



Mondragon **Goi Eskola**
Unibertsitatea **Politeknikoa**

DESARROLLO DE LA METODOLOGÍA
NUMÉRICA PARA EL ANÁLISIS DEL
COMPORTAMIENTO DE
ABSORBEDORES *FALLING FILM* DE
LiBr-H₂O

PERU FERNANDEZ ARROIABE TXAPARTEGI

2021EKO MAIATZAK 3

DESARROLLO DE LA METODOLOGÍA NUMÉRICA PARA EL
ANÁLISIS DEL COMPORTAMIENTO DE ABSORBEDORES *FALLING*
FILM DE LiBr-H₂O

Tesis presentado en
MONDRAGON GOI ESKOLA POLITEKNIKOA
para la obtención del título de

DOCTOR EN INGENIERÍA APLICADA

Presentado por
PERU FERNANDEZ ARROIABE TXAPARTEGI
Dirigida por
DR. M.MOUNIR BOU-ALI SAIDI
DR. MANEX MARTINEZ-AGIRRE

ARRASATEN, 2021EKO MAIATZAK 3

Esta obra se distribuye bajo una licencia Creative Commons
Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional (CC BY-NC-ND 4.0)



ÍNDICE GENERAL

AGRADECIMIENTOS	XVIII
LABURPENA	XX
RESUMEN	XXI
ABSTRACT	XXII
1 INTRODUCCIÓN	1
1.1 Transformadores de calor por absorción	1
1.2 Absorbedores	7
1.3 Estudios experimentales de absorbedores <i>falling film</i>	10
1.3.1 Estudios experimentales orientados al análisis de la transferencia de calor y masa	11
Tubos horizontales	11
Tubos verticales	13
Placas planas	14
Diseños específicos	15
1.3.2 Estudios experimentales orientados al análisis de la hidrodinámica y el espesor del film	15
Hidrodinámica	15
Espesor del film	21
Área de mojado	22
1.4 Transferencia de calor y masa en la interface líquido-vapor	24
1.4.1 Ley de Fick	26
1.4.2 Teorías de coeficientes de transferencia de masa	28
Teoría del film	28
Teoría de Penetración de Higbie	29
1.5 Estudios analíticos y numéricos de absorbedores <i>falling film heat exchangers</i>	32
1.5.1 Modelos analíticos y numéricos de absorbedores desarrollados por diferentes autores	33
1.5.2 Modelos numéricos de absorbedores basados en el <i>Finite Volume Method</i>	34
Estudios de la transferencia de calor y masa	34
Estudio de la hidrodinámica y el espesor del film	36
Estudios de <i>falling film heat exchangers</i> que consideran el ángulo de contacto	37
2 MOTIVACIÓN Y OBJETIVOS	41
2.1 Motivación	41

2.2	Objetivos	42
3	METODOLOGÍA	43
3.1	Introducción	43
3.2	Ecuaciones gobernantes	43
3.3	Discretización de las ecuaciones	44
3.4	Determinación de las variables de la cara	45
3.5	Evaluación de los gradientes	45
3.6	Acoplamiento presión-velocidad	45
3.7	Discretización espacial	46
3.8	Discretización temporal	46
4	ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DE LA MOJABILIDAD EN <i>FALLING FILM HEAT EXCHANGERS</i> DE TUBOS HORIZONTALES	47
4.1	Introducción	47
4.2	Modelo numérico	49
4.2.1	Dominio computacional, condiciones de contorno y mallado	49
4.2.2	Ecuaciones gobernantes	50
4.2.3	Propiedades de los fluidos	51
4.2.4	Independencia de malla	52
4.3	Resultados y discusión	53
4.3.1	Comparación entre los modelos de 2D y 3D	53
4.3.2	Validación del modelo numérico	54
4.3.3	Hidrodinámica del <i>film</i>	56
4.3.4	Ratio de mojado de la solución LiBr – H ₂ O	60
4.3.5	Espesor del <i>film</i> de la solución	65
4.4	Conclusiones	67
5	METODOLOGÍA PARA EL ANÁLISIS DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR Y MASA EN ABSORBEDORES <i>FALLING FILM HEAT EXCHANGERS</i>	69
5.1	Introducción	69
5.2	Modelo numérico	71
5.2.1	Introducción	71
5.2.2	Dominio computacional, condiciones de contorno y discretización	72
5.2.3	Condiciones de operación	74
5.2.4	Propiedades termofísicas	76
5.2.5	Ecuaciones gobernantes	77
5.2.6	Estimación del flujo másico local de la interface	78
	Ley de Fick	79
	Ley de Higbie	80
5.2.7	Cálculo de las condiciones de equilibrio de la interface	81
5.2.8	Modelización de la interface	82
	Interface de una sola celda	83
	Interface en varias celdas	88
5.2.9	Discretización	90
5.3	Resultados y discusión	90
5.3.1	Independencia de malla	91
	Fick 1D	92
	Higbie 1D	93
5.3.2	Comparación con los modelos de la bibliografía	95

