



industriales  
etsii

Escuela Técnica  
Superior  
de Ingeniería  
Industrial

# UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA

Escuela Técnica Superior de Ingeniería  
Industrial

**ESTIMACIÓN DE LA VISCOSIDAD EN MEZCLAS  
MULTICOMPONENTE GASEOSAS. ELABORACIÓN  
DE UN CÓDIGO MATLAB PARA LA ESTIMACIÓN DE  
LA VISCOSIDAD**

**TRABAJO FIN DE MÁSTER**

**MÁSTER UNIVERSITARIO EN INGENIERÍA  
INDUSTRIAL**

**Autor: Juan Luis Muñoz Fernández**  
Director: Carlos Godínez Seoane



Universidad  
Politécnica  
de Cartagena

Cartagena, Noviembre 2016





# Contenido

1	Introducción.....	5
2	Objetivos y plan de trabajo.....	11
2.1	Objetivos.....	13
2.2	Plan de trabajo.....	13
3	Métodos de estimación de la viscosidad.....	15
3.1	Revisión bibliográfica.....	17
3.1.1	Teoría de las propiedades de transporte en gases.....	17
3.1.2	Método de Lucas.....	19
3.1.3	Método de Chung.....	22
3.1.4	Método de Huber.....	25
3.1.5	Regla de mezcla de Wilke.....	29
3.1.6	Método de Dean-Stiel.....	29
3.2	Diseño de los códigos.....	30
3.3	Validación de los códigos.....	39
3.3.1	Casos de aplicación.....	39
3.3.2	Resultados.....	41
3.3.3	Análisis.....	43
4	Aplicación de los códigos Matlab al diseño de condensadores.....	49
4.1	Diseño de condensadores para mezclas con gases incondensables.....	51
4.1.1	Método de Colburn-Chilton (1934).....	51
4.1.2	Método de Silver-Bell-Ghaly (SBG) (1973).....	53
4.1.3	Ejemplo: Área del condensador de una planta de metanol.....	58
4.2	Programa Excel.....	60
4.3	Discusión de resultados.....	63
4.3.1	Comparativa de resultados con los distintos métodos.....	63
4.3.2	Cálculo del precio de un intercambiador de calor.....	63
4.3.3	Influencia del error en el cálculo de la viscosidad de la mezcla gaseosa en el área y el coste de intercambiadores.....	64
5	Conclusiones.....	69
6	Bibliografía.....	73



7	Anexo.....	77
7.1	Método de Lucas.....	79
7.2	Método de Chung.....	83
7.3	Método de Huber.....	88



# 1 Introducción.





Si se aplica un esfuerzo de cizallamiento a una porción de fluido confinado, el fluido se moverá con un gradiente de velocidad cuyo máximo de velocidad está en el punto donde el esfuerzo es aplicado. Si el esfuerzo local de cizallamiento por unidad de área en el punto es dividido por el gradiente de velocidad, el cociente obtenido es definido como la viscosidad del medio. Entonces, la viscosidad viene a ser una medida de la fricción interna del fluido, que tiende a oponerse al cambio dinámico en el movimiento del mismo. Una fuerza de cizallamiento aplicada dará lugar a un gran gradiente de velocidad si la viscosidad es baja. Un aumento de la viscosidad causa que cada capa fluida ejerza un creciente arrastra friccional en las capas adyacentes, lo cual disminuye sucesivamente el gradiente de velocidad.

De acuerdo con Poling (2000) es importante destacar que la viscosidad difiere en un aspecto importante de otras propiedades. De hecho, únicamente se puede medir en un experimento que no está en equilibrio. En esto se diferencia de la densidad, que puede ser encontrada en un aparato estático y por tanto es una propiedad de equilibrio. A nivel de micro escala, sin embargo, ambas propiedades reflejan los efectos del movimiento y la interacción molecular. Entonces, incluso aunque en general se hace referencia a la viscosidad como una propiedad de no equilibrio, ésta es, como la densidad, una función del estado termodinámico del fluido; de hecho, puede ser usada para definir el estado del material.

Los mecanismos y la teoría de la viscosidad del gas han sido razonablemente clarificadas por la mecánica estadística de no equilibrio y la teoría cinética de gases (Millat et al., 1996), pero la teoría de la viscosidad líquida está menos desarrollada.

Dado que la viscosidad se define como esfuerzo de cizallamiento por unidad de área dividido por el gradiente de velocidad, debe tener dimensiones de  $\frac{\text{fuerza}}{\text{superficie}} \cdot \text{tiempo}$  o  $\frac{\text{masa}}{\text{longitud} \cdot \text{tiempo}}$ . Se usan los dos grupos dimensionales, aunque para la mayoría de trabajos científicos la viscosidad se expresa en poises. Se cumple que:

$$1 P = 100 cP = 0.1 Pa \cdot s = 0.1 \frac{kg}{m \cdot s}$$

$$1 cP = 1 mPa \cdot s$$

La viscosidad cinemática es la relación de la viscosidad con la densidad. Con la viscosidad en P y la densidad en gramos por centímetro cúbico, las unidades de la viscosidad cinemática es el stoke, cuyas unidades son el centímetro cuadrado por segundo. Así pues, en el sistema internacional, la viscosidad se expresa en  $Pa \cdot s$  y la viscosidad cinemática en  $\frac{m^2}{s}$  or  $\frac{cm^2}{s}$ .

En relación con los órdenes de magnitud de la viscosidad cabe destacar que la viscosidad de los gases se encuentra entre 0.01-0.1 cP (por ejemplo, el aire tiene una viscosidad de 0.02 cP a 25°C). En los líquidos ordinarios se encuentra entre 0.1 y 1000 cP (por ejemplo el agua tiene una viscosidad de 1 cP), siendo excepcionales los valores de los polímeros (entre  $10^6$  y  $10^{10}$  cP) y del vidrio fundido ( $10^{18}$  cP). La viscosidad disminuye con la temperatura tanto en líquidos como en gases y aumenta con la presión.

La viscosidad expresa la resistencia intrínseca que ofrecen las moléculas de un fluido al movimiento de su propia masa. Este fenómeno puede explicarse en términos de transferencia de cantidad de movimiento, puesto que en un fluido que se mueve, debido a las colisiones moleculares, se transfiere cantidad de movimiento entre capas de fluido, tendiendo a acelerarse las capas más lentas y a retardarse las más

rápidas. La ley que gobierna la velocidad global con que ocurre la transferencia de cantidad de movimiento es la ley de rozamiento de Newton, que se puede escribir para un fluido como:

$$\tau_v = \frac{F}{A} = \mu \cdot \left(\frac{dv}{dx}\right)$$

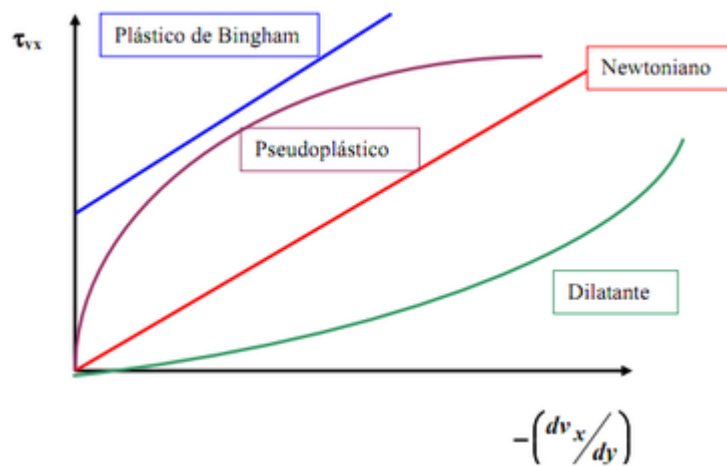
En donde la viscosidad es la constante de proporcionalidad entre el esfuerzo constante y el gradiente de velocidad del fluido en la dirección normal al flujo de cantidad de movimiento.

Existen algunos fluidos en los que no se verifica la ley del rozamiento de Newton, no existiendo proporcionalidad entre el esfuerzo constante existente en el conducto o equipo en donde se mueve el fluido y el gradiente de velocidad. Estos son los fluidos no newtonianos, que son característicos de determinadas industrias que manejan sólidos en suspensión como la industria papelera, el tratamiento de fangos en sistemas de depuración de aguas, en los procesos de fermentación y obviamente en los procesos de polimerización.

En estos fluidos pueden encontrarse comportamientos muy diversos. Así por ejemplo, en los fluidos pseudoplásticos la viscosidad disminuye conforme aumenta la velocidad de deformación (por ejemplo la mayonesa, soluciones de pulpa de papel), mientras que en los fluidos dilatantes la viscosidad aumenta con la velocidad de deformación (por ejemplo, las arenas movedizas o suspensiones de agua y arena).

Un tercer grupo de fluidos son los plásticos de Bingham, los cuales no fluyen hasta que no se alcanza un esfuerzo cortante mínimo (por ejemplo pasta dentífrica, ketchup).

Por último, en algunos fluidos no-newtonianos como los polímeros y otros fluidos viscoelásticos, la viscosidad depende además del tiempo en que dura el esfuerzo cortante aunque este se mantenga constante. Así los fluidos tixotrópicos la viscosidad disminuye con el tiempo (por ejemplo la gelatina, la crema de afeitar) y los fluidos reopécticos se comportan de forma contraria, es decir, su viscosidad aumenta con el tiempo (por ejemplo suspensiones de yeso en agua). En <http://procesosbio.wikispaces.com/Fluidos> podemos ver la siguiente representación gráfica del esfuerzo cortante frente al gradiente de velocidad:



La viscosidad es una propiedad de las sustancias que participa en numerosos grupos adimensionales importantes en el análisis de los equipos industriales empleados en Ingeniería Química. Por ejemplo,





forma parte de las definiciones en los números de Schmidt y Prandtl, los cuales intervienen en las correlaciones para transferencia de materia y calor que se usan en el diseño y la operación de reactores, columnas de destilación o intercambiadores de calor. Asimismo, la viscosidad entra también en la definición del número de Reynolds el cual se usa para delimitar las regiones de flujo laminar y flujo turbulento en la hidrodinámica de la mayoría de equipos de proceso:

$$\text{Re} = \frac{\rho u D}{\mu} \quad \text{Pr} = \frac{C_p \mu}{k} \quad \text{Sc} = \frac{\mu}{\rho D_{AB}}$$

La estimación de la viscosidad de los gases a altas presiones es un área donde los simuladores industriales presentan algunas dudas. Muchos procesos industriales importantes se desarrollan en esta zona de altas presiones. Por ejemplo, la síntesis del amoníaco o del metanol, moléculas claves en la industria de los fertilizantes y en la petroquímica derivada se llevan a cabo en fase gas a presiones entre 100-200 bar. Otro ejemplo de interés son los procesos de extracción supercrítica (SCE) con  $\text{CO}_2$  en donde este gas se emplea a presiones 80-100 bar. Esta tecnología se usa para extraer productos de la industria farmacéutica o alimentaria libres de disolvente o que se degradarían térmicamente con otros procesos a mayor temperatura. Otros gases como el metano, etileno o etano han recibido también atención como disolventes para extracción supercrítica (Seader, 2006).

Por las razones anteriores, parece razonable evaluar como la aplicación de métodos más precisos para la estimación de la viscosidad influye en cálculos importantes relacionados con el diseño y la operación de procesos químicos. En esa línea argumental, en los apartados que siguen vamos a comparar el desempeño de los diversos métodos estudiados en este proyecto utilizando como medida del desempeño del método la diferencia entre el resultado obtenido en algún parámetro importante con y sin corrección de la viscosidad por el efecto de la presión. Utilizaremos para la comparación modelos más o menos sofisticados en los que en algún punto del modelo haya que estimar la viscosidad de alguna mezcla gaseosa a alta presión.





## 2 Objetivos y plan de trabajo.





## 2.1 Objetivos.

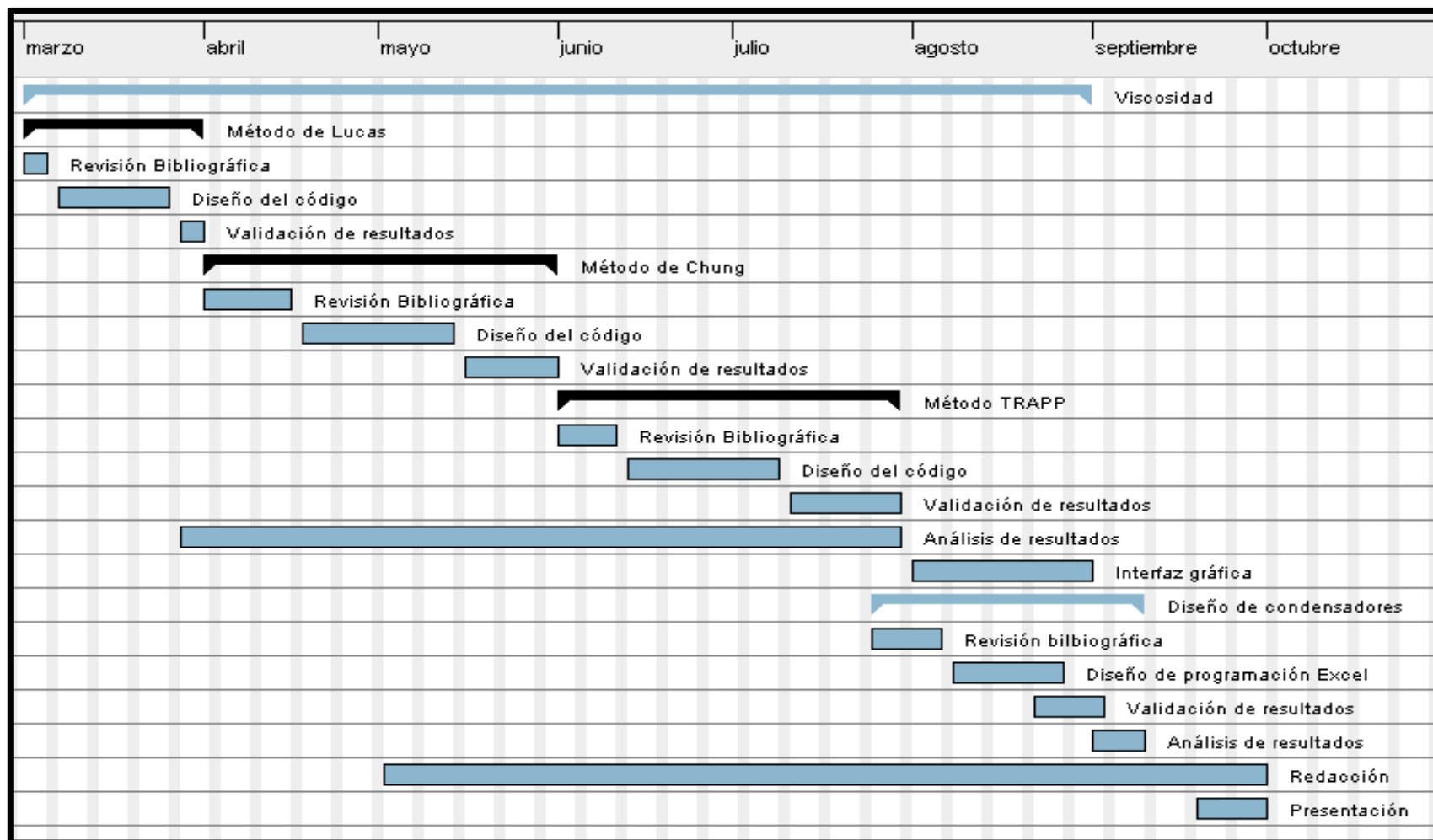
El objetivo de este trabajo es:

- Desarrollar un código Matlab capaz de estimar la viscosidad de mezclas gaseosas mediante diferentes métodos de cálculo.
- Estudiar la influencia de la variación o error en el cálculo de la viscosidad en el diseño de condensadores.

## 2.2 Plan de trabajo.

Las distintas actividades que se han desarrollado a lo largo de este proyecto quedan recogidas en la siguiente tabla, representada en el gráfico que la sigue.

Nombre	Fecha de inicio	Fecha de fin
☐ ● Viscosidad	1/03/16	31/08/16
☐ ● Método de Lucas	1/03/16	31/03/16
● Revisión Bibliográfica	1/03/16	4/03/16
● Diseño del código	7/03/16	25/03/16
● Validación de resultados	28/03/16	31/03/16
☐ ● Método de Chung	1/04/16	31/05/16
● Revisión Bibliográfica	1/04/16	15/04/16
● Diseño del código	18/04/16	13/05/16
● Validación de resultados	16/05/16	31/05/16
☐ ● Método TRAPP	1/06/16	29/07/16
● Revisión Bibliográfica	1/06/16	10/06/16
● Diseño del código	13/06/16	8/07/16
● Validación de resultados	11/07/16	29/07/16
● Análisis de resultados	28/03/16	29/07/16
● Interfaz gráfica	1/08/16	31/08/16
☐ ● Diseño de condensadores	25/07/16	9/09/16
● Revisión bibliográfica	25/07/16	5/08/16
● Diseño de programación Excel	8/08/16	26/08/16
● Validación de resultados	22/08/16	2/09/16
● Análisis de resultados	1/09/16	9/09/16
● Redacción	2/05/16	30/09/16
● Presentación	19/09/16	30/09/16





## 3 Métodos de estimación de la viscosidad.







### 3.1 Revisión bibliográfica.

#### 3.1.1 Teoría de las propiedades de transporte en gases.

La teoría de las propiedades de transporte en gases está establecida, pero es bastante compleja para expresarla en ecuaciones que puedan ser usadas para calcular la viscosidad directamente. Cuando un gas es sometido a un esfuerzo de cizalladura de manera que hay algo de movimiento, las moléculas de cualquier punto tienen el vector de velocidad sumado a su propio vector velocidad aleatorio. Las colisiones moleculares causan un intercambio de cantidad de movimiento a través del fluido, y esta velocidad de movimiento se distribuye. Cerca de la fuente de esfuerzo, el vector de velocidad es alto, pero como las moléculas se alejan de la fuente, éstas van reduciendo su velocidad debido a las colisiones moleculares aleatorias. Este intercambio aleatorio de cantidad de movimiento molecular es la causa predominante de la viscosidad gaseosa.

De acuerdo con Poling (2000), si el gas se modela de forma simple, es posible mostrar la relación entre la viscosidad, la temperatura, la presión y el tamaño molecular. Un tratamiento más riguroso genera relaciones similares pero con importantes factores de corrección. El modelo elemental de los gases asume que todas las moléculas son esferas rígidas sin atracción entre ellas, con diámetro  $\sigma$ , masa  $m$ , que se mueven aleatoriamente a una velocidad media  $v$ . La densidad molar es el número de moléculas ( $n$ ) en una unidad de volumen mientras que la densidad másica es la cantidad de materia en una unidad de volumen. Las moléculas se mueven en el gas y colisionan transfiriéndose cantidad de movimiento en un gradiente de velocidad y energía en un gradiente de temperatura. El movimiento también transfiere especies moleculares en un gradiente de concentración. El flujo neto de cantidad de movimiento, energía, o masa de componentes entre dos capas se asume proporcional al momento, energía o gradiente de densidad de masa, por ejemplo:

$$\text{Flujo} \propto -\frac{d\rho'}{dz}$$

Donde la densidad  $\rho'$  decrece en la dirección positiva de  $z$  y  $\rho'$  puede ser  $\rho_i$  (densidad de masa),  $n \cdot m \cdot v_y$  (densidad de cantidad de movimiento), o  $C_v \cdot n \cdot T$  (densidad energética). El coeficiente de proporcionalidad para todos estos flujos viene dado por la teoría cinética elemental como  $v \cdot \frac{L}{3}$ , donde  $v$  es la velocidad molecular media y  $L$  es el camino libre medio.

La ecuación anterior se usa también para definir los coeficientes de transporte de difusividad  $D$ , la viscosidad  $\eta$ , la conductividad térmica  $\lambda$ :

$$\text{Flujo masa} = -D \cdot m \cdot \frac{dn_i}{dz} = -v \cdot \frac{L}{3} \cdot \frac{d\rho_i}{dz}$$

$$\text{Flujo cantidad de movimiento} = -\eta \cdot \frac{dv_y}{dz} = -v \cdot \frac{L}{3} \cdot m \cdot n \cdot \frac{dv_y}{dz}$$

$$\text{Flujo energía} = -\lambda \cdot \frac{dT}{dz} = -v \cdot \frac{L}{3} \cdot C_v \cdot n \cdot \frac{dT}{dz}$$



Y a continuación se definen los coeficientes de transporte:

$$D = v \cdot \frac{L}{3} = (const) \cdot \frac{T^{\frac{3}{2}}}{M^{\frac{1}{2}} \cdot P \cdot \sigma^2}$$
$$\eta = m \cdot \rho \cdot v \cdot \frac{L}{3} = (const) \cdot \frac{T^{\frac{1}{2}} \cdot M^{\frac{1}{2}}}{\sigma^2}$$
$$\lambda = c_v \cdot n \cdot v \cdot \frac{L}{3} = (const) \cdot \frac{T^{\frac{1}{2}}}{M^{\frac{1}{2}} \cdot \sigma^2}$$

Las constantes de las tres ecuaciones anteriores son diferentes en cada uno de los casos; es reseñable la dependencia de los tres coeficientes de T, P, M y  $\sigma$ . Un tratamiento similar para esferas rígidas sin atracción que tienen una distribución maxwelliana de velocidad produce las mismas ecuaciones pero con constantes numéricas ligeramente diferentes.

La relación de viscosidad para el modelo de esferas rígidas sin atracción es:

$$\eta = 26.69 \cdot \frac{(T \cdot M)^{\frac{1}{2}}}{\sigma^2}$$

donde  $\eta$ =viscosidad (uP); M=peso molecular (g/mol); T=temperatura (K);  $\sigma$ =Diámetro de esfera (Å).

Tal y como se expresa en Poling (2000), si las moléculas atraen o repelen otras debido a las fuerzas intermoleculares, se usa normalmente la teoría de Chapman and Enskog (Chapman and Cowling, 1939; Hirschfelder, et al., 1954). Hay cuatro asunciones importantes en este desarrollo:

- (1) El gas está lo suficientemente diluido como para que solo ocurran colisiones binarias (gas ideal);
- (2) El movimiento de las moléculas durante una colisión puede ser descrito por los mecanismos clásicos;
- (3) Sólo ocurren colisiones elásticas;
- (4) Las fuerzas intermoleculares actúan solo entre centros fijos de moléculas.

Con estas restricciones, parece que la teoría solo debería ser aplicada sobre gases monoatómicos de baja presión y alta temperatura. Las restricciones de presión y temperatura son válidas para gases poliatómicos y, excepto para conductividad térmica, son adecuadas para la mayoría de modelos propuestos.

El tratamiento Chapman-Enskog desarrolla relaciones integrales para las propiedades de transporte cuando las interacciones entre moléculas colindantes son descritas por una función de energía potencial  $\psi(r)$ . Las ecuaciones requieren complejas soluciones numéricas para cada modelo. En términos generales, la solución de primer orden para viscosidad puede ser escrita:

$$\eta = 26.69 \cdot \frac{(T \cdot M)^{\frac{1}{2}}}{\sigma^2 \Omega_v}$$



donde la dependencia de la temperatura de la colisión integral  $\Omega_v$ , es diferente para cada  $\psi(r)$ .  $\Omega_v$  es la unidad si las moléculas no se atraen entre sí. Se pueden encontrar correcciones en Chapman and Cowling (1939) y Hirschfelder, et al. (1954).

### 3.1.2 Método de Lucas.

El objetivo de este apartado es explicar el método que K. Lucas desarrolló entre los años 1980 y 1984 para describir la viscosidad de mezclas gaseosas a altas y bajas presiones.

De cada uno de los componentes participantes en la mezcla necesitamos saber algunas propiedades: Masa molecular, temperatura crítica, presión crítica, volumen crítico, compresibilidad crítica, momento dipolar, fracción molar y un factor Q para indicar si el componente es helio, hidrógeno, deuterio o ninguno. En el caso de que estemos en alta presión y que la temperatura reducida media ( $T_{rm}$ ) sea menor o igual que uno, hay que introducir la presión de vapor. También necesitamos conocer la temperatura de la mezcla, presión de la mezcla y número de componentes de la mezcla. Conocidos esos datos, la secuencia a implementar implica dar los siguientes pasos:

En primer lugar se calcula la temperatura reducida, factor de polaridad, factor de efectos cuánticos y momento dipolar reducido.

La temperatura reducida se obtiene para cada componente j como el cociente entre la temperatura de la mezcla y la temperatura crítica del componente:

$$T_{rj} = \frac{T}{T_{cj}} \quad [\text{Ec. 3.1.}]$$

El factor cuántico se usa solo para los gases cuánticos He, H<sub>2</sub> y D<sub>2</sub>, de manera que:

$$F_Q^0 = 1.22Q^{0.15} \{1 + 0.00385[(T_r - 12)^2]^{\frac{1}{M}} \cdot \text{sign}(T_r - 12)\} \quad [\text{Ec. 3.2.}]$$

Donde  $Q = 1.38$  (He),  $Q = 0.76$  (H<sub>2</sub>),  $Q = 0.52$  (D<sub>2</sub>). *Sign* ( ) indica que se debe usar +1 o -1 dependiendo de si el valor del argumento ( ) es mayor o menor que cero.

Para obtener el factor de polaridad es necesario calcular el momento dipolar reducido para cada componente. De acuerdo con Lucas:

$$\mu_{rj} = 52.46 \cdot \frac{\mu^2 P_c}{T_c^2} \quad [\text{Ec. 3.3}]$$

Donde  $\mu$  está en debyes,  $P_c$  en bares y  $T_c$  en kelvins.

