

Tesis de Posgrado

Transferencia simultánea de calor y materia líquido - burbuja en platos de destilación

Zaritzky de Ghener, Noemí Elisabet

1984

Tesis presentada para obtener el grado de Doctor en Ciencias Químicas de la Universidad de Buenos Aires

Este documento forma parte de la colección de tesis doctorales y de maestría de la Biblioteca Central Dr. Luis Federico Leloir, disponible en digital.bl.fcen.uba.ar. Su utilización debe ser acompañada por la cita bibliográfica con reconocimiento de la fuente.

This document is part of the doctoral theses collection of the Central Library Dr. Luis Federico Leloir, available in digital.bl.fcen.uba.ar. It should be used accompanied by the corresponding citation acknowledging the source.

Cita tipo APA:

Zaritzky de Ghener, Noemí Elisabet. (1984). Transferencia simultánea de calor y materia líquido - burbuja en platos de destilación. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1840_ZaritzkydeGhener.pdf

Cita tipo Chicago:

Zaritzky de Ghener, Noemí Elisabet. "Transferencia simultánea de calor y materia líquido - burbuja en platos de destilación". Tesis de Doctor. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Buenos Aires. 1984.
http://digital.bl.fcen.uba.ar/Download/Tesis/Tesis_1840_ZaritzkydeGhener.pdf

EXACTAS UBA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales



UBA

Universidad de Buenos Aires

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

Transferencia Simultánea de Calor y Materia Líquido-

Burbuja en Platos de Destilación

Noemi Elisabet Zaritzky de Ghener

- 1840 -

Tesis presentada para optar al título de Doctor en Ciencias Químicas .
ej. 2

v
1984

Re. 9

A mis padres
mi esposo
mis hijos

RECONOCIMIENTOS

Al Doctor Alfredo Calvelo, director de esta tesis, por sus oportunas sugerencias y valiosa colaboración.

Al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas por el apoyo proporcionado.

Al Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Ingeniería Universidad Nacional de LaPlata, donde se desarrolló la parte experimental de esta tesis.

Al Centro de Estudios Superiores para el Procesamiento de la Información de la Universidad Nacional de La Plata, donde se llevó a cabo el trabajo de computación.

Al Ing. J. Marsón por su colaboración en las experiencias fotográficas.

A mis compañeros del Centro de Investigación y Desarrollo en Criotecnología de Alimentos (CIDCA).

A mi esposo, el Ing. Mario Ghener, por sus útiles observaciones en la redacción del texto y su dedicada y paciente labor tipográfica

RESUMEN

El análisis de las diversas etapas de contacto que tienen lugar en un plato de destilación, muestra que en la generalidad de los casos la resistencia controlante a la transferencia de materia reside en la fase vapor.

La interpretación de dichos fenómenos de intercambio requiere información no siempre disponible, tal como los coeficientes de transferencia en el interior de burbujas.

En el presente trabajo se plantean las ecuaciones gobernantes de la transferencia de masa incluyendo la circulación toroidal en el interior de la burbuja, se provee una solución de las mismas y se comparan los resultados teóricos con experiencias realizadas en burbujas individuales dentro de los tamaños existentes en platos de destilación.

Los resultados muestran una buena concordancia con el modelo propuesto.

Se comparan también las soluciones previstas por los modelos sin circulación interna.

Utilizando la información obtenida acerca de los coeficientes de transferencia, se desarrolla un modelo no isotérmico para el cálculo de la eficiencia en platos de destilación, teniendo en cuenta la transferencia simultánea de calor y materia, bajo la suposición que la etapa de transporte más importante tiene lugar durante el ascenso de las burbujas.

El modelo es resuelto numéricamente analizándose la variación de la etapa controladora en la transferencia de materia a lo largo de una columna y la influencia de la diferencia entre la temperatura del vapor que ingresa al plato y el líquido. En éste, variable que se halla ligada a la relación de reflujo con que opera la columna.

Los resultados son comparados con la teoría clásica y con valores experimentales de eficiencia para el sistema metanol - agua.

Al respecto, el modelo propuesto predice correctamente la variación de la eficiencia con la composición en condiciones de reflujo total y la posición del máximo de dicha curva, no interpretada a través de la teoría clásica.

INDICE

CAPITULO 1	INTRODUCCION	
1.1	Eficiencia en Destilación	1
1.1.1	Definiciones	1
1.1.2	Factores que afectan la eficiencia	3
1.2	Análisis de la transferencia de calor y materia en una interfase líquido-vapor.	5
1.2.1	Definición del coeficiente de transferencia de materia	5
1.2.2	Modelos sencillos que interpretan el fenómeno de la destilación	10
1.2.2.1	Modelo basado en la teoría clásica	10
1.2.2.2	Modelo no isotérmico	12
CAPITULO 2	ESTUDIO FLUIDODINÁMICO DE LA BURBUJA	
2.1	Introducción	13
2.2	Flujo irrotacional alrededor de la burbuja	14
2.3	Flujo invíscido en el interior de la burbuja	17
2.4	Corrección de los perfiles de velocidad	20
2.5	Comprobación experimental de los perfiles de velocidad	22
CAPITULO 3	COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MATERIA EN BURBUJAS CON RESISTENCIA EXTERNA	
3.1	Introducción	23
3.2	Estudio teórico	23
3.2.1	Modelos teóricos para el cálculo del coeficiente de transferencia	23
3.2.1.1	Aplicación de las teorías al cálculo del coeficiente de transferencia en fase líquida	26

3.2.2	Solución de la ecuación diferencial para la transferencia de calor y materia	27
3.3	Estudio Experimental	30
3.3.1	Método de medida	30
3.3.2	Equipo experimental: Diseño de la columna de absorción	31
3.3.3	Análisis de la sensibilidad del mé- todo: Sistema aire-agua	37
3.3.3.1	Objetivos	37
3.3.3.2	Equipo experimental	38
3.3.3.3	Método experimental	41
3.3.3.4	Obtención de datos	43
3.3.4	Medida del coeficiente de transfe- rencia: Sistema dióxido de carbono- agua	48
3.3.4.1	Ecuaciones interpretativas del méto- do de medida	48
3.3.4.2	Medición de las variables	50
3.3.4.3	Equipo experimental	52
3.3.4.4	Resultados obtenidos	54
3.3.4.4.1	Dimensiones de la burbuja	54
3.3.4.4.2	Velocidad de ascenso	57
3.3.4.4.3	Volumen y área de burbujas indivi- duales	58
3.3.4.4.4	Coefficiente de transferencia	58
3.4	Conclusiones	62
CAPITULO 4	COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MATERIA EN BURBUJAS CON RESISTENCIA INTERNA	
4.1	Introducción	63

4.2	Estudio teórico	64
4.2.1	Planteo de la ecuación diferencial de transferencia de materia para el interior de la burbuja	64
4.2.2	El coeficiente de transferencia de materia	68
4.2.3	Resolución de la ecuación diferencial	69
4.3	Estudio experimental	74
4.3.1	Introducción	74
4.3.2	Método de medida	74
4.3.2.1	Ecuaciones interpretativas del método de medida	75
4.3.3	Equipo experimental	80
4.3.3.1	Composición de la mezcla gaseosa	81
4.4	Obtención de datos	83
4.5	Análisis de los resultados	102
CAPITULO 5 MODELO MATEMATICO DEL PLATO DE DESTILACION		
5.1	Objetivos	108
5.2	Planteo del modelo teórico	108
5.2.1	Suposiciones que involucra	108
5.2.2	Ecuaciones que describen el modelo	109
5.3	Resolución del sistema de ecuaciones	120
5.3.1	Sistema de ecuaciones algebraicas	120
5.3.1.1	Algoritmo de cálculo aplicado al sis- tema original	121
5.3.1.2	Reordenamiento de las ecuaciones	123
5.3.1.3	Método numérico de búsqueda de raíces	125
5.3.2	Sistema de ecuaciones diferenciales	131
5.3.2.1	Metode numérico de resolución del sistema de ecuaciones diferenciales	132

5.3.2.2 Programa principal	132
5.4 Diseño del cálculo	134
5.4.1 Elección de niveles en los parámetros del sistema	134
5.5 Alimentación de datos al programa de computadora	135
5.5.1 Elección del sistema	135
5.5.2 Propiedades físicas de los componentes de la mezcla	140
5.5.3 Plato de burbujeo	141
5.5.3.1 Diámetro de los orificios del plato	141
5.5.3.2 Tamaño de burbujas: cálculo de volumen y área	141
5.5.3.3 Velocidad de ascenso	142
5.5.4 Coeficientes de transferencia	143
5.5.4.1 Coeficiente de transferencia de materia	143
5.5.4.1.1 Coeficiente externo de transferencia de materia	143
5.5.4.1.2 Coeficiente interno de transferencia de materia	146
5.5.4.2 Coeficiente de transferencia de calor	147
5.5.4.2.1 Coeficiente externo de transferencia de calor	147
5.5.4.2.2 Coeficiente interno de transferencia de calor	150
5.6 Resultados obtenidos	152
5.6.1 Consideraciones generales	154
5.7 Análisis de resultados	155
5.7.1 Variación de la eficiencia con ΔT	155

5.7.2	Variación de la eficiencia con la composición a $\Delta T = \text{cte.}$	157
5.7.3	Variación de la eficiencia con la composición en condiciones de reflujo total. Discusión de las teorías interpretativas	158
5.7.3.1	Existencia de un máximo	158
5.7.3.2	Interpretación a través de la teoría clásica	158
5.7.3.3	Otras teorías interpretativas	162
5.7.3.4	Modelo no isotérmico	162
5.7.3.5	Análisis de la aparición del máximo a través del modelo no isotérmico	163
5.7.4	Variación de la resistencia a la transferencia de materia con la composición	166
5.7.4.1	Etapas controlantes	166
5.7.4.2	Variación de la resistencia interna con la composición	168
5.7.4.2.1	Variación de la relación de flujos en la interfase r_1^* con la composición	168
5.7.4.2.2	Influencia de la resistencia a la transferencia con la posición del máximo	172
CAPITULO 6 CONCLUSIONES GENERALES		175
BIBLIOGRAFIA		177
APENDICE I	Programa Principal	181
APENDICE II	Ajustes Polinómicos	183
APENDICE III	Cálculo del coeficiente de difusión del sistema metanol - agua en fase vapor	185
NOMENCLATURA		188

CAPITULO 1

INTRODUCCION

1.1 Eficiencia en destilación

Uno de los pasos más importantes y menos seguros, dentro del diseño de columnas de destilación, es la determinación de la eficiencia, con el objeto de obtener el número de platos equivalentes a una etapa de equilibrio.

Esta eficiencia, representa la resultante de un fenómeno extremadamente complejo como lo es la transferencia simultánea de calor y materia en sistemas dispersos.

El objeto del presente trabajo, es relacionar la eficiencia de un plato con los fenómenos de intercambio que tienen lugar en burbujas individuales al ascender en condiciones no isotérmicas similares a las existentes en un plato de destilación.

Al plantear para el modelo citado, las ecuaciones de transferencia de materia y calor aparecen coeficientes cuya evaluación resulta imprescindible.

En destilación, no se puede afirmar que la resistencia a la transferencia resida en una u otra fase, ya que la etapa controladora varía a lo largo de la columna. Esto puede explicarse de un modo sencillo si se tiene en cuenta que el coeficiente global de transferencia de materia, que se halla directamente ligado a la eficiencia, depende no sólo de los coeficientes individuales, sino también de la pendiente de la curva de equilibrio que a su vez varía con la concentración.

1.1.1 Definiciones

La eficiencia de plato, es una medida de la cantidad de masa transferida que tiene lugar entre el líquido y el vapor,

respecto de la que tendría lugar si se alcanzara el equilibrio termodinámico.

Existen tres definiciones de eficiencia que se usan habitualmente:

a) Eficiencia total: Está dada por el cociente entre el número de etapas de equilibrio en una columna y el número real de platos.

b) Eficiencia de Murphree: Está determinada para un solo plato. Definida en términos de composición del vapor, representa el cociente entre el cambio en la composición del vapor que atraviesa el plato, y el cambio que hubiese tenido lugar si el total del vapor que sale del plato estuviera en equilibrio con el líquido que sale del mismo.

Matemáticamente puede establecerse:

$$E_{MV} = \frac{y_n - y_{n+1}}{y_{no} - y_{n+1}} \quad (1.1)$$

E_{MV} : Eficiencia Murphree en términos del vapor.

y_{no} : Composición del vapor en equilibrio con el líquido que sale de la etapa n.

y_n : Composición del vapor que sale de la etapa n.

y_{n+1} : Composición del vapor que entra a la etapa n.

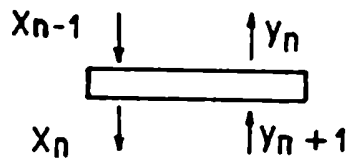


Fig. 1 Plato n de la columna.

c) Eficiencia local: La eficiencia local del vapor se calcula a partir del cambio en la composición del vapor que atraviesa un líquido de composición constante en un punto de la sección transversal del plato.

Esto resulta equivalente a suponer que los vapores atraviesan el líquido verticalmente y que la composición del líquido es constante en cualquiera de las líneas verticales que lo atraviesan.

El concepto de eficiencia local en términos de composición del vapor resulta más adecuado que para el líquido.

Relación entre la eficiencia de Murphree y la eficiencia local

En columnas pequeñas, el líquido del plato se encuentra totalmente mezclado de modo que en él no existe un gradiente horizontal de composición. Puede asumirse por lo tanto que la composición del líquido que abandona el plato corresponde a la del propio plato.

En este caso la eficiencia local y la de Murphree coinciden, ya que todas las burbujas del plato se comportan en forma análoga al ponerse en contacto con un líquido que se halla en las mismas condiciones de temperatura y composición.

Cabe destacar sin embargo, la existencia de otros modelos más complicados que involucran distintas distribuciones de flujo líquido en el plato, y que en otros casos incluyen el arrastre de líquido por el vapor.

1.1.2 Factores que afectan la eficiencia

Los factores que afectan la eficiencia de plato incluyen principalmente las resistencias al transporte de calor y materia en las fases líquido y vapor así como el arrastre de líquido por el vapor, y la formación de espuma.

A su vez estos factores dependen de las propiedades físicas del sistema, del diseño del plato y de la fluidodinámica del mismo.

Es obvio que toda vez que se trate de optimizar la eficiencia del plato, será necesario profundizar el estudio del mecanismo de transferencia entre las burbujas de vapor y el líquido circundante.

En un sistema tan complicado como el de intercambio en un plato es necesario desdoblarse las distintas etapas que tienen lugar.

Garner (1), postuló la existencia de tres zonas de transferencia de materia en un plato de destilación:

- a) Formación de la burbuja.
- b) Ascenso del vapor en el líquido y formación de espuma.
- c) Gotitas líquidas arrastradas por el vapor.

En la zona de formación de burbujas, la energía cinética del vapor decrece rápidamente y gran cantidad de energía se disipa en turbulencia. La transferencia de materia es rápida.

La zona de ascenso del vapor muestra distintas estructuras dependiendo de la existencia o no de espuma y de la velocidad de la corriente de vapor.

La zona de spray difiere de las dos anteriores en el hecho de que aquí el vapor constituye la fase continua. Las gotitas son producidas por las burbujas que se rompen en el tope de la región de espuma y son conducidas por la corriente gaseosa una distancia tal, que depende del diámetro de las gotas y de su energía cinética inicial.

A bajas velocidades del vapor esta zona no es de gran importancia para la transferencia de masa.

A altas velocidades del vapor se torna difícil separar las regiones b) y c).

En condiciones normales de operación de los platos el arrastre de líquido por el vapor es pequeño, de modo que las principales

contribuciones a la transferencia de masa ocurren en las regiones a) y b).

El presente estudio se restringe a los procesos que tienen lugar durante el ascenso del vapor a través del líquido en platos en los que no hay formación de espuma, suponiéndose despreciable el intercambio de calor y materia durante la formación de las burbujas.

1.2 Análisis de la transferencia de calor y materia en una interfase líquido vapor

1.2.1 Definición del coeficiente de transferencia de materia (2)

El proceso de destilación puede simplificarse en extremo analizando la transferencia de los componentes que constituyen la mezcla a través de la interfase que separa el líquido del vapor.

El vapor que ingresa a un plato se enriquece durante su ascenso en el componente más volátil mientras que el componente menos volátil pasa al líquido.

Se establecen entonces, perfiles instantáneos de concentración como los que muestra la figura 2, para el componente A, el más volátil de una mezcla binaria constituida por A y B. (A este tipo de mezcla estará referido todo el análisis posterior)

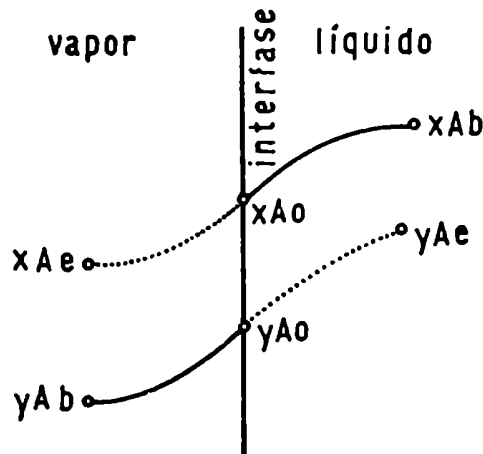


Fig. 2 Perfil de concentraciones del componente A.

En un sistema como el descrito hay tres resistencias que se oponen al movimiento de una especie:

- a) La fase gaseosa.
- b) La fase líquida.
- c) La interfase en sí.

En general, la resistencia que opone la interfase es despreciable salvo cuando en ella se concentra un tensioactivo o cuando la velocidad de transferencia de masa es elevada.

Schrage (3) confirmó esta suposición a partir de consideraciones teóricas y ecuaciones para la velocidad de transferencia en la interfase, encontrando que allí la máxima resistencia equivale a 3% de la fuerza impulsora total; los valores generalmente son mucho menores por lo tanto la suposición adoptada es correcta.

En la interfase las composiciones del líquido y el vapor están situadas sobre la curva de equilibrio. Para el componente A puede expresarse:

$$y_{A_0} = f(x_{A_0}) \quad (1.2)$$

La velocidad de transferencia de materia se expresa en función de un coeficiente de transferencia en la fase considerada y la diferencia de concentración en dicha fase.

Cuando la transferencia de materia es baja de modo que no se distorsionen los perfiles de velocidad y concentración puede definirse el coeficiente de transferencia en términos de la composición del líquido a partir de la siguiente expresión:

$$N_{A_0} = k_x (x_{A_b} - x_{A_0}) + x_{A_0} (N_{A_0} - N_{B_0}) \quad (1.3)$$

El primer término del segundo miembro representa el aporte difusivo a la transferencia de materia, y el segundo término el aporte convectivo.

N_{Ae} es el flujo molar en la interfase del componente más volátil y se halla dirigido hacia la fase vapor.

N_{Be} en cambio, es el flujo molar en la interfase del componente menos volátil y se define con sentido contrario al de N_{Ae} ya que se halla dirigido hacia el interior de la fase líquida; este es el motivo por el cual aparece el signo negativo precediendo al flujo N_{Be} en la expresión (1.3).

El flujo de A puede expresarse también en términos de la composición del vapor de acuerdo con la siguiente igualdad:

$$N_{Ae} = k_y (y_{Ae} - y_{Ab}) + y_{Ae} (N_{Ae} - N_{Be}) \quad (1.4)$$

Por ser:

$$\begin{aligned} x_A &= 1 - x_B \\ y_A &= 1 - y_B \end{aligned} \quad (1.5)$$

resulta innecesario plantear las ecuaciones para el componente B, ya que serían combinación lineal de estas.

Es importante destacar que en las definiciones (1.3), (1.4) los coeficientes de transferencia k_x , k_y sólo representan el aporte difusivo, y no involucran como ocurre en las definiciones usuales el aporte convectivo.

Los coeficientes de transferencia en una sola fase son difíciles de medir salvo en experiencias proyectadas de modo de desprestigiar la diferencia de concentraciones a través de una de las fases.

Es conveniente definir entonces coeficientes globales de

transferencia de materia a través de las siguientes expresiones:

$$N_{Ae} = K_y (y_{Ao} - y_{Ab}) + y_{Ac} (N_{Ao} - N_{Bo}) \quad (1.6)$$

$$N_{Ae} = K_x (x_{Ab} - x_{Ao}) + x_{Ac} (N_{Ao} - N_{Bo}) \quad (1.7)$$

donde

y_{Ac} es la composición que tendría la fase gaseosa si estuviera en equilibrio con la composición global de la fase líquida, es decir $y_{Ac} = f(x_{Ab})$ siendo f la función de equilibrio.

Del mismo modo x_{Ac} se define por $y_{Ab} = f(x_{Ac})$

Con el objeto de relacionar los coeficientes globales con los individuales de cada fase se define:

$$r' = \text{relación de flujos} = \frac{N_{Bo}}{N_{Ao}}$$

La relación entre K_y y los coeficientes individuales se logra escribiendo las ecuaciones (1.3), (1.4), (1.6) en términos de r' y despejando en cada una de ellas la fuerza impulsora.

De este modo resultan:

$$x_{Ab} - x_{Ao} = \frac{N_{Ao} (1 - x_{Ao} (1 - r'))}{k_x} \quad (1.8)$$

$$y_{Ao} - y_{Ab} = \frac{N_{Ao} (1 - y_{Ao} (1 - r'))}{k_y} \quad (1.9)$$

$$y_{Ao} - y_{Ab} = \frac{N_{Ao} (1 - y_{Ac} (1 - r'))}{K_y} \quad (1.10)$$

La fuerza impulsora total puede escribirse en términos de

las parciales:

$$y_{Ae} - y_{Ab} = \frac{y_{Ae} - y_{Ao}}{(x_{Ab} - x_{Ao})} (x_{Ab} - x_{Ao}) + y_{Ao} - y_{Ab} \quad (1.11)$$

Si se llama $m_y = \frac{y_{Ae} - y_{Ao}}{x_{Ab} - x_{Ao}}$ a la pendiente de la

línea que une el verdadero punto de interfase (x_{Ao}, y_{Ao}) , con el ficticio (y_{Ae}, x_{Ab}) , utilizado en el cálculo de la fuerza impulsora global de la fase gaseosa y se reemplazan en (1.11) las ecuaciones (1.8), (1.9) y (1.10) se obtiene la relación deseada:

$$\frac{1 - y_{Ae} (1 - r^2)}{K_y} = \frac{m_y (1 - x_{Ao} (1 - r^2))}{k_x} + \frac{1 - y_{Ao} (1 - r^2)}{k_y} \quad (1.12)$$

En la expresión del coeficiente global aparecen no sólo los coeficientes individuales de cada fase sino también las concentraciones de interfase; la pendiente de la curva de equilibrio, y la relación de los flujos molares de ambos componentes.

Esta ecuación se simplifica, en algunos casos particulares como por ejemplo: difusión equimolar en contracorriente donde $r^2 = 1$, y flujo de un solo componente (comp. A) donde $r^2 = 0$.

En la expresión (1.12) el primer término del miembro de la derecha representa la resistencia a la transferencia en la fase líquida mientras que el segundo lo hace en la fase vapor.

Las magnitudes relativas de las resistencias en las películas líquida y gaseosa dependen fundamentalmente del valor de los coeficientes de transferencia y del valor de m .

Si m es grande la resistencia controlante se encuentra en el líquido mientras que si m es pequeño el control se halla en la fase gaseosa

1.2.2 Modelos sencillos que interpretan el fenómeno de la destilación

1.2.2.1 Modelo basado en la teoría clásica

Se puede relacionar la eficiencia de Murphree con la teoría de transferencia de materia suponiendo un modelo cinético sencillo de burbujas discretas de vapor que ascienden a través de un líquido de composición constante que se halla totalmente mezclado. (4)

La ecuación que da la velocidad de transferencia de masa del componente A para una burbuja en el plato n de una columna de destilación puede escribirse:

$$C V \frac{dy_A}{dt} = N_{Ao} A \quad (1.13)$$

donde:

C : Concentración molar total dentro de la burbuja.

V : Volumen de la burbuja.

y_A : Fracción molar del componente más volátil dentro de la burbuja.

t : Tiempo

A : Area interfacial.

Si se reemplaza la ecuación (1.10) en la (1.13) resulta:

$$C V \frac{dy_A}{dt} = \frac{K_Y A (y_{Ao} - y_A)}{1 - y_{Ao} (1 - r')} \quad (1.14)$$

Omitiendo la escritura del subíndice A la ecuación(1.14) se integra de la siguiente manera para el plato n :

$$\int_{y_{n+1}}^{y_n} \frac{dy}{y_{ng} - y} = \frac{K_y A}{C V (1 - y_{ng} (1 - r'))} \int_0^{t_c} dt \quad (1.15)$$

donde se han considerado constantes en el tiempo: el tamaño de la burbuja, el coeficiente global, la concentración total y la relación de flujos; con t_c se ha designado el tiempo de contacto.

La solución de (1.15) es:

$$\frac{y_{ng} - y_n}{y_{ng} - y_{n+1}} = \exp \left(\frac{-K_y A t_c}{C V (1 - y_{ng} (1 - r'))} \right) \quad (1.16)$$

Utilizando la ecuación(1.12), la(1.16) se relaciona con la(1.1) a través de:

$$E_{MV} = 1 - \exp \left(\frac{-A t_c}{C V \frac{m(1 - x_o (1 - r'))}{k_x} + \frac{1 - y_o (1 - r')}{k_y}} \right) \quad (1.17)$$

Esta expresión vincula la eficiencia de plato con los coeficientes de transferencia de materia en cada fase, las concentraciones de interfase y la relación de los flujos.

En destilación es difícil predecir que el control a la transferencia reside en una de las fases ya que m_y varía a lo largo de la curva de equilibrio modificando las resistencias relativas.

Se concluye entonces que en destilación el control puede ser mixto y por lo tanto es necesario tener expresiones para evaluar tanto k_y como k_x .

Al respecto hay numerosos trabajos que estudiaron destilación en film y obtuvieron dichos coeficientes, pero es fundamental obtenerlos en burbujas ya que los mismos están afectados por la fluidodinámica del sistema y como se verá mas adelante, la de las burbujas es muy especial.

1.2.2.2 Modelo no isotérmico

En este trabajo se desarrolla, como se verá posteriormente, un modelo más complicado que el que postula la teoría clásica (donde la destilación es considerada únicamente como un proceso de transferencia de materia) ya que se toma en cuenta la influencia de la transferencia de calor desde el vapor hacia el líquido, en los flujos de materia de los componentes de la mezcla.

Uno de los más relevantes trabajos sobre transferencia de calor y materia en sistemas líquido - vapor es debido a Ruckenstein (5) quien continúa las observaciones y estudios iniciados por Sawistowski y Smith (6) sobre los efectos térmicos en la rectificación.

En él se plantea el balance de calor en una interfase líquido - vapor donde aparecen los flujos de materia de los componentes a destilar relacionados con sus calores latentes de vaporización y además con el calor que se transfiere desde el vapor hacia el líquido.

Este, modifica a través del balance de interfase los flujos de materia, que por lo tanto difieren de los calculados a partir de la teoría clásica.

Con el propósito de cuantificar el calor transferido es necesario contar con información acerca de los coeficientes de transferencia de calor que se obtienen a partir de los de materia.

CAPITULO 2

ESTUDIO FLUIDODINAMICO DE LA BURBUJA

2.1 Introducción

La elección del modelo de burbujas individuales como representativo del fenómeno de la destilación no es de ningún modo arbitrario.

Un sistema más simplificado, como por ejemplo la pared húmeda, no permitiría obtener resultados extrapolables a burbujas debido a que la fluidodinámica de ambos sistemas es totalmente distinta.

Por otra parte un sistema más complejo, como el de múltiples burbujas interaccionando entre sí, impediría debido a la superposición de efectos, la obtención de nuestro objetivo: una información acerca de las etapas elementales de transferencia de calor y masa que intervienen en el sistema.

A continuación se presenta un análisis de los trabajos realizados al respecto.

Haberman y Morten (7), presentaron los primeros intentos para describir la forma de las burbujas en términos de números adimensionales.

Para flujo reptante ($Re_{ext} < 1$), Hadamar y Rybczynski (8), (9) efectuaron una descripción teórica de los campos de velocidades externo e interno de una esfera fluida con circulación interna totalmente desarrollada, en movimiento estacionario a través de otro fluido de extensión infinita.

Ellos consideraron que las componentes tangenciales de la velocidad y los esfuerzos normales y tangenciales a ambos lados de la interfase son iguales.

En general los primeros trabajos se limitaron al estudio de flujo reptante alrededor de esferas rígidas y fluidas en medios infinitos.

En condiciones normales de burbujeo el Re_{ext} es mayor que el considerado en flujo reptante. En ese caso entran a jugar los efectos inerciales y el análisis de Hadamard se hace inaplicable.

El desarrollo para $Re_{ext} > 1$ fue hecho por Levich (10), quien argumentó que para burbujas que ascienden en líquidos, el campo de velocidades en la vecindad de la superficie interfacial difiere poco de la solución irrotacional.

Moore (11) mostró también que la solución irrotacional es una aproximación válida para las fuerzas inerciales y el campo de velocidades.

En las siguientes secciones se describen los desarrollos que conducen a la obtención de los perfiles de velocidad fuera y dentro de la burbuja.

2.2 Flujo irrotacional alrededor de la burbuja

En un flujo incompresible e irrotacional se cumple que:

$$\underline{\nabla} \cdot \underline{v} = 0 \quad (2.1)$$

$$\underline{\nabla} \times \underline{v} = 0 \quad (2.2)$$

El rotor de un campo vectorial se anula automáticamente cuando el campo se puede expresar como el gradiente de un potencial:

$$\underline{v} = - \underline{\nabla} \phi \quad (2.3)$$

De acuerdo con (2.1) el potencial de la velocidad satisface la ecuación de Laplace

$$\nabla^2 \phi = 0 \quad (2.4)$$

En coordenadas esféricas la ecuación elíptica (2.4) se ex-

presa por:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\operatorname{sen} \theta \frac{d\phi}{d\theta} \right) = 0 \quad (2.5)$$

Las condiciones de contorno son:

$$\text{en } r = R \quad v_r = - \frac{\partial \phi}{\partial r} = 0$$

$$\text{en } r \rightarrow \infty \quad v_r = - \frac{\partial \phi}{\partial r} = -v_\infty \cos \theta$$

$$v_\theta = - \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} = v_\infty \operatorname{sen} \theta$$

$$\therefore \frac{\partial \phi}{\partial \theta} = -v_\infty r \operatorname{sen} \theta \Rightarrow \phi = v_\infty r \cos \theta$$

La última expresión sugiere una solución de la forma

$$\phi = f(r) \cdot \cos \theta \quad (2.6)$$

Reemplazando esta última, en la ecuación diferencial (2.5), conduce a una ecuación ordinaria en f , a partir de cuya solución se llega a:

$$\phi = v_\infty \left(1 - \frac{1}{2} \frac{R^3}{r^2} \right) \cos \theta \quad (2.7)$$

y los perfiles de velocidad

$$v_\theta = v_\infty \left(1 + \frac{1}{2} \frac{R^3}{r^3} \right) \operatorname{sen} \theta$$

$$v_r = -v_\infty \left(1 - \frac{R^3}{r^3} \right) \cos \theta \quad (2.8)$$

De ellos se deducen que en la superficie de la burbuja:

$$v_r = 0 \qquad v_\theta = -\frac{3}{2} v_\infty \sin \theta$$

El hecho que la componente de la velocidad normal es nula equivale a postular la no deformación de la burbuja.

Además existe un deslizamiento de la superficie dado por el valor de la velocidad tangencial.

La ecuación de la función de corriente Ψ es:

$$\Psi = \frac{r^2}{2} \sin^2 \theta v_\infty \left(1 - \frac{R^3}{r^3} \right)$$

Ψ está relacionada con las componentes de velocidad a través de:

$$v_r = -\frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \qquad (2.9)$$

$$v_\theta = \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial r}$$

Los puntos de estancamiento se producen para

$$\sin \theta = 0 \Rightarrow \theta = 0, \pi$$

La velocidad máxima:

$$v_{\theta \max} = \frac{3}{2} v_\infty \quad \text{se produce en } \theta = \pm \frac{\pi}{2}$$

La velocidad máxima en el ecuador de la burbuja predicha por la teoría irrotacional es aproximadamente tres veces mayor que la velocidad en el mismo punto dada por la teoría viscosa (flujo rep- tante).

2.3 Flujo invíscido en el interior de la burbuja (12)

Con el objeto de encontrar la distribución de velocidades dentro de la burbuja se utiliza la ecuación de difusión de la vorticidad:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \underline{v} \cdot \underline{\nabla} \omega - \omega \cdot \underline{\nabla} \underline{v} + \nu \nabla^2 \omega \quad (2.10)$$

donde ω : vorticidad: $\underline{\nabla} \times \underline{v}$

Esta ecuación se reduce para el movimiento axisimétrico en el interior de una burbuja invíscida en estado estacionario a:

$$\underline{v} \cdot \underline{\nabla} \omega = 0$$

$$v_r \frac{\partial \omega_\varphi}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial \omega_\varphi}{\partial \theta} = 0 \quad (2.11)$$

Se postula para la componente de la vorticidad

$$\omega_\varphi = A^2 r \sin^2 \theta \quad \text{con } A^2 = \text{cte.} \quad (2.12)$$

ecuación que satisface (2.11)

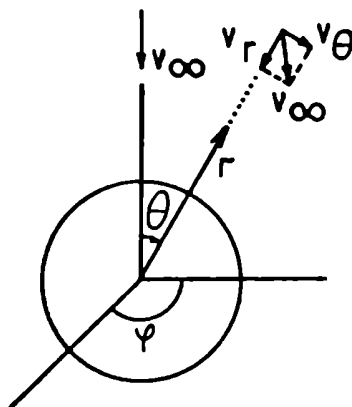


Fig. 3 Coordenadas esféricas

ω_φ se relaciona con la función de corriente Ψ :

$$\omega_\varphi = (\nabla \times \underline{v})_\varphi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) - \frac{1}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} \quad (2.13)$$

como

$$v_r = - \frac{1}{r^2 \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \quad (2.9)$$

$$v_\theta = \frac{1}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial r}$$

Reemplazando (2.9) en (2.13) e igualando a (2.12) resulta la siguiente ecuación diferencial parcial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1}{r^2 \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) = \\ = \Lambda^2 r^2 \operatorname{sen} \theta \end{aligned} \quad (2.14)$$

Al resolverla se supone para Ψ una funcionalidad análoga a la del flujo irrotacional externo

$$\Psi = f(r) \operatorname{sen}^2 \theta \quad (2.15)$$

De esta manera se llega a una ecuación diferencial ordinaria en f .

Las condiciones de contorno son:

$$r = 0 \quad \Psi = \text{finito}$$

$$r = R \quad v_r = 0 \Rightarrow \frac{1}{R^2 \operatorname{sen} \theta} \frac{\partial \Psi}{\partial r} = 0$$

$$r = R \quad v_{\theta} = \text{continua} \quad \therefore \left. \frac{\partial \psi}{\partial r} \right|_{\text{ext}} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial r} \right|_{\text{int}}$$

La solución expresada como función de corriente es:

$$\psi = - \frac{3}{4} v_{\infty} \frac{r^2}{R^2} \sin^2 \theta (R^2 - r^2) \quad (2.16)$$

Pueden dibujarse las líneas de corriente en el interior de la burbuja, y se llaman torbellinos de Hill.

El perfil de velocidades está dado por:

$$\begin{aligned} v_r &= \frac{3}{2} v_{\infty} \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \cos \theta \\ v_{\theta} &= - \frac{3}{2} v_{\infty} \left(1 - 2 \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \sin \theta \end{aligned} \quad (2.17)$$

Son puntos de estancamientos aquellos para los que

$$v_r = v_{\theta} = 0$$

Esto se cumple en

$$r = \frac{R}{\sqrt{2}} \quad ; \quad \theta = \pm \frac{\pi}{2}$$

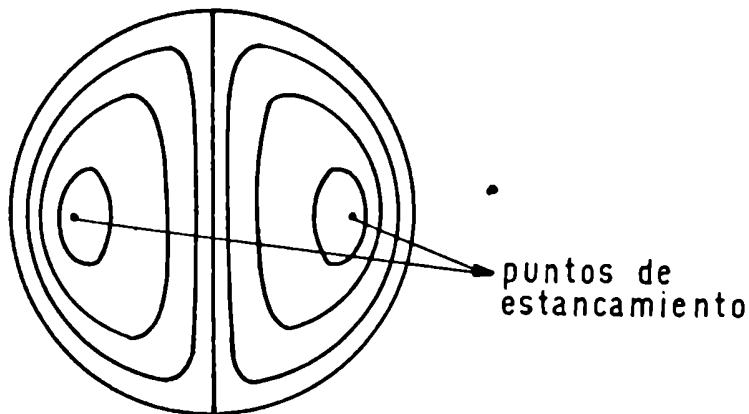


Fig. 4 Torbellinos de Hill.

2.4 Corrección de los perfiles de velocidad

Los perfiles de velocidad obtenidos por esta vía se desvían del campo real de velocidades sólo en una delgada capa límite a cada lado de la superficie de la burbuja.

Esto puede explicarse observando la fig. 5 donde se encuentra graficado el perfil de v_{θ} en una burbuja para $\theta = \frac{\pi}{2}$.

Con el objeto que la cantidad de movimiento pueda ser transportada a través de la superficie de la burbuja desde el exterior al interior, el gradiente radial de velocidad tangencial tiene que ser de signo opuesto al que da la solución potencial.

Esto se debe a que el gradiente de velocidades está vinculado al esfuerzo de corte y este debe ser continuo a través de la interfase líquido - vapor.

Por lo tanto los gradientes de velocidad a ambos lados no pueden tener distinto signo.

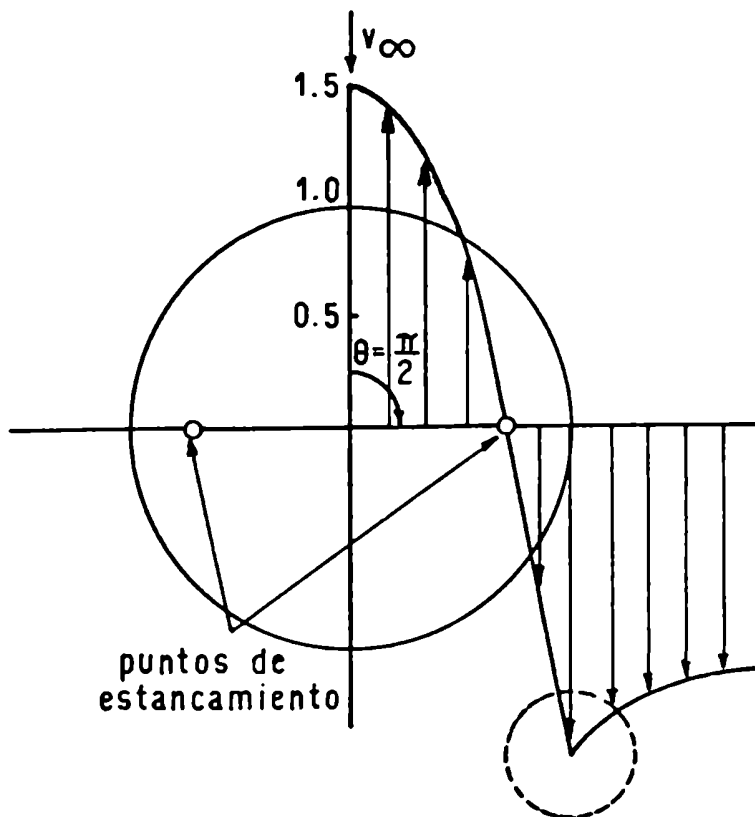


Fig. 5 Distribución de la velocidad tangencial en el plano ecuatorial de una burbuja, en flujo ideal.

Chao (13) presentó un tratamiento teórico del movimiento estacionario de burbujas en líquido a altos números de Re confinando los efectos viscosos en dos delgadas capas límites dentro y fuera de la burbuja.

Computó numéricamente su expresión analítica y obtuvo para burbujas elevándose en agua a temperatura ambiente una distribución de velocidad en el plano ecuatorial dentro de las capas límites semejante a la que se muestra en la fig. 6 .

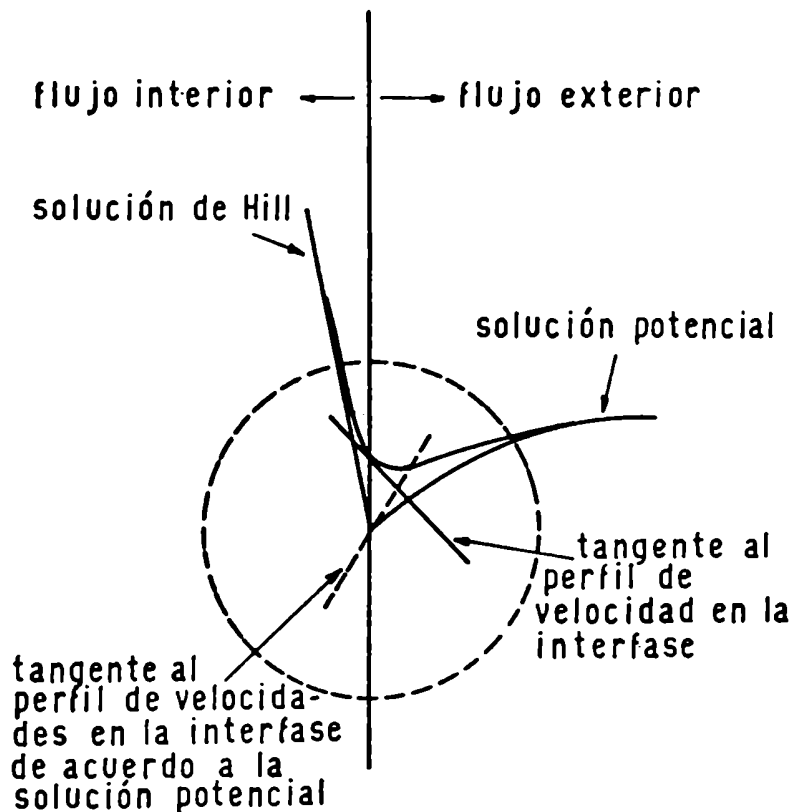


Fig. 6 Distribución de velocidad tangencial en las capas límites (Chao).

Las capas límites obviamente se vuelven más delgadas a medida que aumenta el Re .

Ya para $Re = 300$, el error al usar dentro de la burbuja la solución invíscida de Hill es muy pequeño, ya que esta solución

casi coincide con la obtenida por Chao.

Por esta razón en el análisis que se hace posteriormente en este trabajo se adopta como perfil de velocidades en el interior de la burbuja los torbellinos de Hill.

2.5 Comprobación experimental de los perfiles de velocidad

Hartunian y Sears (14) observaron que la solución irrotacional a altos números de Re es una buena aproximación del flujo exterior a las burbujas.

La existencia de la circulación toroidal del gas dentro de las burbujas fue comprobada experimentalmente mediante estudios fotográficos. Garner y Hamerton (15) agregando niebla de cloruro de amonio durante la formación de las mismas reportaron la existencia de corrientes circulatorias en burbujas elevándose en líquidos.

La forma del flujo circulatorio coincide con la solución teórica de los torbellinos obtenida a través de la condición de igualdad de velocidad tangencial en la interfase.

El hecho que las burbujas, por encima de un cierto diámetro presenten una circulación vigorosa indica que los coeficientes de transferencia en el interior de las mismas se vean alterados respecto de los calculados para esferas rígidas.

Filla y col. (16) utilizando anemómetro de hilo caliente y realizando además experiencias con nubes de humo revelaron la existencia de circulación toroidal dentro de grandes burbujas (tipo "slug").

CAPITULO 3

COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MATERIA EN BURBUJAS CON RESISTENCIA EXTERNA

3.1 Introducción

En este capítulo, se determina el coeficiente de transferencia k_x por vía teórica y experimental ya que este dato es necesario, como se verá posteriormente para el cálculo de k_y .

En el estudio teórico se compara la solución de la ecuación diferencial para la transferencia de materia en la fase continua, con la obtenida aplicando al sistema la teoría de Higbie.

En el estudio experimental, se verifica dicha correlación y se la compara con la obtenida por otros autores.

El método experimental utilizado en este trabajo es fotográfico y los datos obtenidos en el laboratorio han sido procesados en computadora.

3.2 Estudio teórico

3.2.1 Modelos teóricos para el cálculo del coeficiente de transferencia

En el caso de absorción de un gas A, poco soluble en un líquido, la resistencia a la transferencia se halla en este último.

En la bibliografía es frecuente encontrar definido el coeficiente de transferencia de materia en fase líquida mediante la siguiente expresión:

$$N_{A0} = k_L (C_{A0} - C_{Ab}) \quad (3.1)$$

donde C = concentración molar

El coeficiente k_L puede relacionarse con el k_x , definido este último a través de la expresión (1.3) haciendo $N_{Bo} = 0$.

$$N_{Ao} = \frac{k_x (x_{Ao} - x_{Ao})}{1 - x_{Ao}} \quad (3.2)$$

Como el gas A es poco soluble $x_{Ao} \ll 1$, además, si la concentración total en la película líquida (C) es constante puede escribirse:

$$x_{Ao} - x_{Ab} = \frac{C_{Ao} - C_{Ab}}{C} \quad (3.3)$$

La relación entre los coeficientes está dada por:

$$k_L = \frac{k_x}{C} \quad (3.4)$$

k_L a diferencia de k_x , involucra no sólo la parte difusiva sino también la convectiva.

