

ANEXO B

**PROPIEDADES TERMOFÍSICAS
DE LA MEZCLA DE TRABAJO**

B. PROPIEDADES TERMOFÍSICAS DE LOS FLUIDOS DE TRABAJO

En este apartado se muestran las principales propiedades de interés tanto de los compuestos puros metanol (MeOH) y tetraetilenglicol dimetiléter (TEGDME), como de la mezcla que forman, al igual que le procedimiento de cálculo de dichas propiedades. En la tabla B.1, se indican las propiedades del metanol (MeOH) y del tetraetilenglicol dimetiléter (TEGDME).

	TEGDME	MeOH
Nombre Químico	2,5,8,11,14-pentaoxopentadecano	Metanol
Fórmula Molecular	$C_{10}H_{22}O_5$	CH_4O
Peso Molecular	222.28	32.04
Temperatura Crítica (°C)	431.85	239.45
Presión Crítica (bar)	19.4	80.9
Punto Ebullición Normal(°C)	274.3	64.46
Punto Congelación (°C)	-30	-98
Densidad a 20°C (g/cm ³)	1.011	0.791
Entalpía Vaporización a 0°C (kJ/kg)	345.55	1248
Calor Específico a 20 °C (kJ/kgK)	2.0751	2.567
Tensión Superficial a 20 °C (mN/m)	34.14	22.6
Momento Dipolar μ (Debye)	2.5	1.7
Constante Dieléctrica a 25°C	9.16	32.63
Factor Acéntrico a 25°C	0.9652	0.560
Densidad vapor a 5 °C y presión de saturación (5.5 kPa) (kg/m ³)	-	76.4e-3

Tabla B. 1 Propiedades físicas de los compuestos puros TEGDME y MeOH

En la Fig B.1, se presenta el diagrama de Oldham, de Presión – Temperatura - Composición (PTX) para la mezcla MeOH-E181.

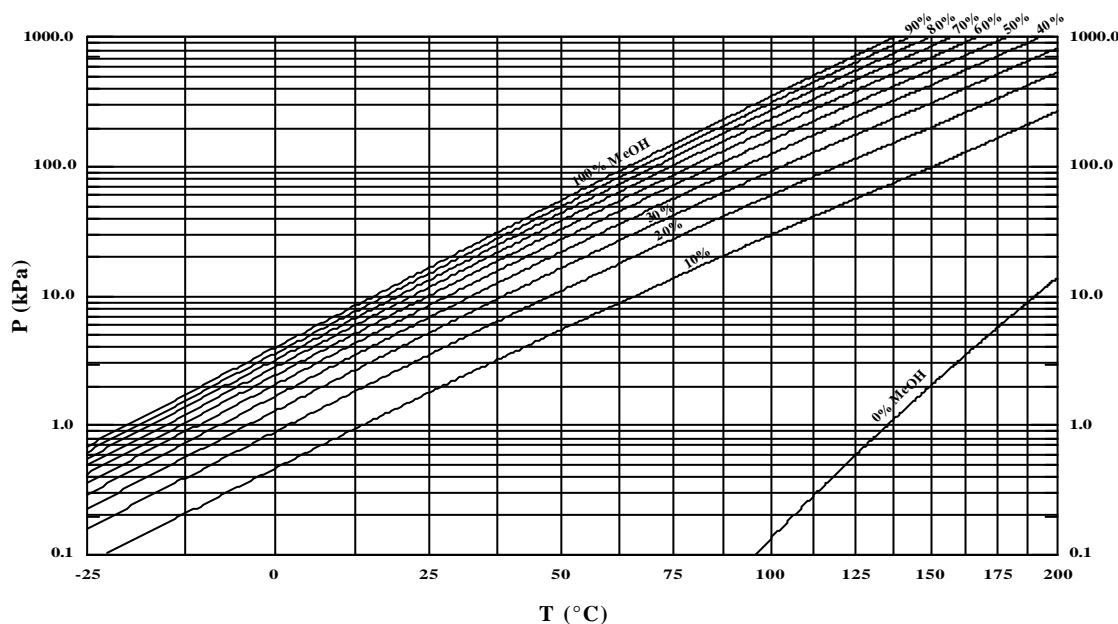


Fig.B. 1 Diagrama de Oldham, presión-temperatura-concentración, del MeOH-TEGDME

El diagrama de entalpía-concentración-temperatura-presión de la solución MeOH-TEGDME se presenta en la Fig B.2.