Los valores del factor de polaridad vienen dados en función del momento dipolar reducido:

$$\text{Si } 0 \leq \mu_{rj} < 0.022, F_p^0 = 1. \quad [\text{Ec. 3.4}]$$

$$\text{Si } 0.022 \leq \mu_{rj} < 0.075, F_p^0 = 1 + 30.55 \cdot (0.292 - Z_c)^{1.72} \quad [\text{Ec. 3.5}]$$

$$\text{Si } 0.075 \leq \mu_{rj}, F_p^0 = 1 + 30.55 \cdot (0.292 - Z_c)^{1.72} \cdot |0.96 + 0.1 \cdot (T_r - 0.7)| \quad [\text{Ec. 3.6}]$$

A continuación hay que calcular los valores medios de algunas variables: temperatura crítica media, presión crítica media, masa molar media, factor cuántico medio y factor polar medio:

$$T_{cm} = \sum_i y_i T_{ci} \quad [\text{Ec. 3.7}]$$



$$P_{cm} = RT_{cm} \cdot \frac{\sum_i y_i \cdot Z_{ci}}{\sum_i y_i \cdot V_{ci}} \quad [\text{Ec. 3.8}]$$

$$M_m = \sum_i y_i M_i \quad [\text{Ec. 3.9}]$$

$$F_{Pm}^0 = \sum_i y_i F_{Pi}^0 \quad [\text{Ec. 3.10}]$$

$$F_{Qm}^0 = (\sum_i y_i F_{Qi}) A \quad [\text{Ec. 3.11}]$$

Para el cálculo del factor A hay que tener en cuenta la siguiente expresión, de manera que el subíndice H hace referencia al componente de peso molecular más alto y el subíndice L hacer referencia al componente de peso molecular más bajo:

$$\text{Si } \frac{M_H}{M_L} > 9 \text{ y } 0.05 < y_H < 0.7, A = 1 - 0.01 \cdot \left(\frac{M_H}{M_L}\right)^{0.87} \quad [\text{Ec. 3.12}]$$

Si no se cumple lo anterior, A=1.

Serán estos valores los que nos permitan calcular la viscosidad reducida inversa:

$$\xi = \left[ \frac{((RT_c) \cdot (N_o)^2)}{(M^3 P_c^4)} \right]^{\frac{1}{6}} \quad [\text{Ec. 3.13}]$$

En unidades del sistema internacional, si  $R = 8314 \frac{J}{kmol K}$  y  $N_o$  (Número de Avogadro) =  $6.023 \cdot 10^{26} (kmol)^{-1}$  y con  $T_c$  en kelvins, M en  $\frac{kg}{kmol}$ , and  $P_c$  en  $\frac{N}{m^2}$ ,  $\xi$  tienen unidades de  $\frac{m^2}{Ns}$ . En unidades más convenientes:

$$\xi = 0.176 \cdot \left(\frac{T_c}{M^3 \cdot P_c^4}\right)^{\frac{1}{6}} \quad [\text{Ec. 3.14}]$$

Donde la viscosidad reducida  $\xi$  está en  $(\mu P)^{-1}$ ,  $T_c$  en kelvins, M en  $\frac{g}{mol}$  y  $P_c$  en bares.

A continuación se calcula la presión reducida media como cociente de la presión de la mezcla y la presión crítica media, así como la temperatura reducida media, que es el cociente de la temperatura de la mezcla y la temperatura reducida media.

A partir de aquí hay una bifurcación de itinerarios, de manera que se ejecuta una parte del código u otra en función de que estemos en alta presión ( $P_{rm} > 1$ ) o en baja presión ( $P_{rm} < 1$ ).

Para el caso de baja presión, Lucas sugiere la siguiente expresión:

$$\eta_r = \eta \xi = [0.807 \cdot T_r^{0.618} - 0.357 \cdot \exp(-0.449 \cdot T_r) + 0.340 \cdot \exp(-4.058 T_r) + 0.018] \cdot F_p^0 \cdot F_q^0 \quad [\text{Ec. 3.15}]$$

Finalmente, conocida la viscosidad inversa reducida, obtenemos la viscosidad de la mezcla como:

$$\eta = \frac{\eta_r}{\xi} \quad [\text{Ec. 3.16}]$$



En el caso de que estemos en alta presión, el cálculo es más elaborado. En una técnica que es similar en algunos aspectos a la de Reichenberg, Lucas recomienda el siguiente procedimiento. Para la temperatura reducida de interés primero calcula un parámetro  $Z_1$ :

$$Z_1 = \eta^0 \cdot \xi = [0.807 \cdot T_r^{0.618} - 0.357 \cdot \exp(-0.449 T_r) + 0.340 \cdot \exp(-4.058 T_r) + 0.018] \cdot F_p^0 \cdot F_Q^0 \quad [\text{Ec. 3.17}]$$

A continuación se calcula el parámetro  $Z_2$ :

$$\text{Si } T_r \leq 1 \text{ y } P_r < \left(\frac{P_{vp}}{P_c}\right) \text{ entonces } Z_2 = 0.600 + 0.760 P_r^\alpha + (6.990 \cdot P_r^\beta - 0.6)(1 - T_r) \quad [\text{Ec. 3.18}]$$

Donde

$$\alpha = 3.262 + 14.98 P_r^{5.508}$$

$$\beta = 1.390 + 5.746 P_r$$

$$\text{En cambio, si } (1 < T_r < 40) \text{ y } (0 < P_r \leq 100) \text{ entonces } Z_2 = \eta^0 \cdot \xi \cdot \left[1 + \frac{a \cdot P_r^e}{b P_r^f + (1 + c P_r^d)^{-1}}\right] \quad [\text{Ec. 3.19}]$$

Los valores de las constantes se obtienen:

$$a = \frac{a_1}{T_r} \cdot \exp(a_2 T_r^\gamma)$$

$$b = a \cdot (b_1 T_r - b_2)$$

$$c = \frac{c_1}{T_r} \cdot \exp(c_2 T_r^\delta)$$

$$d = \frac{d_1}{T_r} \cdot \exp(d_2 T_r^\epsilon)$$

$$e = 1.3008$$

$$f = f_1 \cdot \exp(f_2 T_r^\zeta)$$

$$a_1 = 1.245 \cdot 10^{-3}, a_2 = 5.1726, \gamma = -0.3286$$

$$b_1 = 1.6553, b_2 = 1.2723$$

$$c_1 = 0.4489, c_2 = 3.0579, \delta = -37.7332$$

$$d_1 = 1.7368, d_2 = 2.2310, \epsilon = -7.6351$$

$$f_1 = 0.9425, f_2 = -0.1853, \zeta = 0.4489$$

A continuación calculamos el parámetro  $Y$ :

$$Y = \frac{Z_2}{Z_1} \quad [\text{Ec. 3.20}]$$



A continuación se calculan los factores de corrección a aplicar:

$$F_P = \frac{1+(F_P^0-1)Y^{-3}}{F_P^0} \quad [\text{Ec. 3.21}]$$

$$F_Q = \frac{1+(F_Q^0-1)[Y^{-1}-(0.007)\cdot(\ln Y)^4]}{F_Q^0} \quad [\text{Ec. 3.22}]$$

Finalmente:

$$\eta = \frac{Z_2 F_P F_Q}{\xi} \quad [\text{Ec. 3.23}]$$

### 3.1.3 Método de Chung.

A continuación se procede a explicar la secuencia de operaciones necesaria para calcular mediante el método de Chung (1988) la viscosidad en mezclas de sustancias, de acuerdo con Poling (2000)..

Los datos con los que se trabaja principalmente son masa molar  $M$ , propiedades críticas ( $T_c$ ,  $P_c$ ,  $V_c$ ), momento dipolar  $\mu$ ,  $w$ , número de grupos NOH, fracciones molares de los componentes. Hay que introducir también el número de componentes de la mezcla, y la temperatura y la presión de la misma.

Una aclaración importante sobre este método viene referida al uso del método Soave-Redlich-Kwong (1972) para el cálculo de la densidad. En general, no se tiene por qué disponer de este dato. Si se dispone de él, una revisión del código permite insertarlo de manera que sea el valor considerado, dejando al margen los cálculos del método SRK.

En primer lugar calculamos los parámetros de interacción binaria  $\xi_{ij}$  y  $\zeta_{ij}$ . Se trata de matrices cuadradas donde los elementos de la diagonal no se emplean, por lo que se ponen a cero. El resto de parámetros suelen ser igual a 1.

A continuación nos centramos en el cálculo de una serie de matrices que contienen información de las sustancias de la mezcla. Calculamos por separado los elementos de la diagonal y el resto.

Para los elementos de la diagonal:

$$\sigma_{ii} = \sigma_i = V_{ci}^{\frac{1}{3}} \quad [\text{Ec. 3.24}]$$

Donde  $\sigma$  representa el diámetro de colisión.

$$\frac{\varepsilon_{ii}}{k} = \frac{\varepsilon_i}{k} = \frac{T_{ci}}{1.2593} \quad [\text{Ec. 3.25}]$$

Donde  $k$  es la constante de Boltzmann's y  $\varepsilon$  es el mínimo de la energía par-potencial.

$$\omega_{ii} = \omega_i \quad [\text{Ec. 3.26}]$$

Donde  $\omega$  es el factor acéntrico.

$$k_{ii} = k_i \quad [\text{Ec. 3.25}]$$

Donde  $k$  es una corrección especial para sustancias altamente polares como alcoholes y ácidos.

$$M_{ii} = M_i \quad [\text{Ec. 3.26}]$$



Donde M representa la masa molecular.

Respecto a la corrección  $k$ , cabe destacar que esta se puede encontrar en la siguiente tabla o en la ecuación que la acompaña:

Compuesto	$k$	Compuesto	$k$
Methanol	0.215	n-Pentanol	0.122
Ethanol	0.175	n-Hexanol	0.114
n-Propanol	0.143	n-Heptanol	0.109
i-Propanol	0.143	Acetic Acid	0.0916
n-Butanol	0.132	Water	0.076
i-Butanol	0.132		

Para otros alcoholes no mostrados en la tabla anterior:

$$k = 0.0682 + 4.707 \cdot \left( \frac{\text{Número de grupos } -OH}{\text{Peso molecular}} \right)$$

Para los elementos que no están en la diagonal:

$$\sigma_{ij} = \xi_{ij} (\sigma_i \cdot \sigma_j)^{\frac{1}{2}} \quad [\text{Ec. 3.27}]$$

$$\frac{\varepsilon_{ij}}{k} = \zeta_{ij} \cdot \left( \frac{\varepsilon_i}{k} \cdot \frac{\varepsilon_j}{k} \right)^{\frac{1}{2}} \quad [\text{Ec. 3.28}]$$

$$\omega_{ij} = \frac{\omega_i + \omega_j}{2} \quad [\text{Ec. 3.29}]$$

$$k_{ij} = (k_i k_j)^{\frac{1}{2}} \quad [\text{Ec. 3.30}]$$

$$M_{ij} = \frac{2M_i M_j}{M_i + M_j} \quad [\text{Ec. 3.31}]$$

A continuación, mediante otro bucle for calculamos los valores medios ponderados asociados a las matrices anteriormente calculadas:

$$\sigma_m^3 = \sum_i \sum_j \sigma_{ij}^3 \quad [\text{Ec. 3.32}]$$

$$\left( \frac{\varepsilon}{k} \right)_m = \frac{\sum_i \sum_j y_i y_j \left( \frac{\varepsilon_{ij}}{k} \right) \sigma_{ij}^3}{\sigma_m^3} \quad [\text{Ec. 3.33}]$$

$$M_m = \left( \frac{\sum_i \sum_j y_i y_j \left( \frac{\varepsilon_{ij}}{k} \right) \sigma_{ij}^2 M_{ij}^{1/2}}{\left( \frac{\varepsilon}{k} \right)_m \sigma_m^2} \right)^2 \quad [\text{Ec. 3.33 bis}]$$

$$\omega_m = \frac{\sum_i \sum_j y_i y_j \omega_{ij} \sigma_{ij}^3}{\sigma_m^3} \quad [\text{Ec. 3.34}]$$

$$\mu_m^4 = \sigma_m^3 \sum_i \sum_j \left( \frac{y_i y_j \mu_i^2 \mu_j^2}{\sigma_{ij}^3} \right) \quad [\text{Ec. 3.35}]$$

$$k_m = \sum_i \sum_j y_i y_j k_{ij} \quad [\text{Ec. 3.36}]$$



A continuación se calcula:

$$\mu_{rm} = \frac{131.3 \mu_m}{(V_{cm} T_{cm})^{\frac{1}{2}}} \quad [\text{Ec. 3.37}]$$

$$V_{cm} = \left( \frac{\sigma_m}{0.809} \right)^3 \quad [\text{Ec. 3.38}]$$

$$T_{cm} = 1.2593 \left( \frac{\varepsilon}{k} \right)_m \quad [\text{Ec. 3.39}]$$

El siguiente consiste en calcular los coeficientes  $E_i$  con  $i$  desde 1 hasta 10. Para ello requerimos a su vez los coeficientes de la siguiente tabla:

$i$	$a_i$	$b_i$	$c_i$	$d_i$
1	6.324	50.412	-51.628	1189.0
2	$1.210 \cdot 10^{-3}$	$-1.154 \cdot 10^{-3}$	$-6.257 \cdot 10^{-3}$	0.03728
3	5.283	254.209	-168.48	3898.0
4	6.623	38.096	-8.464	31.42
5	19.745	7.630	-14.354	31.53
6	-1.900	-12.537	4.985	-18.15
7	24.275	3.450	-11.291	69.35
8	0.7972	1.117	0.01235	-4.117
9	-0.2382	0.06770	-0.8163	4.025
10	0.06863	0.3479	0.5926	-0.727

A partir de esta tabla, calculamos  $E_i = a_i + b_i \cdot \omega_m + c_i \cdot \mu_r^4 + d_i \cdot k_m$ , donde  $i$  va de 1 a 10. [Ec. 3.40]

Ahora vamos a calcular la integral de colisión como:

$$\Omega_v = [A(T^*)^{-B}] + C[\exp(-DT^*)] + E[\exp(-FT^*)] \quad [\text{Ec. 3.41}]$$

Donde:

$$T_m^* = \frac{T}{\left( \frac{\varepsilon}{k} \right)_m} \quad [\text{Ec. 3.42}]$$

$$A = 1.16145$$

$$B = 0.14874$$

$$C = 0.52487$$

$$D = 0.77320$$

$$E = 2.16178$$

$$F = 2.43787$$

A continuación calculamos el factor que sirve para tener en cuenta las formas moleculares y la polaridad de gases diluidos:

$$F_{cm} = 1 - 0.275\omega_m + 0.275\mu_{rm}^4 + k_m \quad [\text{Ec. 3.43}]$$





Ahora calculamos:

$$y = \frac{\rho V_c}{6} \quad [\text{Ec. 3.44}]$$

$$G_1 = \frac{1-0.5y}{(1-y)^3} \quad [\text{Ec. 3.45}]$$

$$G_2 = \frac{E_1 \left\{ \frac{[1-\exp(-E_4 y)]}{y} \right\} + E_2 G_1 \exp(E_5 y) + E_3 G_1}{E_1 E_4 + E_2 + E_3} \quad [\text{Ec. 3.46}]$$

$$\eta^{**} = E_7 y^2 G_2 \exp[E_8 + E_9 (T_m^*)^{-1} + E_{10} (T_m^*)^{-2}] \quad [\text{Ec. 3.47}]$$

$$\eta^* = \frac{(T_m^*)^{\frac{1}{2}}}{\Omega_v} \{F_c [(G_2)^{-1} + E_6 y]\} + \eta^{**} \quad [\text{Ec. 3.48}]$$

Finalmente:

$$\eta = \eta^* \cdot \frac{36.344 (M T_c)^{\frac{1}{2}}}{V_c^{\frac{2}{3}}} \quad [\text{Ec. 3.49}]$$

donde  $\eta$  representa la viscosidad.

Nótese que a bajas densidades y se aproxima a cero,  $G_1$  y  $G_2$  se aproximan a 1 y  $\eta^{**}$  es despreciable.

### 3.1.4 Método de Huber.

A continuación se describirá el método de Huber (1996) también conocido como TRAPP (Transport Property Prediction).

Se parte como datos fundamentales de la mezcla de la presión, la temperatura y la composición de la misma. Además, se implementará el método SRK para el cálculo de la densidad. Se necesitan diversos datos referentes a las sustancias, a saber: masa molar  $M$ , propiedades críticas ( $T_c$ ,  $P_c$ ,  $V_c$ ,  $Z_c$ ), momento dipolar  $\mu$ , factor acéntrico  $w$ .

En primer lugar, es preciso calcular el valor de la viscosidad a baja presión  $\eta_m^0$ . Para ello se implementa el método de Chung, siguiendo los pasos expuestos anteriormente.

A continuación se calcula la densidad de la mezcla, mediante el método SRK.

Se calculan las relaciones de reducción de sustancia equivalente para cada una de las sustancias mediante las siguientes expresiones:

$$f = \frac{T_c}{T_c^R} [1 + (\omega - \omega^R)(0.05203 - 0.7498 \ln T_r)] \quad [\text{Ec. 3.50}]$$

$$h = \frac{\rho_c^R}{\rho_c} \cdot \frac{Z_c^R}{Z_c} [1 - (\omega - \omega^R)(0.1436 - 0.2822 \ln T_r)] \quad [\text{Ec. 3.51}]$$

Donde  $T_c$ ,  $\rho_c$ ,  $Z_c$ ,  $\omega$ , son la temperatura, la densidad, el factor de compresibilidad y el factor acéntrico críticos para cada una de las sustancias.  $T_r$  es la temperatura reducida para cada una de las sustancias.

Además para la aplicación de este método se requiere el establecimiento de un fluido de referencia, que será propano en este caso. A sus correspondientes propiedades hacen referencia  $T_c^R$ ,  $\rho_c^R$ ,  $Z_c^R$ ,  $\omega^R$ .



Calculamos el diámetro de colisión o de esfera dura  $\sigma_i$ :

$$\sigma_i = 4.771 \cdot h_i^{\frac{1}{3}} \quad [\text{Ec. 3.52}]$$

Y con lo calculado hasta ahora ya estamos en disposición de calcular otros parámetros que nos conducirán hacia las relaciones de reducción de sustancia equivalente medias:

$$f_{ij} = (f_i \cdot f_j)^{\frac{1}{2}} \quad [\text{Ec. 3.53}]$$

$$h_{ij} = \frac{\left(h_i^{\frac{1}{3}} + h_j^{\frac{1}{3}}\right)^3}{8} \quad [\text{Ec. 3.54}]$$

$$h_m = \sum_i \sum_j y_i y_j h_{ij} \quad [\text{Ec. 3.55}]$$

$$f_m = \frac{1}{h_m} \cdot \left[\sum_i \sum_j y_i y_j f_{ij} h_{ij}\right] \quad [\text{Ec. 3.56}]$$

$$M_{ij} = \frac{2 M_i M_j}{M_i + M_j} \quad [\text{Ec. 3.57}]$$

Calculamos  $F_{\eta m}$ :

$$F_{\eta m} = (44.094)^{-\frac{1}{2}} \cdot h_m^{-2} \cdot \sum_i \sum_j y_i y_j (f_{ij} M_{ij})^{\frac{1}{2}} (h_{ij})^{\frac{4}{3}} \quad [\text{Ec. 3.58}]$$

A continuación se utiliza el valor de densidad calculado previamente mediante el método SRK y el valor de hm para calcular  $\rho_o$ :

$$\rho_o = \rho h_m \quad [\text{Ec. 3.59}]$$

En el método de Huber, la viscosidad residual de un fluido puro es relativa a la viscosidad residual de un fluido de referencia, propano:

$$\eta - \eta^o = F_{\eta} [\eta^R - \eta^{Ro}] \quad [\text{Ec. 3.60}]$$

Los valores del fluido de referencia son evaluados a  $T_o$  y densidad  $\rho_o$ , no a T y  $\rho$ . En la ecuación anterior,  $\eta^o$  es la viscosidad a baja presión,  $\eta^R$  es la viscosidad real del fluido de referencia, propano, a la temperatura  $T_o$  y densidad  $\rho_o$ .  $\eta^{Ro}$  es el valor de baja presión para propano a temperatura  $T_o$ . Para propano Younglove y Ely (Zaytsev y Aseyev, 1992) proporcionan la ecuación que se aplica después de calcular  $\rho_o$ :

$$\eta^R - \eta^{Ro} = G_1 \exp[\rho_o^{0.1} G_2 + \rho_o^{0.5} (\rho_r^R - 1) G_3] - G_1 \quad [\text{Ec. 3.61}]$$

Donde

$$\rho_r^R = \frac{\rho_o}{\rho_c^R} \quad [\text{Ec. 3.62}]$$

Y  $\eta^R - \eta^{Ro}$  está en  $\mu Pa \cdot s$ .



El resto de valores implicados en el cálculo se obtienen como a continuación se expone:

$$G_1 = \exp\left(E_1 + \frac{E_2}{T}\right)$$

$$G_2 = E_3 + \frac{E_4}{T^{1.5}}$$

$$G_3 = E_5 + \frac{E_6}{T} + \frac{E_7}{T_2}$$

$$E_1 = -14.113294896$$

$$E_2 = 968.22940153$$

$$E_3 = 13.686545032$$

$$E_4 = -12511.628378$$

$$E_5 = 0.0168910864$$

$$E_6 = 43.527109444$$

$$E_7 = 7659.4543472$$

El cálculo de la viscosidad requiere realizar la asunción de esfera dura. Para realizar una corrección a esa asunción se calculará más adelante el término  $\Delta\eta^{ENSKOG}$  como:

$$\Delta\eta^{ENSKOG} = \eta_m^{ENSKOG} - \eta_x^{ENSKOG} \quad [\text{Ec. 3.63}]$$

Donde  $\eta_x^{ENSKOG}$  es para un fluido puro hipotético con la misma densidad que la mezcla.

Teniendo clara que esa es la expresión hacia la que nos dirigimos, comenzamos a exponer las expresiones para el cálculo de los valores que nos conducen a ella.

Calculamos distintos valores relacionados con el diámetro de esfera dura:

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad [\text{Ec. 3.64}]$$

$$\sigma_x = \left(\sum_i \sum_j y_i y_j \sigma_{ij}^3\right)^{\frac{1}{3}} \quad [\text{Ec. 3.65}]$$

Ahora calculamos un parámetro relacionado con la masa molecular de las sustancias implicadas:

$$M_x = \left(\sum_i \sum_j y_i y_j M_{ij}^{\frac{1}{2}} \sigma_{ij}^4\right)^2 \sigma_x^{-8} \quad [\text{Ec. 3.66}]$$

Calculamos la relación de viscosidad para el modelo de una esfera rígida no atrayente, sin olvidar que posteriormente tendremos que hacer la corrección con el valor de viscosidad del fluido puro hipotético con la misma densidad que la mezcla:



$$\eta_{ij}^o = 26.69 \cdot \frac{(M_{ij}T)^{\frac{1}{2}}}{(\sigma_{ij})^{\frac{1}{2}}} \quad [\text{Ec. 3.67}]$$

$$\eta_x^o = 26.69 \cdot \frac{(M_x T)^{\frac{1}{2}}}{(\sigma_x)^{\frac{1}{2}}} \quad [\text{Ec. 3.68}]$$

$$\xi = (6.023 \cdot 10^{-4}) \cdot \frac{\pi}{6} \cdot \rho \cdot \sum_i y_i \sigma_i^3 \quad [\text{Ec. 3.69}]$$

$$\xi_x = (6.023 \cdot 10^{-4}) \cdot \frac{\pi}{6} \cdot \rho \cdot \sum_i y_i \sigma_x^3 \quad [\text{Ec. 3.70}]$$

$$\vartheta_{ij} = \frac{\sigma_i \sigma_j \cdot \sum_k y_k \sigma_k^2}{2 \sigma_{ij} \cdot \sum_k y_k \sigma_k^3} \quad [\text{Ec. 3.71}]$$

$$\vartheta_x = \frac{1}{2} \quad [\text{Ec. 3.72}]$$

La función de distribución radial se calcula mediante (Tham and Gubbins, 1977):

$$g_{ij} = (1 - \xi)^{-1} + \frac{3 \xi}{(1 - \xi)^2} \vartheta_{ij} + \frac{2 \xi^2}{(1 - \xi)^3} \vartheta_{ij}^2 \quad [\text{Ec. 3.73}]$$

$$g_x = (1 - \xi_x)^{-1} + \frac{3 \xi_x}{(1 - \xi_x)^2} \vartheta_x + \frac{2 \xi_x^2}{(1 - \xi_x)^3} \vartheta_x^2 \quad [\text{Ec. 3.74}]$$

$$Y_i = y_i \left[ 1 + \frac{8\pi}{15} (6.023 \cdot 10^{-4}) \rho \sum_j y_j \left( \frac{M_j}{M_i + M_j} \right) \sigma_{ij}^3 g_{ij} \right] \quad [\text{Ec. 3.75}]$$

$$Y_x = 1 + \frac{8\pi}{15} (6.023 \cdot 10^{-4}) \rho \left( \frac{\sigma_x^3 g_x}{2} \right) \quad [\text{Ec. 3.76}]$$

Los n valores de  $\beta_i$  se obtienen resolviendo las n ecuaciones lineales de la forma:

$$\sum_j B_{ij} \beta_j = Y_i \quad [\text{Ec. 3.77}]$$

Donde

$$B_{ij} = 2 \sum_k y_i y_k \frac{g_{ik}}{\eta_{ik}^o} \left( \frac{M_k}{M_i + M_k} \right)^2 \left( \left( 1 + \frac{5 M_i}{3 M_k} \right) \delta_{ij} - \frac{2 M_i}{3 M_k} \delta_{jk} \right) \quad [\text{Ec. 3.78}]$$

En la ecuación anterior  $\delta_{ij}$  es la función delta de Kronecker, que toma el valor de 1 si  $i=j$ , y toma el valor de 0 si  $i \neq j$ .