Varias teorías se han desarrollado relacionando la transferencia de masa con la difusividad molecular.

La teoría de Lewis y Whitman supone transferencia en estado estacionario a través de las películas líquida y gaseosa cercanas a la interfase.

Toda la resistencia se supuso concentrada en dichas películas, y afuera se supuso mezclado total.

Los coeficientes individuales pueden expresarse:

$$k = \frac{D}{\ell} \quad (3.5)$$

donde ℓ : espesor de la película.

Higbie (17) postuló que la transferencia ocurre por un proceso de penetración en un medio semiinfinito, en el cual la composición inicial del líquido es uniforme. El coeficiente de transferencia esta dado por:

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L}{\pi t_c}} \quad (3.6)$$

donde:

t_c : es el tiempo de contacto entre los dos elementos de fluido.

Danckwerts (18) modificó la teoría de Higbie suponiendo una velocidad constante de renovación superficial s

$$k_L = \sqrt{D_L s} \quad (3.7)$$

Toor y Marcello (19) enunciaron una teoría más general; suponiendo transferencia en estado no estacionario, en un elemento de fluido de longitud L , derivaron las siguientes expresiones:

$$k_L = \sqrt{\frac{D_L}{\pi t_c}} \left(1 + 2 \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-i^2 L^2}{D t_c}\right) \right) \quad (3.8)$$

$$k_L = \frac{D_L}{L} \left(1 + 2 \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(-i^2 \pi^2 \frac{D t_c}{L^2}\right) \right) \quad (3.9)$$

La primera de estas expresiones converge rápidamente para cortos tiempos de contactos y la segunda para largos tiempos de exposición.

La aplicación de las ecuaciones rigurosas de Toor y Marcello en problemas reales de transferencia de masa (especialmente en destilación) es limitado ya que es dificultoso determinar el valor de L .

Para la fase líquida la penetración dentro de un medio semi-

infinito es una aproximación cercana a las condiciones reales y su uso es más conveniente que en la fase gaseosa donde la burbuja no puede comportarse como un medio semiinfinito.

3.2.1.1 Aplicación de las teorías al cálculo del coeficiente de transferencia en fase líquida

Para la transferencia de materia desde burbujas a líquidos el corto tiempo de contacto entre el vapor y el líquido hace posible la aplicación de la teoría de Higbie.

Un tiempo de contacto adecuado para la aplicación de esta teoría, es el basado en el tiempo que tarda una burbuja en elevarse a través de su propio diámetro.

El valor de k_L durante el ascenso de la burbuja resulta entonces:

$$k_L = 2 \sqrt{\frac{D_L v_\infty}{\pi D}} \quad (3.10)$$
$$k_x = 2 \sqrt{\frac{D_L v_\infty}{\pi D}} \quad C$$

En estas expresiones se ha hecho:

$$t_c = \text{tiempo de contacto} = \frac{\text{diámetro de la burbuja}}{\text{velocidad de ascenso}} = \frac{D}{v_\infty}$$

Además:

D_L = Difusividad efectiva en el líquido.

Este valor del coeficiente fue obtenido teóricamente por diversos autores, quienes llegaron por distintas vías a la misma correlación.

3.2.2 Solución de la ecuación diferencial para la transferencia de calor u materia

La velocidad de transferencia de materia o calor desde burbujas hacia la fase continua puede ser analizada rigurosamente si las burbujas son esféricas y se elevan en línea recta.

Los primeros trabajos que estudiaron difusión desde burbujas en movimiento supusieron que la principal resistencia está en la fase continua.

La primera solución analítica se debe a Boussinesq (20) que obtuvo una expresión para el coeficiente de transferencia de calor o materia externo de una burbuja cuya temperatura o concentración en la superficie es constante y se mueve estacionariamente en un campo de flujo inviscido e irrotacional válido a altos Re .

Levich (21) predijo el flujo difusional desde una burbuja o gota en movimiento.

Ruckenstein (22) resolvió el problema de transferencia de calor entre una burbuja de vapor en movimiento y el líquido en ebullición que la genera llegando a la misma solución que los dos investigadores anteriores.

Se puede plantear la siguiente ecuación diferencial en términos de concentración o temperatura válida para la capa límite difusional o térmica que se forma alrededor de la burbuja.

En términos de concentración resulta:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v_r \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial c}{\partial \theta} - \frac{D}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad (3.11)$$

La posibilidad del estado no estacionario radica en el hecho que el radio de la burbuja cambie, variando el campo de velocidades y éste a su vez el de concentraciones.

Si se supone que el radio varía lentamente el término transitorio se desprecia. Esta es la hipótesis pseudoestacionaria.

Otra simplificación es escribir el aporte difusional en términos de geometría plana puesto que el espesor de la capa límite es mucho menor que el radio de curvatura de la burbuja.

Esto es válido si el número de Pe $\gg 1$ (Pe = Re Sc).

En este caso el perfil de velocidades puede aproximarse por las expresiones correspondientes a un fluido ideal.

Como la ecuación es válida sólo en la zona cercana a la burbuja, se define una nueva coordenada u , que es la distancia medida desde la superficie de la burbuja :

$$u = r - R$$

Luego:

$$v_r \approx -3 v_\infty \frac{u}{R} \cos \theta$$

(3.12)

$$v_\theta \approx \frac{3}{2} v_\infty \sin \theta$$

Las condiciones de contorno son:

$$c = c_b \quad r \rightarrow \infty$$

$$c = c_0 \quad r = R$$

como $\frac{u}{R} \ll 1$ $\frac{v_\theta}{r} \frac{\partial c}{\partial \theta} \approx \frac{v}{R} \frac{\partial c}{\partial \theta}$

Con estas simplificaciones la ecuación diferencial (3.11) resulta:

$$- 3 \frac{v_{\infty}}{R} \frac{u}{\cos \theta} \frac{\partial c}{\partial r} + \frac{3}{2} \frac{v_{\infty}}{R} \frac{\partial c}{\partial \theta} \sin \theta - \mathcal{D} \frac{\partial^2 c}{\partial r^2} \quad (3.13)$$

La solución a esta ecuación es:

$$\frac{c - c_o}{c_b - c_o} = \operatorname{erf} \frac{\frac{3}{2} v_{\infty} R u \sin^2 \theta}{2 \sqrt{\frac{3}{2} v_{\infty} R^3 \left(\frac{2}{3} - \cos \theta + \frac{\cos^3 \theta}{3} \right)}} \quad (3.14)$$

El flujo de materia en la superficie de la burbuja:

$$N = -\mathcal{D} \frac{\partial c}{\partial u} \Big|_{u=0}$$

Derivando la expresión (3.14) resulta:

$$N = \left(\frac{\frac{3}{2} v_{\infty} \mathcal{D}}{R} \right)^{1/2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/2} \frac{(1 + \cos \theta)}{(2 + \cos \theta)^{1/2}} (c_b - c_o) \quad (3.15)$$

La materia transferida en la unidad de tiempo se obtiene integrando la ecuación (3.15) sobre toda la superficie de la burbuja.

$$W = 2 \pi R^2 \int_0^{\pi} N \sin \theta d\theta = 8 \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} \left(\frac{\mathcal{D} v_{\infty}}{R} \right)^{1/2} R^2 \quad (3.16)$$

El coeficiente de transferencia de materia queda definido a través de:

$$W = k_x 4 \pi R^2 (x_o - x_b) \quad (3.17)$$

De (3.17) y (3.3) surge:

$$k_x = \frac{W}{4 \pi R^2} \frac{C}{(C_o - C_b)}$$

Reemplazando el valor de W dado por (3.16) se obtiene:

$$k_x = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{D v_{\infty}}{2 R} \right)^{1/2} C \quad \text{que coincide con (3.10)}$$

Introduciendo los números adimensionales característicos en transferencia de materia:

$$Sh = \frac{k_x 2 R}{C D}$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D}$$

$$Pe_{AB} = Re Sc = \frac{2 v_{\infty} R}{D}$$

Resulta la siguiente correlación:

$$Sh = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/2} Pe_{AB}^{1/2} \quad (3.18)$$

3.3 Estudio experimental

3.3.1 Método de medida

Las técnicas experimentales para el estudio de transferencia de materia en burbujas individuales fueron aplicadas casi en su totalidad hasta el presente al estudio del coeficiente de transferencia correspondiente a la fase continua, exterior a la burbuja.

El primer estudio experimental fue realizado por Hamerton y Garner (23) en burbujas de etileno, oxígeno, dióxido de carbono, e hidrógeno en glicerol y agua.

El estudio de la transferencia de materia en burbujas de gran tamaño (0,8 a 4,2 cm de diámetro) fue realizado por Baird y Davidson (24) en el sistema dióxido de carbono - agua utilizando un registro fotográfico continuo del cambio de volumen de la burbuja.

Deindoerfer, y Humphrey (25) y Mundkur (26) usaron cámaras móviles para registrar la historia de la burbuja, en un sistema dióxido de carbono-agua.

Leonard y Houghton (27) hicieron lo propio con burbujas de óxido nítrico y etileno en agua.

Calderbank y Lochiel (28) estudiaron la transferencia en burbujas de dióxido de carbono en agua, midiendo fotográficamente el área transversal de la burbuja y el cambio de presión en el espacio de aire encerrado en el tope de la columna, el cual es causado por el cambio en el nivel de líquido cuando la burbuja se desprende y modifica su volumen. Midieron en forma continua la diferencia de presión entre el espacio de aire encerrado y la atmósfera con un micromanómetro conectado a un registro. Esa medición de la diferencia de presión y su derivada en el tiempo se usaron para calcular el coeficiente de transferencia.

Garbarini y Tien (29) compararon el método de la presión y el fotográfico obteniendo por ambos procedimientos coeficientes de transferencia para dióxido de carbono en agua.

En este trabajo se intentó utilizar el método de la presión pero las dificultades experimentales generadas por la carencia de un transductor de presión suficientemente sensible, condujeron a la elección del método fotográfico. El estudio fue realizado en burbuja de dióxido de carbono absorbiéndose en agua.

3.3.2 Equipo experimental: Diseño de la columna de absorción

La columna de absorción utilizada para las experiencias fue construida en acrílico cristal, de base cuadrada y de caras planas.

De este modo, se trató de evitar el efecto de distorsión óptica que produciría la curvatura de un tubo y que dificultaría la obtención de datos acerca del tamaño y forma de las burbujas mediante el método fotográfico.

La determinación de la longitud de la columna (1 m.) surgió de la estimación del tiempo necesario para que la burbuja de dióxido de carbono disminuyera apreciablemente su tamaño, por efectos de la absorción en agua.

Para obtener este dato, se utilizaron valores del coeficiente de transferencia hallados previamente por otros autores con el objeto de contar con una información estimativa.

Selección del diámetro del orificio de salida de la burbuja

La elección del diámetro del orificio depende del tamaño de la burbuja que se desea producir.

Para obtener la relación entre ambas magnitudes se plantea un balance entre el peso y el empuje que sufre la burbuja y los efectos de tensión superficial en el orificio de salida.

No reconociendo fuerzas viscosas e inerciales resulta:

$$\frac{\pi}{6} D_e^3 (\rho_L - \rho_g) g = \pi d \sigma \quad (3.19)$$

Donde:

D_e = diámetro equivalente de la burbuja.

d = diámetro del orificio.

ρ_L = densidad del líquido.

ρ_g = densidad del gas.

σ = tensión interfacial líquido - gas .

g = aceleración de la gravedad.

luego:

$$d = \frac{D_0^3 \epsilon (\rho_L - \rho_g)}{6 \sigma} \quad (3.20)$$

En destilación los tamaños de las burbujas oscilan entre 0,3 y 1 cm. de diámetro equivalente (4).

Resulta interesante conocer como varía la forma, la trayectoria y la velocidad terminal de las burbujas en función de su diámetro equivalente para encuadrar las que son objeto de este estudio.

Los grupos adimensionales que intervienen se deducen a partir de las siguientes consideraciones:

El conjunto de propiedades en términos de las cuales se pueden interpretar datos experimentales para burbujas son:

$$\rho_g, \rho_L, \mu_g, \mu_L, \sigma, \epsilon$$

como las relaciones:

$$\frac{\rho_g}{\rho_L}, \frac{\mu_g}{\mu_L}$$

son pequeñas, se pueden despreciar las propiedades del gas.

Los restantes parámetros físicos son agrupados por Moore (11) formando los siguientes números adimensionales:

$$Re = \frac{D_0 v_{\infty} \rho_L}{\mu_L}$$

$$We = \frac{\sigma}{D_0 v_{\infty}^2 \rho_L}$$

$$M = \frac{Fr}{Re^4 We^3} = \frac{\epsilon \mu^4}{\rho \sigma^3}$$

donde:

$$Fr = \frac{\epsilon D_0}{v_{\infty}^2}$$

M es una relación adimensional que depende fundamentalmente

de la viscosidad del líquido.

El agua es un líquido de M bajo, del orden de 10^{-10} .

El We da la relación entre las fuerzas de tensión superficial que mantienen la forma de la burbuja y las fuerzas de presión hidrodinámica. Si el $We > 1$ la burbuja adopta forma esférica, ello implica que su energía superficial sea un mínimo.

Rosenberg (30) realizó experiencias sobre velocidad terminal y forma de burbujas de aire en agua encontrando que éstas son esféricas hasta $Re = 400$.

Haberman y Morton (7) enunciaron que hasta $Re = 275 - 300$ las burbujas de gas en agua mantienen su forma esférica.

En general, puede afirmarse que en agua, burbujas mas pequeñas que $0,1$ cm de D_b , son aproximadamente esférica y ascienden con trayectoria rectilínea.

Definiendo el factor de fricción f_b para burbujas a través de la siguiente expresión:

$$\frac{\pi}{6} (D_b)^3 (\rho_L - \rho_g) g = f_b \frac{1}{2} \rho_L v_{\infty}^2 \pi \frac{D_b^2}{4}$$

y despreciando ρ_g frente a ρ_L se obtiene:

$$f_b = \frac{4}{3} \frac{D_b}{v_{\infty}^2} g \quad (3.21)$$

Si se grafica el factor de fricción para burbujas ascendiendo en agua vs Re , se obtiene:

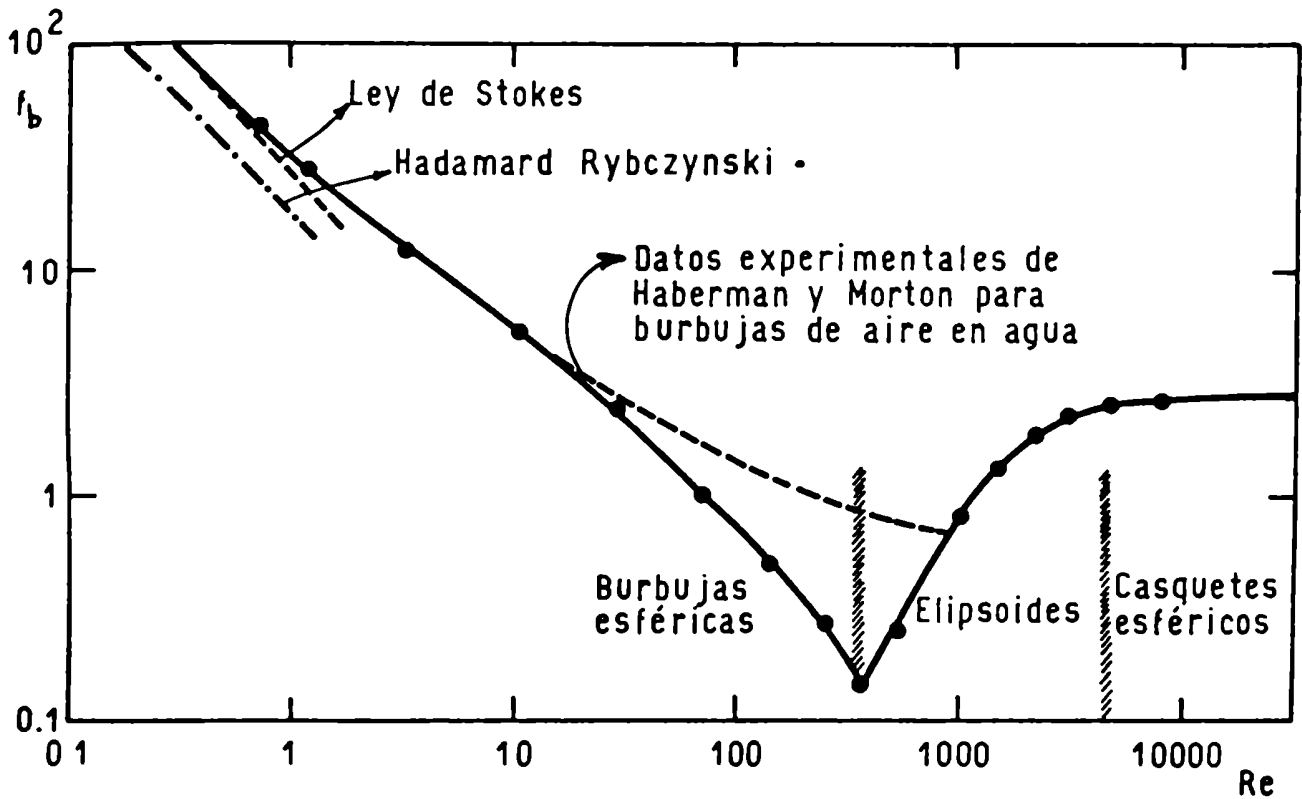


Fig. 7 Factor de fricción para burbujas en agua .

En esta figura se observa un mínimo en la curva hacia Re 300 a 400 . Ese mínimo en la curva del arrastre es el responsable del máximo en la curva de v_{∞} vs. D_e que se muestra más abajo.

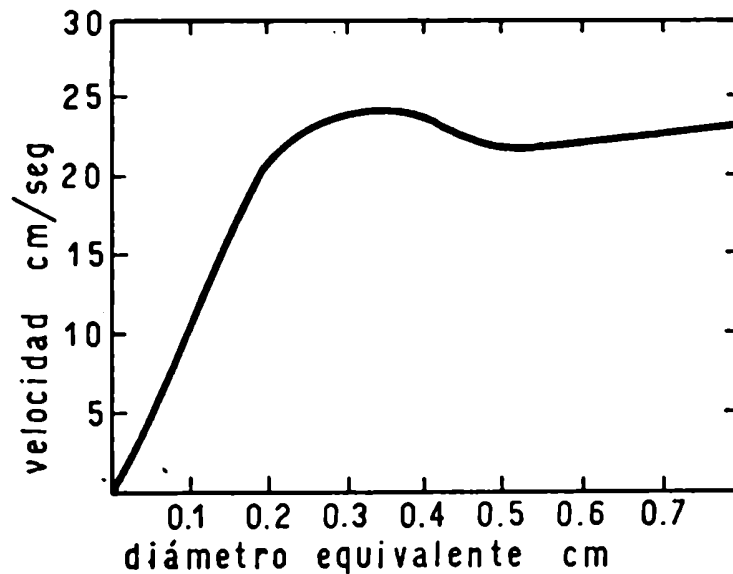


Fig. 8 Velocidad de ascenso de burbujas en agua .

Este máximo determina un diámetro equivalente crítico de 0,1 cm. según Heffer (31) a 0,16 cm. según Bryn (32) para el cual la burbuja se achata y toma forma lenticulada que puede aproximarse geométricamente a un esferoide óblongo.

La trayectoria comienza a ser espiralada. El paso y la amplitud de la hélice son ambas aproximadamente igual a dos veces el diámetro equivalente de la burbuja.

Cuando $D_e > 1$ cm. las burbujas toman forma de sombrilla estable en su parte frontal y fluctuante en su parte inferior. Estas ascienden con trayectoria rectilínea.

Coppus y Rietma (33), realizaron una descripción generalizada de la forma y velocidad de las burbujas ascendiendo en líquidos newtonianos.

Resulta ilustrativo representar la excentricidad de las burbujas e definida como el cociente entre el semieje mayor a y el semieje menor b en función de D_e .

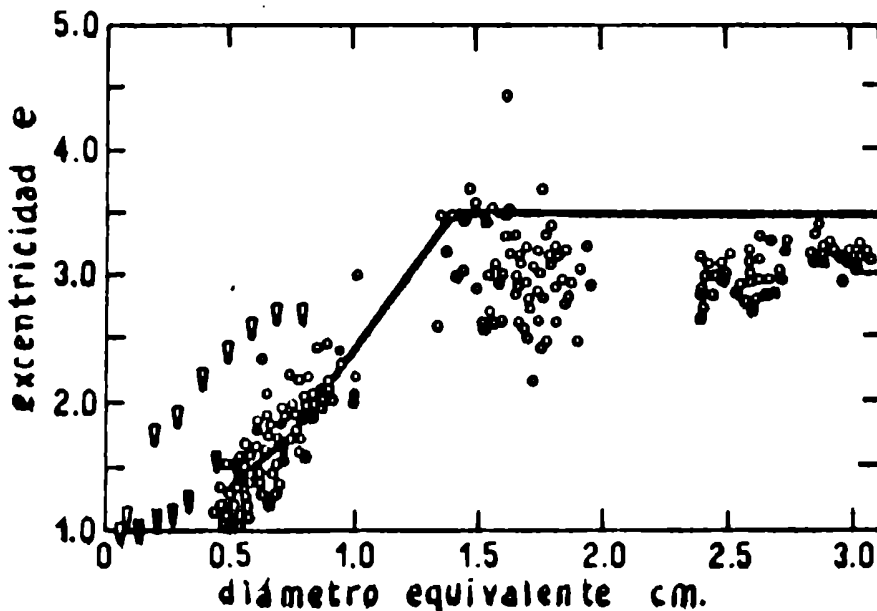


Fig. 9 Excentricidad de burbujas en agua.

- Tadaki y Maeda (35)
- ∇ Rosenberg (30) : aire en agua
- ∇ Siemes (36) : aire en agua
- Li (37) : oxígeno en agua
- Calderbank y Lochiel (28) : CO_2 en agua

De este análisis surge que en destilación las burbujas son oblongas y con trayectoria helicoidal.

En el estudio para la obtención del coeficiente externo se trabajó con un diámetro de burbuja medio representativo de los que aparecen usualmente en destilación .

Aplicando la fórmula (3.20) se calculó el diámetro de orificio necesario.

Tomando como dato $\sigma_{\text{aire-agua}} = 72 \text{ dinas / cm}$
resulta:

$$d = 0,1451 \text{ cm.}$$

Se eligió un diámetro de orificio de 0,15 cm. y se recalculó el diámetro de la burbuja que en este caso resultó $D_b = 0,405 \text{ cm.}$ valor aceptable respecto al propuesto.

Luego, $d = 0,15 \text{ cm.}$

Sección de la columna

En la elección de la sección de la columna se tuvo especial cuidado en que no haya efectos de pared que afecten la velocidad terminal de ascenso de la burbuja.

Para ello se consultó el trabajo de Uno y Kintner (34) donde aparecen determinaciones experimentales de los efectos de pared.

Los resultados obtenidos en ese trabajo se pueden usar para decidir el tamaño mínimo de la columna en la cual pueden tomarse datos sin que haya efectos de pared. Se recomienda que éste debe ser por lo menos de 10 a 15 veces el diámetro equivalente de la burbuja de mayor tamaño que se estudia.

En nuestro caso, se determinó que la columna de base cuadrangular tuviese 7,2 cm de lado.

3.3.3 Análisis de la sensibilidad del método: Sistema aire-agua

3.3.3.1 Objetivos

El objetivo de esta parte del trabajo experimental fue determinar la sensibilidad del método fotográfico utilizado en el estudio, registrando la expansión que sufre una burbuja que asciende en una columna líquida, en condiciones isotérmicas y sin transferir materia al exterior.

Este aumento de volumen se produce debido a que la presión dentro de la burbuja disminuye a medida que esta asciende ya que soporta una menor columna líquida.

3.3.3.2 Equipo experimental

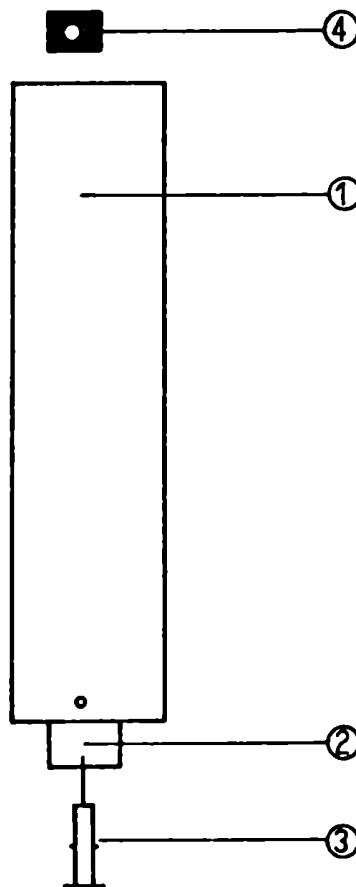


Fig. 10 Sistema aire - agua. Esquema del equipo experimental

1 Columna

3 Jeringa de inyección

2 Cámara de gas

4 Fuente de iluminación

Se utilizó una columna absorbidora con agua destilada como la descrita en 3.3.2 .

La parte superior se hallaba abierta a la atmósfera. En la parte inferior se montó el sistema de generación de burbujas que estaba constituido por una cámara de gas que presentaba en su parte superior una placa circular perforada para la salida de la burbuja y en su parte inferior una placa circular de goma siliconada ajustada por una tuerca de bronce con un orificio central. Por este orificio se introducía en la cámara a través de la goma una jeringa para gases Hamilton Bonaduz Schweiz de 5 ml, que originaba en forma instantánea la sobrepresión requerida para la aparición de una única burbuja en el orificio de salida; la perforación producida por la jeringa en la goma se cerraba al ser retirada la aguja.

Todo el sistema era desmontable ya que se roscaba en la base de la columna, lo que permitía poder cambiar las placas perforadas para la salida de las burbujas y variar de este modo el diámetro del orificio.

Para tomar las fotografías las caras laterales y posterior de la columna se cubrieron con papel blanco que hizo las veces de fondo de la imagen.

En las caras anterior y posterior se colocaron escalas graduadas a alturas definidas de la columna. Esto permitió conocer en cada fotografía la posición de la burbuja y la columna hidrostática que soportaba. Las escalas se utilizaron además, para obtener comparativamente las dimensiones de la burbuja.

El motivo de haber colocado dos escalas se debió a que de esta manera se podía corregir el error por perspectiva; se supuso que la burbuja se desplazaba a lo largo del eje central de la columna y sus dimensiones se obtuvieron como promedio de los valores suministrados por ambas escalas.

Las fotografías fueron tomadas con una cámara Kónica sistema reflex con lente de 52 mm. que llevaba adosada dos lentes de aproximación que permitían un acercamiento por debajo de los 24 cms.

Para las tomas instantáneas de la burbuja en distintas posiciones de la columna se utilizó como fuente de iluminación un flash ubicado en la parte superior de la columna.

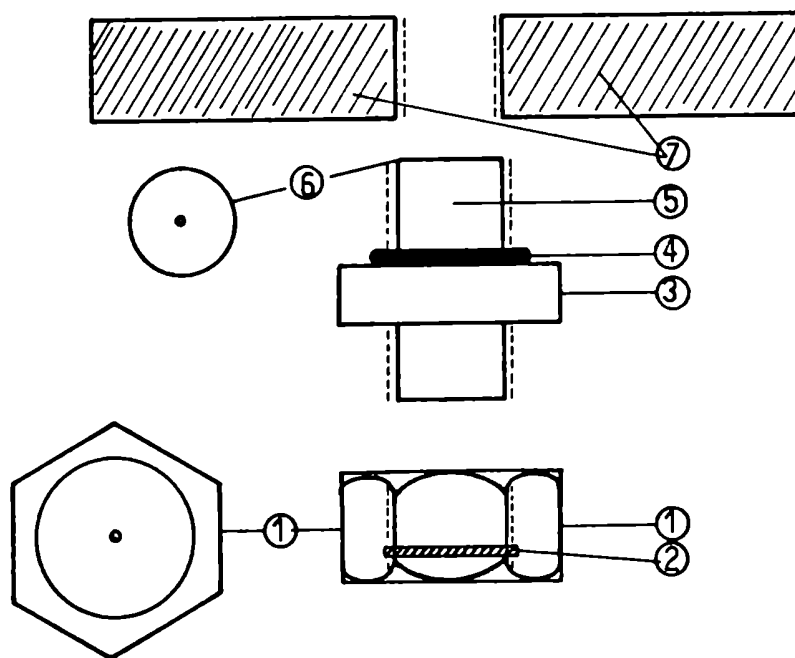


Fig. 11 Sistema de inyección

- | | |
|--|---|
| 1 - Tapa de bronce roscada con orificio central. | 4 - Asiento. |
| 2 - Disco de goma. | 5 - Cámara de gas. |
| 3 - Tope. | 6 - Disco de acrílico con orificio central para salida de burbujas. |
| 7 - Base de la columna. | |

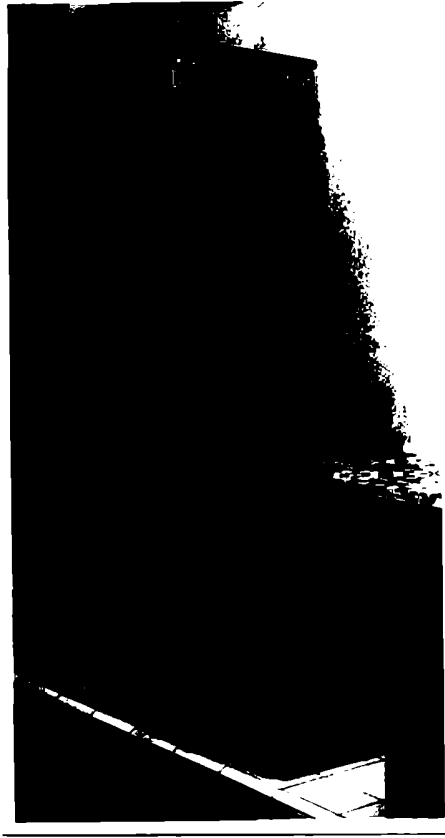


Fig. 12 Columna de absorción.

3.3.3.3 Método experimental

La sensibilidad del método fue probada en un sistema en el cual no había transferencia de materia.

Se analizó la expansión sufrida por una burbuja de aire al ascender en condiciones isotérmicas a través de un líquido.

Suponiendo comportamiento ideal para el gas de la burbuja resulta la siguiente igualdad entre los estados 1 y 2 :

$$P_1 V_1 = P_2 V_2$$

luego:

$$\frac{P_1}{P_2} = \frac{V_2}{V_1} \quad (3.22)$$

La relación de presiones fue comparada con la relación de volúmenes obtenida a partir de los datos experimentales.

Estos fueron extraídos de las fotografías tomadas a la burbuja en distintas posiciones durante su ascenso.

En ellas aparecían las escalas solidarias a la columna que proveyeron la información acerca de la localización de la burbuja y del tamaño de la misma.

El primero de estos datos era necesario para conocer la presión a la que se hallaba sometida. Esta se calculó utilizando la siguiente expresión :

$$P = P_{\Delta} + L - x_d \quad (3.23)$$

donde:

P: presión soportada por la burbuja. (cm. columna de agua)

P_{Δ} : presión en el tope de la columna. (cm. columna de agua)

L: altura de la columna líquida.

x_d : desplazamiento de la burbuja.

El cálculo de volumen se hizo asimilando la burbuja a un esferoide oblongo*(28), ésta constituye una buena aproximación geométrica.

Sobre las fotografías se midieron los ejes mayor (2a) y menor (2b). Los valores reales de estas magnitudes se obtuvieron por comparación con el tamaño de las escalas.

Con estos datos se calculó la excentricidad:

$$e = \frac{2a}{2b} \quad (3.24)$$

*esferoide oblongo: cuerpo formado por la rotación de una elipse alrededor de su eje menor.

y luego el diámetro equivalente definido por:

$$D_e = \frac{2a}{\sqrt[3]{e}} \quad (3.25)$$

Finalmente el volumen de la burbuja se obtuvo a partir de:

$$V = \frac{\pi}{6} D_e^3 \quad (3.28)$$

3.3.3.4 Obtención de datos

Se muestra a continuación la obtención de las dimensiones de las burbujas a partir de las fotografías tomadas.

En la figura 13 se presenta una burbuja ascendiendo en la parte inferior de la columna.

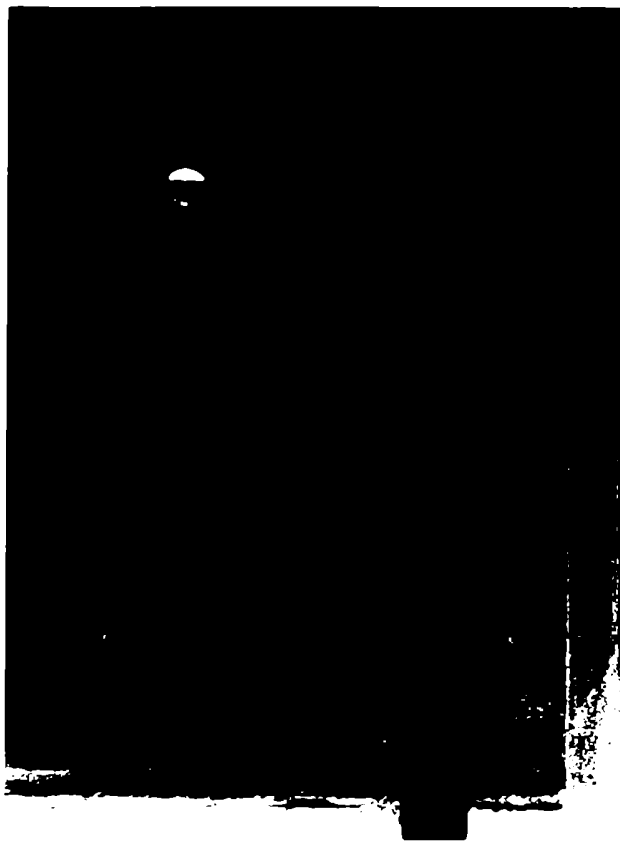


Fig. 13 Burbuja de aire en la parte inferior de la columna.

Sobre la fotografía se midieron los ejes mayor y menor, resultando:

eje mayor : $2a = 0,702$ cm.

eje menor : $2b = 0,595$ cm.

(las mediciones se efectuaron con un calibre)

excentricidad : $e = \frac{2a}{2b} = 1,17$

Para obtener las dimensiones reales de la burbuja se compararon estos valores con la separación existente entre dos divisiones sucesivas de las escalas adyacentes que representaba 0,5 cm.

Es decir a 0,5 cm. reales le correspondían:

en la escala frontal 0,905 cm.

en la escala posterior 0,730 cm.

valor promedio 0,817 cm.

Por lo tanto la dimensión real del eje mayor

$$2a = \frac{0,702 \cdot 0,5}{0,817} = 0,43 \text{ cm.}$$

El diámetro equivalente:(3.25)

$$D_e = \frac{0,43}{\sqrt[3]{1,17}} = 0,408 \text{ cm.}$$

El volumen de la burbuja:(3.26)

$$V = \frac{3,14}{6} 0,408^3 = 0,035 \text{ cm}^3$$

El valor obtenido para la excentricidad de la burbuja fue verificado en el gráfico de la figura 9 donde a $D_e = 0,408$ cm. le corresponde un $e = 1,2$.

Se supuso despreciable el efecto de la tensión superficial por lo tanto se hizo coincidir la presión existente en el interior de la burbuja con la presión hidrostática externa.

La burbuja de la figura 13 se hallaba localizada a una distancia $x_d = 6,5$ cm. del punto de desprendimiento.

En todas las experiencias que se llevaron a cabo, la presión en el tope de la columna $P_1 = 758$ mm de Hg = 997,36 cm. de columna de agua.

La altura de la columna líquida fue de 100 cm.

Aplicando la fórmula (3.23) resultó $P = 1090,86$ cm. col. agua.

La fotografía que se presenta a continuación fue tomada en la parte superior de la columna.

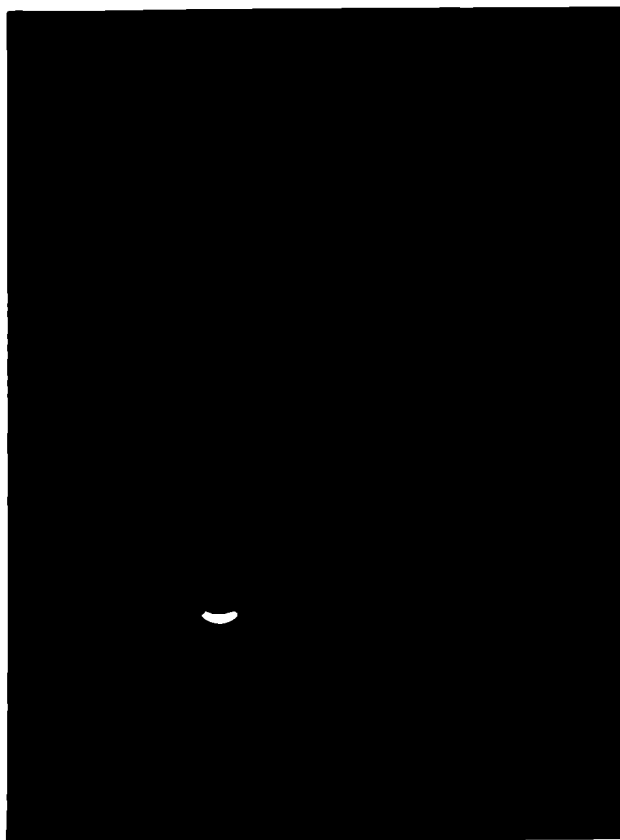


Fig. 14 Burbuja de aire en la zona superior de la columna

Los valores medidos sobre ella fueron:

$$2a = 0,69 \text{ cm.}$$

$$2b = 0,53 \text{ cm.} \quad \text{luego:}$$

$$e = 1,3$$

A 0,5 cm. le correspondían:

en la escala frontal 0,84 cm.

en la escala posterior 0,68 cm.

valor promedio 0,760 cm.

La dimensión real del eje mayor

$$2a = \frac{0,69 \cdot 0,5}{0,76} = 0,46 \text{ cm.}$$

El diámetro equivalente

$$D_e = \frac{0,46}{\sqrt[3]{1,3}} = 0,422 \text{ cm.}$$

El volumen de la burbuja

$$V = \frac{3,14}{6} 0,422^3 = 0,039 \text{ cm}^3.$$

En este caso $x_d = 84 \text{ cm.}$

Con las mismas consideraciones que en el caso anterior y aplicando la fórmula (3.23) resultó $P = 1013,36 \text{ cm.}$

Los resultados obtenidos a partir del análisis de las fotografías se muestran en la tabla I .

El estado 1 corresponde en todos los casos a la zona inferior de la columna y el estado 2 a la superior.

La relación de volúmenes se calculó según:

$$\frac{V_1}{V_2} = \frac{D_e^3}{D_e^3}$$

TABLA I

Datos experimentales del sistema aire - agua.

P_1 cm agua	P_2 cm agua	$\frac{P_2}{P_1} = \frac{V_1}{V_2}$ teor	D_{e1} cm	D_{e2} cm	$\frac{D_{e1}}{D_{e2}}$	$\frac{V_1}{V_2}$ exp	Error %
1090,86	1013,36	0,929	0,408	0,422	0,966	0,903	2,72
1092,36	1007,36	0,922	0,407	0,416	0,980	0,942	2,11
1091,36	1002,36	0,918	0,405	0,420	0,964	0,895	2,50
1091,86	1004,36	0,919	0,413	0,423	0,976	0,930	1,11
1092,86	1010,36	0,924	0,406	0,413	0,983	0,950	2,81
1090,36	1008,86	0,925	0,412	0,418	0,986	0,961	3,78

A través del análisis del cuadro de valores expuesto surge que el error relativo del método no llega al 4%.

3.3.4 Medida del coeficiente de transferencia; sistema dióxido de carbono - agua

Para la medición del coeficiente de transferencia de materia en burbujas con resistencia externa se utilizó un sistema constituido por burbujas individuales de dióxido de carbono, gas poco soluble absorbiéndose en agua.

Se tomaron fotografías a distintas alturas de la columna y a partir de los datos obtenidos se calculó el coeficiente de transferencia k_x .

3.3.4.1 Ecuaciones interpretativas del método de medida

El balance macroscópico de materia para la burbuja de dióxido de carbono es:

$$\frac{dn}{dt} = -N_o \cdot A \quad (3.27)$$

donde:

n = número total de moles que forman la burbuja.

La expresión para N_o está dada por la ecuación (3.2), con x_{Ao} despreciable frente a la unidad debido a la baja solubilidad del dióxido de carbono en agua.

Como la burbuja está formada por un solo componente se omite en este desarrollo la escritura del subíndice A, luego:

$$N_o = k_x (x_o - x_b) \quad (3.28)$$

reemplazando en (3.27) se obtiene:

$$\frac{d n}{d t} = - k_x (x_o - x_b) \cdot A \quad (3.29)$$

La composición del líquido en la interfase se halla en equilibrio con la del gas a través de la ley de Henry, por lo tanto:

$$x_o = \frac{P}{H} \quad (3.30)$$

donde:

H = constante de Henry

La fracción molar de dióxido de carbono en el seno del líquido x_b , se ha considerado despreciable en este trabajo experimental ya que el agua destilada se renovaba después de enviar no más de diez burbujas.

Con las consideraciones efectuadas la ecuación (3.29) resulta:

$$\frac{d n}{d t} = - k_x \cdot A \cdot \frac{P}{H} \quad (3.31)$$

Se supuso comportamiento ideal del gas en el interior de la burbuja, luego:

$$n = \frac{P \cdot V}{R \cdot T} \quad (3.32)$$

Derivando esta expresión respecto del tiempo y considerando temperatura constante se obtiene:

$$\frac{d n}{d t} = \frac{l}{R T} \left(P \frac{d V}{d t} + V \frac{d P}{d t} \right) \quad (3.33)$$

Igualando las ecuaciones (3.31) y (3.33) y despejando el coeficiente se llega a:

$$k_x = \frac{-H}{R T A} \left(\frac{d V}{d t} + \frac{V}{P} \frac{d P}{d t} \right) \quad (3.34)$$

Esta expresión vincula el coeficiente k_x con variables medibles durante la experiencia.

3.3.4.2 Medición de las variables

Para poder utilizar la fórmula (3.34) fue necesario evaluar P , $d P / d t$, V , $d V / d t$, y A a partir de los datos suministrados por la fotografía.

a) Cálculo de P

Se hizo del mismo modo que en las experiencias aire - agua. La presión P soportada por la burbuja se halla dada por:

$$P = P_a + \rho_L g (L - x_d) \quad (3.35)$$

b) Cálculo de $d P / d t$

Si se deriva la ecuación (3.35) respecto del tiempo se obtiene:

$$\frac{d P}{d t} = - \rho_L g \frac{d x_d}{d t}$$

Però $\frac{d x_d}{d t} = v_{\infty}$ = velocidad de ascenso de la burbuja.

Luego:

$$\frac{dP}{dt} = - \rho_L g v_{\infty} \quad (3.36)$$

La medida de v_{∞} se hizo también fotográficamente registrando y midiendo la trayectoria descrita por la burbuja durante un tiempo de apertura del diafragma de la cámara de 1/8 seg.

La iluminación en este caso fue provista por una lámpara traslúcida con filamento de tungsteno de 200 watts colocada en la parte superior del sistema.

Las tomas fotográficas se efectuaron a distintas alturas de la columna comprobándose la constancia de la velocidad de ascenso a lo largo de la misma.

Los datos que surgieron por esta vía fueron contrastados con valores de velocidad obtenidos cronometreando el tiempo transcurrido para que la burbuja recorra una determinada distancia.

c) Cálculo de V

El volumen de las burbujas fue calculado con la fórmula (3.26) de un modo análogo al efectuado en el sistema aire - agua.

d) Determinación de A

El área de transferencia para una burbuja asimilada en su forma a un esferoide oblongo está dada por (28)

$$A = 2\pi a^2 \left[1 + \frac{\ln(e + \sqrt{e^2 - 1})}{e \sqrt{e^2 - 1}} \right] \quad (3.37)$$

El cálculo de a y e se realizó en forma análoga a la descrita para el sistema aire - agua.

e) Determinación de dV / dt

Este dato se obtuvo gráficamente a partir de la curva volumen de la burbuja vs. tiempo.

La escala de tiempos se contruyó en base a la posición de la columna y a su velocidad de ascenso.

Las experiencias se efectuaron a una temperatura constante de 15 °C.

El valor de la constante de Henry para el sistema dióxido de carbono - agua a esa temperatura es:

$$H_{\text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}} \Big|_{15 \text{ °C}} = 1,22 \cdot 10^3 \frac{\text{atmósfera}}{\text{frac molar CO}_2}$$

3.3.4.3 Equipo experimental

Se utilizó la misma columna que para el sistema aire - agua.

Se tuvo especial cuidado en remover la carga líquida después de analizar a le sumo una decena de burbujas de dióxido de carbono.

El sistema de generación de burbujas sufrió ciertas modificaciones ya que la cámara de gas estanca utilizada anteriormente y en la cual se introducía una jeringa para generar las burbujas fue reemplazada por una cámara con gas circulante.