5.3.3	Análisis de las diferentes metodologías para modelar absorbedores de LiBr – H ₂ O	97
	Consideración y estimación de la absorción	97
	Modelización de la interface	101
5.3.4	Análisis de la influencia de las condiciones de operación en la absorción	102
	Efecto del número de Reynolds	103
	Efecto de la transferencia de calor del agua de enfriamiento	105
	Efecto de la fracción másica de LiBr inicial de la solución	106
5.3.5	Comparación con los resultados experimentales	107
5.4	Conclusiones	110
6	ANÁLISIS DEL EFECTO DE LA TERMODIFUSIÓN EN ABSORBEDORES <i>FALLING FILM HEAT EXCHANGERS</i>	113
6.1	Introducción	113
6.2	Modelo numérico	114
6.2.1	Dominio computacional, condiciones de contorno y discretización.	114
6.2.2	Condiciones de operación y propiedades termofísicas	115
6.2.3	Ecuaciones gobernantes	116
6.2.4	Metodología	116
6.3	Resultados y discusión	117
6.3.1	Análisis de la termodifusión	117
6.3.2	Análisis de la influencia de las condiciones de operación en la absorción	121
	Efecto del coeficiente de termodifusión	121
	Efecto del número de Reynolds	124
	Efecto de la transferencia de calor del agua de enfriamiento	128
	Efecto de la fracción másica de LiBr inicial de la solución	129
6.4	Conclusiones	130
7	CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS	133
7.1	Conclusiones	133
7.2	Líneas futuras	134
	PUBLICACIONES	136
	BIBLIOGRAFÍA	159
	ANEXOS	159
A	PROPIEDADES TERMOFÍSICAS	161
B	CÁLCULO DE LAS CONDICIONES DE EQUILIBRIO DE LA INTERFACE	167

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1	Potencial de la energía residual y potencial de Carnot para diferentes sectores [1].	1
1.2	Comparación del potencial de energía residual industrial entre España y Euskadi y el porcentaje del consumo de combustible (2001) [3].	2
1.3	Tecnologías de recuperación de calor residual [4].	3
1.4	Temperatura de calor residual.	3
1.5	Principio de operación de AHTs [8]	5
1.6	Diagrama de un AHT de simple efecto [19]	6
1.7	Configuraciones de absorbedores de tipo FFHX.	7
1.8	Configuraciones de absorbedores.	8
1.9	Absorbedor FFHX de tubos horizontales.	9
1.10	Esquema de la transferencia de calor y masa en el proceso de absorción.	9
1.11	Tubo floral aleteado [43].	12
1.12	Diferentes configuraciones de absorbedores	16
1.13	Modos de flujo observados para glicol-etileno a) gota; b) gota-columna; c) columnas en línea; d) columnas escalonadas; e) columna-lámina f) lámina [63].	17
1.14	Fotografías de los tubos con superficies mejoradas ensayados por Roques et al. [65].	18
1.15	Patrones de flujo observados: (a) lámina continua (<i>whole sheet</i>); (b) lámina rota-columna (<i>torn sheet-jet</i>); (c) columna (<i>jet</i>); (d) columna-gota (<i>jet-droplet</i>); (e) gota (<i>droplet</i>) y (f) lámina rota (<i>torn-sheet</i>) [72].	19
1.16	Progresión de la gota en el modo de flujo gota [74]: formación (a-b); caída (c-f); impacto (f-h), rotura del cuello y repliegue (e-j).	19
1.17	Hidrodinámica del flujo para diferentes caudales.	20
1.18	Evolución del espesor del film a lo largo de la dirección tangencial [79].	21
1.19	Mojabilidad en diferentes configuraciones y condiciones de trabajo de <i>falling films</i>	23
1.20	Características de la gota (a) Impacto de la gota. (b) Movimiento axial. (c) Interacción entre gotas [91].	24
1.21	Experimento simple para la difusión [117].	26
1.22	Difusión estacionaria a través de un film [117].	27
1.23	Esquema de la interface del film para la transferencia de masa.	28