De la misma manera:

$$\sum_j B_x \beta_x = Y_x \quad [\text{Ec. 3.79}]$$

Donde

$$B_x = \frac{g_x}{\eta_x^o} \quad [\text{Ec. 3.80}]$$



A continuación:

$$\eta_m^E = \sum_i \beta_i Y_i + 9.725 \cdot 10^{-7} \rho^2 \sum_i \sum_j y_i y_j \sigma_{ij}^6 \eta_{ij}^0 g_{ij} \quad [\text{Ec. 3.81}]$$

$$\eta_x^E = \sum_i \beta_x Y_x + 9.725 \cdot 10^{-7} \rho^2 \sigma_x^6 \eta_x^0 g_x \quad [\text{Ec. 3.82}]$$

Donde  $\rho$ =densidad en mols/L,  $\sigma$  está en Å y  $\eta_m^E$  está en  $\mu P$ .

Aplicamos:

$$\Delta\eta^E = \eta_m^E - \eta_x^E \quad [\text{Ec. 3.83}]$$

Finalmente calculamos la viscosidad de la mezcla como:

$$\eta_m = \eta_m^0 + F_{\eta m}(\eta^R - \eta^{R0}) + \Delta\eta^E \quad [\text{Ec. 3.84}]$$

### 3.1.5 Regla de mezcla de Wilke.

Para el caso de la viscosidad sin corrección de presión puede usarse la regla de mezcla de Wilke (1950):

$$\eta_m = \sum_{i=1}^n \frac{x_i \eta_i}{\sum_{j=1}^n x_j \phi_{ij}} \quad [\text{Ec. 3.85}]$$

$$\phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left(1 + \frac{M_i}{M_j}\right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \left[1 + \left(\frac{\eta_i}{\eta_j}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{M_i}{M_j}\right)^{\frac{1}{4}}\right]^2 \quad [\text{Ec. 3.86}]$$

donde  $x_i$  y  $x_j$  son las fracciones molares de las especies y  $\eta_i$ ,  $\eta_j$  son las viscosidades de los componentes puros (Pa·s) a la presión y temperatura especificada y  $M_i$ ,  $M_j$  son las masas moleculares de las dos especies (kg/kmol). La viscosidad de un componente puro gaseoso se puede predecir mediante la ecuación:

$$\eta_i = \frac{A_i T^{B_i}}{1 + \frac{C_i}{T} + \frac{D_i}{T^2}} \quad [\text{Ec. 3.87}]$$

donde las constantes A, B, C y D se encuentran tabuladas en la literatura. La viscosidad así se obtiene en Pa·s.

### 3.1.6 Método de Dean-Stiel.

El método de Dean-Stiel (1965) es un método sencillo para incluir el efecto de la presión sobre la viscosidad de las mezclas gaseosas. Su sencillez radica en el hecho de que parte del dato de viscosidad a baja presión y utiliza una simple correlación para corregir el valor de baja presión y extrapolarlo a alta presión. Se incluye aquí como referencia ya que es el método utilizado por defecto por alguno de los simuladores de procesos químicos comerciales más populares.

Según este método, la viscosidad a alta presión de una mezcla gaseosa viene dada por:

$$\eta = \eta_0 + \frac{10.8 \times 10^{-5}}{\xi} \left( e^{1.439 p_R} - e^{-1.11 p_R^{1.858}} \right) \quad [\text{Ec. 3.88}]$$



donde  $\eta_0$  es la viscosidad a baja presión obtenida por alguno de los modelos que son aplicables a baja presión. El factor adimensional  $\xi$  viene dado por:

$$\xi = \frac{T_c^{1/6}}{M^{1/2} P_c^{2/3}} \quad [\text{Ec. 3.89}]$$

Donde  $T_c$  y  $P_c$  son la pseudo-temperatura crítica y pseudo-presión crítica de la mezcla, las cuales se obtienen mediante las siguientes reglas de mezcla:

$$T_c = \sum_i^n y_i T_{ci} \quad P_c = \frac{Z_{cm} R T_c}{V_{cm}} \quad [\text{Ec. 3.90}]$$

$$Z_{cm} = \sum_i^n y_i Z_{ci} \quad V_{cm} = \sum_i^n y_i V_{ci} \quad [\text{Ec. 3.91}]$$

y  $M$  es la masa molecular media de la mezcla gaseosa obtenida por ponderación de las masas moleculares de los componentes individuales. Los términos exponenciales de la correlación de Dean-Stiel contienen la densidad reducida de la mezcla  $\rho_R$  obtenida mediante:

$$\rho_R = \frac{\rho_m}{\rho_{cm}} = \rho_m V_{cm} \quad [\text{Ec.3.92}]$$

La densidad de la mezcla  $\rho_m$  se obtiene mediante alguna ecuación de estado conveniente (por ejemplo, la ecuación de Soave-Redlich-Kwong).

### 3.2 Diseño de los códigos.

A continuación se muestran los flujogramas que se han utilizado para el diseño de los códigos. En ellos se muestra la secuencia de cálculo recomendada con las ecuaciones utilizadas en cada caso. Los códigos Matlab correspondientes pueden verse en el anexo.

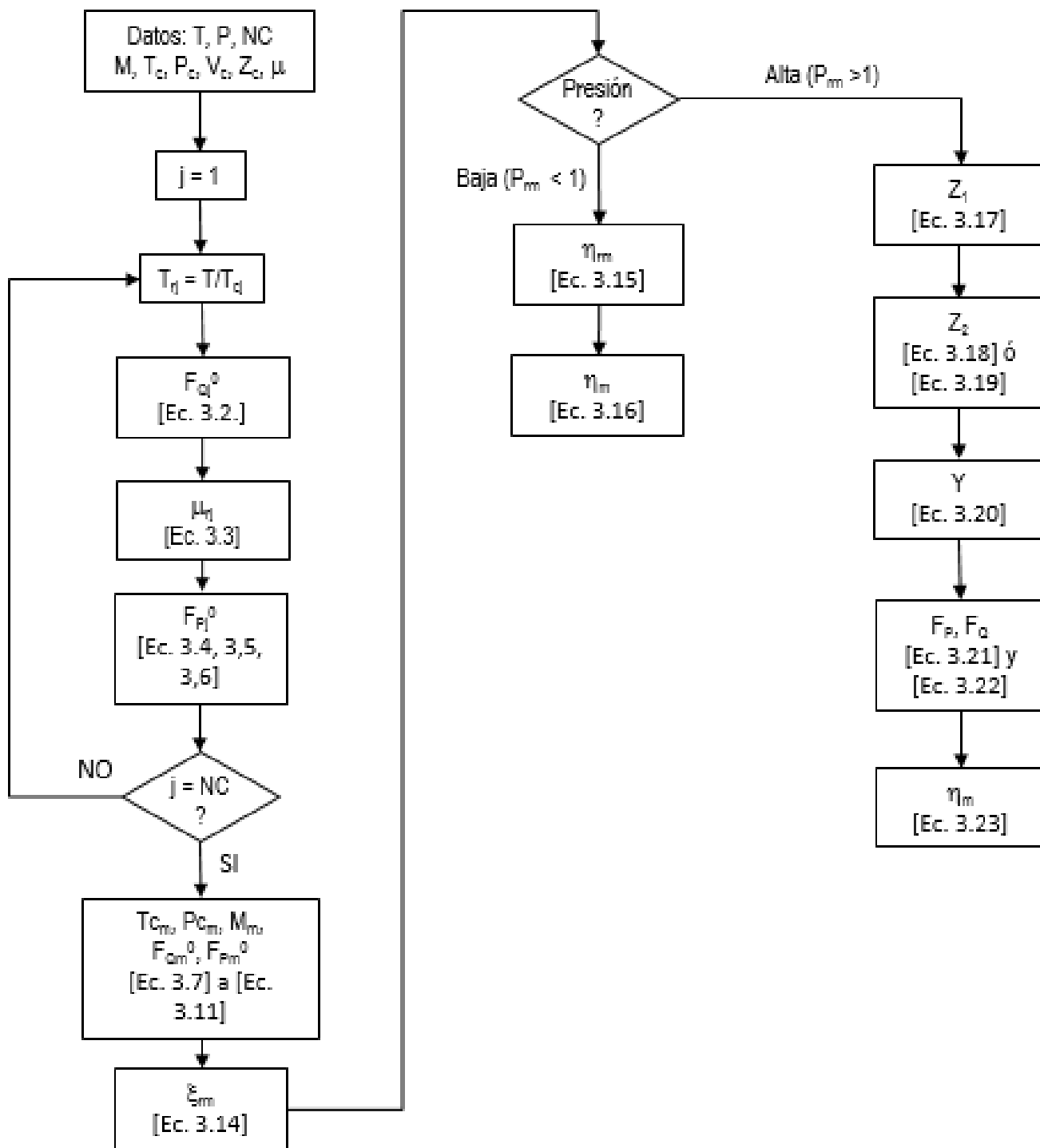


Figura 3.1. Flujograma del método de Lucas.

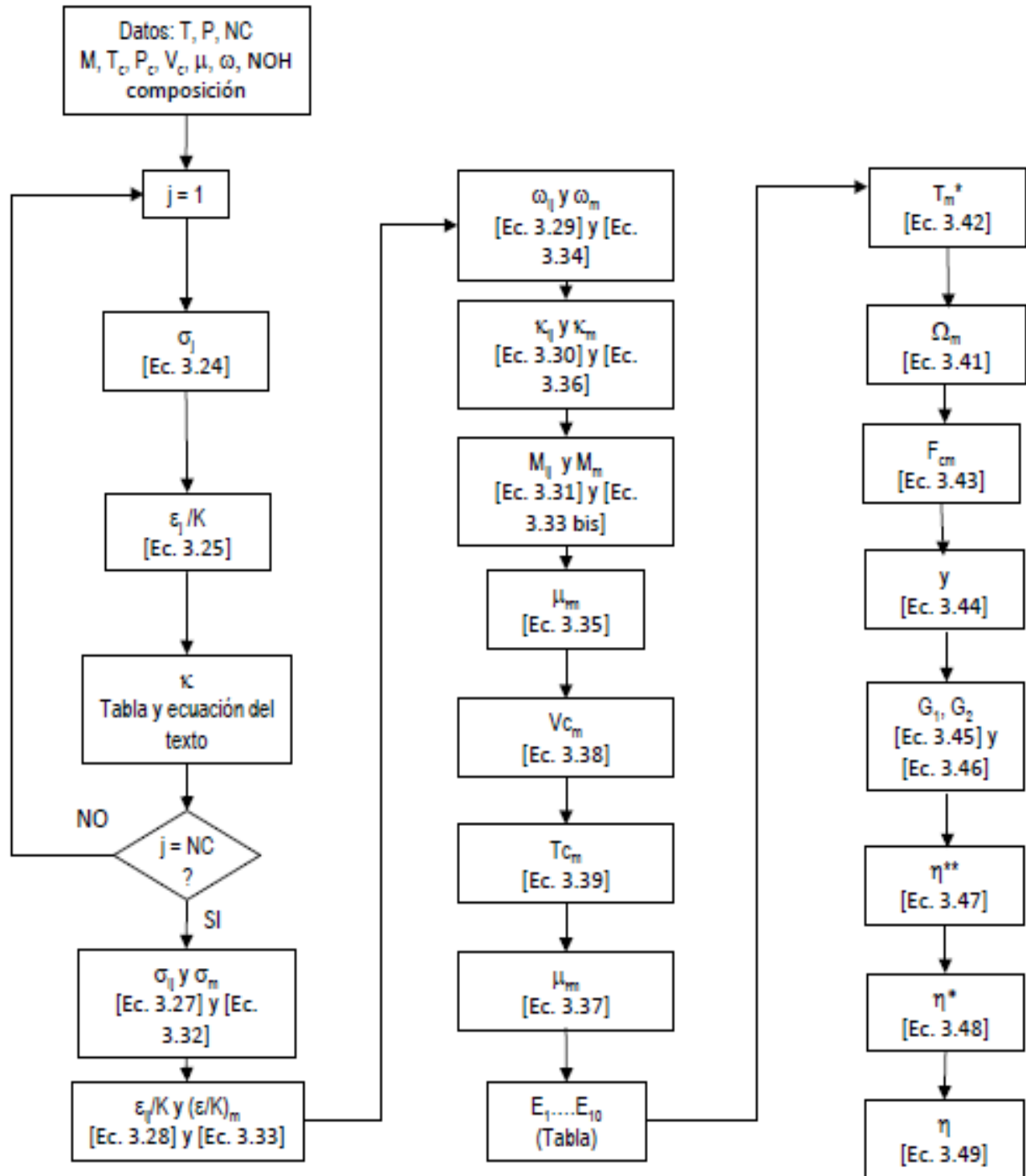


Figura 3.2. Flujoograma del método de Chung.



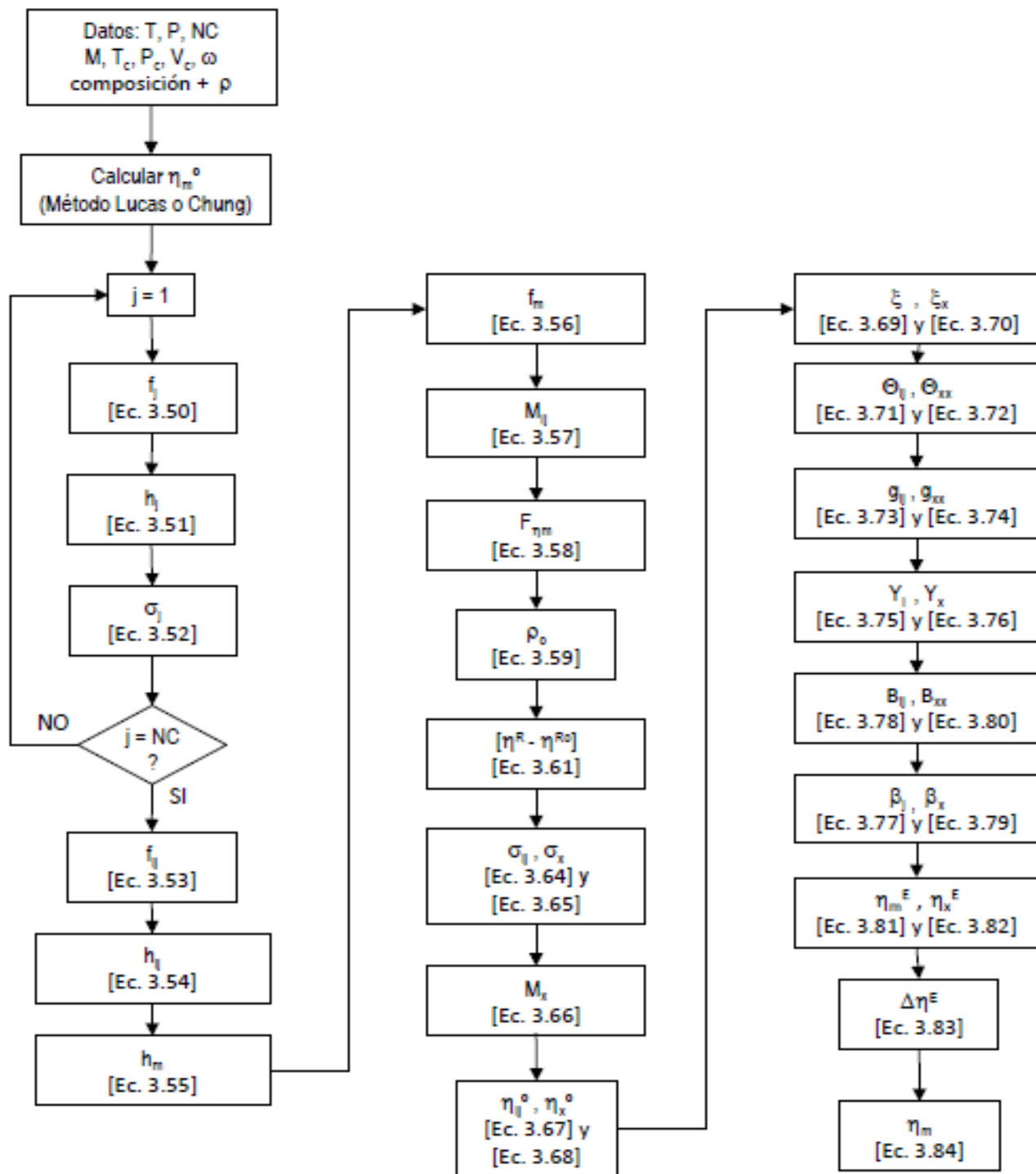


Figura 3.3. Flujoograma del método de Huber.



Se ha desarrollado mediante las herramientas que ofrece Matlab una interfaz gráfica que permite interactuar con cada uno de los métodos de cálculo de viscosidad de mezclas gaseosas de manera sencilla de forma que no haya necesidad de ir a líneas concretas de código, o entender el conjunto del mismo para obtener una viscosidad de mezcla de gases. Por el contrario, se han habilitado una serie de botones, cuadros de introducción y muestra de texto que permiten obtener, como ya se ha comentado, la viscosidad de una mezcla gaseosa por cada uno de los métodos expuestos en este texto y la densidad de dicha mezcla mediante el método SRK.

Para que el funcionamiento de la interfaz tenga lugar, en la carpeta de apertura han de hallarse:

- Archivo .fig: contiene la información gráfica de la interfaz, esto es, posicionamiento y tamaño de cada uno de los botones, cuadros de texto, cuadros de introducción de datos, etcétera.
- Archivo .m: contiene información y código relacionado con cada uno de los ítems situados en el archivo .fig. Además contiene implementados cada uno de los métodos de cálculo de viscosidad en mezclas gaseosas, así como las partes del código necesarias para que exista una interacción entre este archivo y el archivo .fig.
- Archivo "SRK.m": Contiene una parte de la implementación del método SRK para cálculo de densidad en mezclas gaseosas. Se trata de una función a la que se hace referencia en el archivo .m.
- Archivo "Datos Interfaz.xlsx". Se trata de una base de datos que incluye las sustancias químicas que se pueden usar en las mezclas, así como los valores numéricos de las propiedades requeridos para la implementación de los métodos de cálculo de viscosidad. A continuación mostramos el aspecto que tiene la base de datos y exponemos una metodología que permite la introducción de nuevos componentes en la base de datos para su utilización en la mezcla de gases.

La base de datos a la que se ha hecho referencia antes muestra un aspecto como en el que se muestra en la Figura 3.4. Como se aprecia en esta figura, cada columna hace referencia a una sustancia que puede ser incorporada en las mezclas objeto de nuestro cálculo y cada fila hace referencia a una propiedad de dicha sustancia. El archivo .m incorpora comandos que abren este archivo Excel automáticamente y seleccionan en él la sustancia adecuada y sus propiedades en función de la selección del usuario. Claro está que esta base de datos es aún muy reducida en el sentido de que son pocas las sustancias que a ella se ha incorporado. Se han incluido aquellas que ha participado de uno u otro modo en este estudio. Pero en un futuro quizá se desee incluir en las mezclas sustancias no incorporadas todavía en esta base de datos.



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1		Amoniaco	Hidrogeno	Metano	ndecano	Nitrogeno	Dioxidodeca	Agua	Metanol	Dioxidosulfuro	Sulfurodehidrogeno	EtilEter	Monoxidodecarbono
2	Tc_K	405,5	33,2	190,56	617,7	126,19	304,2	647	513	430,8	373,4	466,7	132,86
3	Pc_bar	113,5	13	45,99	22,2915	33,9	73,8	220,38	79,54	90	90	36,07	34,94
4	Vc_cm3_mo												
5	I	72,5	64,3	98,6	624	89,5	94	56,84	118	122	98	280	92,16
6	Zc	0,244	0,306	0,286	0,256	0,29	0,29	0,232	0,224	0,269	0,284	0,262	0,289
7	M_g_mol	17,031	2,016	16,043	142,285	28,0134	44,01	18,015	32,04	64,065	34,082	74,123	28,01
8	Mu_debyes	1,47	0	0	0	0	0	1,85	1,69	1,6	0,9	1,3	0,12
9	Qgas	0	0,76	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	w	0,256	-0,218	0,011	0,49	0,039	0,239	0,344	0,556	0,256	0,09	0,281	0,048
11	NOH	0	0	0	0	0	0			0	0	0	0
12	k	0	0	0	0	0	0	0,076	0,215	0	0	0	0
13													

Figura 3.4. Base de datos.



Para ello se presentan a continuación una serie de pasos que se requiere realizar si se desea incorporar una nueva sustancia, junto con sus propiedades, a esta base de datos.

1. El primer paso consiste en incorporar las propiedades de la nueva sustancia a la base de datos de las propiedades de las sustancias, esto es, al Excel titulado “Datos interfaz.xlsx”. Se añade una nueva columna con el nombre del componente y sus propiedades siguiendo el patrón de las anteriores columnas.

2. A continuación en el editor gráfico de la interfaz, se hace clic con el botón derecho sobre el popmenu1 y se abre el “Property Inspector”. En el campo “String” se hace click en el icono:



Se introduce en la lista el nombre de la sustancia a agregar.

3. Nos situamos en el código de la interfaz gráfica, en la función:

```
function popupmenu1_Callback(hObject, eventdata, handles)
```

Dentro del “switch” agregamos un “case” más, siguiendo el patrón de las anteriores sustancias.

Por ejemplo:

```
case 12 % User selects sinc.  
handles.current_data = 'Monoxidodecarbono';
```

4. A continuación, se dirige la atención a la función:

```
function pushbutton1_Callback(hObject, eventdata, handles)
```

Consta básicamente de un conjunto de if-end, uno por cada una de las sustancias de la lista del excel. Dentro de cada uno de esos if-end, hay diversos bloques de bucles for anidados, un bloque por cada propiedad de sustancias requerida en alguno de los métodos (Lucas, Chung, Huber). Lo que hace cada uno de los bucles for es asignar a una variable, cada una de las propiedades de las sustancias que hay en el Excel. Además se añaden una serie de líneas para mostrar en una lista el componente y la proporción en que se encuentra dentro de la mezcla, así como para asignar a una variable, dicha proporción. Para añadir una nueva sustancia hay que añadir un nuevo bloque if-end, siguiendo el patrón de los precedentes. Fundamentalmente, lo único que cambia de un if-end a otro es el nombre de la sustancia, que aparece repetido varias veces y entre comillas simples.

La interfaz gráfica presenta un aspecto como el que a continuación se muestra:

interfaz\_v17

## VISCOSIDAD EN MEZCLAS GASEOSAS

Iniciar

### Composición de la mezcla

Componente: Amoniaco

Fracción molar:

Guardar

### Datos de la mezcla

Temperatura (K):

Presión (bar):

### Método

MetododeLucas

### Solución

Ejecutar

Densidad (kg/m3):

Viscosidad (uP):

Autor: Juan Luis Muñoz Fernández  
Tutor: Carlos Godínez Seoane

En líneas generales se compone de:

- Un botón de Inicio, con el que se habilitan e inicializan variables y se abre el Excel que contiene la base de datos.
- Una sección de composición de la mezcla en la que el usuario introduce las sustancias químicas participantes en la mezcla gaseosa, así como la fracción molar en que participa cada una.
- Una sección donde se introducen las condiciones de la mezcla, esto es, presión y temperatura.
- Una sección donde se selecciona el método que se desea implementar en el cálculo de la viscosidad.

- Una sección de ejecución y soluciones donde mediante un botón el usuario propicia la ejecución e implementación del método seleccionado y puede visualizar tanto el valor de densidad de la mezcla calculado mediante el método SRK, como el valor de la viscosidad de la mezcla gaseosa calculado mediante el método seleccionado.

A continuación se muestra un ejemplo de funcionamiento y los pasos a seguir para conseguir la viscosidad de una mezcla gaseosa. Para el caso, tenemos una mezcla a 300 °C y 81.06 bar de monóxido de carbono con una fracción molar de 0.2, hidrógeno con una fracción molar de 0.4, agua con una fracción molar de 0.35 y metanol con una fracción molar de 0.05.

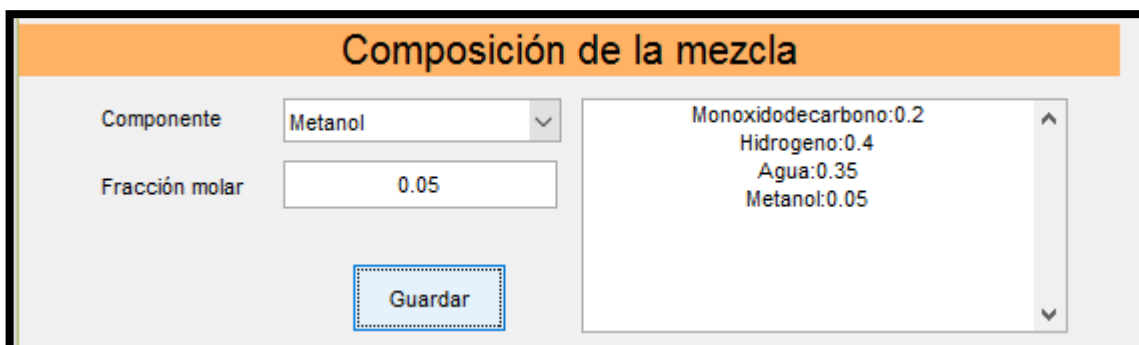
Los pasos para conocer el valor de la viscosidad de esta mezcla gaseosa son:

1. Se pulsa el botón Play que aparece en verde dentro del editor de código de Matlab. Con ello propiciamos la aparición de la interfaz gráfica mostrada anteriormente.