A dicha cámara se le adosó un deflector central para evitar zonas muertas que no permitieran desalojar el aire que las ocupaba.

El caudal de dióxido de carbono se reguló con una válvula a-
guja conectada a la entrada de la cámara de gas.

El cierre momentáneo de la llave 5 (figura 15) originaba el exceso de presión necesario para generar burbujas individuales en el orificio de salida.

Con el objeto de evitar la penetración de agua en la cámara de gas (ya que esta se encontraba a presión atmosférica durante la circulación del dióxido de carbono) se instaló un sistema de vacío en la parte superior de la columna. La presión en esa zona fue lo suficientemente baja para evitar la inundación de la cámara, pero se tomó en consideración que una disminución excesiva ocasionaría un reguero de burbujas con la consiguiente saturación

del líquido. Esta depresión se leía en un manómetro diferencial de mercurio intercalado en el sistema.

Para evitar oscilaciones en la presión originadas por la bomba de vacío y que afectaban la formación y dinámica de las burbujas se intercaló en la línea una válvula reguladora de presión.

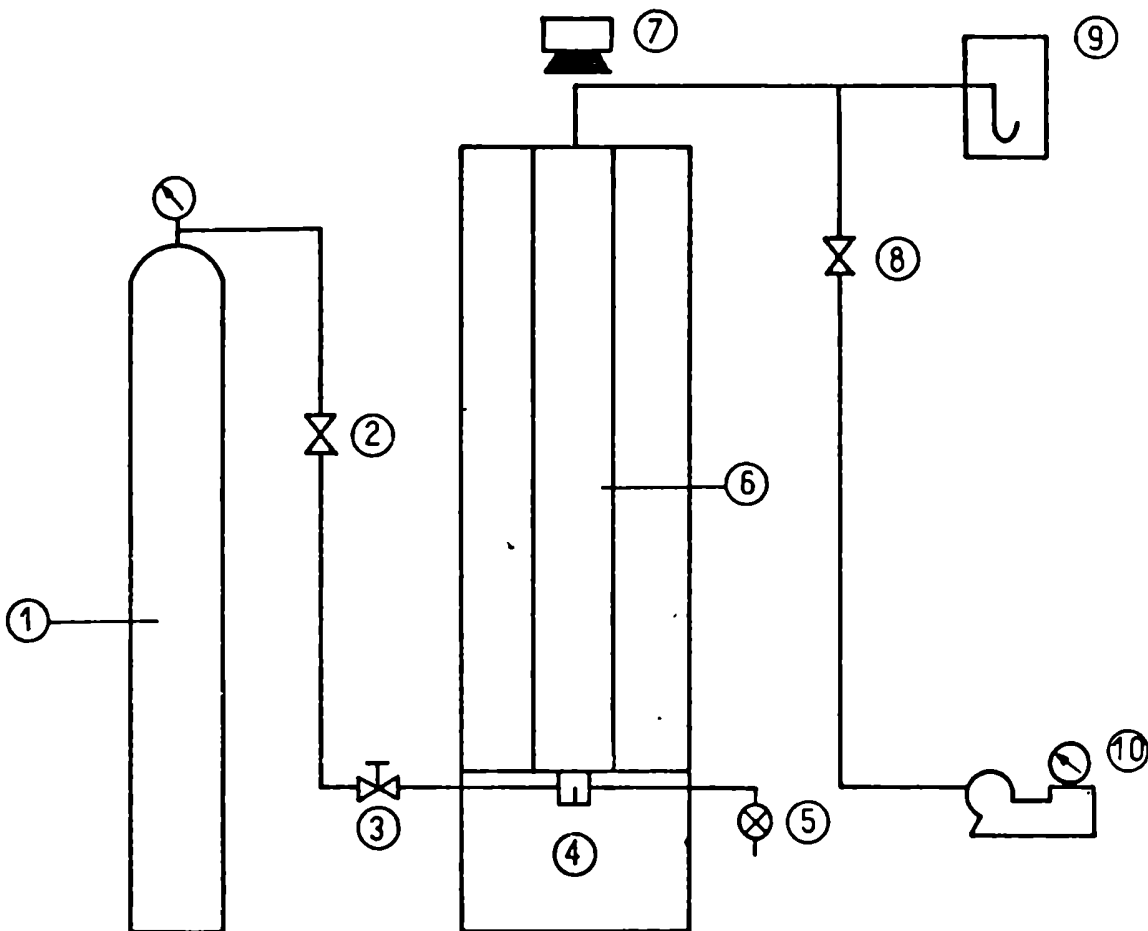


Fig. 15 Esquema del equipo experimental

- | | |
|--------------------------------|--------------------------------|
| 1 - Tubo de CO_2 . | 6 - Columna de absorción. |
| 2 - Válvula regul. de presión. | 7 - Fuente de iluminación. |
| 3 - Válvula regul. de caudal. | 8 - Válvula regul. de presión. |
| 4 - Cámara de gas. | 9 - Manómetro. |
| 5 - Llave de una vía. | 10 - Bomba de vacío. |

3.3.4.4 Resultados obtenidos

3.3.4.4.1 Dimensiones de las burbujas

Con el objeto de ejemplificar la obtención de estos datos se presentan a continuación tres fotografías tomadas durante el ascenso de una burbuja a través de la columna de absorción.

El procedimiento seguido es similar al utilizado en las experiencias con burbujas de aire en agua.

Al pie de cada fotografía se incluyen: la localización de la burbuja en la columna, la medida de los ejes mayor y menor, el factor de escala definido como el cociente entre la distancia real existente entre dos divisiones sucesivas de las escalas (0.5 cms) y el promedio de dichos valores medidos en las escalas anterior y posterior, y finalmente las dimensiones reales de la burbuja afectadas ya por el factor de escala.



Fig. 16 Burbuja de CO_2 a $x = 7,5$ cm.
d

Valores medidos sobre la fotografía:

$$2a = 0,974 \text{ cm.}$$

$$2b = 0,634 \text{ cm.}$$

$$\text{Factor de escala: } \frac{0,5}{1,06} = 0,471$$

Dimensiones reales:

$$2a = 0,458 \text{ cm.}$$

$$2b = 0,298 \text{ cm.}$$

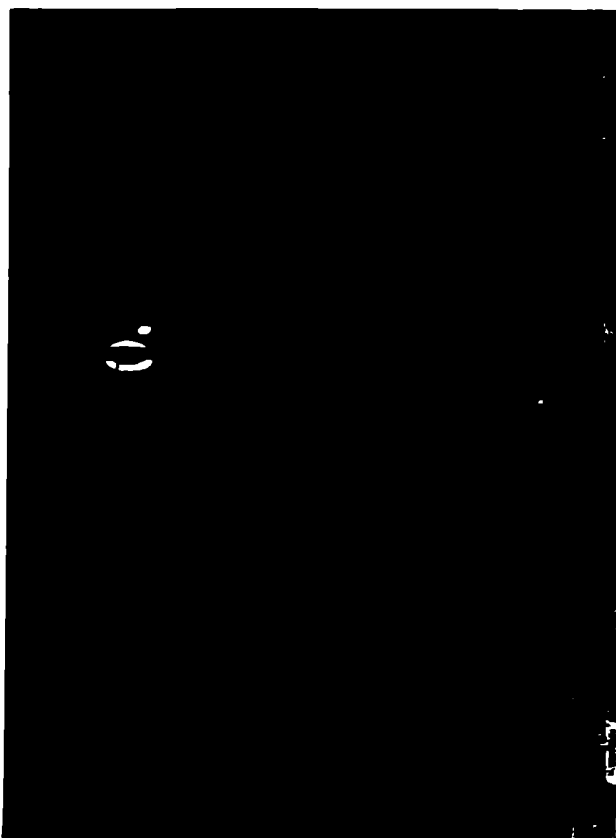


Fig. 17 Burbuja de CO_2 a $x_d = 23,5 \text{ cm.}$

Valores medidos sobre la fotografía:

$$2a = 0,664 \text{ cm.}$$

$$2b = 0,520 \text{ cm.}$$

$$\text{Factor de escala} = \frac{0,5}{0,865} = 0,578$$

Dimensiones reales:

$$2a = 0,384 \text{ cm.}$$

$$2b = 0,300 \text{ cm.}$$

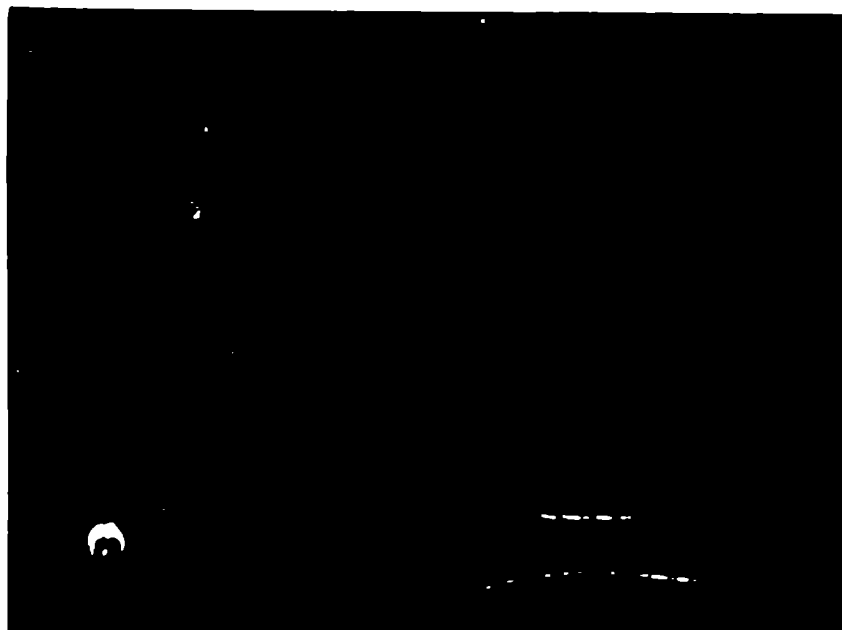


Fig. 18 Burbuja de CO_2 a $x_d = 82 \text{ cm.}$

Valores medidos sobre la fotografias:

$$2a = 2b = 0,55 \text{ cm.}$$

$$\text{Factor de escala: } \frac{0,5}{1,37} = 0,365$$

Dimensiones reales:

$$2a = 2b = 0,201 \text{ cm.}$$

3.3.4.4.2 Velocidad de ascenso

De acuerdo a lo expuesto en el punto 3.3.4.2 para medir la velocidad de ascenso de burbujas individuales se tomaron fotografías con un tiempo de apertura de diafragma de $1/8$ de seg.

A continuación se presenta una de ellas y el detalle del procedimiento seguido para la obtención del dato final.



Fig. 10 Velocidad de ascenso de burbujas individuales

Desplazamiento medido sobre la fotografía = 4,24 cm.

Factor de escala = 0,625

Desplazamiento real = 2,65 cm.

Velocidad de ascenso = $2,65 \times 8$ cm./seg. = 21,2 cm. / seg.

La velocidad se mantuvo aproximadamente constante a lo largo de la columna y se adoptó como valor promedio de todas las experiencias $v_{\infty} = 21,5$ cm. / seg.

3.3.4.4.3 Volúmen y área de burbujas individuales

Los datos de localización de la burbuja, velocidad de ascenso y tamaño de la misma obtenidos como se explicó anteriormente fueron volcados en la TABLA II. A partir de ello se calculó para cada burbuja, el tiempo de contacto, la excentricidad, el diámetro equivalente (ecuac. 3.25), el volúmen (ecuac. 3.26), y el área de transferencia (ecuac. 3.37)

3.3.4.4.4 Coefficiente de transferencia

Los valores de dV/dt necesarios para el cálculo del coeficiente de transferencia se obtuvieron en forma gráfica.

En la figura 20 se halla representada la curva de volúmen de la burbuja vs. tiempo de contacto.

Las variables que intervienen en el cálculo del coeficiente de transferencia de acuerdo con la ecuación (3.34) se volcaron en la TABLA III.

Las condiciones experimentales fueron:

T = temperatura de absorción = 15 °C = 288 °K

P_0 = presión en el tope de la columna = 923,7 cm. agua.

L = altura de la columna líquida = 97 cm. agua

De acuerdo con la expresión (3.35) la presión en términos de columna líquida se halla dada en cada punto por:

$$P = 923,7 + 97 - x_d = 1020,77 - x_d \text{ cm. agua}$$

Recordando que:

$v_{co} = 21,5 \text{ cm./seg.}$, y tomando en cuenta la ecuación (3.36) resultó un valor constante $dP/dt = - 21,5 \text{ cm. agua/seg.}$

Reemplazando las constantes en la ecuación (3.34) se obtiene la siguiente expresión para el cálculo del coeficiente externo:

$$k_x \left[\frac{\text{moles}}{\text{cm}^2 \text{ seg}} \right] = \frac{51,66 \cdot 10^{-3}}{A} \left(21,5 \frac{V}{P} + \frac{dV}{dt} \right)$$

TABLA II

Volumen y Area de burbujas individuales de CO_2 en agua

x_d (cm)	t (seg)	2a (cm)	2b (cm)	e	De (cm)	V_3 (cm^3)	A_2 (cm^2)
5,0	0,23	0,430	0,340	1,26	0,398	0,0330	0,504
6,0	0,28	0,453	0,294	1,54	0,393	0,0320	0,500
6,5	0,30	0,481	0,269	1,79	0,396	0,0325	0,525
7,0	0,32	0,486	0,265	1,83	0,398	0,0330	0,530
7,5	0,35	0,458	0,298	1,54	0,397	0,0327	0,512
17,0	0,79	0,402	0,308	1,31	0,368	0,0263	0,431
18,0	0,84	0,383	0,336	1,14	0,368	0,0263	0,424
18,5	0,86	0,390	0,327	1,30	0,367	0,0259	0,405
20,0	0,93	0,391	0,297	1,33	0,356	0,0236	0,404
23,5	1,09	0,384	0,300	1,28	0,354	0,0233	0,397
49,0	2,28	0,295	0,268	1,10	0,286	0,0123	0,257
50,0	2,32	0,292	0,278	1,05	0,288	0,0125	0,259
53,0	2,46	0,275	0,256	1,07	0,268	0,0108	0,226
54,0	2,51	0,284	0,275	1,03	0,281	0,0116	0,238
82,0	3,81	0,201	0,201	1,00	0,201	0,0042	0,127
83,0	3,86	0,200	0,200	1,00	0,200	0,0042	0,126
84,0	3,90	0,185	0,185	1,00	0,185	0,0033	0,107
85,0	3,95	0,191	0,191	1,00	0,191	0,0036	0,114

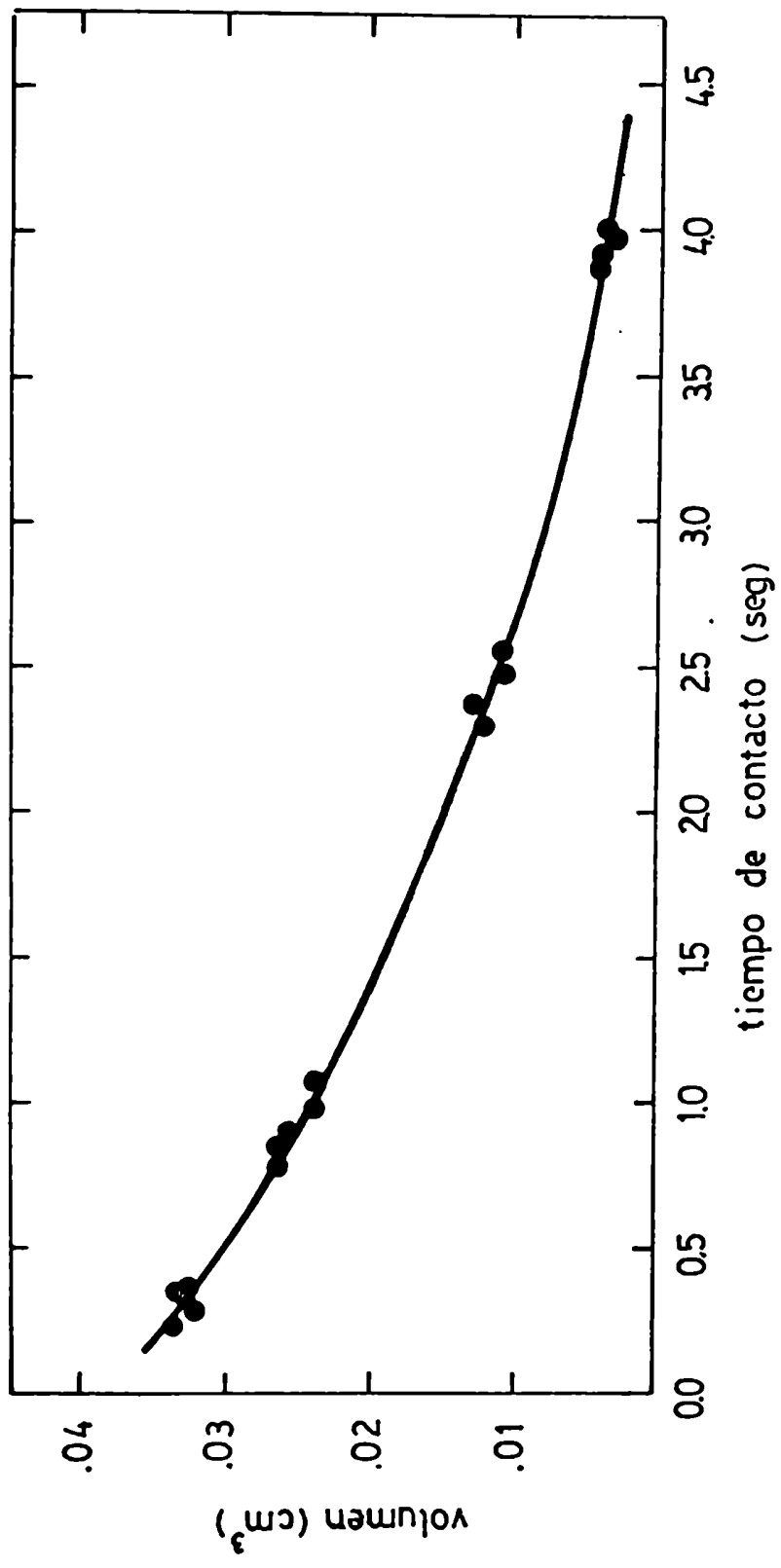


Fig. 20 Volumen de burbuja vs. tiempo de contacto

TABLA III

Coeficiente de transferencia externo

t (seg)	V (cm ³)	dV/dt (cm ³ /seg)	P (cm agua)	A (cm ²)	$k_x \cdot 10^2$ (mol/cm ² seg)
0,23	0,0330	0,0150	1015,8	0,504	0,154
0,28	0,0320	0,0150	1014,8	0,500	0,155
0,30	0,0325	0,0150	1014,3	0,525	0,148
0,32	0,0330	0,0150	1013,8	0,530	0,147
0,35	0,0327	0,0150	1013,5	0,512	0,151
0,79	0,0283	0,0120	1003,8	0,431	0,144
0,84	0,0263	0,0120	1002,8	0,424	0,146
0,86	0,0259	0,0120	1002,3	0,405	0,153
0,93	0,0236	0,0120	1000,8	0,404	0,154
1,09	0,0233	0,0120	997,3	0,397	0,156
2,28	0,0123	0,0080	971,8	0,257	0,161
2,32	0,0125	0,0080	970,8	0,259	0,159
2,46	0,0108	0,0070	967,8	0,226	0,160
2,51	0,0116	0,0070	966,8	0,238	0,152
3,81	0,0042	0,0040	938,8	0,127	0,163
3,86	0,0042	0,0040	937,8	0,126	0,163
3,90	0,0033	0,0035	936,8	0,107	0,169
3,95	0,0036	0,0035	935,8	0,114	0,158

El valor medio es: $k_x = 0,00155 \text{ mol/cm}^2 \text{ seg}$

3.4 Conclusiones

Los valores experimentales obtenidos en este capítulo para el coeficiente externo, muestran una buena concordancia con los de otros autores (28,29).

Calderbank y Lochiel (28) a partir de sus experiencias de absorción de dióxido de carbono en agua arribaron a la conclusión que el coeficiente externo en burbujas individuales cuyos D_e se encuentran comprendidos entre 0,4 y 1,9 cm es constante e igual a 0,028 cm/seg.

Por otra parte el valor promedio de k_L para burbujas en el rango $0,4 < D_e < 1$ cm, que resulta de aplicar la teoría de Higbie (17) a este sistema, siendo $D_{O_2 - H_2O} | 15^\circ C = 1,7 \cdot 10^{-5}$ cm/seg es de 0,0275 cm/seg.

Con el objeto de comparar estos valores de k_L con el de k_x obtenido en este trabajo debe utilizarse la relación (3.4).

La concentración total en el líquido C se toma aproximadamente igual a la del agua pura, $C = 0,055$ mol/cm³.

La Tabla IV muestra los valores de k_x en forma comparativa.

TABLA IV

Comparación de los valores del coeficiente

k_x mol/seg cm ²	Teoría Higbie	Calderbank	este trabajo
	0,00151	0,00154	0,00155

A través de este cuadro se observa una buena coincidencia en los resultados y con ello, otra prueba de la aplicabilidad de la teoría de Higbie (que a su vez coincide con la solución para flujo irrotacional) en el cálculo del coeficiente externo en burbujas individuales tales que $0,4 < D_e < 1$ cm.

Por otra parte queda demostrada la confiabilidad del método fotográfico que fue utilizado posteriormente en la medición del coef. interno.

CAPITULO 4

COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA DE MATERIA EN BURBUJAS CON RESISTENCIA INTERNA

4.1 Introducción

En este capítulo se obtiene por vía teórica y experimental una correlación para evaluar el coeficiente de transferencia de materia en el interior de burbujas.

La necesidad de haber efectuado este trabajo se debió a la gran disparidad de resultados que se obtenían al aplicar las distintas teorías.

La teoría de Higbie (17) se hace inaplicable para hallar el coeficiente de transferencia en el interior de una burbuja debido a que por su tamaño esta no puede ser considerada como un medio seminfinito.

Existen expresiones como la de Chu (38) que utilizando la teoría de Chilton y Colburn para el coeficiente de transferencia de masa llegó a la siguiente relación:

$$k_g = 0,023 G \text{ Re}^{-0,2} \text{ Sc}^{-2/3} \quad (4.1)$$

donde G velocidad del vapor
y en la que intervienen las propiedades del gas en el cálculo de los números adimensionales.

Esta expresión adolece de un importante defecto ya que la correlación de Chilton se utiliza en transferencia de calor en cañerías verticales y Chu asimiló el rosario de burbujas que sale de un orificio de un plato de destilación a un conducto de diámetro igual al diámetro del orificio.

Obviamente el coeficiente así calculado no puede aplicarse

a burbujas individuales.

Otro criterio fue el seguido por Geddes (40) quien utilizó la ecuación de Barrer (41) para difusión no estacionaria desde una burbuja sin circulación interna.

De acuerdo a ella:

$$k_g = \frac{R}{3 t_c} \ln \left(\frac{t_c}{\bar{t}^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^2} \exp \left(- \frac{2 i^2 \pi^2 t_c}{R^2} \right) \right) \quad (4.2)$$

donde t_c = tiempo de contacto de la burbuja.

En esta expresión se consideró estático el gas del interior de la burbuja es decir se despreció el movimiento de torbellinos que resulta importante en los rangos de Re con que se trabaja en un plato de destilación.

De lo expuesto, surge la necesidad de obtener una correlación más exacta para determinar k_y en burbujas individuales que incluya en su deducción el perfil de velocidades correcto.

4.2 Estudio teórico

En esta sección se obtiene teóricamente una correlación que vincula el Sh con el Pe para el interior de la burbuja con el objeto de poder calcular el coeficiente de transferencia de materia cuando la resistencia se halla localizada en la fase gaseosa.

A este resultado se arribó a través de la solución numérica de la ecuación de cambio de transferencia de materia para un solo componente planteada en el gas de la burbuja.

4.2.1 Planteo de la ecuación diferencial de transferencia de materia para el interior de la burbuja

Para el estudio de transferencia de materia con resistencia controlante en el gas se consideró una burbuja formada por dos

componentes: el componente A que es muy soluble en el líquido circundante y el componente B que no se absorbe en aquél.

El gas A, al ser altamente soluble en la fase continua presenta resistencia a la transferencia en el interior de la burbuja.

El flujo de A en un punto de la burbuja se halla dado por la suma de dos contribuciones:

- a) el flujo difusivo definido por la ley de Fick
- b) el flujo convectivo que acompaña el movimiento global del fluido es decir:

$$N_A = -C \mathcal{D}_{AB} \nabla x_A + x_A (N_A + N_B) \quad (4.3)$$

En el caso que la mezcla gaseosa sea diluída en el componente A, la distribución de velocidades puede suponerse igual a la que existiría si no hubiese transferencia de A y la ecuación de movimiento se desacopla de la de continuidad.

Luego, si C es uniforme la ecuación (4.3) resulta:

$$N_A = -\mathcal{D}_{AB} \nabla C_A + C_A v^*$$

donde :

$$v^* = \frac{C_A v_A + C_B v_B}{C_A + C_B}$$

pero como $C_A \ll C_B$ $v_B \approx v^* \approx v$

En consecuencia:

$$N_A = -\mathcal{D}_{AB} \nabla C_A + C_A v \quad (4.4)$$

La ecuación de continuidad para el componente A está dada por:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} = - \nabla \cdot N_A \quad (4.5)$$

reemplazando N_A por la ecuación (4.4) se obtiene:

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v \cdot \nabla c_A = D_{AB} \nabla^2 c_A \quad (4.6)$$

escrita en coordenadas esféricas y tomando por simplicidad $D_{AB} = D_g$

$$\frac{\partial c_A}{\partial t} + v_r \frac{\partial c_A}{\partial r} + v_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial c_A}{\partial \theta} = D_g \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial c_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial c_A}{\partial \theta} \right) \right) \quad (4.7)$$

donde se han eliminado los términos en φ ya que existe simetría a lo largo de esa coordenada.

Para resolver la ecuación diferencial (4.7) las componentes de la velocidad deben sustituirse por los torbellinos de Hill:

$$v_r = \frac{3}{2} v_\infty \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \cos \theta \quad (2.17)$$

$$v_\theta = - \frac{3}{2} v_\infty \left(1 - 2 \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \sin \theta$$

La condición inicial esta dada por una composición uniforme en toda la burbuja

$$c_A (r , \theta , 0) = c_{A i} \quad (4.8)$$

La condición de contorno establece que la concentración de A en la interfase gas líquido a cualquier tiempo es el valor de equilibrio

$$C_A (R, \theta, t) = C_{A0} \quad (4.9)$$

La ecuación diferencial puede adimensionalizarse si se define:

$$t^* = \frac{t D}{R^2}$$

$$r^* = \frac{r}{R}$$

(4.10)

$$C_A^* (r^*, \theta, t^*) = \frac{C_A (r, \theta, t) - C_{A0}}{C_{A1} - C_{A0}}$$

$$Pe_g = \frac{v_{\infty} R}{D_g}$$

Reemplazando en (4.7) los perfiles de velocidad dados por (2.17) y adimensionalizando según (4.10) resulta:

$$\frac{\partial C_A^*}{\partial t^*} - \frac{3}{4} Pe_g \left((1 - r^*)^2 \cos \theta \frac{\partial C_A^*}{\partial r^*} - \left(\frac{1 - 2r^{*2}}{r^*} \right) \sin \theta \frac{\partial C_A^*}{\partial \theta} \right) -$$

$$\frac{1}{r^{*2}} \frac{\partial}{\partial r^*} \left(r^{*2} \frac{\partial C_A^*}{\partial r^*} \right) + \frac{1}{r^{*2} \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial C_A^*}{\partial \theta} \right) \quad (4.11)$$

Las condiciones inicial y de contorno adimensionalizadas quedan

$$c_A^*(r^*, \theta, 0) = 1 \quad (4.12)$$

$$c_A^*(1, \theta, t^*) = 0$$

Esta ecuación diferencial puede resolverse para distintos valores del Pe y obtener de Qse modo en cada caso, los perfiles adimensionales de concentración que a su vez se relacionan con el Sh como se explica más abajo.

4.2.2 El coeficiente de transferencia de materia

Si se plantea el balance macroscópico de materia para el componente A de la burbuja en el caso que la transferencia se halle en el interior se obtiene

$$V \frac{d\bar{c}_A}{dt} = -k_y \frac{\bar{y}_A - y_{Ao}}{1 - y_{Ao}} A \quad (4.13)$$

donde:

$$\bar{c}_A = \frac{1}{V} \int_V c_A \, dv \quad ; \quad \bar{y}_A = \frac{\bar{c}_A}{C} \quad (4.14)$$

como $C_A \ll C_B$ será $C = \text{constante}$ y si se supone $y_{Ao} \ll 1$ resulta :

$$V \frac{d\bar{c}_A}{dt} = -\frac{k_y}{C} (\bar{c}_A - c_{Ao}) A \quad (4.15)$$

Para una burbuja esférica será :

$$k_y = \frac{R}{3} C \frac{d\bar{c}_A}{dt} \frac{1}{(\bar{c}_A - c_{Ao})} \quad (4.16)$$

Integrando la ecuación (4.16) en un intervalo de tiempo t y siendo

$$\tilde{k}_y = \frac{1}{t} \int_t^{t+dt} k_y dt \quad (4.17)$$

se obtiene

$$\tilde{k}_y = -\frac{R}{3} \frac{C}{t} \ln \frac{\bar{C}_A - C_{Ao}}{C_{Ai} - C_{Ao}} \quad (4.18)$$

En forma adimensional:

$$\tilde{Sh} = \frac{\tilde{k}_y}{C} \frac{2R}{\mathcal{D}} = \frac{2}{3} \frac{1}{t^*} \ln \frac{\bar{C}_A}{C_A} \quad (4.19)$$

4.2.3 Resolución de la ecuación diferencial

La solución de la ecuación diferencial es relativamente simple en los siguientes casos límites:

- a) $Pe = 0$, difusión pura sin aporte convectivo.
- b) $Pe = \infty$, que corresponde al modelo Kronig y Brink (42) en donde se supone que el tiempo de circulación de una partícula de materia a lo largo de la línea de corriente es menor que el tiempo que tarda la materia en difundir.

Sobre las líneas de corriente se producen líneas de isoconcentración. En ese caso la ecuación diferencial se resuelve por el método de separación de variables.

Como los valores de Pe en burbujas que ascienden en condiciones similares a las existentes en platos de destilación se encuentran en una zona intermedia resulta necesario obtener la solución completa de la ecuación diferencial y abarcar de este modo todo el rango de números de Pe .

Johns y Beckman (43) trabajando en extracción en gotas en flujo reptante con la distribución interna de velocidad dada por Hadamard (8) plantearon una ecuación diferencial similar a la

ecuación (4.11) para gotas que resolvieron numéricamente.

Mediante un adecuado cambio de variables fue posible transformar la ecuación diferencial (4.7) de difusión no estacionaria en burbujas con la distribución de velocidad dada por los 'terbellinos de Hill en la misma ecuación resuelta por Johns y Beckman (43) para gotas ya que la diferencia se halla a nivel de una constante numérica distinta.

La distribución de velocidad para flujo reptante de Hadamard está dada por :

$$\begin{aligned}
 v_r &= -K^2 \left(1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \cos \theta \\
 v_\theta &= K^2 \left(1 - 2 \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right) \sin \theta
 \end{aligned}
 \tag{4.20}$$

donde:

$$K^2 = \frac{1}{3} g (\rho_L - \rho_g) R^2 \frac{1}{3 \mu_g + 2 \mu_L}$$

que tiene la misma forma que la (2.17) ya que difiere solo en la constante K.

El inconveniente se salva definiendo un número de Pe modificado.

$$Pe'_g = \frac{3}{4} Pe_g$$

con lo que se logra que ambas soluciones numéricas coincidan.

A través de ello se observa que el \tilde{Sh} es función del tiempo como se muestra en la figura 21, alcanzando finalmente un valor constante.

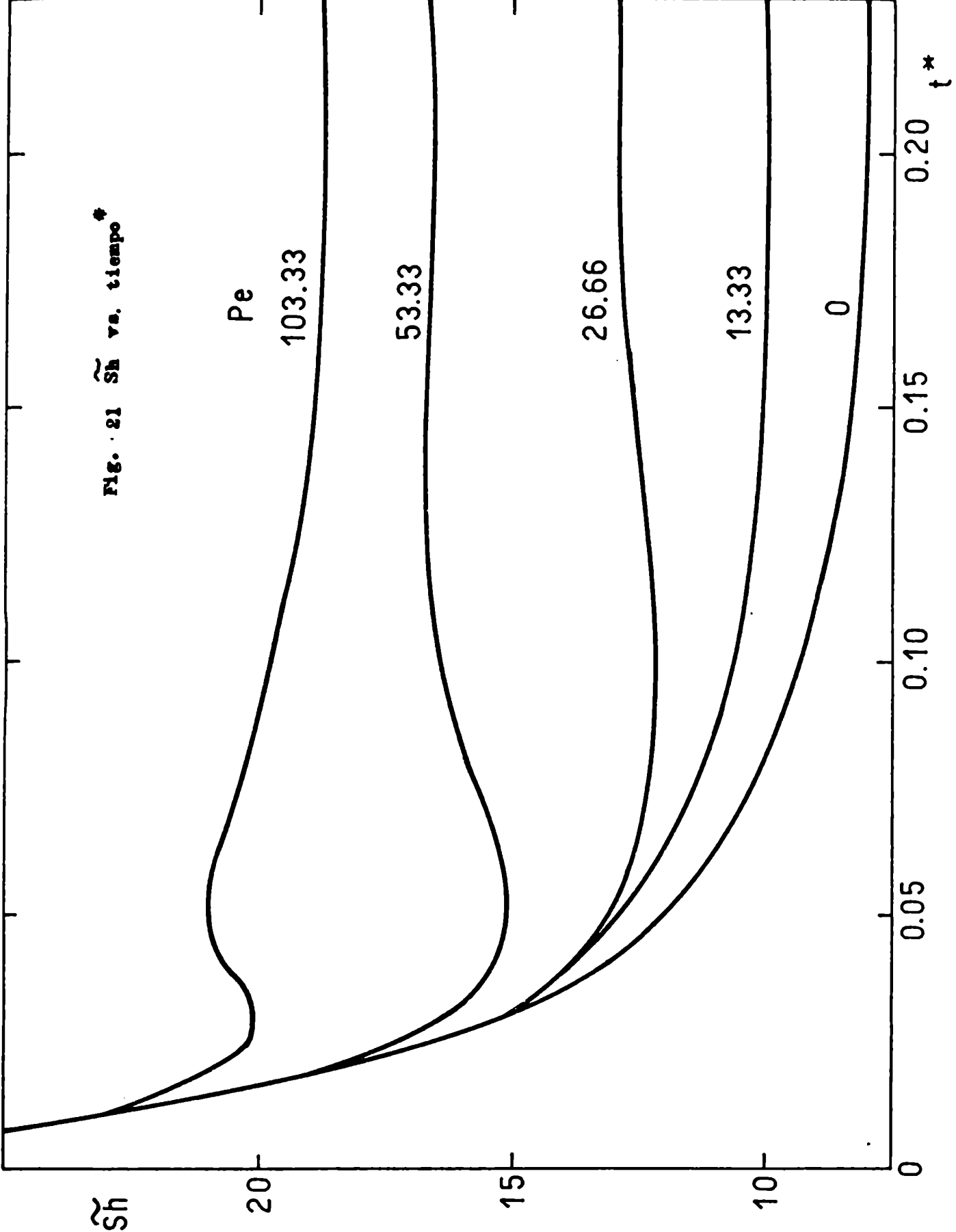


Fig. 21 \tilde{Sh} vs. tiempo*

Puede definirse por lo tanto:

$$Sh = \lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{Sh}$$

que incluye un valor constante del coeficiente de transferencia k_y .

La solución teórica del problema del cálculo del coeficiente de transferencia en burbujas con resistencia interna se presenta en forma gráfica en la figura 22 como Sh_{∞} en función del Pe .

Esta correlación se verifica a continuación en forma experimental.

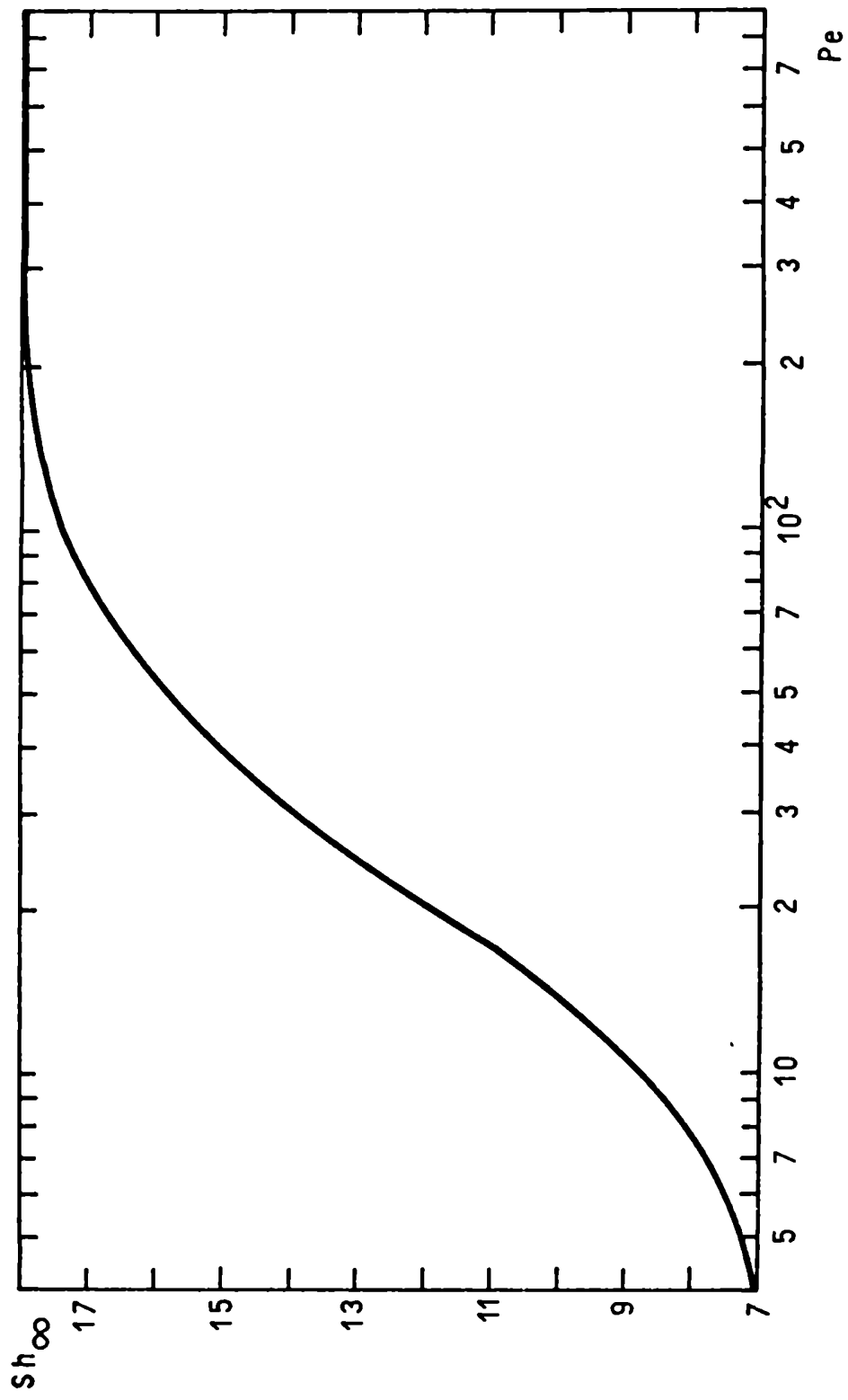


Fig. 22 Correlación teórica para el cálculo del coeficiente interno

4.3 Estudio experimental

4.3.1 Introducción

En esta parte del trabajo, se llevaron a cabo medidas conducentes a la comprobación experimental de la correlación teórica para el cálculo del coeficiente de transferencia en el interior de burbujas individuales presentada en la sección 4.2 .

El objetivo es hallar dicho coeficiente para burbujas en condiciones similares a las existentes en un plato de destilación, pero dada la dificultad de medirlo en un sistema tan complejo como éste en el que la transferencia de materia se produce en forma simultánea con la de calor, se decidió medirlo en condiciones de absorción.

Un sistema constituido por una burbuja que se absorbe en el medio externo y que presenta resistencia interna a la transferencia debe estar formado por una mezcla gaseosa en que uno de los componentes sea muy soluble en el líquido y el otro no absorbible en él.

Una mezcla ideal estaría constituida por los gases: amoníaco y nitrógeno pero la gran solubilidad del primero en agua implicaba un tiempo de absorción demasiado corto y difícil de registrar en forma adecuada.

Por esta razón se eligió un sistema con resistencia mixta: burbujas individuales de dióxido de azufre y nitrógeno en agua.

Se midieron coeficientes globales y a partir de ellos se obtuvieron los correspondientes al interior de la burbuja ya que la resistencia de la fase continua pudo calcularse con la correlación verificada experimentalmente en el capítulo 3.

4.3.2 Método de medida

Para la obtención del coeficiente de transferencia se utilizó el método fotográfico, de un modo análogo al empleado en el caso del coeficiente externo.

En esta experiencia sin embargo, la velocidad de absorción fue mucho mayor, por lo que las fotografías fueron tomadas utilizando luz estroboscópica. Con ello se logró en cada toma registrar una corrida completa de la variación del volumen de la burbuja con el tiempo, de la presión soportada, y de su velocidad de ascenso.

4.3.2.1 Ecuaciones interpretativas del método de medida

En esta sección se analiza la obtención del coeficiente de transferencia a partir de los datos extraídos de las fotografías.

Si se denomina con A al dióxido de azufre, componente que se absorbe y con B al nitrógeno y se plantea para la burbuja un balance macroscópico de materia resulta de acuerdo a la ecuación (1.6) con

$$N_{Bo} = 0$$

$$\frac{d n_A}{dt} = - K_y A \frac{(y_{Ab} - y_{Ae})}{1 - y_{Ae}} \quad (4.21)$$

donde K_y es el coeficiente global.

El líquido de la columna se renovaba frecuentemente de modo tal que las burbujas enviadas no llegaban a modificar su composición. Por esta razón en el desarrollo de las ecuaciones se supuso $y_{Ae} = 0$.

La ecuación (4.21) se convierte en:

$$\frac{d n_A}{dt} = - K_y A y_{Ab} \quad (4.22)$$

Si se admite que en el interior de la burbuja se cumple la ley de los gases:

$$P V = (n_A + n_B) R T \tag{4.23}$$

de donde:

$$n_A = \frac{P V}{R T} - n_B \tag{4.24}$$

Luego:

$$y_A = 1 - \frac{n_B R T}{P V} \tag{4.25}$$

Reemplazando esta expresión en (4.22) se obtiene:

$$\frac{d n_A}{d t} = - K_y \left(1 - \frac{n_B R T}{P V} \right) A \tag{4.26}$$

Si el proceso de absorción se considera isotérmico y teniendo en cuenta que $n_B = cte.$ de la ecuación(4.24) resulta :

$$\frac{d n_A}{d t} = \frac{P dV/dt + V dP/dt}{R T} \tag{4.27}$$

Iguando las ecuaciones(4.26) y(4.27) y despejando el coeficiente global se llega a :

$$K_y = - \frac{1}{A R T} \frac{(P dV/dt + V dP/dt)}{1 - \frac{n_B R T}{P V}} \tag{4.28}$$

Como ya se mencionó el valor de n_B se mantiene constante y puede expresarse a partir de la ecuación(4.25), como:

$$n_B = \frac{P_i V_i}{R T} (1 - y_{A1}) \quad (4.29)$$

donde el subíndice i indica condiciones iniciales.

Finalmente la ecuación(4.28) resulta:

$$K_y = - \frac{1}{\Delta R T} \frac{(P dV/dt + V dP/dt)}{1 - (1 - y_{A1}) \frac{P_i V_i}{P V}} \quad (4.30)$$

Si se desea obtener a partir del coeficiente global el valor del coeficiente correspondiente a la fase gaseosa debe escribirse la expresión que los vincula:

$$\frac{1}{K_y} = \frac{m_y (1 - x_{Ao})}{k_x} + \frac{(1 - y_{Ao})}{k_y} \quad (4.31)$$

Esta ecuación es un caso particular de la (1.12) con $y_{Ao} = 0$ y $r = 0$.

Debe recordarse que m_y es la pendiente de la recta que une el punto de interfase (x_{Ao}, y_{Ao}) con el punto (x_{Ab}, y_{Ae}) , que por las consideraciones efectuadas coincide con el origen, luego:

$$m_y = \frac{y_{Ae} - y_{Ao}}{x_{Ab} - x_{Ao}} = \frac{y_{Ae}}{x_{Ao}} \quad (4.32)$$

Reemplazando (4.32) en (4.31) y despejando k_y se obtiene:

$$k_y = \frac{1 - y_{Ao}}{\frac{1}{k_x} - \frac{y_{Ao} \left(\frac{1 - x_{Ao}}{x_{Ao}} \right)}{k_x}} \quad (4.33)$$

Para llegar al valor k_y no basta con conocer el coeficiente global sino que es necesario conocer el coeficiente k_x y obtener previamente las condiciones de interfase que se limitarían a encontrar x_{Ao} ya que se relaciona con y_{Ao} a través de la curva de equilibrio.