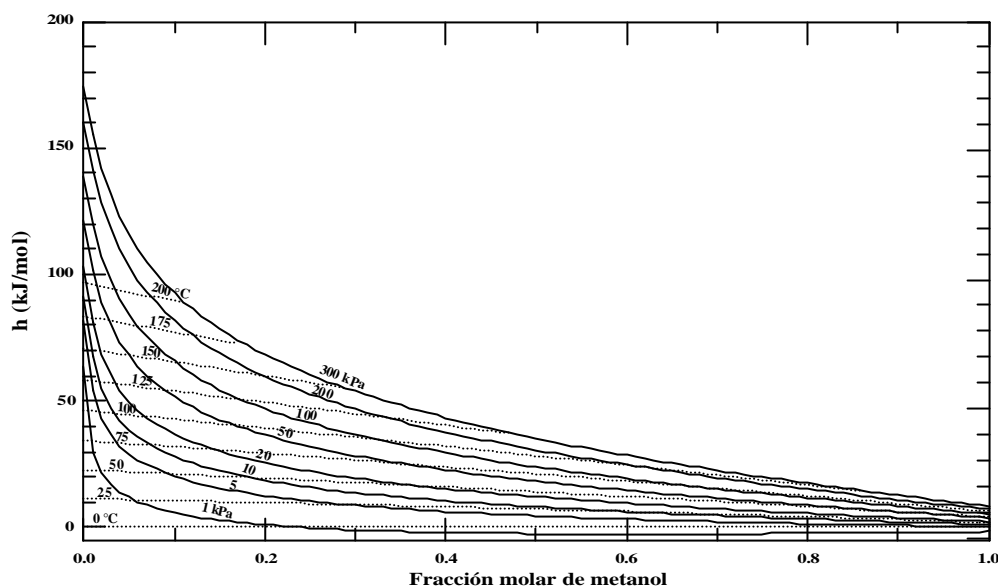


Fig.B. 2 Diagrama entalpía-concentración-temperatura-presión de las soluciones de MeOH-TEGDME

Para realizar tanto la simulación termodinámica del ciclo de absorción/compresión del prototipo, como el dimensionado de cada uno de los componentes que lo forman, se ha elaborado un módulo de cálculo en lenguaje Fortran 90. Mediante este módulo de cálculo y partiendo de los datos de entrada y de las hipótesis consideradas, las variables del ciclo pueden obtenerse directamente o mediante procesos iterativos sin necesidad de plantear ni resolver sistemas de ecuaciones globales. Las ecuaciones que aparecen en el módulo de cálculo son los balances de materia totales y parciales y los balances de energía planteados en cada componente del ciclo.

Para poder plantear estos balances es necesario conocer las propiedades termofísicas de cada uno de los compuestos puros y de la mezcla. Dicha propiedades han sido evaluadas a partir de la base de datos confeccionada por Medrano (1998). Esta base de datos escrita en FORTRAN 90 está concebida como un módulo externo que puede intercambiar información con otros paquetes de simulación de los ciclos y sus componentes. La estructura de esta base de datos la conforma los procedimientos genéricos que se han definido para las propiedades termofísicas de mezclas. Estos procedimientos permiten evitar la duplicidad de módulos de simulación de un determinado ciclo, cuya única diferencia sería las llamadas a las propiedades termofísicas del sistema de trabajo escogido. Para construir dichos procedimientos se ha incluido en los argumentos de las llamadas genéricas una variable que, en función de su valor, identifica cada mezcla. A título de ejemplo se presenta a continuación la función genérica que calcula la presión de vapor de una mezcla: VAPOUR_PRESSURE(X,T,IND).

