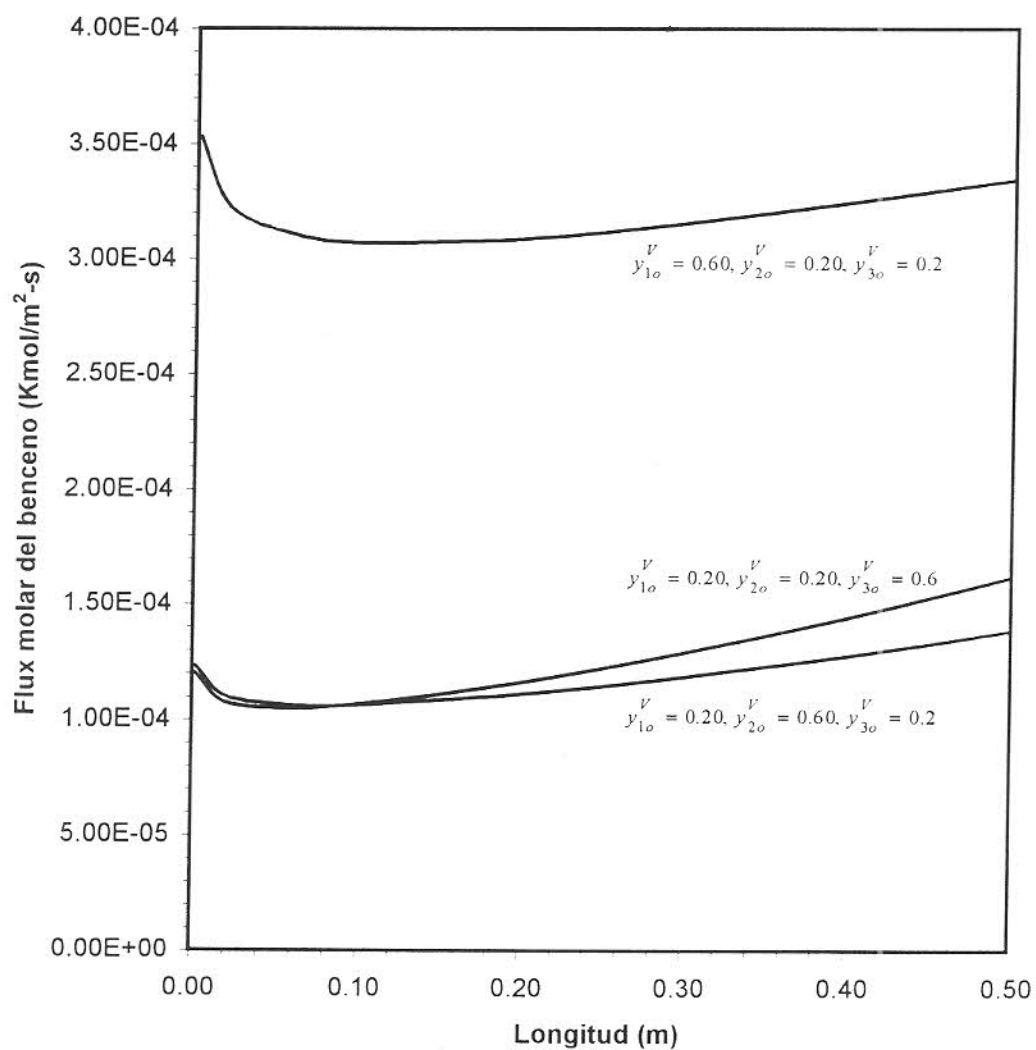


Figura 5.7: Efecto de la composición inicial del vapor en el flujo molar del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

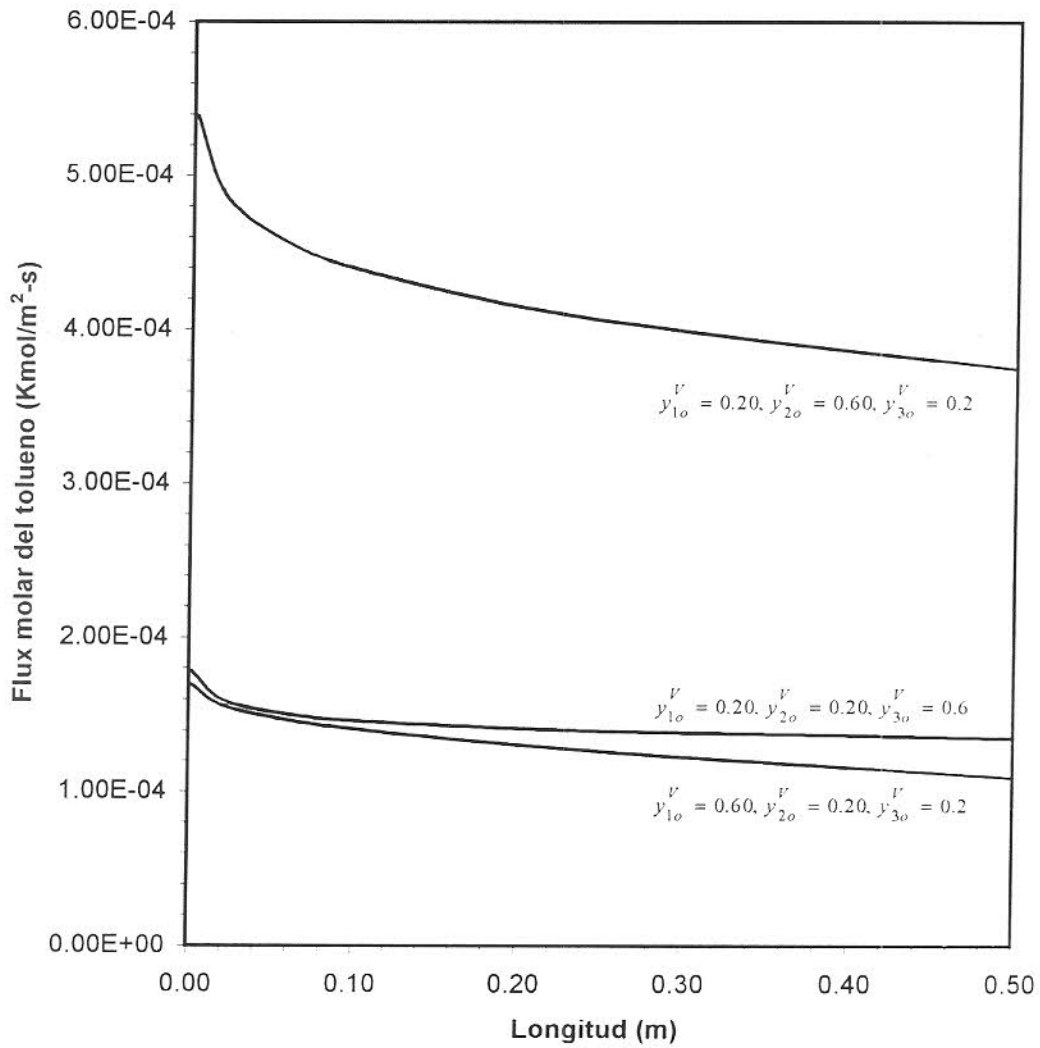


Figura 5.8: Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

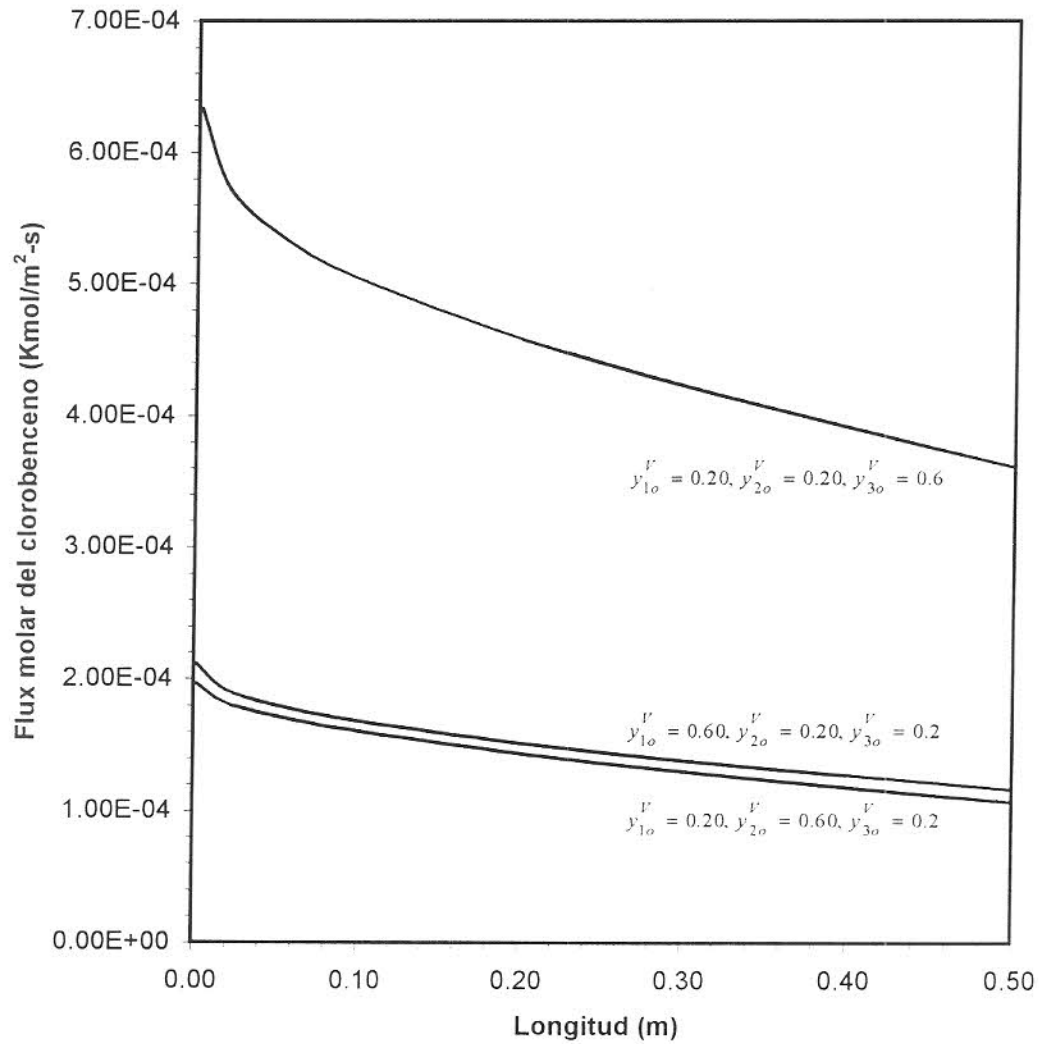


Figura 5.9: Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del clorobenceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

del vapor. A diferencia de las mezclas binarias, en una mezcla ternaria el incremento de concentración de uno de los componentes no necesariamente establece una disminución de concentración de los restantes componentes. Se han seleccionado tres composiciones del vapor bajo las cuales al menos uno de los componentes mantiene su composición en dos de ellas. Las composiciones de vapor seleccionadas son: $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$, $y_{3o}^V = 0.60$; $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.60$, $y_{3o}^V = 0.20$; y $y_{1o}^V = 0.60$, $y_{2o}^V = 0.20$, $y_{3o}^V = 0.20$.

En estas gráficas se puede observar que el flux molar de cada componente se incrementa con el aumento de la fracción molar del mismo en el vapor de entrada, tal como se presenta en la mezclas binarias. Sin embargo, si solo la fracción molar de los dos restantes componentes cambia, el flux molar se modifica ligeramente. Este cambio en el flux molar se debe al efecto de interacción de las diferencias de composición (sección 3.2.2). Para la mezcla benceno-tolueno-clorobenceno, los efectos de interacción resultan poco significativos que pueden prácticamente suponerse despreciables. Esto se debe a que los componentes son de naturaleza similar. Sin embargo, para las restantes mezclas ternarias ignorar los efectos de interacción no resulta recomendable, como se muestra en la Figura 5.10 para el etanol en la mezcla metanol-etanol-agua, en donde al cambiar la composición del metanol y agua se observa un cambio significativo en el flux molar, aproximadamente 100%. Taylor y Krishna [7] indicaron que los efectos de interacción deben ser considerados tanto en mezclas de vapores como en mezclas gas-vapor porque tienen un efecto significativo en la dirección de transferencia de un componente, ignorarlos puede conducir a determinar una dirección de transferencia errónea.

El flux molar total en una mezcla ternaria disminuye al incrementar la concentración del benceno y tolueno (componentes más ligeros), en forma similar a la mezcla binaria cuando se incrementa la concentración del componente ligero, como se muestra en la Figura 5.11. El flux molar del clorobenceno (componente pesado) y total disminuye conforme procede la condensación, tal como sucede en una mezcla binaria. Para el benceno (componente más ligero), y en algunos casos para el tolueno (componente intermedio), se presenta un incremento en el flux molar al final del condensador (ver Figuras 5.8 y 5.10, donde el componente intermedio es el Componente 2), al igual como sucede con el componente ligero en

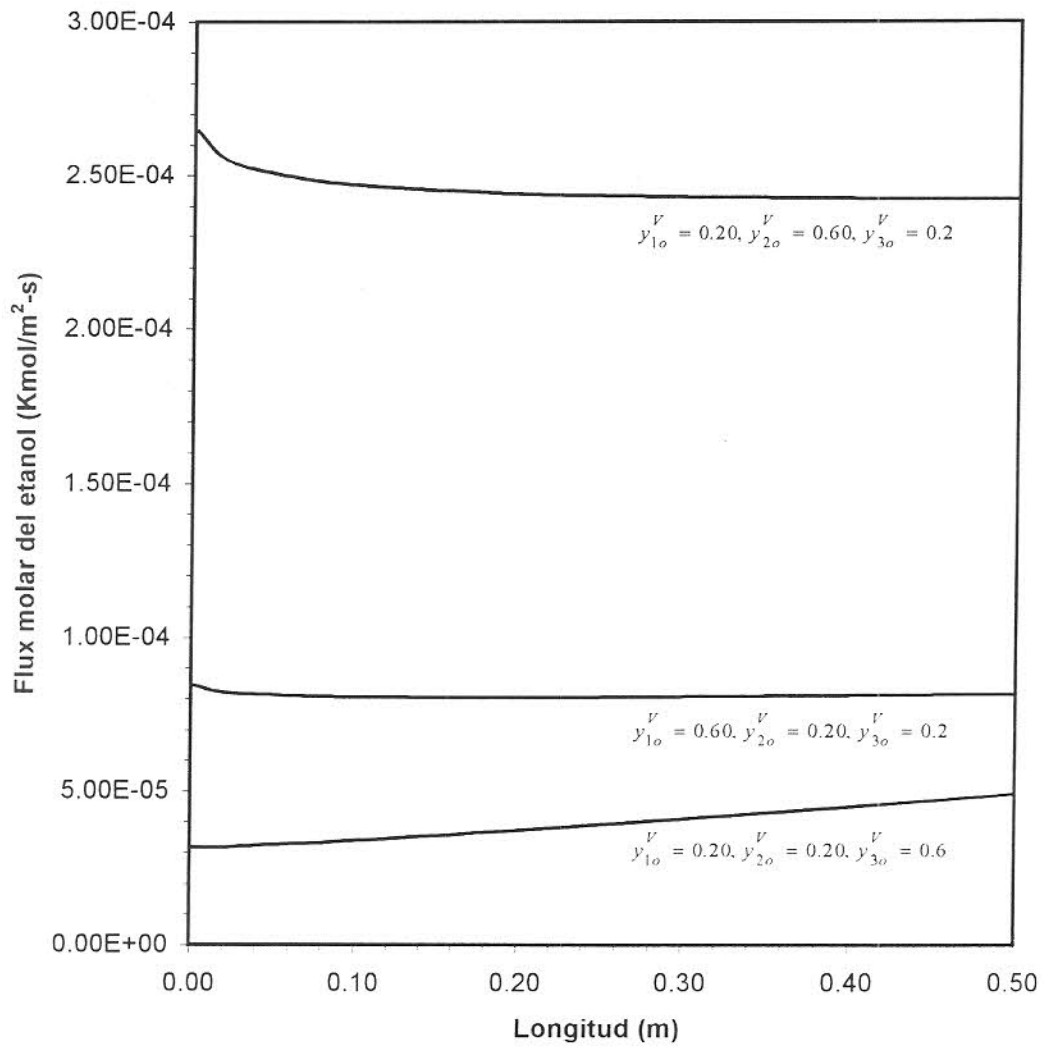


Figura 5.10: Efecto de la composición inicial del vapor en el flux molar del etanol para la mezcla metanol(1)-etanol(2)-agua(3).

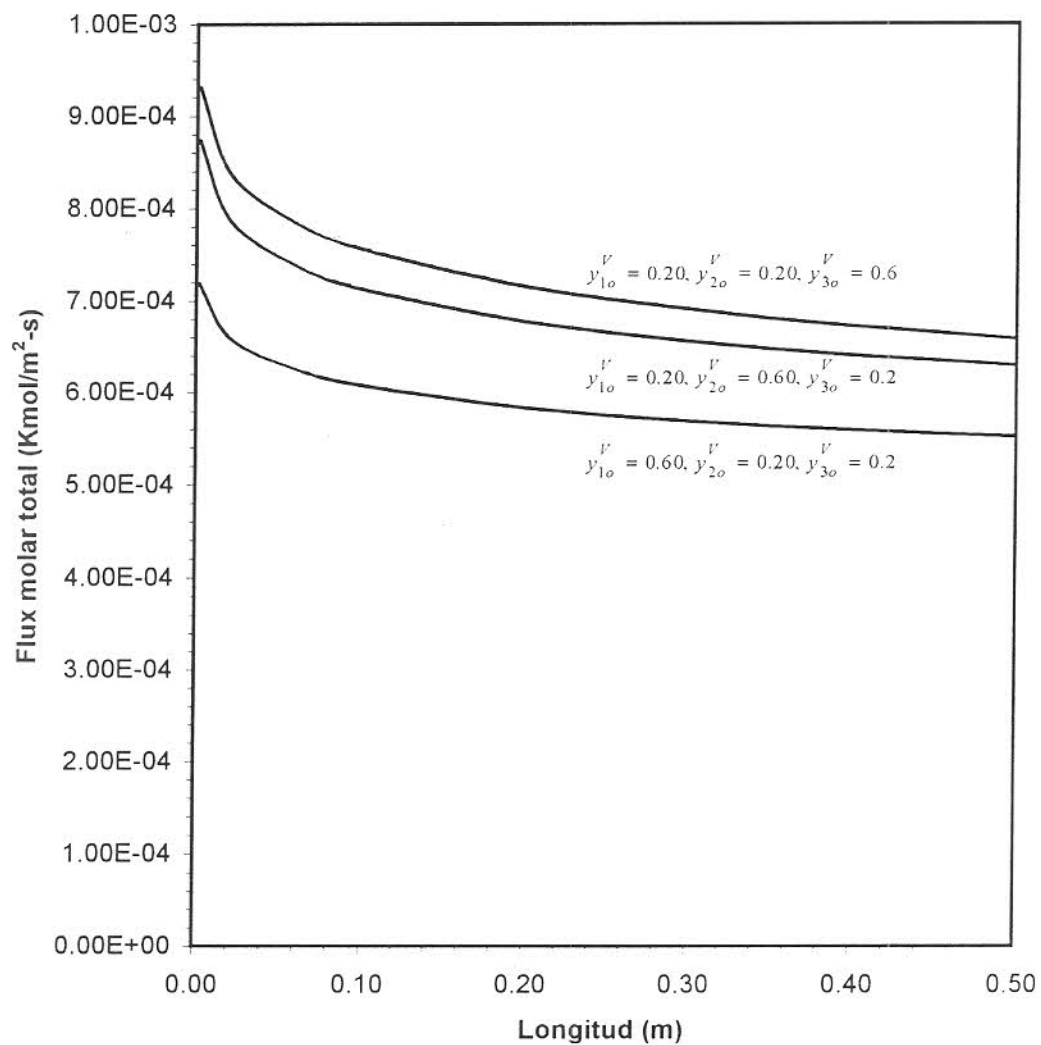


Figura 5.11: Efecto de la composición inicial del vapor en el flujo molar total para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

las mezclas binarias. Las causas que originan que el flux molar de un componente se incremente a partir de un punto del condensador no son muy claras (posteriormente se analiza más a detalle), pero sucede sólo con el componente ligero; o componentes más ligeros en una mezcla ternaria, y no con el componente pesado. Asimismo, a diferencia de las mezclas gas-vapor que presentan un gradual incremento en el flux molar del componente ligero a la entrada del condensador, en las mezclas de vapores la región de aumento del flux sucede después de la entrada del condensador para el componente ligero.

Las Figuras 5.1, 5.2, 5.5, 5.6, 5.7, 5.8, 5.9 y 5.10 muestran que el flux molar de cada componente resulta positivo $N_i > 0$ a las tres diferentes composiciones del vapor. Esto indica que los componentes se transfieren en la misma dirección, desde el vapor hasta el líquido. Por lo tanto, para las mezclas de estudio y bajo las condiciones de condensación seleccionadas, la composición del vapor no modificó la dirección de transferencia de cada componente.

Los perfiles de flux molar encontrados para las mezclas binarias y ternarias presentan disminuciones muy rápidas en los primeros 0.06 m del condensador. Davis et al. [8] encontraron experimentalmente que los efectos de entrada son muy significativos en los perfiles de temperatura del tubo interno (presentan una rápida disminución a la entrada del condensador), pero no efectuaron ninguna observación sobre el flux molar. Sin embargo, como se observa en las gráficas, se presenta un comportamiento muy similar en el flux molar. En la Figura 5.12 se muestra el perfil de temperatura del tubo interno para la mezcla benceno-tolueno, el cual presenta un comportamiento similar al encontrado por Davis et al. [8]. Esto permite deducir que el modelo de condensación efectúa un cálculo aproximado de los efectos de entrada en el flux molar, así como un cálculo aproximado del resto de las variables: los perfiles de temperatura y composición tanto del vapor como del líquido condensado. Sin embargo, para determinar si los efectos de entrada son realmente muy significativos en el flux molar, se requiere efectuar experimentalmente la condensación de las mezclas bajo las condiciones seleccionadas a fin de comparar los perfiles experimentales con los teóricos.