Para expresar x_{Ao} en función de datos medibles se plantea el balance macroscópico de masa en términos del coeficiente de transferencia del lado del líquido, es decir :

$$\frac{d n_A}{d t} = - k_x A \frac{x_{Ao}}{1 - x_{Ao}} \quad (4.34)$$

donde se ha anulado x_{Ab} bajo la misma suposición con la que se eliminó y_{Ao} .

Igualando las expresiones (4.34) y (4.27), y despejando el valor de x_{Ao} se obtiene :

$$x_{Ao} = \frac{1}{\frac{k_x A R T}{P dV/dt + V dP/dt} + 1} \quad (4.35)$$

Resumiendo, la secuencia de cálculo para la obtención del coeficiente interno a partir de las mediciones se establece mediante el siguiente esquema:

$$K_y = \frac{1}{A R T} \frac{(P \, dV/dt + V \, dP/dt)}{1 - (1 - y_{Ai}) \frac{P_i V_i}{P V}}$$

ec.(4.30)

$$x_{Ao} = \frac{1}{\frac{k_x A R T}{P \, dV/dt + V \, dP/dt} + 1}$$

ec.(4.35)

$$y_{Ao} = f(x_{Ao})$$

curva de equilibrio

$$k_y = \frac{1 - y_{Ao}}{\frac{1}{K_y} - \frac{y_{Ao} \frac{1 - x_{Ao}}{x_{Ao}}}{k_x}}$$

ec.(4.33)

4.3.3 Equipo experimental

El equipo se hallaba constituido esencialmente por una columna de acrílico cristal de sección cuadrada (64 cm^2) cuya altura era de 20 cm. y que operaba abierta a la atmósfera con una columna líquida de 15 cm.

Su cara posterior fue cubierta con papel negro y los laterales con papel estañado para mejorar el contraste y favorecer la iluminación.

Esta fue provista por un estroboscopio (Dave Instrument) que trabajó con frecuencias comprendidas entre 19 y 28 disparos/seg. en un cuarto convenientemente oscurecido.

El estroboscopio fue calibrado comparándose sus frecuencias con la velocidad de rotación alcanzada por un motor sincrónico provisto de un taquímetro e iluminado con el estroboscopio.

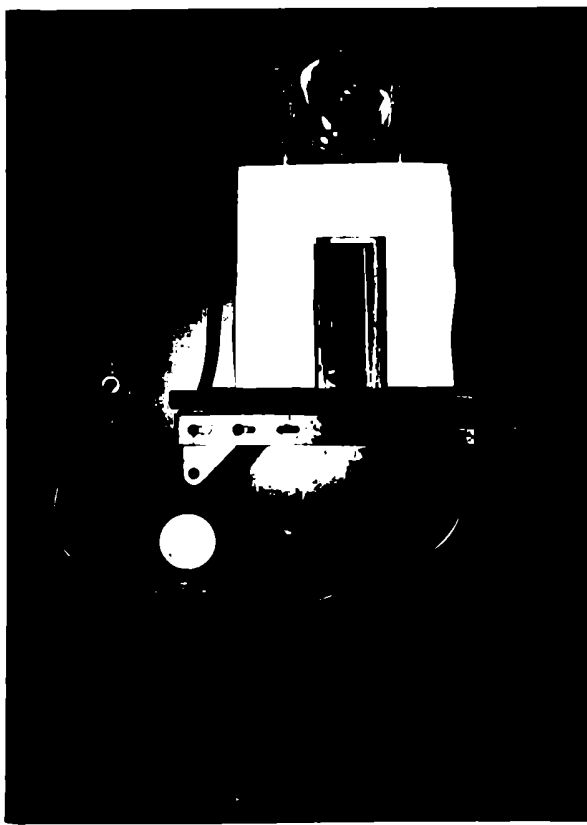


Fig. 23 Fotografía del equipo experimental

La figura 24 muestra un esquema del equipo experimental.

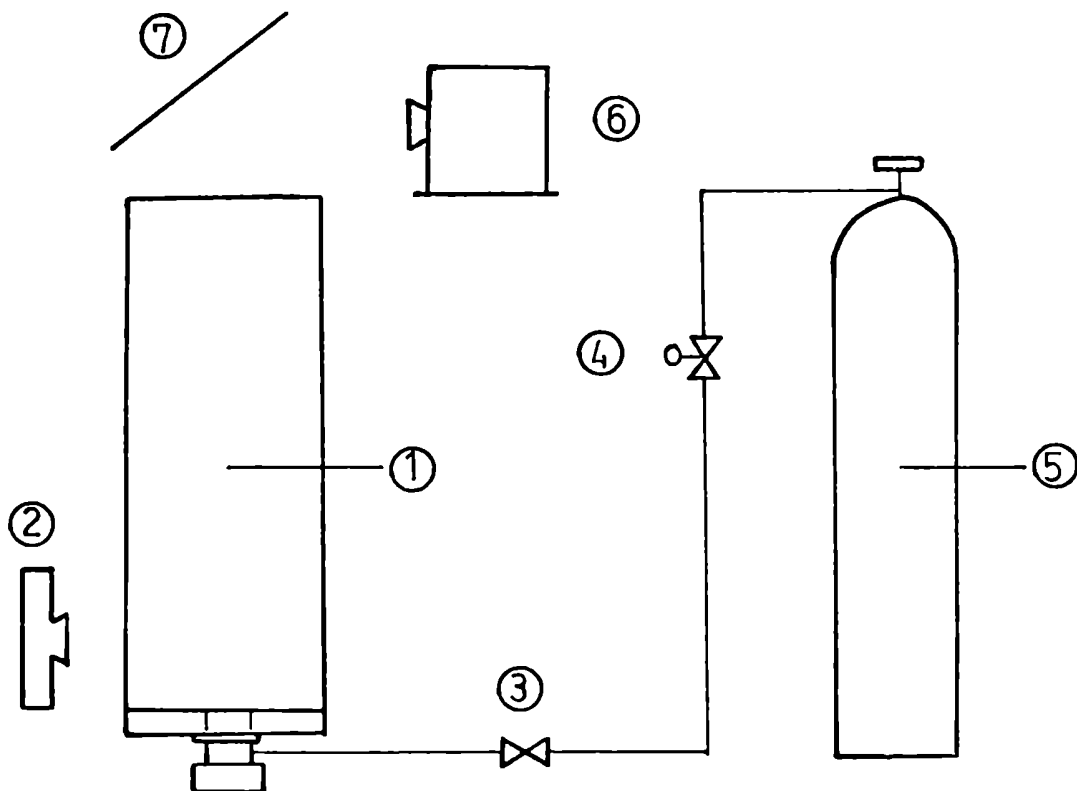


Fig. 24 Esquema del equipo experimental

- | | |
|----------------------------------|-----------------------------|
| 1.- Columna de absorción. | 4.- Válvula reg. de presión |
| 2.- Cámara fotográfica | 5.- Tubo de gas |
| 3.- Válvula reguladora de caudal | 6.- Estroboscopio |
| 7.- Superficie especular | |

4.3.3.1 Composición de la mezcla gaseosa

La determinación cuantitativa de la composición de la mezcla gaseosa de nitrógeno y dióxido de azufre utilizada se efectuó mediante cromatografía de gases en un cromatógrafo Carlo Erba.

Las condiciones del análisis fueron:

Columna Farapak Q $\phi = 1/8''$

Long = 3 m

material: acero inoxidable

Temperatura columna = 120°C

Temperatura detector = 90°C

Caudal de Carrier = 16 cm³/seg

La muestra analizada encerrada previamente en un rulo para gases de Vol = 3,2474 ml se encontraba a T = 21°C y P = 764,6 mm Hg

Con estos datos se calculó el número de moles de la muestra:
n = 1,355 10⁻⁴ moles.

El registro obtenido en el análisis se muestra en la figura 25.

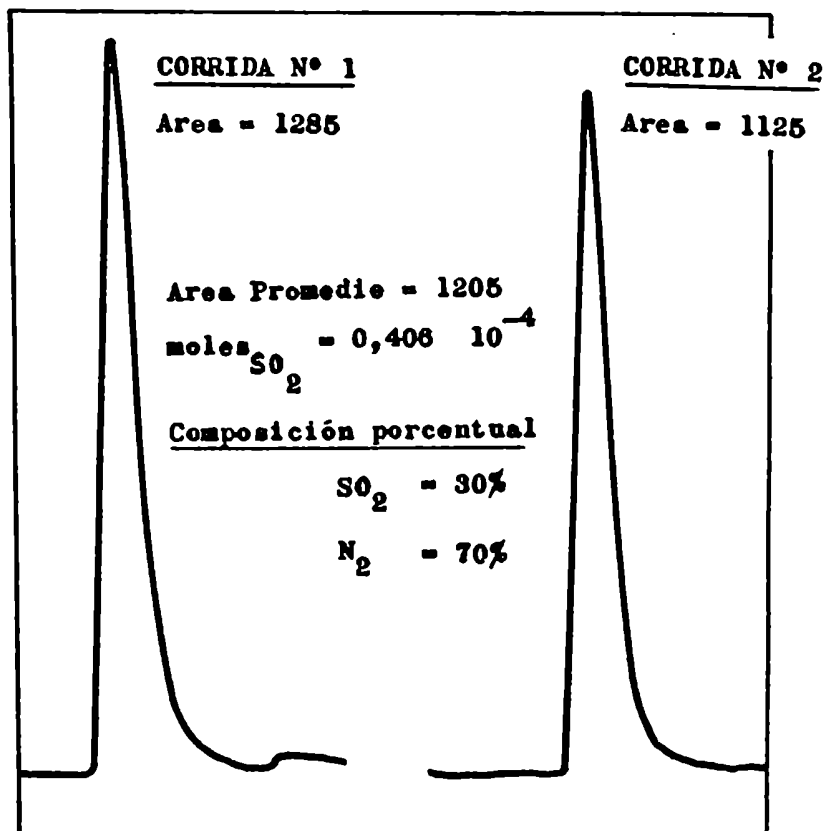


Fig. 25 Análisis cromatográfico de la mezcla gaseosa

A través de la medida del área bajo la curva, teniendo en cuenta la atenuación del equipo y haciendo uso de la curva de calibración absoluta: moles de SO_2 vs. Área se obtuvo el siguiente resultado:

$$Y_{\text{SO}_2} = 30\%$$

$$Y_{\text{N}_2} = 70\%$$

4.4 Obtención de datos

Se llevaron a cabo cuatro series de experiencias cada una de ellas correspondiente a un tamaño distinto de burbuja.

Con ese objeto se utilizaron cuatro tamaños de orificio de salida: 1 mm , 1,5 mm , 3 mm , y 5 mm de diámetro que originaron burbujas cuyos diámetros equivalentes se hallaban comprendidos entre 0,35 y 0,6 cm.

Para cada diámetro de orificio se tomaron aproximadamente diez fotografías, involucrando cada una de ellas todo el tiempo de absorción.

La obtención de resultados a partir de los datos fotográficos se ejemplifica a continuación en forma detallada para un tamaño de orificio de salida de $d = 5 \text{ mm}$.

La figura 26 muestra una de las diez fotografías analizadas que forman parte de esta serie de experiencias.

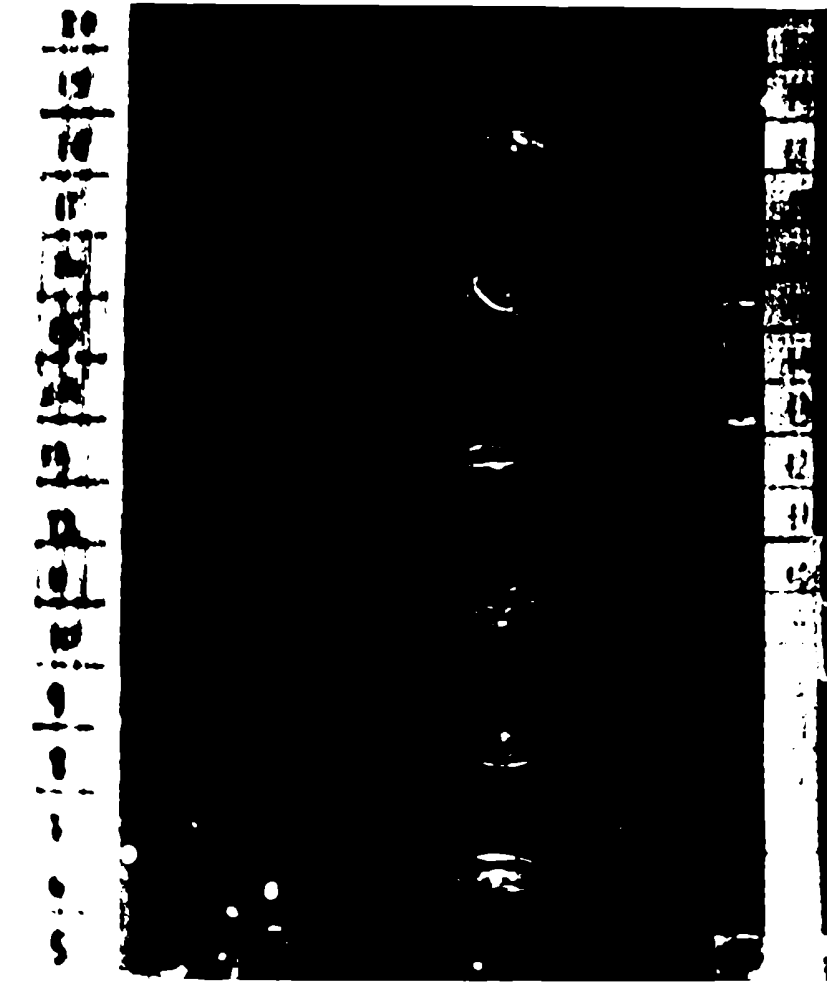


Fig. 26 Burbuja individual de $\text{SO}_2 - \text{N}_2$ absorbiéndose en agua

Díámetro de orificio de salida 5 mm.

Frecuencia de iluminación : 19 cuadros/seg

Factor de escala:0,63

a) Velocidad de ascenso

El dato de la velocidad de ascenso se obtuvo a partir del producto de la distancia media entre dos imágenes sucesivas, del factor de escala y de la frecuencia de iluminación del estroboscopio.

$$v_{\infty} = 1,84 \text{ (cm fotog.)} \cdot 0,63 \left(\frac{\text{cm real}}{\text{cm fotog.}} \right) \cdot 19 \left(\frac{1}{\text{seg}} \right) = 22,04 \text{ cm/seg.}$$

b) Tamaño de burbuja

La medida de los ejes mayor y menor se efectuó de un modo análogo al expuesto en el capítulo anterior con burbujas de CO_2 en agua.

Para cada una de las fotografías tomadas en esta serie correspondiente a $d = 5 \text{ mm}$ se construyó una tabla como la que se muestra mas abajo y que pertenece a la figura 26.

TABLA V

Variación de tamaño durante la absorción de una burbuja de $\text{SO}_2\text{-N}_2$ en agua. Diámetro de orificio de salida: 5 mm (corresp. fig 26)

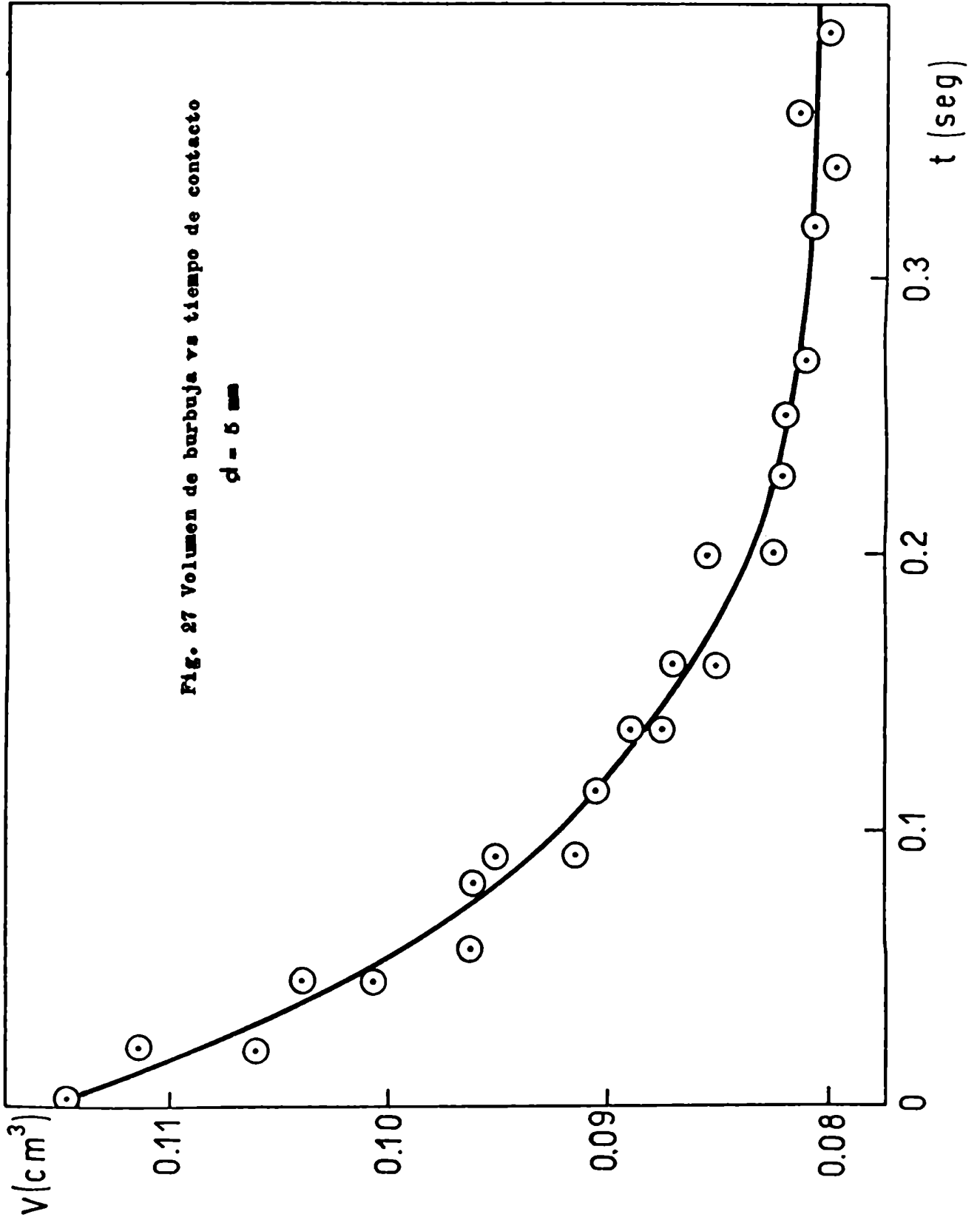
x_d (cm)	t (seg)	2a (cm)	2b (cm)	e	De (cm)	V (cm ³)
2,5	0,114	0,736	0,318	2,32	0,557	0,0908
3,5	0,159	0,720	0,320	2,25	0,549	0,0869
5,0	0,227	0,653	0,340	2,10	0,540	0,0823
6,0	0,272	0,763	0,266	2,87	0,537	0,0812
7,5	0,341	0,689	0,324	2,13	0,534	0,0797

En la Tabla VI se presenta la totalidad de los datos obtenidos en esta serie de experiencias, que a su vez se encuentran graficados en la fig. 27.

TAJILA VI

Volúmen de burbujas individuales de $SO_2 - N_2$ en agua en función del tiempo de contacto. Diámetro de orificio de salida: 5 mm

x_d (cm)	t (seg)	2a (cm)	2b (cm)	e	D_0 (cm)	V (cm ³)
0	0	0,802	0,341	2,35	0,603	0,1148
0,50	0,023	0,789	0,340	2,32	0,597	0,1115
0,50	0,023	0,777	0,335	2,32	0,597	0,1000
1,00	0,045	0,762	0,340	2,24	0,583	0,1039
1,00	0,045	0,756	0,336	2,25	0,577	0,1006
1,25	0,057	0,738	0,335	2,20	0,568	0,0958
1,75	0,080	0,752	0,324	2,32	0,509	0,0901
2,00	0,090	0,695	0,376	1,85	0,567	0,0953
2,00	0,090	0,689	0,366	1,88	0,559	0,0912
2,50	0,114	0,736	0,318	2,32	0,557	0,0908
3,00	0,136	0,687	0,358	1,92	0,553	0,0865
3,00	0,136	0,706	0,328	2,15	0,551	0,0877
3,50	0,159	0,720	0,320	2,25	0,560	0,0869
3,50	0,159	0,666	0,364	1,83	0,546	0,0852
4,50	0,204	0,702	0,331	2,21	0,547	0,0855
4,50	0,204	0,680	0,337	2,02	0,540	0,0823
5,00	0,227	0,653	0,311	2,10	0,540	0,0823
5,50	0,250	0,655	0,302	1,81	0,538	0,0818
6,00	0,272	0,763	0,266	2,87	0,537	0,0812
7,00	0,318	0,664	0,442	2,32	0,536	0,0806
7,50	0,341	0,709	0,305	2,13	0,534	0,0797
8,00	0,359	0,702	0,313	2,24	0,537	0,0812
8,50	0,386	0,706	0,305	2,31	0,535	0,0801



La curva de volumen de burbuja vs tiempo de contacto correspondiente a cada diámetro de orificio surgió como promedio de la totalidad de los datos obtenidos.

La forma de las burbujas, como ya se enunció en el Capítulo 3 puede asimilarse a un esferoide oblongo (cuerpo de revolución originado por la rotación de una elipse sobre su eje menor).

Durante su ascenso, la burbuja tiene un movimiento oscilatorio planar y su eje menor se orienta en esa dirección.

Muchas veces dicho movimiento se produce en un plano perpendicular al de la cámara fotográfica apareciendo imágenes de elipses de menor excentricidad que la real y que por lo tanto no proporcionan las dimensiones correctas.

Por esa razón, en la determinación del volumen de las burbujas se aceptaron únicamente desviaciones de la excentricidad máxima del orden del 25% , descartando los datos que superaban dicha cota.

Este criterio estuvo basado en los valores experimentales de la curva de excentricidad vs. diámetro equivalente de la fig. 9.

En los casos en que se observó un alejamiento en la trayectoria de la burbuja respecto del eje de la columna se efectuaron las correcciones por paralaje correspondientes.

c) Coefficiente global K_y

Para la obtención del coeficiente K_y se utilizó la ecuación (4.30) con: $V_i = 0,1153 \text{ cm}^3$

$$y_{A1} = 0,3$$

$$P_i = 1,015 \text{ atm.}$$

$$RT = 23616 \text{ cm}^3 \text{ atm/mol}$$

$$dP/dt = 0,022 \text{ atm/seg.}$$

Para el cálculo del area de transferencia se utilizó la

ecuación (3.37).

Los valores de dV/dt se obtuvieron en forma gráfica de la fig. 27.

La Tabla VII muestra los valores del coeficiente global obtenidos a partir de cuatro puntos de la curva de la fig. 27

TABLA VII
Coeficiente global

t (seg)	V (cm ³)	A (cm ²)	dV/dt (cm ³ /seg)	P (atm)	$k_y \cdot 10^4$ (mol/cm ² seg)
0	0,1148	1,2773	0,390	1,0150	0,470
0,050	0,1006	1,1843	0,265	1,0140	0,480
0,140	0,0877	1,0580	0,102	1,0120	0,520
0,250	0,0818	0,9380	0,016	1,0095	0,540

d) Composición de la interfase

Para hallar el valor de x_{Ao} , de acuerdo con la ecuación (4.35) debió calcularse previamente el coeficiente k_x mediante la ecuación (3.10) siendo:

$$D_{SO_2 - \text{agua}} = 1,6 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{seg}$$

$$v_{co} = 22 \text{ cm/seg}$$

$$C = 0,055 \text{ mol/cm}^3$$

resultó:

$$k_x = \frac{0,001165}{\sqrt{De}}$$

La curva de equilibrio del sistema SO_2 -agua a 15°C que se muestra en la figura 28 fue utilizada para obtener los valores de

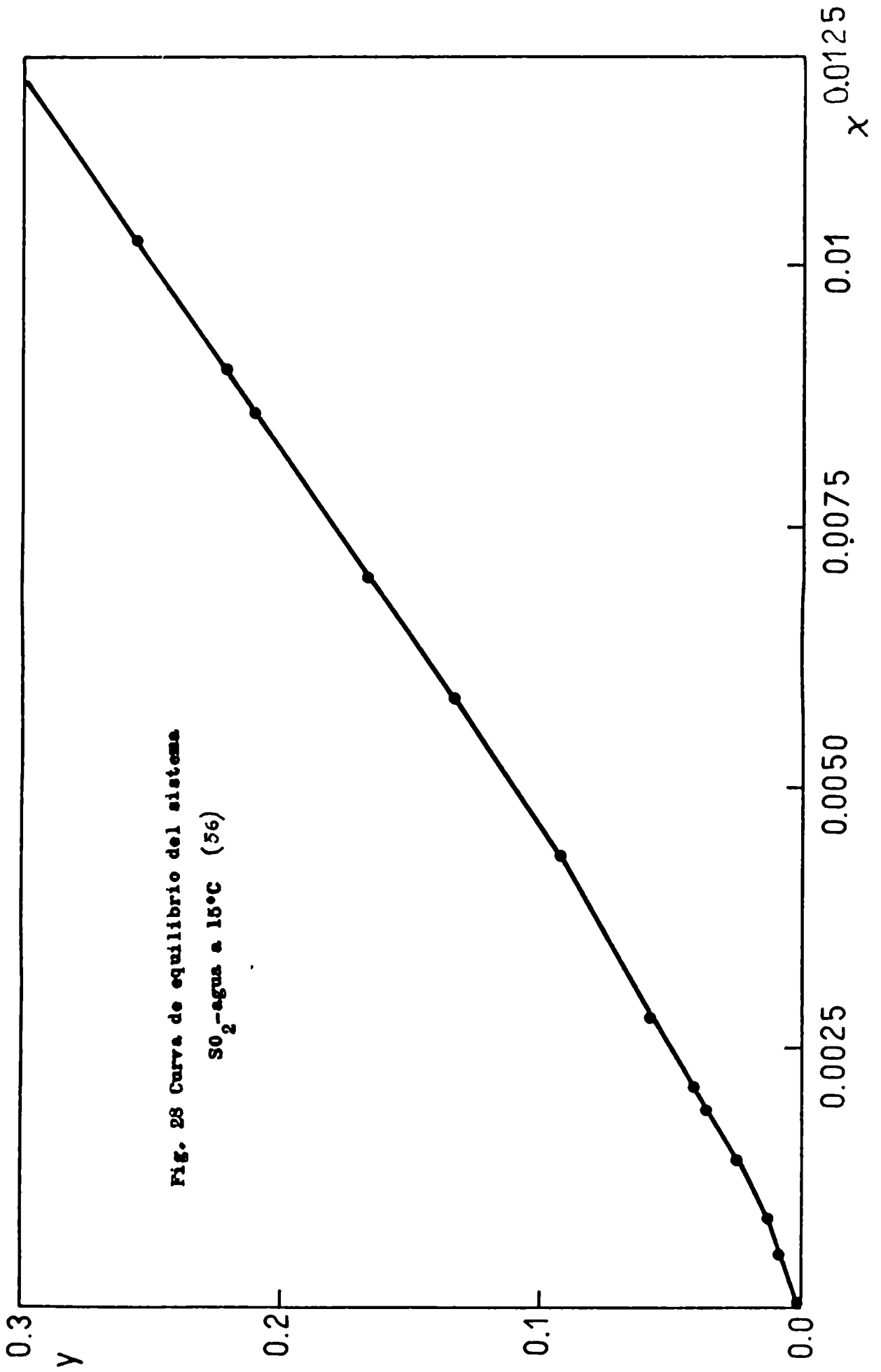


Fig. 28 Curva de equilibrio del sistema
SO₂-agua a 15°C (56)

y_{Ao} a partir de los de x_{Ao} .

Para los puntos considerados anteriormente se obtuvieron los siguientes valores que se muestran en la Tabla VIII.

TABLA VIII

Composición de la interfase

De (cm)	k_x (mol/cm ² seg)	P dV/dt (atm cm ³ /seg)	x_{Ao}	y_{Ao}
0,600	0,00150	0,39585	0,00864	0,210
0,577	0,00153	0,26884	0,00620	0,144
0,551	0,00157	0,10330	0,00263	0,052
0,538	0,00158	0,01616	0,00040	0,008

e) Coefficiente interno k_y

Utilizando la ecuación (4.33) se obtuvieron los valores de k_y que se muestran a continuación en la Tabla IX. El valor medio obtenido para k_y es 0,0001509 mol/cm² seg.

TABLA IX Coeficiente interno

De (cm)	k_x (mol/cm ² seg)	x_{Ao}	y_{Ao}	$K_y 10^4$ (mol/cm ² seg)	$k_y 10^3$ (mol/cm ² seg)
0,600	0,00150	0,00864	0,210	0,470	0,1549
0,577	0,00153	0,00620	0,144	0,480	0,1514
0,551	0,00157	0,00263	0,052	0,520	0,1485
0,538	0,00158	0,00040	0,008	0,540	0,1490

Para cada uno de los otros tres tamaños de orificio con que se trabajó: $d = 1 \text{ mm}$, $1,5 \text{ mm}$, 3 mm , se muestran a continuación algunas de las fotografías analizadas, la curva de volumen de burbuja vs. tiempo de contacto y los resultados tabulados.

Diámetro de orificio - 1 mm

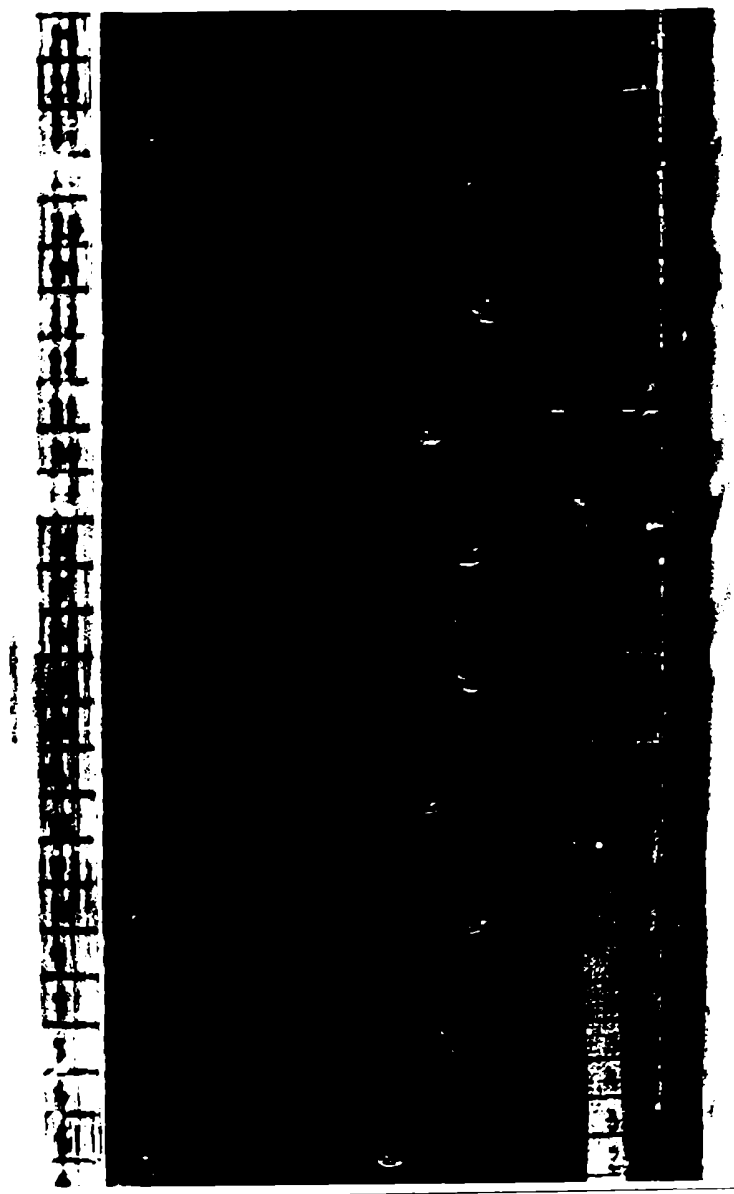


Fig. 29 Burbuja individual de $\text{SO}_2 = \text{N}_2$ absorbiéndose en agua
Diámetro de orificio de salida - 1 mm

Frecuencia de iluminación = 16,7 cuadros/seg

Factor de escala = 0,81

Velocidad de ascenso = 0,81 . 1,7 . 16,7 = 23 cm/seg

En la figura 30 se muestra otra fotografía correspondiente al mismo diámetro de orificio donde puede observarse la burbuja un instante antes de su desprendimiento.

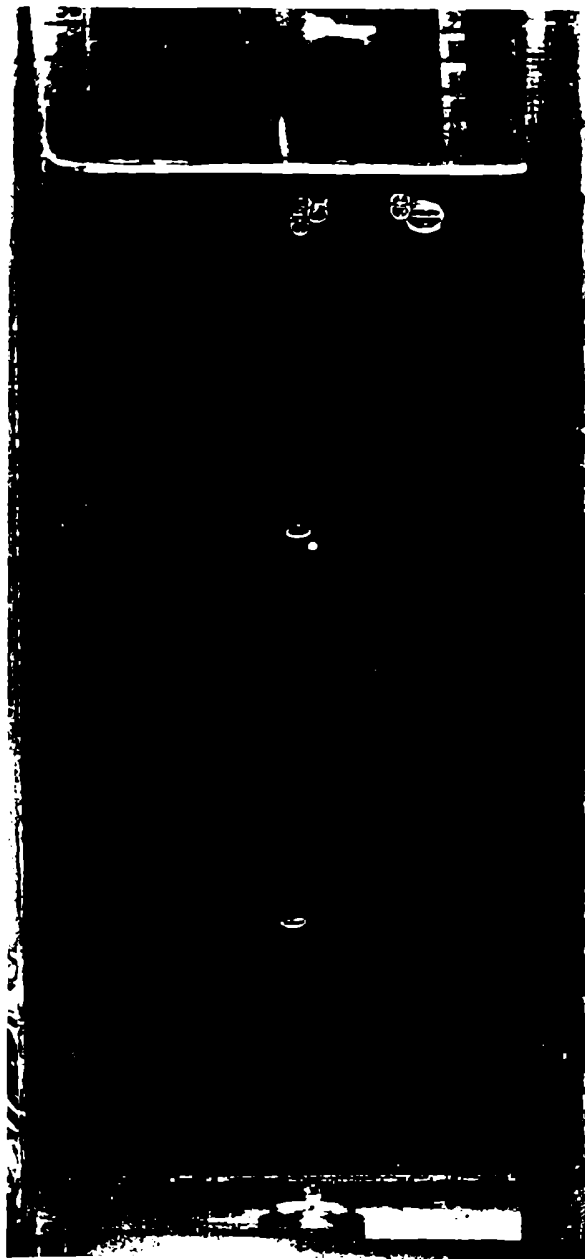


Fig. 30 Burbuja individual de $\text{SO}_2 - \text{N}_2$ absorbiéndose en agua
Diámetro de orificio de salida = 1 mm

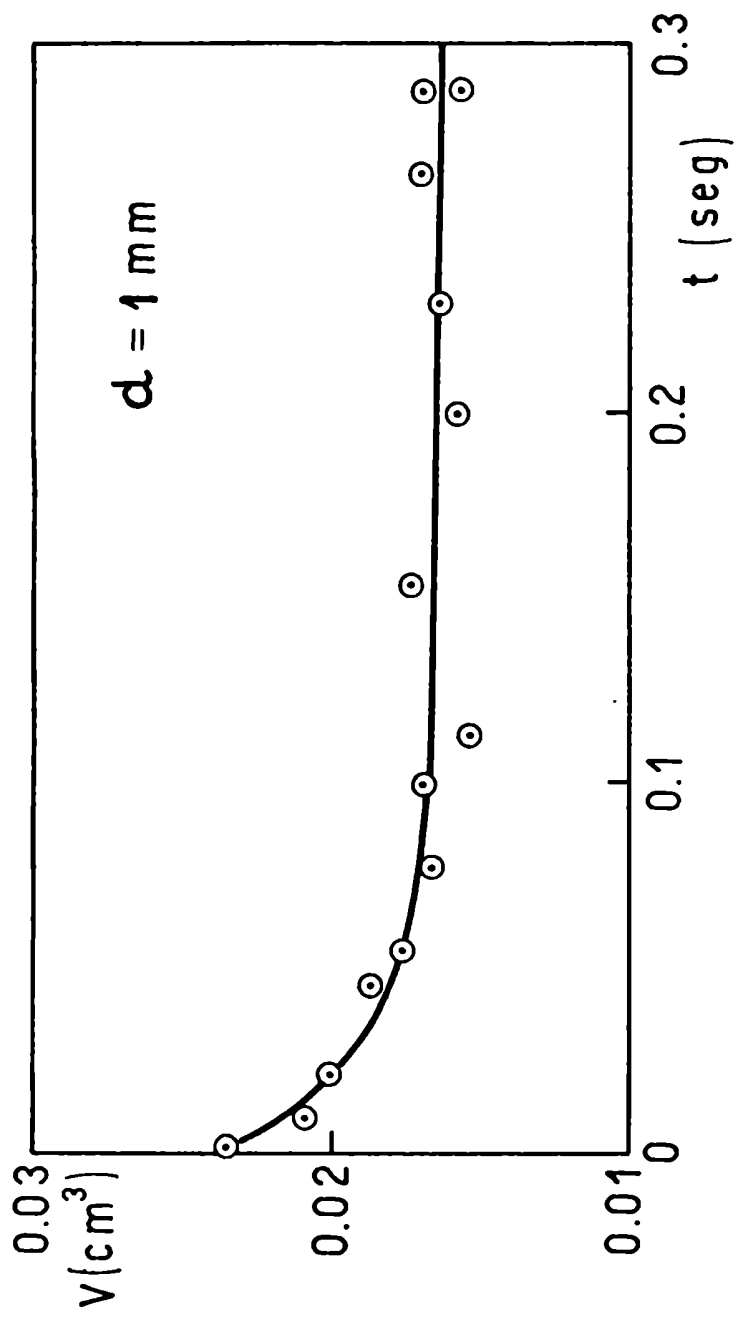


Fig. 31 Volumen de burbuja vs. tiempo de contacto
 $d = 1 \text{ mm}$

TABLA I

COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA INTERNO EN BURBUJAS INDIVIDUALES

Diámetro de orificio = 1 mm

t (seg)	De (cm)	V (cm ³)	A (cm ²)	dV/dt (cm ³ /seg)	P (atm)	K _y 10 ⁴ (mol/cm ² seg)	k _x 10 ² (mol/cm ² seg)	x _{Ao}	y _{Ao}	k _y 10 ³ (mol/cm ² seg)
0	0,350	0,0235	0,459	0,210	1,0150	0,654	0,201	0,0090	0,220	0,2454
0,021	0,337	0,0201	0,415	0,123	1,0145	0,690	0,205	0,0063	0,140	0,2517
0,054	0,324	0,0177	0,398	0,050	1,0148	0,719	0,209	0,0028	0,048	0,2474
0,108	0,313	0,0166	0,338	0,006	1,0125	0,830	0,212	0,0004	0,006	0,2550

Valor medio de k_y = 0,000250 mol/cm² seg

Diámetro de orificio = 1,5 mm

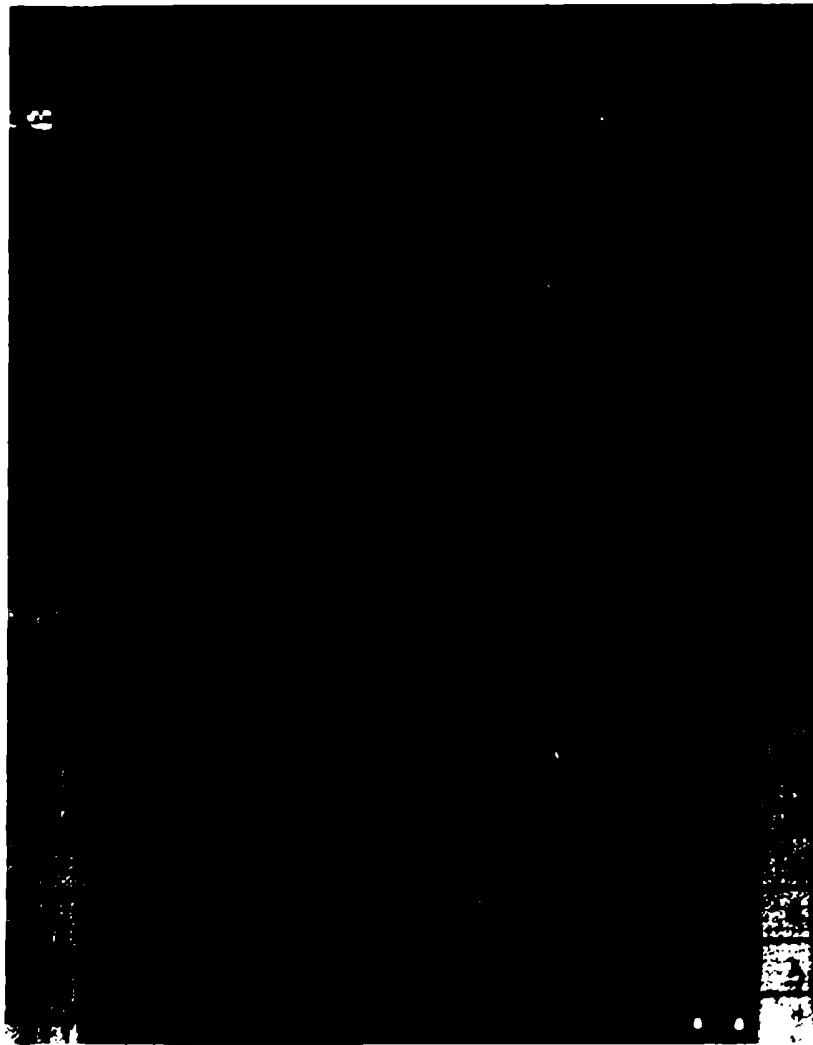


Fig. 32 Burbuja individual de $\text{SO}_2 - \text{N}_2$ absorbiéndose en agua

Diámetro de orificio de salida 1,5 mm

Frecuencia de iluminación : 16,7 cuadros/seg

Factor de escala: 0,606

Velocidad de ascenso: $2,25 \cdot 0,606 \cdot 16,7 = 22,5$ cm/seg

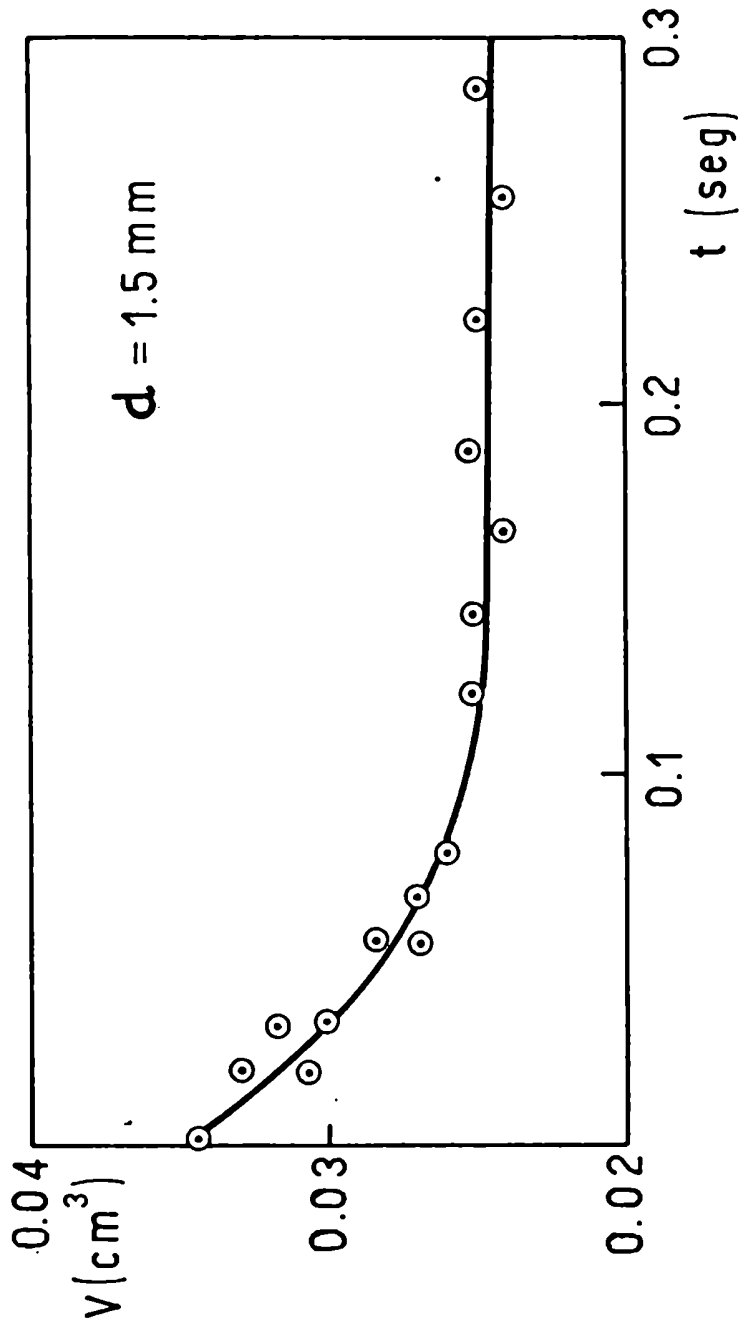


Fig. 33 Volumen de burbuja vs. tiempo de contacto
 $d = 1,5 \text{ mm}$

TABLA XI

COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA INTERNO EN BURBUJAS INDIVIDUALES