1.24	Teoría de penetración de Higbie.	29
1.25	Análisis de la mojabilidad en placas planas [183].	37
1.26	Comparación entre la interface obtenida por medio de modelos numéricos y en los ensayos experimentales para diferentes ángulos de contacto [109].	38
4.1	Dominio computacional, condiciones de contorno y la malla base del modelo.	50
4.2	Ángulos de contacto del agua y de la solución LiBr – H ₂ O ($w_{\text{LiBr}} = 0.55$) en diferentes superficies: cobre, aluminio, acero inoxidable y PT-FE [174].	52
4.3	Ratio de mojado (WR) del distribuidor en función del tiempo para diferentes mallas, $Re = 7$ y $\Psi = 0^\circ$	53
4.4	Comparación del ratio de mojado (WR) en el tubo central en función del tiempo para los modelos bidimensional (2D) y tridimensional (3D) cuando $Re = 53$ y para $\Psi = 0^\circ$ y $\Psi = 60^\circ$	54
4.5	Distribución del espesor del <i>film</i> en función del ángulo circunferencial θ para diferentes números de Reynolds cuando $\Psi = 0^\circ$: comparación entre los resultados numéricos y las soluciones de Nusselt [78] y Ji et al. [189].	55
4.6	Hidrodinámica transitoria del <i>film</i> de la solución LiBr – H ₂ O cuando $Re = 7$ para diferentes valores del ángulo de contacto.	57
4.7	Hidrodinámica del <i>film</i> de la solución LiBr – H ₂ O cuando $Re = 24$ para diferentes valores del ángulo de contacto	58
4.8	Hidrodinámica del <i>film</i> de la solución LiBr – H ₂ O cuando $Re = 53$ para diferentes valores del ángulo de contacto	59
4.9	Ratio de mojado para el tubo central en función del tiempo para diferentes valores de Re y Ψ	60
4.10	Ratio de mojado promedio del tubo central para diferentes valores de Re y Ψ	61
4.11	Resultados del flujo mínimo de mojado en función del ángulo de contacto y las isolíneas de flujo mínimo adimensional calculados con los números de Reynolds de $Re = 7$, $Re = 24$ y $Re = 53$	63
4.12	Hidrodinámica del <i>film</i> para las condiciones de operación mostradas en la Tabla 4.3.	64
4.13	Evolución temporal del espesor en el plano medio cuando $Re = 53$ para diferentes ángulos de contacto, así como el valor estimado del espesor mediante la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)).	65
4.14	Espesor del <i>film</i> del plano medio en la dirección axial para diferentes ángulos de contacto y el espesor del <i>film</i> estimado por la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)).	67
5.1	Diferentes métodos de modelización [183].	70
5.2	Modelo numérico del tubo vertical.	72
5.3	Elemento diferencial del <i>falling film</i>	79
5.4	Función de equilibrio y función de equilibrio lineal de la mezcla LiBr – H ₂ O para $p = 1$ kPa.	83
5.5	Modelización de la interface mediante una sola celda utilizada en modelos monofásicos.	83

5.6	Esquema de la modelización de la interface en una sola celda utilizada en el presente estudio.	84
5.7	Esquema de la modelización de la interface en varias celdas empleada en el presente estudio.	88
5.8	Efecto de malla en la dirección transversal para $Re = 290$ empleando el método Fick 1D imponiendo la fracción másica sobre:	92
5.9	Efecto de malla en la dirección transversal para $Re = 50$ empleando el método Fick 1D imponiendo la fracción másica sobre:	93
5.10	Flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal empleando el método Fick 1D imponiendo la fracción másica para diferentes número de celdas en la dirección longitudinal.	94
5.11	Flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal para diferentes mallas empleando el método Fick 1D sin imponer para $Re = 290$	94
5.12	Flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal para diferentes número de celdas empleando el método de Higbie 1D.	95
5.13	Comparación entre el presente trabajo y dos estudios numéricos de la literatura:	96
5.14	Comparación del flujo de masa absorbido localmente a lo largo de la longitud del flujo para diferentes metodologías y números de Reynolds:	98
5.15	Diferentes perfiles de fracción másica de LiBr para diferentes metodologías cuando $Re = 50$	99
5.16	Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal con el método Higbie 1D y Higbie 2D sin imponer la concentración cuando $Re = 50$	101
5.17	Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal con el método Fick 1D con 2 diferentes formas de modelar la interface.	102
5.18	Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal con el método Higbie 1D con 2 diferentes formas de modelar la interface cuando $Re = 290$	103
5.19	Resultados globales obtenidos con el modelo numérico para diferentes números de Reynolds y metodologías.	104
5.20	Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal para diferentes números de Reynolds obtenidos con diferentes metodologías.	104
5.21	Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal para $Re = 50$ y $Re = 290$ y diferentes coeficientes de convección del agua de enfriamiento.	105
5.22	Resultados de flujo local de masa absorbido para diferentes fracciones másicas de entrada ($w_{in, LiBr} = 0.6$ y $w_{in, LiBr} = 0.58$) y números de Reynolds ($Re = 50$ y $Re = 290$), obtenidos utilizando dos diferentes métodos.	106
5.23	Comparación del flujo de masa de vapor absorbido entre resultados experimentales del trabajo de Medrano et al. [51] y los resultados numéricos.	108