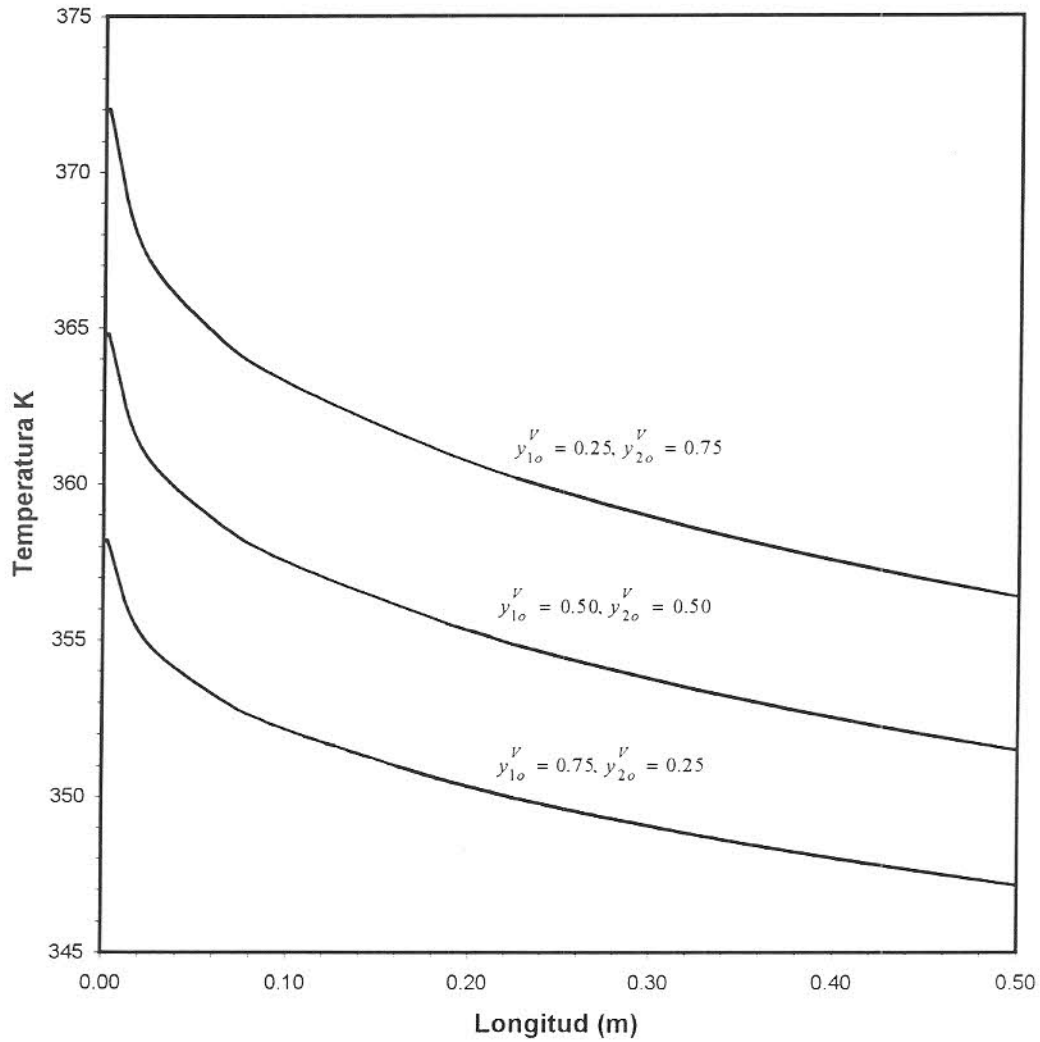


Figura 5.12: Efecto de la composición inicial del vapor en la temperatura del tubo interno del condensador para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

5.3 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar

En base a los resultados obtenidos con la composición inicial, se consideró variar la temperatura del vapor, el flujo del vapor y la temperatura del agua de enfriamiento independientemente uno del otro a fin de determinar si bajo otra combinación de parámetros es posible encontrar que el flux molar de uno de los componentes sea negativo. La temperatura de salida del agua de enfriamiento se aumenta a 318.15 K (40°C). La condición térmica del vapor no puede ser llevada hasta un punto tal que uno de los componentes se encuentre a su temperatura crítica debido a limitaciones en el modelo para el cálculo de las propiedades de cada componente y de la mezcla. En base a experiencias previas se consideró 30 K de sobrecalentamiento respecto a la temperatura de saturación de la mezcla. El flujo másico de vapor se incrementó a 0.006 Kg/s. El modelo de condensación continuó siendo válido para los valores de estos parámetros.

En las Figuras 5.13 y 5.14 se muestra el efecto de la condición térmica del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar de cada componente para la mezcla benceno-tolueno a la composición de benceno $y_{1o}^V = 0.50$. De igual manera, en las Figuras 5.15, 5.16 y 5.17 se muestra el efecto de los anteriores parámetros en el flux molar de cada componente para la mezcla benceno-tolueno-clorobenceno a la composición $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$, $y_{3o}^V = 0.60$. El flux molar obtenido con cada parámetro modificado se compara con el flux molar calculado para la combinación de valores establecida en la sección 5.1.

En estas gráficas se puede observar que el sobrecalentamiento del vapor (30 K arriba de saturación) causa una disminución en el flux molar de cada componente (ligero o pesado), pero sin modificar su comportamiento a lo largo del tubo. Colburn y Drew [2], y Taylor et al. [4] indicaron que una mezcla sobrecalentada siempre presenta una rapidez de transferencia (flux molar) menor que si se encontrara saturada. Esta disminución en la rapidez de transferencia se atribuye a que una mezcla sobrecalentada requiere se retire una mayor can-

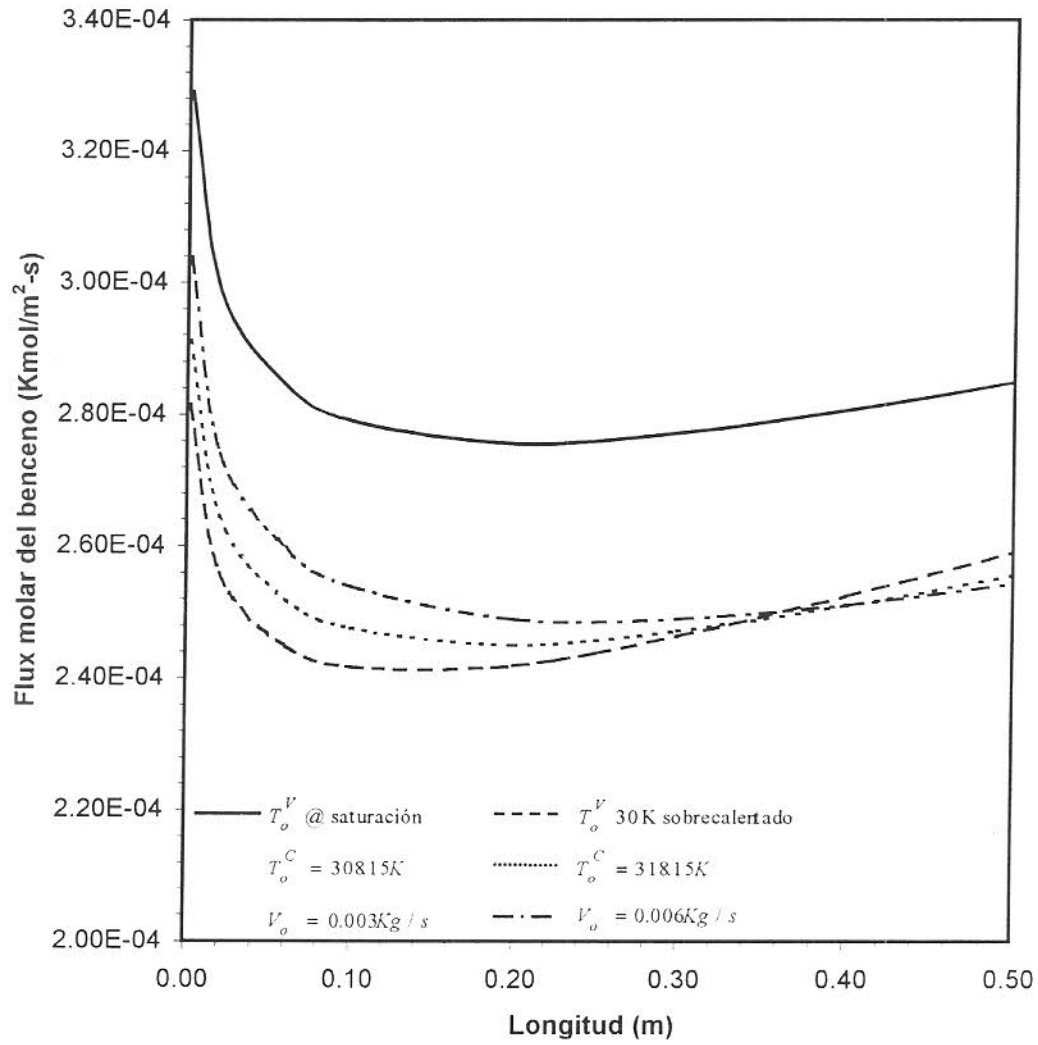


Figura 5.13: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.50$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

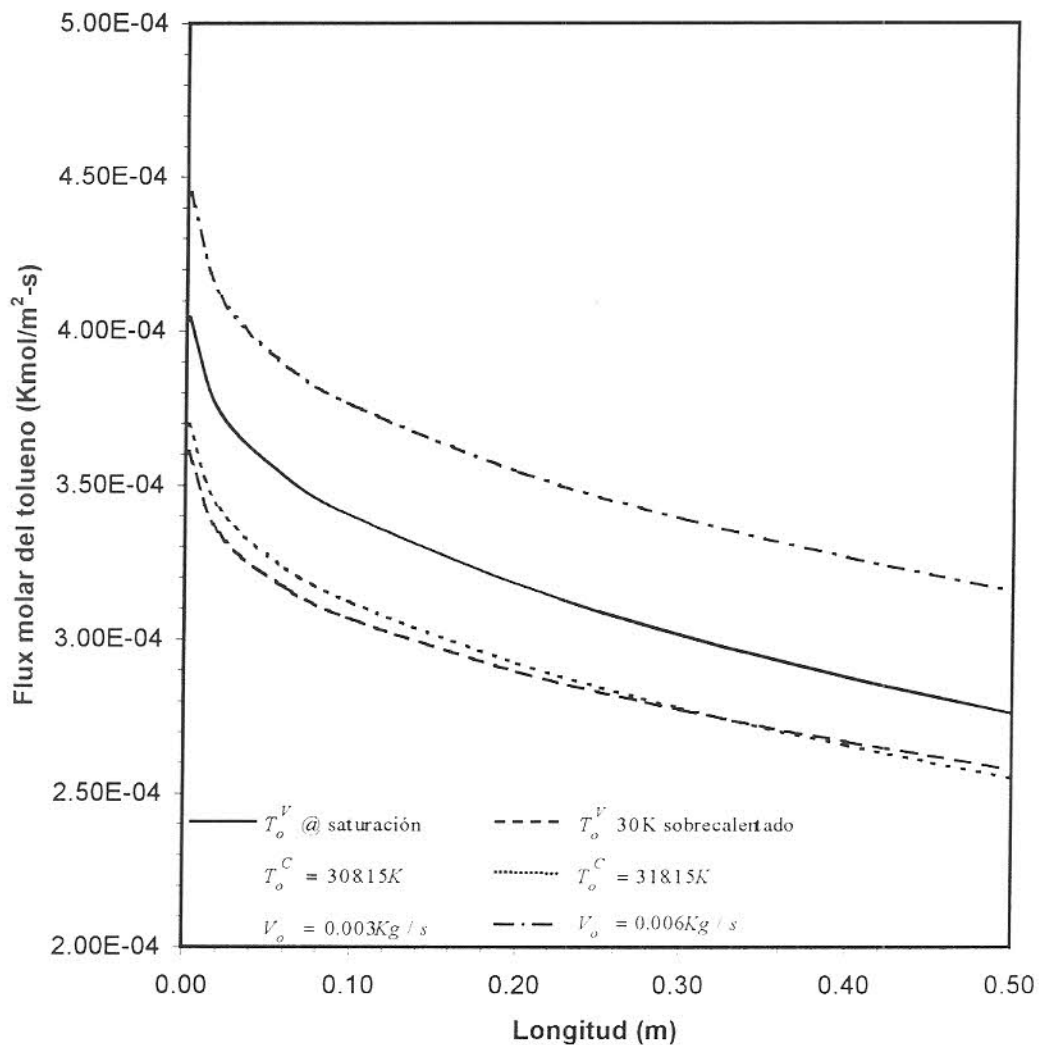


Figura 5.14: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del tolueno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.50$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

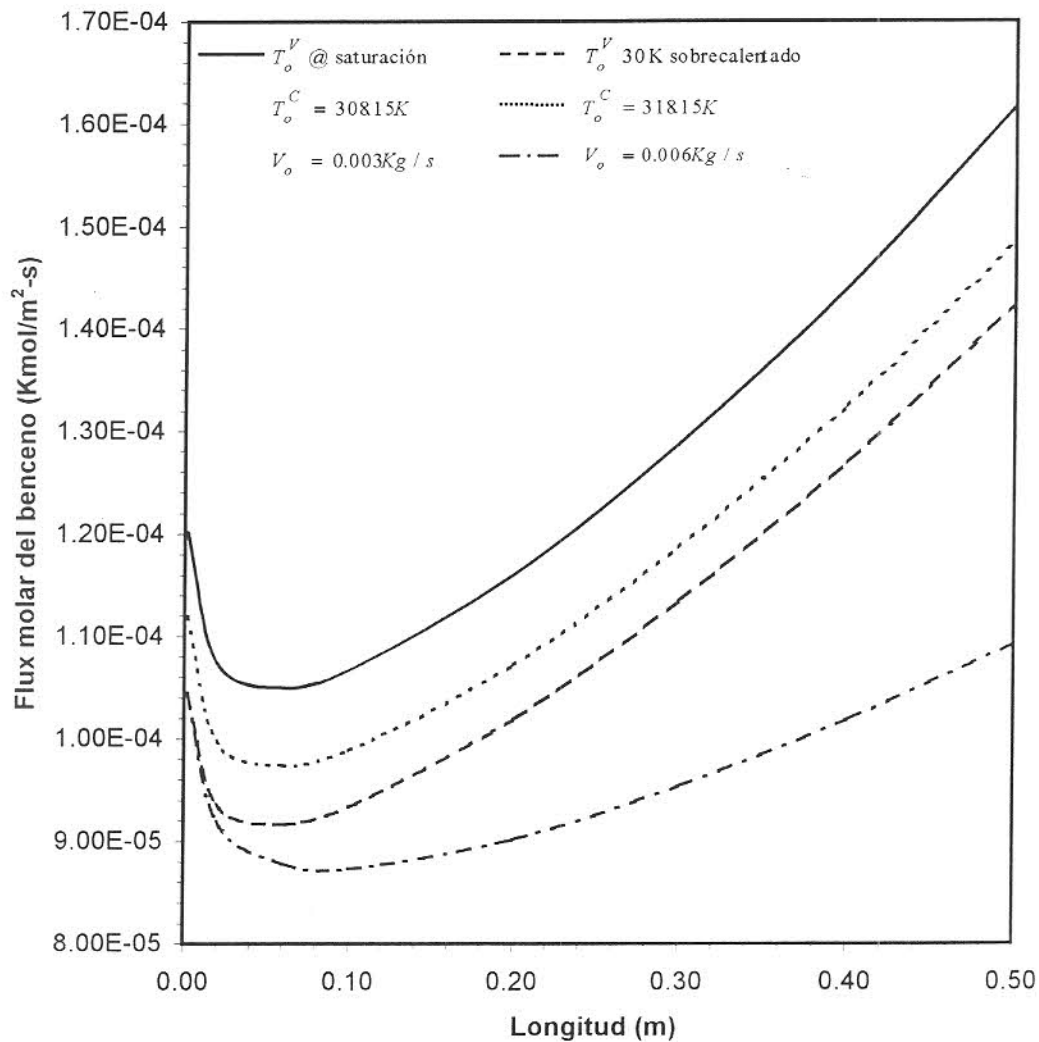


Figura 5.15: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3)

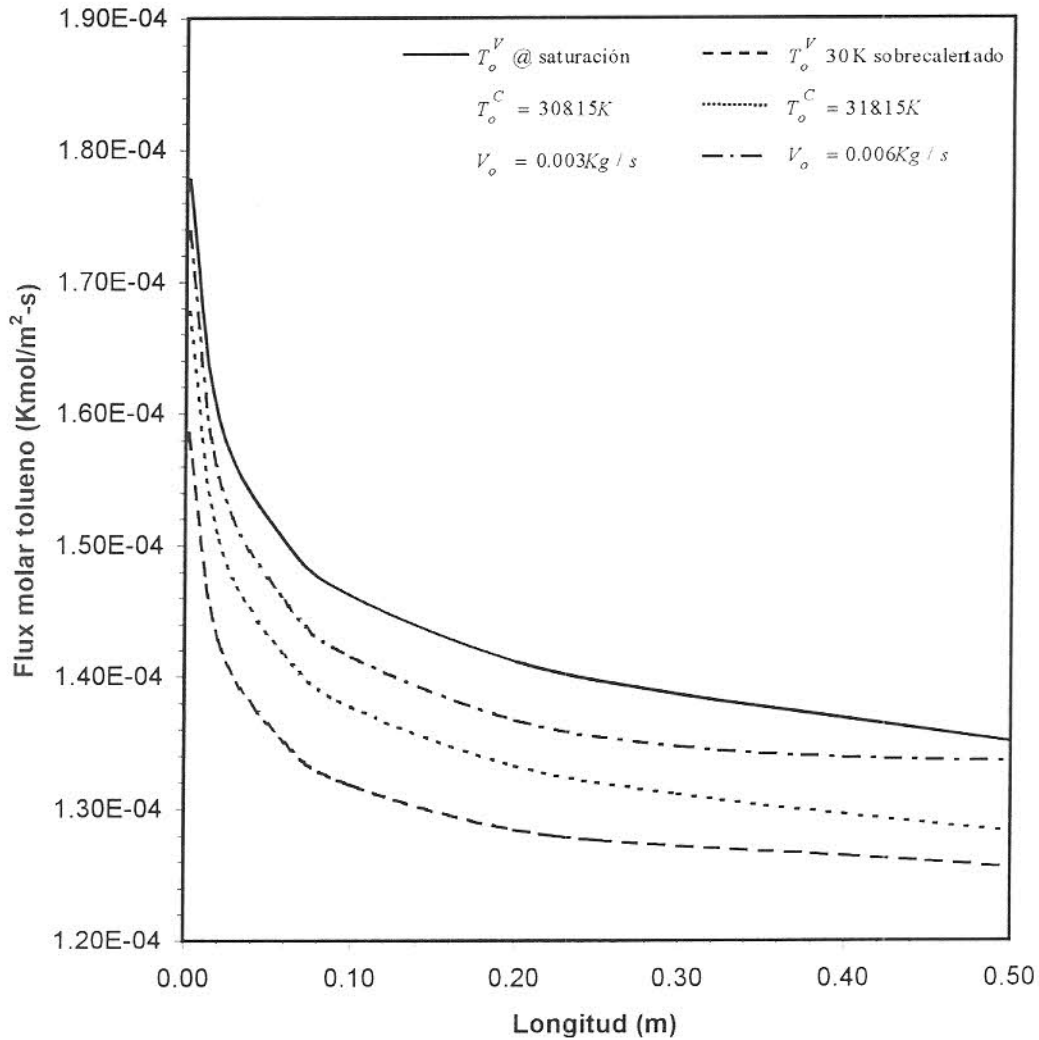


Figura 5.16: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del tolueno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

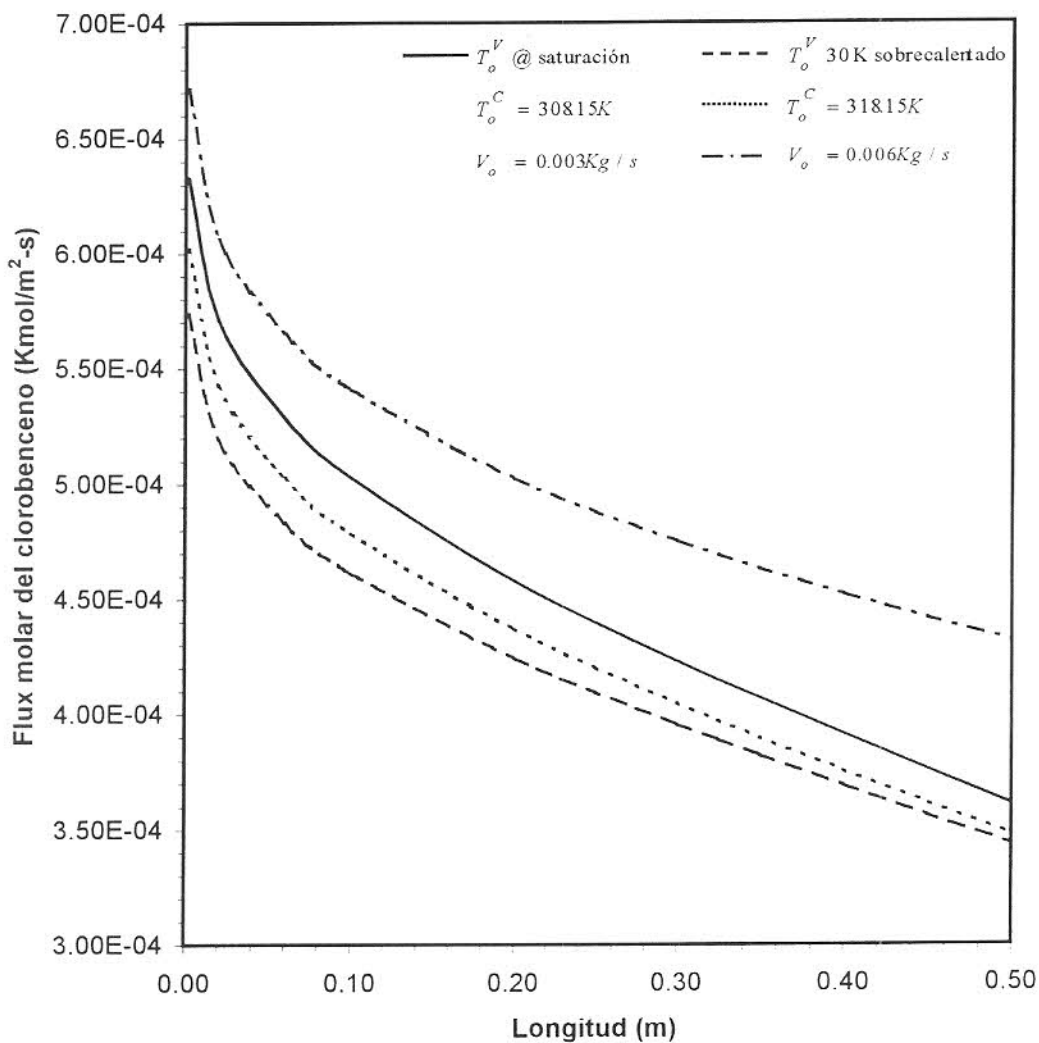


Figura 5.17: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el flux molar del clorobenceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

tividad de calor sensible del vapor, energía que es empleada en condensar más vapor cuando la mezcla esta saturada. El incremento en la temperatura del agua de enfriamiento (10 K) causa una disminución en el flux molar de cada componente (ligero o pesado) como se muestra en la Figuras 5.13 a 5.17. Este incremento de temperatura no modifica el comportamiento del flux molar a lo largo del tubo. La disminución en el flux molar ocurre porque agua de enfriamiento más caliente incrementa la temperatura de la superficie de condensación, lo cual disminuye la cantidad de calor substraído, que representa una menor cantidad de vapor condensado [2].

Cuando el flujo de vapor de entrada se duplica, el flux molar del componente ligero disminuye como se muestra en las Figuras 5.13, 5.15 y 5.16. Sin embargo, el flux molar del componente pesado aumenta, como se muestra en las Figuras 5.14 y 5.17. Este efecto opuesto en el flux molar del componente pesado y ligero se encuentra relacionado con la transferencia de masa (Ecuaciones 3.7 y 3.11). Un incremento de flujo de vapor se refleja en un coeficiente de transferencia de masa k_i^* mayor [7], lo cual ocasiona que el componente con diferencia de composición positiva ($y_i^V - y_i^L$) incremente su rapidez de transferencia (componente pesado), pero el componente con diferencia de composición negativa disminuya su rapidez de transferencia (componente ligero).