Diámetro de orificio = 1,5 mm

t (seg)	D _o (cm)	V (cm ³)	A (cm ²)	dV/dt (cm ³ /seg)	P (atm)	K _y 10 ⁴ (mol/cm ² seg)	k _x 10 ² (mol/cm ² seg)	x _{Ao}	y _{Ao}	k _y 10 ³ (mol/cm ² seg)
0	0,404	0,0346	0,635	0,25	1,0150	0,571	0,1853	0,0059	0,220	0,1869
0,033	0,385	0,0300	0,547	0,15	1,0142	0,631	0,1887	0,0061	0,140	0,2269
0,066	0,372	0,0271	0,588	0,09	1,0135	0,675	0,1920	0,0038	0,070	0,2328
0,077	0,368	0,0261	0,457	0,05	1,0132	0,759	0,1930	0,0020	0,035	0,2054

Valor medio de k_y = 0,0002130 mol/cm² seg

Diámetro de orificio = 3 mm

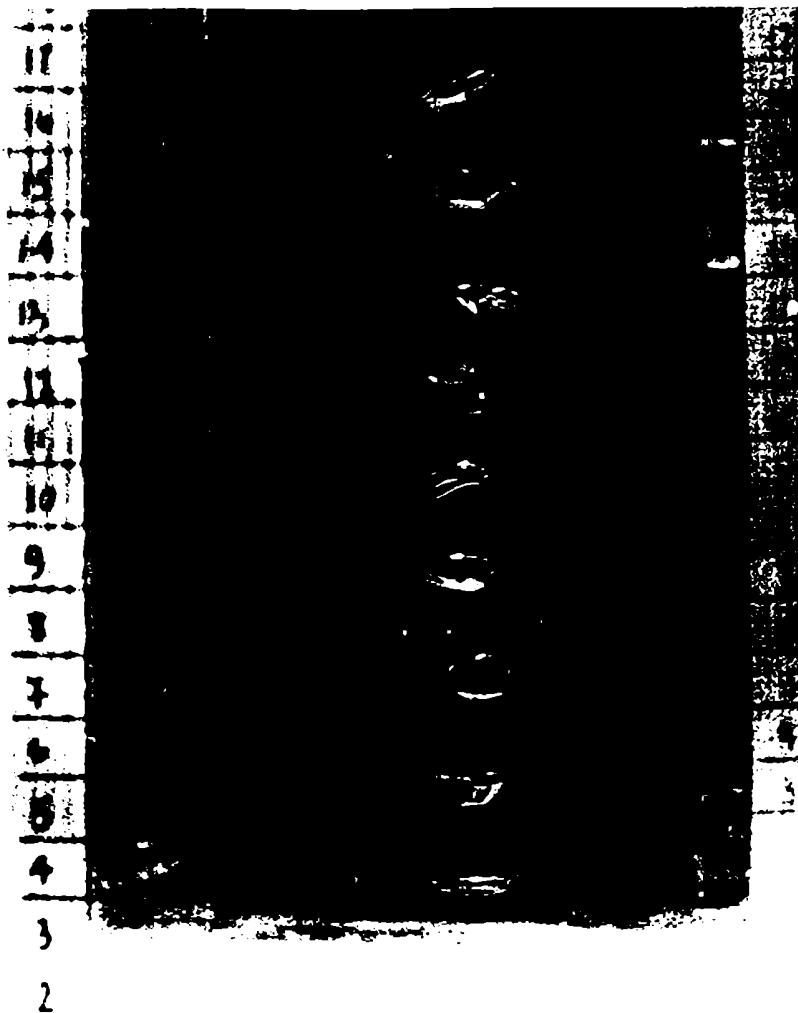


Fig. 34 Burbuja individual de $\text{SO}_2 - \text{N}_2$ absorbiéndose en agua

Diámetro de orificio de salida 3 mm

Frecuencia de iluminaciones: 25 cuadros/seg

Factor de escala: 0,625

Velocidad de ascenso: $1,4 \cdot 0,625 \cdot 25 = 22 \text{ cm/seg}$

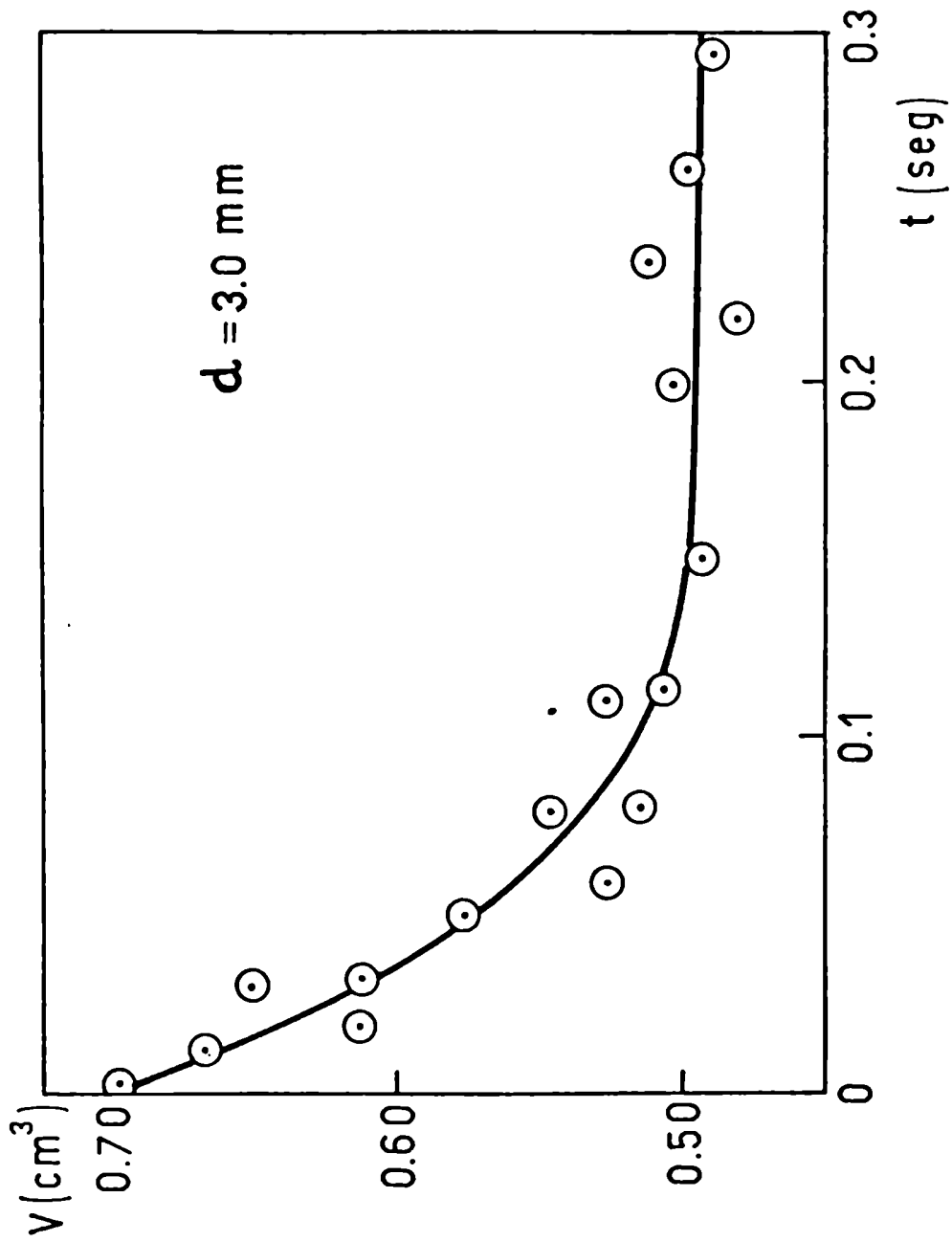


Fig. 35 Volumen de burbuja vs. tiempo de contacto
 $d = 3$ mm

TABLA XII

COEFICIENTE DE TRANSFERENCIA INTERNO EN BUBUJAS INDIVIDUALES

Diámetro de orificio - 3 mm

t (seg)	De (cm)	V (cm ³)	A (cm ²)	dV/dt (cm ³ /seg)	P (atm)	K _y 10 ⁴ (mol/cm ² seg)	k _x 10 ² (mol/cm ² seg)	x _{A0}	y _{A0}	k _y 10 ³ (mol/cm ² seg)
0	0,5090	0,0690	1,089	0,40	1,015	0,520	0,1646	0,0094	0,234	0,1614
0,01	0,5026	0,0665	1,056	0,35	1,0147	0,523	0,1650	0,0086	0,210	0,1628
0,03	0,4890	0,0611	0,948	0,25	1,0145	0,520	0,1664	0,0068	0,160	0,1626
0,05	0,4780	0,0572	0,809	0,16	1,014	0,544	0,1684	0,0049	0,110	0,1761

Valor medio de k_y = 0,0001708 mol/cm²seg

4.5 Análisis de resultados

A partir de los datos experimentales del coeficiente de transferencia interno k_y en función del diámetro equivalente de burbuja D_e se obtuvieron los valores de:

$$Sh = \frac{k_y D_e}{C} \quad y \quad Pe = \frac{D_e v_\infty}{D}$$

respectivamente teniendo en cuenta que para el sistema en estudio:

$$D_{SO_2 - N_2} = 0,12 \text{ cm}^2/\text{seg}$$

$$C = \frac{P}{RT} = 0,429 \cdot 10^{-4} \text{ moles/cm}^3$$

Dichos resultados, que fueron comparados con los obtenidos a partir de la correlación teórica deducida en la sección 4.2.3, se muestran en la tabla XIII y se hallan graficados en la fig. 36.

TABLA XIII Comparación de los resultados experimentales con la solución teórica.

D_e (cm)	v_∞ (cm/seg)	Pe	$k_{y \text{ exp.}} \cdot 10^3$ (mol/cm ² seg)	Sh _{exp}	Sh _{teor.}	e %
0,60	22,0	110	0,1509	17,59	17,55	0,22
0,51	22,0	91,7	0,1708	16,95	17,30	2,02
0,40	22,5	75	0,2130	16,50	16,95	2,65
0,35	23,0	67	0,2500	17,03	16,75	1,64

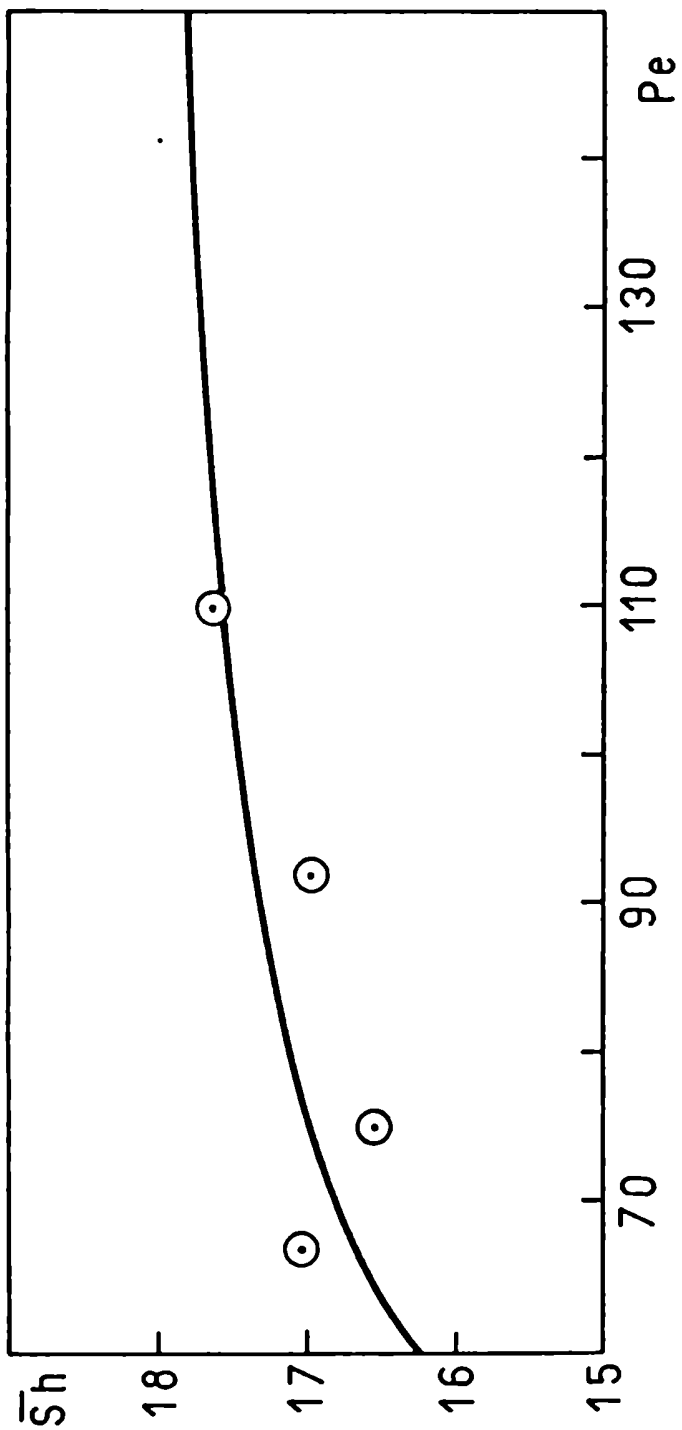


Fig. 36 Comparación de los puntos experimentales con la solución teórica

⊙ Puntos experimentales

— Solución teórica

Los valores de Sh obtenidos experimentalmente muestran buena coincidencia con los valores teóricos surgidos de la resolución de la ecuación diferencial de transferencia de materia en el interior de la burbuja aceptando la existencia de circulación toroidal según los torbellinos de Hill.

En bibliografía aparecen distintas teorías para el cálculo del coeficiente interno y en general no se encuentran valores coincidentes.

Se comparan a continuación las ecuaciones utilizadas comúnmente en ese caso, con los resultados obtenidos en este trabajo.

Unos de los primeros métodos para el cálculo del coeficiente interno se basó en la solución no estacionaria de la ecuación de difusión en coordenadas esféricas (44):

$$E = \frac{C_1 - C}{C_1 - C_0} = 1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i^2} \exp\left(\frac{-i^2 \mathcal{D} \pi^2 t_c}{R^2}\right) \quad (4.36)$$

donde:

C_1 = Concentración inicial del soluto en la esfera

C_0 = Concentración del soluto en la interfase considerada cte.

E = Concentración adimensional que representa el apartamiento de la condición de equilibrio.

La ecuación (4.36) es una serie infinita convergente de Fourier.

Para largos tiempos de contacto ($E > 0,4$) (45) solo el primer término de la serie es significativo y resulta:

$$E = 1 - \frac{6}{\pi^2} \exp\left(\frac{-\pi^2 \mathcal{D} t_c}{R^2}\right) \quad (4.37)$$

Otra alternativa a la solución del problema a través del mé-

todo de la transformada de Laplace conduce a una serie infinita divergente.

Para tiempos de contacto pequeños ($E < 0,4$) sólo es importante el primer término de la serie y se obtiene:

$$E = \frac{6}{R} \sqrt{\frac{D_g t_c}{\pi}} \quad (4.38)$$

En este caso la esfera se ha comportado como un medio semi-infinito ya que el soluto no ha penetrado hasta su centro.

El coeficiente convencional de transferencia de materia se halla ligado al valor de E a través de la relación:

$$-\ln(1 - E) = k_g \frac{3}{R} t_c \quad (4.39)$$

En el caso de tiempos de contacto largos la aplicación de las ecuaciones (4.37) y (4.39) conduce a:

$$\frac{\pi^2 D_g t_c}{R^2} - \ln \frac{6}{\pi^2} = k_g \frac{3}{R} t_c$$

de donde despreciando el valor de logaritmo se obtiene:

$$k_g = \frac{1}{3} \frac{\pi^2 D_g}{R} \quad (4.40)$$

En el caso de tiempos de contacto cortos resulta:

$$-\ln(1 - E) \approx E = \frac{6}{R} \sqrt{\frac{D_g t_c}{\pi}} = k_g \frac{3}{R} t_c$$

Luego:

$$k_g = 2 \sqrt{\frac{D}{\pi t_c}} \quad (4.41)$$

La ecuación (4.41) coincide con la solución deducida por Higbie para la fase continua.

Adimensionalizando las ecuaciones (4.40) y (4.41) se obtienen respectivamente las siguientes expresiones:

$$Sh = \frac{2}{3} \pi^2 = 6,58 \quad (4.42)$$

$$Sh = 1,13 \text{ Pe}^{1/2} \quad (4.43)$$

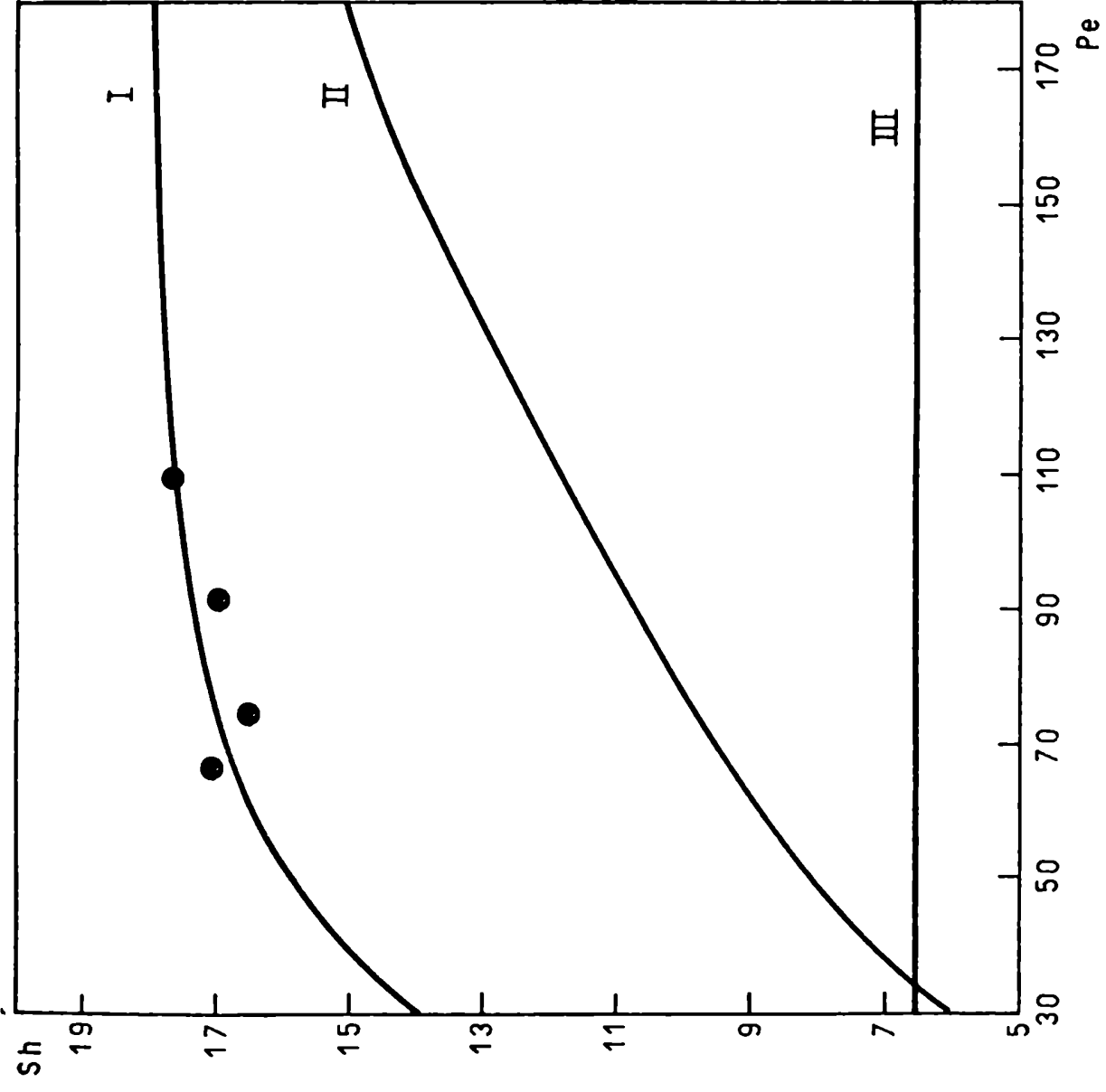
Ambas soluciones (ecuaciones (4.42) y (4.43)) aparecen graficadas en la figura 37 para poder ser comparadas con los resultados obtenidos en este trabajo.

En dicha figura puede observarse que los valores de Sh obtenidos en forma experimental son sustancialmente mayores que los que surgen de aplicar las teorías que no tienen en cuenta la circulación del gas de la burbuja.

De este modo puede concluirse que la teoría propuesta involucrando circulación interna resulta satisfactoria para predecir el coeficiente del lado del gas en burbujas individuales.

Este resultado es especialmente útil para el cálculo de los coeficientes de transferencia de calor y/o materia en destilación, y se ha aplicado al modelo matemático del plato como se describe en el Capítulo 5.

Fig. 37 Comparación de los resultados teóricos y experimentales de este trabajo con otras teorías.



● Resultados experimentales (este trabajo)

I Solución teórica modificada en este trabajo.

II Curva obtenida a partir de la solución de la ecuación de difusión sin aportes convectivos para tiempos de contacto cortos.

III Idem para tiempos de contacto largos.

CAPITULO 5

MODELO MATEMÁTICO DEL PLATO DE DESTILACIÓN

5.1 Objetivos

En este capítulo se aplican los coeficientes de transferencia de materia y calor con resistencia externa e interna obtenidos en burbujas individuales, a la resolución numérica del modelo matemático de un plato de destilación.

Los objetivos son estudiar cómo influye la transferencia de calor en la eficiencia del plato y analizar simultáneamente cómo varía esta eficiencia a lo largo de la columna por efecto del cambio en la etapa controlante ocasionado por la modificación de la pendiente de la curva de equilibrio.

5.2 Planteo del modelo teórico

5.2.1 Suposiciones que involucra

En este modelo de plato se supuso que:

- 1) El líquido se encuentra totalmente mezclado y mantiene constante en el tiempo su composición y temperatura.
- 2) Las burbujas que atraviesan el líquido no interaccionan entre sí, por lo tanto, los fenómenos de transferencia que tienen lugar en el plato y que permiten calcular su eficiencia, son asimilados a los que ocurren en una burbuja individual. De este modo, la eficiencia local coincide con la de Murphree.
- 3) El vapor que llega al plato objeto del análisis, se encuentra a mayor temperatura que el líquido circundante por lo tanto se toma en cuenta la transferencia de calor entre las fases.
- 4) El vapor de la burbuja se comporta como gas ideal.
- 5) El tamaño de la burbuja y su velocidad de ascenso permanecen constantes.

- 6) La concentración total dentro de la burbuja es uniforme.
- 7) La composición, temperatura y flujos en la interfase, varían en el tiempo.
- 8) Los coeficientes de transferencia de materia y calor en ambas fases permanecen constantes.
- 9) Los calores latentes de vaporización de los componentes de la mezcla que se destila son distintos.

5.2.2 Ecuaciones que describen el modelo

El análisis se aplica a una mezcla binaria siendo A el componente más volátil.

Las ecuaciones que se plantean en primer término corresponden a la interfase líquido-vapor y describen el problema en forma instantánea. Esta información se completa con los balances no estacionarios de materia y energía que tienen por objeto estudiar los fenómenos de transferencia durante el ascenso de las burbujas.

- a) Flujo de materia en la interfase expresado en términos de la composición del líquido.

El flujo del componente A en la interfase en términos de composición del líquido se halla dado por la ecuación(1.3):

$$N_{A0} = \frac{k_x (x_{Ab} - x_{A0}) - x_{A0} N_{B0}}{1 - x_{A0}} \quad (5.1)$$

- b) Flujo de materia en la interfase expresado en términos de la composición del vapor.

El flujo de A en términos de la composición del vapor está dado por la ecuación (1.4):

$$N_{Ao} = \frac{\frac{k}{y} (y_{Ao} - y_{Ab}) - y_{Ao} N_{Bo}}{1 - y_{Ao}} \quad (5.2)$$

En la figura 38 se muestra un perfil instantáneo de fracción molar del componente más volátil en el líquido del plato y en el vapor de la burbuja.

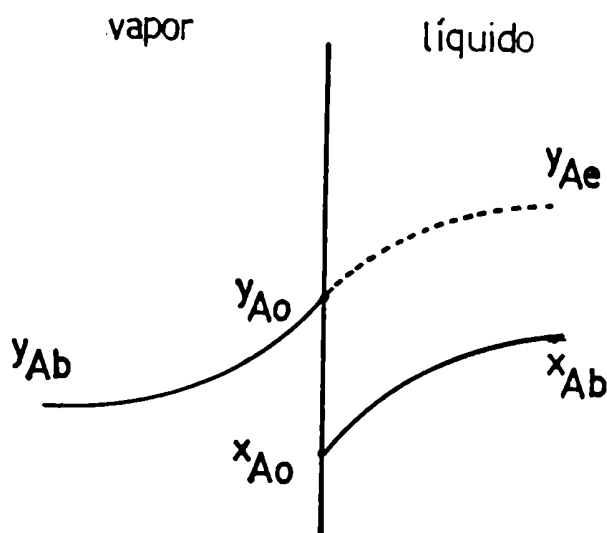


Fig. 38 Perfil de composición del líquido y vapor

c) Curva de equilibrio líquido-vapor en la interfase

En la interfase es válida la condición de equilibrio:

$$x_{Ao} = f (y_{Ao}) \quad (5.3)$$

Esta curva puede aproximarse a efectos de ser utilizada en el cálculo numérico mediante un polinomio de la forma:

$$x_{Ao} = a_1 + a_2 y_{Ao} + a_3 y_{Ao}^2 \quad (5.4)$$

d) Curva de puntos de rocío

Para cada mezcla que destila se puede establecer una curva de temperatura vs. composición.

Existe en realidad una curva de puntos de rocío y otra de puntos de burbuja, pero basta con elegir una de ellas ya que la otra queda automáticamente determinada a partir de la elegida y de la curva de equilibrio.

Si se utiliza la curva de temperatura de rocío su ajuste polinómico queda expresado por:

$$y_{Ao} = b_1 + b_2 T_o + b_3 T_o^2 \quad (5.5)$$

e) Balance de energía en la interfase

El componente A proveniente del líquido vaporiza en la interfase tomando λ_A calorías/mol. Por otra parte el componente B condensa desprendiendo λ_B calorías/mol.

Si además se toma en cuenta la transferencia de calor sensible desde el vapor hacia el líquido el balance energético resulta:

$$N_{Bo} \hat{H}_{BV} + N_{Ao} \hat{H}_{AL} + q_V = N_{Bo} \hat{H}_{BL} + N_{Ao} \hat{H}_{AV} + q_L \quad (5.6)$$

En la figura 39 se muestra el sentido de los flujos energéticos en la interfase.

Los perfiles de temperatura en el vapor y en el líquido se indican en la figura 40.

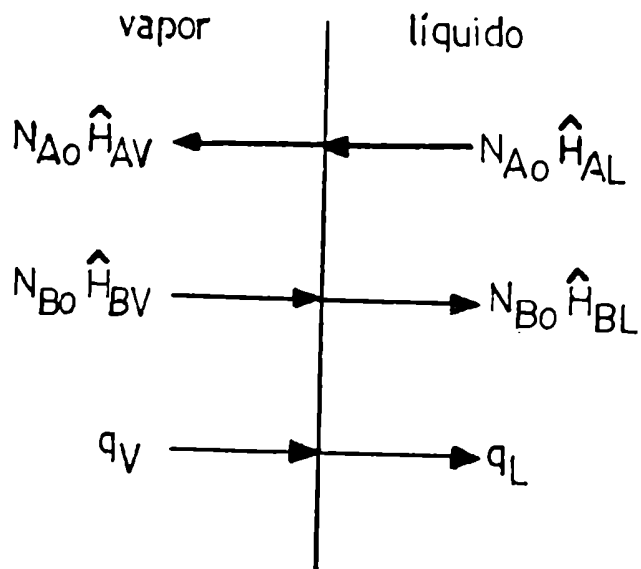


Fig. 39 Flujos de calor en la interfase líquido - vapor

Los flujos de calor se expresan a través de un coeficiente de transferencia, es decir:

$$\begin{aligned} q_V &= h_V (T_V - T_o) \\ q_L &= h_L (T_o - T_L) \end{aligned} \tag{5.7}$$

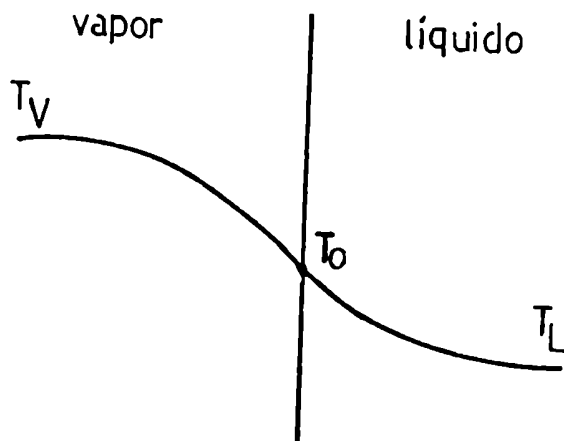


Fig. 40 Perfil de temperatura

Si se toma en cuenta que:

$$\begin{aligned}\lambda_A &= \hat{E}_{AV} - \hat{E}_{AL} \\ \lambda_B &= \hat{E}_{BV} - \hat{E}_{BL}\end{aligned}\quad (5.8)$$

resulta finalmente:

$$- N_{Ao} \lambda_A + N_{Bo} \lambda_B + h_V (T_V - T_o) - h_L (T_o - T_L) = 0 \quad (5.9)$$

Las ecuaciones (5.1), (5.2), (5.4), (5.8) y (5.9) constituyen un sistema algebraico cuyas incógnitas son las variables de interfase: N_{Ao} , N_{Bo} , Y_{Ao} , x_{Ao} , T_o .

A continuación se plantean los balances no estacionarios que permiten la obtención de información en cada instante.

f) Balance macroscópico de materia para el componente A

Tomando la burbuja como volumen de control resulta:

$$\frac{d}{dt} m_A^{tot} = v_A^{(m)} \quad (5.10)$$

es decir: la acumulación de masa del componente A se debe a la materia que ingresa a través de las paredes del volumen de control. Este último se indica con el supraíndice (m).

Siendo

$$m_A^{tot} = \int_V c_A dv \quad (5.11)$$

y definiendo

$$\bar{C}_A = \frac{\int_V C_A \, dv}{V} \quad (5.12)$$

la ecuación (5.11) se transforma en:

$$\dot{m}_A^{\text{tot}} = \bar{C}_A V \quad (5.13)$$

Como se supuso que el tamaño de la burbuja no varía en el tiempo resulta:

$$\frac{d \dot{m}_A^{\text{tot}}}{dt} = V \frac{d\bar{C}_A}{dt} \quad (5.14)$$

Por definiciones:

$$\dot{W}_A^{(m)} = - \int_{S^{(m)}} (\underline{N} \cdot \underline{\check{n}}) \, dS \quad (5.15)$$

donde $\underline{\check{n}}$: vector unitario normal dirigido hacia afuera.

luego:

$$\dot{W}_A^{(m)} = N_{Ao} A \quad (5.16)$$

En definitiva el balance (5.10) se convierte en:

$$\frac{d\bar{C}_A}{dt} = \frac{A}{V} N_{Ao} \quad (5.17)$$

Si la forma de las burbujas se asimila a un esferoide oblongo las expresiones para el volumen y el área de transferencia están dadas por las ecuaciones (3.20) y (3.37) respectivamente.

g) Balance macroscópico de energía térmica

El balance macroscópico de energía térmica se expresa en forma general a través de:

$$\frac{d}{dt} U^{tot} = Q^{(m)} + Q \quad (5.18)$$

donde:

U^{tot} es la energía interna total dentro del volumen de control y se halla dada por:

$$U^{tot} = \int_V C \hat{U}^{tot} dV \quad (5.19)$$

siendo:

\hat{U}^{tot} = energía interna específica total por mol.

C = concentración total

Por otra parte:

$Q^{(m)}$ es la sumatoria del calor transferido por la materia que entra y sale del sistema a través del área que envuelve el volumen de control y se define por medio de:

$$Q^{(m)} = \int_{S^{(m)}} \left(\sum_{i=1}^N \frac{N_i}{N} \hat{H}_i \right) \cdot \underline{v} \, dS \quad (5.20)$$

\dot{Q} es el calor transferido desde el volumen de control al medio externo y se define por medio de:

$$\dot{Q} = - \int_{S(m)} (\underline{q} \cdot \underline{n}) dS \quad (5.21)$$

Como C se supuso uniforme dentro del volumen de control la expresión (5.19) se convierte en:

$$\dot{U}^{tot} = \int_V (\hat{U}_A C_A + \hat{U}_B C_B) dV \quad (5.22)$$

Como resulta imposible conocer los valores absolutos de \hat{U}_A y \hat{U}_B se toma un nivel energético de referencia: en este caso se ha elegido la temperatura inicial de la burbuja T_{v1} luego:

$$\begin{aligned} \hat{U}_A &= C_{vA} (T_v - T_{v1}) \\ \hat{U}_B &= C_{vB} (T_v - T_{v1}) \end{aligned} \quad (5.23)$$

donde C_v es la capacidad calorífica del vapor a volumen constante.

Considerando que C_{vA} y C_{vB} no varían apreciablemente dentro de la burbuja por efectos del perfil de temperatura, utilizando la expresión (5.12) y su equivalente para el componente B y definiendo:

$$\bar{T}_v = \frac{1}{V} \int_V T_v dV \quad (5.24)$$

la expresión (5.22) se convierte en:

$$U^{tot} = V (C_{vA} \bar{C}_A + C_{vB} \bar{C}_B) (\bar{T}_V - T_{Vi}) \quad (5.25)$$

Si se supone que V , C_{vA} , C_{vB} son constantes en el tiempo y además se utiliza la ecuación (5.17) y su equivalente para el componente B resulta:

$$\begin{aligned} \frac{dU^{tot}}{dt} = V (C_{vA} \bar{C}_A + C_{vB} \bar{C}_B) \frac{d\bar{T}_V}{dt} + \\ + (\bar{C}_{vA} N_{Ao} - \bar{C}_{vB} N_{Bo}) (\bar{T}_V - T_{Vi}) \Delta \quad (5.26) \end{aligned}$$

El planteo del segundo miembro del balance (5.18) depende de la ubicación del volumen de control.

Si este se halla por afuera de la interfase y se considera que A vaporiza y B condensa a la temperatura de interfase T_o resulta:

$$\dot{Q}^{(m)} = \Delta (N_{Ao} \hat{H}_{AL} \Big|_{T_o} - N_{Bo} \hat{H}_{BL} \Big|_{T_o}) \quad (5.27)$$

Pero:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{AL} \Big|_{T_o} = \hat{H}_{AV} \Big|_{T_{Vi}} - C_{pA} (T_{Vi} - T_o) - \lambda_A \\ \hat{H}_{BL} \Big|_{T_o} = \hat{H}_{BV} \Big|_{T_{Vi}} - C_{pB} (T_{Vi} - T_o) - \lambda_B \quad (5.28) \end{aligned}$$

donde C_{p_A} , C_{p_B} son las capacidades caloríficas a presión constante de los componentes al estado vapor y $\hat{H}_{AV}|_{T_{V1}} = \hat{H}_{BV}|_{T_{V1}} = 0$

por ser la temperatura inicial del vapor el nivel energético de referencia adoptado.

Además :

$$\dot{Q} = q_L A = h_L A (T_o - T_L) \quad (5.29)$$

Luego:

$$\dot{Q}^{(m)} + \dot{Q} = ((T_{V1} - T_o) (-N_{Ao} C_{p_A} + N_{Bo} C_{p_B}) - N_{Ao} \lambda_A + N_{Bo} \lambda_B - q_L) A \quad (5.30)$$

Si se aplica^a esta expresión el balance de energía en la interfase (5.9) se obtiene finalmente:

$$\dot{Q}^{(m)} + \dot{Q} = ((T_{V1} - T_o) (-N_{Ao} C_{p_A} + N_{Bo} C_{p_B}) - q_V) A \quad (5.31)$$

A esta misma expresión puede llegarse ubicando el volumen de control adentro de la interfase. En este caso resulta:

$$\dot{Q}^{(m)} + \dot{Q} = (N_{Ao} \hat{H}_{AV}|_{T_o} - N_{Bo} \hat{H}_{BV}|_{T_o} - q_V) A \quad (5.32)$$

Peros:

$$\hat{H}_{AV}|_{T_o} = \hat{H}_{AV}|_{T_{V1}} - C_{p_A} (T_{V1} - T_o) \quad (5.33)$$

$$\hat{H}_{BV}|_{T_o} = \hat{H}_{BV}|_{T_{V1}} - C_{p_B} (T_{V1} - T_o)$$

donde $\hat{H}_{AV} \Big|_{T_{V1}} - \hat{H}_{BV} \Big|_{T_{V1}} = 0$ por las consideraciones efectuadas anteriormente.

Luego (5.32) se convierte en la ecuación (5.31).

Finalmente el balance macroscópico de energía térmica puede escribirse partiendo de las ecuaciones (5.26) y (5.31) de la siguiente forma

$$\left(C_{vA} \bar{C}_A + C_{vB} (C - \bar{C}_A) \right) \frac{d\bar{T}_V}{dt} = \frac{A}{V} \left((T_{V1} - \bar{T}_V) (N_{Ao} C_{vA} - N_{Bo} C_{vB}) - (T_{V1} - T_o) (N_{Ao} C_{pA} - N_{Bo} C_{pB}) - h_V (\bar{T}_V - T_o) \right) \quad (5.34)$$

Al conjunto anterior de ecuaciones (5.2), (5.4), (5.5), (5.9), (5.17), (5.34) se agregan:

h) Definición de fracción molar de A en el seno del vapor

$$y_{Ab} = \frac{\bar{C}_A}{C} \quad (5.35)$$

i) Idealidad del vapor de la burbuja

Suponiendo que el vapor de la burbuja cumple con la ley de los gases ideales resulta:

$$C = \frac{P}{R \bar{T}_V} \quad (5.36)$$

j) Eficiencia de plato

De acuerdo con la ecuación (1.1) resulta:

$$E_{MV} = \frac{y_{Abf} - y_{Abi}}{y_{Ao} - y_{Abi}} \quad (5.37)$$

donde y_{Abf} da la composición final de la burbuja.

k) Condiciones iniciales

$$T_V(0) = T_{Vi} \quad (5.38)$$

$$y_{Ab}(0) = y_{Abi} \quad (5.39)$$

5.3 Resolución del sistema de ecuaciones

5.3.1 Sistema de ecuaciones algebraicas

Este sistema está integrado por las siguientes ecuaciones:

$$N_{Ao} = \frac{k_x (x_{Ab} - x_{Ao}) - x_{Ao} N_{Bo}}{1 - x_{Ao}} \quad (5.1)$$

$$N_{Ao} = \frac{k_y (y_{Ao} - y_{Ab}) - y_{Ao} N_{Bo}}{1 - y_{Ao}} \quad (5.2)$$

$$x_{Ao} = a_1 + a_2 y_{Ao} + a_3 y_{Ao}^2 \quad (5.4)$$

$$y_{Ao} = b_1 + b_2 T_o + b_3 T_o^2 \quad (5.5)$$

$$- N_{Ao} \lambda_A + N_{Bo} \lambda_B + h_V (T_V - T_o) - h_L (T_o - T_L) = 0 \quad (5.9)$$

Son datos constantes en el tiempo para cada plato: los coeficientes de transferencia k_x , k_y , h_L , h_V , los calores latentes de vaporización de ambos componentes λ_A , λ_B , los coeficien-

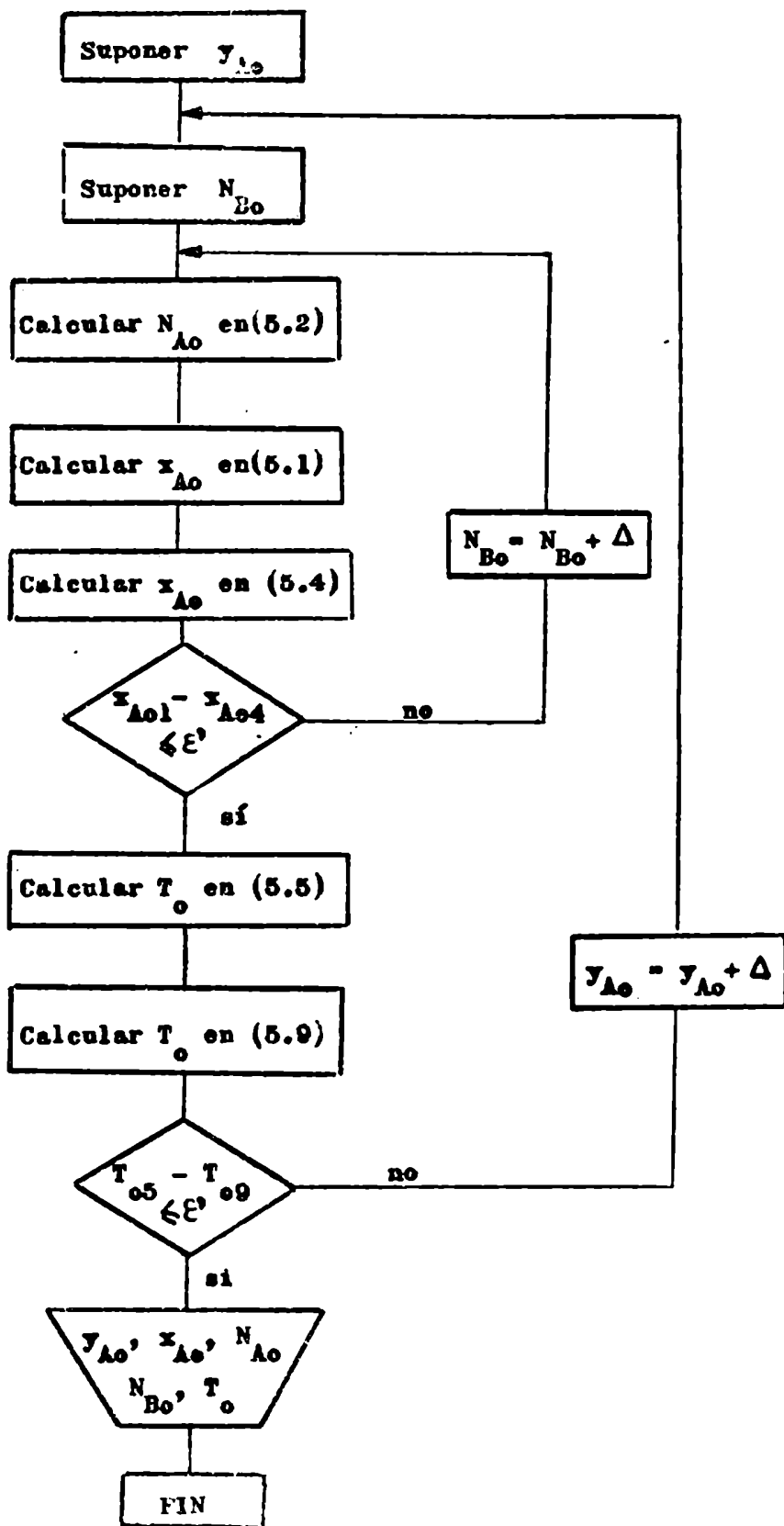
tes correspondientes a los ajustes polinómicos a_1 , a_2 , a_3 , b_1 , b_2 , b_3 , la composición y temperatura del líquido x_{Ab} , T_L .

Son datos del sistema algebraico variables durante el ascenso de la burbuja: la temperatura del vapor T_V , y su composición y_{Ab} . Esta información resulta conocida a tiempo = 0 por constituir las condiciones iniciales y a intervalos posteriores la provee la solución de las ecuaciones diferenciales.

Las incógnitas del sistema corresponden a las variables de interfase N_{Ao} , N_{Bo} , x_{Ao} , y_{Ao} , T_o .

5.3.1.1 Algoritmo de cálculo aplicado al sistema original

La aplicación del algoritmo de selección de variables(46) al sistema de ecuaciones planteado conduce al siguiente esquema de cálculos:



En este esquema aparecen dos lazos de iteración lo cual genera un alto grado de dificultad en la resolución del sistema.

Con el objeto de evitar este inconveniente y crear otro sistema algebraico que pueda resolverse con un solo lazo de iteración, las ecuaciones fueron reacomodadas como se muestra a continuación.