2. Se pulsa el botón Iniciar que aparece en la parte superior de la interfaz.
3. Para la introducción de cada uno de los componentes y las fracciones molares seguimos la siguiente secuencia: a) Se abre el desplegable "Componente" y se selecciona la sustancia a introducir; b) se introduce mediante el teclado numérico del ordenador el valor de la fracción molar en el correspondiente cuadro de introducción de texto; c) se pulsa el botón "Guardar".

Tras introducir esta secuencia se mostrará en el cuadro situado a la derecha de este apartado el nombre de la sustancia seleccionada acompañada de su fracción molar. Para este caso concreto, una vez introducidas todas las sustancias, habremos de tener un cuadro como el que a continuación se muestra: Es importante revisar que la suma de las fracciones molares es igual a 1.



4. Se introduce el valor de la temperatura de la mezcla en Kelvins y el valor de la presión en bares:

Datos de la mezcla

Temperatura (K)	<input type="text" value="573"/>
Presión (bar)	<input type="text" value="81.06"/>

5. Se abre el desplegable de la sección “Método” y se selecciona el método de cálculo que se desea usar. En este caso usaremos el método de Lucas. En esta sección hay un cuadro donde se muestran aclaraciones sobre los métodos en el caso de ser necesarias.

Método

MetododeLucas

MetododeChung

MetododeTRAPP

MetododeWilke

6. Se pulsa el botón Ejecutar que habilita la implementación del método seleccionado y propicia que por pantalla se muestren resultados de viscosidad en micro poises ( $\mu\text{P}$ ) y de densidad en  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ .

Solución

<input type="button" value="Ejecutar"/>	Densidad (kg/m3)	Viscosidad (uP)
	<input type="text" value="25.2833"/>	<input type="text" value="224.3679"/>

### 3.3 Validación de los códigos.

#### 3.3.1 Casos de aplicación.

A continuación se exponen ejemplos concretos con datos de aplicaciones de los métodos explicados anteriormente mediante los códigos adjuntos en el Anexo. Estos ejemplos se resolverán mediante el método de Lucas, el método de Chung, el método de Huber y Chemcad, que sigue el método de Dean-Stiel (1965). En la tabla 3.1 se describe los sistemas utilizados, su composición, presión y temperatura.



Tabla 3.1. Casos de aplicación utilizados en la validación de los códigos.

Nº	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
C1	NH3	NH3	CH4	SO2	H2S	NH3	CH4	CH4	CH4	CH4	CH4	CH4	N2	NH3	H2O	N2
C2	H2		C10H22		(C2H5)2O		N2	N2	N2	CO2	CO2	CO2	CO2	N2	CH3OH	H2
Yc1	0,68	1	0,8	1	0,204	1	0,9	0,9	0,9	0,9	0,9	0,9	0,6899	0,5638	0,635	0.51
Yc2	0,32		0,2		0,796		0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,3101	0,4362	0,365	0.49
T (K)	306	420	377,6	573	331	520	321,89	321,9	383	310,78	310,78	455,2	293,15	293,15	373,15	373
P (bar)	1	300	413,7	1	1	600	344,74	1379	1379	344,74	1723,7	1724	1	1	1	1





### 3.3.2 Resultados.

En líneas generales, se observa que la mayoría de los métodos, calculan un valor de viscosidad inferior al real. Por otro lado, se aprecia que los casos a baja presión presentan en general mejores resultados que los casos a alta presión. El método empleado por CHEMCAD, método de Dean-Stiel, parece uno de los más efectivos. Aunque presenta casos con errores del 20%, el 26% y casi el 70%. En el caso CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub> a 310.8 K y 1724 bar, a pesar de tener un error superior al 20%, el método de CHEMCAD es el que mejor calcula. En el caso de NH<sub>3</sub> a 420 K, con un error de Dean-Stiel, superior al 26%, tenemos que el método de Lucas presenta un error inferior al 6%. Y en el caso de CH<sub>4</sub>-C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>, para el que CHEMCAD calcula con un error de casi el 70%, el método de Huber nos ofrece una solución que tiene la mitad de error.

Así las cosas, en principio, el método empleado por Dean-Stiel parece razonablemente bueno, teniendo 7 de los 16 casos de estudio menos de un 5% de error. 7 de los 16 casos de estudio tienen un error inferior al 21%. 1 caso tiene un error del 26% y, finalmente, hay un caso en el que presenta un error de casi el 70%. Se trata de un caso de mezcla a alta presión y alta temperatura, de dos componentes apolares, donde ninguno de ellos es helio, hidrógeno o deuterio, orgánicos ambos, donde los otros tres métodos también presentan errores considerables. Para este caso concreto, es el método que peor predice. El mejor cálculo de viscosidad de Dean-Stiel es el del ejemplo N<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>. Se trata de una mezcla a baja presión, de componentes apolares, donde ninguno de ellos es hidrógeno, helio o deuterio, ambos inorgánicos. Vemos dos diferencias entre el mejor y el peor caso de aplicación: el que peor calcula, es a alta presión y con componente orgánicos y el que mejor es a baja presión y con componentes inorgánicos. El segundo caso que mejor predice Dean-Stiel es el CH<sub>4</sub>-N<sub>2</sub> a 321.9 K y 1379 bar que es a alta presión, con componentes apolares, sin H<sub>2</sub>, He ni D<sub>2</sub>, y tienen un componente orgánico y otro inorgánico. El segundo que peor predice es la viscosidad de un solo componente inorgánico a alta presión. En principio, de aquí no podemos sacar conclusiones claras. Destacable es que el error del Dean-Stiel es negativo en 13 de los 16 casos, lo que indica que la viscosidad que predice está por debajo de la experimental.

Respecto al método de Chung, vemos 1 caso en el que el error está muchos órdenes de magnitud por encima de los de la viscosidad experimental. Se trata de un caso a alta presión, con componentes apolares, sin H<sub>2</sub>, He o D<sub>2</sub> y con un componente orgánico y otro inorgánico. Existen otros ejemplos de similares características pero con órdenes de magnitud razonables. Los cinco casos que mejor calcula son a baja presión y en todos ellos es el método que mejor calcula.

Los ejemplos que peor calcula el método de Lucas son los de alta presión, aunque en general, el error en alta presión apenas supera el 16%, con dos excepciones: caso CH<sub>4</sub>-C<sub>10</sub>H<sub>22</sub> (alta presión, no polar-no polar, sin H<sub>2</sub>, He o D<sub>2</sub>, orgánico-orgánico) y caso CH<sub>4</sub>-CO<sub>2</sub> a 310.8 K y 1724 bar (alta presión, no polar-no polar, sin H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>, ni He, no orgánico – orgánico) con errores casi del 60% y casi del 35% respectivamente. El caso que mejor calcula es el N<sub>2</sub>-CO<sub>2</sub>: baja presión, no polar-no polar, sin H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub> o He, No orgánico –No orgánico).

Finalmente, cabe destacar que el ejemplo CH<sub>4</sub>-C<sub>10</sub>H<sub>22</sub>, único formado por dos componentes orgánicos, es uno de los peor calculados por los tres métodos. Además, los tres errores son negativos.

El único ejemplo que tiene al menos uno de los tres componentes mencionados en el método de Lucas (H<sub>2</sub>, He y D<sub>2</sub>) obtiene mejores resultados precisamente por el método de Lucas, siendo el error de aproximadamente el doble si se calcula por Chung y de más del triple si se calcula por Dean-Stiel.



Tabla 3.2. Resumen de los resultados de las simulaciones para los distintos casos en estudio.

Sistema	Polaridad	Temp. [K]	Presión [bar]	Compos. [frac.mol.]	Visc. Exper. [uP]	Lucas et al.		Chung et al.		Huber (TRAPP)		Dean-Stiel	
						Viscosidad	Error	Viscosidad	Error	Viscosidad	Error	Viscosidad	Error
						[uP]	[%]	[uP]	[%]	[uP]	[%]	[uP]	[%]
SO2	polar	573,0	1	1	246	250	1,8	246	0,0			242	-1,8
NH3	polar	420,0	300	1	571	603	5,6	297	-48,0	395	-30,9	418	-26,7
NH3	polar	520,0	600	1	466	495	6,3	449	-3,7	626	34,3	385	-17,3
N2-CO2	apolar/apolar	293,2	1	0,69/0,31	168	169	0,5	169	0,3			167	-0,5
N2-H2	apolar/apolar	373,0	1	0,51/0,49	190	186	-2,0	169	-11,0			201	5,6
NH3-H2	polar/apolar	306,0	1	0,68/0,32	120	116	-3,1	129	7,2			107	-11,0
NH3-CO2	polar/apolar	293,2	1	0,56/0,44	138	128	-7,4	130	-6,1			135	-2,7
SH2-(C2H5)2O	polar/polar	331,0	1	0,20/0,80	87	89	2,1	88	0,9			91	4,1
H2O-CH3OH	polar/polar	373,2	1	0,63/0,37	127	123	-3,0	129	1,7			123	-2,9
CH4-N2	apolar/apolar	321,9	345	0,9/0,1	237	257	8,3	268	13,2	209	-11,8	256	8,2
CH4-CO2	apolar/apolar	310,8	345	0,9/0,1	331	299	-9,7	254	-23,1	231	-30,2	298	-10,0
CH4-C10H22	apolar/apolar	377,6	414	0,80/0,20	1260	556	-55,9	644	-48,9	827	-34,3	387	-69,3
CH4-N2	apolar/apolar	321,9	1379	0,9/0,1	722	611	-15,5	552	-23,6	606	-16,2	717	-0,7
CH4-N2	apolar/apolar	383,0	1379	0,9/0,1	621	537	-13,6	469	-24,5	504	-18,8	599	-3,5
CH4-CO2	apolar/apolar	310,8	1724	0,9/0,1	1214	792	-34,7	822	-32,2	846	-30,3	966	-20,4
CH4-CO2	apolar/apolar	455,2	1724	0,9/0,1	722	601	-16,7	NA	NA	NA	NA	662	-8,2
						Error medio =	-8,6		-13,2		-17,3		-9,8
						Desv. Estandar =	17,0		19,7		22,4		19,0
						Error maximo =	-55,9		-48,9		-34,3		-69,3



### 3.3.3 Análisis.

El análisis de los diversos métodos se ha llevado a cabo comparando los resultados de la viscosidad experimental con los obtenidos por los diversos modelos. Estos resultados pueden verse en la Tabla 3.2 donde además del valor predicho por el modelo se muestra el error relativo porcentual definido como:

$$\text{Error}(\%) = \frac{\eta_{\text{mod}} - \eta_{\text{exp}}}{\eta_{\text{exp}}} \times 100$$

Hay que tener en cuenta que el método de Huber solo es aplicable para los sistemas a alta presión ya que para su aplicación requiere un dato de la viscosidad a baja presión. Por ello los datos ausentes en este método corresponden a los valores a baja presión.

Los mismos resultados se ilustran gráficamente en la Figura 3.5 donde se representa lado la viscosidad experimental frente a la del modelo. En esta gráfica los mejores modelos son aquellos que presentan el mayor número de datos en la diagonal o sus proximidades. Igualmente en la Figura 3.6 se representa el error relativo porcentual frente a la viscosidad experimental. En esta gráfica los mejores modelos son los que concentran los puntos alrededor de la línea del cero. Por último en la Figura 3.7 se muestra los histogramas con las distribuciones de los errores donde se puede apreciar la dispersión de los mismos.

En una aproximación global se observan resultados razonables entre los modelos y los resultados experimentales para todos los modelos. Una primera observación es que para todos los modelos el error relativo medio es negativo lo cual indica que todos los modelos predicen, como promedio, por debajo del valor experimental. Por otro lado, si se compara el error relativo medio global de todos los datos (incluyendo datos a alta y baja presión y sistemas con mezclas apolares y mezclas polar-apolar) el mejor modelo parece ser el modelo de Lucas, con un error relativo medio del -8.6%, seguido de cerca por el método de Dean-Stiel usado por CHEMCAD con un -9.8%. Aunque con pequeñas diferencias, los métodos de Chung (-13.2%) y de Huber (-17.3%) parecen ser algo menos precisos. Si miramos a las Figuras 3.6 y a los histogramas 3.7 para los métodos de Lucas y de Dean-Stiel un 75% de los casos caen en la banda de  $\pm 10\%$  del error mientras que para el método de Chung el valor es inferior (56.25%). Para el método de Huber ningún dato cae en esta banda.

Cuando se diseccionan los datos en función de la presión se observan conclusiones adicionales. Por ejemplo a baja presión, todos los métodos presentan predicciones muy aceptables con errores medios relativos inferiores al 5% en todos los casos, siendo el método de Chung el mejor (0.7%), seguido del método de Lucas (-1.5%) y de Dean-Stiel (-2.5%). A alta presión, en todos los métodos el error crece con errores relativos medios alrededor del 15%. En este caso el método de Chung pasa a ser el peor (-23.9% de error relativo medio solo con los datos a alta presión). Los métodos de Lucas, Dean-Stiel y Huber presentan errores similares siendo el menor el del método de Lucas (-14% solo para los datos a alta presión).

En la base de datos existen cuatro datos correspondientes condiciones supercríticas (muy alta presión). Para estas condiciones el método de Dien-Stiel utilizado por CHEMCAD es el que presenta un menor error relativo (-8.2%) con una diferencia significativa de casi un 10% con los otros métodos (-20.1% para el método de Lucas, -21.8% para el método de Huber y -26.8% para el método de Chung).



Desde el punto de vista de la aplicación práctica, el método de Lucas es muy atractivo porque solo requiere de las propiedades críticas de los componentes y puede aplicarse en todo el rango de presiones y composiciones, siendo susceptible de aplicarse en software comercial. Los métodos de Chung, Huber y Dean-Stiel necesitan de un valor de la densidad que debe obtenerse mediante una ecuación de estado (como Soave-Redlich-Kwong) o bien proporcionarse directamente si está disponible. Por otro lado, los métodos de Huber y Dean-Stiel se aplican a partir de un dato de viscosidad a baja presión que ha de obtenerse mediante algún otro método.

Por todo lo anterior, combinando el análisis del desempeño de los modelos con su facilidad de implementación, el método de Lucas parece ser el método más recomendable para su uso en software comercial. Sólo en condiciones próximas a las condiciones críticas y supercríticas se recomienda el método de Dean-Stiel.

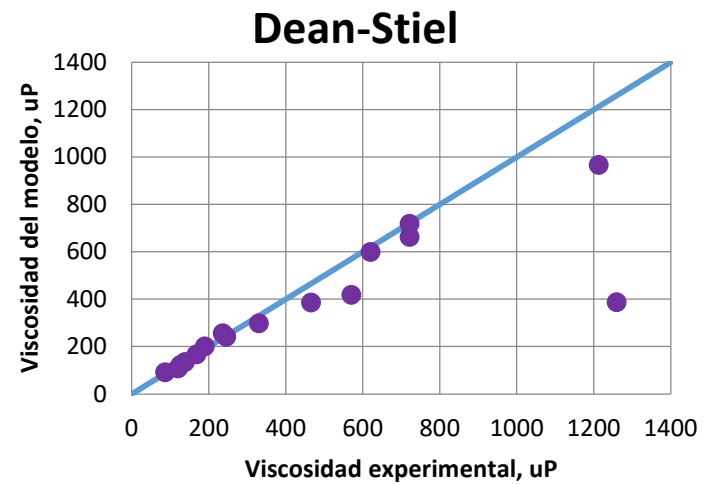
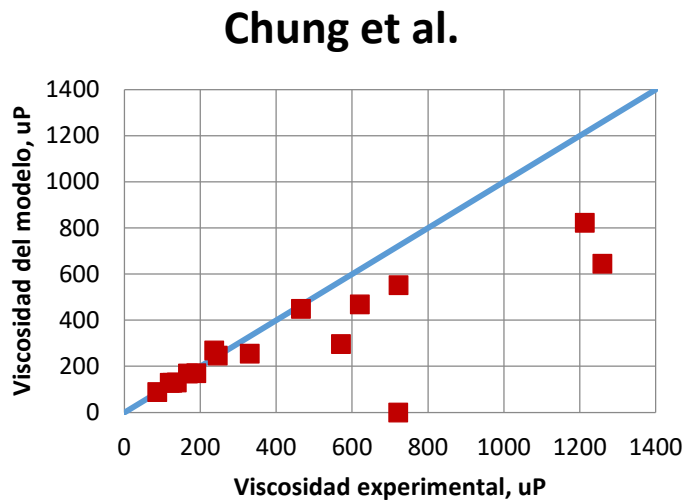
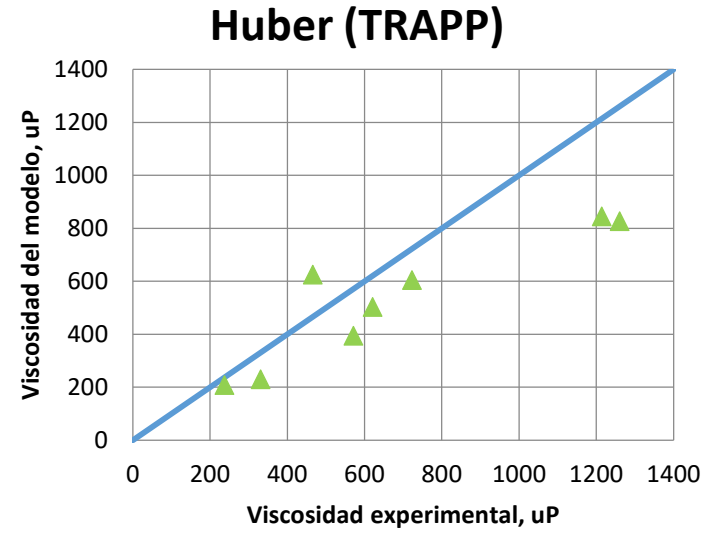
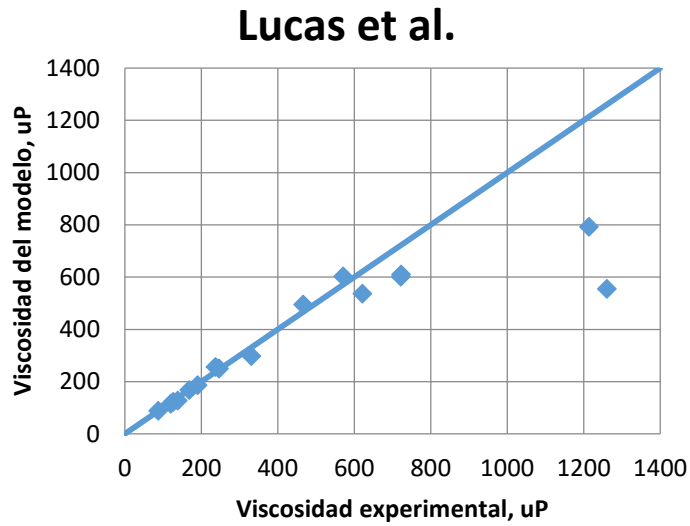
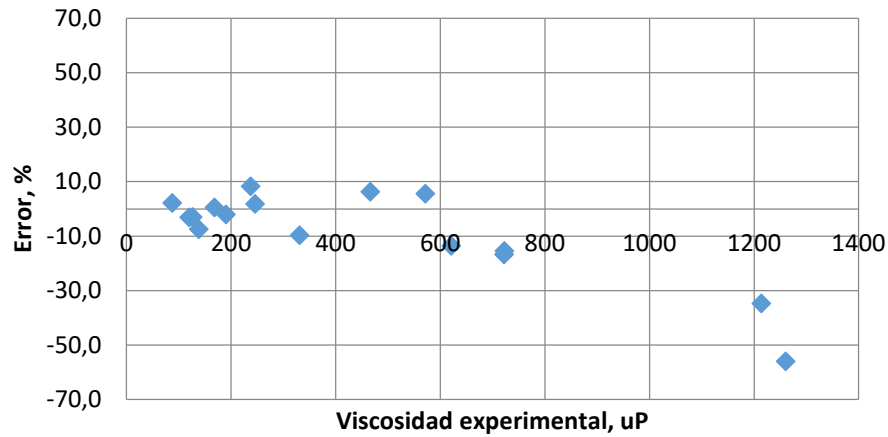


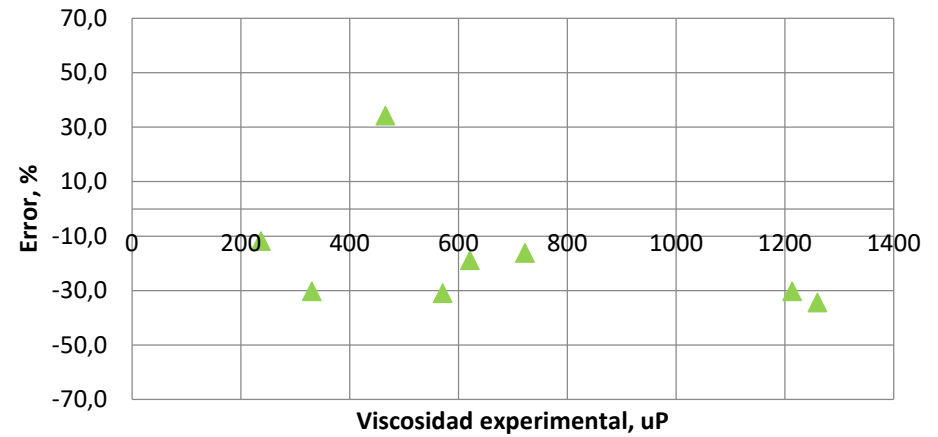
Figura 3.5. Comparación de viscosidad experimental frente a la predicha por los diferentes modelos.