Los dos primeros argumentos de la función X y T son, respectivamente, la composición molar en fase líquida del componente más volátil, y la temperatura de la mezcla. El tercero es un código identificativo de la mezcla de trabajo.

Los procedimientos genéricos realizan llamadas a procedimientos específicos a una mezcla en particular y, a su vez, éstos utilizan procedimientos específicos de los componentes puros.

Estos procedimientos (tanto genéricos como específicos) se pueden clasificar en dos grupos, los explícitos y los auxiliares o implícitos.

Los procedimientos explícitos constituyen la mayoría de las funciones y subrutinas de la base de datos. Son el resultado de la traslación de una correlación experimental o un método estimativo de una propiedad termofísica a una función o subrutina, que permite calcular el valor de dicha propiedad a partir de las variables de entrada de una manera explícita, es decir, sin realizar ningún cálculo iterativo. Un ejemplo de este primer grupo es la función que calcula la presión de vapor de un componente puro a una temperatura aplicando una correlación experimental: `PV_NSP(T)`, donde NSP es el nombre de la sustancia pura (MeOH, TFE, TEGDME, etc.). Otro ejemplo es el cálculo de la presión y la fracción molar de la fase vapor a partir de la temperatura y la fracción molar de la fase líquida utilizando el modelo NRTL (Non Random Two Liquid): `VAPOUR_PRESSURE(X,T,IND)` y `YE(X,T,IND)`.

Los procedimientos implícitos o auxiliares son aquellos que transforman variables independientes en dependientes llevando a cabo un proceso iterativo sobre un procedimiento explícito. Así, por ejemplo, son procedimientos auxiliares la función que calcula la temperatura de ebullición de una sustancia pura en función de la presión (`TB_NSP(P)`) iterando sobre de la presión de vapor o la función que encuentra la temperatura de burbuja de una mezcla a partir de su fracción molar en la fase líquida y de la presión total (`BOILING_POINT (X, P, IND)`).

Las tablas B.2 y B.3 muestran los procedimientos explícitos e implícitos más importantes implementados en la base de datos para las sustancias puras y las mezclas, respectivamente.

<i>NOMBRE</i>	<i>INPUTS</i>	<i>OUTPUTS</i>	<i>DESCRIPCIÓN</i>
<i>PV_NSP¹ (T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>P(kPa)</i>	<i>Calcula la presión de vapor.</i>
<i>LENTHALPY_NSP(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>h_l(kJ/kg)</i>	<i>Calcula la entalpía del líquido saturado.</i>
<i>LHEAT_NSP(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>Δ_v(kJ/kg)</i>	<i>Calcula el calor latente de vaporización.</i>
<i>VENTHALPY_NSP(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>h_v(kJ/kg)</i>	<i>Calcula la entalpía del vapor saturado.</i>
<i>SUPERHEATED_HV_NSP(T,P)</i>	<i>T(K), P(kPa)</i>	<i>h_v(kJ/kg)</i>	<i>Calcula la entalpía de vapor recalentado.</i>
<i>LDENSITY_NSP(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>ρ_l(kg/m³)</i>	<i>Calcula la densidad del líquido.</i>
<i>DIN_VISC_NSP_L(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>μ(Pa·s)</i>	<i>Calcula la viscosidad dinámica del líquido.</i>
<i>KIN_VIS_NSP_L(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>ν(m²/s)</i>	<i>Calcula la viscosidad cinemática del líquido.</i>
<i>DIN_VISC_NSP_V(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>μ(Pa·s)</i>	<i>Calcula la viscosidad dinámica del vapor.</i>
<i>COND_NSP_L(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>k_l(W/mK)</i>	<i>Calcula la conductividad térmica del líquido.</i>
<i>COND_NSP_V(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>k_v(W/mK)</i>	<i>Calcula la conductividad térmica del vapor.</i>
<i>SURF_TENS_NSP(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>σ(N/m)</i>	<i>Calcula la tensión superficial del líquido.</i>
<i>CP_0_NSP_V(T)</i>	<i>T(K)</i>	<i>c_p^o(kJ/kmol·K)</i>	<i>Calcula el calor molar de gas ideal.</i>
<i>TB_NSP(P)</i>	<i>P(kPa)</i>	<i>T(K)</i>	<i>Calcula la temperatura de ebullición.</i>