5.3.1.2 Reordenamiento de las ecuaciones

Si se igualan los segundos miembros de la ecuaciones (5.1) y (5.2) resulta:

$$k_x \frac{x_{Ab} - x_{Ao}}{1 - x_{Ao}} - k_y \frac{y_{Ao} - y_{Ab}}{1 - y_{Ao}} = N_{Bo} \left(\frac{x_{Ao}}{1 - x_{Ao}} - \frac{y_{Ao}}{1 - y_{Ao}} \right) \quad (5.40)$$

llamando:

$$R_1 = \frac{x_{Ab} - x_{Ao}}{1 - x_{Ao}}$$

$$R_2 = \frac{y_{Ab} - y_{Ao}}{1 - y_{Ao}}$$

$$R_3 = \frac{x_{Ao}}{1 - x_{Ao}} - \frac{y_{Ao}}{1 - y_{Ao}}$$

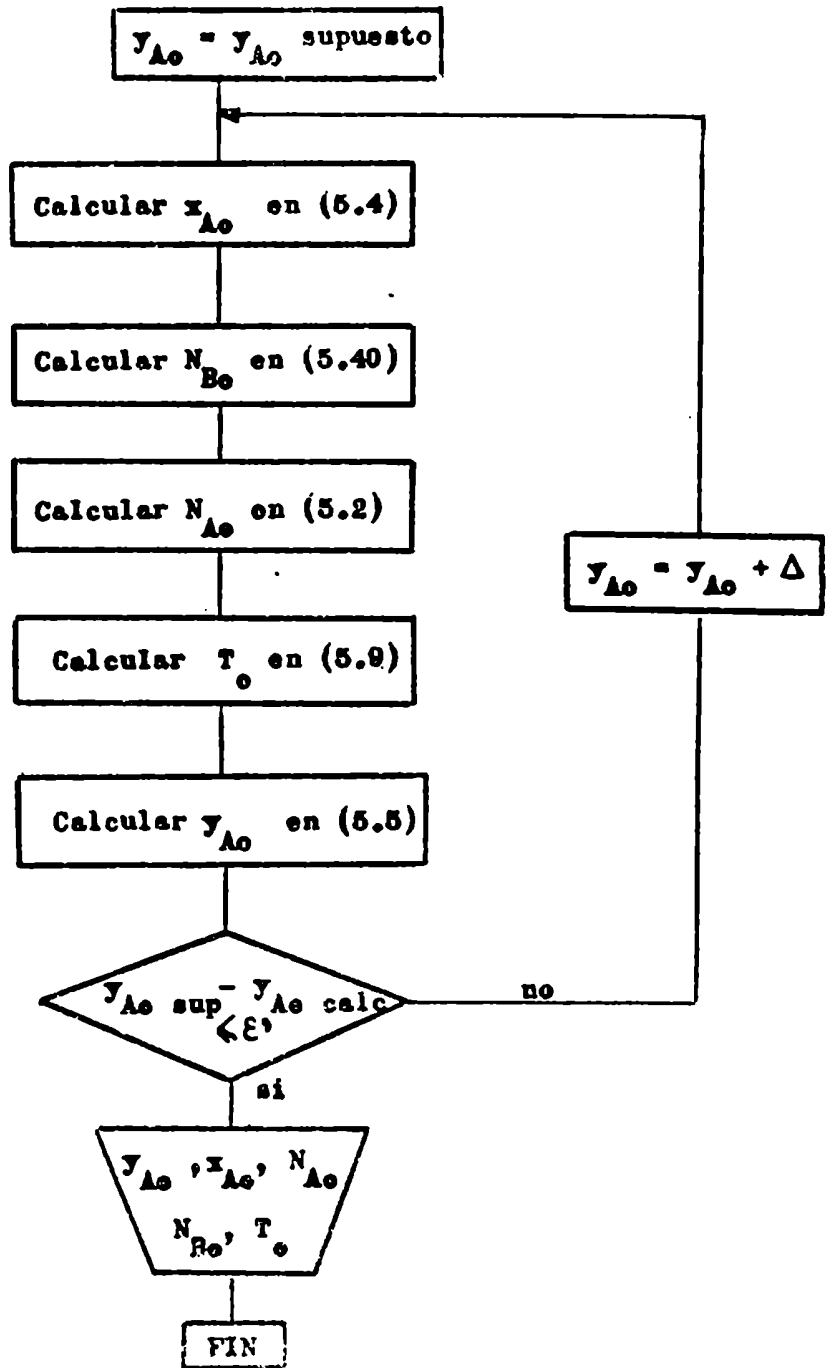
se obtiene:

$$N_{Bo} = \frac{k_x R_1 + k_y R_2}{R_3} \quad (5.41)$$

Si esta ecuación reemplaza a la (5.1) el sistema original se modifica.

Al aplicar el algoritmo de selección de variables (48) a dicho sistema resulta una sola variable de tanteo y_{Ao} y un solo lazo de iteración.

El orden de cálculo se esquematiza como sigue:



5.3.1.3 Método numérico de búsqueda de raíces

La forma en que se elige el incremento de la variable a iterar define el método numérico de búsqueda de raíces.

Existen métodos como el de la secante cuyo algoritmo iterativo está definido por:

$$x^{j+1} = x^j - \frac{(x^j - x^{j-1}) \cdot f(x^j)}{f(x^j) - f(x^{j-1})}$$

donde j es el número de iteración.

La figura (41) indica esquemáticamente el modo en que opera el método.

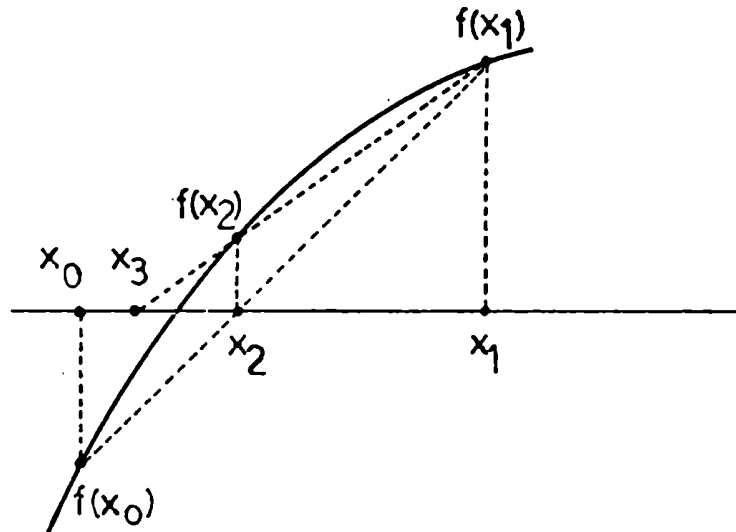


Fig. 41 Método de la secante

Una variante de este método es el Régula - Falsi clásico en el que uno de los puntos se toma siempre fijo (Fig 42)

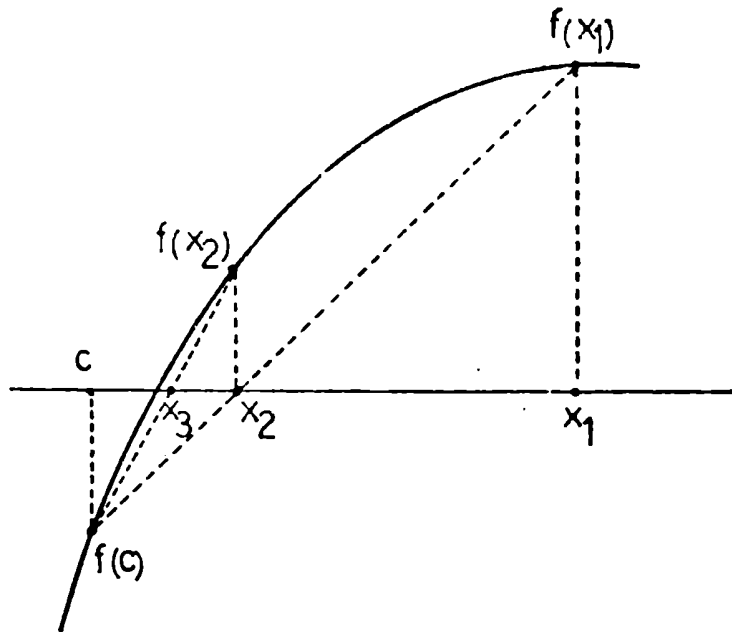


Fig. 42 Método Régula - Falsi clásico

El algoritmo iterativo es:

$$x^{j+1} = x^j - \frac{(x^j - c) \cdot f(x^j)}{f(x^j) - f(c)}$$

La posibilidad de no convergencia de estos métodos es grande y esa fue la razón por la cual se eligió como variante el método de la falsa posición, que consiste en tomar como punto $(x^{j-1}, f(x^{j-1}))$ el último punto en el cual la función tomó signo opuesto.

Por lo tanto $f(x^{j-1}) \cdot f(x^j) < 0$.

En estas condiciones el método converge incondicionalmente como se muestra en la figura (43).

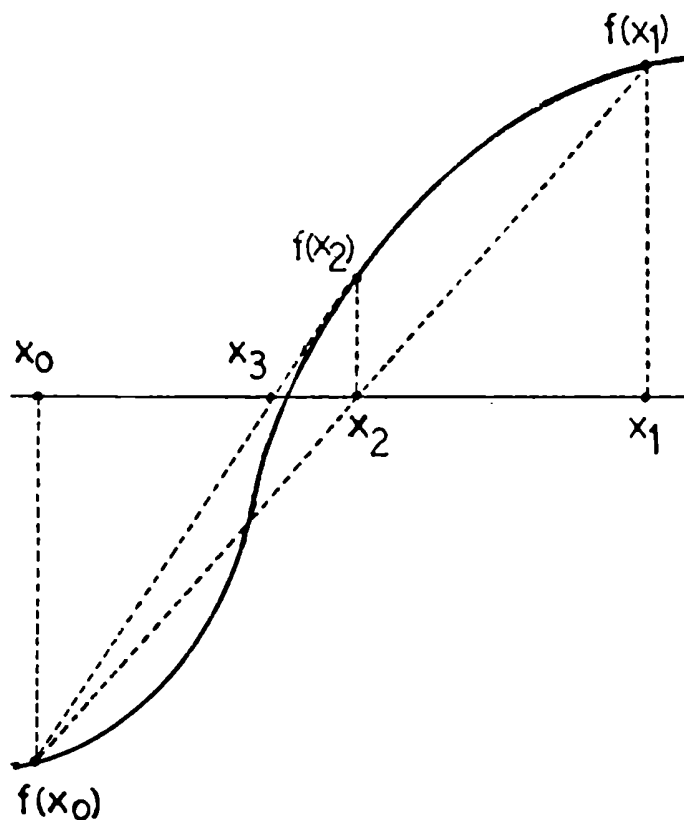
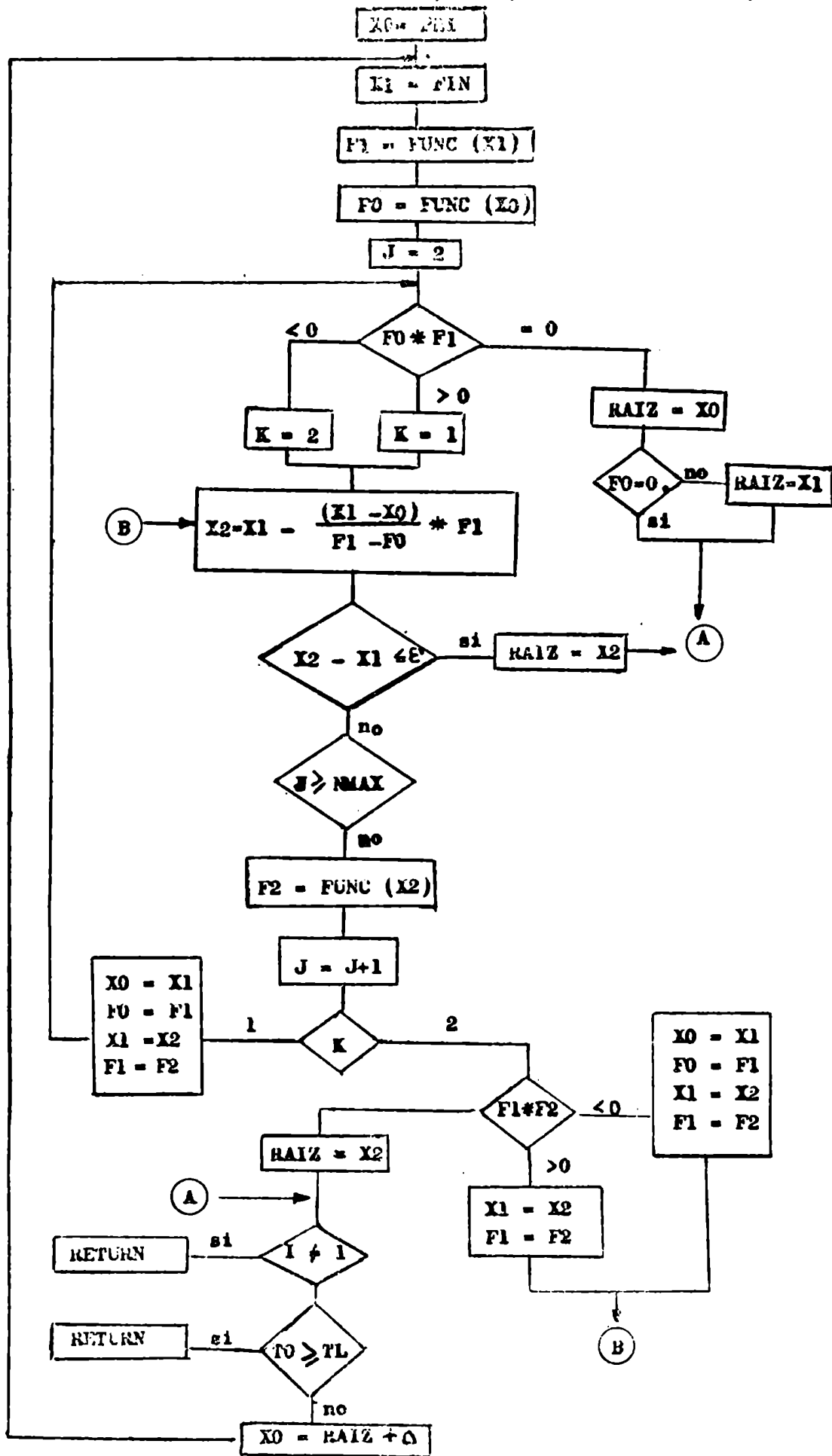


Fig. 43 Método de la falsa posición

El diagrama en bloques que se muestra a continuación constituye la subrutina falsa encargada de la búsqueda de las raíces.

SUBROUTINA FALSA (INI , FIN , EREOR, NMAX, FUNC, RAIZ)



La subrutina Falsa tiene los siguientes argumentos:

PRI = Extremo inicial del intervalo de búsqueda de la raíz.

FIN = Extremo final del intervalo

ERROR = Cota aceptada (ϵ)

NMAX = Numero máximo de iteraciones

FUNC = Subprograma FUNCTION donde se calcula el valor de la función a la cual se le quiere hallar la raíz.

RAIZ = Valor que devuelve el subprograma al programa principal .

El subprograma Function FUNC (YAO) incluye el sistema de ecuaciones algebraicas de modo que su resolución sea equivalente a hallar la raíz de la función FUNC definida como el valor absoluto de la diferencia entre el valor de y_{A_0} recibido desde la subrutina FALSA y el calculado a partir del sistema de ecuaciones

SUBPROGRAMA FUNCTION FUNC (YAO)

$$XAO = A1 + A2 YAO + A3 YAO^2$$

$$R3 = \frac{XAO}{1 - XAO} - \frac{YAO}{1 - YAO}$$

$$R1 = \frac{XAB - XAO}{1 - XAO}$$

$$R2 = \frac{YAB - YAO}{1 - YAO}$$

$$NBO = \frac{KX B1 + KY R2}{R3}$$

$$NAO = \frac{KY (YAO - YAB) - YAO NBO}{1 - YAO}$$

$$TO = \frac{-NAO \lambda A + NBO \lambda B + HV TV + HL TL}{HV + HL}$$

$$YAO C = B1 + B2 TO + B3 TO^2$$

$$FUNC = |YAO C - YAO|$$

5.3.2 Sistema de ecuaciones diferenciales

Resuelto el sistema algebraico a $t = 0$, es decir una vez hallada las variables de interfase x_{Ao} , y_{Ao} , T_o , N_{Ao} , N_{Bo} para las condiciones iniciales T_{Vi} , y_{Abi} se debe avanzar en el tiempo hasta que la burbuja alcance el nivel del líquido en el plato.

Esto se logra a través de las ecuaciones diferenciales gobernantes del sistema.

$$\frac{d\bar{C}_A}{dt} = \frac{A}{V} N_{Ao} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\bar{T}_V}{dt} = \frac{A}{V} & (T_{Vi} - \bar{T}_V) (N_{Ao} C_{vA} - N_{Bo} C_{vB}) - (T_{Vi} - T_o) (N_{Ao} C_{pA} - \\ & - N_{Bo} C_{pB}) - h_V (\bar{T}_V - T_o) \quad / \quad (C_{vA} C_A + C_{vB} (C - C_A)) \end{aligned} \quad (5.34)$$

con condiciones iniciales:

$$\bar{C}_A = C_{Ai}$$

$$\bar{T}_V = T_{Vi}$$

Las ecuaciones anteriores pueden escribirse alternativamente como:

$$\frac{d\bar{C}_A}{dt} = f_1(\bar{T}_V, \bar{C}_A)$$

$$\frac{d\bar{T}_V}{dt} = f_2(\bar{T}_V, \bar{C}_A)$$

A este sistema se aplica el método numérico de resolución.

5.3.2.1 Metodo numérico de resolución del sistema de ecuaciones diferenciales

El método utilizado para resolver las ecuaciones diferenciales es un Runge Kutta de tercer orden que se detalla a continuación (47).

Si se llama h al intervalo de tiempo elegido, T_{Va} , C_{Aa} a los valores correspondientes al intervalo anterior, puede calcularse:

$$QC1 = h \cdot f_1 (T_{Va}, C_{Aa})$$

$$QT1 = h \cdot f_2 (T_{Va}, C_{Aa})$$

$$QC2 = h \cdot f_1 (T_{Va} + 1/2 QT1, C_{Aa} + 1/2 QC1)$$

$$QT2 = h \cdot f_2 (T_{Va} + 1/2 QT1, C_{Aa} + 1/2 QC1)$$

$$QC3 = h \cdot f_1 (T_{Va} + 2 QT2 - QT1, C_{Aa} + 2 QC2 - QC1)$$

$$QT3 = h \cdot f_2 (T_{Va} + 2 QT2 - QT1, C_{Aa} + 2 QC2 - QC1)$$

por último los nuevos valores resultan

$$\bar{C}_A = C_{Aa} + 1/6 (QC1 + 4 QC2 + QC3)$$

$$\bar{T}_V = T_{Va} + 1/6 (QT1 + 4 QT2 + QT3)$$

En el cálculo de f_1 y f_2 y en la obtención de las condiciones de interfase al final del intervalo de tiempo fue necesario resolver el sistema de ecuaciones algebraicas a través del llamado de la subrutina Falsa.

5.3.2.2 Programa principal

El diagrama en bloques que se presenta a continuación corresponde al Programa Principal que incluye el método de resolución del sistema de ecuaciones diferenciales.

Su listado se muestra en el Apéndice I

PROGRAMA PRINCIPAL

KX, KY, HL, HV, V, S, A1, A2, A3
 B1, B2, B3, A, B, CVA, CVB, CPA, CPB
 CPB, XAB, TL, YABI, TVI, DT, N

KX, KY, HL, HV, XAB, TL, YABI, V
 TVI, A1, A2, A3, B1, B2, B3, S
 A, B, CVA, CVB, CPA, CPB

J = 0

TV = TVI
 YAB = YABI

$$C = \frac{10^3}{82 \cdot (TV + 273)}$$

CA = YAB * C

PRI = YABI

$$FIN = B1 + B2 TL + B3 TL^2$$

J = J + 1

Método de Runge Kutta de 3ª orden

L = 1

$$F1 = S/V + NAO$$

$$F2 = S/V + ((TVI - TV) (NAO CVA - NBO CVB) - (TVI - TO) (NAO CPA - NBO CPB) - HV (TV - TO)) / (CVA CA + CVB (C - CA))$$



QC1 = DT F1
 QT1 = DT F2
 CAA = CA
 TVA = TV
 TV = TVA + 0,5 QT1
 L = 2

QC2 = DT F1
 QT2 = DT F2
 CA = CAA + 2QC2 - QC1
 TV = TVA + 2QT2 - QT1
 L = 3

QC3 = DT F1
 QT3 = DT F2
 CA = CAA + (QC1 + 4QC2 + QC3) / 6
 TV = TVA + (QT1 + 4QT2 + QT3) / 6

$$C = \frac{10^3}{82(TV + 273)}$$

YAB = CA / C
 PRI = YAO

CALL FALSA (PRI, FIN, EIKOR, NMAX, FUNC, MAIZ)

J = 0

L = 3

$$TT = J * DT$$

TT, C, CA, TV, YAO,
 YAO, NBO, NBO,
 TO, NG, RL

J < N

FIN

EPIC

5.4 Diseño del cálculo

5.4.1 Elección de niveles en los parámetros del sistema

En el estudio de la eficiencia de plato se analizó principalmente la influencia de dos efectos:

- a) la resistencia controlante en la transferencia de materia
- b) la diferencia entre la temperatura del vapor que ingresa al plato y el líquido de éste (ΔT).

La variación de la pendiente de la curva de equilibrio y la de los coeficientes de transferencia con la composición y temperatura del sistema pueden modificar el primero de los efectos a lo largo de una columna de destilación.

Por esa razón la eficiencia de plato fue determinada a distintas concentraciones de la mezcla eligiéndose éstas, de modo que pudiesen apreciarse diferencias en los valores de la pendiente de la curva de equilibrio y en los coeficientes de transferencia.

Cada plato, fue caracterizado por la composición del líquido de salida que, de acuerdo con la suposición de mezclado total, coincide con la composición propia del plato.

A través del análisis de la variable ΔT , se ponderó la influencia de la transferencia de calor vapor-líquido en la eficiencia de plato.

Dicha variable, se halla ligada a la relación de reflujo con que opera la columna.

En condiciones de reflujo total, ΔT alcanza su máximo nivel ya que en ese caso, la diferencia de composición entre el vapor que ingresa al plato y el líquido de éste es la máxima que se puede establecer para dicho plato y consecuentemente también será máxima la diferencia entre ambas temperaturas (ΔT_{max} .)

5.5 Alimentación de datos al programa de computadora

5.5.1 Elección del sistema

Para la aplicación del modelo matemático planteado se eligió el sistema metanol - agua del cual existen datos experimentales que registran la variación de la eficiencia con la composición.

Es un sistema en el cual los calores latentes de vaporización de ambos componentes son distintos y por lo tanto, la difusión es no equimolar aún desde el punto de vista de la teoría clásica.

Las figuras (44) (45) muestran respectivamente la curva de equilibrio y las curvas de temperatura vs. composición del sistema metanol - agua.

La curva de equilibrio y la de temperatura de rocío fueron alimentadas al programa en forma polinómica.

Los ajustes se efectuaron usando un método de cuadrados mínimos y se realizaron por tramos, cada uno de estos correspondió a un plato operando en condiciones de reflujo total ya que ese caso, comprende todas las condiciones de equilibrio posibles para dicho plato.

En el Apéndice II se incluye el listado correspondiente a los ajustes polinómicos y un ejemplo de cálculo del mismo para uno de los tramos de la curva de equilibrio, y de puntos de rocío.

A efectos de definir el intervalo de búsqueda de raíces de la Subrutina Falsa se ha elegido como valor inicial la composición del vapor de la burbuja que ingresa en el plato y como valor final la del vapor en equilibrio con el líquido; de este modo se abarcan todos los valores que puede adoptar la composición del vapor de interfase.

En la tabla XIV se muestran para el sistema elegido: la composición de los platos considerados, los niveles seleccionados para la variable ΔT y consecuentemente los valores de composición del vapor que ingresa al plato. Además se han tabulado los coeficientes de los ajustes polinómicos para las curvas de equilibrio (a_1, a_2, a_3, a_4) y de puntos de rocío (b_1, b_2, b_3)

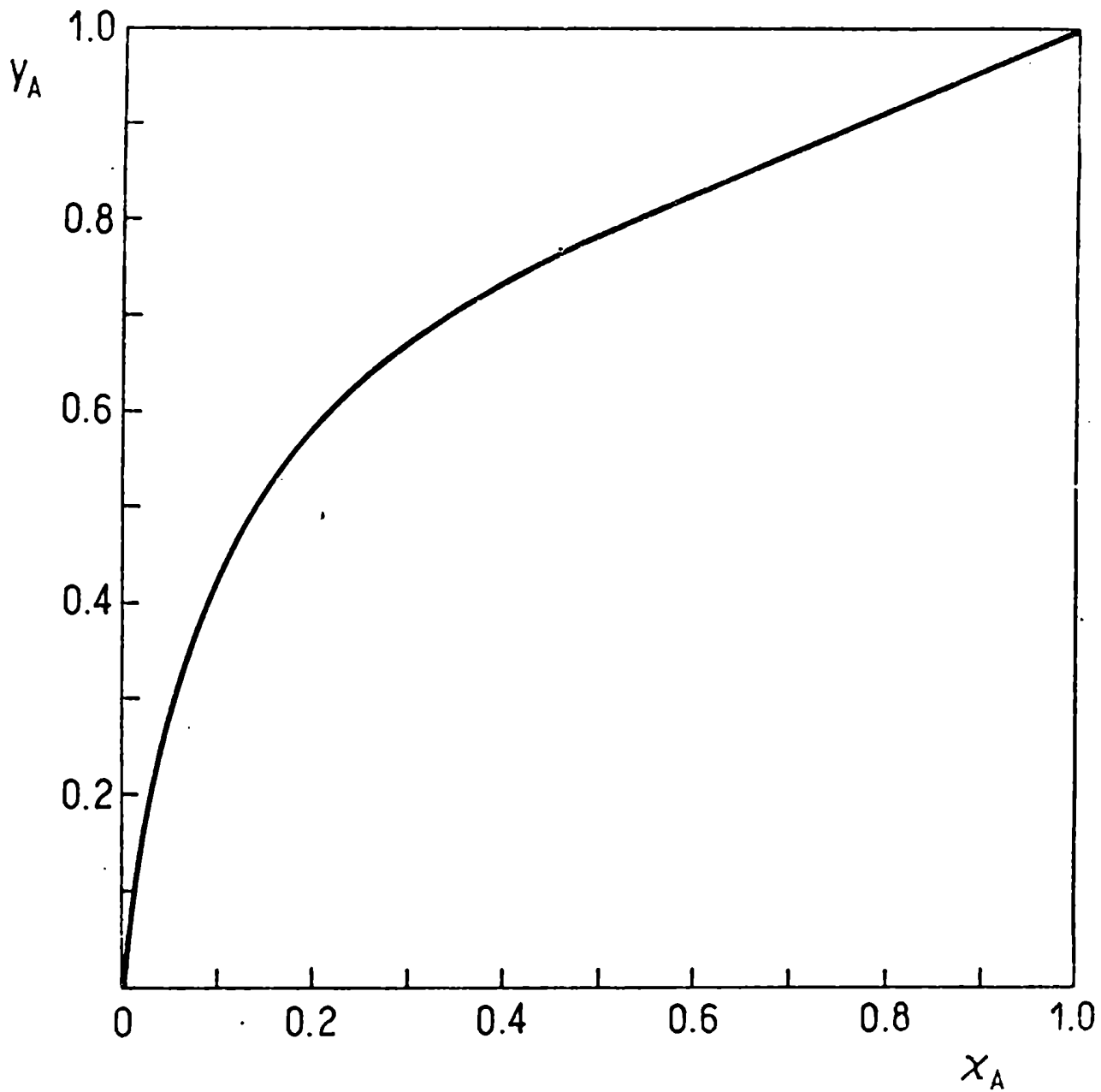


Fig. 44 Sistema Metanol - Agua . Curva de Equilibrio

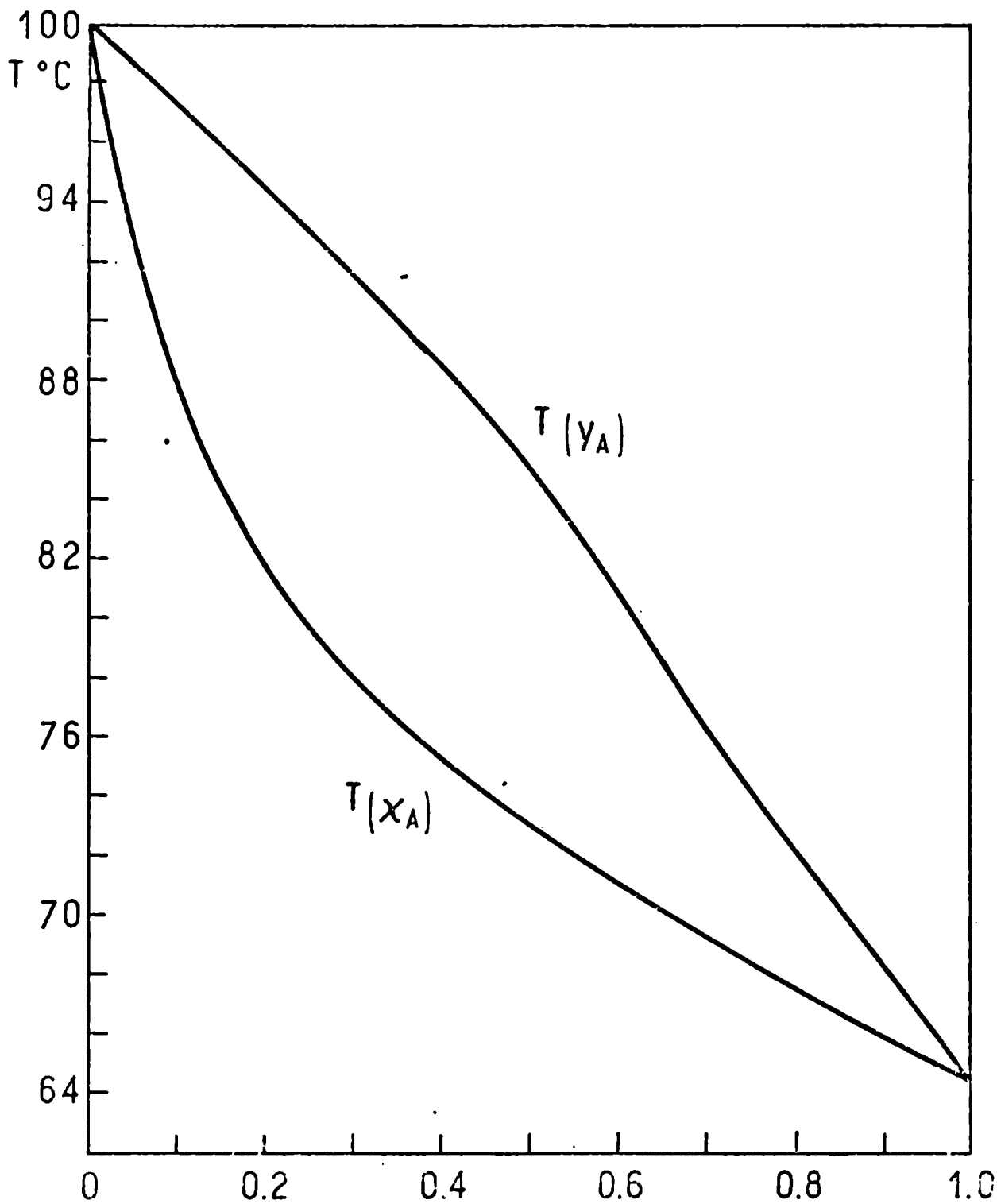


Fig. 45 Sistema Metanol - Agua. Curvas de puntos de rocío y de burbuja.

TABLA XIV
Condiciones operativas de los platos

x_{AL}	T_L (°C)	$\Delta T = 4 \text{ } ^\circ\text{C}$		$\Delta T = 7 \text{ } ^\circ\text{C}$		$\Delta T = 10 \text{ } ^\circ\text{C}$		Reflujo total		
		T_{Vi}	y_{Ai}	T_{Vi}	y_{Ai}	T_{Vi}	y_{Ai}	y_{Ai}	T_{Vi}	ΔT_{max}
0,1	87,7	91,7	0,287	94,7	0,190	-	-	0,1	97,6	9,9
0,2	81,7	85,7	0,475	88,7	0,385	91,7	0,290	0,2	94,5	12,8
0,3	78,0	82,0	0,580	85,0	0,495	88,0	0,410	0,3	91,2	13,2
0,5	73,1	77,1	0,682	80,1	0,610	83,1	0,545	0,5	84,8	11,7
0,7	69,3	73,1	0,779	76,3	0,705	-	-	0,7	78,4	7,1
0,8	67,6	71,6	0,845	-	-	-	-	0,8	72,6	4,9

TABLA XIV (cont.)

Coefficientes de los ajustes polinómicos de las curvas de equilibrio y de puntos de rocío

XAL	$x = a_1 + a_2 y + a_3 y^2 + a_4 y^3$				$y = b_1 + b_2 T + b_3 T^2$		
	a_1	a_2	a_3	a_4	b_1	b_2	b_3
0,1	- 0,00922	0,2300	- 0,240	0,750	0,9901	0,01708	- 0,0002695
0,2	- 0,01867	0,3622	- 0,7461	1,330	0,4406	0,02916	- 0,0003356
0,3	- 0,17500	1,5250	- 3,5150	3,457	0,3026	0,03240	- 0,0003548
0,5	- 0,00403	0,1867	- 0,1602	0,785	0,9973	0,01478	- 0,0002434
0,7	0,2855	- 1,4700	2,2390	-	1,6610	- 0,00072	- 0,0001547
0,8	- 1,1930	2,1430	0,0382	-	2,5560	- 0,02400	- 0,0000043

5.5.2 Propiedades físicas de los componentes de la mezcla

Calores latentes de vaporización

Los calores latentes de vaporización para ambos componentes se expresaron para el rango de temperaturas de trabajo mediante las siguientes funciones:

$$\lambda_A \left(\frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right) = 7732,05 + 19,518 (100 - T (^{\circ}\text{C}))$$

$$\lambda_B \left(\frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right) = 9723,44 + 10,800 (100 - T (^{\circ}\text{C}))$$

Estas funciones fueron obtenidas a partir de datos extraídos de International Critical Tables (48)

En cada plato los calores latentes de vaporización se evaluaron a la temperatura del líquido.

Capacidad calorífica a presión y volumen constante de los componentes al estado vapor

Para el cálculo de las capacidades caloríficas de los componentes al estado vapor se utilizaron las siguientes expresiones polinómicas (49) :

$$C_{p_{Av}} \left(\frac{\text{cal}}{\text{mol } ^{\circ}\text{C}} \right) = 4,394 + 24,270 \cdot 10^{-3} T - 6,855 \cdot 10^{-6} T^2$$

$$C_{p_{Bv}} \left(\frac{\text{cal}}{\text{mol } ^{\circ}\text{C}} \right) = 7,256 + 2,298 \cdot 10^{-3} T - 0,283 \cdot 10^{-6} T^2$$

donde T es la temperatura en $^{\circ}\text{K}$.

Teniendo en cuenta que (48) :

$$\gamma_A = \frac{C_{p_A}}{C_{v_A}} = 1,203$$

$$\gamma_B = \frac{C_{p_B}}{C_{v_B}} = 1,373$$

se obtuvieron en cada caso los valores correspondientes de las capacidades caloríficas a volumen constante para cada componente.

5.5.3. Plato de burbujeo

5.5.3.1 Diámetro de los orificios del plato

Los diámetros de los orificios que usualmente se encuentran en los platos perforados utilizados en columnas de destilación son 1/8" , 1/8" , 3/16" , 1/4" , 3/8" , 1/2". (50), (51), (52).

Sin embargo las perforaciones utilizadas más frecuentemente en platos comerciales tienen de 1/8" a 3/16" de diámetro. (50)

El uso de orificios más pequeños es costoso y se reportó el hecho de que forman espuma que acarrea problemas y aumenta poco la eficiencia de contacto.

De acuerdo a lo antedicho se ha seleccionado para el presente estudio un diámetro de orificio de 1/8".

5.5.3.2 Tamaño de burbujas: cálculo de volumen y área

Para el cálculo del diámetro equivalente de una burbuja individual formada en un orificio singular puede utilizarse la expresión (3.19) que surge de una ecuación que involucra un balance entre tensión superficial y fuerzas de flotación.

Sin embargo en la práctica, las burbujas formadas no individualmente a partir de un orificio único aumentan de tamaño con el aumento de la velocidad del gas y su diámetro equivalente es mayor que el calculado a partir de la ecuación (3.19).

A través de medidas experimentales (53) se comprobó que en el caso de un orificio de 1/8" el diámetro equivalente de las burbujas que se forman es de 0,5".

El valor de la excentricidad se obtuvo a partir de la curva de la figura 9 y resultó $e = 2,9$.

Con estos datos y empleando para el cálculo del volumen y área de burbuja las ecuaciones (3.28) y (3.37) respectivamente se obtuvieron los siguientes valores:

$$V = 1,071 \text{ cm}^3$$

$$A = 6,767 \text{ cm}^2$$

con que posteriormente se alimentó el programa de computadora.

5.5.3.3 Velocidad de ascenso

La velocidad de ascenso de una burbuja formada individualmente en un orificio singular es función del De y está representada en la curva de la figura 8.

Para una corriente de burbujas formada a partir de un orificio singular la velocidad es del orden de 1 pie/seg (mayor que la predicha por la curva mencionada) en un amplio range de caudales gaseosos y tamaño de burbujas (15).

Sin embargo en un plato perforado con múltiples orificios la velocidad de ascenso de las burbujas aumenta con el flujo de vapor hasta valores del orden de 9 pie/seg siendo los valores medios de 1,5 a 3,5 pie/seg (53).

Datos experimentales que verifican estos resultados pueden extraerse del trabajo de Ju Chin Chu y colaboradores (54) a partir de la funcionalidad que establecieron entre tiempo real de contacto de burbuja en el plato y sumergencia del mismo.

De acuerdo con este y para el problema planteado en este trabajo se adoptaron los siguientes valores:

Velocidad de ascenso: 50 cm/seg

Sumergencia de platos: 5 cm

Estos datos implican un tiempo de contacto de 0,1 seg.

5.5.4 Coefficientes de transferencia

5.5.4.1 Coefficientes de transferencia de materia

5.5.4.1.1 Coefficiente externo de transferencia de materia

Para el cálculo del coeficiente externo de transferencia de materia se utilizó la ecuación (3.10).

La inexistencia de datos experimentales de difusividades en fase líquida a temperaturas mayores de 25°C obligó a utilizar ecuaciones para evaluarlas a las temperaturas de plato.

Dichos coeficientes no solo varían con la temperatura sino además con la composición de la mezcla.

Por tal motivo se consideraron dos casos extremos:

- a) El coeficiente de difusión a bajas concentraciones de metanol se estimó a partir de la ecuación de Othmer y Thakar válida para soluciones acuosas diluídas (55)

$$D_{12} = 14,0 \cdot 10^{-5} \mu_v^{-1,1} \hat{V}_1^{-0,6} \quad (5.42)$$

donde:

μ_v : Viscosidad del agua. (cp)
 \hat{V}_1 : Volumen molar del soluto en su punto de ebullición normal.
(cm³/gr mol).

Siendo:

$$\mu_v_{80^\circ C} = 0,365 \text{ cp} \quad (56)$$

$$\hat{V}_1 = 42,5 \text{ cm}^3/\text{g mol} \quad (55)$$

resulta:

$$D_{12} = 4,41 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{seg}$$

b) Para valores de $x_A \approx 1$ el coeficiente de difusión se estimó a partir de la ecuación de Wilke Chang considerando una solución de agua en solvente orgánico. (2)

En esos casos (según recomiendan Reid y Sherwood (55) p. 559) el valor de D_{12} calculado debe dividirse por 2,3.

La ecuación mencionada es la siguiente:

$$D_{12} = 7,4 \cdot 10^{-8} \frac{(\gamma^s M_2)^{1/2} T}{\mu_2 \hat{V}_1^{0,6}} \quad (5.43)$$

donde:

γ^s : Parámetro de asociación para el solvente.

M_2 : Peso molecular del solvente.

μ_2 : Viscosidad de la solución en cp a la temperatura T(°K)

Siendo: (55)

$$\gamma^s_{\text{metanol}} = 1,9$$

$$M_2 = 32 \text{ g/mol}$$

$$\mu_2_{70^\circ\text{C}} = 0,35 \text{ cp}$$

$$V_1 = 18,7 \text{ cm}^3/\text{g mol}$$

resulta:

$$D_{12} = 4,21 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{seg}$$

Dada la proximidad de los valores obtenidos del coeficiente de difusión se adoptó como valor medio para toda la columna

$$D_{AB} = 4,31 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{seg}$$

La concentración total en el líquido se estableció a partir de la siguiente ecuación surgida de aplicar la propiedad de aditi-

vidad de los volúmenes molares.

$$C = \frac{\rho}{M} = \frac{1}{\frac{x_A M_A}{\rho_A} + \frac{x_B M_B}{\rho_B}} \quad (5.41)$$

donde ρ_A y ρ_B son las densidades de los componentes individuales y M_A , M_B sus pesos moleculares.

En la Tabla XV se presentan los valores obtenidos.

Tabla XV

Coefficiente externo de transferencia de materia

x_A	C mol/cm ³	$k_x \cdot 10^2$ mol/seg. cm ²
0.1	0,0475	0,2208
0.3	0,0388	0,1804
0.5	0,0326	0,1516
0.7	0,0282	0,1311
0.8	0,0264	0,1227

5.5.4.1.2 Coefficiente interno de transferencia de materia

En el cálculo del coeficiente interno se utilizó la correlación Sh vs. Pe presentada en el capítulo 4.

Previo a su aplicación fue necesario obtener los datos de difusividad del vapor en función de la temperatura a través de la ecuación de Chapman - Enskog (2).

Los detalles de dicho cálculo se muestran en el Apéndice III

Los valores de concentración total en el vapor se obtuvieron aplicando la ecuación general de los gases.

Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla XVI

TABLA XVI
Coefficiente interno de transferencia de
materia

J_A	T_V (°C)	D_V (cm ² /seg)	Pe	Sh	$C \cdot 10^4$ (mol/cm ³)	$k_y \cdot 10^4$ (mol/sg cm ²)
0,1	97,6	0,1671	380,0	17,9	0,329	0,775
0,3	91,2	0,1610	394,0	17,9	0,335	0,760
0,5	84,8	0,1549	409,9	17,9	0,340	0,742
0,7	78,4	0,1478	429,6	17,9	0,349	0,728
0,8	72,5	0,1452	434,3	17,9	0,353	0,727

5.5.4.2 Coefficientes de transferencia de calor

5.5.4.2.1 Coefficiente externo de transferencia de calor

La correlación empleada en el cálculo del coeficiente externo de transferencia de materia escrita en forma adimensional coincide con la ecuación (3.18).

Aplicando analogía de transferencia de calor y materia la correlación para transferencia de calor se expresa a través de:

$$Nu = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/2} Pe^{1/2} \quad (5.45)$$

donde el Pe en transferencia de calor se define como:

$$Pe = Re Pr = \frac{v_{co} De}{\alpha}$$

siendo α la difusividad térmica y

$$Nu = \frac{h De}{k_T} \quad \text{donde } k_T \text{ es la conductividad térmica.}$$

La expresión final para el cálculo del coeficiente externo de transferencia de calor resulta:

$$h_L = \left(\frac{4}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{v_{co}}{\alpha_L De} \right)^{1/2} k_{TL} \quad (5.46)$$

Las propiedades físicas que intervienen en la evaluación de h_L según la ecuación anterior son función de la composición y temperatura del plato.

El cálculo de las mismas se detalla a continuación y los resultados finales se muestran en la tabla XVIII

Para el cálculo de la densidad de la solución líquida se aplicó la siguiente ecuación derivada de la (5.44)

$$\rho = \frac{M_A x_A + M_B x_B}{M_A \frac{x_A}{\rho_A} + M_B \frac{x_B}{\rho_B}} \quad (5.47)$$

Esta fórmula fue aplicada a las distintas composiciones de plato y en cada caso se tuvo en cuenta la funcionalidad de ρ_A y ρ_B con la temperatura.