Las Figuras 5.13 a 5.17 muestran que el flux molar de cada componente resulta positivo $N_i > 0$. El flux molar de cada componente a las restantes composiciones de vapor también fue positivo para todas las mezclas. Por lo tanto, para las mezclas de estudio, la dirección de transferencia de cada componente no se modificó con cambios en el flujo de vapor, temperatura del vapor o temperatura del agua de enfriamiento.

Los resultados muestran que bajo las condiciones de condensación y para las diferentes mezclas seleccionadas, los componentes siempre condensan. Sin embargo, se requiere explorar otras condiciones de condensación, principalmente aquellas que originen una disminución en la rapidez de condensación. Colburn y Drew [2] indicaron que para tasas pequeñas de condensación ($N_i \rightarrow 0$) se puede presentar que el flux molar de un componente sea negativo.

A continuación se analiza brevemente la relación de fluxes, antes de analizar la rela-

ción entre el flux de difusión y el flux convectivo. El objetivo de analizar el efecto difusivo y convectivo en el flux molar es efectuar una búsqueda más selectiva de las condiciones de condensación que puedan permitir un flux molar negativo en uno de los componentes.

5.4 Relación de fluxes molares

La relación de fluxes N_2/N_1 entre los componente uno y dos, en el caso de una mezcla binaria, es una representación de la rapidez con que el componente dos se transfiere durante la condensación respecto a la rapidez de transferencia del componente uno. Generalmente, la relación de fluxes se establece de forma que el flux molar en el numerador corresponde al componente pesado y el flux molar en el denominador corresponde al componente ligero.

Una relación de fluxes positiva indica que los dos componentes se transfieren en la misma dirección, esto es, ambos condensan. Una relación de fluxes negativas establece que los componentes se transfieren en direcciones opuestas, lo cual indica que un componente condensa y el otro evapora. Por otra parte, una relación de fluxes $N_2/N_1 > 1$ establece una situación en la cual el componente pesado se transfiere más rápidamente que el componente ligero, en tanto una relación de fluxes $N_2/N_1 < 1$ indica que el componente ligero se transfiere más rápidamente que el componente pesado. La relación de fluxes $N_2/N_1 = 1$ establece una situación en donde ambos componentes se transfieren a la misma rapidez.

5.4.1 Efecto de la composición en la relación de fluxes molares

A continuación se analiza el efecto de la composición inicial del vapor en la relación de fluxes para la combinación de valores del flujo y temperatura del vapor, flujo y temperatura del agua de enfriamiento, presión y geometría del condensador de la sección 5.1. En la Figuras 5.18, 5.19, 5.20 y 5.21 se muestran la relación de fluxes molares en la condensación de las mezclas benceno-tolueno, etanol-benceno, etanol-agua y metanol-clorobenceno a las composiciones de vapor: $y_{1o}^V = 0.25$, $y_{1o}^V = 0.50$ y $y_{1o}^V = 0.75$.

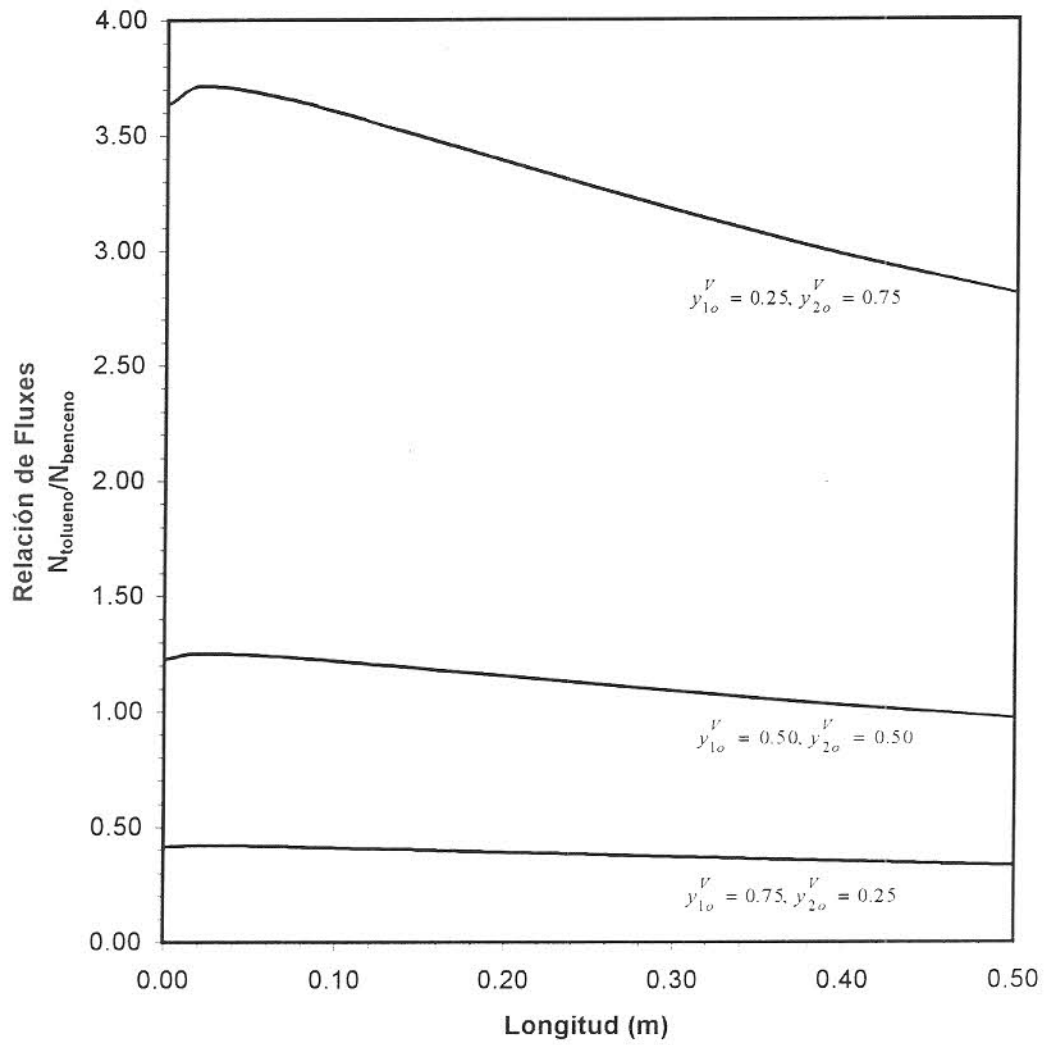


Figura 5.18: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flujes para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

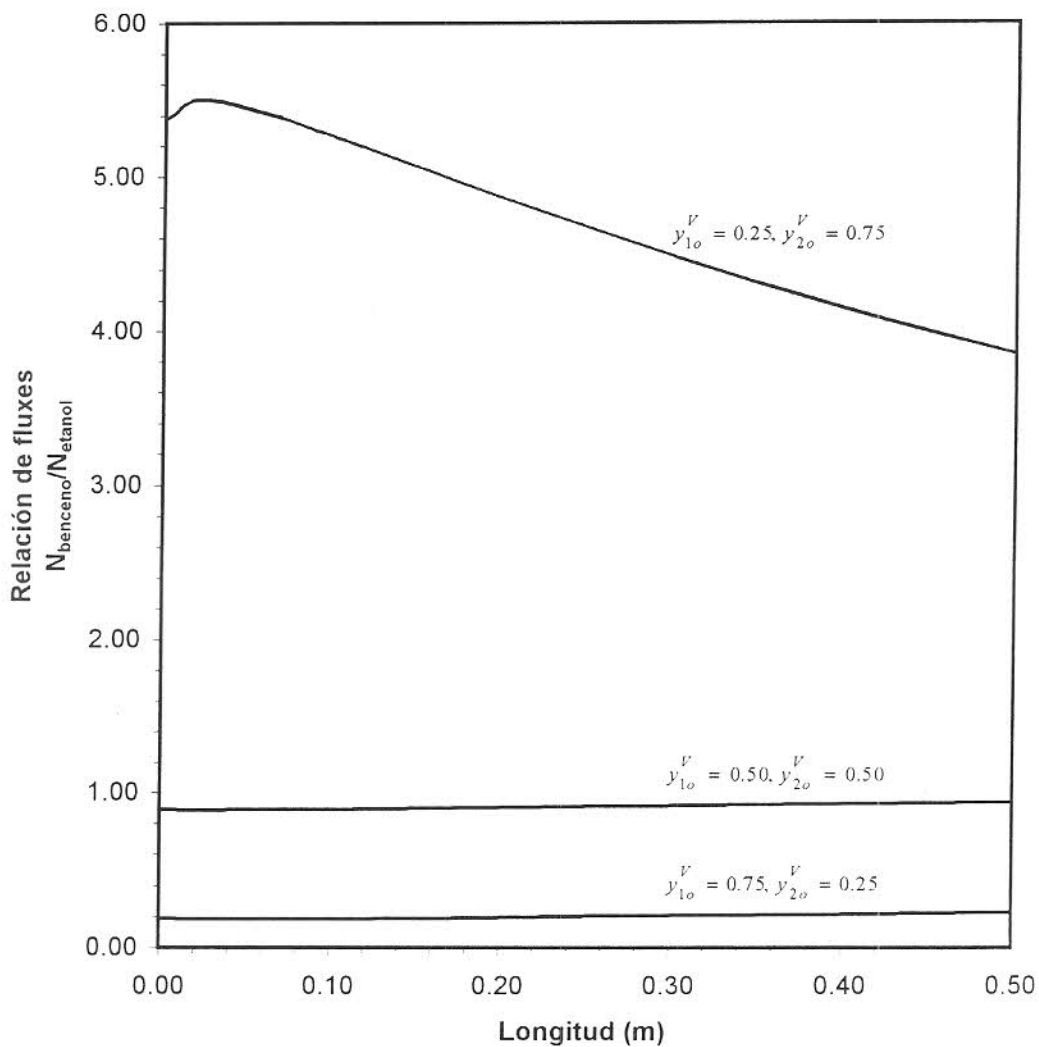


Figura 5.19: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes para la mezcla etanol(1)-benceno(2).

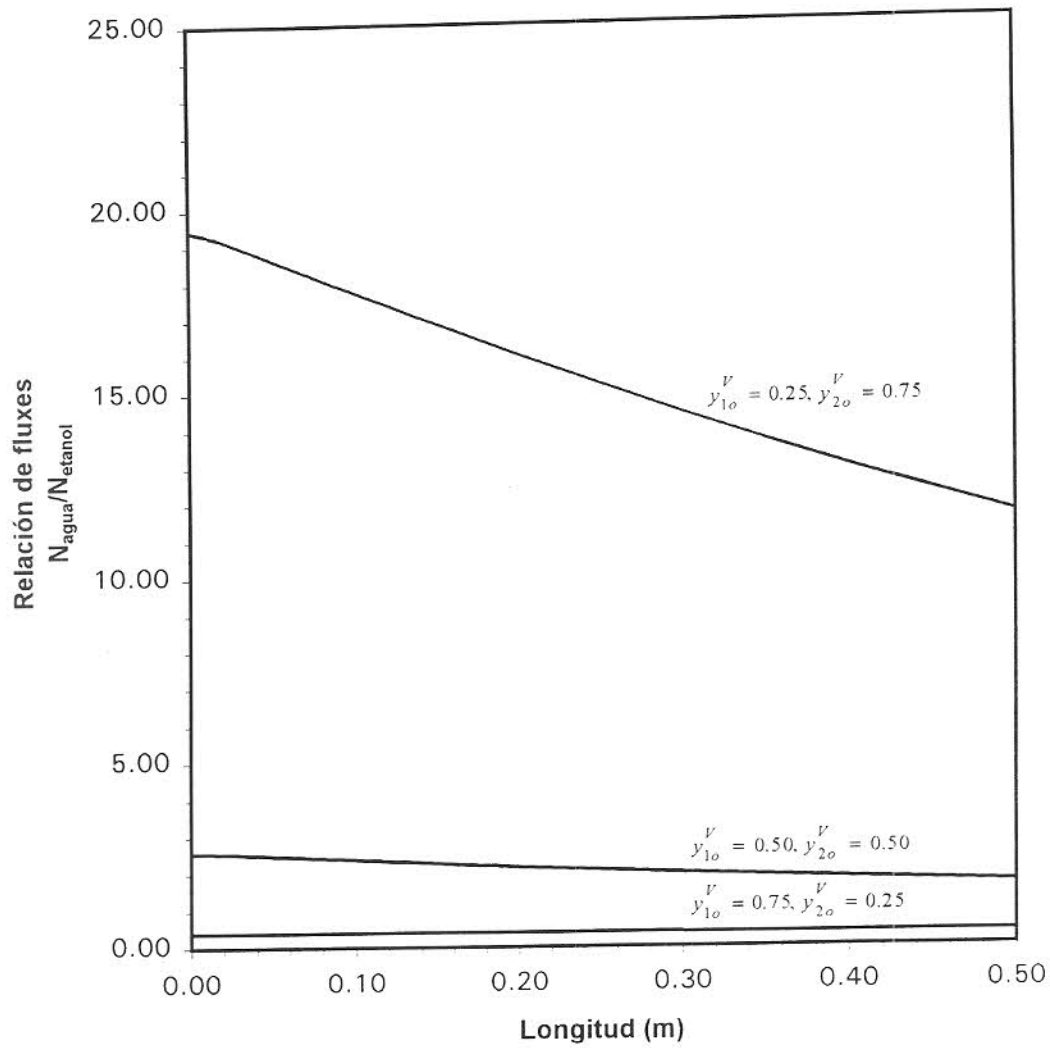


Figura 5.20: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flujes para la mezcla etanol(1)-agua(2).

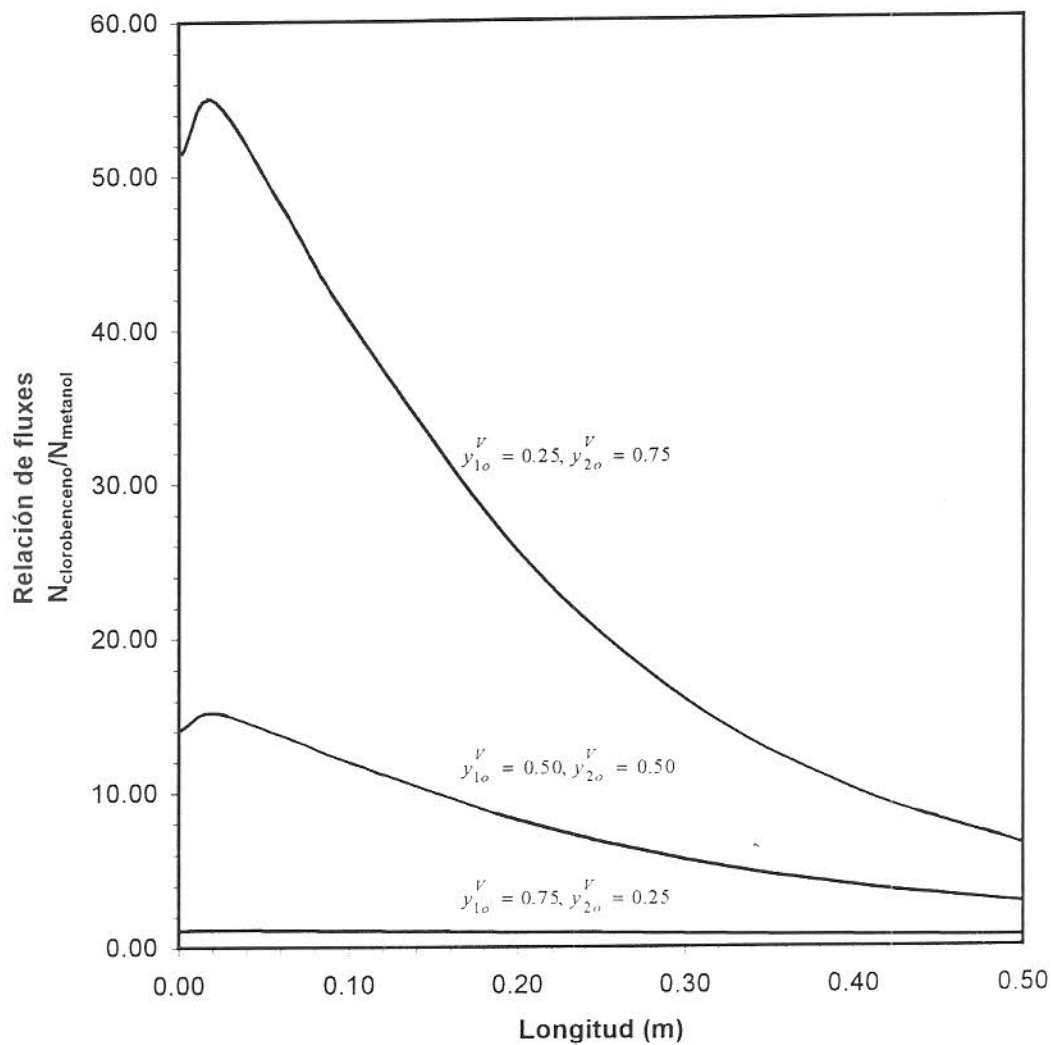


Figura 5.21: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flujes para la mezcla metanol(1)-clorobenceno(2).

En estas gráficas se muestra que la relación de fluxes molares resulta positiva a las tres diferentes composiciones del vapor, situación esperada, ya que el flux molar de cada componente resultó positivo $N_i > 0$. Además, se puede observar que el incremento de concentración del componente ligero en el vapor de entrada disminuye la relación de fluxes. Asimismo, una alta concentración del componente ligero en el vapor causa una linearización en la relación de fluxes.

La relación de fluxes resulta mayor a una baja concentración del componente ligero y en mezclas donde el componente ligero resulta muy volátil $\alpha_{12} \gg 1$, como se muestra en las Figuras 5.20 y 5.21 para las mezclas etanol-agua y metanol-clorobenceno, respectivamente, a la composición $y_{1o}^V = 0.25$. La relación de fluxes disminuye conforme procede la condensación, sin embargo, en las mezclas de hidrocarburos se presenta un máximo a la entrada del condensador, situación no encontrada en las mezclas acuosas, como se muestra en la Figura 5.20 para la mezcla etanol-agua.

En la Tabla 5.2 se muestra la relación de fracciones molares del vapor y del líquido en equilibrio (punto de rocío) a la entrada del condensador para las cuatro mezclas binarias. Se puede observar que la relación y_{2o}^V/y_{1o}^V es la misma en las cuatro mezclas a una composición de vapor, pero la relación x_{2o}^L/x_{1o}^L del líquido en equilibrio con el vapor (rocío estático) resulta diferente para cada composición y mezcla.

En las Figuras 5.18 a 5.21 y en la Tabla 5.5 se observa que la relación de fluxes durante la condensación se encuentra entre los valores límites de x_{2o}^L/x_{1o}^L y y_{2o}^V/y_{1o}^V . La relación de fluxes en la condensación inicia en un valor intermedio de las dos anteriores relaciones, pero se puede establecer que la relación de fracciones molares del líquido representan más aproximadamente que tan rápido se transfiere inicialmente un componente respecto a otro. Conforme procede la condensación, la relación de fluxes tiende a disminuir, esto se debe a que el componente ligero aumenta su flux molar, y simultáneamente, el componente pesado disminuye su flux molar, como se presentó en la sección 5.2. Asimismo, se puede observar una variación en la relación de fluxes a lo largo del condensador muy significativa para una baja concentración del componente ligero y una volatilidad relativa grande $\alpha_{12} \gg 1$, como se muestra en la Figura 5.21 para la mezcla metanol-clorobenceno a $y_{1o}^V = 0.25$.

Tabla 5.2: Relación de fracción molar para el vapor de entrada y el líquido en equilibrio.

Relación de fracción molar					
Relación de fracción molar	Composición del vapor y_{1o}^V/y_{2o}^V	benceno(1)-tolueno(2)	etanol(1)-benceno(2)	etanol(1)-agua(2)	metanol(1)-clorobenceno(2)
x_{2o}^r/x_{1o}^r	0.25/0.75	6.987	12.736	31.362	276.777
	0.50/0.50	2.340	0.697	6.107	95.153
	0.75/0.25	0.831	0.120	0.435	29.487
y_{2o}^V/y_{1o}^V	0.25/0.75	3.0	3.0	3.0	3.0
	0.50/0.50	1.0	1.0	1.0	1.0
	0.75/0.25	0.333	0.333	0.333	0.333

A diferencia de las mezclas binarias, en una mezcla ternaria se pueden establecer tres diferentes relaciones de fluxes. Cada relación de fluxes relaciona a dos de los tres componentes presentes en la mezcla. En las Figuras 5.22, 5.23 y 5.24 se muestra el efecto de la composición inicial del vapor en la relación de fluxes molares para la mezcla benceno-tolueno-clorobenceno. En las gráficas se puede observar que el incremento de la concentración del componente presente en el numerador, pero con la fracción molar constante del componente en el denominador incrementa la relación de fluxes. Por otra parte, el incremento de la fracción molar del componente en el denominador, pero con la fracción molar constante del componente en el numerador disminuye la relación de fluxes. Resulta complejo generalizar el comportamiento de la relación de fluxes respecto a la variación de concentración de un componente en mezclas de tres componentes, como se estableció en mezclas binarias. Las variaciones en la concentración de un componente en el vapor no necesariamente aumenta o disminuye la concentración de los restantes componentes, en este punto radica la dificultad.