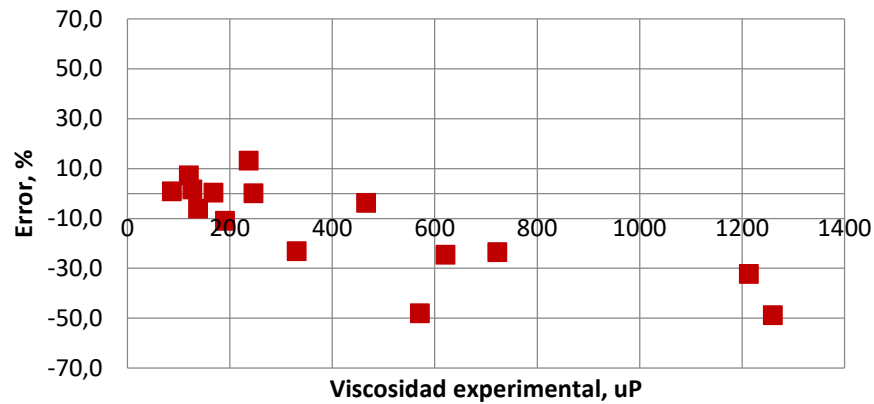
**Lucas et al.**



**Huber (TRAPP)**



**Chung et al.**



**Dean-Stiel**

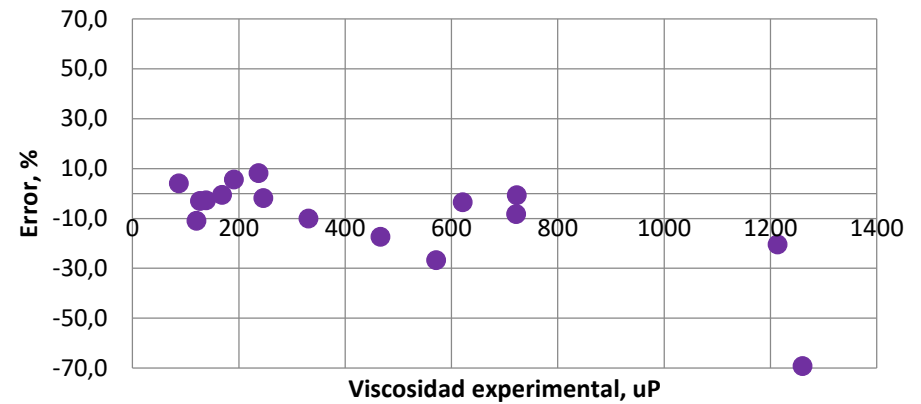


Figura 3.6. Comparación de los errores relativos de los distintos modelos empleados

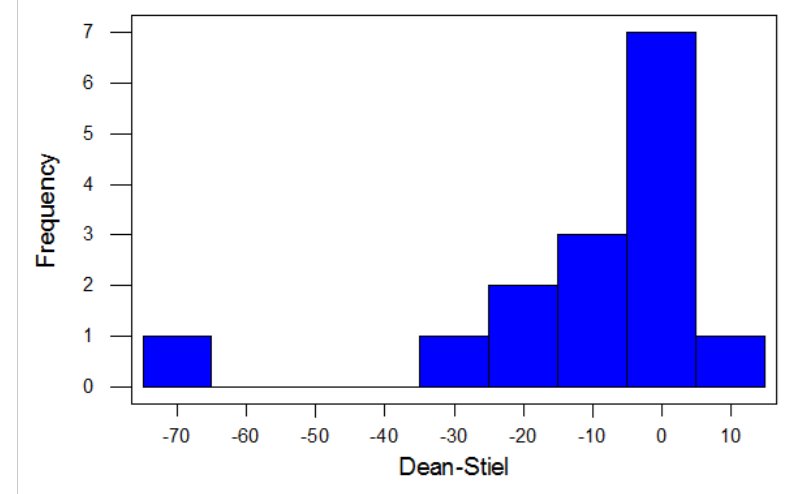
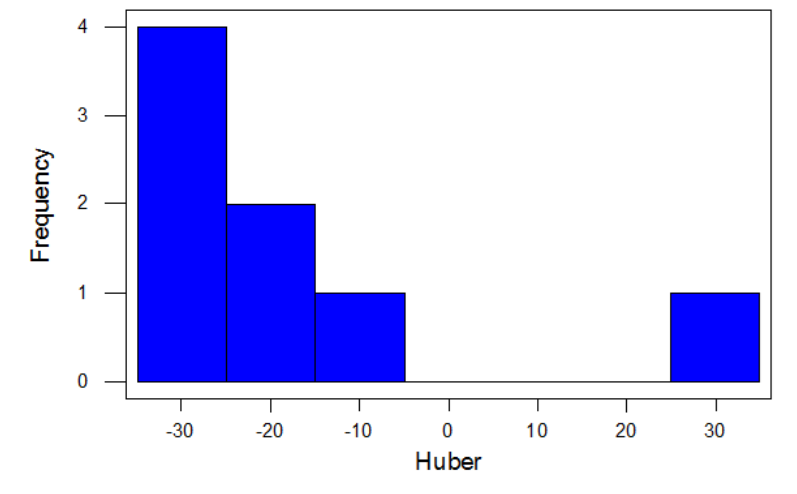
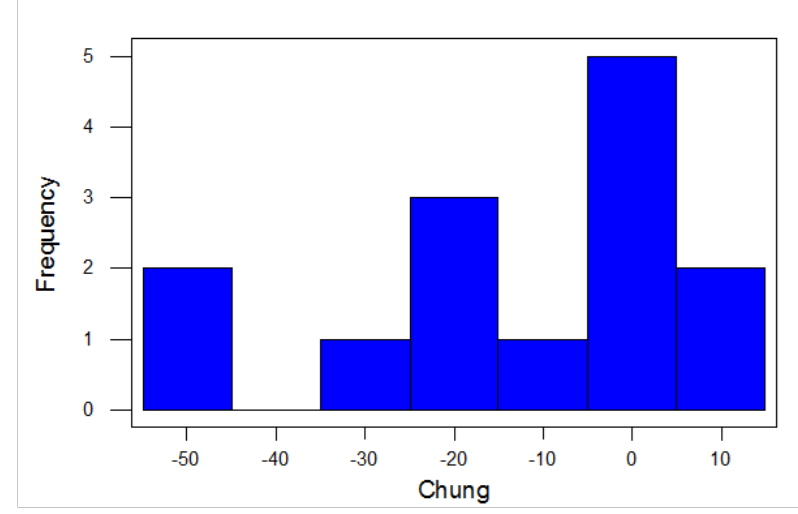
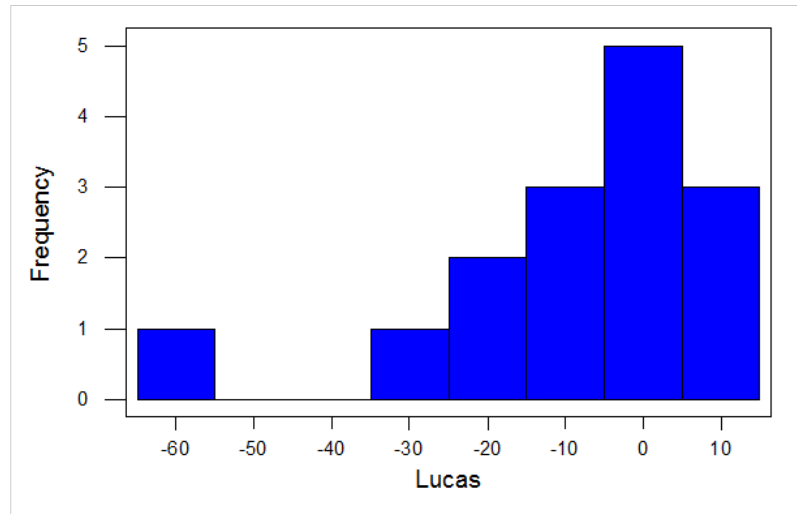


Figura 3.7. Histogramas con la distribución de los errores para los distintos modelos.







## 4 Aplicación de los códigos Matlab al diseño de condensadores.





#### 4.1 Diseño de condensadores para mezclas con gases incondensables.

La principal diferencia en el análisis de un condensador respecto de un intercambiador de calor sin cambio de fase es que debido a la variación en la composición del vapor que se produce durante el proceso, se originan severas variaciones no lineales tanto en los coeficientes de transmisión de calor como en la diferencia de temperatura ( $\Delta T$ ). Por tanto, en un condensador la integración numérica de la ecuación de diseño [Ec.2] resulta ser el único procedimiento aceptable para el diseño final.

$$A = \int_0^{Q_T} \frac{dQ}{U\Delta T} \quad [\text{Ec. 4.1}]$$

El coeficiente global de transmisión de calor  $U$  varía mucho durante la condensación de un vapor en un gas no condensable debido a que el potencial para la difusión varía notablemente a medida que el vapor es eliminado del seno del gas. A la entrada del condensador la corriente contiene una alta proporción de vapor con coeficientes parecidos a los de condensación pura pero conforme la condensación empieza a ser apreciable el gas se enriquece en incondensables cuyos coeficientes de película son inferiores. Con frecuencia puede observarse una disminución en el coeficiente  $U$  entre la entrada y salida que en algunos casos puede llegar a ser de 100 veces.

Otra dificultad adicional en el diseño de los condensadores es el reconocimiento del mecanismo de condensación correcto en cada tipo de condensador. La práctica habitual de aplicar la correlación de Nusselt independientemente del mecanismo de condensación o de la orientación del condensador ha prevalecido durante mucho tiempo debido a que con frecuencia el resultado es un condensador sobredimensionado que funciona bien. Además, debido a que los coeficientes de transmisión de calor en condensación son muy bajos, la estimación precisa del consumo de fluido refrigerante tiene un impacto muy significativo sobre los consumos energéticos del proceso. Por todas estas razones, está justificado dedicar un tiempo adecuado a la aplicación de los métodos de cálculo más apropiados que permitan la predicción del correcto funcionamiento del condensador.

##### 4.1.1 Método de Colburn-Chilton (1934).

Muchos autores han contribuido al desarrollo de la teoría de transferencia simultánea de materia y energía pero la esencia de la misma fue desarrollada entre 1933 y 1934 por Colburn, Chilton y Hougen. Su aplicación al diseño riguroso de condensadores se encuentra en los trabajos originales de Colburn (1934) y Colburn y Hougen, (1930). Según este modelo además de las tres resistencias a la transmisión de calor que normalmente se tienen en cuenta en el cálculo del coeficiente global  $U$  se añade una cuarta resistencia en la frontera de la interfase entre la película de condensado y el gas. En esta frontera tienen lugar dos fenómenos (Figura 4.1):

- La difusión de moléculas condensantes desde el seno de la fase gas hacia la interfase debido al gradiente de concentración existente entre ambas fases.
- El enfriamiento de la fase gas a la temperatura de la interfase debido a que las moléculas que condensan toman calor latente de condensación del gas.

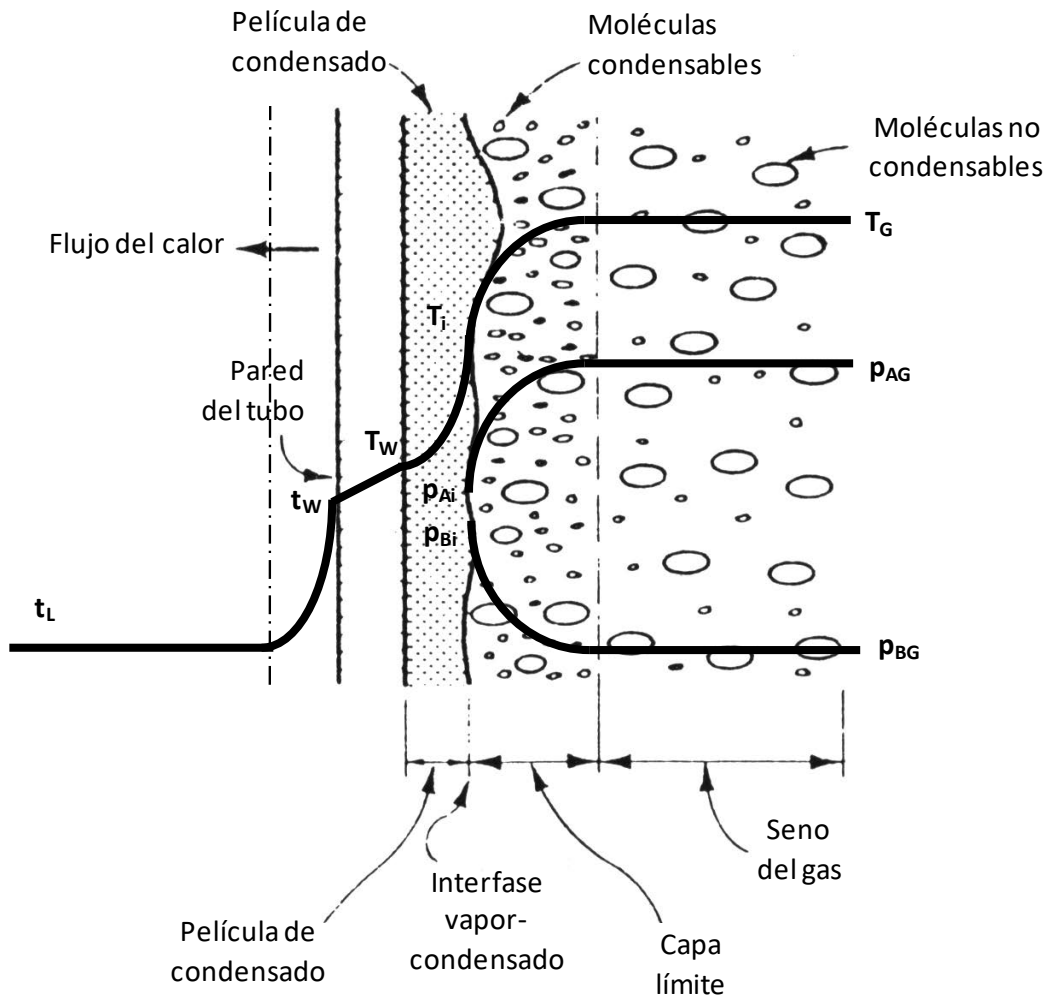


Figura 4.1. Condensación de un vapor multicomponente

Como ambos procesos ocurren simultáneamente (en paralelo), el flujo térmico puede expresarse como la suma del flujo debido al calor sensible para la fase vapor (proporcional al coeficiente cinético  $h_{sG}$ ), y del flujo debido al calor latente de la materia condensante (proporcional al coeficiente cinético  $k_{AG}$ ). A su vez, estos procesos se encuentran en serie con el flujo a través de la película de condensado (dado por un coeficiente cinético  $h_{cf}$ ), por lo que en estado estacionario:

$$dQ = \left( \begin{array}{c} \text{calor sensible} \\ \text{vapor} \rightarrow \text{condensado} \end{array} \right) + \left( \begin{array}{c} \text{calor latente} \\ \text{vapor} \rightarrow \text{condensado} \end{array} \right) = \left( \begin{array}{c} \text{calor transferido} \\ \text{condensado} \rightarrow \text{pared} \end{array} \right) \quad [\text{Ec. 4.2.}]$$

$$dQ = h_{sG}(T_G - T_i) + \lambda_A^{\text{vap}} k_{AG}(p_{AG} - p_{Ai}) = h_{cf}(T_i - T_w) \quad [\text{Ec. 4.3}]$$



El método de Colburn-Hougen involucra pues la resolución de [Ec.2] mediante incrementos:

$$A = \int_0^{Q_T} \frac{dQ}{U\Delta T} \approx \sum_{k=1}^n \frac{dQ_k}{(U\Delta T)_k} \quad [\text{Ec. 4.4}]$$

en cada uno de los cuales ha de determinarse el valor del coeficiente  $U$  a partir de los coeficientes de película evaluados en las condiciones de cada intervalo. Este es un cálculo iterativo ya que la estimación de los coeficientes de película requiere la el conocimiento de la temperatura en la interfase  $T_i$ , para lo cual se requiere la estimación de  $k_{AG}$ ,  $\lambda_A^{sat}$  y  $p_{Ai}$  los cuales a su vez son función de  $T_i$ . Como valor de partida para la iteración puede suponerse  $T_i = T_G$  lo cual implica suponer que no hay gradiente térmico entre el seno del gas y la superficie del condensado.

La selección del número de intervalos de temperatura es importante ya que afecta a la precisión del resultado final. Según Ludwig (1999) un número de intervalos entre 5-10 suele ser aceptable, siendo 10 el número de intervalos por defecto en varios simuladores comerciales. Otro aspecto a tener en cuenta es si los intervalos son equiespaciados o de diferente achura. Esto depende de la forma de la curva de condensación debiendo ser los incrementos más pequeños en la zona del condensador donde la pendiente de la curva de condensación es mayor.

El método de Colburn-Hougen es considerado el método más preciso de todas las alternativas publicadas hasta la fecha. Sin embargo, la necesidad de estimar la temperatura y composición en la interfase en cada incremento hace que sea demasiado largo y tedioso para cálculos manuales por lo que se reserva para cálculos por ordenador.

#### 4.1.2 Método de Silver-Bell-Ghaly (SBG) (1973).

Como alternativa al método de Colburn-Hougen han propuesto diferentes métodos aproximados que, aunque simplificados, contiene los elementos físicos más importantes del problema y son fáciles de adaptar a las geometrías específicas de condensación de cada caso. Entre ellos se encuentran los métodos gráficos de Bras (1954), Hulden (1957) y Mueller (1971) o el método analítico de Silver-Bell-Ghaly -Silver (1947) y Bell y Ghaly (1973)-. Estos métodos tienen precisiones que van del 1-10% cuando se comparan con el método de Colburn-Hougen. En lo que sigue nos centraremos en el método de Silver-Bell-Ghaly (SBG) por ser uno de los que más se mencionan en varios de los simuladores comerciales actuales.

El método SBG se ha utilizado exitosamente en la condensación de mezclas miscibles y mezclas de vapores con gases incondensables. Thome (2016), indica que el método es fiable para mezclas con pequeños a medianos rangos de condensación (menores de 30 K) aunque más recientes resultados sugieren que el límite superior de este método es para rangos de 10-15 K. Excelentes revisiones del método SBG pueden encontrarse en Taborek (1983).

El método original de SBG se basa en las siguientes hipótesis:

1. El vapor que condensa sigue la curva de condensación de equilibrio ( $T_G = T_{eq}$ ). Esta condición se cumple siempre que el número de Lewis ( $Le = Sc/Pr$ ) sea próximo a la unidad.
2. Todo el calor liberado, incluyendo el de la fase líquida pasa de la interfase al fluido refrigerante.
3. La transferencia de materia no tiene efecto sobre el coeficiente de transmisión de calor.
4. El vapor ocupa el total de la sección transversal del tubo al determinar el coeficiente de transmisión de calor.

El método supone la definición de un coeficiente de transmisión de calor efectivo calculado mediante:

$$\frac{1}{U_{\text{eff}}} = \frac{1}{h_{\text{Cf}}} + \frac{Z_G}{h_{\text{sG}}} \quad [\text{Ec. 4.5.}]$$

donde  $h_{\text{Cf}}$  es el coeficiente de transmisión de calor en la película de condensado y  $h_{\text{sG}}$  es el coeficiente de transmisión de calor para la fase vapor incluyendo los efectos de transferencia de materia.

El coeficiente  $h_{\text{Cf}}$  se determina con correlaciones de condensación para fluidos puros. No es el objeto de este tema hacer un tratado de todas las geometrías de condensación posibles. Nos centraremos en la condensación llevada a cabo en el interior de tubos verticales ya que es la configuración más frecuente. Este modo de condensación se usa cuando el fluido refrigerante es suficientemente limpio para colocarlo en el lado de la carcasa donde la limpieza es más difícil o cuando el fluido de proceso está a alta presión o es corrosivo de manera que al situarlo en los tubos se requiere menor cantidad de materiales costosos.

Al orientarse verticalmente, la película de condensado fluye bajo la influencia de la fuerza gravitatoria y las fuerzas de corte del vapor actuando ambas en la misma dirección y sentido. El condensado fluye como una película anular más o menos uniforme y paralela al eje del tubo (Figura 4.2). En este caso, el coeficiente  $h_{\text{Cf}}$  depende a su vez del régimen de flujo. Para bajos caudales de vapor, la fuerza gravitacional controla sobre las fuerzas de corte mientras que para altos caudales controlan las fuerzas de corte. Según la literatura consultada las fronteras entre ambos regímenes se determinan mediante el parámetro:

$$C_{\text{gt}} = \frac{1}{G} \left[ g D_i (\rho_L - \rho_G) \left( \frac{1-y}{y} \right) \right]^{0.5} \quad [\text{Ec. 4.6}]$$

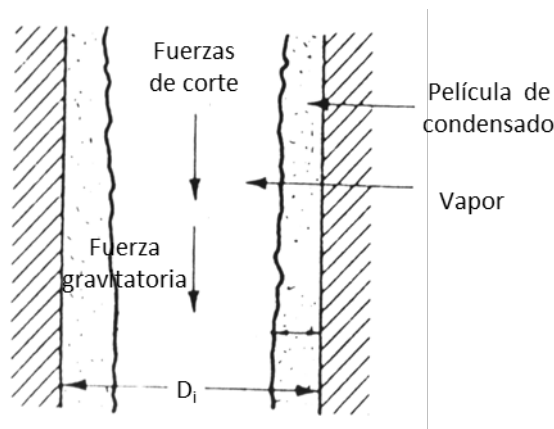


Figura 4.2. Fuerzas actuando en la condensación en el interior de tubos verticales

Si  $C_{\text{gt}} < 0.3$  se encuentra en régimen de fuerza de corte, mientras que si  $C_{\text{gt}} > 0.7$  el sistema se encuentra en régimen de fuerza gravitacional. Para valores intermedios se prorratean los valores de cada régimen.



Las ecuaciones para cada régimen y subrégimen así como las formas de determinar los regímenes de transición se resumen en la Tabla 1.

Tabla 4.1. Correlaciones para la determinación del coeficiente de Transmisión de calor en la película de condensado ( $h_{cf}$ )

RÉGIMEN	CORRELACIÓN	ECUACIÓN
Gravitatorio ( $C_{gt} > 0.7$ ) y Laminar ( $Re_G < 1000$ )	$h_{cf} = 1.1Ck_L \left[ \frac{\rho_L(\rho_L - \rho_G)g}{\mu_L^2} \right]^{1/3} Re_G^{-1/3}$	[Ec. 4.7a]
Gravitatorio ( $C_{gt} > 0.7$ ) y Turbulento ( $Re_G < 1000$ )	$h_{cf} = k_L \left[ \frac{\rho_L(\rho_L - \rho_G)g}{\mu_L^2} \right]^{1/3} (0.024Re_G^{1/4} Pr_L^{1/3})$	[Ec. 4.7b]
Gravitatorio ( $C_{gt} > 0.7$ ) y Transición ( $1000 < Re_G < 2500$ )	$h_{cf} = \left( \frac{h_{cf,T} - h_{cf,L}}{1500} \right) Re_G + h_{cf,T} - 2500 \left( \frac{h_{cf,T} - h_{cf,L}}{1500} \right)$	[Ec. 4.7c]
Fuerzas de corte ( $C_{gt} < 0.3$ )	$h_{cf} = 0.022F_{tp} \left( \frac{k_L}{D_i} \right) Re_G^{0.8} Pr_L^{0.4} \left( \frac{\mu_L}{\mu_w} \right)^{0.14}$	[Ec. 4.7d]
Intermedio ( $0.3 < C_{gt} < 0.7$ )	$h_{cf} = \eta_C h_{cf,G} + (1 - \eta_C) h_{cf,C}$ $\eta_C = 2.5C_{gt} - 0.75$	[Ec. 4.7e]

$h_{cf,L}$  = coeficiente régimen gravitatorio-laminar;  $h_{cf,T}$  = coeficiente régimen gravitatorio-turbulento;  $h_{cf,G}$  = coeficiente régimen de fuerza gravitatoria (cualquier subrégimen);  $h_{cf,C}$  = coeficiente régimen de fuerzas de corte.

$C = 1.0$  (para  $Re_G < 40$ ),  $C = 1.5$  (para  $Re_G > 200$ ),  $C = 0.875 + 0.00313Re_G$  (para  $40 < Re_G < 200$ )

Para el cálculo de  $F_{tp}$ , en la expresión 7d, se usan las siguientes expresiones:

$$F_{tp} = \left[ 1 + \frac{C_{sh}}{\chi} + \frac{1}{\chi^2} \right]^{0.5}$$

Donde:

$$C_{sh} = 2.75 \left[ 1 + \frac{2}{\chi^{0.5}} \right]^{0.5} \left[ 1 - \frac{\rho_G}{\rho_L} \right]^{1.5}$$

y el parámetro  $\chi$  es el parámetro de Lockart-Martinelli definido como:

$$\chi = \left( \frac{1-y}{y} \right)^{0.9} \left( \frac{\rho_G}{\rho_L} \right)^{0.5} \left( \frac{\mu_L}{\mu_G} \right)^{0.1}$$



Igualmente, en la ecuación 5 el coeficiente  $h_{sG}$  se determina localmente como si la fase vapor estuviera fluyendo en solitario en el tubo. Para flujo turbulento ( $Re_G > 10000$ ) puede utilizarse la conocida correlación de Sieder-Tate (1936):

$$h_{sG} = 0.023 \left( \frac{k_G}{D_i} \right) Re_G^{0.8} Pr_G^{0.4} \left( \frac{\mu_G}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad [\text{Ec. 4.8}]$$

$$Re_G = \frac{D_i G_T y}{\mu_G} \quad [\text{Ec. 4.9}]$$

Si  $Re_G < 2000$  (flujo laminar) pueden utilizarse otras correlaciones específicas para flujo laminar que se encuentran en textos clásicos de transmisión de calor. Téngase en cuenta que ciertos condensadores como los condensadores de reflujo pueden operar en este régimen. El término  $(\mu_G/\mu_w)$  supone estimar la viscosidad del gas en las condiciones de la temperatura de la pared ( $T_w$ ). Esto requiere un cálculo iterativo que no está justificado para cálculos manuales excepto que las diferencias de temperatura entre el vapor y la pared sean extremas ( $> 50^\circ\text{C}$ ). En la mayoría de los casos, el término  $(\mu_G/\mu_w)$  puede considerarse igual a uno.

En el método SBG el parámetro  $Z_G$  se define como el cociente entre el calor sensible y el calor total:

$$Z_G = \frac{Q_{sG}}{Q_T} \quad [\text{Ec. 4.10.}]$$

Existen diversas variantes del método SBG que básicamente difieren en la forma de obtener el parámetro  $Z_G$ . En una de ellas:

$$Z_G = \frac{1}{1 + \phi_D} \quad [\text{Ec. 4.11.}]$$

donde  $\phi_D$  es el llamado factor de difusión o cociente entre el calor latente y el calor sensible:

$$\phi_D = \frac{\lambda_A^{\text{vap}} k_{AG} (p_{AG} - p_{Ai})}{h_{sG} (T_G - T_i)} \quad [\text{Ec. 4.12}]$$

Según el HTRI, el cálculo de  $\phi_D$  depende nuevamente de la orientación del condensador (horizontal vs. vertical) y del régimen de flujo (fuerzas de corte vs. fuerza gravitacional) existente en cada caso (Tabla 2):





Tabla 4.2. Valores del factor de difusión

Condensación en el interior de tubos horizontales:		
Control de fuerzas de corte	$\phi_d = 1.2\phi_{d0}$	[Ec. 4.13a]
Control de fuerza gravitacional	$\phi_d = 0.85\phi_{d0}^{0.7}$	[Ec. 4.13b]
Condensación en el interior de tubos verticales:		
Control de fuerzas de corte	$\phi_d = 1.2\phi_{d0}$	[Ec. 4.13c]
Control de fuerza gravitacional	$\phi_d = 0.9\phi_{d0}^{0.9}$	[Ec. 4.13d]

donde:

$$\phi_{d0} = \frac{\lambda_A^{\text{vap}}}{yCp_G} \left( \frac{\Delta y}{\Delta T_G} \right) + \frac{Cp_L}{Cp_G} \left( \frac{1-y}{y} \right) \quad [\text{Ec. 4.14}]$$

siendo el término  $\Delta y/\Delta T_G$  es la pendiente de la curva de la fracción de vapor en función de la temperatura del gas en el intervalo de integración de la ecuación 2 que está siendo calculado.

De acuerdo con Silver (1947), cuando la curva de condensación es prácticamente lineal o ligeramente convexa y/o las propiedades no cambian demasiado desde la entrada a la salida:

$$Z_G = \frac{\overline{Cp_G} [W_{in} + 0.5(W_{in} - W_{out})](T_{in} - T_{out})}{Q_T} \quad [\text{Ec. 4.15}]$$

con la capacidad calorífica del gas  $Cp_G$  evaluada en las condiciones medias entrada-salida y  $Q_T$  es la carga térmica total del condensador. Usando  $Z_G$  calculado de esta manera puede obviarse el cálculo de la integral de la ecuación 2 y aproximarla por la expresión algebraica:

$$A = \int_0^{Q_T} \frac{dQ}{U\Delta T} \approx \frac{Q_T}{U_{\text{eff}} \text{LMTD}} = \left[ \frac{1}{h_{cf}} + \frac{Z_G}{h_{sg}} \right] \frac{Q_T}{\text{LMTD}} \quad [\text{Ec. 4.16}]$$

El método SBG no deja de ser un método aproximado. Por ello si el sistema no cumple la hipótesis 1 y se dan desviaciones respecto de la temperatura de equilibrio resultan en errores en la predicción de la temperatura del gas. Si el calor se extrae más rápido que en el equilibrio conduce a temperaturas de vapor inferiores que a la temperatura de equilibrio siendo el vapor subenfriado o saturado. Si el calor se extrae más lentamente que en el equilibrio la temperatura del vapor es mayor que el del equilibrio siendo un vapor sobrecalentado.