Los datos de capacidad calorífica del líquido surgieron de aplicar la siguiente expresión:

$$\hat{C}_p = \hat{C}_{p_A} v_A + \hat{C}_{p_B} v_B = \frac{\hat{C}_{p_A} x_A M_A + \hat{C}_{p_B} x_B M_B}{x_A M_A + x_B M_B} \quad (5.48)$$

siendo la capacidad calorífica de los componentes puros en función de la temperatura (48):

TABLA XVII

T °C	\hat{C}_{p_A} cal/g °C	\hat{C}_{p_B} cal/g °C
60	0,6339	1,0013
80	0,6507	1,0028
100	0,6674	1,0042

Se adoptaron como valores medios para los componentes individuales en el rango de temperaturas de trabajos:

$$\hat{C}_{p_A} = 0,6500 \text{ cal/g } ^\circ\text{C} \quad \hat{C}_{p_B} = 1,003 \text{ cal/g } ^\circ\text{C}$$

El coeficiente de conductividad térmica para el líquido se obtuvo a partir de un nomograma en función de la fracc. másica de metanol. (57)

TABLA XVIII

Coefficiente externo de transferencia de calor

x_A	M (g/mol)	v_A	ρ_L (g/cm ³)	\hat{c}_{pL} (cal/g °C)	$k_{TL} \cdot 10^3$ (cal/seg cm °C)	$\alpha_L \cdot 10^3$ (cm ² /seg)	h_L (cal/seg cm ² °C)
0,1	19,4	0,16	0,921	0,946	1,100	1,264	0,222
0,3	22,2	0,43	0,863	0,850	0,890	1,213	0,1810
0,5	25,0	0,64	0,815	0,777	0,700	1,105	0,1492
0,7	27,8	0,81	0,784	0,719	0,560	0,993	0,1256
0,8	29,3	0,87	0,775	0,691	0,517	0,965	0,1180

5.5.4.2.2 Coefficiente interno de transferencia de calor

El coeficiente interno de transferencia de calor surgió de la misma correlación que la utilizada en transferencia de materia pero que en este caso se convierte en:

$$Nu = \frac{h_v D_e}{k_{TV}} \quad \text{vs.} \quad P_3 = \frac{v_{\infty} D_e}{\alpha_v} \quad (\text{ver Tabla XIX})$$

Para poder ser aplicada debieron calcularse previamente las propiedades físicas de la mezcla al estado vapor que intervienen en dicha correlación.

La capacidad calorífica del vapor en función de la temperatura se obtuvo a partir de la de los componentes puros.

Estas últimas fueron calculadas con las expresiones presentadas en el apartado 5.5.2.2.

La densidad del vapor se estimó por medio de la ecuación general de los gases.

Los valores de conductividad térmica de los componentes individuales al estado vapor se calcularon utilizando la siguiente ecuación (57):

$$k_{TV} \left[\frac{\text{BTU}}{\text{pie h } ^\circ\text{F}} \right] = m^2 \left(\frac{T (^\circ\text{F}) + 600}{632} \right)^{n^2} \quad (5.49)$$

Siendo para el alcohol metílico:

$$m^2 = 763 \cdot 10^{-5}$$

$$n^2 = 1,741$$

y para el agua:

$$m^2 = 864 \cdot 10^{-5}$$

$$n^2 = 1,506$$

Debido a que las conductividades térmicas de los componentes individuales no difieren entre si más de un 5% se adoptó como conductividad térmica de la mezcla, la media entre ambas.

TABLE XIX

Coefficiente interno de transferencia de calor

J_A	T_V (°C)	\hat{C}_{PAV} (cal/g°C)	\hat{C}_{PBV} (cal/g°C)	\hat{C}_{PV} (cal/g°C)	$\rho_V 10^3$ (g/cm ³)	$k_{TV} 10^5$ (cal/sg cm °C)	α_V (cm ² /seg)	Pe	Na	$h_V 10^4$ (cal/sg cm ² °C)
0,1	87,6	0,388	0,448	0,438	0,638	5,0095	0,1792	354	17,9	7,060
0,3	91,2	0,385	0,447	0,420	0,744	4,8855	0,1563	408	17,9	5,885
0,5	84,8	0,381	0,446	0,404	0,850	4,7765	0,1391	459	17,9	6,732
0,7	76,4	0,376	0,445	0,389	0,970	4,6180	0,1223	519	17,9	6,508
0,8	72,5	0,373	0,444	0,380	1,035	4,5395	0,1154	550	17,9	6,388

5.6 Resultados obtenidos

La aplicación del modelo matemático desarrollado en este capítulo, permitió la determinación de la eficiencia de plato para el sistema metanol-agua a distintas composiciones del líquido del plato y para distintos valores de la variable $\Delta T = T_{Vi} - T_L$, definida como la diferencia entre la temperatura del vapor que ingresa al plato y el líquido en éste.

Los resultados obtenidos se muestran en la tabla **XX**, que es una tabla de doble entrada, en la cual la grilla se ha completado con los correspondientes valores de la eficiencia.

La columna de x_L representa la composición del líquido del plato.

Los números entre paréntesis, en la columna correspondiente a reflujo total, indican para cada plato, los valores de ΔT_{max} .

Los casilleros en blanco indican la inexistencia física de un plato con tales características de composición y ΔT .

La limitación, proviene de que existe un ΔT_{max} para cada composición que surge de la forma de las curvas de punto de rocío y burbuja.

En la fig. 46 se han representado gráficamente estos valores en términos de eficiencia vs. composición del líquido del plato (x_A) eligiendo como variable paramétrica ΔT , que es representativa de la magnitud de fuerza impulsora para el proceso de transferencia térmica.

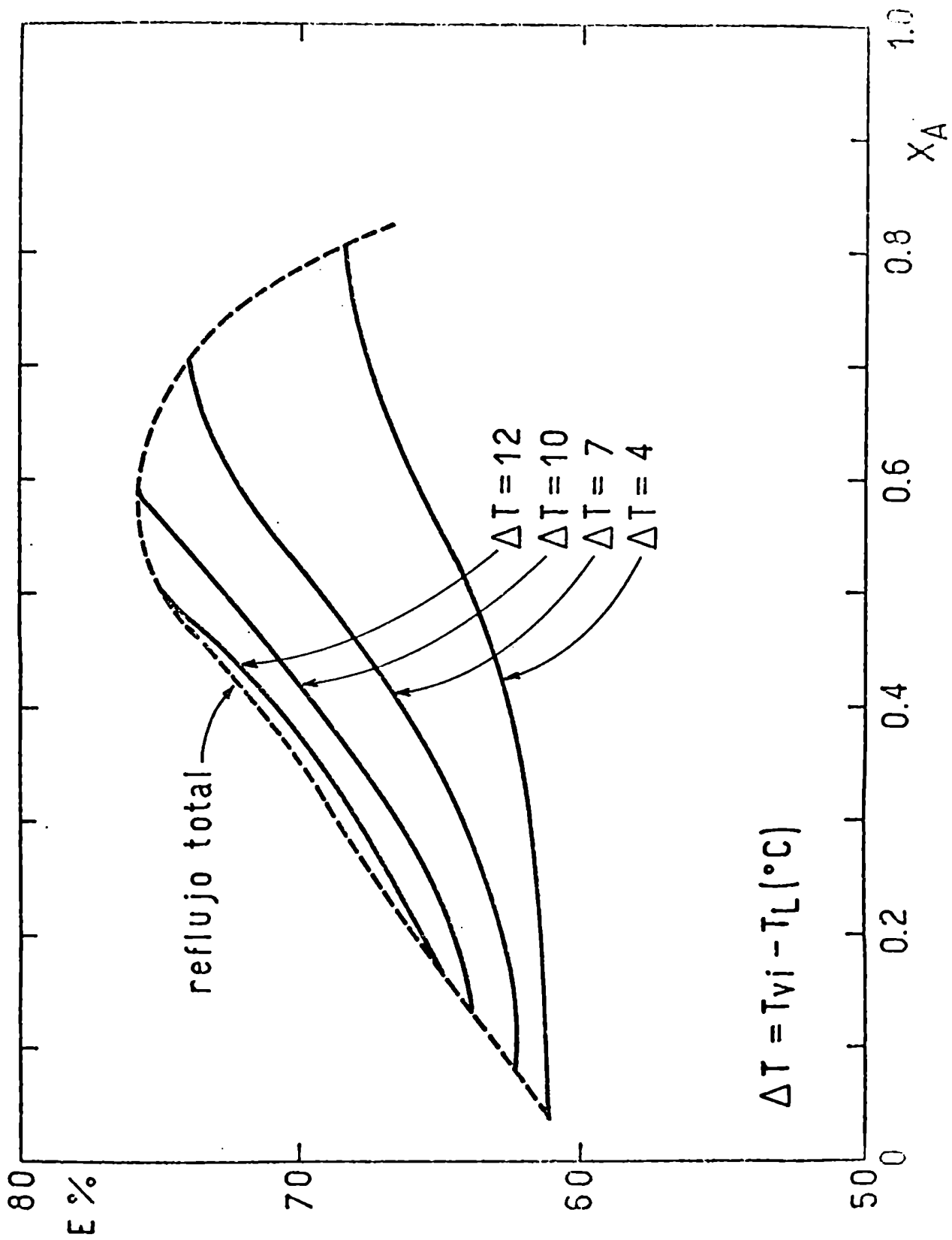


Fig. 46 Eficiencia vs composición e distintos valores de ΔT

TABLA XX

Eficiencia vs. composición para distintos valores de ΔT
Teoría no isotérmica

x_L \ ΔT (°C)	4	7	10	12	Reflujo Total T_{max} (°C)
0,1	61,01	62,35	-	-	62,4 (9,9)
0,2	61,22	62,87	64,61	65,22	66,03 (12,8)
0,3	61,83	64,06	66,33	67,81	68,29 (13,2)
0,5	63,79	68,90	72,83	-	74,23 (11,7)
0,7	67,82	73,80	-	-	73,89 (7,1)
0,8	68,21	-	-	-	68,61 (4,9)

5.6.1 Consideraciones generales

A través de los resultados obtenidos puede notarse que:

a) A composición constante la eficiencia aumenta con el valor de ΔT .

En condiciones de reflujo total, (ΔT_{max}), cada plato, representado por la composición de su líquido, muestra como es de esperar los mayores valores de eficiencia.

La curva de trazos de la figura 48, corresponde a condiciones de reflujo total y por ende, representa los valores de eficiencia máxima para cada plato resultando de este modo, la envolvente de la familia de curvas trazadas a $\Delta T = \text{cte}$.

b) Las curvas de eficiencia vs composición a $\Delta T = \text{cte}$ crecen a medida que aumenta x_A .

c) La curva de eficiencia vs. composición en condiciones de reflujo total muestra un máximo en $x_A = 0,5$.

Estas observaciones son analizadas e interpretadas en las siguientes secciones, en la misma secuencia con que fueron formuladas.

5.7 Análisis de resultados

5.7.1 Variación de la eficiencia con ΔT

Como se acaba de mencionar, resulta notorio un aumento de la eficiencia con ΔT a composición constante.

Esto se debe a que un mayor valor de la temperatura del vapor que ingresa al plato, respecto de la del líquido ($T_{Vi} - T_L$), origina una mayor fuerza impulsora para la transferencia de materia, ($y_{AVi} - y_{Ae}$) tal como se muestra en la figura 47.

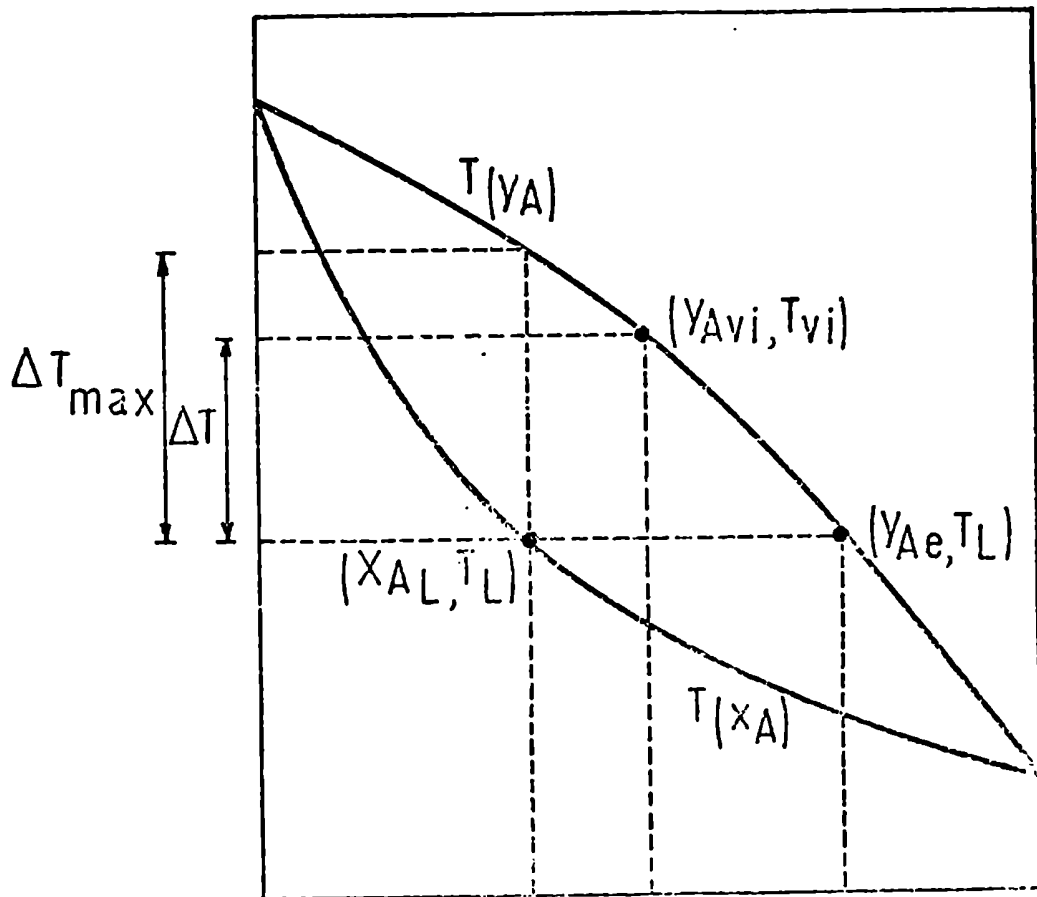


Fig. 47 Análisis de las fuerzas impulsoras

Ello produce a su vez, un aumento de los flujos molares según la ecuación (5.2) y por ende de la eficiencia.

En la figura 48 se hallan representados valores de la eficiencia en términos de ΔT correspondientes a platos de composición:

$x_A = 0,2$, $x_A = 0,3$, $x_A = 0,4$, $x_A = 0,5$.

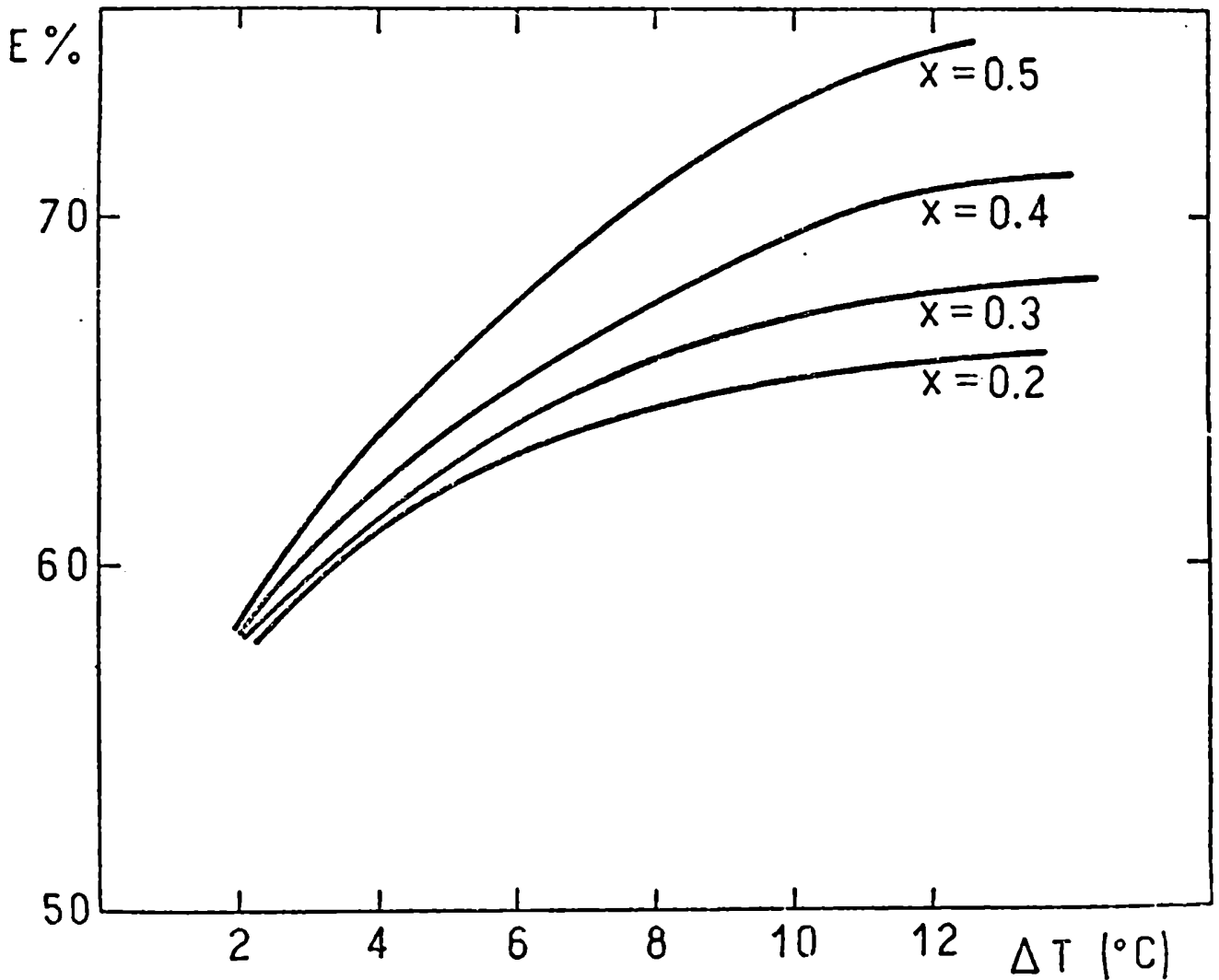


Fig. 48 Eficiencia vs ΔT

Dichas curvas interpretan las observaciones experimentales de Van Wijk y col. (59) respecto de un aumento de la eficiencia con la relación de reflujo, variable que se halla ligada en forma directa a ΔT .

Esta funcionalidad de la eficiencia con la relación de reflujo no pudo ser explicada en esa oportunidad desde el punto de vista de la teoría clásica es decir, en términos de la variación de la fuerza impulsora difusional.

En el presente trabajo sin embargo resulta satisfactoria la justificación de los resultados obtenidos.

5.7.2 Variación de la eficiencia con la composición a $\Delta T = cte$

Como puede observarse, a través de la figura 46, la eficiencia a $\Delta T = cte$ aumenta con la concentración en forma similar a una sigmoidea.

Evidentemente tratándose de un análisis de la variación de la eficiencia con la composición a $\Delta T = cte$ se elimina en la comparación el efecto de la diferencia inicial entre la temperatura del vapor que ingresa al plato y la del líquido en éste, basándose las observaciones en la influencia del otro parámetro mencionado en la sección 4.2.1: la variación de la resistencia a la transferencia de materia con la composición.

Este hecho se analiza detalladamente más adelante (sección 5.7.4.2.1) y justifica la forma de las curvas a $\Delta T = cte$.

Dado que para cada plato, caracterizado por la composición de su líquido pueden producirse distintos valores de ΔT según la relación de reflujo con que opera la columna las eficiencias adoptarán valores según la intersección de las condiciones operativas con la familia de curvas de la figura 46. De este modo el parámetro ΔT debería ser incluido en las correlaciones experimentales para la determinación de eficiencias de plato.

5.7.3 Variación de la eficiencia con la composición en condiciones de reflujo total: Discusión de las teorías interpretativas

5.7.3.1 Existencia de máximo

En condiciones de reflujo total la curva de eficiencia vs. composición predicha por el modelo no isotérmico aquí desarrollado (curva de trazos en fig. 46) presenta un máximo.

La forma de la curva como así también la posición del máximo coinciden con las observaciones experimentales recogidas por diversos investigadores (6), (59), (60), (61), quienes trabajaron en distintos sistemas de intercambio tales como columnas rellenas, de pared húmeda y platos de burbujeo.

Esto lleva a suponer que la aparición del máximo en la curva de eficiencia vs. composición en condiciones de reflujo total resulta independiente de la geometría y de la fluidodinámica del sistema, siendo función de la mezcla que se destila y de la forma de sus curvas de equilibrio.

5.7.3.2 Interpretación a través de la teoría clásica

Algunos investigadores intentaron explicar la existencia del máximo a través de la teoría clásica.

Esta teoría como se mencionó en la sección 1.2.2.2 supone que el proceso de transferencia de materia en destilación es puramente difusional; es decir, ignora la existencia de curvas de equilibrio composición-temperatura y por supuesto de los efectos de transferencia térmica.

Por otra parte supone que el calor liberado por la condensación del componente menos volátil en la interfase es utilizado integralmente en la vaporización del más volátil.

La vinculación que existe entre la eficiencia de plato, los coeficientes de transferencia en cada fase, las concentraciones y la relación de los flujos en la interfase está expresada por la ecuación (1.17) de la sección 1.2.2.1 según:

$$E_{IV} = 1 - \exp \left(\frac{-A t_c}{C V \left(\frac{m_y (1-x_o (1-r^2))}{k_x} + \frac{1-y_o (1-r^2)}{k_y} \right)} \right) \quad (1.17)$$

donde: $m_y = \frac{y_{Ae} - y_{Ao}}{x_{Ab} - x_{Ao}}$

Everitt y Hutchinson (62) apoyándose en la teoría clásica propusieron una dependencia de la eficiencia con la composición a través de la variación de la pendiente de la curva de equilibrio y_A vs x_A .

Sin embargo, los cálculos sobre el modelo, fallaban en la predicción del máximo obtenido experimentalmente a reflujo total.

En rigor dada la función de la ecuación (1.17) es evidente que a $r^2 = 1$ (difusión equimolar en contracorriente), la curva de eficiencia vs composición sólo puede presentar un máximo si existe un mínimo en m_y .

Dados que los sistemas con máximos en E. vs x_A no involucran necesariamente azeótropos, debe concluirse que la interpretación propuesta es incorrecta.

A efectos de verificar si la existencias de flujos no equimolares, la variación temporal de las condiciones de interfase durante el ascenso de la burbuja y/o la dependencia de las propiedades de transporte con la composición y temperatura (63) eran responsables de la existencia del máximo, se desarrolló un modelo interpretativo de los postulados de la teoría clásica, teniendo en cuenta dichas posibilidades, y como caso particular del modelo no

isotérmico .

Este modelo fue resuelto en computadora con el objeto de obtener resultados comparables a los presentados en la sección 6.1

El sistema de ecuaciones que lo constituye es el siguiente:

$$1) N_{Ao} = k_x (x_{Ab} - x_{Ao}) + x_{Ao} (N_{Ao} - N_{Bo}) \quad (5.1')$$

$$2) N_{Ao} = k_y (y_{Ao} - y_{Ab}) + y_{Ao} (N_{Ao} - N_{Bo}) \quad (5.2')$$

$$3) x_{Ao} = a_1 + a_2 y_{Ao} + a_3 y_{Ao}^2 + a_4 y_{Ao}^3 \quad (5.4')$$

$$4) N_{Ao} \lambda_A = N_{Bo} \lambda_B \quad (5.9')$$

$$5) \frac{V}{A} \frac{dC_A}{dt} = N_{Ao} \quad (5.17)$$

Se han incluido en este sistema, las ecuaciones de transferencia de materia en fase líquida y vapor, la curva de equilibrio, un balance en la interfase donde no aparecen los efectos térmicos ($q_V = q_L = 0$) y un balance macroscópico no estacionario de materia para la burbuja.

Asimismo, se consideró la variación de los coeficientes de transferencia con la composición y temperatura a través de la variación de las propiedades físicas del sistema.

Como puede observarse, siguiendo los postulados de la teoría clásica, se ha ignorado la existencia de la curva de equilibrio temperatura composición, como así también de la transferencia de calor entre las fases.

Los resultados de Eficiencia vs composición en condiciones de reflujo total obtenidos aplicando este modelo al sistema metanol-agua en forma numérica se hallan representados en la curva, I de la figura 49 donde pueden compararse con la correspondiente al modelo no isotérmico (curva II) en iguales condiciones operativas.

Puede observarse, que el máximo no aparece y que la eficiencia resulta prácticamente independiente de la composición y con valo-

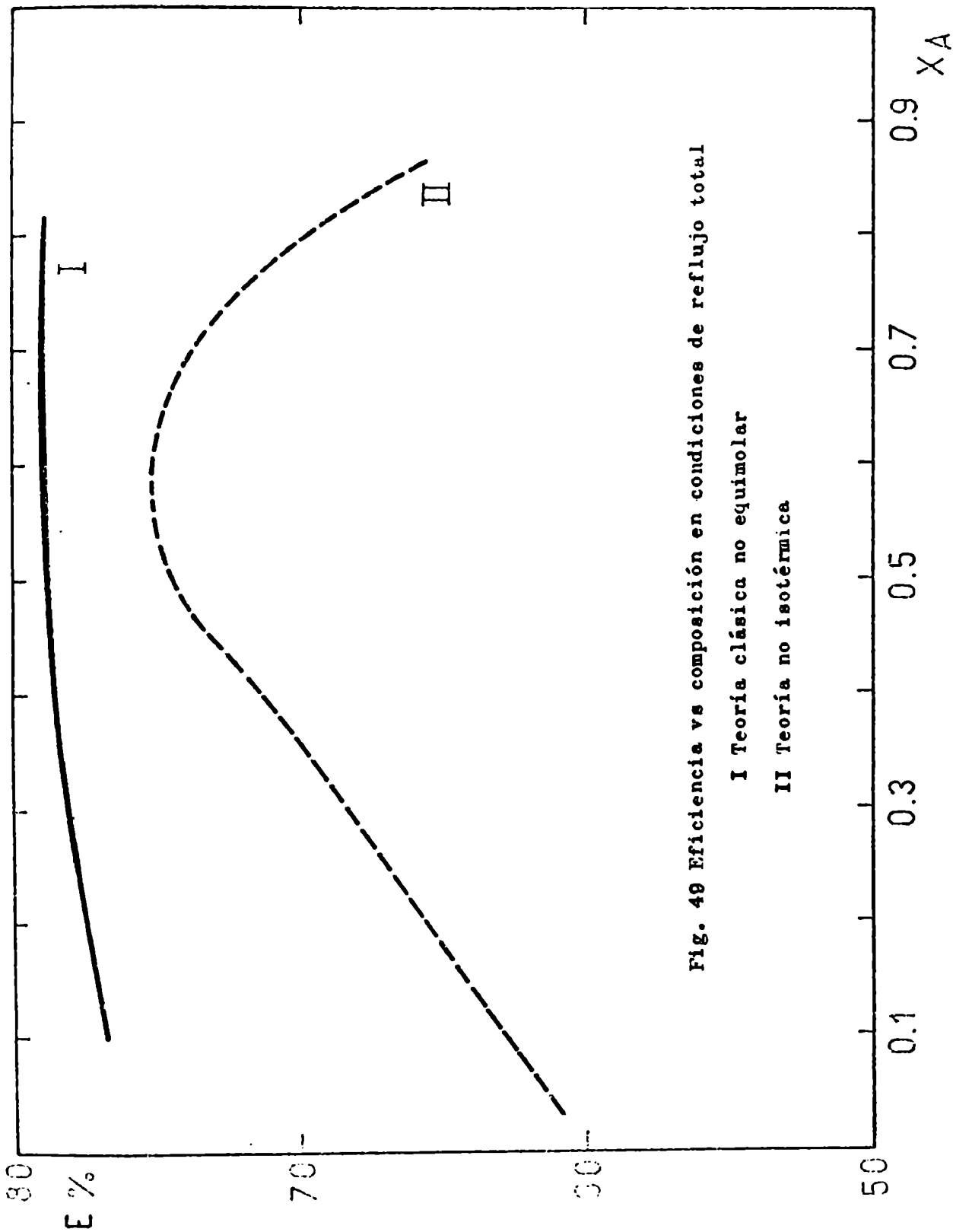


Fig. 40 Eficiencia vs composición en condiciones de reflujo total
I Teoría clásica no equimolar
II Teoría no isotérmica

res mayores que los correspondientes a la teoría no isotérmica.

En conclusión, los resultados descritos muestran que el máximo no es atribuible a:

- No equimolaridad de los flujos interfaciales.
- Variación de los coeficientes de transporte con la composición y temperatura del sistema.
- Variación temporal de las condiciones de interfase durante el ascenso de la burbuja.

5.7.3.3 Otras teorías interpretativas

Sawistowski y Smith (6) ante la imposibilidad de explicar los resultados experimentales de Eficiencia vs. composición mediante la teoría clásica, insistieron en efectuar una revisión de las suposiciones que ella involucra, e introdujeron la teoría térmica, en la que, por primera vez, se toma en cuenta la transferencia de calor entre el vapor y el líquido, pero que postula flujos de materia adicionales a los difusivos y que se hallan originados por la condensación y vaporización en el seno de las fases.

En forma casi simultánea Zúiderweg y Harmens (64) señalaron que los cambios de la tensión superficial con la composición influyen en forma notoria en los procesos de transferencia de masa y utilizaron el efecto Marangoni (65) para la explicación del máximo en la curva.

Sin embargo Ruckenstein (63) demostró experimentalmente que el máximo se producía independientemente de los efectos de tensión superficial en el sistema y analizó el problema a través de la teoría térmica.

5.7.3.4 Modelo no isotérmico

El modelo desarrollado en este trabajo es más realista que el presentado por la teoría térmica, ya que supone al líquido en su punto de equilibrio (hecho que fuera comprobado experimentalmente por Liang y Smith (60)), mientras permite al vapor a tra-

vés del sistema de ecuaciones diferenciales de materia y energía (sección 5.2.2) ajustar su composición y temperatura en forma independiente.

En la fig. 50 se muestra sobre el diagrama de fases, la evolución de la composición y temperaturas medias de la burbuja durante su ascenso en el plato.

Los puntos de coordenada (y_{Ab}, \bar{T}_V) no caen en su totalidad sobre la curva de rocío sino que la trayectoria presenta desviaciones por debajo de las condiciones de equilibrio.

Ello no implica que la burbuja se subenfria sino que debe tenerse en cuenta que las variables y_{Ab}, \bar{T}_V corresponden de acuerdo a las definiciones efectuadas en (5.35 y 5.24) a promedios volumétricos y como es dable de esperar no necesariamente, dichos valores se hallarán en equilibrio aunque individualmente cada punto de la burbuja lo esté.

Puede asimismo observarse que el mayor apartamiento de la curva de rocío se produce en una zona en que dicha curva muestra mayor concavidad, mientras que el apartamiento es casi nulo en la zona próxima a $x_A = 1$ donde la variación es lineal.

5.7.3.5 Análisis de la aparición del máximo a través del modelo no isotérmico

El análisis realizado en la sección 5.7.1 indicó la existencia de una cierta proporcionalidad de los valores de Eficiencia con los de ΔT .

En el caso de reflujo total el parámetro ΔT para cada composición adopta su máximo valor.

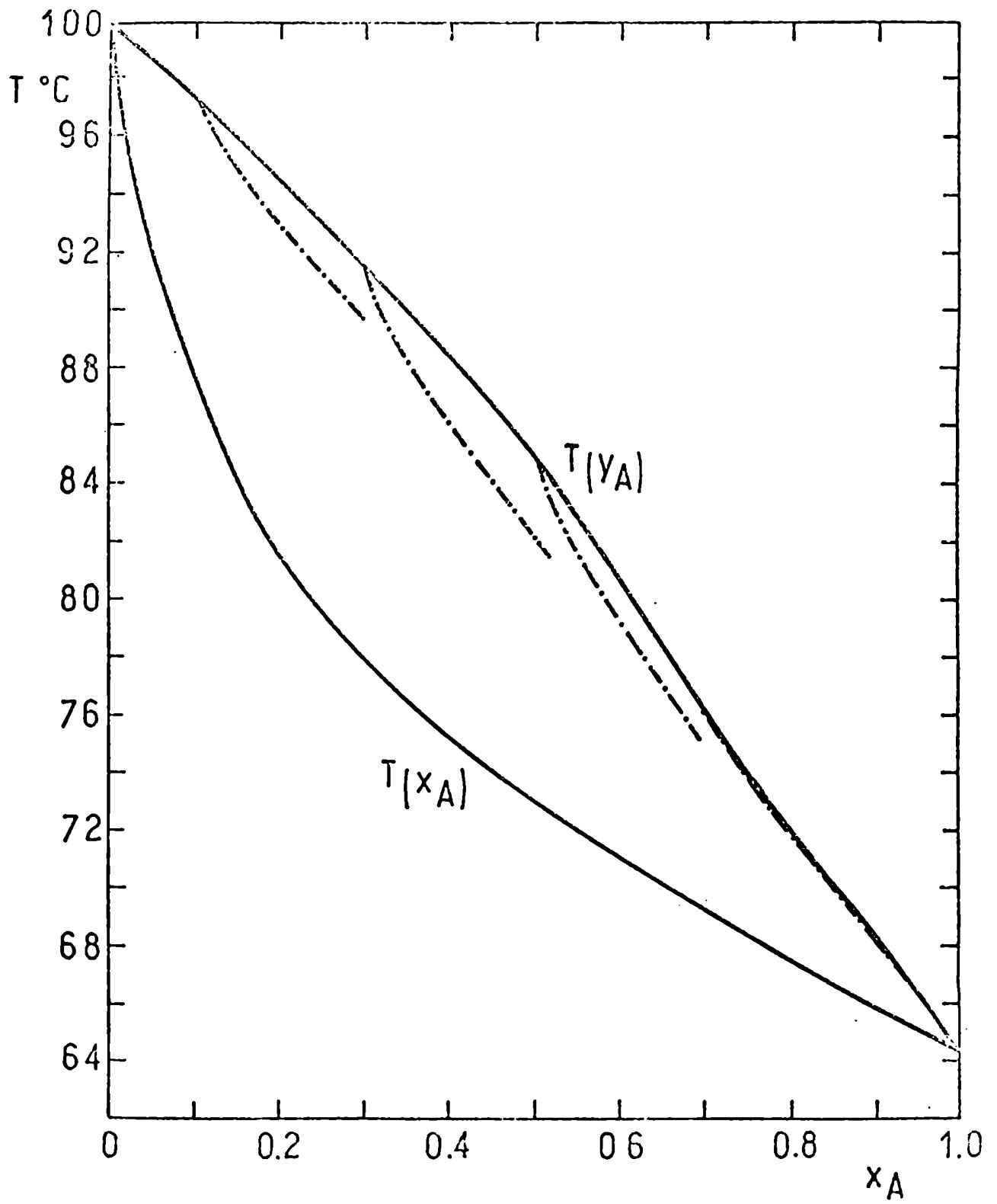


Fig. 50 Evolución de las variables y_A vs \bar{T}_V en el diagrama de fases.

Siguiendo este razonamiento la curva de eficiencia vs composición en condiciones de reflujo total tendría un cierto paralelismo con la de ΔT_{\max} vs. composición que se presenta en la fig. 51.

Tal como se mencionó en la sección 5.7.2 , se observa la presencia de un máximo en $x = 0,3$.

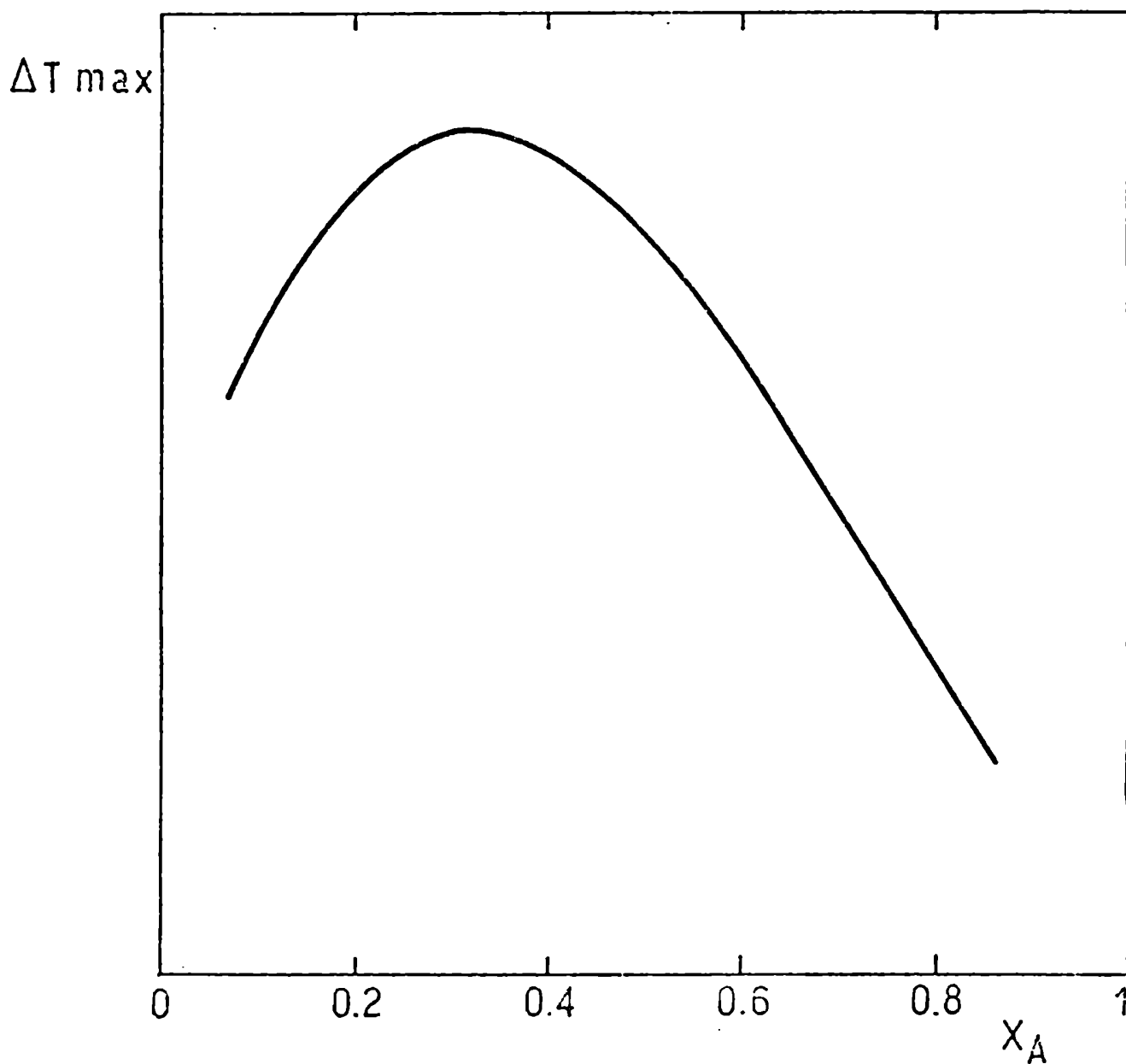


Fig. 51 ΔT_{\max} vs. composición

Sin embargo la posición del máximo en esta curva no coincide con el correspondiente a la curva de eficiencia en condiciones de reflujó total que está ubicado en $x = 0,5$ (fig. 49).

Este hecho está indicando la existencia de otro factor que afecta la variación de la eficiencia con la composición.

Ese factor, que es la resistencia a la transferencia de masa se analiza en la siguiente sección y es el responsable del corrimiento del máximo en la curva desde $x_A = 0,3$ a $x_A = 0,5$.

5.7.4 Variación de la resistencia a la transferencia de materia con la composición.

5.7.4.1 Etapa controlante

Una de los propósitos con que se encaró el presente trabajo era ubicar y cuantificar la resistencia predominante en la transferencia de materia y observar su variación con la composición del plato.

La resistencia total a la transferencia que incluye la correspondiente a ambas fases puede determinarse como la inversa del coeficiente global.

Es decir, si se denomina con R_{Tot} la resistencia total se obtiene de acuerdo a la ecuación (1.12):

$$R_{Tot} = \frac{m}{y} \left[\frac{1 - x_{Ao} (1 - r^2)}{k_x} + \frac{1 - y_{Ao} (1 - r^2)}{k_y} \right] \quad (5.50)$$

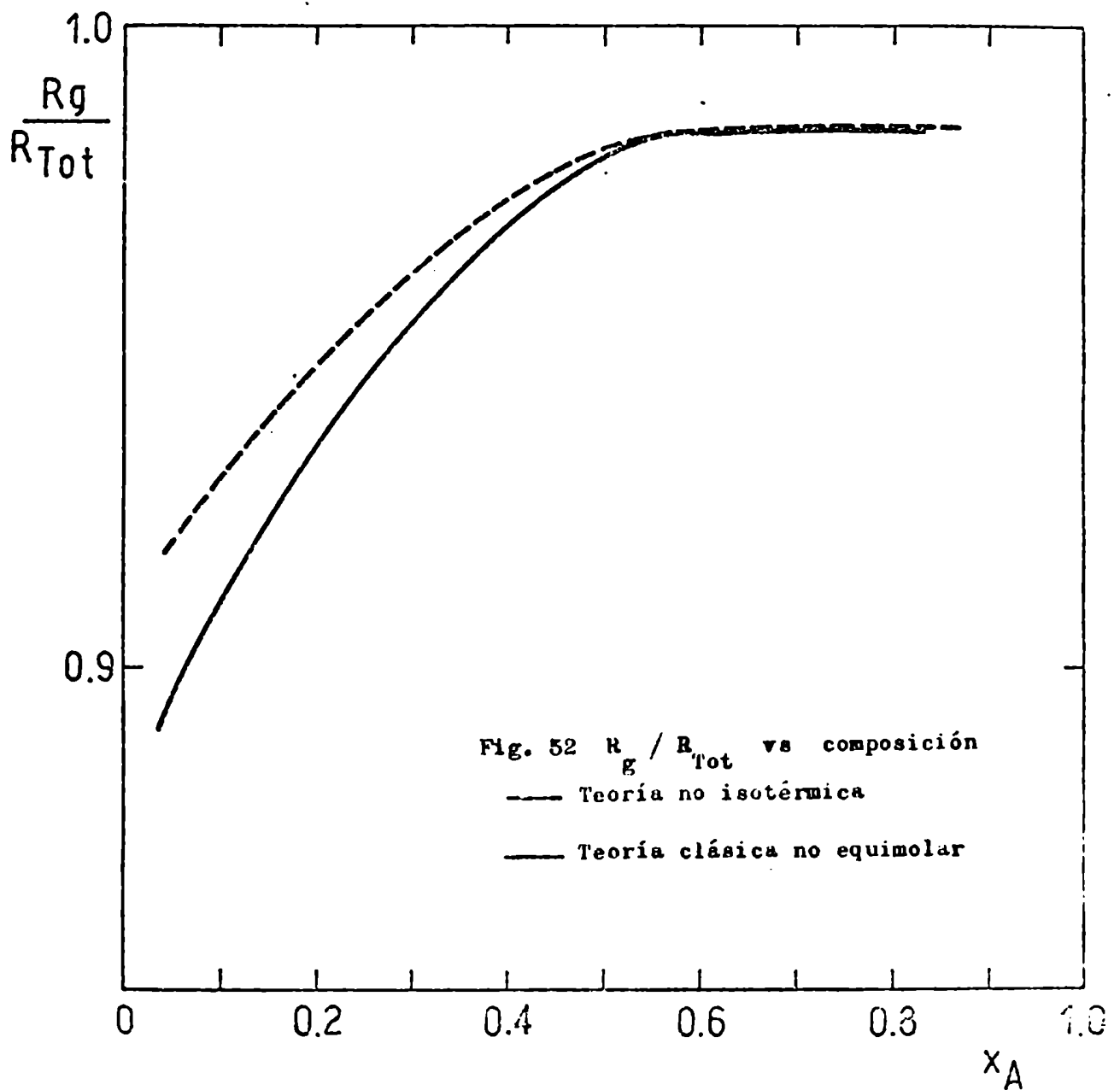
donde: $r^2 = N_{Bo} / N_{Ao}$

siendo:

$$R_g = \frac{1 - y_{Ao} (1 - r^2)}{k_y} = \text{resistencia en fase vapor}$$

$$R_L = \frac{n_y}{k_x} \frac{(1 - x_{A0} (1 - r'))}{1} = \text{resistencia en fase líquida}$$

Los valores de resistencia pueden diferir para la teoría clásica y para el modelo no isotérmico a través de un comportamiento distinto de la variable r , sin embargo resulta destacable el hecho que la relación R_g / R_{Tot} representado en la fig. 52



y que corresponde a la fracción de la resistencia total que reside en el vapor, muestra valores comparables para ambas teorías y mayores del 90% (66), (67), (68), (69), (70).

El hecho que la resistencia a la transferencia de materia, resida fundamentalmente en el vapor de la burbuja (independientemente que se trate del modelo clásico o no isotérmico), afirma la importancia de contar con una correlación adecuada para la evaluación de los coeficientes internos y justifica el trabajo experimental expuesto en el capítulo 4.

5.7.4.2 Variación de la resistencia interna con la composición

5.7.4.2.1 Variación de la relación de flujos en la interfase r con la composición

Dado que la resistencia a la transferencia de masa, reside en el vapor, según se mostró en la sección anterior, se analiza a continuación, la influencia que ejerce sobre la eficiencia, la resistencia interna únicamente.

Dicha resistencia puede expresarse como:

$$R_g = \frac{1 - y_{Ao} (1 - r')}{k_y}$$

Obviamente la variación de R_g con la composición se produce a través de la de y_{Ao} y r' , de acuerdo a la resolución de los modelos matemáticos.

Si bien éstos, proveen valores de y_{Ao} y r' en función del tiempo a los efectos de simplificar el análisis cualitativo para distintas composiciones de plato, se utilizarán en adelante valores medios en el tiempo de contacto.

De todas maneras, la composición de la interfase de la burbuja y_{Ao} , resulta semejante a la de equilibrio con el líquido del plato y_{Ae} (dada la baja resistencia que esta fase interpone a la

transferencia de materia) , y por lo tanto su valor se mantiene casi constante durante el tiempo de ascenso de la burbuja.