Por otra parte, la relación de fluxes en mezclas ternarias de hidrocarburos exhiben un máximo a la entrada del condensador, tal como se presenta en mezclas de hidrocarburos binarias, así como una continua disminución cuasi-lineal conforme procede la condensación. En la mezcla acuosa metanol-etanol-agua, la relación de fluxes de los componentes no pre-

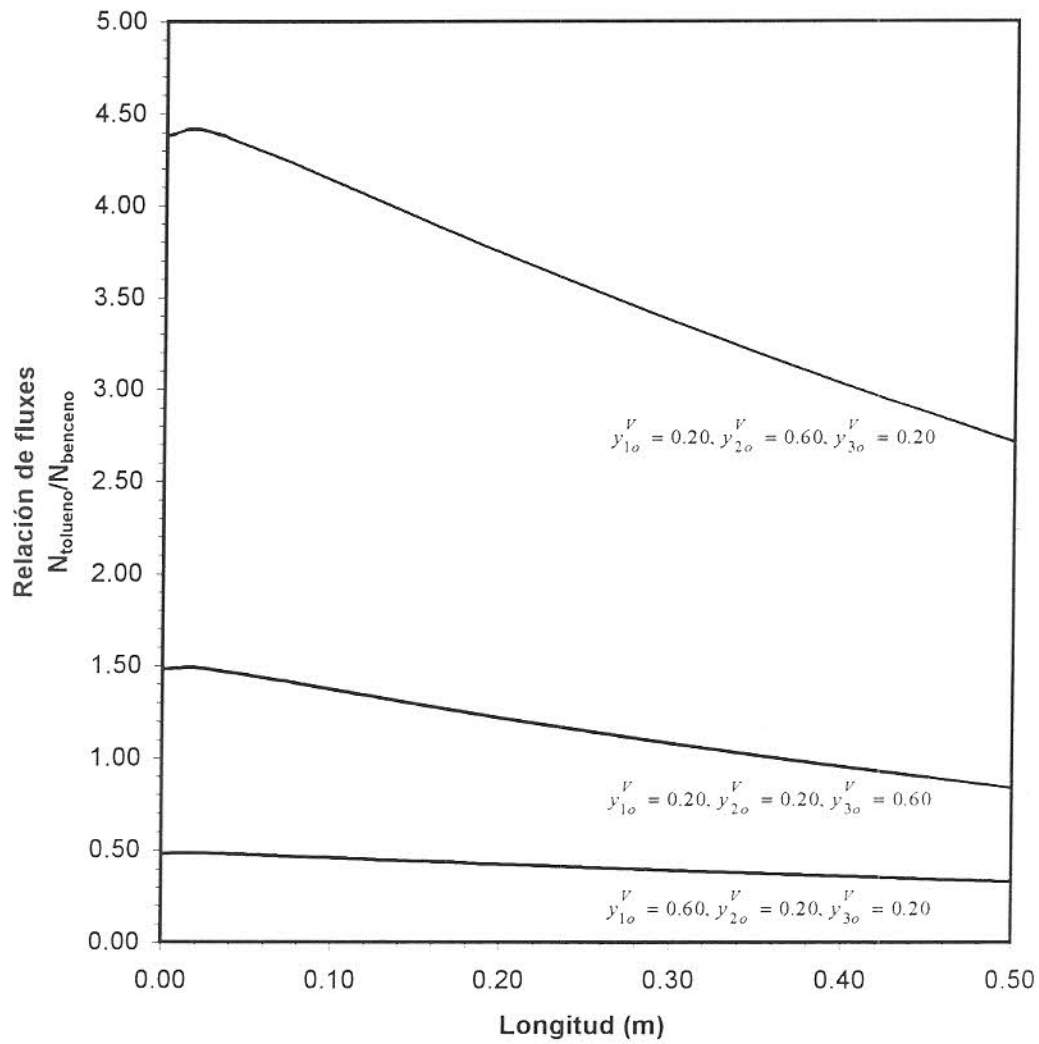


Figura 5.22: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes de tolueno a benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

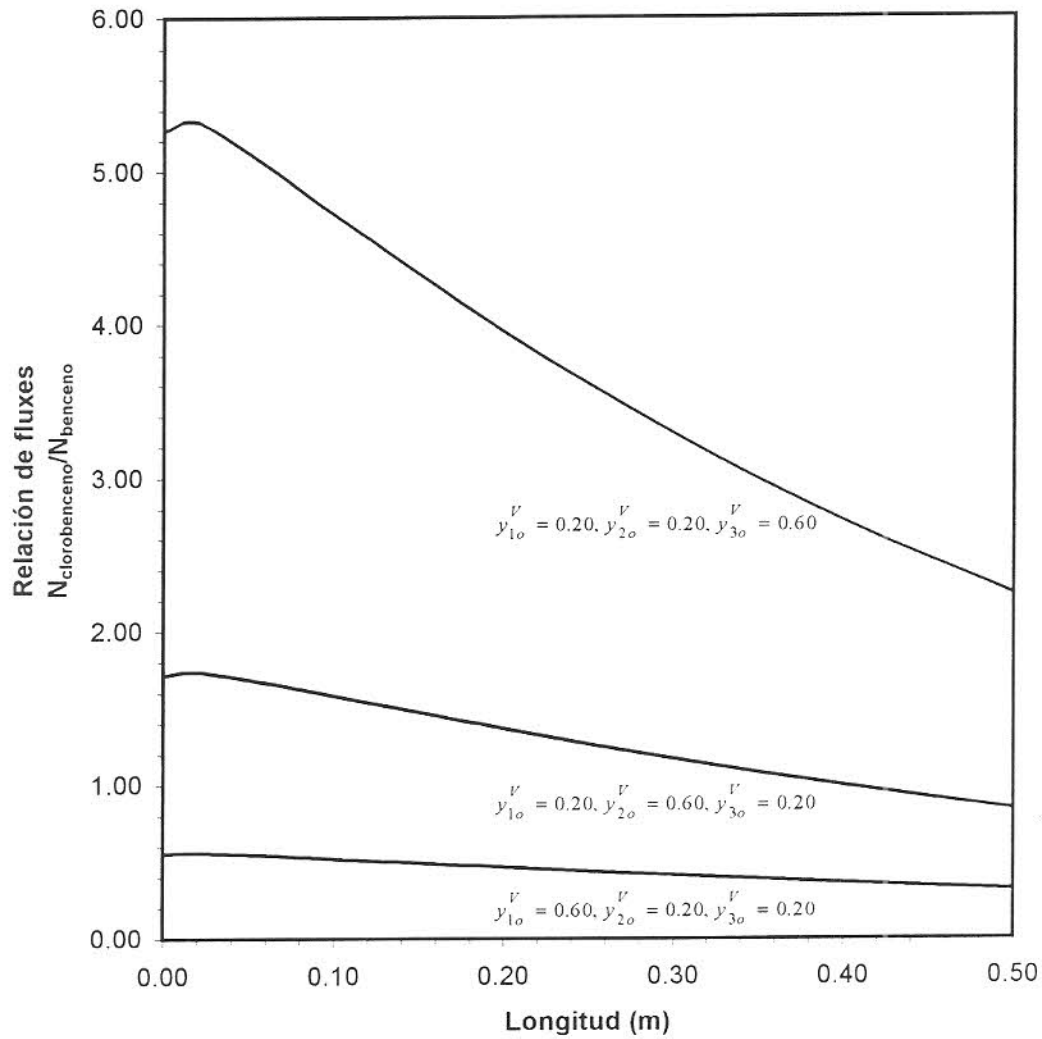


Figura 5.23: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flujes de clorobenceno a benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

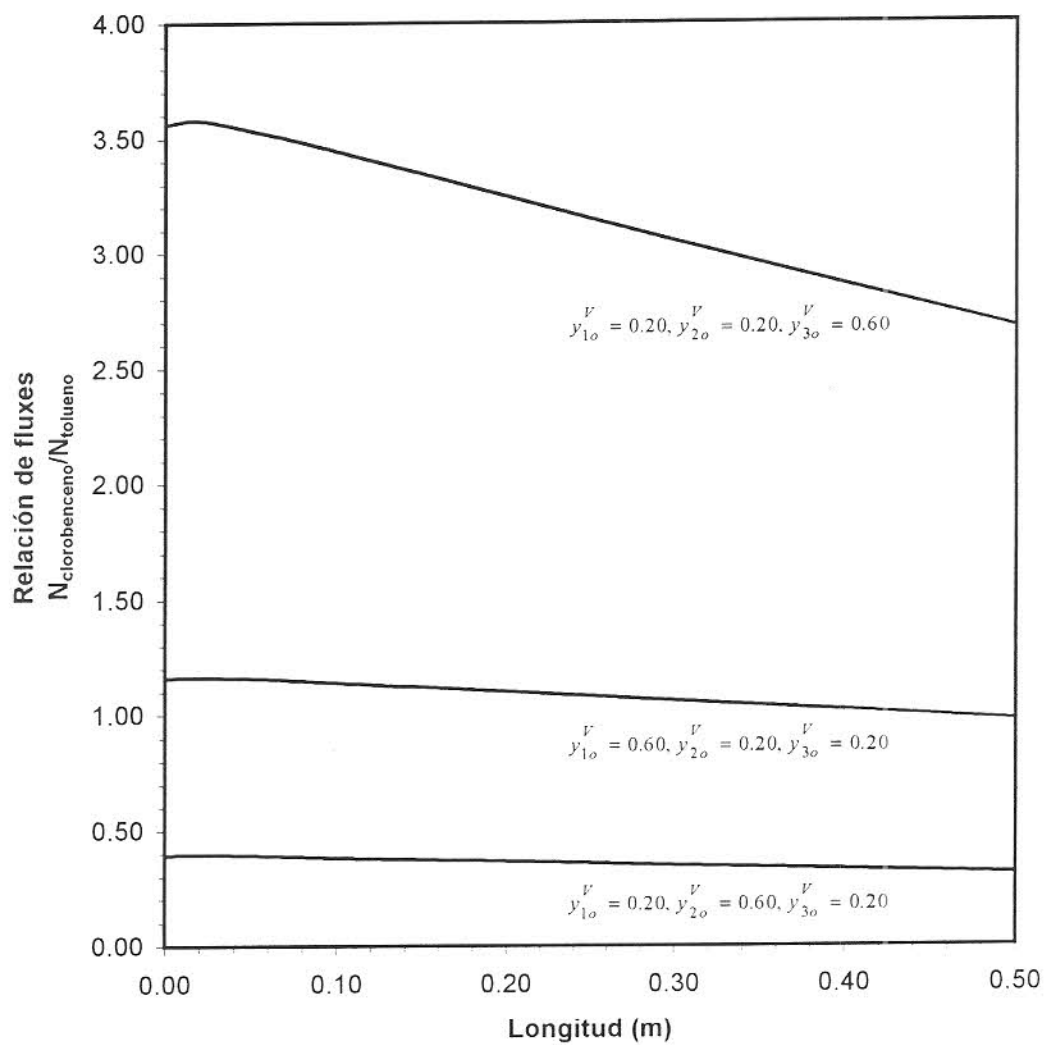


Figura 5.24: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flujos de clorobenceno a tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

senta un máximo a la entrada del condensador, como se muestra en la Figura 5.25 para la relación de fluxes del agua a metanol. Este mismo comportamiento se presentó en la relación de fluxes de las mezclas binarias acuosas.

5.4.2 Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de fluxes

A continuación se analiza el efecto de la condición térmica del vapor de entrada, la temperatura del agua de enfriamiento y el flujo de vapor en la relación de fluxes de la condensación de mezclas binarias y ternarias. En la Figura 5.26 se muestra la variación en la relación de fluxes para la mezcla benceno-tolueno con los parámetros anteriores, y en las Figuras 5.27, 5.28 y 5.29, para la mezcla benceno-tolueno-clorobenceno. Las relación de fluxes anterior se compara con la relación de fluxes calculada con los valores de la sección 5.1.

Se puede observar en las Figuras 5.26 a 5.29 que la relación de fluxes se incrementa bajo un aumento de la temperatura del vapor de entrada (30 K de sobrecalentamiento), un incremento en la temperatura del agua de enfriamiento a la salida (10 K más caliente) o un aumento en el flujo de vapor (0.006 Kg/s). El aumento de la relación de fluxes molares establece que aparte de una disminución en el valor de los fluxes, se presenta un incremento en la diferencia de rapidez (fluxes) con la cual se transfieren los componentes, desde el vapor hasta el líquido, durante la condensación. En estas gráficas se observa que el comportamiento de la relación de fluxes conforme procede la condensación no se modifica. Asimismo, se muestra que el mayor efecto en la relación de fluxes se obtiene ante el incremento de flujo de vapor. El incremento en la relación de fluxes resulta más moderado con el cambio de temperatura en el agua de enfriamiento, así como el sobrecalentamiento del vapor.

En esta sección se mostró brevemente el efecto de la composición inicial del vapor, temperatura del agua de enfriamiento, temperatura y flujo del vapor en la relación de fluxes, así como la influencia de la termodinámica de la fases. Desafortunadamente, la información existente en literatura no presenta gráficas ni deducciones generales acerca del comportamiento de la relación de fluxes. Por lo tanto, las deducciones efectuadas deben ser corroboradas mediante experimentación.

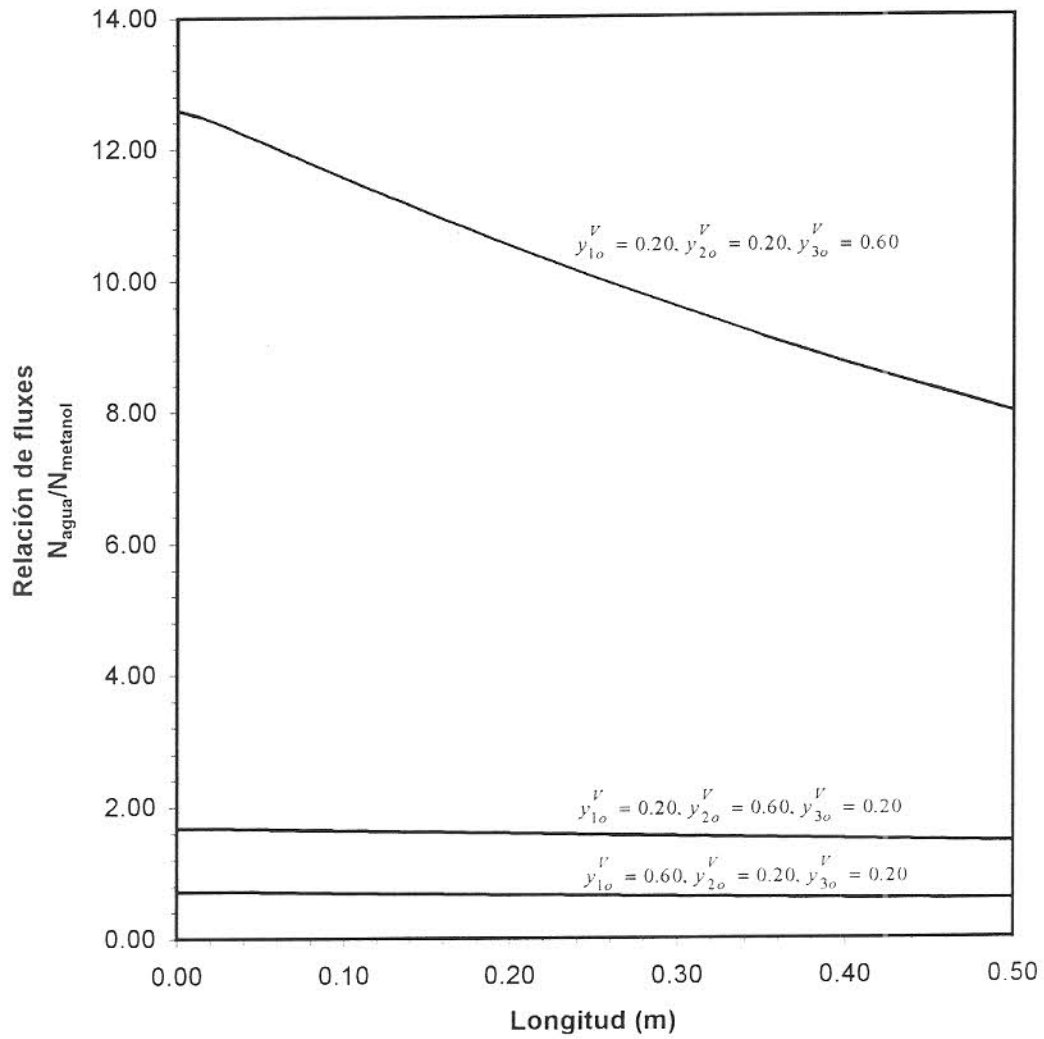


Figura 5.25: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de fluxes de agua a metanol para la mezcla metanol(1)-etanol(2)-agua(3).

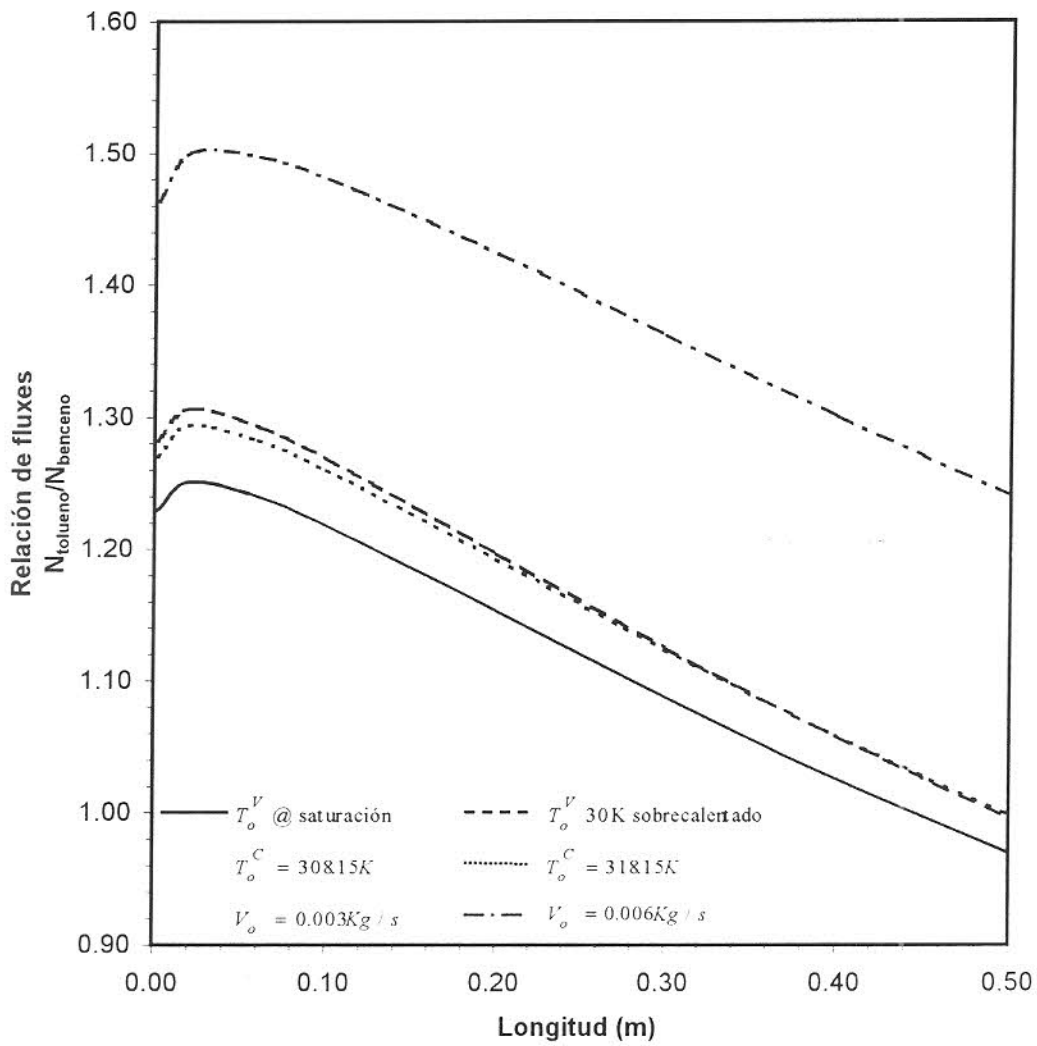


Figura 5.26: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en el la relación de fluxes a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.50$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

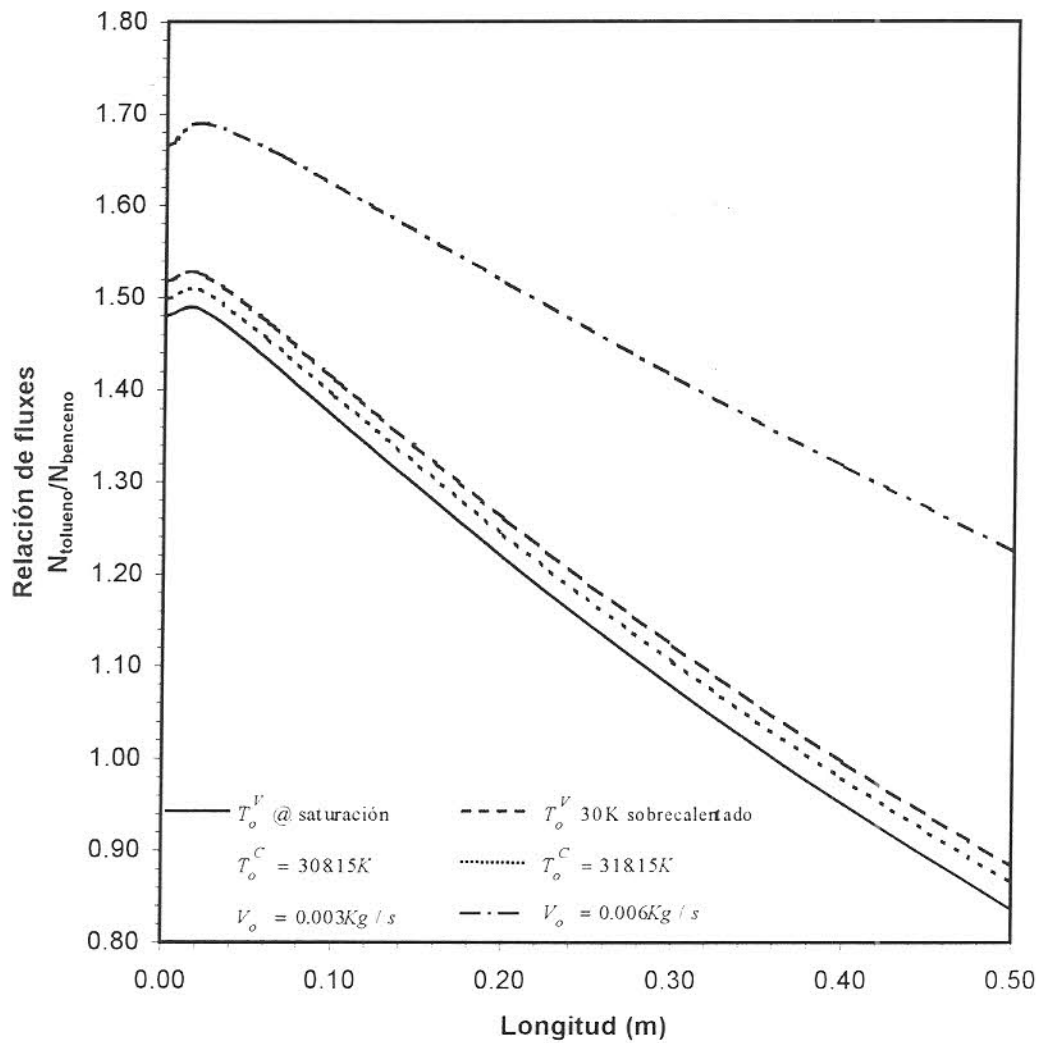


Figura 5.27: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flujos de tolueno a benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

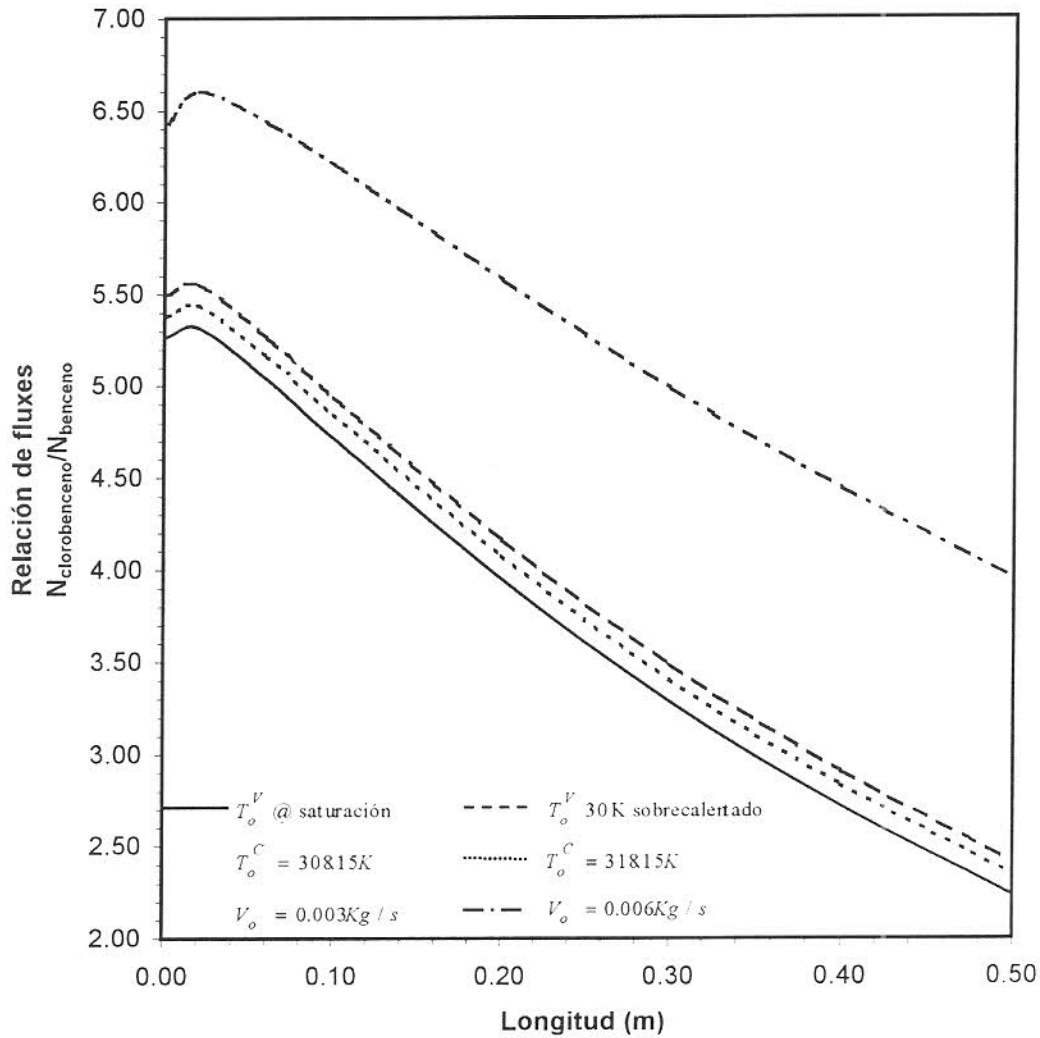


Figura 5.28: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flujos de clorobenceno a benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