El algoritmo para la aplicación del método SBG se ilustra en la Figura 4.3. Los cálculos pueden sistematizarse en una hoja de cálculo tal y como se muestra en la Tabla 4.3.



#### 4.1.3 Ejemplo: Área del condensador de una planta de metanol.

El reactor de síntesis del metanol produce una mezcla de CO, H<sub>2</sub> y metanol a presiones de 50-100 bar. Esta mezcla gaseosa pasa por un condensador en la cual se enfría la mezcla por debajo de su temperatura de condensación separándolo del resto de gases incondensables los cuales se recirculan a la entrada del reactor. El condensador es un equipo crítico en las plantas de metanol existiendo unidades de hasta 1500 m<sup>2</sup> de superficie de intercambio.

En este ejemplo se desea estimar el área de intercambio de calor requerida con y sin la corrección de presión en la estimación de la viscosidad del proceso. La corriente a condensar tiene un caudal másico de 10000 kg/h y está formada por un 20% de CO, 40% de hidrógeno, 35% de agua y 5% de metanol (todos porcentajes molares) que se encuentra a 300°C y 80 atm de presión usando como refrigerante agua de refrigeración que se introduce a 20°C y se devuelve a la torre de refrigeración a 40°C. El condensador tiene una carga térmica de 4.778 MW y consume 205000 kg/h de agua de refrigeración. Se considerará que el condensador tiene 323 tubos y cada uno de ellos un diámetro de 0.0191m. Los datos de la curva de calor son:

Param.	Unidades	Zona										
		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
ΔH	MW	0,000	0,531	0,589	1,058	1,589	2,119	2,650	3,167	3,694	4,250	4,778
y	fracc.molar	1,000	1,000	1,000	0,931	0,858	0,792	0,732	0,681	0,641	0,614	0,603
TG	°C	300,0	230,4	223,4	216,0	205,9	193,3	177,5	157,2	130,7	95,7	50,0
VAPOR	kg/h	10000	10000	10000	9114	8169	7289	6484	5765	5159	4726	4522
CO	fracc.molar	0,200	0,200	0,200	0,215	0,233	0,253	0,273	0,294	0,312	0,326	0,332
H2	fracc.molar	0,400	0,400	0,400	0,429	0,466	0,505	0,546	0,587	0,624	0,651	0,664
Agua	fracc.molar	0,350	0,350	0,350	0,304	0,249	0,191	0,133	0,080	0,038	0,012	0,018
Metanol	fracc.molar	0,050	0,050	0,050	0,052	0,052	0,052	0,048	0,040	0,026	0,012	0,002
LIQUIDO	kg/h	0.000	0.000	0.000	886	1831	2711	3516	4235	4841	5274	5478
CO	fracc.molar	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
H2	fracc.molar	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Agua	fracc.molar	0,000	0,000	0,000	0,969	0,963	0,955	0,943	0,927	0,907	0,888	0,878
Metanol	fracc.molar	0,000	0,000	0,000	0,031	0,036	0,044	0,056	0,072	0,092	0,111	0,122

Las propiedades del condensado son:  $\rho_L = 730.76 \text{ kg/m}^3$ ,  $C_p = 4.67 \text{ kJ/kg}\cdot^\circ\text{C}$ ,  $k_L = 0.264 \text{ W/m}\cdot\text{K}$  y  $\mu_L = 3.018\cdot 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ . Los resultados de las diferentes simulaciones se muestra en la Tabla 4:



Figura 4.3. Flujograma del método de Silver-Bell-Ghaly (SBG).

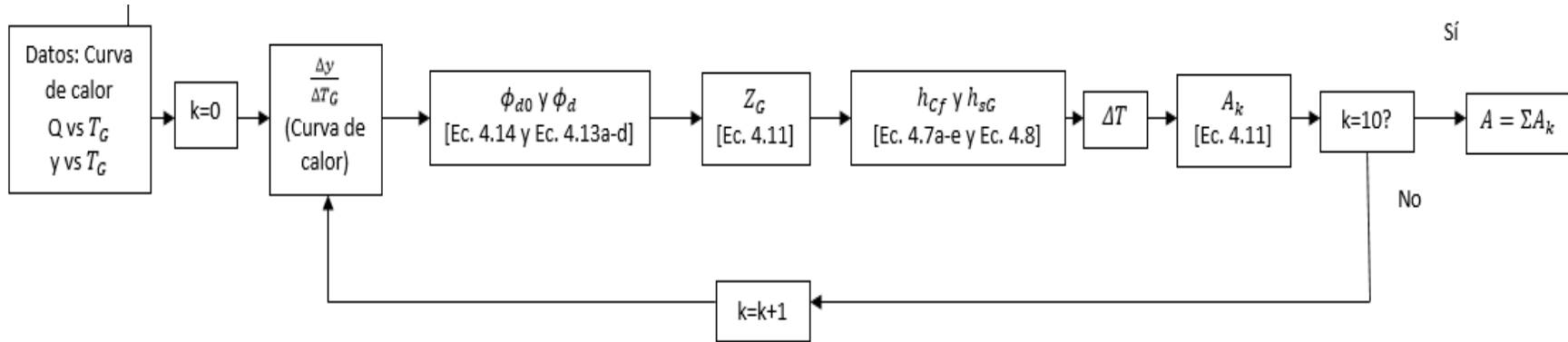


Tabla 4.3. Organización de los cálculos en el método de Silver-Bell-Ghaly.

Zona	$T_G$	Q	y	$\Delta y/\Delta T_G$	$\lambda_A^{vap}$	$\phi_0$	$\phi$	$Z_G$	$h_{cf}$	$h_{sG}$	$A_k$
0	$T_{G1}$	0	0								
1	.	.	.								
2	.	.	.								
3	.	.	.								
4	.	.	.								
5	.	.	.								
6	.	.	.								
7	.	.	.								
8	.	.	.								
9	.	.	.								
10	$T_{G2}$	$Q_T$	1								

←→  
 Datos  
 (curva de calor)

$\Sigma = A$



#### 4.2 Programa Excel.

Se ha desarrollado un programa Excel que permite calcular el área de un condensador:

Zona	T_G (°C)	T_G (K)	Q (W)	y masica	y	$\Delta y/\Delta T_G$	$\lambda_{A^{vap}}$ (J/kg)	Cp_G (J/kg °C)	$\phi_0$	$\phi$	Z_G	$\rho_G$ (kg/m <sup>3</sup> )
0	300,0	573,0	0	1,00	1,00		1712000	2690	0,0	0,0	1,0000	25,3
1	230,4	503,4	531000	1,00	1,00	0,0000	1712000	2690	0,0	0,0	1,0000	29,3
2	223,4	496,4	589000	1,00	1,00	0,0000	1712000	2690	0,0	0,0	1,0000	29,8
3	216,0	489,0	1058000	0,91	0,93	0,0093	1712000	2690	1783,1	2139,7	0,0005	29,2
4	205,9	478,9	1589000	0,82	0,86	0,0072	1712000	2690	1548,9	1858,7	0,0005	28,4
5	193,3	466,3	2119000	0,73	0,79	0,0052	1712000	2690	1279,2	1535,1	0,0007	27,8
6	177,5	450,5	2650000	0,65	0,73	0,0038	1712000	2690	1079,6	1295,6	0,0008	27,2
7	157,2	430,2	3167000	0,58	0,68	0,0025	1712000	2690	866,8	1040,2	0,0010	26,8
8	130,7	403,7	3694000	0,52	0,64	0,0015	1712000	2690	677,6	317,8	0,0031	26,7
9	95,7	368,7	4250000	0,47	0,61	0,0008	1712000	2690	518,5	249,8	0,0040	27,7
10	50,0	323,0	4778000	0,45	0,60	0,0002	1712000	2690	383,1	190,2	0,0052	31,3

$\mu_G$ con error (Pa·s)	$\mu_G$ (Pa·s)	k_G (W/m·°C)	G_mass (Kg/h)	G (kg/(m <sup>2</sup> ·s))	C_gt	Re_g	Pr_G	C	hcf_L	hcf_T	hcf_trans	x	C_sh
2,34E-05	2,34E-05	0,115	10000	30,02	0,00	24499,4	0,55	1,5	572,2	5285,4	74410,9	0,000	
2,10E-05	2,10E-05	0,115	10000	30,02	0,00	27351,5	0,49	1,5	550,5	5422,7	86142,8	0,000	
2,07E-05	2,07E-05	0,115	10000	30,02	0,00	27681,6	0,48	1,5	548,2	5437,7	87521,9	0,000	
2,07E-05	2,07E-05	0,115	9114	27,36	0,11	23049,4	0,48	1,5	582,9	5195,8	68391,4	0,025	9,55
2,06E-05	2,06E-05	0,115	8169	24,52	0,19	18580,3	0,48	1,5	626,5	4925,0	51005,9	0,051	8,13
2,05E-05	2,05E-05	0,115	7289	21,88	0,27	14872,3	0,48	1,5	674,9	4659,7	37526,9	0,077	7,44
2,03E-05	2,03E-05	0,115	6484	19,46	0,36	11861,3	0,48	1,5	728,0	4404,9	27351,7	0,102	7,00
2,01E-05	2,01E-05	0,115	5765	17,30	0,45	9484,0	0,47	1,5	784,5	4166,1	19910,5	0,127	6,69
1,97E-05	1,97E-05	0,115	5159	15,48	0,56	7761,0	0,46	1,5	838,8	3962,6	14919,0	0,149	6,47
1,89E-05	1,89E-05	0,115	4726	14,19	0,64	6785,6	0,44	1,5	876,8	3829,9	12267,2	0,169	6,28
1,75E-05	1,75E-05	0,115	4522	13,57	0,68	6710,3	0,41	1,5	878,5	3812,6	12048,2	0,189	6,09



Ftp	hcf_c	nu_c	hcf_int_L	hcf_int_T	hcf_int_trans	h_Cf	h_sG	ΔT	dQ_k	1/U	A_k	U
		-0,750					353,20			0,00283		353,20
		-0,750					369,11	69,60	531000	0,00271	20,67	369,11
		-0,750					370,89	7,00	58000	0,00270	22,34	370,89
44,34	81454,5	-0,465	119039,1	116895,3	119039,1	81454,5	320,03	7,40	469000	0,00001	0,87	72799,20
23,30	36026,0	-0,274	45731,2	44552,7	45731,2	36026,0	268,98	10,10	531000	0,00003	1,56	33605,68
16,38	21187,0	-0,078	22785,7	22475,1	22785,7	21187,0	224,62	12,60	530000	0,00005	2,11	19961,30
12,85	13873,3	0,142	12000,9	12524,6	12000,9	12524,6	186,85	15,80	531000	0,00008	2,82	11908,93
10,76	9716,1	0,386	6271,5	7575,6	6271,5	7575,6	155,52	20,30	517000	0,00014	3,52	7237,03
9,46	7272,7	0,638	3169,3	5161,6	3169,3	5161,6	131,34	26,50	527000	0,00022	4,33	4595,08
8,55	5904,9	0,854	1611,6	4133,2	1611,6	4133,2	116,04	35,00	556000	0,00028	4,39	3619,10
7,82	5355,6	0,961	1053,5	3872,9	1053,5	3872,9	111,51	45,70	528000	0,00031	3,53	3277,57
											66,14	

Otros datos		
ρ <sub>L</sub>	730,76	kg/m <sup>3</sup>
Cp <sub>L</sub>	4670	J/kg·°C
k <sub>L</sub>	0,264	W/mK
μ <sub>L</sub>	0,000302	Pa·s
g	9,81	m/s <sup>2</sup>
Di	0,0191	m
Pr <sub>L</sub>	5,34	
N <sub>t</sub>	323	tubos



Las celdas marcadas en color naranja son datos que requiere el método para ofrecer una solución acerca del área. Estos son:

- Número de zona en que se divide el tubo.
- Curva de calor con el calor Q para cada zona el W.
- Temperatura en cada zona en °C.
- Fracción molar.
- Calor latente de vaporización  $\lambda_A^{vap}$  en  $\frac{J}{kg}$
- Capacidad calorífica  $C_p$  del líquido y del gas en  $\frac{J}{^{\circ}C \cdot kg}$
- Densidad del gas  $\rho_G$  y densidad del líquido  $\rho_L$  en  $\frac{kg}{m^3}$
- Viscosidad del gas  $\mu_G$  y viscosidad del líquido  $\mu_L$  en  $Pa \cdot s$
- $k_G$  y  $k_L$  en  $\frac{W}{m^{\circ}C}$
- Caudal másico de gas en  $\frac{kg}{h}$
- Valor de la gravedad, diámetro de tubo y número de tubos.

A modo de resumen se muestra la siguiente tabla con los principales parámetros del método:

Zona	T_G (°C)	Q (W)	y	$\Delta y/\Delta T_G$	$\lambda_{A^{vap}}$ (J/kg)	$\phi_0$	$\phi$	Z_G	h_Cf	h_sG	A_k
0	300,0	0	1,00		1712000	0,0	0,0	1,00000		353,2	
1	230,4	531000	1,00	0,0000	1712000	0,0	0,0	1,00000		369,1	20,67
2	223,4	589000	1,00	0,0000	1712000	0,0	0,0	1,00000		370,9	22,34
3	216,0	1058000	0,93	0,0093	1712000	1783,1	2139,7	0,00047	81454,5	320,0	0,87
4	205,9	1589000	0,86	0,0072	1712000	1548,9	1858,7	0,00054	36026,0	269,0	1,56
5	193,3	2119000	0,79	0,0052	1712000	1279,2	1535,1	0,00065	21187,0	224,6	2,11
6	177,5	2650000	0,73	0,0038	1712000	1079,6	1295,6	0,00077	12524,6	186,8	2,82
7	157,2	3167000	0,68	0,0025	1712000	866,8	1040,2	0,00096	7575,6	155,5	3,52
8	130,7	3694000	0,64	0,0015	1712000	677,6	317,8	0,00314	5161,6	131,3	4,33
9	95,7	4250000	0,61	0,0008	1712000	518,5	249,8	0,00399	4133,2	116,0	4,39
10	50,0	4778000	0,60	0,0002	1712000	383,1	190,2	0,00523	3872,9	111,5	3,53
											66,14

Tal y como podemos observar, el área de condensador requerida para estas condiciones concretas es de 66.14 metros cuadrados.

### 4.3 Discusión de resultados.

#### 4.3.1 Comparativa de resultados con los distintos métodos.

La siguiente tabla muestra la comparativa de los valores de la viscosidad de la mezcla en las distintas zonas del condensador, calculados por los diferentes métodos comentados en este estudio:

Zona	LUCAS	CHUNG	HUBER	CHEMCAD	WILKE
0	2,24E-05	1,25E-05	3,26E-05	2,34E-05	1,96E-05
1	2,01E-05	1,15E-05	2,99E-05	2,10E-05	1,75E-05
2	1,98E-05	1,14E-05	2,93E-05	2,07E-05	1,72E-05
3	1,77E-05	1,16E-05	2,92E-05	2,07E-05	1,71E-05
4	1,84E-05	1,19E-05	2,84E-05	2,06E-05	1,67E-05
5	1,84E-05	1,21E-05	2,73E-05	2,05E-05	1,64E-05
6	2,05E-05	1,24E-05	2,58E-05	2,03E-05	1,59E-05
7	2,04E-05	1,28E-05	2,38E-05	2,01E-05	1,53E-05
8	1,99E-05	1,27E-05	2,17E-05	1,97E-05	1,46E-05
9	1,92E-05	1,28E-05	1,97E-05	1,89E-05	1,36E-05
10	1,82E-05	1,18E-05	1,82E-05	1,75E-05	1,24E-05

Como podemos observar, los métodos ofrecen resultados en general bastante distintos. En este apartado tratamos de analizar cómo afectan esas variaciones a los resultados del área.

	Área del intercambiador (m <sup>2</sup> )	Número de tubos	Diámetro (m)	Longitud (m)
Método de Lucas	65,19	323	0,0191	3,3635
Método de Chung	52,08	323	0,0191	2,6871
Método de Huber	74,90	323	0,0191	3,8645
CHEMCAD	66,14	323	0,0191	3,4125
Regla de Wilke	60,11	323	0,0191	3,1014

Existen diferencias en las áreas calculadas por los diferentes métodos, lo cual afecta a la longitud del intercambiador y, por tanto, al precio.

#### 4.3.2 Cálculo del precio de un intercambiador de calor.

Para el cálculo del precio del intercambiador de calor que nos ocupa, un condensador en este caso, empleamos el método de Guthrie. Partimos de la siguiente expresión:

$$C_E = C_{E,ref} \cdot f_M \cdot f_P$$

Donde:

- $C_{E,ref}$  es el coste base, esto es el coste de referencia del equipo en su versión más simple (de acero al carbono y para operar a presión atmosférica).
- $f_M$  es el factor material, un factor de corrección del coste base para tener en cuenta el uso de materiales más sofisticados.



- $f_p$  es el factor de presión, factor que tiene en cuenta el uso de presiones diferentes de la atmosférica.

El coste base del equipo se obtiene mediante correlaciones que son función una variable (Q) identificativa de la capacidad del equipo. Para intercambiadores de calor esa variable Q representa el área en metros cuadrados.

$$\log C_{E,ref} = K_1 + K_2 \log Q + K_3 (\log Q)^2$$

Los valores de las constantes  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  los obtenemos de acuerdo con Turton (2003), siendo para cambiadores de calor de carcasa y tubos con cabezal flotante:

$$K_1 = 4.8306$$

$$K_2 = -0.8509$$

$$K_3 = 0.3187$$

El factor de material se considerará 2.9 en nuestro caso, correspondiente al acero inoxidable requerido para la circulación por él de monóxido de carbono, hidrógeno, agua y metanol. Este factor se obtiene de la bibliografía Smith (2005), Anson (1977) y Mulet (1981).

El factor de presión será de 1.75 para la presión de 80 atmósferas en el cambiador. Este factor se obtiene de la bibliografía Smith (2005).

Finalmente se procede a la actualización en el tiempo de los precios calculados, considerando que el índice CEPCI para el año 2003 es de 401.7 y el índice CEPCI para el año 2015 es 573.74.

$$\frac{C_{E1}}{C_{E2}} = \frac{I_1}{I_2}$$

Los valores de los precios los obtenemos en dólares estadounidenses. Consideraremos para la conversión a euros que:

$$1 \$ = 0.91 \text{ euros}$$

En el apartado siguiente se puede observar cómo afecta el error del cálculo de la viscosidad al precio de un intercambiador de calor.

#### 4.3.3 Influencia del error en el cálculo de la viscosidad de la mezcla gaseosa en el área y el coste de intercambiadores.

En los ejemplos y casos calculados en el apartado 3.3 del presente proyecto nos percatamos de que los distintos métodos disponibles para el cálculo de viscosidad en mezclas gaseosas ofrecen cierto error respecto a los datos experimentales. Los errores van desde -70% hasta cerca de un +10%. En este apartado tratamos de analizar cómo afecta ese error al cálculo del área del condensador de metanol.

Para realizar este análisis partiremos de la base de los datos de viscosidad calculados mediante Dean-Stiel, y del área que para estos resultados se ofrece. Lo que haremos será suponer que en todas las zonas en que se divide el condensador el error es el mismo, multiplicando el valor de la viscosidad que nos da Dean-Stiel por un determinado factor, para simular el error.

El error en apartados anteriores lo hemos calculado como:

$$Error = \frac{Viscosidad\ estimada - Viscosidad\ experimental}{Viscosidad\ experimental} \cdot 100$$





En este caso consideraremos la viscosidad de referencia la viscosidad que da el método de Dean-Stiel, y como viscosidad estimada (la que contiene el error) aquella resultante de multiplicar la viscosidad de referencia por el factor que se indica a continuación:

$$\text{Viscosidad estimada} = \text{Viscosidad referencia} \cdot \left(1 + \frac{\text{error}}{100}\right)$$

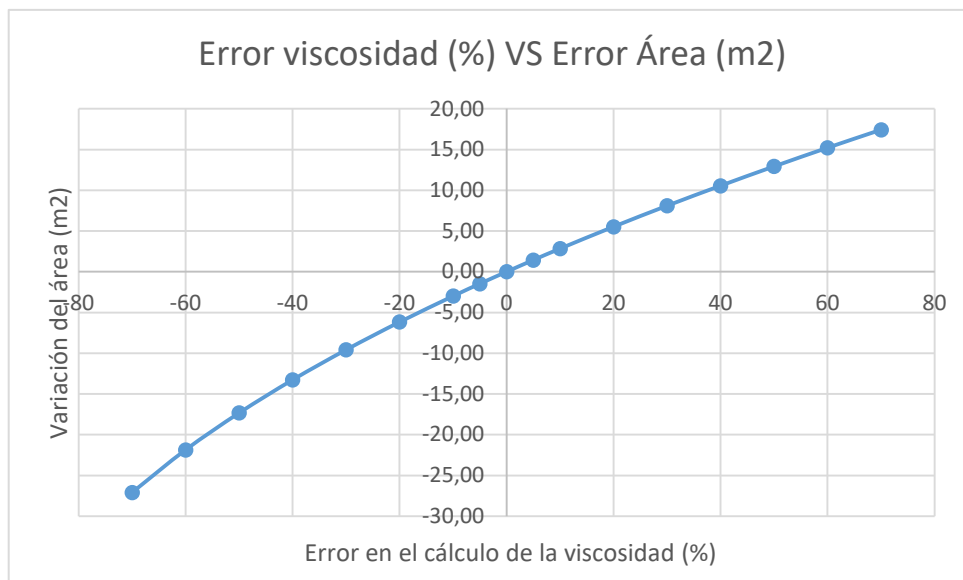
$$\text{factor de error} = 1 + \frac{\text{error}}{100}$$

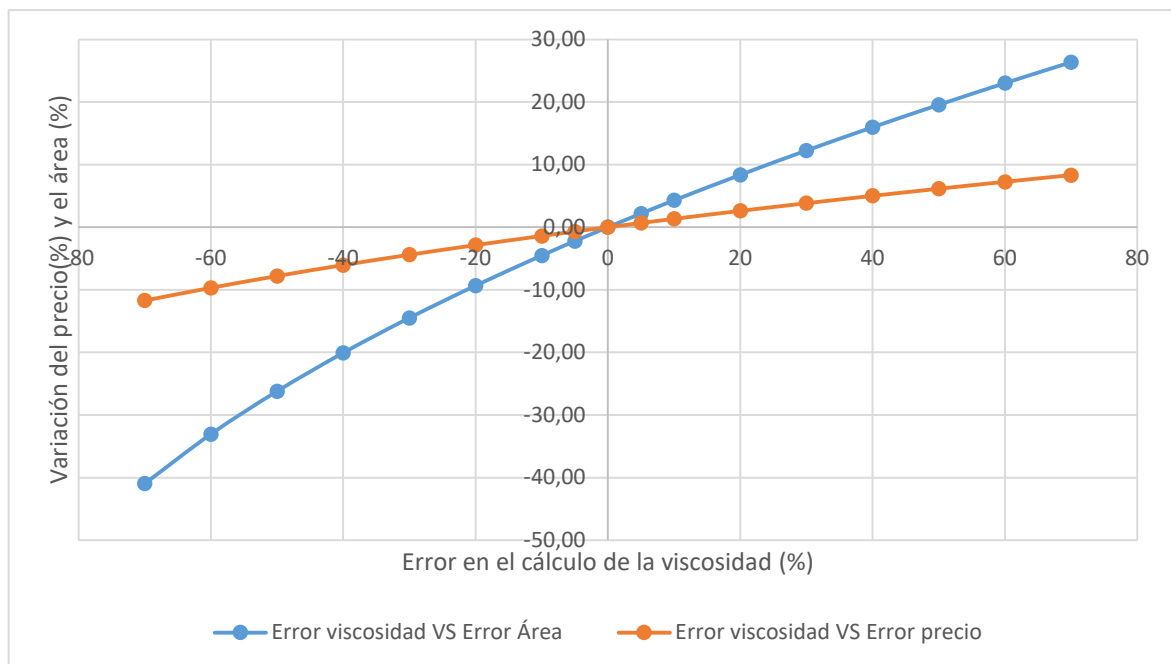
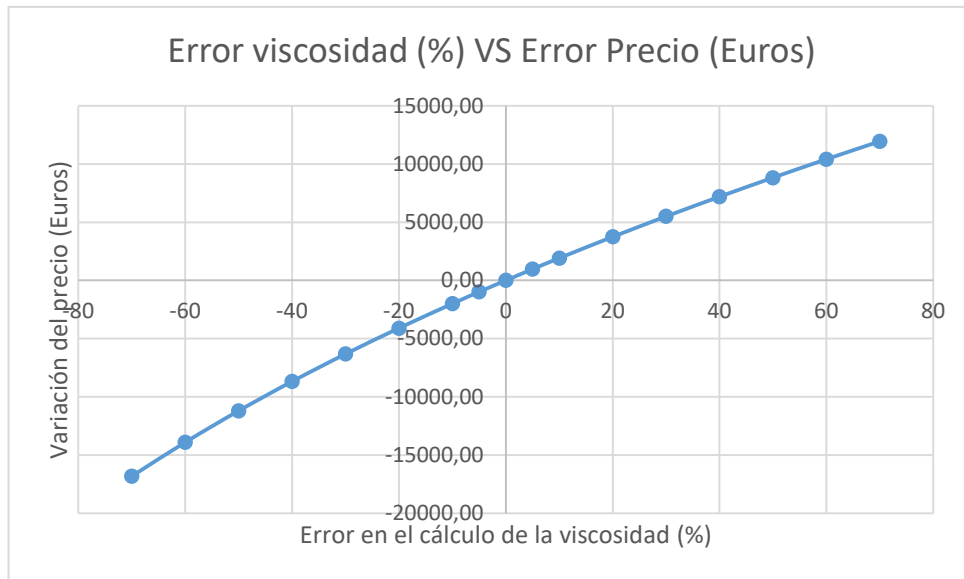
Con esa viscosidad estimada para cada zona, calculamos el área del intercambiador y con esa área calculamos el precio, siguiendo el método expuesto en el apartado anterior, obteniendo:

Error en viscosidad del gas (%)	Área (m <sup>2</sup> )	Ce,ref	Ce (2003)	Ce (2015) \$US	Ce (2015) euros
-70	39,04	19214,1	97511,7	139274,0	126739,3
-60	44,27	19656,2	99755,2	142478,3	129655,2
-50	48,80	20066,0	101835,1	145449,0	132358,5
-40	52,86	20448,7	103776,9	148222,5	134882,4
-30	56,55	20806,0	105590,6	150812,9	137239,8
-20	59,96	21142,8	107299,6	153253,8	139461,0
-10	63,14	21461,4	108916,7	155563,5	141562,8
-5	64,66	21615,1	109696,5	156677,3	142576,3
0	66,13	21764,4	110454,4	157759,9	143561,5
5	67,57	21911,4	111200,3	158825,1	144530,8
10	68,97	22054,8	111928,3	159865,0	145477,1
20	71,66	22332,0	113334,7	161873,7	147305,1
30	74,23	22598,4	114686,6	163804,6	149062,2
40	76,69	22854,7	115987,4	165662,4	150752,8
50	79,06	23102,7	117246,1	167460,3	152388,8
60	81,35	23343,3	118467,1	169204,1	153975,7
70	83,56	23576,2	119649,3	170892,7	155512,4

A continuación tenemos una tabla que nos indica, para un determinado error en el cálculo de la viscosidad, cuál es el área que obtenemos y cuál es el precio del condensador, así como los errores cometidos, absolutos y relativos:

Error en viscosidad del gas (%)	Área (m <sup>2</sup> )	Ce (2015) euros	Variación área (m <sup>2</sup> )	Variación Coste euros	Variación área (%)	Variación Coste %
-70	39,04	126739,32	-27,09	-16822,14	-40,96	-11,72
-60	44,27	129655,24	-21,86	-13906,23	-33,06	-9,69
-50	48,80	132358,55	-17,33	-11202,91	-26,21	-7,80
-40	52,86	134882,44	-13,27	-8679,02	-20,07	-6,05
-30	56,55	137239,75	-9,58	-6321,71	-14,49	-4,40
-20	59,96	139460,97	-6,17	-4100,50	-9,33	-2,86
-10	63,14	141562,77	-2,99	-1998,69	-4,52	-1,39
-5	64,66	142576,33	-1,47	-985,14	-2,22	-0,69
0	66,13	143561,46	0,00	0,00	0,00	0,00
5	67,57	144530,84	1,44	969,38	2,18	0,68
10	68,97	145477,13	2,84	1915,67	4,29	1,33
20	71,66	147305,07	5,53	3743,60	8,36	2,61
30	74,23	149062,19	8,10	5500,72	12,25	3,83
40	76,69	150752,83	10,56	7191,36	15,97	5,01
50	79,06	152388,85	12,93	8827,39	19,55	6,15
60	81,35	153975,74	15,22	10414,28	23,02	7,25
70	83,56	155512,36	17,43	11950,90	26,36	8,32





En primer lugar es preciso recordar que la mayoría de los métodos de cálculo de viscosidad la calculan por defecto. Ello implica que el área requerida calculada sea menor y que el intercambiador seleccionado tenga un coste inferior al que debiera. Partiendo de esa base, vemos que errores en la viscosidad que oscilan entre el -20% y el -70% originan errores en el cálculo del área que van desde el -10% hasta valores inferiores al -40% de error, originando además costes que son entre un -2% y un -11% menores a los que los cálculos recomiendan.





## 5 Conclusiones.





En relación con el análisis realizado en el presente documento se obtienen las siguientes conclusiones:

1. Se desarrolla un código Matlab para distintos métodos de cálculo de viscosidad de mezclas gaseosas: Lucas, Chung y Huber. Estos códigos son capaces de resolver diferentes casos planteados en Poling (2000) con garantías, de manera que se prueba que la implementación es la correcta.

2. Se buscan en la bibliografía más ejemplos con los que comprobar la ejecución de los códigos implementados en diferentes situaciones (alta y baja presión, condiciones supercríticas,...) y para sustancias con diferentes características (polares y apolares,...), concluyendo la no existencia de errores de ejecución de código para ninguno de ellos, pudiendo obtener, por tanto, para todos, un valor de viscosidad.

3. Se analizan y comparan los resultados de estos métodos entre sí y con el método de Dean-Stiel para los diferentes ejemplos, obteniéndose principalmente las siguientes conclusiones:

3.1. Las mezclas a baja presión tienen un error de cálculo menor.

3.2. Los métodos implementados suelen dar valores de viscosidad inferiores a la viscosidad experimental en la mayoría de los casos.

3.3. Chung, Huber y Dean-Stiel requieren de un valor de densidad de la mezcla como entrada para la ejecución del código o del cálculo interno (con el correspondiente error) de la misma, y Huber y Dean-Stiel además, requieren de un valor de viscosidad a baja presión.

3.4. Para la aplicación práctica, Lucas parece ser de los más adecuados pues solo requiere para su ejecución de las propiedades críticas y aplica en todo el rango de presiones y composiciones, aunque en condiciones supercríticas el método de Dean-Stiel es más adecuado.

4. Se desarrolla una interfaz gráfica para poder interactuar con los códigos, así como una base de datos con sustancias susceptibles de ser empleadas. Se plantea un procedimiento de introducción de nuevas sustancias en el código.

5. Se aplica el cálculo de la viscosidad de mezclas gaseosas a un caso concreto: el diseño de un condensador. Se desarrolla una hoja Excel capaz de calcular el área requerida por un condensador para unos datos concretos relacionados con la producción de metanol, mediante la aplicación del método SBG.

6. Se comprueba que el empleo de distintos métodos para el cálculo de la viscosidad en mezclas gaseosas influye de manera importante en el cálculo del área del condensador, viendo por ejemplo que la diferencia entre usar la viscosidad que proporciona Chung y la viscosidad que proporciona Huber es de unos 20 metros cuadrados.

7. Se estudia para un amplio rango de error en el cálculo de la viscosidad, el área de condensador que se obtiene. Para un error en la viscosidad del -30% (bastante común en los casos de alta presión analizados en el presente estudio), la variación del área puede llegar a ser de hasta el 14%, que para el caso concreto analizado supone un ahorro económico de casi el 5% en el precio del condensador (algo más de 6000 euros) pero también la ausencia de unos 10 metros cuadrados, requeridos de acuerdo con los cálculos teóricos para alcanzar las condiciones de salida del condensador fijadas.







## 6 Bibliografía.





- Anson HA, "A New Guide to Capital Cost Estimating", IChemE, UK (1977).
- Bell k. J. and Ghaly M. A., "An Approximate Generalized Design Method for Multicomponent/Partial Condensers," CEP Symp. Series Vol. 69, 72 (1973).
- Bras, G. A. P., "Shortcut to Cooler Condenser Design", Chem. Eng., V 60, No. 4, p. 223, No. 5, p. 230 (1953), and V.61, No. 5, p. 190 (1954).
- Bras, G. H., "Design of Cooler-Condenser for Vapor-Gas Mixtures-I," Chem. Eng., p. 223, April (1953).
- Brokaw R. S., "Viscosity of Gas Mixtures", Nasa Technical Note, Cleveland, Ohio (1968).
- Chapman, S., and T.G. Cowling: "The Mathematical Theory of Nonuniform Gases", Cambridge, New York (1939).
- Chung, T.-H., M. Aljan, L. L. Lee, and K. E. Starling: Ind. Eng. Chem. Fundam., 27: 671 (1988).
- Colburn A. P, Trans AIChE, V.30, p.187 (1934) and "Design of Cooler Condensers for Mixtures of Vapors with Noncondensing Gases", Ind. Eng. Chem., V.26, No 11, p. 1178 (1934).
- Colburn A. P. and Hougen O.A., University of Wisconsin Eng. Expt. Station, Bul. 70 (1930) and Ind. Eng. Chem., V.26, p.1178 (1934)
- Davani E., "Experimental investigation on high-pressure, high-temperature viscosity", Texas University (2011).
- Dean D. E., Stiel L. I., "The Viscosity of Nonpolar Gas Mixtures at Moderate and High Pressures", AIChE Journal, 11 (3), p. 526-532 (1965).
- Hirschfelder, J.O., M. H. Taylor, and T. Kihara: Univ. Wisconsin Theoret. Chem, Lab., WIS-ORR-29, Madison, Wis. (1960).
- Huber, M. L.: Chap 12 in Transport Properties of Fluids, Their Correlation, Prediction and Estimation, J. Millat, J. H. Dymond, and C. A. Nieto de Castro (eds.), IUPAC, Cambridge Univ. Press, Cambridge (1996).
- Hulden B., "Condensation of Vapours from Gas-Vapour Mixtures. An Aproximate Method of Design,". Chem. Eng. Science, V.7, p. 60 (1957).
- Lucas, K.: Phase Equilibria and Fluid Properties in the Chemical Industry, Dechema, Frankfurt, p. 573 (1980).
- Lucas, K.: Chem. Ing. Tech., 53:959 (1981).
- Lucas, K.: personal communications (1983, 1984).
- Lucas, K.: VDI-Warmeratlas, Abschnitt DA, "Berechnungsmethoden für Stoffeigenschaften," Verein Deutscher Ingenieure, Düsseldorf (1984a).
- Ludwig E. E., "Applied process design for chemical and petrochemical plants", Butterworth-Heinemann (1999).
- Mueller, A. C. and Bell, K. J., "Condensation Heat Transfer and Condenser Design", AIChE Today Series, AIChE, 345, E.47<sup>th</sup> St., New York (1971).



Mulet A., Corripio AB and Evans LB, "Estimate Costs of Pressure Vessels Via Correlations", Chem Eng, Dec: 77 (1981).

Mulet A., Corripio AB and Evans LB, "Estimate Costs of Distillation and Absorption Towers Via Correlations", Chem Eng, Oct: 145 (1981).

Poling B. C., Pausnitz J. M., O'Connel J. O. "The properties of Gases and Liquids", McGraw-Hill International Edition, Chemical Engineering Series, Fifth edition (2000).

Seader J.D, Henley E.J., "Separation Process Principles", Second Edition, Wiley & Sons (2006).

Sieder, EN, Tate GE, "Heat transfer and pressure drop liquids in tubes", Industrial and Engineering Chemistry, Volumen: 28, Páginas 1429-1435 (1936).

Smith, R., "Chemical Process Design and Integration", John Wiley & Sons, Ltd. (2005).

Silver L., "Gas Cooling with Aqueous Condensation," Trans. Inst. of Chem. Eng., Vol 25, 30 (1947).

Soave, G.: Chem. Eng. Sci., 27: 1197 (1972).

Taborek, J., Hewitt G. F., and Afgan N. (Eds.), Heat Exchangers Theory and Practice, Hemisphere, New York (1983).

Thome J. R., "Encyclopedia of two-phase heat transfer and flow II". Special Topics and Applications (A 4-Volume Set). Volume3: Special Topics in Condensation. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2016).

Turton R., Bailie R.C., Whiting W. B., Shaeiwitz J.A., "Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes", Prentice Hall (2003).

Wilke, C. R.: J. Chem. Phys., 18: 517 (1950).

<http://procesosbio.wikispaces.com/Fluidos>



## 7 Anexo.





## 7.1 Método de Lucas.

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% MÉTODO DE LUCAS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

clear all;
clc;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% DEFINICIÓN DE VARIABLES %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
Tc=[]; % Temperatura crítica de cada uno de los componentes (K)
Pc=[]; % Presión crítica de cada uno de los componentes (bar)
Vc=[]; % Volumen crítico de cada uno de los componentes (cm3/mol)
Zc=[]; % Factor de compresibilidad crítico de cada uno de los
componentes
M=[]; % Masa molar de cada uno de los componenetes (kg/kmol)
Mu=[]; % Momento dipolar
Q_gas=[]; % Factor que depende del tipo de gas
Y=[]; % Proporción molar de cada uno de los componentes
Tr=[]; % Temperatura reducida de cada uno de los componentes
Trm=0; % Temperatura reducida media. Inicializo a cero porque forma
parte de un bucle
Fq_0=[]; % Factor de corrección (inicial) para tener en cuenta la
polaridad
Mur=[]; % Momento dipolar reducido
Fp_0=[]; % Factor de corrección (inicial) para tener en cuenta los
efectos cuánticos
sign=[]; % Depende de Tr y se utiliza para calcular Fq_0
Tc_m=0; % Temperatura crítica media. Se actualiza en un bucle.
Pc_m=0; % Presión crítica media. Se actualiza en un bucle.
Pc_m_num=0; % Valor que se utiliza para calcular la Pc_m. Se actualiza
en un bucle.
Pc_m_den=0; % Valor que se utiliza para calcular la Pc_m. Se actualiza
en un bucle.
M_m=0; % Masa molar media
Fq_0_m=0; % Factor cuántico medio.
Fq_0_m_factor=0; % Factor que se utilizar para calcular Fq_0_m.
Fp_0_m=0; % Factor de polaridad medio.
R=83.14; % Constante gases ideales en cm3 bar/(K· mol)
Pr=[]; % Presión reducida de cada componente
Prm=0; % Presión reducida media

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% DATOS %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

NC=2; % Número de componentes
T=455.22 ; %Temperatura de la mezcla en K
P=1723.7; %Presión de la mezcla en bar

%%Componente 1 (C1: Metano)
Tc(1)=190.56; % Temperatura crítica de C1 en K
Pc(1)=45.99; % Presión crítica en bar. Lo he buscado por mi cuenta
Vc(1)=98.6; % Volumen crítico en cm3/mol
Zc(1)=0.286; % factor de compresibilidad crítico
M(1)=16.043; % Masa molecular
Mu(1)=0; % Momento dipolar. Lo he buscado por mi cuenta.

```



```
Q_gas(1)=0; % Ver si es un gas cuántico del tipo He, H2, D2
(No:Q_gas=0; Helio=Q_gas=1.38; H2:Q_gas=0.76; D2:Q_gas=0.52)
Y(1)=0.9; % Fracción molar C1

%%Componente 2 (C2: Dióxido de carbono)
Tc(2)=304.20; % Temperatura crítica de C2 en K
Pc(2)=73.80; % Presión crítica en bar. Lo he buscado por mi cuenta
Vc(2)=94; % Volumen crítico en cm3/mol
Zc(2)=0.29; % factor de compresibilidad crítico
M(2)=44.01; % Masa molecular
Mu(2)=0; % Momento dipolar. Lo he buscado por mi cuenta: para los
alcanos el momento dipolar permanente es cero
Q_gas(2)=0; % Ver si es un gas cuántico del tipo He, H2, D2 ->
(No:Q_gas=0; Helio=Q_gas=1.38; H2:Q_gas=0.76; D2:Q_gas=0.52)
Y(2)=0.1; % Fracción molar C2

%%%%%%%% CÁLCULO DE Tr, Fq_0, Mur, Fp_0 %%%%%%%%%

for i=1:NC;

    % Cálculo de la temperatura reducida
    Tr(i)=T/Tc(i);

    % Cálculo de Fq_0: Primero se ve el valor de sign, luego
    dependiendo
    % del tipo de gas, se aplica la fórmula o directamente se pone 1.
    if (Tr(i)-12)>=0; sign(i)=1;
    else sign(i)=-1;
    end;
    if Q_gas(i)~=0;
    Fq_0(i)=1.22*Q_gas(i)^(0.15)*(1+0.00385*((Tr(i)-
    12)^(2))^(1/M(i))*sign(i));
    else Fq_0(i)=1;
    end;

    %Calculamos el valor de Mu reducida
    Mur(i)=52.46*Mu(i)^(2)*Pc(i)/(Tc(i)^2);

    % Dependiendo del valor de Mur, se aplica una fórmula u otra para
    el
    % cálculo de Fp_0
    if Mur(i)>=0 && Mur(i)<0.022; Fp_0(i)=1; end;
    if Mur(i)>=0.022 && Mur(i)<0.075; Fp_0(i)=1+30.55*(0.292-
    Zc(i))^(1.72); end;
    if Mur(i)>=0.075; Fp_0(i)=1+30.55*(0.292-
    Zc(i))^(1.72)*abs(0.96+0.1*(Tr(i)-0.7)); end;

end;

%%%%%%%% CÁLCULO DE Tc_m, Pc_m, M_m, Fq_m, Fp_m%%%%%%%%

for i=1:NC;

    % La Tc_m se calcula directamente iterando desde cero.
    Tc_m=Tc_m+Y(i)*Tc(i);
```





```
% Para calcular la Pc_m calcularemos los valores del num y del
den, que
% se van actualizando en las interacciones, y luego haremos el
cociente
% y multiplicaremos por R y Tc_m
Pc_m_num=Pc_m_num+Y(i)*Zc(i);
Pc_m_den=Pc_m_den+Y(i)*Vc(i);

% La M_m se calcula directamente iterando desde cero
M_m=M_m+Y(i)*M(i);

% Fp_0_m se calcula directamente iterando desde cero
Fp_0_m=Fp_0_m+Y(i)*Fp_0(i);

% Para calcular Fq_0_m primero calculamos el factor que se
actualiza en
% cada iteración y finalmente multiplicamos por A.
Fq_0_m_factor=Fq_0_m_factor+Y(i)*Fq_0(i);

end;

Pc_m=R*Tc_m*Pc_m_num/Pc_m_den;

% Calculamos el factor A, que se necesita para Fq_0_m, y que depende
de
% cuál sea el componente más pesado.
Mh=M(1);
Ml=M(1);
for j=1:NC;
    if Mh<M(j); Mh=M(j); ind_high=j; end;
    if Ml>M(j); Ml=M(j); end;
end;
if Mh/Ml>9 && Y(ind_high)>0.05 && Y(ind_high)<0.7; A=1-
0.01*(Mh/Ml)^(0.87);
else A=1;
end;
Fq_0_m=A*Fq_0_m_factor;

%%%%%%%%%%%% CÁLCULO DE Jirm %%%%%%%%%%%%%%

Jirm=0.176*(Tc_m/(M_m^3*Pc_m^4))^(1/6); % Viscosidad reducida inversa
en (uP)^(-1)

%%%%% DISTINTO PROCEDIMIENTO PARA ALTA Y PARA BAJA PRESIÓN %%%%

% Calculamos la presión reducida media y la temperatura reducida media
%

Prm=P/Pc_m;

Trm=T/Tc_m;

% Vemos si estamos en alta o baja presión
```



```
if Prm<=1; NivelPresion=0; end; % 0: Baja presión; 1: alta presión
if Prm>1; NivelPresion=1; end; % 0: Baja presión; 1: alta presión

% Si estamos en baja presion
if NivelPresion==0;
    Nur=(0.807*Trm^0.618-0.357*exp(-0.449*Trm)+0.340*exp(-
4.058*Trm)+0.018)*Fp_0_m*Fq_0_m;
    Nu=Nur/Jirm;
end;

% Si estamos en alta presion: falta definir Pvp ;;; ATENCIÓN!!!
if NivelPresion==1;
    Z1=(0.807*(Trm)^0.618-0.357*exp(-0.449*Trm)+0.340*exp(-
4.058*Trm)+0.018)*Fp_0_m*Fq_0_m;
    alfa=3.262+14.98*Prm^5.508;
    beta=1.390+5.746*Prm;

    if Trm<=1 && Prm<(Pvp/Pc_m);
        Z2=0.6+0.760*Prm^(alfa)+(6.990*Prm^(beta)-0.6)*(1-Trm);
    end;

    if Trm>1 && Trm<40 && Prm>0 && Prm<=100;
        a1=0.001245;
        b1=1.6553;
        c1=0.4489;
        d1=1.7368;
        f1=0.9425;
        a2=5.1726;
        b2=1.2723;
        c2=3.0578;
        d2=2.2310;
        f2=-0.1853;
        gamma=-0.3286;
        delta=-37.7332;
        epsilon=-7.6351;
        chi=0.4489;
        a=a1*exp(a2*Trm^(gamma))/Trm;
        b=a*(b1*Trm-b2);
        c=c1*exp(c2*Trm^(delta))/Trm;
        d=d1*exp(d2*Trm^(epsilon))/Trm;
        e=1.3088;
        f=f1*exp(f2*Trm^(chi));

        Z2=Z1*(1+((a*Prm^(e))/(b*Prm^(f)+(1+c*Prm^d)^(-1))));
    end;

    Y_z=Z2/Z1;

    Fp=(1+(Fp_0_m-1)*Y_z^(-3))/(Fp_0_m);

    Fq=(1+(Fq_0_m-1)*(Y_z^(-1)-(0.007)*(log(Y_z))^4))/(Fq_0_m);

    Nu=Z2*Fp*Fq/Jirm;
end;
```



## 7.2 Método de Chung.

```
clear all
clc

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% MÉTODO DE CHUNG %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% 0) Declaración de variables

sigma=[];
E_k=[];
E_km_num=0;
k=[];
Jij=1;
sigmam=0;
sigmam3=0;
wm_num=0;
km=0;
Mm_num=0;
mu_sum=0;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% 1) Datos

%% 1.1.) Datos mezcla

T=573; %% Temperatura de la mezcla en K
P=81.06; %% Presión de la mezcla en bares
NC=4; % Número de componentes de la mezcla

%% 1.2.) Datos componente 1: CO
M(1)=28.01; % Masa molar en g/mol
Tc(1)=132.86; % Temperatura crítica en K
Pc(1)=34.94; %Presión crítica en bar
Vc(1)=92.16; %Volumen crítico en cm3/mol
w(1)=0.048;
mu(1)=0.12; %momento dipolar debyes
NOH(1)=0; %número de grupos -OH
k(1)=0;
% k(1)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno
que esté
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si
no
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos
o
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076
% k(1)=0.0682+4.704*(NOH(1)/M(1));
y(1)=0.2; % composición
```



```
% 1.3.) Datos componente 2: H2
M(2)=2.016; % Masa molar en g/mol
Tc(2)=33.2; % Temperatura crítica en K
Pc(2)=13; %Presión crítica en bar
Vc(2)=64.3; %Volumen crítico en cm3/mol
w(2)=-0.218;
mu(2)=0; %momento dipolar debyes
NOH(2)=0; %número de grupos -OH
k(2)=0;
% k(2)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno
que esté
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si
no
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos
o
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076
% k(2)=0.0682+4.704*(NOH(2)/M(2));
y(2)=0.4; % composición

%marcador=0; %%Poner a 1 si tenemos el V_especific. Si no tienes nada,
pones cero.
% Si tienes la densidad en g/cm3 pones un 2.
%V_especific=48.2; %% Volumen específico a P y T, en cm3/mol.Si no te
lo dan,
% que es lo normal si estás a baja presión, se aplicará la ley de los
gases
% ideales, por lo que has de bloquear esta línea.

%dens=0.4484; % densidad de la mezcla en g/cm3. Se usa para calcular
la densidad
%en mol/cm3. Bloquear si no se posee el dato.