Para distintos platos y_{A0} varía en consecuencia según la curva de equilibrio de la fig. 44.

Por otra parte, los valores medios de r' durante el tiempo de ascenso en condición de reflujo total varían con la composición de acuerdo a lo que se muestra en la fig. 53 para el caso de la teoría no isotérmica (I) y la clásica no equimolar (II).

Puede observarse una notable disminución en el valor de r' para el caso de la teoría no isotérmica, mientras que en el caso de la teoría clásica no equimolar, su valor permanece constante e independiente de la composición.

Resulta interesante analizar los parámetros del sistema que conducen a tal comportamiento en r' . Para ello se plantea el balance energético en la interfase, resultandos:

$$N_{A0} \lambda_A + q_L = N_{B0} \lambda_B + q_V \quad (5.9')$$

donde:

$$q_L = h_L (T_0 - T_L) \quad (5.7)$$

$$q_V = h_V (T_V - T_0)$$

luego siendo:

$$r' = N_{B0} / N_{A0}$$

resulta:

$$r' = \frac{\lambda_A}{\lambda_B} - \frac{(q_V - q_L)}{N_{A0} \lambda_B} \quad (5.51)$$

Si $q_V = q_L = 0$ tal cual se postula en la teoría clásica no equimolar será: $r' = \frac{\lambda_A}{\lambda_B}$

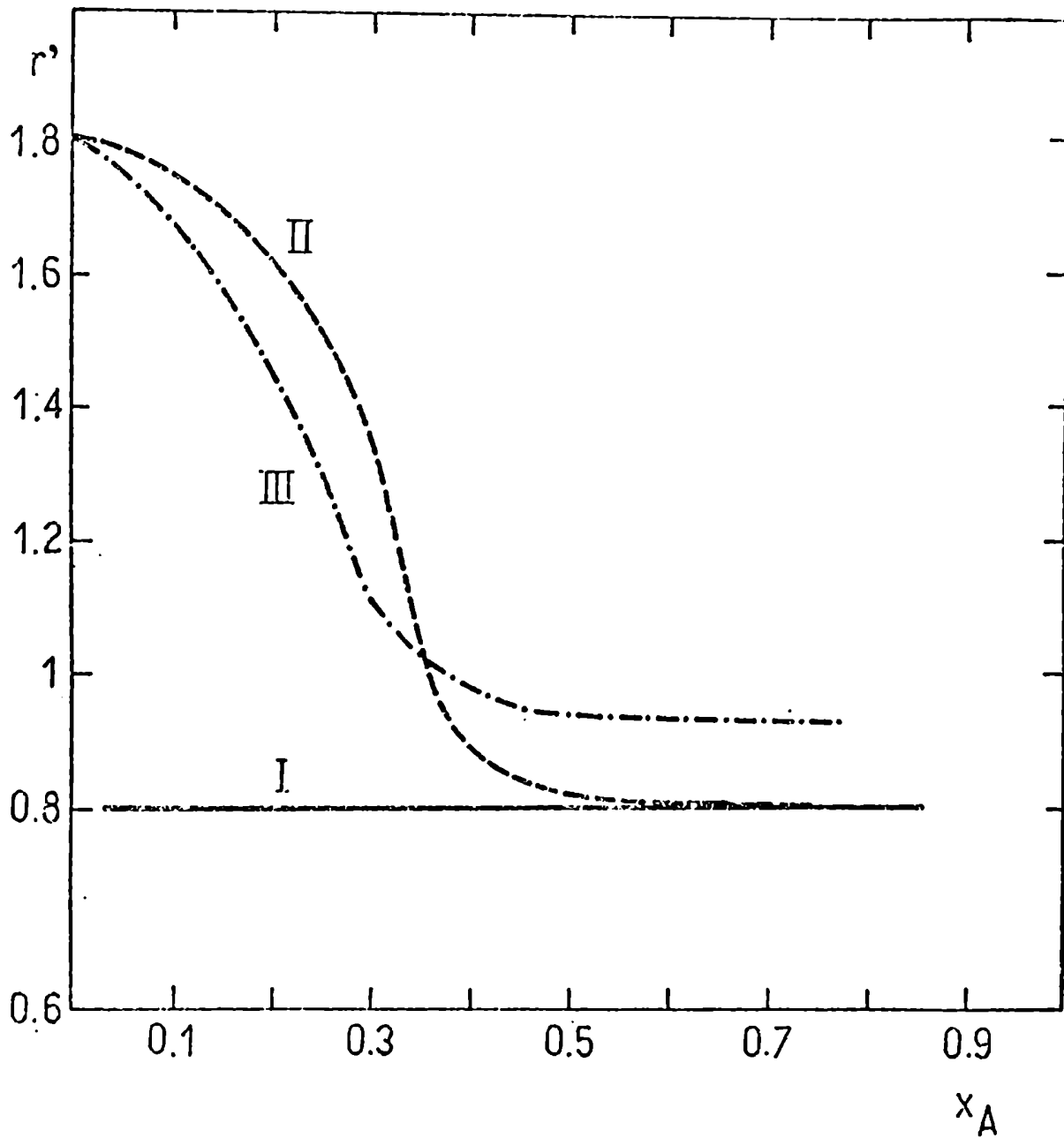


Fig. 53 Relación de flujos en la interfase (r') vs. composición
 I Teoría clásica no equimolar.
 II Teoría no isotérmica.
 III Ecuación (5.56)

lo que predice un valor de r' constante e independiente de x_A como se observa en la fig. 53.

Además, en dicho modelo no se incluyen los efectos térmicos y a través del análisis efectuado se originan valores de eficiencia independientes de la concentración, tal como se muestran en la curva I de la figura 49.

Sin embargo, para la teoría no isotérmica $r' = r'(x_A)$.

siendo:

$$N_{A0} = k_x (x_{Ab} - x_{Ao}) + x_{Ao} (N_{Ao} - N_{Bo}) \quad (5.1')$$

resulta

$$N_{A0} = \frac{k_x (x_{Ab} - x_{Ao})}{1 - x_{Ao} (1 - r')} \quad (5.52)$$

Por otra parte $q_V \ll q_L$

al ser $h_L \approx 100 h_V$

y $T_V - T_o \approx 10 (T_o - T_L)$

luego sustituyendo en (5.51) resulta:

$$r' = \frac{\lambda_A}{\lambda_B} + \frac{h_L (T_o - T_L)}{k_x (x_{Ab} - x_{Ao}) \lambda_B} (1 - x_{Ao} (1 - r')) \quad (5.53)$$

pero

$$\frac{T_o - T_L}{x_{Ab} - x_{Ao}} = p = \text{pendiente de la curva de puntos de burbuja (fig. 44)}$$

llamando

$$z_1 = \frac{\lambda_A}{\lambda_B} \quad (5.54)$$

$$z_2 = \frac{h_L}{k_x \lambda_B} \quad (5.55)$$

resulta despejando r :

$$r = \frac{z_1 + z_2 p (1 - x_{A0})}{1 - p z_2 x_{A0}} \quad (5.56)$$

Reemplazando los valores numéricos correspondientes al sistema metanol - agua se obtiene:

$$z_1 = 0,8$$

$$z_2 = 0,01$$

Adoptando $x_{A0} = x_{AB}$ (resistencia a la transferencia de materia despreciable en fase líquida) y los valores de p correspondientes a x_{AB} se obtiene la curva III de la figura 53.

Como puede verse la funcionalidad es similar a la obtenida con el modelo no isotérmico (curva I).

Las diferencias pueden atribuirse a que los valores de r' obtenidos de este modo, constituyen valores iniciales mientras que los del modelo numérico son valores medios.

Obsérvese que la forma de la función $r'(x_A)$ puede ser predicha en términos de la curva de equilibrio temperatura composición.

Hasta aquí se ha interpretado la variación de r' , en la siguiente sección se analiza la influencia que este hecho tiene en la variación de la resistencia interna.

5.7.4.2.2 Influencia de la resistencia a la transferencia en la posición del máximo

Con el objeto de mostrar la influencia combinada de las variables y_{A0} y r' en la eficiencia se ha representado en la fig.

54 , $1 / 1 - y_{A0} (1-r^2)$ vs x_A .

La primera coordenada se ha elegido ya que siendo proporcional a la inversa de la resistencia a la transferencia, sus valores resultan directamente relacionables con la eficiencia según puede verse en la ecuación 1.17 .

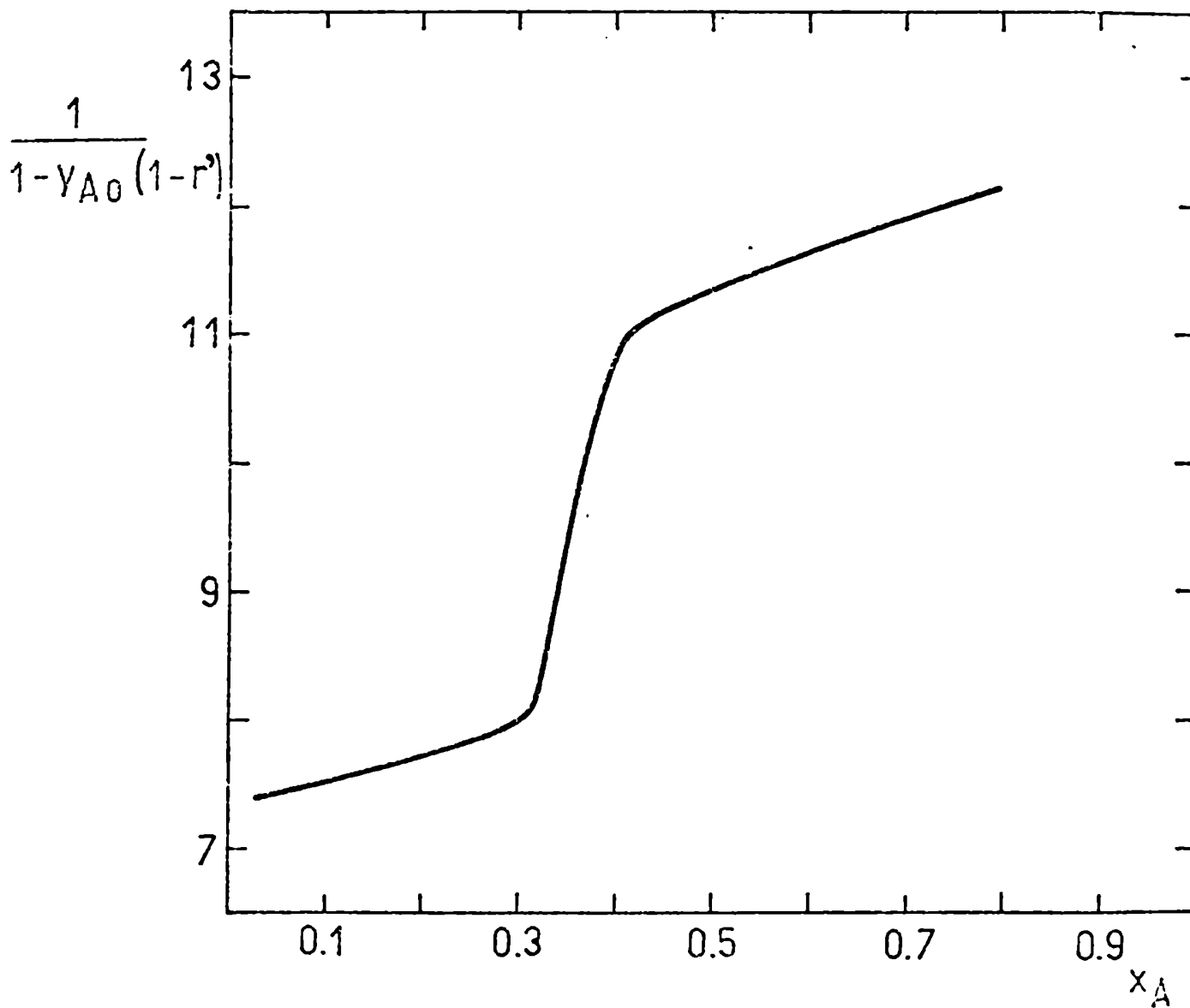


Fig. 54 $1 / 1 - y_{A0} (1 - r^2)$ vs. composición.

En dicha representación puede observarse un aumento de la resistencia en la zona correspondiente a $x = 0,3$ debido al abrupto descenso de r .

Respecto a la curva de eficiencia en condiciones de reflujo total, dependiente como ya se analizó de ΔT_{\max} y R_g el comportamiento surgirá de la superposición de los efectos mostrados en las figuras 51 y 54.

Este hecho, ocasiona un corrimiento del máximo de la figura 51, desde $x_A = 0,3$ hacia la derecha, lo que coincide con la curva de Eficiencia vs. concentración para reflujo total de la figura 49.

De este modo, a través de los factores ΔT y resistencia interna, el modelo no isotérmico desarrollado en el presente trabajo, predice correctamente no sólo la forma de la curva Eficiencia vs. concentración en condiciones de reflujo total, sino también la posición del máximo.

CAPITULO 6

CONCLUSIONES GENERALES

En base a lo expuesto en el trabajo pueden extraerse las siguientes conclusiones:

- 1) La transferencia de calor y materia en burbujas ascendentes en platos de destilación, está principalmente controlada por la resistencia en fase gaseosa.
- 2) Lo anteriormente mencionado justifica la evaluación de los coeficientes internos tal como se presenta en el capítulo 4.
- 3) El modelo teórico desarrollado para el cálculo de coeficiente, incluyendo circulación toroidal en el interior de la burbuja, predice correctamente los valores experimentales obtenidos.
- 4) El hecho descrito en 3) y las discrepancias entre los datos experimentales y las teorías convencionales que consideran el gas en reposo, evidencian la importancia de la circulación toroidal, sobre la transferencia de masa en el interior de burbujas.
- 5) A pesar que el modelo teórico fue desarrollado para burbujas esféricas, los resultados son aplicables a burbujas oblongas, utilizando un diámetro equivalente, definido en términos del eje mayor y la excentricidad del esferoide.
- 6) El modelo desarrollado del plato de destilación, que incluye la transferencia simultánea de calor y materia, teniendo en cuenta las curvas de equilibrio composición - temperatura del sistema, permite predecir el comportamiento anómalo de la eficiencia de plato,

no explicable a través de la teoría clásica.

- 7) La resolución de un modelo no incluyendo la transferencia calórica, aunque admitiendo no equimolaridad y variación de las propiedades físicas del sistema con la composición y temperatura de los platos, no permitió explicar dichas anomalías.
- 8) La existencia de un máximo en las curvas de eficiencia vs. composición a reflujo total repetidamente verificada en experiencias, no sólo en platos de destilación, sino en distintos sistemas fluido-dinámicos (columnas de pared húmeda, columnas rellenas etc.) es perfectamente explicado por el modelo desarrollado en este trabajo, en base a la forma de las curvas de equilibrio del sistema.
- 9) La posición de dicho máximo, resultante de la superposición de efectos debidos a las curvas de equilibrio, resulta también explicable a través del modelo propuesto.
- 10) A diferencia de la teoría térmica, el modelo no isotérmico aquí desarrollado, no postula la existencia de condensación y vaporización en el seno de las fases, hallándose todo punto a la temperatura de equilibrio.
- 11) El modelo predice correctamente la dependencia de la eficiencia con la relación de reflujo, hecho que fuera verificado experimentalmente, pero hasta el presente no fundamentado en forma teórica.
- 12) El éxito de la teoría propuesta en la predicción de los efectos mencionados, destaca la importancia del desarrollo de modelos que, aunque simplificados en algunas de sus hipótesis, permiten explicar a partir de información elemental, fenómenos complejos que transcurren en sistemas reales y de importancia industrial.

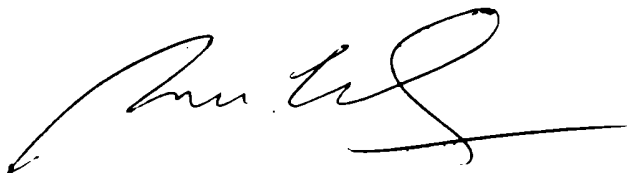
BIBLIOGRAFIA

- 1.- Garner, F.H. , Porter, K.E. , "Internat Symposium on Dist" ,
Inst. of Chem. Eng. London (1960).
- 2.- Bird, R. , Stewart, W.E. , Lightfoot E.N. , "Fenómenos de Trans-
porte" , Ed. Reverté (1962).
- 3.- Schrage, R.W. , "Interphase mass transfer" , Columbia Univer-
sity Press , New York (1953).
- 4.- Therogood, R.M. , British Chem. Eng. 8, 3, 164 (1963).
- 5.- Ruckenstein, E. , A.I.Ch.E. Journal 16, 144, (1970).
- 6.- Sawistewski, H. , Smith, W. , Ind. Eng. Chem. 51, 915 (1959).
- 7.- Haberman, W.L. , Morton, R.K. , David Taylor Model Basin
Report N° 802 (1953) .
Trans. Am. Soc. Civil Engrs. 121, 227, (1956).
- 8.- Hadamard, J. , Comptes Rendue Acad. Sci. 152, 1735 (1911).
- 9.- Rybczynski, W. , Bull. Acad. Sci (Cracovi) Serie A, 40 (1911).
- 10.- Levich, B.G. , Zhur. Eksptl. Teoret. Fiz. 19, 18 (1949).
- 11.- Moore, D.W. , Journal of Fluid Mech. 6, 113 (1959).
- 12.- Milne - Thomson, L.M. , "Theoretical Hydrodynamics" 4° Edic.
Mc Millan New York (1960) p. 554
- 13.- Chao, B.T. , Physics Fluids 5, 69 (1962).
- 14.- Hartunian, R.A. , Sears, W. , J. Fluid Mech. 3, 27 (1957).
- 15.- Garner, F.H. , Hammerton, D. , Chem. Eng. Sci. 3, 1 (1954).
- 16.- Filla, M., Davidson, J.F., Bates, J.F., Eccles, M.A., Chem. Eng.
Sci. 31, 359 (1976).
- 17.- Higbie, R. , A.J.Ch.E.J. Trans. 31, 365 (1935).
- 18.- Danckwerts, P. , Ind. Eng. Chem. 43, 1460 (1951).
- 19.- Toor, H.L. , Marcello, J.M. , A.I.Ch.E.J. 4, 97 (1958).
- 20.- Boussinesq, M.J. , J. Math. Sev. 6, 70, 285 (1905).
- 21.- Levich, B. , "Physicochemical Hydrodynamics", Prentice Hall
(1962).

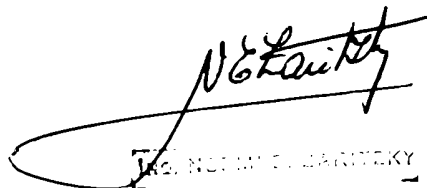
- 22.- Ruckenstein, E., Chem. Eng. Sci. 10, 22 (1959).
- 23.- Hammerton, D. , Garner, F.H. , Trans. Instn. Chem. Eng. 32, 518 (1954).
- 24.- Baird, M.H.I. , Davidson, J.F. , Chem. Eng. Sci. 17, 87 (1962).
- 25.- Deindoerfer, F.H. , Humphrey, A. , Ind. Eng. Chem. 53, 755 (1961).
- 26.- Mundkur, S.M. , M.S. Thesis, University of Pennsylvania, (1962)
- 27.- Leonard, J.H. y Houghton, G. , Chem. Eng. Sci., 29, 131 (1965)..
- 28.- Calderbank, P.H. , Lochiel, A.C., Chem. Eng. Sci. , 19, 485 (1964).
- 29.- Garbarini, Gail R. , Tien, C. , Can. J. Chem. Eng. 47, 35 (1969).
- 30.- Rosenberg, B. Report N° 727, Washington D.C. : The David Taylor Model Basin (1950).
- 31.- Hoefler, K. , Forschungsarbeiten, V.D.I. , 138, 1 (1913)
Z. Ver. Deut. Ing. 57, 1174 (1913).
- 32.- Bryn, T. , Forsch - Gebiete Ingenieurw, 4, 27 (1933).
- 33.- Coppus, J.H.C., Rietma, K., Chem. Eng. Sci. 35, 1495 (1980).
- 34.- Uno, S. , Kintner, R. C. - A.J.Ch.E.J. 2, 420 (1958).
- 35.- Tadaki, T. , Maeda, S. , Chem. Eng. Tokyo, 25, 254 (1961).
- 36.- Siemes, W. , Chem. Ing. Tech. 23, 614 (1954).
- 37.- Li, P.S. , Ph. D. Thesis, Univ. Washington (1953).
- 38.- Chu, J.C. , J. Appl. Chem. 1, 529 (1951).
- 39.- Chilton, T.H. , Colburn , A.F. , Ind. Eng. Chem. 42, 1164 (1934).
- 40.- Geddes, K.L. , A.I.Ch.E. Trans. 42, 79 (1946).
- 41.- Barrer, R.M. , "Diffusion in and through solids", Columbia University Press, (1941).

- 42.- Kronig, K. , Brink, J.C. , Appl. Sci. Res. , A2, 142 (1950).
- 43.- Johns, L.E. , Beckman R.B. , A.I.Ch.E.J. 12, 10 (1966).
- 44.- Carslaw, H.S. , Jaeger, J.C. , "Conduction of Heat in Solids", Clarendon Press, Oxford (1959).
- 45.- Calderbank, P.H. , Review Series N° 3 209,(1967).
- 46.- Rudd, D.F. , Watson, C.C. , "Strategy of Process Engineering" John Wiley.
- 47.- Jenson, V.G. y Jeffreys, G.V. "Mathematical Methods in chemical Engineering", Academic Press (1963).
- 48.- International Critical Tables , Mc Graw Hill New York (1926)
- 49.- Smith, J. M. y Van Ness H. C. , "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics" Mc Graw Hill , 1959
- 50.- Hengstebeck , R. J. , "Destilación, Principios y Métodos de diseño, Ed. Continental, México (1964) p. 312
- 51.- Mc Cabe y Smith "Operaciones Básicas de Ingeniería química" Ed. Reverté (1969)
- 52.- Norman, W. S. "Absorption, Distillation and Cooling Towers", Longmans (1962) p. 344
- 53.- West, F. Gilbert, W. Shimizu, T., Ind. and Eng. Chem. 44, 10, 2470 (1952)
- 54.- Chu, J. C. , Forgrive, J. , Grosso, R. , Shah, S. M. y Othmer, D. F. , A.I. Che. J. 3, 1, 16 (1957)
- 55.- Reid, R. and Sherwod, T. , "The properties of gases and Liquids", Mc Graw Hill, New York (1966)
- 56.- Perry, J. H. , y col. , " Chemical Engineering Handbook" Ed. Mc Graw Hill, New York (1963)
- 57.- Davies, D. "Chemical Engineering Nomographs" , Mc Graw Hill (1944) p. 28
- 58.- Farina, I. "Solución numérica de Ecuaciones No Lineales" 1ª parte. Publicación de la Facultad de Ing. U.N.L.P. (1973)

- 59.- Van Wijk, W.R., Thijssen, H.A.C., Chem. Eng. Sci. 3, 153 (1954).
- 60.- Liang, S.Y., Smith, W., Chem. Eng. Sci. 17, 11 (1962).
- 61.- Ruckenstein, E., Smigelschi, O., Chem.Eng. Sci. 20, 66 (1965).
- 62.- Everitt, C.T., Hutchinson, H.P., Chem. Eng. Sci. 21, 833 (1966).
- 63.- Ruckenstein, E., Smigelschi, O., Can. Journal Chem. Eng. 45, 334 (1967).
- 64.- Zuiderweg, F.J., Harmens, A., Chem. Eng. Sci. 9, 2, 89 (1950).
- 65.- Ruckenstein, E., Chem. Eng. Sci., 19, 505 (1964).
- 66.- Kayihan, F., Sandall, O.C., Mellichamp, D.A., Chem. Eng. Sci. 30, 1333 (1975).
- 67.- Kayihan, F., Sandall, O.C., Mellichamp, D.A., Chem. Eng. Sci. 32, 747 (1977).
- 68.- Honorat, A., Sandall, O.C., Chem. Eng. Sci. 33, 635 (1978).
- 69.- Dribika, M.M., Sandall, O.C., Chem. Eng. Sci. 34, 733 (1979).
- 70.- Ito, A., Asano, K., Int. Chem. Eng. 22, 2, 309 (1982).



DR. ALFREDO CALVELO



J. N. S. JANKOVKY

APENDICE I

Programa PRINCIPAL

```

C 11-21-67 ZARIZKY
C SISTEMA BUBUJA DE METANOL AGUA
C CONSECUENCIA SIMULTANEA DE CALOR Y MATERIA EN UNA BUBUJA
C EN CONDICIONES SIMILARES A LAS DE DESTILACION
C CALCULO DE LA EFICIENCIA.
C NOMENCLATURA
C
C CY=COEF. DE TRANSFERENCIA DE MATERIA EN FASE LIQUIDA (MILIMOL/SEG*CM**2)
C YV=COEF. DE TRANSFERENCIA DE MATERIA EN FASE VAPOR
C HL=COEF. DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN FASE LIQUIDA (CAL/SEG*CM**2*CHAD)
C HV=COEF. DE TRANSFERENCIA DE CALOR EN FASE VAPOR
C ZAC=FLUJO MOLAR DE METANOL (COMP. A) EN LA INTERFASE (MILIMOL/SEG*CM**2)
C ZBC=FLUJO MOLAR DE AGUA (COMP. B) EN LA INTERFASE
C XAB=FRACCION MOLAR DE A EN EL SEAC DEL LIQUIDO
C YAB=FRACCION MOLAR DE A EN EL SEAC DEL VAPOR
C TL=TEMPERATURA EN EL SEAC DEL LIQUIDO (CHAD C)
C TV=TEMPERATURA EN EL SEAC DEL VAPOR
C CAB=COEF. DE TRANSFERENCIA EN EL VAPOR (MILIMOL/CM**2)
C CB=COEF. TOTAL EN EL VAPOR
C YAC=FRACCION MOLAR DE A EN LA INTERFASE DEL LADO DEL VAPOR
C XAC=FRACCION MOLAR DE A EN LA INTERFASE DEL LADO DEL LIQUIDO
C TC=TEMPERATURA DE INTERFASE
C CVA,CVB=CAPACIDADES CALORIFICAS A VOL.OTE DE LOS COMP. A Y B,VAPOR
C (CAL/MILIMOL*CHAD)
C CPA,CPB=CAPACIDADES CALORIFICAS A PRESION CTE
C WA,WB=CALORES LATENTES DE VAPORIZACION DE LOS COMP. A Y B (CAL/MILIMOL)
C A1,A2,A3=COEF DEL AJUSTE POLINOMICO DE LA CURVA DE EQUILIBRIO
C B1,B2,B3=COEF DEL AJUSTE POLINOMICO DE LA CURVA DE PUNTOS
C DE=EGCIC
C PAI,PII=EXTREMOS INICIAL Y FINAL DEL INTERVALO DE BUSQUEDA DE
C LA RAIZ YAC
C N=NUMERO DE INTERVALOS DE TIEMPO
C TT=TIEMPO TRANSCURRIDO (SEG)
C DT=INCREMENTO DEL TIEMPO (SEG)
C V=VOLUMEN DE LA BUBUJA (CM**3)
C S=AREA (CM**2)
C TVI=TEMP. INICIAL DEL VAPOR
C YABE=COMPOSICION DEL VAPOR EN EQUILIBRIO CON EL LIQUIDO QUE ENTRA AL PLATO
C SV=RELACION AREA VOLUMEN (1/CM)
C RG=RESISTENCIA EN FASE VAPOR
C RL=RESISTENCIA EN FASE LIQUIDA
C REIC=EFICIENCIA
C
C EN EL INSTANTE INICIAL CONFO: : TV , YAB
C
COMMON A1,A2,A3,XAB,YAB,CY,CYV,WA,WB,HV,HL,TV,TL,B1,B2,B3
COMMON XAC,B,CAB,ZAC,ZBC,TC,YAC
COMMON I
EXTERNAL FUNC
REAL(8,10) CY,CYV,HL,HV,V,S
REAL(8,10) A1,A2,A3,B1,B2,B3
REAL(8,10) WA,WB,CVA,CVB,CPA,CPB
101 REAL(8,10) XAB,TL,YAB,TV,DT
102 REAL(8,10) XAC,TV,YABE,TVI,TT
103 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
104 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
105 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
106 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
107 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
108 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
109 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
110 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
111 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
112 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
113 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
114 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
115 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
116 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
117 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
118 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
119 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
120 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
121 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
122 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
123 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
124 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
125 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
126 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
127 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
128 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
129 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
130 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
131 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
132 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
133 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
134 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
135 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
136 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
137 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
138 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
139 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
140 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
141 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
142 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
143 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
144 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
145 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
146 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
147 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
148 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
149 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
150 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
151 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
152 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
153 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
154 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
155 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
156 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
157 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
158 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
159 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
160 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
161 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
162 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
163 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
164 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
165 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
166 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
167 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
168 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
169 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
170 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
171 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
172 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
173 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
174 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
175 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
176 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
177 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
178 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
179 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
180 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
181 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
182 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
183 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
184 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
185 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
186 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
187 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
188 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
189 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
190 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
191 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
192 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
193 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
194 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
195 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
196 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
197 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
198 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
199 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT
200 REAL(8,10) XAB,TV,YABE,TVI,TT

```



```

      100  W=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      120  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      140  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      160  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      180  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      200  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      220  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      240  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      260  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      280  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      300  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      320  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      340  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      360  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      380  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      400  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      420  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      440  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      460  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      480  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      500  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      520  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      540  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      560  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      580  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      600  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      620  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      640  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      660  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      680  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      700  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      720  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      740  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      760  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      780  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      800  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      820  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      840  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      860  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      880  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      900  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      920  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      940  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      960  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      980  F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)
      1000 F=1.0/6.12*(VW,WA,SWA,WA,CPA,CF)

```

APENDICE II

AJUSTES POLINOMICOS

```

SUBROUTINE QMINC
C AJUSTE POLINOMICO POR CUADRADOS MINIMOS
DIMENSION X(50),Y(50),W(21),Z(11),A(11),B(11,12)
COMMON COMI(20)
READ(5,979) COMI
WRITE(6,980) COMI
930 FORMAT(1H1T25,20A4,///)
979 FORMAT(20A4)
WRITE(6,7)
7 FORMAT(1H ,2SHVALORES X E Y EXPERIMENTALES)
70 READ(5,1,END=80)M,N,(X(I),Y(I),I=1,N)
1 FORMAT(2I3/(7F10.0))
WRITE(6,3)M,N,(X(I),Y(I),I=1,N)
3 FORMAT(1H ,I2,I3/(4F14.7))
WRITE(6,4)
4 FORMAT(1H 26HCOEFICIENTES DEL POLINOMIO)
LW=2*M+1
LR=M+2
LZ=M+1
DO5J=2,LW
5 W(J)=0.
W(1)=N
DO6J=1,LZ
6 Z(J)=0.
DO16I=1,N
P=1.0
Z(I)=Z(I)+Y(I)
DO11RJ=2,LZ
P=X(I)*P
W(J)=W(J)+P
118 Z(J)=Z(J)+Y(I)*P
DO16J=LR,LW
P=X(I)*P
16 W(J)=W(J)+P
17 DO20I=1,LZ
DO20K=1,LZ
J=K+I
20 B(K,I)=W(J-1)
DO22K=1,LZ
22 B(K,LR)=Z(K)
23 DO31L=1,LZ
DIVER=B(L,L)
DO26J=L,LR
26 B(L,J)=B(L,J)/DIVER
I=L+1
IF(I-LR)29,33,33
28 DO31I=1,LZ
FMU=B(I,L)
DO31J=L,LR
31 B(I,J)=B(I,J)-B(L,J)*FMU
33 A(LZ)=B(LZ,LR)
I=LZ
35 SIGMA=0
DO37J=I,LZ
37 SIGMA=SIGMA+B(I-1,J)*A(J)
I=I-1
A(I)=B(I,LR)-SIGMA
40 IF(I-1)41,41,35
41 WRITE(6,2)(A(I),I=1,LZ)
WRITE(6,9)
8 FORMAT(1H 32HVERIFICACION DE LOS VALORES DE Y)
WRITE(6,100)
100 FORMAT(1H 3X'Y EXP.'4X'Y CALC.'4X'ERROR')
DO101I=1,N
YE=A(1)+1(2)*Y(I)+A(3)*X(I)**2
ERROR=((Y(I)-YE)*100.)/Y(I)
101 WRITE(6,102)Y(I),YE,ERROR
102 FORMAT(1H 2F10.6,FR.2)
2 FORMAT(1H 5F11.4)
GOTO 70
80 CALL EXIT
END

```

AJUSTE POLINOMICO DE LA CURVA DE EQUILIBRIO METANCL AGUA

VALORES X E Y EXPERIMENTALES

2	4	0.7790000	0.5000000	0.8250000	0.6000000
		0.8699999	0.7000000	0.9150000	0.8000000
COEFICIENTES DEL POLINOMIO					
		-0.1193E-01	0.2143E-01	0.3817E-01	
VERIFICACION DE LOS VALORES DE Y					
		Y EXP.	Y CALC.	ERROR%	
		0.500000	0.499487	0.12	
		0.600000	0.600801	-0.13	
		0.700000	0.700147	-0.02	
		0.800000	0.799646	0.04	

AJUSTE POLINOMICO DE LA CURVA DE PUNTOS DE FCCIC

VALORES X E Y EXPERIMENTALES

2	4	73.0999908	0.7790000	71.1999969	0.8250000
		69.2999878	0.8699999	67.5999908	0.9150000
COEFICIENTES DEL POLINOMIO					
		0.2556E-01	-0.2400E-01	-0.4295E-05	
VERIFICACION DE LOS VALORES DE Y					
		Y EXP.	Y CALC.	ERROR%	
		0.779000	0.778342	0.08	
		0.825000	0.825120	-0.01	
		0.870000	0.871867	-0.21	
		0.915000	0.912665	0.15	

APENDICE III

Cálculo del coeficiente de difusión del sistema metanol - agua
en fase vapor

Para el cálculo de este coeficiente se utilizó la ecuación de Chapman Enskog (2)

$$D_{AB} = 0,001853 \frac{\sqrt{T^3 \left(\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)}}{P \sigma_{AB}^2 \Omega_{AB}}$$

donde:

D_{AB} = Coeficiente de difusión (cm²/seg)

T = Temperatura absoluta (°K)

M_A , M_B = Pesos moleculares

P = Presión (atm.)

Ω_{AB} = Función adimensional de la temperatura y del campo de potencial intermolecular que viene dada aproximadamente por la función Lennard Jones la cual tiene como parámetros σ_{AB} y ϵ/k

σ_{AB} = Diámetro de colisión (Å)

ϵ = Energía de interacción molecular (erg)

k = Constante de Boltzman.

Estos parámetros vienen tabulados para algunas sustancias y en el caso del agua el dato hallado fue:

$$\epsilon/k_{\text{agua}} = 363 \text{ °K}$$

El dato para el metanol fue estimado a partir de la ecuación recomendada por Hirschfelder, Bird, y Spotz (2) :

$$\varepsilon/k = 0,77 T_c \quad (^{\circ}\text{K})$$

siendo para el metanol:

$$T_c = 240 \text{ }^{\circ}\text{C} = 513 \text{ }^{\circ}\text{K}$$

el valor que resulta es:

$$\varepsilon/k_{\text{metanol}} = 395 \text{ }^{\circ}\text{K}$$

Para el cálculo del diámetro de colisión se utilizó la siguiente expresión:

$$\sigma^0 = 2,44 \left(\frac{T_c}{P_c} \right)^{1/3}$$

siendo:

$$T_c \text{ agua} = 374,15 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$P_c \text{ agua} = 218,4 \text{ atm.}$$

$$P_c \text{ metanol} = 78,7 \text{ atm.}$$

se obtuvieron los siguientes valores:

$$\begin{aligned} \sigma^0_{\text{agua}} &= 3,5 \text{ \AA} \\ \sigma^0_{\text{metanol}} &= 4,51 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Los parámetros de Lennard - Jones para la mezcla se estimaron combinando empíricamente los correspondientes a las especies A y B .

$$\sigma_{AB}^2 = \frac{1}{2} (\sigma_A^2 + \sigma_B^2) = 4 \text{ \AA}$$

$$\frac{\epsilon_{AB}}{k} = \sqrt{\frac{\epsilon_A}{k} \cdot \frac{\epsilon_B}{k}} = 378,66 \text{ } ^\circ\text{K}$$

Para obtener finalmente el valor de $\Omega_{D_{AB}}$ se utilizó la Tabla para predicción de propiedades de transporte de gases a baja densidad en función de $T/\frac{\epsilon_{AB}}{k}$ (2).

En la Tabla XXI se consignan los valores hallados de $\Omega_{D_{AB}}$ y los de D_{AB} en función de la temperatura.

TABLA XXI
Coeficientes de difusión en fase vapor

y_A	T (°K)	$T/\frac{\epsilon_{AB}}{k}$	$\Omega_{D_{AB}}$	D_{AB} (cm ² /seg)
0,1	370,6	0,9787	1,450	0,1671
0,3	364,2	0,9618	1,465	0,1610
0,5	357,8	0,9450	1,480	0,1549
0,7	349,4	0,9227	1,495	0,1478
0,8	345,5	0,9124	1,500	0,1432

NOMENCLATURA

- A = área interfasial de la burbuja , cm^2
- A' = constante definida en la ecuación (2.12)
- a = semieje mayor de la burbuja , cm
- a_1 , a_2 , a_3 = coeficientes del ajuste polinómico de la curva de equilibrio
- b = semieje menor de la burbuja , cm
- b_1 , b_2 , b_3 = coeficientes del ajuste polinómico de la curva de punto de rocío
- C = concentración molar total , mol/cm^3
- C_A , C_B = concentración molar de los componentes A y B respectivamente , mol/cm^3
- C_p , C_v = capacidad calorífica a presión y volumen constante respectivamente , $\text{cal}/\text{mol} \text{ } ^\circ\text{C}$
- \hat{C}_p , \hat{C}_v = capacidad calorífica a presión y volumen constante respectivamente , $\text{cal}/\text{g} \text{ } ^\circ\text{C}$.
- c = punto considerado fijo en el método Regula Falsi clásico
- D = diámetro de la burbuja esférica , cm
- D_e = diámetro equivalente del esferoide, $D_e = \frac{2a}{\sqrt[3]{e}}$, cm
- D_{AB} = coeficiente de difusión en una mezcla binaria, cm^2/seg
- d = diámetro del orificio de salida de la burbuja , cm
- E = concentración adimensional definida en ecuación (4.36)
- E_{MV} = eficiencia de Murphree definida en la ecuación (1.1)
- e = excentricidad de la burbuja , $e = \frac{2a}{2b}$
- f_b = factor de arrastre para burbujas definido en la ecuación (3.21) adimensional
- G = velocidad del vapor en ecuación (4.1) cm/seg
- g = aceleración de la gravedad , cm/seg^2

H = constante de Henry ecuación (3.30) , atm/ fracc. molar

\hat{H} = entalpía molar , cal/ mol

h = coeficiente de transferencia de calor , cal/cm² °C seg.

h' = intervalo de tiempo en el método de Runge Kutta , seg.

K' = constante en la ecuación (4.20) , cm/seg

K_x , K_y = coeficientes globales de transferencia de materia en fase líquida y vapor respectivamente ; mol/cm² seg.

k_T = coeficiente de conductividad térmica , cal/cm °C seg.

k_L , k_V = coeficientes de transferencia de materia en fase líquida y vapor respectivamente , cm/seg.

k_x , k_y = coeficientes de transferencia de materia en fase líquida y vapor respectivamente mol/cm² seg

k = constante de Boltzman

L = altura de la columna líquida , cm

l = espesor de la película ecuación (3.5) , cm

\mathcal{L} = longitud de un elemento de fluido ecuación (3.8 y 3.9) , cm

M = peso molecular , g/mol

m = pendiente de la curva de equilibrio

m_y = pendiente definida en la ecuación (1.11)

\mathcal{M} = masa total del sistema , moles

N = flujo molar , moles/cm² seg

n = número de moles , moles

n_A = moles de la especie A , moles de A

$\underline{\hat{n}}$ = versor normal a la superficie

P = presión , atm.

p = pendiente definida en la ecuación (5.53) , °C/fracc. molar

Q = velocidad de transferencia calórica , cal/ seg

QC_1 , QC_2 , QC_3 , QT_1 , QT_2 , QT_3 = variables en el método de Runge - Kutta

q = flujo calórico , cal/cm² seg.

R = radio de la burbuja esférica , cm

R_{Tot} , R_g , R_L = resistencias a la transferencia de materia, total, en el vapor y en el líquido respectivamente, ecuación (5.50) , $(\text{mol}/\text{cm}^2 \text{ seg})^{-1}$

R_1 , R_2 , R_3 = relaciones adimensionales definidas en (5.41)

r = coordenada radial

r' = relación de flujos molares , $r' = \frac{N_B}{N_A}$, adimensional

\mathcal{R} = constante general de los gases , $\text{cm}^3 \text{ atm}/^\circ\text{K mol}$

S = superficie que envuelve al volumen de control , cm^2

s = velocidad de renovación superficial , ecuación (3.7) , 1/seg

T = temperatura , $^\circ\text{C}$

ΔT = diferencia de temperatura entre el vapor que ingresa al plato y el líquido en este , $\Delta T = T_{Vi} - T_L$, $^\circ\text{C}$

t = tiempo , seg

t_c = tiempo de contacto , seg

U = energía interna total , cal

\hat{U} = energía interna molar , cal/mol

u = coordenada radial , $u = r - R$, cm

V = volumen de la burbuja , cm^3

\hat{V} = volumen molar , cm^3/mol

\underline{v} = velocidad , cm/seg

v_∞ = velocidad del fluido lejos de la interfase , cm/seg

\underline{v}^* = velocidad media molar , $\underline{v}^* = \frac{C_A \underline{v}_A + C_B \underline{v}_B}{C_A + C_B}$, cm/seg

W = velocidad de transferencia de materia , mol/seg.

w = fracción másica

x = fracción molar en el líquido

x_d = desplazamiento de la burbuja , cm

x^j = variable a iterar en el método de búsqueda de raíces

y = fracción molar en el vapor

y_n = composición del vapor que sale de la etapa n

y_{ne} = composición del vapor en equilibrio con el líquido que sale de la etapa n

z_1, z_2 = relaciones definidas en las ecuaciones (5.54) y (5.55)

Letras Griegas

α = difusividad térmica , $\alpha = \frac{k}{\rho c_p}$, cm^2/seg

δ = relación de capacidades caloríficas a presión y volumen constante , $\delta = c_p/c_v$

δ' = parámetro de asociación para el solvente en la ecuación de Wilke Chang (5.43)

\mathcal{E} = energía de interacción molecular , erg.

\mathcal{E}' = cota del error

θ = componente tangencial en coordenadas esféricas

λ = calor latente de vaporización , cal/mol

μ = viscosidad dinámica , g/cm seg

ν = viscosidad cinemática, cm^2/seg

ρ = densidad , g/cm^3

σ = tensión interfacial líquido - gas , dinas/cm

σ_{AB}' = diámetro de colisión , Å

ϕ = potencial de velocidad

ψ = ángulo azimutal en coordenadas esféricas

Ψ = función de corriente

$\Omega_{\mathcal{D}_{AB}}$ = función adimensional , teoría de Chapman - Enskog

ω = vorticidad

Subíndices

- A , B = especies de un sistema binario
- a = valor anterior
- a' = en el tope de la columna
- b = en el seno de una fase
- c = valor crítico
- f = valor final
- g = en fase gaseosa
- i = valor inicial
- L = en fase líquida
- n = correspondiente a la etapa n
- o = en la interfase
- r = componente radial
- v = en fase vapor
- w = correspondiente al agua
- 1 = soluto
- 2 = solvente
- θ = componente tangencial
- φ = componente azimutal

Supraíndices

- * = magnitud adimensional ecuación (4.10)
- = media volumétrico definido para una propiedad cualquiera

$$\bar{Y} = \frac{1}{V} \int_V Y \, dV$$

- \sim = valor promedio en el tiempo, ecuación (4.17)
- j = número de iteración
- (m) = a través de una superficie de transferencia de materia

Números dimensionales

Fr = número de Froude ; $Fr = \frac{g D}{v_{\infty}^2}$

M = relación adimensional , $M = \frac{Fr}{Re^4 We^3} = \frac{g \mu^4}{\rho \sigma^3}$

Nu = número de Nusselt , $Nu = \frac{h D}{k_T}$

Pe = número de Peclet en transferencia de calor $Pe = Re Pr = \frac{v_{\infty} De}{\alpha}$

Pe_{AB} = número de Peclet en transferencia de materia , $Pe = Re Sc = \frac{v_{\infty} D}{\mathcal{D}}$

Pe' = 3/4 Pe

Re = número de Reynolds , $Re = \frac{\rho v_{\infty} D}{\mu}$

Sc = número de Schmidt , $Sc = \frac{\mu}{\rho \mathcal{D}}$

Sh = número de Sherwood , $Sh = \frac{k D}{c \mathcal{D}}$

$\tilde{Sh} = \frac{\tilde{k}_y 2R}{c \mathcal{D}}$

Sh_∞ = número de Sherwood asintótico , $Sh_{\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} \tilde{Sh}$

We = número de Weber = $\frac{\sigma}{De v_{\infty}^2 \rho}$