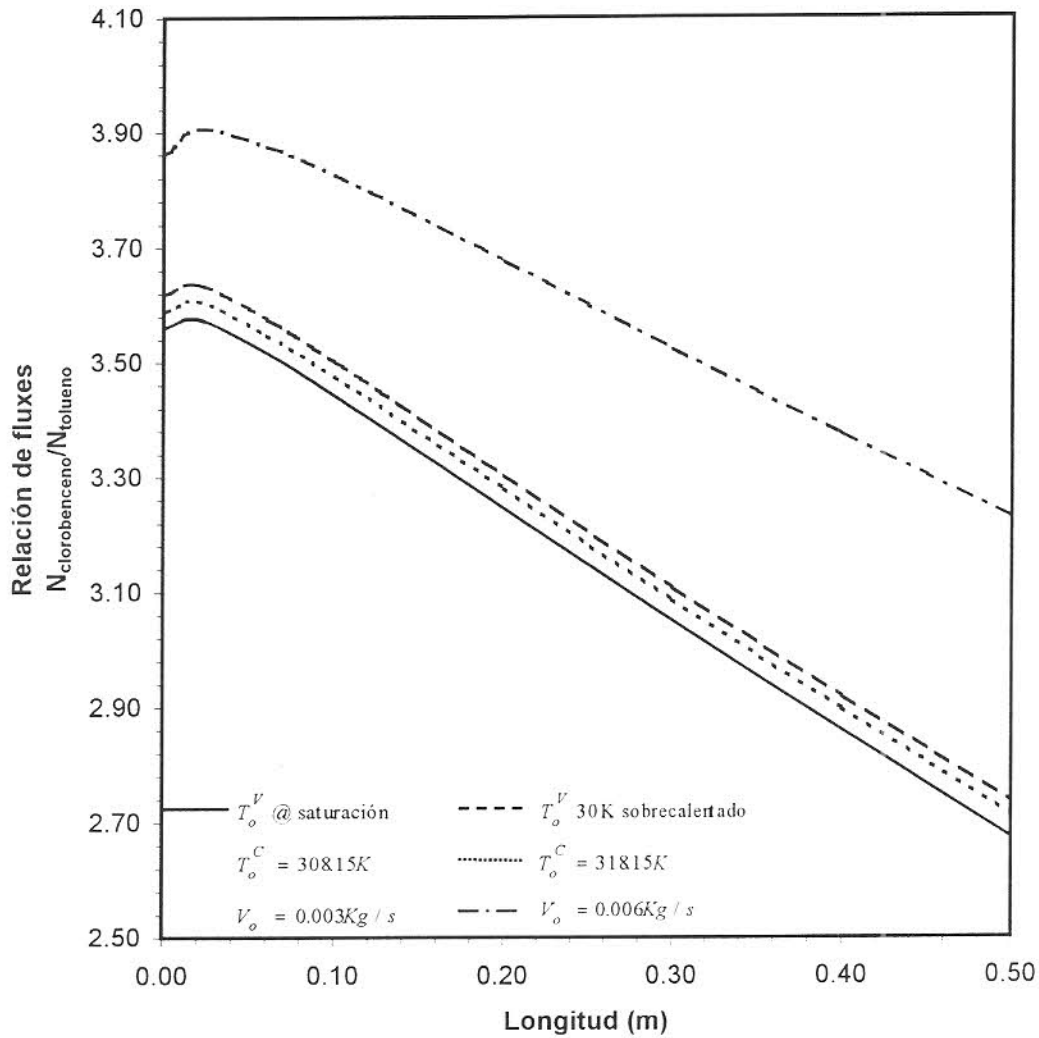


Figura 5.29: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flujes de clorobenceno a tolueno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

5.5 Relación de flux de difusión a flux convectivo

La evaporación de un componente no puede ocurrir desde la entrada del condensador, ya que esto implica la existencia de líquido de entrada en cantidad suficiente para permitir el proceso de agotamiento. Como la condensación es el proceso de formación de una película de líquido, se espera que inicialmente los componente condensen y en un punto posterior a la entrada alguno de los componentes evapore.

El flux molar de un componente es resultado de dos magnitudes: el flux molar de difusión y el flux molar de convección (Ecuación 3.7). Un valor negativo para el término convectivo $y_i^V N_t$ no puede suceder en el proceso de condensación por que $N_t > 0$ [7], pero el término de difusión J_i^V puede resultar positivo o negativo.

Un flux molar de difusión positivo indica una situación en donde la convección induce difusión en la misma dirección [26]. Por lo tanto, si evaluamos la relación de flux molar de difusión a flux molar convectivo $J_i^V / y_i^V N_t$, esta resulta positiva. Una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ positiva establece que la condensación ocurre tanto por convección como por difusión. Una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ negativa se presenta si el término de difusión J_i^V resulta negativo. Esto indica que la difusión ocurre en dirección contraria a la convección. Una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ negativa indica una condensación por convección y una evaporación por difusión, de forma que si el término convectivo supera al término de difusión $J_i^V / y_i^V N_t > -1$ el efecto neto es la condensación $N_t > 0$; pero si el termino por difusión supera al termino convectivo $J_i^V / y_i^V N_t < -1$ el efecto neto es la evaporación $N_t < 0$.

Un componente que presenta una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ negativa conforme procede la condensación puede evaporar en algún momento. La evaporación puede ocurrir si su relación $J_i^V / y_i^V N_t$ llega a ser menor al límite $J_i^V / y_i^V N_t = -1$, en algún momento.

5.5.1 Efecto de la composición inicial del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo

A continuación se analiza el efecto de la composición del vapor de entrada en la relación de flux de difusión a flux convectivo $J_i^V / y_i^V N_t$ para una mezcla. En las Figuras 5.30 y 5.31 se muestran el efecto de la concentración del benceno en la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ para cada componente de la mezcla benceno-tolueno bajo las condiciones de condensación de la sección 5.1. Se han seleccionado tres composiciones para el vapor a condensar: $y_{1o}^V = 0.25$, $y_{1o}^V = 0.50$ y $y_{1o}^V = 0.75$. Se puede observar en la Figura 5.30 que el benceno (componente ligero) puede llegar a evaporar dado que la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ es negativa, en tanto el tolueno (componente pesado) siempre condensa ya que $J_i^V / y_i^V N_t$ es positiva, como se muestra en la Figura 5.31. En general, el componente ligero siempre presentó una relación negativa, debiéndose a que su diferencia de composición del vapor ($y_i^V - y_i^f$) resulta negativa, esto es, la composición molar del vapor en la interfase siempre resulta mayor que la composición molar de la corriente de vapor.

La temperatura en la interfase resulta menor que la temperatura de la corriente de vapor a condensar en todas las mezclas, lo cual indica que el perfil de temperatura radial disminuye desde el vapor hacia el agua de enfriamiento. Este comportamiento coincide con el perfil de temperatura mostrado por Taylor et al. [4] para la condensación parcial de mezclas de vapores, y se explica desde la transferencia de calor: la disminución de temperatura ocurre en el sentido de la substración de energía. Se ha demostrado [28, 29] que para una mezcla de vapor saturada, una mayor concentración del componente ligero en la fase vapor esta asociada con una temperatura de saturación (punto de rocío) menor, siempre que no exista azeotropía. Entonces, es justificable que la composición del vapor en la interfase sea mayor a la composición de la corriente de vapor porque la temperatura de la interfase es menor a la temperatura del vapor [17] y a que el vapor y el líquido en la interfase se suponen en equilibrio. De hecho, la composición del líquido condensado es la composición del líquido en equilibrio con el vapor.

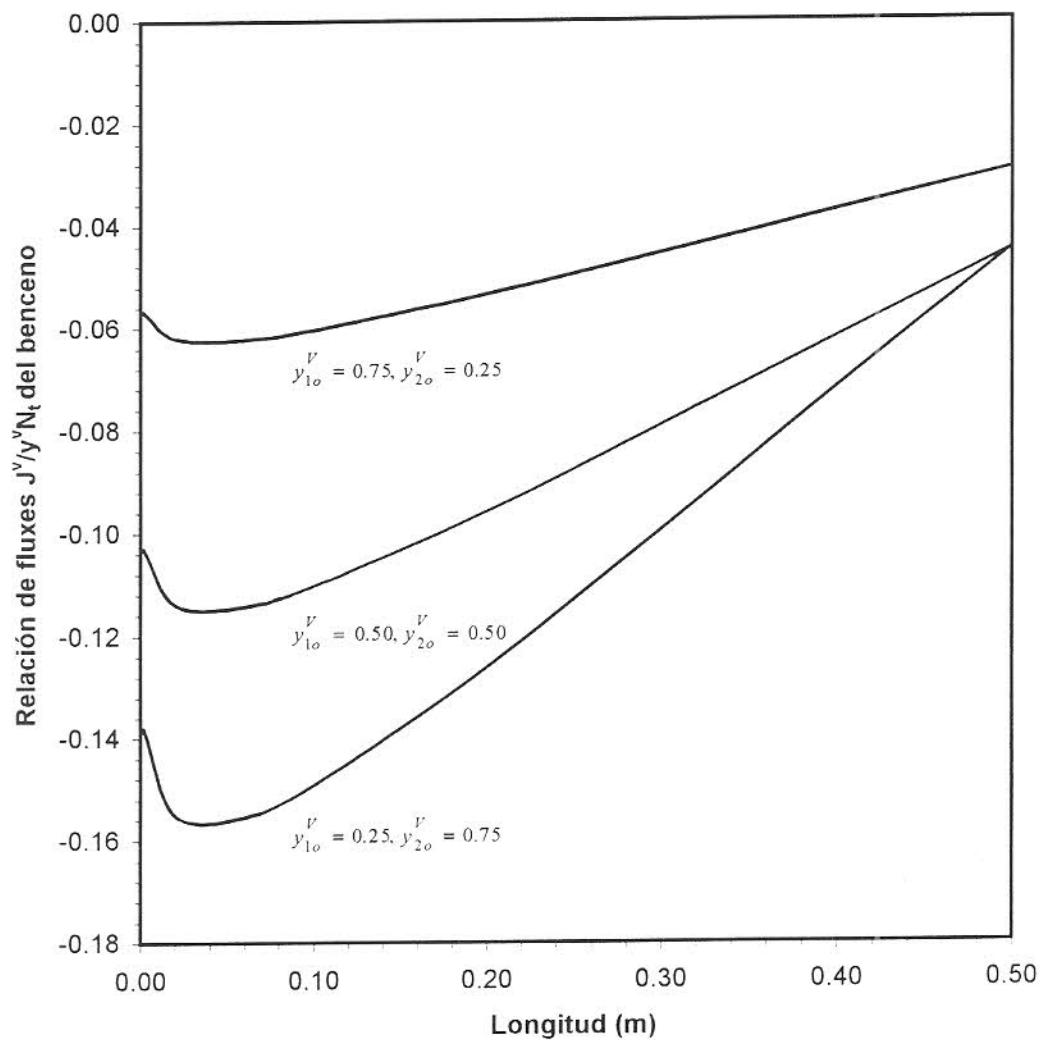


Figura 5.30: Efecto de la composición inicial del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

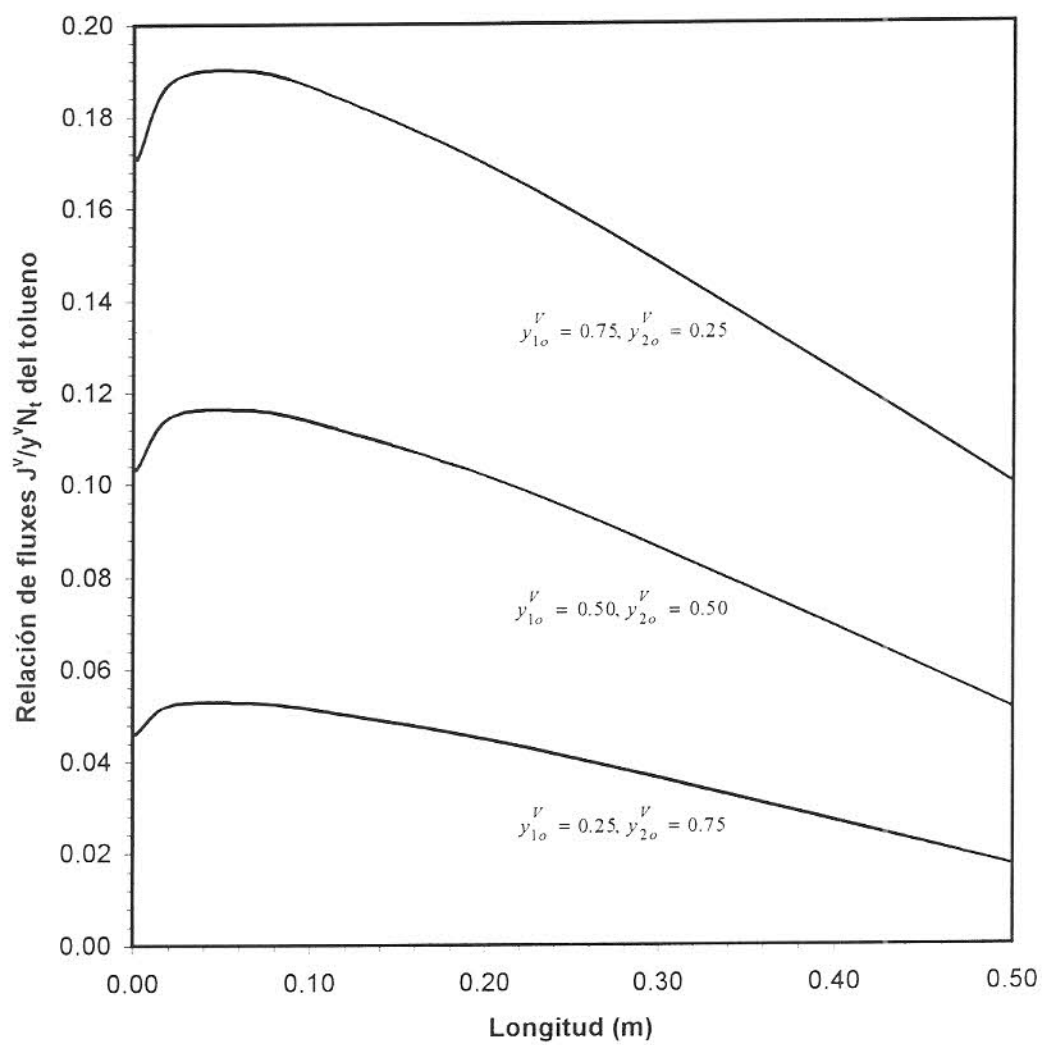


Figura 5.31: Efecto de la composición inicial del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

En la Figuras 5.30 se observa un efecto significativo de la composición inicial del vapor en la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del benceno. Una baja concentración del benceno conduce a una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ más negativa, esto es, se propicia una mayor transferencia de masa por difusión en dirección opuesta a la convección. En valor absoluto, la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del benceno se incrementa con la reducción de concentración del benceno, debiéndose a la combinación de un incremento en el flux de difusión J_i^V y una reducción en el flux convectivo $y_i^V N_t$. El flux de difusión aumenta principalmente por un incremento en el coeficiente de transferencia de masa de la mezcla benceno-tolueno, debiéndose a cambios en el valor de las propiedades por efecto de la composición y temperatura del vapor. El flux convectivo se reduce porque la composición del benceno en el vapor disminuye.

Por otra parte, se puede observar que el efecto convectivo $y_i^V N_t$ es más significativo que el efecto difusivo, esto explica porque el aumento de concentración de benceno incrementa apreciablemente su flux molar (sección 5.2), ya que la composición del vapor es proporcional al flux convectivo.

Si la evaporación del benceno ocurre, esta se presentaría en la región cercana a la entrada del condensador. En dicha región, la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ presenta un mínimo que favorecería una corta evaporación si llegara a ser menor a -1, como se muestra en la Figura 5.30. Este resultado coincide con lo establecido por Taylor et al. [4], que la evaporación de un componente puede suceder en un punto cercano a la entrada del condensador.

El mínimo en la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ se presenta a la entrada del condensador porque en este punto se inicia la formación de la película de líquido condensado. Cuando se inicia el proceso de condensación, se combina una resistencia de transferencia de calor por parte de la película de condensado casi nula (película muy delgada, casi no existe) y un efecto de difusión muy significativo. Al iniciarse la formación de la película de líquido condensado, este último tiene una composición lo más cercana a la composición del líquido en equilibrio con el vapor de entrada, como indicaron Colburn y Drew [2]. Esto origina una transferencia de masa por difusión más intensa que en cualquier otro punto del condensador.

En la Figura 5.30 se observa que la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del benceno disminuye a lo

largo del condensador después del mínimo. Como la disminución del contenido de vapor y temperatura del vapor ocurre conforme procede la condensación, los coeficientes de transferencia de masa y calor disminuyen [16]. Esto origina que el flux de difusión disminuya, pero la contribución del flux convectivo continua siendo significativa en el flux molar del benceno. Esto explica por que el flux molar del benceno (componente ligero) presenta un gradual incremento en el flux molar al final del condensador (sección 5.2).

En las Figuras 5.32, se compara la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del componente ligero para las mezclas benceno-tolueno, etanol-benceno, etanol-agua y metanol-clorobenceno a la composición del vapor $y_{10}^V = 0.25$. Se puede observar que la combinación de bajo peso molecular y una volatilidad relativa grande causa una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ negativa y muy cercana a -1, como se muestra para el metanol en la mezcla metanol-clorobenceno. Las curvas de la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ para el etanol muestran claramente que la termodinámica de las fases efectúa una apreciable influencia. Se observa que aún cuando el benceno es de naturaleza diferente, la presencia del agua propicia una volatilidad relativa más grande que el benceno (ver gráficas de volatilidad relativa en el apéndice B), y se refleja principalmente en una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ más negativa. A diferencia de las anteriores mezclas, la mezcla benceno-tolueno, cuyos componentes son de naturaleza similar, presenta una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ mayor que -1 y muy cercana a cero. Esta mezcla presenta una volatilidad relativa moderada para el benceno.

En la Figura 5.32 se observa que la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del etanol en presencia de agua muestra prácticamente una continua reducción en el flux por difusión conforme procede la condensación. A diferencia de la mezcla etanol-benceno, donde la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ presenta un mínimo a la entrada del condensador. Este comportamiento de la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ para el componente ligero en las mezclas acuosas reduce la probabilidad de que el componente evapore en algún punto del condensador a otras condiciones, aun cuando la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ resulte muy cercana a -1. Por otra parte, en las mezclas no acuosas, el componente ligero presenta un mínimo en la región de entrada del condensador, como se muestra en las mezclas benceno-tolueno, benceno-etanol y metanol-clorobenceno. Sin em-

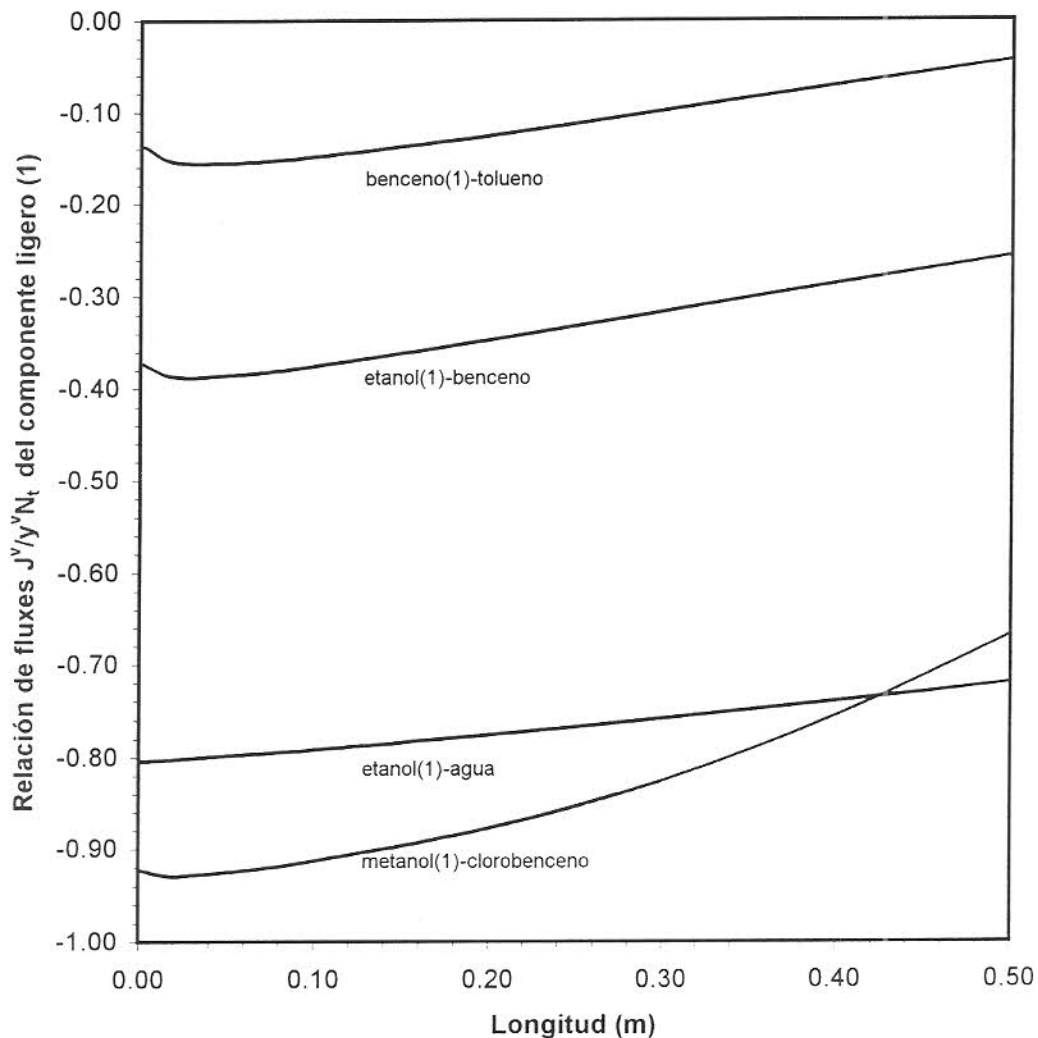


Figura 5.32: Efecto del EVL y componentes de la mezcla en la relación de flux difus vo a flux convectivo del componente ligero a la composición inicial de vapor $y_{1o}^v = 0.25$ para las mezclas benceno(1)-tolueno(2), etanol(1)-benceno(2), etanol(1)-agua(2) y metanol(1)-clorobenceno(2). El componente ligero es el Componente 1.

bargo, la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ resulta superior a -1. Esta situación indica que si este comportamiento de $J_i^V / y_i^V N_t$ permanece a otras condiciones, se puede presentar la evaporación del componente ligero.