%% 1.3.) Datos componente 2: H2O
M(3)=18.015; % Masa molar en g/mol
Tc(3)=647; % Temperatura crítica en K
Pc(3)=220.38; %Presión crítica en bar
Vc(3)=56.84; %Volumen crítico en cm3/mol
w(3)=0.344;
mu(3)=1.85; %momento dipolar debyes
NOH(3)=0; %número de grupos -OH
k(3)=0.076;
% k(2)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno
que esté
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si
no
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos
o
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076
```



```
% k(2)=0.0682+4.704*(NOH(2)/M(2));  
y(3)=0.35; % composición  
  
%% 1.3.) Datos componente 2: MeOH  
M(4)=32.04; % Masa molar en g/mol  
Tc(4)=513; % Temperatura crítica en K  
Pc(4)=79.54; %Presión crítica en bar  
Vc(4)=118; %Volumen crítico en cm3/mol  
w(4)=0.556;  
mu(4)=1.69; %momento dipolar debyes  
NOH(4)=0; %número de grupos -OH  
k(4)=0.215;  
% k(2)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno  
que esté  
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si  
no  
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos  
o  
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.  
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)  
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143  
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132  
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;  
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076  
% k(2)=0.0682+4.704*(NOH(2)/M(2));  
y(4)=0.05; % composición  
  
%%% Fijo algunos valores de variables que luego cambian  
w_dens=w;  
M_dens=M;  
  
% Cálculo de los parámetros de interacción binaria Ji y Ci, que  
suelen ser 1  
  
for i=1:NC;  
    for j=1:NC;  
        if (i~=j) Ji(i,j)=1; end;  
        if (i~=j) Ci(i,j)=1; end;  
    end;  
end;  
  
% Cálculo de sigmam, E_km, km, wm, Mm  
  
for i=1:NC;  
    for j=1:NC;  
        if i==j sigma(i,j)=0.809*(Vc(i))^(1/3); end; % 9-5.32  
        if i==j E_k(i,j)=Tc(i)/1.2593; end; % 9-5.34  
        if i==j w(i,j)=w(i); end; %9-5.36  
        if i==j k(i,j)=k(i); end; %9-5.37  
        if i==j M(i,j)=M(i); end; %9-5.39  
    end;  
end;  
  
for i=1:NC;  
    for j=1:NC;
```



```
    if (i~=j)
sigma(i,j)=Ji(i,j)*(sigma(i,i)*sigma(j,j))^(1/2);end; %9-5.33
    if i~=j E_k(i,j)=Ci(i,j)*(E_k(i,i)*E_k(j,j))^(1/2); end; %9-
5.35
    if i~=j w(i,j)=(w(i,i)+w(j,j))/2; end; %9-5.36
    if i~=j k(i,j)=(k(i,i)*k(j,j))^(1/2); end; %9-5.38
    if i~=j M(i,j)=(2*M(i,i)*M(j,j))/(M(i,i)+M(j,j)); %9-5.40
    end;
end;

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        sigmam3=sigmam3+y(i)*y(j)*(sigma(i,j))^3; %9-5.25
        E_km_num=E_km_num+y(i)*y(j)*E_k(i,j)*(sigma(i,j))^3; %9-5.27
        wm_num=wm_num+y(i)*y(j)*w(i,j)*(sigma(i,j))^3; %9-5.27
        km=km+y(i)*y(j)*k(i,j); %9-5.31
        Mm_num=Mm_num+y(i)*y(j)*E_k(i,j)*sigma(i,j)^2*M(i,j)^(1/2);
%9-5.28
        mu_sum=mu_sum+y(i)*y(j)*mu(i)^2*mu(j)^2/(sigma(i,j)^3);
    end;
end;

sigmam=(sigmam3)^(1/3);
E_km=E_km_num/sigmam3;
wm=wm_num/sigmam3;
Mm=(Mm_num/(E_km*sigmam^2))^2;
mum=(sigmam3*mu_sum)^(1/4);

Vcm=(sigmam/0.809)^3;
Tcm=1.2593*E_km;
mu_rm=(131.3*mum)/((Vcm*Tcm)^(1/2));

% Cálculo de E1 hasta E10. tabla 9-6.

a(1)=6.324; b(1)=50.412; c(1)=-51.680; d(1)=1189;
a(2)=0.00121; b(2)=-0.001154; c(2)=-0.006257; d(2)=0.03728;
a(3)=5.283; b(3)=254.209; c(3)=-168.48; d(3)=3898.0;
a(4)=6.623; b(4)=38.096; c(4)=-8.464; d(4)=31.42;
a(5)=19.745; b(5)=7.63; c(5)=-14.354; d(5)=31.53;
a(6)=-1.9; b(6)=-12.537; c(6)=4.985; d(6)=-18.15;
a(7)=24.275; b(7)=3.45; c(7)=-11.291; d(7)=69.35;
a(8)=0.7972; b(8)=1.117; c(8)=0.01235; d(8)=-4.117;
a(9)=-0.2382; b(9)=0.0677; c(9)=-0.8163; d(9)=4.025;
a(10)=0.06863; b(10)=0.3479; c(10)=0.5926; d(10)=-0.727;

for i=1:10;
    E_i(i)=a(i)+b(i)*wm+c(i)*mu_rm^4+d(i)*km;
end;

% Cálculo de Tm^*, omegav

Tm_ast=T/E_km; %9-5.26

A=1.16145; B=0.14874; C=0.52487; D=0.77320; E=2.16178; F=2.43787;
```



```
omegav=(A*(Tm_ast)^(-B))+C*(exp(-D*Tm_ast))+E*(exp(-F*Tm_ast)); %9-4.3

Fcm=1-0.275*wm+0.059035*mu_rm^4+km; %9-5.41

R=83.14472; % cm3bar/(K mol)

if P==1; ro=P/(83.14472*T); end;
if P~=1;
    %%%%%%%%%%% Calculo la densidad %%%%%%%%%%%

    % Calculo del coeficiente de compresibilidad para la mezcla

    Tr = T./Tc;
    Pr = P./Pc;
    m = 0.48+1.574*w_dens-0.176*(w_dens.^2);
    alpha = (1+m.*(1-Tr)).^2;
    a = 0.42748*alpha.*Pr./(Tr.^2);
    b = 0.08664*Pr./Tr;

    for i=1:length(y);
        for j=1:length(y);
            par_inter_bin(i,j)=0;
        end;
    end;

    A = 0; B = 0;
    for i = 1:length(y);
        for j = 1:length(y);
            A = A + y(i).*y(j).*sqrt(a(i).*a(j)).*(1-par_inter_bin(i,j));
        end
        B = B + y(i).*b(i);
    end

    ini = 1.000;
    ZG = fzero(@(Z) SRK(Z,A,B),ini);

    % Calculo de la densidad del gas

    Mm_dens = 0;
    for i = 1:length(y);
        Mm_dens = Mm_dens + y(i).*M_dens(i);
    end

    denG = P*Mm_dens/(0.08314*ZG*T);

    ro=(denG/Mm_dens)/1000;

end;

%% Fin cálculo de densidad

Y=ro*Vcm/6;

G1=(1-0.5*Y)/(1-Y)^3; %9-6.21
```



$$G2 = (E_i(1) * ((1 - \exp(-E_i(4) * Y)) / Y) + E_i(2) * G1 * \exp(E_i(5) * Y) + E_i(3) * G1) / (E_i(1) * E_i(4) + E_i(2) + E_i(3)); \quad \%9-6.22$$

$$nu_{ast\_ast} = E_i(7) * Y^2 * G2 * \exp(E_i(8) + E_i(9) * (Tm_{ast})^{(-1) + E_i(10) * (Tm_{ast})^{(-2)}}); \quad \%9-6.23$$

$$nu_{ast} = ((Tm_{ast})^{(1/2)} * (Fcm * ((G2)^{(-1) + E_i(6) * Y)})) / (\omega_{gav} + nu_{ast\_ast}); \quad \%9-6.19$$

$$nu = nu_{ast} * 36.344 * (Mm * Tcm)^{(1/2)} / (Vcm)^{(2/3)}; \quad \%9-6.18$$

### 7.3 Método de Huber.

```
clear all;
clc;
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% MÉTODO DE Huber %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% APLICACIÓN INICIAL DE CHUNG PARA CÁLCULO %%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% DE VISCOSIDAD A BAJA PRESIÓN%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% 0) Declaración de variables
```

```
sigma=[];
E_k=[];
E_km_num=0;
k=[];
Jij=1;
sigmam=0;
sigmam3=0;
wm_num=0;
km=0;
Mm_num=0;
mu_sum=0;
```

```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% 1) Datos
```

```
%% 1.1.) Datos mezcla
```

```
NC=4; % Número de componentes
T=573 ; %Temperatura de la mezcla en K
P=81.06; %Presión de la mezcla en bar
```

```
%% 1.2.) Datos componente 1: CO
M(1)=28.01; % Masa molar en g/mol
Tc(1)=132.86; % Temperatura crítica en K
Pc(1)=34.94; %Presión crítica en bar
Vc(1)=92.16; %Volumen crítico en cm3/mol
Zc(1)=0.289;
```





```
w(1)=0.048;  
mu(1)=0.12; %momento dipolar debyes  
NOH(1)=0; %número de grupos -OH  
k(1)=0;  
% k(1)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno  
que esté  
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si  
no  
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos  
o  
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.  
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)  
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143  
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132  
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;  
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076  
% k(1)=0.0682+4.704*(NOH(1)/M(1));  
y(1)=0.2; % composición
```

```
%% 1.3.) Datos componente 2: H2  
M(2)=2.016; % Masa molar en g/mol  
Tc(2)=33.2; % Temperatura crítica en K  
Pc(2)=13; %Presión crítica en bar  
Vc(2)=64.3; %Volumen crítico en cm3/mol  
Zc(2)=0.306;  
w(2)=-0.218;  
mu(2)=0; %momento dipolar debyes  
NOH(2)=0; %número de grupos -OH  
k(2)=0;  
% k(2)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno  
que esté  
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si  
no  
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos  
o  
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.  
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)  
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143  
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132  
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;  
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076  
% k(2)=0.0682+4.704*(NOH(2)/M(2));  
y(2)=0.4; % composición
```

```
%% 1.3.) Datos componente 2: H2O  
M(3)=18.015; % Masa molar en g/mol  
Tc(3)=647; % Temperatura crítica en K  
Pc(3)=220.38; %Presión crítica en bar  
Vc(3)=56.84; %Volumen crítico en cm3/mol  
Zc(3)=0.232;  
w(3)=0.344;  
mu(3)=1.85; %momento dipolar debyes  
NOH(3)=0; %número de grupos -OH  
k(3)=0.076;  
% k(2)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno  
que esté
```



```
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si
no
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos
o
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076
% k(2)=0.0682+4.704*(NOH(2)/M(2));
y(3)=0.35; % composición
```

```
%% 1.3.) Datos componente 2: MeOH
M(4)=32.04; % Masa molar en g/mol
Tc(4)=513; % Temperatura crítica en K
Pc(4)=79.54; %Presión crítica en bar
Vc(4)=118; %Volumen crítico en cm3/mol
Zc(4)=0.224;
w(4)=0.556;
mu(4)=1.69; %momento dipolar debyes
NOH(4)=0; %número de grupos -OH
k(4)=0.215;
% k(2)= ; % Revisar la siguiente tabla y, si el compuesto es alguno
que esté
% en ella, desbloquear esta línea copiando el valor de k apropiado. Si
no
% está en la lista, pero es una sustancia altamente polar como ácidos
o
% alcoholes, desbloquear la línea que hay tras la tabla.
% Para los valores de k considerar la siguiente tabla (tabla 9-1)
% Methanol: 0.215; Ethanol:0.175; n-Propanol:0.143
% i-Propanol: 0.143; n-butanol:0.132; i-Butanol:0.132
% n-pentanol: 0.122; n-Hexanol: 0.114; n-heptanol: 0.109;
% Acetic Acid: 0.0916; water: 0.076
% k(2)=0.0682+4.704*(NOH(2)/M(2));
y(4)=0.05; % composición
```

```
P_low=1;
```

```
%marcador=0; %%Poner a 1 si tenemos el V_especific. Si no tienes nada,
pones cero.
% Si tienes la densidad en g/cm3 pones un 2.
%V_especific=48.2; %% Volumen específico a P y T, en cm3/mol.Si no te
lo dan,
% que es lo normal si estás a baja presión, se aplicará la ley de los
gases
% ideales, por lo que has de bloquear esta línea.
```

```
%dens=0.4484; % densidad de la mezcla en g/cm3. Se usa para calcular
la densidad
%en mol/cm3. Bloquear si no se posee el dato.
```



```
% Cálculo de los parámetros de interacción binaria Ji y Ci, que
suelen ser 1

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        if (i~=j) Ji(i,j)=1; end;
        if (i~=j) Ci(i,j)=1; end;
    end;
end;

% Cálculo de sigmam, E_km, km, wm, Mm

w_dens=w;
M_dens=M;

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        if i==j sigma(i,j)=0.809*(Vc(i))^(1/3); end; % 9-5.32
        if i==j E_k(i,j)=Tc(i)/1.2593; end; % 9-5.34
        if i==j w(i,j)=w(i); end; %9-5.36
        if i==j k(i,j)=k(i); end; %9-5.37
        if i==j Mch(i,j)=M(i); end; %9-5.39
    end;
end;

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        if (i~=j)
sigma(i,j)=Ji(i,j)*(sigma(i,i)*sigma(j,j))^(1/2);end; %9-5.33
        if i~=j E_k(i,j)=Ci(i,j)*(E_k(i,i)*E_k(j,j))^(1/2); end; %9-
5.35
        if i~=j w(i,j)=(w(i,i)+w(j,j))/2; end; %9-5.36
        if i~=j k(i,j)=(k(i,i)*k(j,j))^(1/2); end; %9-5.38
        if i~=j Mch(i,j)=(2*Mch(i,i)*Mch(j,j))/(Mch(i,i)+Mch(j,j));
%9-5.40
        end;
    end;
end;

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        sigmam3=sigmam3+y(i)*y(j)*(sigma(i,j))^3; %9-5.25
        E_km_num=E_km_num+y(i)*y(j)*E_k(i,j)*(sigma(i,j))^3; %9-5.27
        wm_num=wm_num+y(i)*y(j)*w(i,j)*(sigma(i,j))^3; %9-5.27
        km=km+y(i)*y(j)*k(i,j); %9-5.31
        Mm_num=Mm_num+y(i)*y(j)*E_k(i,j)*sigma(i,j)^2*Mch(i,j)^(1/2);
%9-5.28
        mu_sum=mu_sum+y(i)*y(j)*mu(i)^2*mu(j)^2/(sigma(i,j)^3);
    end;
end;

sigmam=(sigmam3)^(1/3);
E_km=E_km_num/sigmam3;
wm=wm_num/sigmam3;
Mm=(Mm_num/(E_km*sigmam^2))^2;
mum=(sigmam3*mu_sum)^(1/4);
```



```
Vcm=(sigmam/0.809)^3;  
Tcm=1.2593*E_km;  
mu_rm=(131.3*mum)/((Vcm*Tcm)^(1/2));
```

```
% Cálculo de E1 hasta E10. tabla 9-6.
```

```
a(1)=6.324; b(1)=50.412; c(1)=-51.680; d(1)=1189;  
a(2)=0.00121; b(2)=-0.001154; c(2)=-0.006257; d(2)=0.03728;  
a(3)=5.283; b(3)=254.209; c(3)=-168.48; d(3)=3898.0;  
a(4)=6.623; b(4)=38.096; c(4)=-8.464; d(4)=31.42;  
a(5)=19.745; b(5)=7.63; c(5)=-14.354; d(5)=31.53;  
a(6)=-1.9; b(6)=-12.537; c(6)=4.985; d(6)=-18.15;  
a(7)=24.275; b(7)=3.45; c(7)=-11.291; d(7)=69.35;  
a(8)=0.7972; b(8)=1.117; c(8)=0.01235; d(8)=-4.117;  
a(9)=-0.2382; b(9)=0.0677; c(9)=-0.8163; d(9)=4.025;  
a(10)=0.06863; b(10)=0.3479; c(10)=0.5926; d(10)=-0.727;
```

```
for i=1:10;  
    E_i(i)=a(i)+b(i)*wm+c(i)*mu_rm^4+d(i)*km;  
end;
```

```
% Cálculo de Tm^*, omegav
```

```
Tm_ast=T/E_km; %9-5.26
```

```
A=1.16145; B=0.14874; C=0.52487; D=0.77320; E=2.16178; F=2.43787;
```

```
omegav=(A*(Tm_ast)^(-B))+C*(exp(-D*Tm_ast))+E*(exp(-F*Tm_ast)); %9-4.3
```

```
Fcm=1-0.275*wm+0.059035*mu_rm^4+km; %9-5.41
```

```
R=83.14472; % cm3bar/(K mol)
```

```
ro=P_low/(83.14472*T);  
%if marcador==1; ro=1/V_especific; end;  
%if marcador==2; ro=dens/Mm; end;
```

```
Y=ro*Vcm/6;
```

```
G1=(1-0.5*Y)/(1-Y)^3; %9-6.21
```

```
G2=(E_i(1)*((1-exp(-  
E_i(4)*Y))/Y)+E_i(2)*G1*exp(E_i(5)*Y)+E_i(3)*G1)/(E_i(1)*E_i(4)+E_i(2)  
+E_i(3)); %9-6.22
```

```
nu_ast_ast=E_i(7)*Y^2*G2*exp(E_i(8)+E_i(9)*(Tm_ast)^(-  
1)+E_i(10)*(Tm_ast)^(-2)); %9-6.23
```

```
nu_ast=((Tm_ast)^(1/2)*(Fcm*((G2)^(-  
1)+E_i(6)*Y)))/(omegav)+nu_ast_ast; %9-6.19
```

```
nu=nu_ast*36.344*(Mm*Tcm)^(1/2)/(Vcm)^(2/3); %9-6.18
```

```
% la nu está en uP y la tengo que pasar a uPa·s para que luego sea  
% coherente con el método de Huber
```

```
nu_low=nu/10;
```



```
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% FIN APLICACIÓN MÉTODO CHUNG. INICIO APLICACIÓN
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% MÉTODO DE Huber PARA ALTA PRESIÓN
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

%% Variables del trapp,

hm=0;
fmhm=0;
Fnm_sum=0;
sigmax_suma=0;
Mx_suma=0;
Ji_suma=0;
tita_ij_suma1=0;
tita_ij_suma2=0;
nu_m_enskog_suma1=0;
nu_m_enskog_suma2=0;
Mmezcla=0;
par_inter_bin=[];

%% Datos del fluido de referencia (Propano)

Tc_ref=369.83; %K
Vc_ref=200; %200 cm3/mol,
Zc_ref=0.276;
w_ref=0.152;
M_ref=44.1;

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% Cálculo de la densidad%%

Tr = T./Tc;
Pr = P./Pc;
m = 0.48+1.574*w_dens-0.176*(w_dens.^2);
alpha = (1+m.*(1-Tr)).^2;
a = 0.42748*alpha.*Pr./(Tr.^2);
b = 0.08664*Pr./Tr;

for i=1:length(y);
    for j=1:length(y);
        par_inter_bin(i,j)=0;
    end;
end;

A = 0; B = 0;
for i = 1:length(y);
    for j = 1:length(y);
        A = A + y(i).*y(j).*sqrt(a(i).*a(j)).*(1-par_inter_bin(i,j));
    end
    B = B + y(i).*b(i);
end

ini = 1.000;
ZG = fzero(@(Z) SRK(Z,A,B),ini);
```



```
% Calculo de la densidad del gas

Mm_dens = 0;
for i = 1:length(y);
    Mm_dens = Mm_dens + y(i).*M_dens(i);
end

denG = P*Mm_dens/(0.08314*ZG*T);

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% fin cálculo densidad %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

% 9.6.34, 9.6.35, 9.7.12

for i=1:NC;
    Tr(i)=T/Tc(i);
    f(i,i)=(Tc(i)/Tc_ref)*(1+(w(i,i)-w_ref)*(0.05203-
0.7498*log(Tr(i)))));
    h(i,i)=(Vc(i)/Vc_ref)*(Zc_ref/Zc(i))*(1-(w(i,i)-w_ref)*(0.1436-
0.2822*log(Tr(i)))));
    sigma(i)=4.771*h(i)^(1/3);
end;

% 9-7-5, 9-7-4
for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        %if (j~=i);
            f(i,j)=(f(i,i)*f(j,j))^(1/2);
            h(i,j)=(((h(i,i))^(1/3)+(h(j,j)^(1/3)))^(3))/8;
        %end;
    end;
end;

%9-7-2, 9-7-3
for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        %if j>=i;
            hm=hm+y(i)*y(j)*h(i,j);
            fmhm=fmhm+y(i)*y(j)*f(i,j)*h(i,j);
        %end;
    end;
end;

fm=fmhm/hm;

%9-7-9
for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        %if j>i;
            M_ij(i,j)=(2*M(i)*M(j))/(M(i)+M(j));
        % end;
    end;
end;
```



```
end;

%9-7-8
for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        %if j>i;

Fnm_sum=Fnm_sum+y(i)*y(j)*(f(i,j)*M_ij(i,j))^(1/2)*(h(i,j))^(4/3);
        % end;
    end;
end;

Fnm=(44.094)^(-1/2)*(hm)^(-2)*Fnm_sum;

%9-7-7

for i=1:NC;
    Mmezcla=Mmezcla+y(i)*M(i); %calculo la masa molar de la mezcla
end;

%if marcador==0; dens=ro*Mmezcla; end;
%if marcador==1; dens=(1/V_especific)*Mmezcla; end;
dens=denG/1000; % paso denG de kg/m3 a g/cm3

dens_litros=(dens/Mmezcla)*1000;

%ro_o=ro*hm;

dens_o=dens_litros*hm;

% 9-6-25

roc_ref=1/Vc_ref;
%ro_r=ro_o/roc_ref;

densc_ref=1000/Vc_ref; %metemos el 1000 para pasar a mol/l
dens_r=dens_o/densc_ref;

E1=-14.113294896;
E2=968.22940153;
E3=13.686545032;
E4=-12511.628378;
E5=0.0168910864;
E6=43.527109444;
E7=7659.4543472;

G1=exp(E1+E2/T);
G2=E3+E4/(T^(1.5));
G3=E5+E6/T+E7/((T^2));

nur_menos_nuro=G1*exp((dens_o^0.1)*G2+((dens_o^0.5)*(dens_r-1))*G3)-
G1;

%9-7-13;
for i=1:NC;
    for j=1:NC;
```



```
sigma(i,j)=(sigma(i,i)+sigma(j,j))/2;

end;
end;

%9-7-20
for i=1:NC;
    for j=1:NC;

        sigmax_suma=sigmax_suma+y(i)*y(j)*sigma(i,j)^3;

    end;
end;

sigmax=(sigmax_suma)^(1/3);

%9-7-21
for i=1:NC;
    for j=1:NC;

        Mx_suma=Mx_suma+y(i)*y(j)*sigma(i,j)^4*M_ij(i,j)^(1/2);

    end;
end;

Mx=(Mx_suma)^(2)*sigmax^(-8);

%9-3-8
for i=1:NC;
    for j=1:NC;

        nu_ij(i,j)=26.69*(((M_ij(i,j)*T)^(1/2))/((sigma(i,j)^2)));
        % Divido por diez para que me salga igual que el libro. En el
        libro
        % está mal, para que den las Bij, la nu_ij tiene que valer el
        valor
        % del libro multiplicado por 10
    end;
end;

nux=26.69*((Mx*T)^(1/2)/(sigmax^2));

%9-7-10 (creo que no es este, parece más 9-7-16)
for i=1:NC;
    Ji_suma=Ji_suma+y(i)*(sigma(i,i)^3);
end;

Ji=6.023E-4*(pi/6)*dens_litros*Ji_suma;

Jix=6.023E-4*(pi/6)*dens_litros*sigmax^3;

%9-7-15
```





```
for i=1:NC;
    tita_ij_suma1=tita_ij_suma1+y(i)*sigma(i,i)^2;
    tita_ij_suma2=tita_ij_suma2+y(i)*sigma(i,i)^3;
end;

for i=1:NC;
    for j=1:NC;

tita_ij(i,j)=((sigma(i,i)*sigma(j,j))/(2*sigma(i,j)))*(tita_ij_suma1/t
ita_ij_suma2);
        end;
    end;
tita_xx=1/2;

%9-7-14
for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        g_ij(i,j)=(1-Ji)^(-1)+((3*Ji)/(1-
Ji)^2)*tita_ij(i,j)+((2*Ji^2/((1-Ji)^3))*tita_ij(i,j)^2);
        end;
    end;

g_xx=(1-Jix)^(-1)+((3*Jix)/(1-Jix)^2)*tita_xx+((2*Jix^2/((1-
Jix)^3))*tita_xx^2);

%9-7-17

for i=1:NC;
    Y_i_suma(i)=0;
    for j=1:NC;

Y_i_suma(i)=Y_i_suma(i)+y(1,j)*((M_ij(j,j)/(M_ij(i,i)+M_ij(j,j)))*si
gma(i,j)^3)*g_ij(i,j);
        end;
    end;

for i=1:NC;
    Y_i(i)=y(i)*(1+((8*pi)/15)*(6.023E-4)*dens_litros*Y_i_suma(i));
end;

Y_x=1+((8*pi)/15)*(6.023E-4)*dens_litros*(sigmax^3)*g_xx/2;

% -9-7-19

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        Bij_suma(i,j)=0;
        for k=1:NC;
            if i==j;
                deltakroi_j=1;
            else deltakroi_j=0;
            end;

            if j==k;
                deltakroi_k=1;
            else deltakroi_k=0;
            end;
        end;
    end;
end;
```



```
Bij_suma(i,j)=Bij_suma(i,j)+y(i)*y(k)*(g_ij(i,k)/nu_ij(i,k))*(M_ij(k,k)
)/(M_ij(i,i)+M_ij(k,k))^2*((1+(5*M_ij(i,i))/(3*M_ij(k,k)))*deltakroi
j-(2*M_ij(i,i)*deltakroj/(3*M_ij(k,k))));
    end;
end;
end;

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        Bij(i,j)=2*Bij_suma(i,j);
    end;
end;

Bxx=g_xx/nux;

% 9-7-18

Y_i=transpose(Y_i);

beta_i=Bij\Y_i;
beta_x=Bxx\Y_x;

% 9-7-11

for i=1:NC;
    nu_m_enskog_suma1=nu_m_enskog_suma1+beta_i(i)*Y_i(i);
end;

for i=1:NC;
    for j=1:NC;
        nu_m_enskog_suma2=nu_m_enskog_suma2+y(i)*y(j)*sigma(i,j)^6*nu_ij(i,j)*
g_ij(i,j);
    end;
end;

alfa=9.725E-7;

nu_m_enskog=nu_m_enskog_suma1+alfa*dens_litros^2*nu_m_enskog_suma2;

nu_x_enskog=beta_x*Y_x+alfa*dens_litros^2*sigmax^6*nux*g_xx;

%9-7-10;
incremento_nu=nu_m_enskog-nu_x_enskog;
% Paso los micropoises a micropascales segundo (uPa.s)
incremento_nu_uPas=incremento_nu/10;

% 9-7-1

nu_trapp=nu_low+Fnm*(nur_menos_nuro)+incremento_nu_uPas;
```