Tabla B-2: Lista de procedimientos implementados en el módulo de sustancias puras

¹ NSP: *Nombre de la Sustancia Pura (MeOH, TFE o TEGDME)*

(□: procedimientos explícitos; ■: procedimientos implícitos).

NOMBRE	INPUTS	OUTPUTS	DESCRIPCIÓN
VAPOUR_PRESSURE(X,T,IND ¹)	X,T(K), IND	P(kPa)	Calcula la presión de vapor de una mezcla con fracción molar líquida y temperatura conocidas.
LIQUID_ENTHALPY(X,T,IND)	X,T(K), IND	h_l (kJ/kg)	Calcula la entalpía líquida de equilibrio de una mezcla con fracción molar líquida y temperatura conocidas.
VAPOUR_ENTHALPY(Y,T,IND)	Y,T(K), IND	h_v (kJ/kg)	Calcula la entalpía de vapor saturado con fracción molar vapor y temperatura conocidas.
LIQUID_DENSITY(X,T,IND)	X,T(K), IND	ρ_l (kg/m ³)	Calcula la densidad de una mezcla saturada con fracción molar líquida y temperatura conocidas.
MASS_FRACTION(Z,IND)	Z,IND	W	Calcula la fracción másica de una mezcla de fracción molar conocida.
M_WEIGHT(IND)	IND	M	Calcula el peso molecular del refrigerante en la mezcla.
M_WEIGHT2(IND)	IND	M	Calcula el peso molecular del absorbente en la mezcla.
QUALITY1(Z,T,P,IND)	Z,T(K),P(kPa),IND	Q	Calcula el título de vapor de una mezcla con fracción molar total, temperatura y presión conocidas.
ENTHALPY1(Z,T,P,IND)	Z,T(K),P(kPa),IND	h(kJ/kg)	Calcula la entalpía de la mezcla con fracción molar total, temperatura y presión conocidas.
XE(T,P,IND)	T(K),P(kPa), IND	X	Calcula la fracción molar líquida en equilibrio de una mezcla con presión total y temperatura conocidas.
YE(X,T,IND)	X,T(K), IND	Y	Calcula la fracción molar vapor en equilibrio de una mezcla con fracción molar líquida y temperatura conocidas.
BOILING_POINT (X,P,IND)	X,P(kPa), IND	T(K)	Calcula la temperatura de burbuja de una mezcla con fracción molar líquida y presión total conocidas.
DEW_POINT(P,Y,IND)	P(kPa), Y,IND	T(K)	Calcula la temperatura de rocío de una mezcla de fracción molar vapor y presión total conocidas.
TEMPERATURE(Z,P,H,IND)	Z,P(kPa),H(kJ/kg),IND	T(K)	Calcula la temperatura de una mezcla con la fracción molar total, la presión y la temperatura conocida.
QUALITY2(Z,P,H,IND)	Z,P(kPa),H(kJ/kg),IND	Q	Calcula el título de vapor de una mezcla con la fracción molar total, presión y entalpía conocidas.
ENTHALPY2(Z,T,Q,IND)	Z,T(K),Q,IND	H(kJ/kg)	Calcula la entalpía de la mezcla con la fracción molar total, la temperatura y el título de vapor conocidos.
PRESSURE(Z,T,Q,IND)	Z,T(K),Q,IND	P(kPa)	Calcula la presión de la mezcla con la fracción molar total, la temperatura y el título de vapor conocidos.

Tabla B-3: Lista de procedimientos genéricos implementados en el módulo de mezclas

¹ IND: Código para la selección del fluido de trabajo

(□: procedimientos explícitos; ■: procedimientos implícitos)