En base a los resultados anteriores, se establece que junto con una baja concentración del componente ligero, se debe combinar un bajo peso molecular y una termodinámica de las fases (equilibrio vapor-liquido) que origine una volatilidad relativa grande para que exista la posibilidad de que el componente ligero evapore. Además, se descartan las mezclas acuosas por no presentar un mínimo a la entrada del condensador.

Las Figuras 5.33, 5.34 y 5.35 muestran la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ para cada componente en la mezclas benceno-tolueno-clorobenceno. Estas gráficas muestran que sólo el benceno (componente más ligero) para las tres composiciones y el tolueno (componente intermedio) cuando presenta una baja concentración, como se muestra para la composición inicial $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$, presentan una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ negativa. El clorobenceno, como componente pesado, presenta una relación $J_i^V / y_i^V N_t$ positiva. Estos resultados muestran que las deducciones obtenidas con las mezclas binarias se pueden aplicar para las mezclas ternarias.

En la Figura 5.34, la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del tolueno muestra que generalmente la termodinámica de la fases determina el sentido de la transferencia por difusión, ya que a la composición $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ la composición del tolueno en el vapor es menor que su composición en el líquido en equilibrio, contrario a lo que sucede en las dos restantes composiciones. Sin embargo, los efectos de interacción pueden cambiar el sentido de transferencia por difusión conforme procede la condensación, como se muestra en el tolueno para la anterior composición. Se encontró en las restantes mezclas ternarias que los efectos de interacción sólo cambian el sentido de la transferencia de difusión en mezclas que presentan relaciones $J_i^V / y_i^V N_t$ muy cercanas a cero, característico de mezclas con componentes de naturaleza similar y volatilidad relativa moderada.

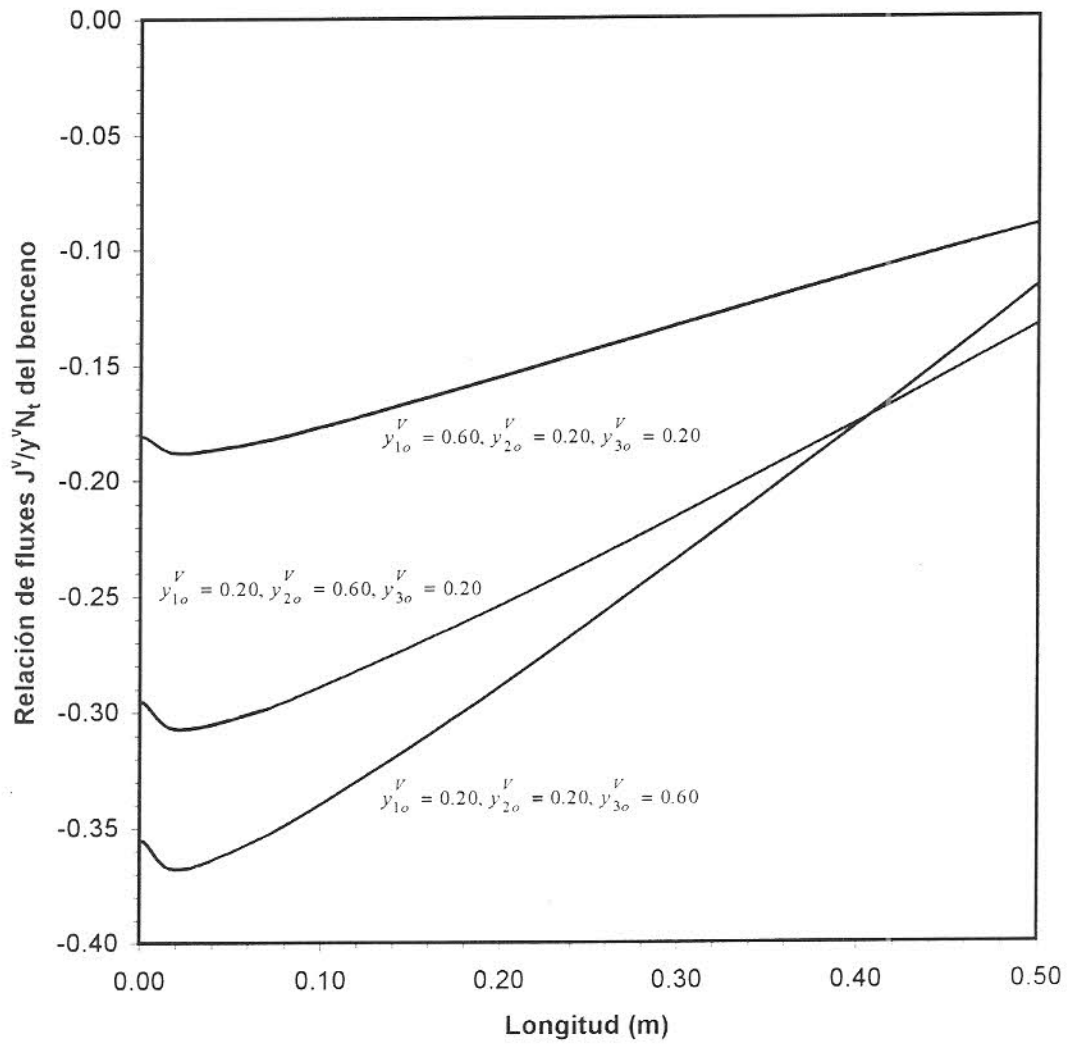


Figura 5.33: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flux difusivo a flux convectivo del benceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

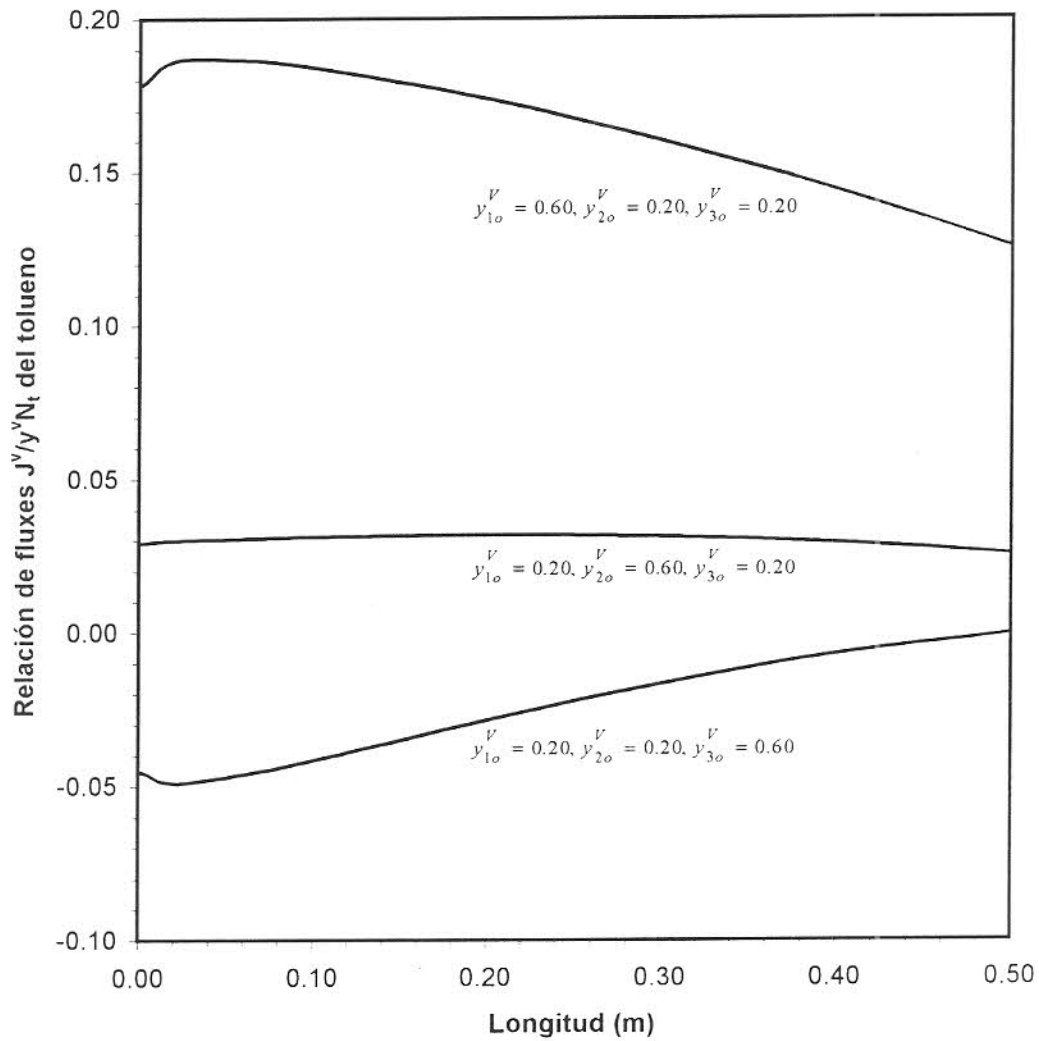


Figura 5.34: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flux difusivo a flux convectivo del tolueno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

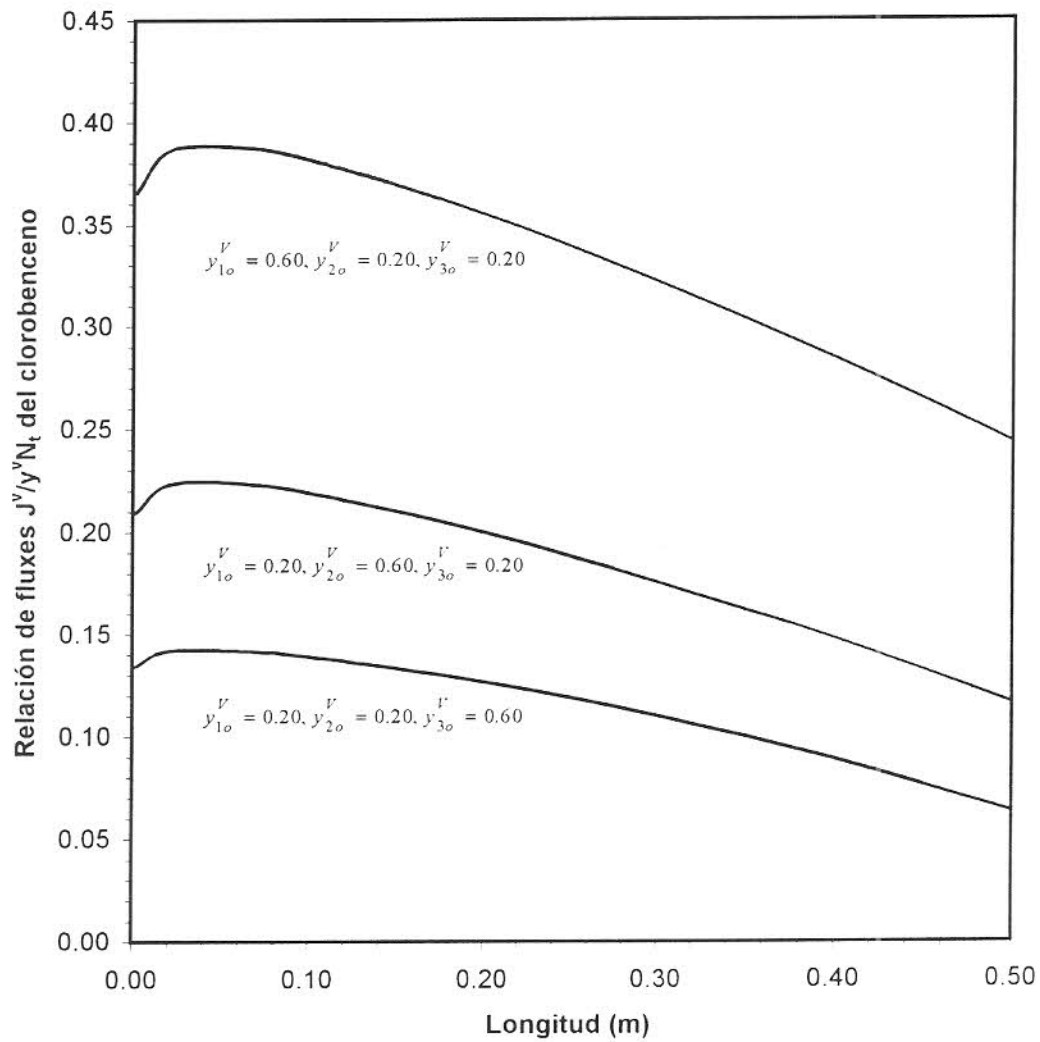


Figura 5.35: Efecto de la composición inicial del vapor en relación de flux difusivo a flux convectivo del clorobenceno para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

Los resultados de esta sección indican que la transferencia por convección predominó sobre la difusión en todas las mezclas y para todas las composiciones, ya que $|J_i^V / y_i^V N_t| < 1$ en todos los componentes. Esta situación es concordante con el cálculo de fluxes molares positivos $N_i > 0$, tal como se mostró en la sección 5.2.

5.5.2 Efecto de la temperatura del vapor, flujo de vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación flux de difusión a flux convectivo

A continuación se analiza el efecto de la condición térmica del vapor de entrada, el flujo de vapor y la temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flux de difusión a flux convectivo $J_i^V / y_i^V N_t$. En la Figuras 5.36 se muestra la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del metanol en las condensación de la mezcla metanol-clorobenceno, respectivamente, a la composición $y_{10}^V = 0.50$. Asimismo, en la Figura 5.37 se muestra la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ para el benceno en la mezcla benceno-tolueno-clorobenceno. Se compara la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ calculada con cada parámetro anterior respecto a la calculada con los valores de la sección 5.1.

En estas gráficas se muestran que el incremento de temperatura en el agua de enfriamiento o el sobrecalentamiento del vapor tiene un efecto pequeño, pero el incremento de flujo de vapor modifica significativamente el valor de la relación $J_i^V / y_i^V N_t$. El comportamiento de $J_i^V / y_i^V N_t$ a lo largo del condensador no se modifica prácticamente, la curva sólo se desplaza como se muestra en las Figuras 5.36 y 5.37.

Los resultados indican que variaciones con incremento del flujo de vapor, temperatura del vapor y temperatura del agua hacen más negativa la relación $J_i^V / y_i^V N_t$. Sin embargo, las limitaciones de temperatura en el agua de enfriamiento (por consideraciones de operación el agua de enfriamiento no se utiliza a una temperatura mayor a 40°C) y en el vapor (el modelo no puede calcular las propiedades de un componentes a la temperatura crítica) sólo permiten explorar el efecto de incremento de flujo de vapor.

Un incremento de flujo de vapor hace más negativa la relación $J_i^V / y_i^V N_t$ del componente ligero, sin embargo, la relación tiende a un comportamiento lineal y a un valor límite

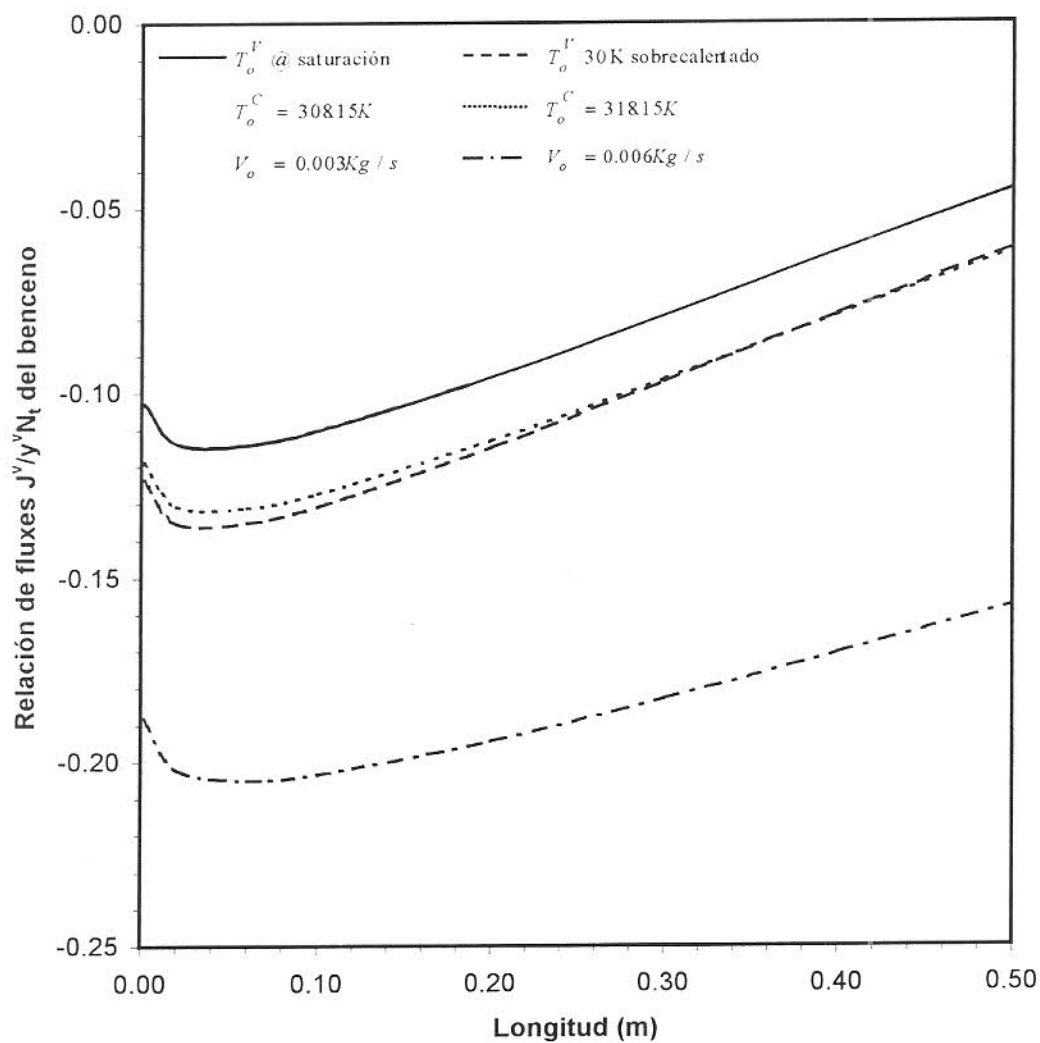


Figura 5.36: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno a la composición inicial de vapor $y_{1o}^V = 0.25$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2).

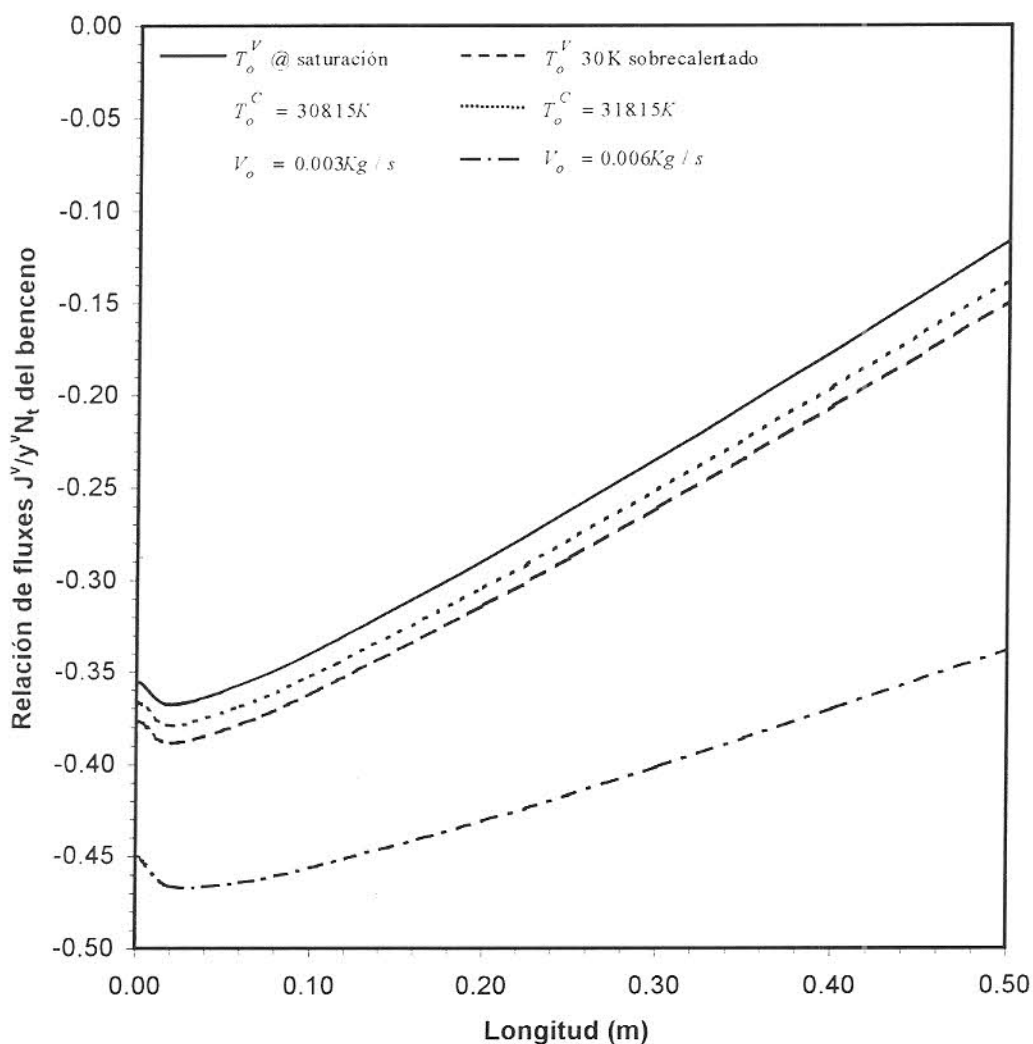


Figura 5.37: Efecto de la temperatura del vapor, flujo del vapor y temperatura del agua de enfriamiento en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

mayor que -1. Esto se muestra en la Figuras 5.38 y 5.39 para el metanol y el benceno en las mezclas metanol-clorobenceno y benceno-tolueno-clorobenceno, respectivamente, para flujo de vapor de 0.003 Kg/s, 0.012 Kg/s, 0.024 Kg/s y 0.048 Kg/s. La relación $J_i^V / y_i^V N_i$ no resulta menor a -1, lo cual indica que el componente ligero no se evapora, siempre condensa.

El incremento de flujo de vapor reduce el flux molar de cada componente N_i de forma significativa, y en consecuencia, el flux molar total tiende a cero $N_i \rightarrow 0$. Con una tasa de condensación pequeña ($N_i \rightarrow 0$), la dirección de transferencia del componente ligero no se modificó. Esto contradice la deducción establecida por Colburn y Drew [2] para la mezcla metanol-agua, que a una tasa de condensación finita y pequeña, el metanol puede llegar a evaporar en algún punto del condensador. Aún cuando no se presenta una gráfica con la relación $J_i^V / y_i^V N_i$ del metanol en la mezcla metanol-agua, se ha establecido anteriormente la poca factibilidad de que el componente ligero evapore en una mezcla acuosa. Bajo las condiciones de condensación consideradas en este trabajo, el metanol no evaporó en algún punto del condensador.

5.6 Eficiencia en el proceso de condensación

En el tratamiento precedente del proceso de condensación se ha expuesto que el equilibrio de fases se asume en la interfase vapor-líquido. Por tanto, las variaciones de composición en la corriente de vapor son diferentes de las que se obtendrían a partir de las condiciones de equilibrio. Una forma de caracterizar este hecho es mediante una eficiencia \mathcal{E} del proceso de condensación.

Esta eficiencia \mathcal{E} puede definirse tomando como base la fase vapor y, para un componente dado, es igual a la variación real de composición de la fase vapor dividida por la variación prevista por consideraciones de equilibrio. Esta definición se expresa matemáticamente como

$$\mathcal{E} = \frac{y_{is}^V - y_{io}^V}{y_{is}^* - y_{io}^V} * 100$$

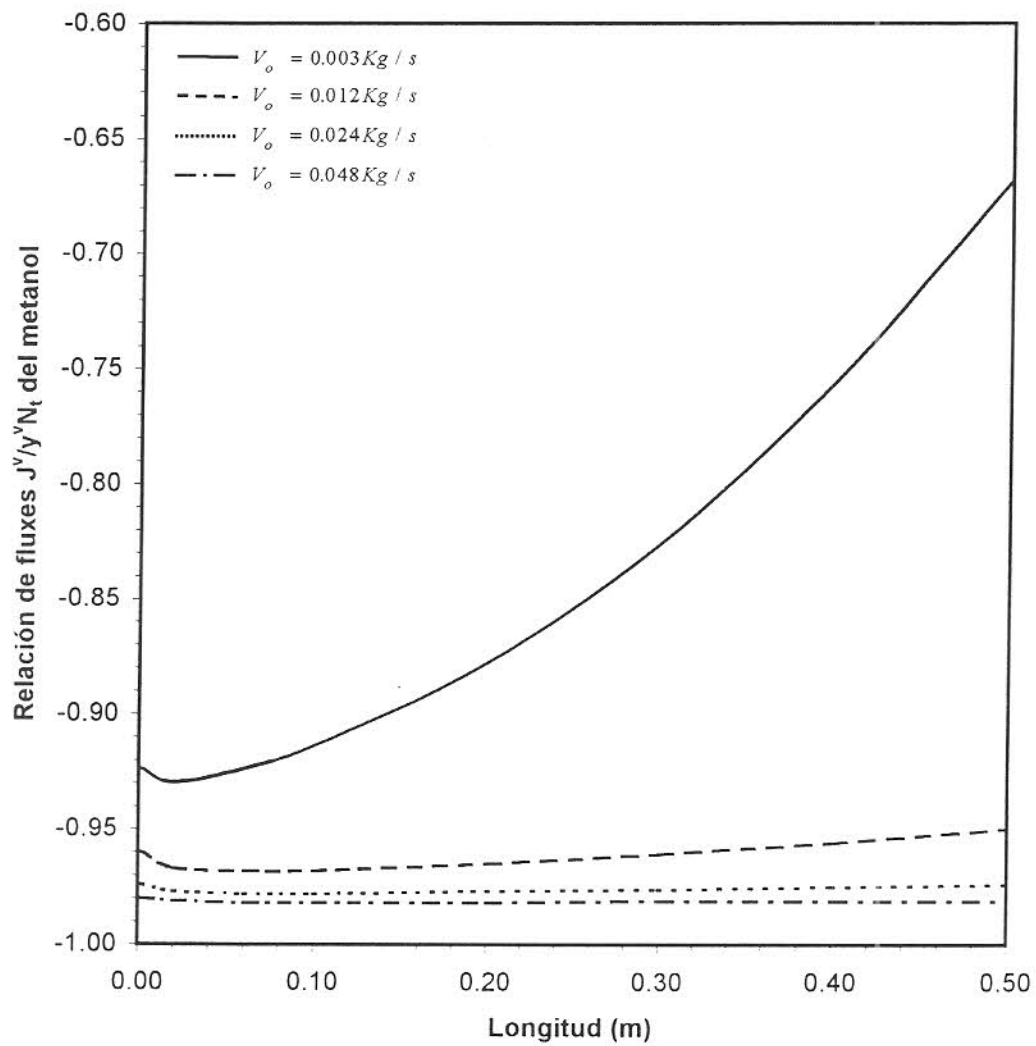


Figura 5.38: Efecto del flujo del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo del metanol a la composición inicial de vapor $y_{10}^V = 0.25$ para la mezcla metanol(1)-clorobenceno(2).

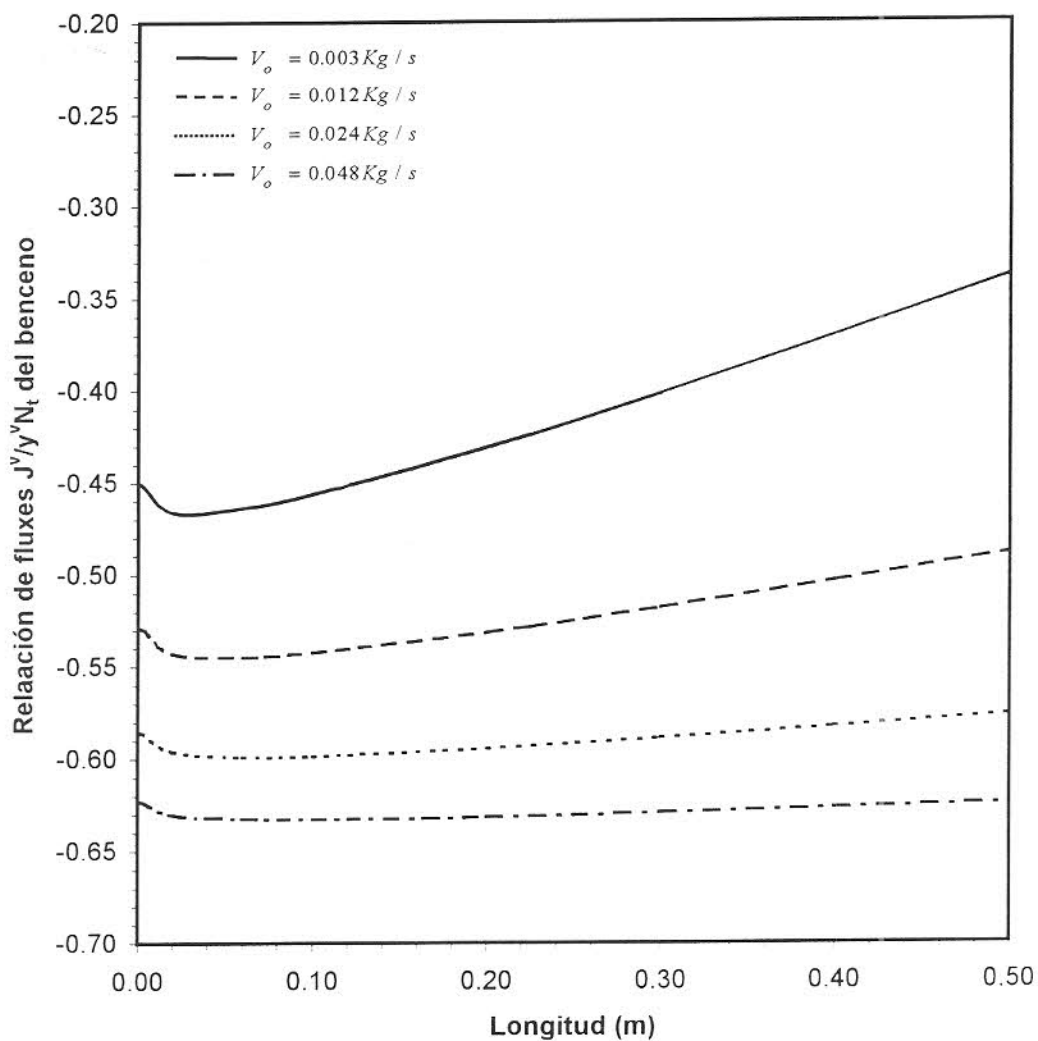


Figura 5.39: Efecto del flujo del vapor en la relación de flux de difusión a flux convectivo del benceno a la composición inicial del vapor $y_{1o}^V = 0.20$, $y_{2o}^V = 0.20$ y $y_{3o}^V = 0.60$ para la mezcla benceno(1)-tolueno(2)-clorobenceno(3).

En donde y_{is}^V representa la composición del componente i en el vapor que emerge del condensador e y_{is}^* la hipotética composición del componente i en el vapor en equilibrio con el líquido que sale del condensador. En el caso de mezclas binarias, la eficiencia del componente dos es igual a la eficiencia del componente uno, esta igualdad no se aplica a mezclas ternarias. En la Tabla 5.3 se muestra el efecto de la composición en la eficiencia de la condensación de las mezclas benceno-tolueno, benceno-etanol, etanol-agua y metanol-clorobenceno a las condiciones de la sección 5.1. Se puede observar que las mezclas binarias con presencia de agua o un alcohol presentan eficiencias mayores que las mezclas de solamente hidrocarburos. Los cambios de composición en el vapor de entrada resultan poco significativos en la eficiencia, sin embargo, estos cambios pueden aumentar o disminuir la eficiencia

En la Tabla 5.4 se muestra el efecto de la composición inicial del vapor de las eficiencias para cada componente en la condensación de las mezclas benceno-tolueno-clorobenceno y metanol-etanol-agua a las condiciones de la sección 5.1. Se puede observar que los componentes presentan eficiencias similares, excepto el componente intermedio que presenta mayor variación en su eficiencia con la composición. Sin embargo, estas eficiencias resultan aproximadas a las obtenidas en las mezclas binarias.

Tabla 5.3: Eficiencia en el proceso de condensación de mezclas binarias.

Eficiencia				
Composición y_{1o}^V/y_{2o}^V	benceno-tolueno	etanol-benceno	etanol-agua	metanol-clorobenceno
0.25/0.75	14.59	26.13	26.71	26.75
0.50/0.50	16.94	26.61	34.31	29.50
0.75/0.25	18.68	23.62	36.84	26.83

Tabla 5.4: Eficiencia en el proceso de condensación de mezclas ternarias.

Eficiencia						
Composición $y_{1o}^V/y_{2o}^V/y_{3o}^V$	benceno	tolueno	clorobenceno	metanol	etanol	agua
0.20/0.20/0.60	33.56	50.94	34.36	32.99	30.15	31.43
0.20/0.60/0.20	33.27	30.61	34.95	30.93	10.60	37.26
0.60/0.20/0.20	34.26	33.57	34.64	34.71	16.86	38.44

Capítulo 6

Conclusiones y Recomendaciones

Conclusiones

Se ha estudiado la condensación parcial de mezclas de vapor mediante el planteamiento de un modelo teórico y su solución analítica ha permitido el cálculo del flux molar de cada componente. Se analizaron veintiún mezclas binarias y ocho mezclas ternarias las cuales presentan un variado comportamiento en el equilibrio vapor-líquido, incluyendo la presencia de azeotropía.

A partir de la determinación de una combinación de valores de flujo y temperatura del vapor, flujo y temperatura del agua de enfriamiento, geometría y presión del condensador bajo los cuales el modelo de condensación resulta válido, fue posible evaluar el efecto de la composición molar inicial del vapor en el flux molar. Se encontró que a una alta concentración del componente en la mezcla, su rapidez de condensación (flux molar) es mayor que a una concentración baja. Independientemente de los componentes presentes y de la termodinámica de las fases, el flux molar de cada componente presentó este comportamiento. De acuerdo a que el flux molar de cada componente resultó positivo a las tres diferentes composiciones molares del vapor, se concluye que la composición no modifica la dirección de transferencia de los componentes, estos siempre condensan.

Con la composición molar inicial constante del vapor, el flujo de vapor, la temperatura del vapor y temperatura del agua de enfriamiento fueron variados independientemente

uno del otro. Aún cuando se disminuyó la rapidez de condensación, el sentido de transferencia de los componentes no se modificó, siempre condensaron.

En base al análisis de la relación de flux de difusión a flux convectivo se encontró que el componente ligero era el único que podría evaporar, ya que el flux de difusión era negativo y bajo ciertas condiciones de condensación podría ser mayor al flux convectivo, de forma que el flux molar del componente resultaría negativo. Sin embargo, esto no llegó a suceder a las condiciones de condensación consideradas en este trabajo. El análisis de la relación de flux de difusión a flux convectivo con el incremento del flujo de vapor reveló que el flux molar del componente ligero tiende a un comportamiento cuasi-lineal y a un valor absoluto límite de uno, cuando el porcentaje de vapor condensado es bajo. Esto descarta la posibilidad que el componente ligero llegue a evaporar y resulta opuesto a la deducción de Colburn y Drew [2], pero también establece la posibilidad que el modelo de película para la transferencia simultánea de masa y calor, no prediga adecuadamente la dirección de transferencia de los componentes cuando el flux molar total tiende a cero.

El flux molar del componente pesado siempre disminuyó durante la condensación. A diferencia de éste, el flux molar del componente ligero presentó un mínimo en un punto del condensador y un gradual incremento conforme procedía la condensación, el cual resulta opuesto al encontrado en una mezcla gas-vapor, en donde el flux molar del componente ligero presenta un máximo [19].

La relación de fluxes resultó positiva para todos los casos, a excepción de la entrada del condensador, presentó un comportamiento cuasi-lineal a lo largo del condensador. Se determinó que la relación de composiciones del líquido en equilibrio con el vapor determina en forma más aproximada la relación de fluxes inicial, pero conforme procede la condensación la relación de fluxes tiende a la relación de composición inicial del vapor.

El modelo de condensación predice una transferencia de difusión muy intensa a la entrada del condensador, el cual se refleja en una rápida disminución en el flux molar del componente. Solamente los resultados experimentales de la condensación de mezclas a las condiciones establecidas permitirían confirmar si esto está sucediendo. Por otra parte, la eficiencia calculada en el proceso de condensación presentó valores bajos, sin embargo no es posible comparar con valores reportados en literatura debido a su inexistencia.

Recomendaciones

Durante el desarrollo del presente trabajo se realizaron varias observaciones que permiten recomendar lo siguiente:

1. Evaluar la condensación de mezclas de hidrocarburos de cadena lineal en las cuales se encuentre hidrocarburos de bajo peso molecular, como *n*-Etano, *n*-Propano y *n*-Butano, en presencia de hidrocarburos de elevado peso molecular.
2. Seleccionar un modelo para el cálculo de coeficientes de transferencia de masa en la fase líquida de mezclas de hidrocarburos de cadena lineal, de forma que se elimine la condición límite del líquido $x_i^l = x_i^l$.
3. Seleccionar métodos de cálculo de propiedades físicas, termodinámicas y de transporte para un componente cercano a su temperatura crítica, a fin de evaluar la condensación de mezclas con uno de sus componentes cercano a su temperatura crítica.
4. Evaluar la condensación de mezclas a una presión superior a la atmosférica.
5. Evaluar la condensación de mezclas de cuatro y cinco componentes.

Apéndice A

Métodos de cálculo de propiedades

Una revisión a los métodos de predicción y correlaciones existentes para el cálculo de las propiedades de líquidos y vapores se llevo a cabo en libros de Reid et al. [34], Yaws [35] y Henley y Seader [28]. La Tabla A.1 muestra los métodos usados para el calculo de las propiedades físicas, de transporte y termodinámicas, para una descripción detallada del método refiérase a la obra indicada.

Las propiedades críticas (T_{ci} , P_{ci} , ρ_{ci} y Z_{ci}), el factor acéntrico w_i , el peso molecular M_i , la temperatura normal de ebullición T_{bi} , el momento dipolar $Dipm_i$ y el calor de vaporización a temperatura normal de ebullición $\Delta H_{vap,i}^{T_{bi}}$ son tomados de las obras de Reid et al. [34], Yaws [35] y Henley y Seader [28].

La correlación de Davis [30] para el calculo del coeficiente de transferencia de calor del fluido refrigerante que circula por la región anular es

$$\frac{h_C}{C_p^C G_C} = 0.029 \left(\frac{2r_{int} G_C}{\mu^C} \right)^{-0.2} \left(\frac{C_p^C \mu^C}{\kappa^C} \right)^{-2/3} \left(\frac{\mu^C}{\mu_W^C} \right)^{0.14} \left(\frac{r_{ext}}{r_{int}} \right)^{0.15}$$

$$G_C = \frac{L_C}{\pi(r_{ext}^2 - r_{int}^2)}$$

En donde las propiedades se evalúan a la temperatura de la corriente T^C del fluido, excepto μ_W^C que se calcula a la temperatura de la superficie anular interna T^W .

Métodos, correlaciones y reglas de mezcla para estimación de propiedades		
Propiedad	Fase vapor	Fase líquida
Presión de vapor Componente puro P_i^{sat}	Ecuación de Antoine [28]	-
Calor latente Componente puro $\Delta H_{vap,i}$ Mezcla ΔH_{vap}	- -	Ecuación de Watson [34, 35] $\Delta H_{vap} = \sum_{i=1}^n \Delta H_{vap,i}$ [28]
Capacidad calorífica Componente puro C_{pi} Mezcla C_p	Polinomio función de la temperatura C_{pi}^V [35] $C_p^V = \sum_{i=1}^n C_{pi}^V$ [28]	Polinomio función de la temperatura C_{pi}^L [35] $C_p^L = \sum_{i=1}^n C_{pi}^L$ [28]
Viscosidad Componente puro μ_i Mezcla μ	Método de Lucas μ_i^V [34] Método de Wilke μ^V [34, 35]	Polinomio función de la temperatura μ_i^L o método de Orrick-Erbar [34] Método de Teja-Rice μ^L [34]
Difusividad Coeficiente binario D Coeficiente efectivo $D_{i\text{efe}}$	Método de Fuller et al. [34, 36] Método de Wilke [37]	- -
Conductividad térmica Componente puro κ_i Mezclas κ	Polinomio función de la temperatura κ_i^V o método de Roy-Thodos [34, 38, 39] Método de Wassiljewa con modificación de Mason y Saxena κ^V [34]	Polinomio función de la temperatura κ_i^L o método de Latani [34] Método de Li κ^L [34, 40]
Densidad Componente puro ρ_i Mezcla ρ	Ecuación de gas ideal a presión atmosférica ρ_i^V o ecuación de Peng-Robinson a presión mayor [28, 34, 41] $\rho^V = \sum_{i=1}^n \rho_i^V$ gas ideal o reglas de mezclado cuadráticas para ecuación de Peng-Robinson [34, 41]	Método de Rackett con modificación de Spencer-Danner y Campbell-Thodos ρ_i^L [34, 42, 43] Método de Rackett modificado con reglas de mezclado de Chueh-Prausnitz ρ^L [34, 44]

Tabla A.1: Métodos de predicción de propiedades físicas, de transporte y termodinámicas de sustancias puras y mezclas.

La correlación de Chilton y Colburn [25] del factor j_H para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor del vapor en flujo turbulento es

$$j_H = \frac{f}{2} = \frac{h_V}{C_p^V G_V} \left(\frac{C_p^V \mu_f^V}{\kappa_f^V} \right)^{2/3}$$

$$G_V = \frac{V}{\pi r_{\text{int}}}$$

La correlación de Chilton y Colburn [25] del factor j_D para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa del vapor en flujo turbulento es

$$j_D = \frac{f}{2} = \frac{k_V}{G_V} \left(\frac{\mu_f^V}{\rho_f^V D_f} \right)$$

El factor de fricción de Fanning para régimen turbulento se evalúa por

$$f = 0.047 \left(\frac{2r_{\text{int}} G_V}{\mu_f^V} \right)^{-0.2}$$

En donde las propiedades se evalúan a la composición de la corriente [13] y a la temperatura de película T^f

$$T^f = 0.5(T^V + T^I)$$

excepto la capacidad calorífica promedio la cual se calcula por

$$C_p^V = \frac{\int_{T^I}^{T^V} C_p^V dT}{(T^V - T^I)}$$

La correlación de Nusselt [3] para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor del líquido condensado en flujo laminar es

$$h_L^* = 1.76 \left(\frac{\kappa_f^{L^3} \rho_f^{L^2} 9.8}{\text{Re}_L \mu_f^{L^2}} \right)^{1/3}$$

El Reynolds del líquido condensado se calcula por

$$\text{Re}_L = \frac{4L}{2\pi r_{\text{int}} \mu_f^L}$$

Si el valor del Reynolds del líquido es menor que 1600, se considera que la película está en flujo laminar (o pseudolaminar). Las propiedades se evalúan a la temperatura de película del líquido condensado T^f

$$T^f = T^I - \frac{3}{4}(T^I - T^L)$$

La relación de equilibrio K_i por la Ley de Raoult se calcula por

$$K_i = \frac{P_i^{sat}}{P}$$

En donde la presión de vapor P_i^{sat} se evalúa a la temperatura de la interfase con la ecuación de Antoine [28, 29].

La relación de equilibrio K_i por el método de gas ideal-NRTL (solución no ideal) se calcula por

$$K_i = \frac{\gamma_{iL} P_i^{sat}}{P}$$

En donde el coeficiente de actividad γ_{iL} de cada componente se calcula por el modelo de NRTL [28, 29]. Los parámetros de NRTL desde datos experimentales se reportan en DECHEMA [45].

La relación de equilibrio K_i por el método de la Ecuación Cúbica de Peng-Robinson se calcula por

$$K_i = \frac{\bar{\phi}_{iL}}{\bar{\phi}_{iV}}$$

En donde los coeficientes de fugacidad del componente i en la mezcla para la fase vapor $\bar{\phi}_{iV}$ y la fase líquida $\bar{\phi}_{iL}$ se calculan con la ecuación de Peng Robinson y reglas de mezclado cuadráticas [29, 41].

La temperatura T^r y composición del líquido x_i^r en el punto de rocío, así como la temperatura T^b y composición del vapor y_i^b en el punto de burbuja se calculan con los algoritmos recomendados por Henley y Seader [28].

Apéndice B

Parámetros del modelo

B.1 Mezclas de estudio

La selección de las mezclas de estudio binarias y ternarias se basó en:

1. Disponibilidad de datos de equilibrio vapor-líquido a presión atmosférica.
2. Consistencia termodinámica y predicción del EVL por el modelo gas ideal-NRTL.
3. Métodos o correlaciones para la predicción de propiedades físicas, termodinámicas y de transporte de cada componente presente en la mezcla.

La Figura B.1 muestra las relaciones de EVL para los sistemas benceno-tolueno, etanol-benceno, etanol-agua y metanol-clorobenceno, las fracciones molares de la fase vapor y líquido corresponden al componente ligero. Estas mezclas reflejan un amplio comportamiento de las fases. Por ejemplo, en la mezcla benceno-tolueno se tiene un comportamiento de la fase líquida de solución ideal, pero en las tres restantes mezclas se presenta un comportamiento de solución no ideal. De las mezclas seleccionadas, una parte son sistemas azeotrópicos, pero sólo se seleccionaron sistemas azeotrópicos con punto de ebullición mínimo como los sistemas etanol-benceno y etanol-agua, no se consideró a sistemas con punto de ebullición máximo.

La Figuras B.2 y B.3 muestra la variación de la volatilidad relativa con la composición molar del vapor para las cuatro mezclas precedentes. Se puede observar que el comportamiento ideal de la mezcla benceno-tolueno está asociado con una variación cuasi-lineal de

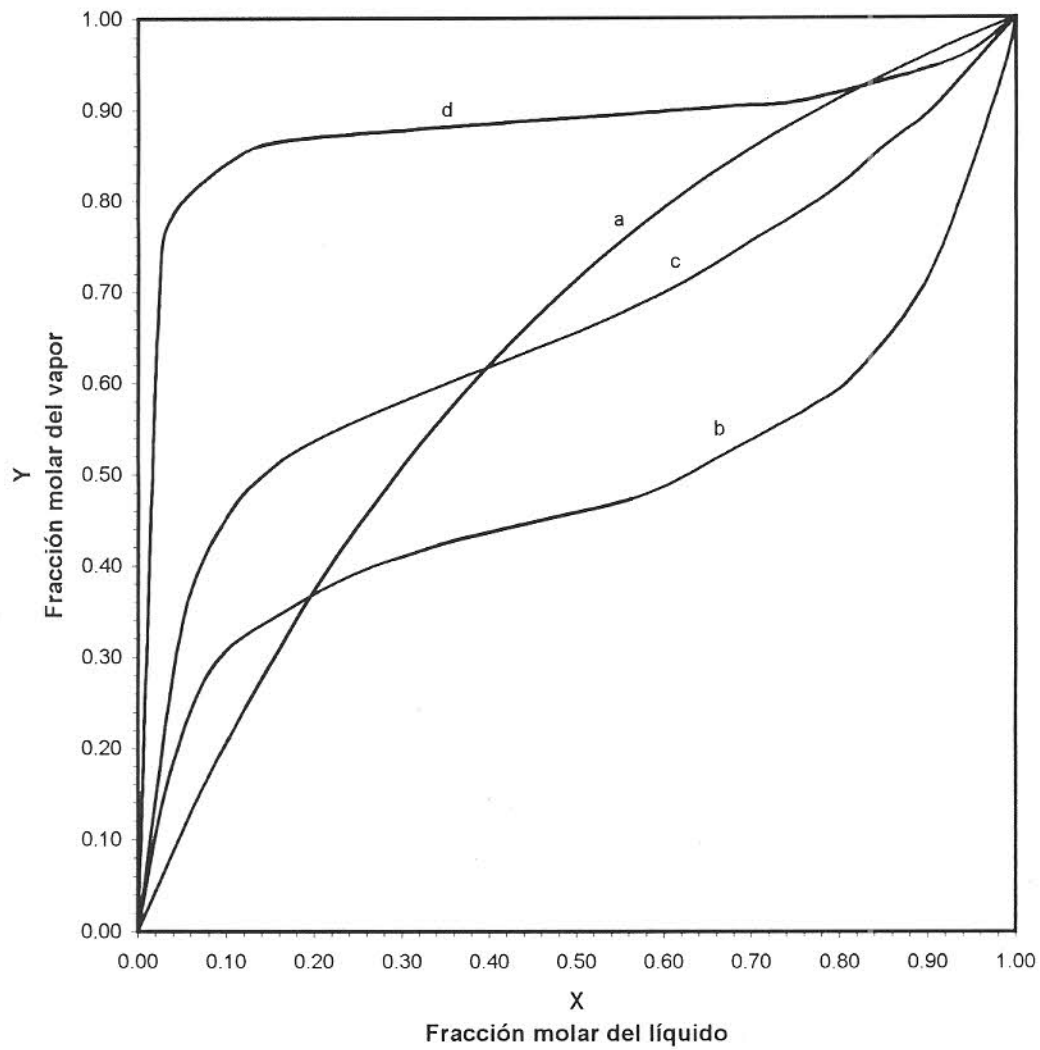


Figura B.1: Diagrama xy de equilibrio vapor-líquido del Componente 1 a presión atmosférica para las mezclas: (a) benceno(1)-tolueno(2), (b) etanol(1)-benceno(2) y (c) etanol(1)-agua(2) y (d) metanol(1)-clorobenceno(2).

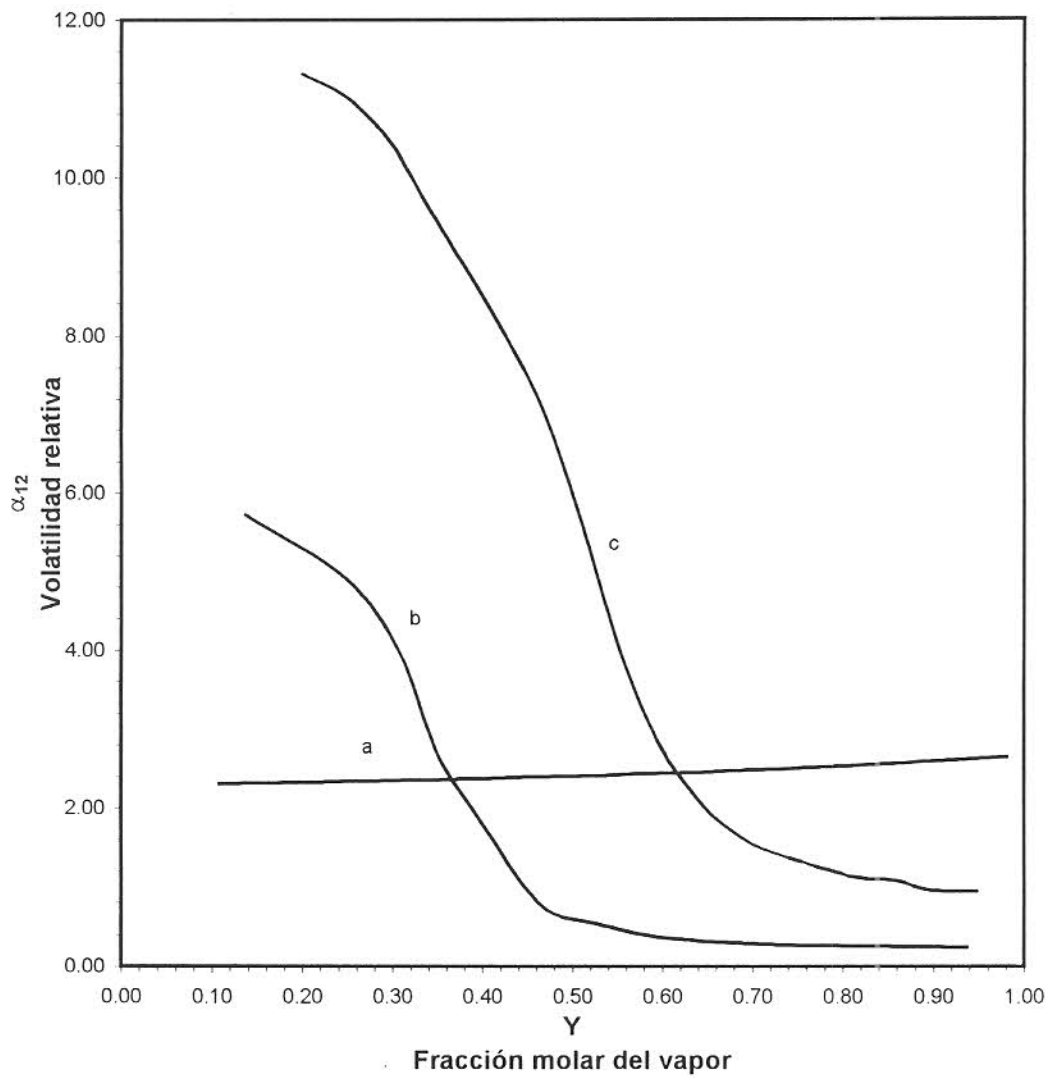


Figura B.2: Efecto de la composición del vapor en la volatilidad relativa de las mezclas: (a) benceno(1)-tolueno(2), (b) etanol(1)-benceno(2) y (c) etanol(1)-agua(2) considerando EVL a presión atmosférica.

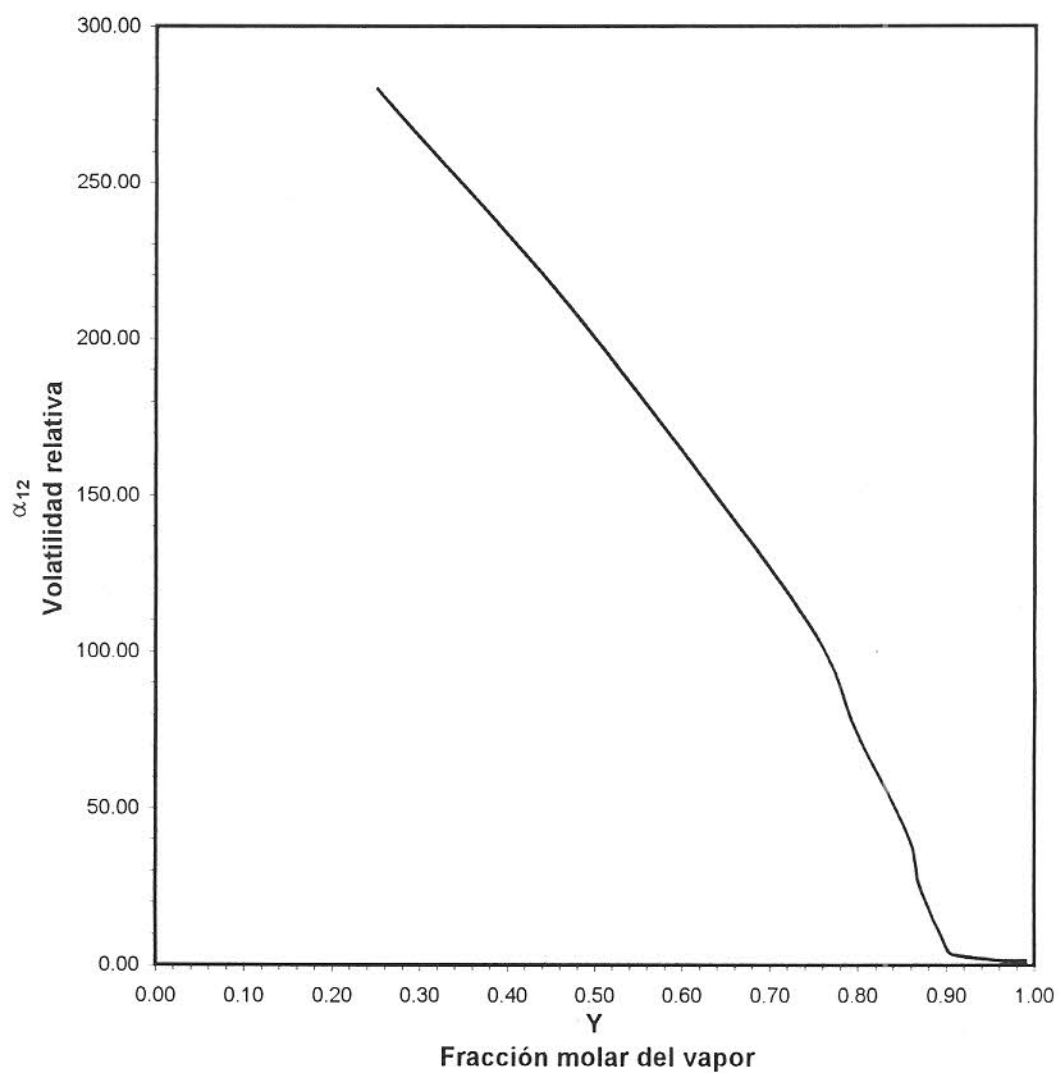


Figura B.3: Efecto de la composición del vapor en la volatilidad relativa de la mezcla metanol(1)-clorobenceno(2) considerando EVL a presión atmosférica.

la volatilidad relativa respecto de la composición, no así para las restantes tres mezclas que presentan variaciones significativas en la volatilidad relativa. Por ejemplo, la mezcla metanol-clorobenceno presenta variaciones en la volatilidad relativa de hasta dos ordenes de magnitud para el intervalo de composición seleccionado. Esta mezcla muestra que las variaciones en la volatilidad relativa son significativas cuando se tienen componentes de muy diferente naturaleza.

B.2 Geometría del condensador

En un condensador concéntrico, Walas [32] recomienda que el diámetro interno d_{int} del tubo interno sea de 3/4 a 1 pulgada y la relación de diámetros internos de tubo interno a tubo externo d_{int}/d_{ext} se considere de 1/2 a 1/3. Estas recomendaciones aplican cuando la condensación se efectúa en el interior del tubo interno y el fluido de enfriamiento circula por la región anular.

B.3 Tamaño en paso de integración

El tiempo de cálculo en un problema de simulación es directamente proporcional al número de veces que el sistema de ecuaciones del modelo debe ser resuelto. En efecto, este número depende del tamaño de incremento de longitud ΔZ o de área ΔA seleccionado para los cálculos de integración. Krishna y Panchal [19] usaron el método de Euler con etapas de 0.053 m de longitud, en tanto que Webb y Sardesai [4] utilizaron el método de Runge-Kutta para integrar en 5 etapas un metro de longitud. Por otra parte, Taylor et al. [4] determinaron incrementos de longitud del orden de 0.25 a 0.50 m con el método de diferencias finitas. Cada uno de los autores utilizó un diferente modelo de integración, así como de un diferente tamaño de incremento de longitud, esto indicó la importancia de determinar el incremento de longitud adecuado para el presente estudio. La influencia del tamaño en paso de integración en el cálculo del flux molar del benceno se muestra en la figura B.4 para el sistema benceno-tolueno. La solución del modelo se efectuó con un incremento de longitud ΔZ de 0.05 m,

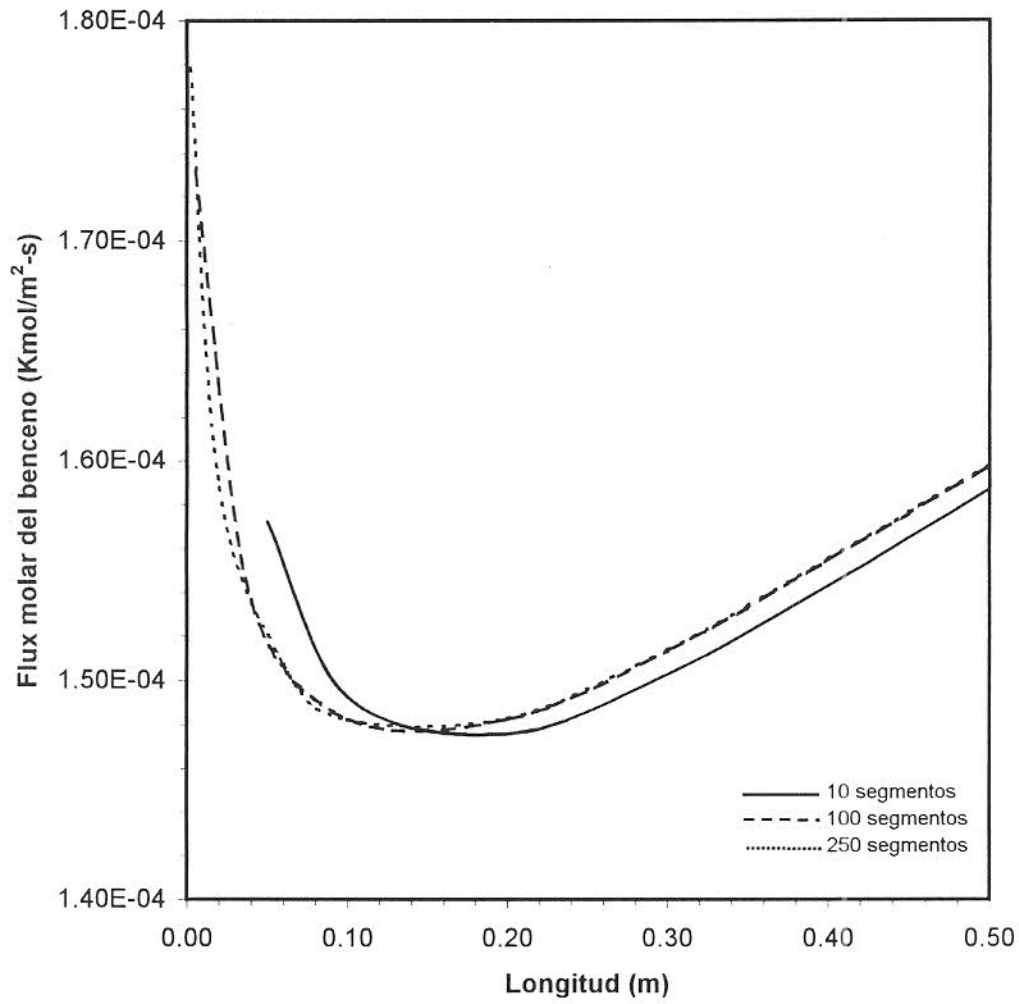


Figura B.4: Efecto del tamaño en paso de integración en el cálculo del flux molar del benceno para la mezcla benceno-tolueno. Las líneas de 100 y 200 segmentos casi se traslapan.

0.005 m y 0.002 m (división de la longitud total del condensador L en 10, 100 y 250 segmentos) para las condiciones de operación indicadas en la sección 5.1. Se puede observar en la figura B.4 que los resultados obtenidos con incrementos de longitud de 0.005 m y 0.002 m no presentan diferencias significativas, ya que las curvas casi se traslapan. Esta gráfica permite concluir que se puede seleccionar un incremento de longitud de 0.005 m (100 segmentos) a fin de obtener resultados confiables y disminuir el tiempo de cálculo.

Referencias

- [1] Alvarado, J.F.J. y P.T. Eubank. Comunicación personal. 1996.
- [2] Colburn, A.P. y T.B. Drew. The Condensation of Mixed Vapors. *Trans. AIChE*, 33: 197-215, 1937.
- [3] McCabe, W.L. y J.C. Smith. *Operaciones Básicas en Ingeniería Química*. McGraw-Hill, Barcelona, 1981.
- [4] Taylor, R., Krishnamurthy, R., Furno, J.S. y R. Krishna. Condensation of Vapor Mixtures. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop.*, 25: 83-101, 1986.
- [5] Sardesai, R.G. y D.R. Webb. Condensation of Binary Vapours of Immiscible Liquids. *Chem. Eng. Sci.*, 37: 529-537, 1982.
- [6] C. G. Kirkbride. Heat Transfer by Condensing Vapor on Vertical Tubes. *Ind. Eng. Chem.*, 26: 425-428, 1934.
- [7] Taylor, R. y R. Krishna. *Multicomponent Mass Transfer*. John Wiley & Sons, NY, 1993.
- [8] Davis, J.F., Tung, H.H. y R.S.H. Mah. Fractionation with Condensation and Evaporation in Wetted-Wall Columns. *AIChE J*, 30: 328-338, 1984.
- [9] Honda, K., Kawasaki, Y. y T. Munakata. Fractionation of Binary-Vapor Mixtures in a Wetted-Wall Column. *AIChE J*, 32: 148-156, 1992.
- [10] G.H. Bras. Design of Cooler Condensers for Vapor-Gas Mixtures-I. *Chem. Eng.*, 60: 223-226, 1953.
- [11] Sardesai, R.G., Palen, J.W. y J. Taborek. Modified Resistance Proration Method for Condensation of Vapor Mixtures. *Heat Transfer AIChE Symp. Ser.*, 225: 41-46, 1983.

- [12] I. Cuptor. Design of Condensers for a Mixture of Vapors in the Presence of Gases which are Uncondensable in a Vacuum. *Int. Chem. Eng.*, 31: 553-563, 1991.
- [13] Bird, R.B., Stewart, W.E., y E.N. Lightfoot, *Fenómenos de Transporte*. Reverté, España, 1982.
- [14] Sherwood, T.K., Pigford y C.R. Wilke. *Mass Transfer*. McGraw-Hill, NY, 1975.
- [15] Estrin, J., Hayes, T.W. y T.B. Drew. The Condensation of Mixed Vapors. *AIChE J*, 11: 800-803, 1965.
- [16] Fullarton, D. y E.U. Schlünder. Aproximate Calculation of Heat Exchanger Area for Condensation of Gas-Vapor Mixtures. *Int. Chem. Eng.*, 26: 408-418, 1986.
- [17] Fullarton, D., Schlünder, E.U. y L. Yüksel. Condensation of Isopropanol-Steam Mixtures. *Int. Chem. Eng.*, 27: 597-606, 1987.
- [18] Panchal, C.B., Kuro, W.C., Chen, F.C., Domingo, N. y E.P. Huang. Experimental and Analytical Study of Condensation of Ammonia-Water Mixtures. *Heat Transfer AICHE Symp. Ser.*, 314: 239-244, 1997.
- [19] Krishna, R. y C.B.Panchal. Condensation of Binary Vapour Mixture in the Presence of an Inert Gas. *Chem. Eng. Sci.*, 32: 741-745, 1977.
- [20] Toor, H.L., Solution of the Linearized Equations of Multicomponent Mass Transfer. *AIChE. J*, 10: 448-465, 1964.
- [21] Stewart, W.E. y R. Prober. Matrix Calculation of Multicomponent Mass Transfer in Isothermal Systems. *Ind. Eng. Chem. Fundls.*, 3: 224-235, 1964.
- [22] Krishna, R. y G.L. Standart. A Multicomponent Film Model Incorporating a General Matrix Method of Solution to the Maxwell-Stefan Equations. *AIChE J*, 22: 383-389, 1976.
- [23] Webb, D.R., Panchal, C.B. e I. Coward. The Significance of Multicomponent Diffusional Interactions in the Presence of Condensation in the Presence of a Non Condensable Gas. *Chem. Eng. Sci.*, 36: 87-95, 1981.
- [24] Hines, A.L. y R.N. Maddox. *Transferencia de Masa: fundamentos y aplicaciones*. Prentice Hall, México, 1987.

- [28] Henley, E.J. y J.D. Seader. *Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química*. Repla, México, 1990.
- [29] S.M. Walas. *Phase Equilibria in Chemical Engineering*. Butterwoth-Heinemann, Boston, 1985.
- [30] G. Tojo. *Problemas en Ingeniería Química: Operaciones Básicas*. 2a. ed., Aguilar, Barcelona, 1967.
- [31] Press, W.H., Flannery, B.P., Teukolsky, S.A. y W.T. Vetterling. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, NY, 1986.
- [32] S.M. Walas. *Chemical Process Equipment*. Butterwoth-Heinemann, Boston, 1990.
- [33] Stern, F. y F. Votta Jr. Condensation from Superheated Gas-Vapor Mixtures. *AIChE J*, 14: 928-933, 1968.
- [34] Reid, R.C., Prausnitz, J.M. y B.E. Poling. *The Properties of Gases and Liquids*. 4a. ed., McGraw-Hill, México, 1987.
- [35] C.L. Yaws. *Thermodynamic and Physical Property Data*. Gulf Publishing, Houston, 1992.
- [36] Fuller, E.N., Schettler, P.D. y J.C. Giddings. A New Method for Predictions of Binary Gas Phase Diffusion Coefficients. *Ind. Eng. Chem.*, 58: 19-27, 1966.
- [37] C.R. Wilke. Diffusional Properties of Multicomponent Gases. *Chem. Eng. Progr.*, 46: 95-104, 1958.
- [38] Roy, P. y G. Thodos. Thermal Conductivity of Gases: Hydrocarbons at Normal Pressures. *Ind. Eng. Chem. Fundls.*, 7: 529-534, 1968.
- [39] Roy, P. y G. Thodos. Thermal Conductivity of Gases: Organic Compounds at Pressure Atmospheric. *Ind. Eng. Chem. Fundls.*, 9: 71-79, 1970.