5.24	Comparación del flujo de masa de vapor absorbido entre resultados experimentales del trabajo de Takamatsu et al. [52] y los resultados numéricos, para dos diferentes condiciones de entrada de temperatura del agua.	108
5.25	Comparación entre resultados experimentales del trabajo de García-Rivera et al. [53] y los resultados numéricos.	109
6.1	Efecto de la termodifusión en el flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal para las dos metodologías escogidas cuando $Re = 50$	118
6.2	Efecto de la termodifusión en el flujo de masa absorbido total (\dot{m}_{abs}), flujo de masa absorbido originado por el gradiente de fracción másica ($\dot{m}_{abs,D}$) y el flujo de masa absorbido originado por el gradiente de temperaturas (\dot{m}_{abs,D_T}) a lo largo de la dirección longitudinal cuando $Re = 50$ para diferentes métodos:	119
6.3	Esquema del fenómeno de transporte en un <i>falling film</i> vertical con la mezcla LiBr – H ₂ O para:	120
6.4	Flujo de masa de vapor absorbido en la interface para $Re = 50$ y para diferentes valores de D_T	121
6.5	Influencia del coeficiente de difusión térmica D_T cuando $Re = 50$:122	
6.6	Perfil de la fracción másica de LiBr cuando $x = 0.5$ m a diferentes D_T cuando $Re = 50$	122
6.7	Influencia del coeficiente de termodifusión en el flujo de calor promedio absorbido por el agua de enfriamiento cuando $Re = 50$:123	
6.8	Flujo local de vapor total absorbido en la interface a lo largo de la dirección longitudinal para diferentes valores de Re y D_T	124
6.9	Incremento en porcentaje del flujo local de vapor total promedio absorbido para diferentes valores de Re cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11}$ ($m^2s^{-1}K^{-1}$).	125
6.10	Perfil de la fracción másica de LiBr a lo largo de la dirección transversal del <i>film</i> para diferentes longitudes de flujo.	126
6.11	Perfil de la temperatura a lo largo de la dirección transversal del <i>film</i>	127
6.12	Incremento en porcentaje del flujo de calor promedio absorbido por el agua de enfriamiento para diferentes valores de Re cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11}$ ($m^2s^{-1}K^{-1}$).	128
6.13	Incremento en porcentaje del flujo de masa de vapor promedio absorbido para diferentes valores de h_{H_2O} cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11}$ ($m^2s^{-1}K^{-1}$) y para $Re = 50$ y 290.	129
6.14	Flujo local de masa absorbido para diferentes fracciones másicas de la mezcla inicial ($w_{in,LiBr} = 0.6$ y $w_{in,LiBr} = 0.58$) con y sin coeficientes de termodifusión.	129
A.1	Valores del calor de absorción h_{abs} en función de la temperatura para diferentes fracciones másicas cuando $p = 1kPa$ calculados mediante la ecuación (A.6).	164
A.2	Coefficientes y funciones ajustadas y residuales en función de la fracción másica para el coeficiente A.	165

A.3 Coeficientes y funciones ajustadas y residuales en función de la fracción másica para el coeficiente A. 165

ÍNDICE DE TABLAS

1.1	Condiciones geométricas de los absorbedores estudiados en la bibliografía	13
1.2	Condiciones de operación de absorbedores empleados en la bibliografía.	13
1.3	Presión de trabajo de absorbedores.	14
1.4	Resultados obtenidos en la bibliografía.	14
1.5	Número de Reynolds y Galileo modificado para los diferentes ensayos experimentales de la bibliografía orientados al estudio hidrodinámico.	20
1.6	Número de Reynolds del film de los diferentes ensayos experimentales orientados a la estimación del espesor.	22
4.1	Propiedades termofísicas de la solución LiBr – H ₂ O y el vapor de agua.	52
4.2	Valores de MWCA estimados con las Ecuaciones propuestas por El Genk y Saber [208] y los calculados con el modelo numérico propuesto en el trabajo de esta tesis doctoral	63
4.3	Número de Reynolds mínimo correspondiente a diferentes ángulos de contacto	64
5.1	Condiciones geométricas y de operación del estudio de Yoon et al. [29] y Mittermaier et al [102].	74
5.2	Condiciones geométricas y de operación de los estudios experimentales de tubos verticales de la bibliografía [51–53].	75
5.3	Fluido de trabajo, material del tubo y número de Reynolds mínimo reportado en el trabajo de García-Rivera et al. [53, 215].	75
5.4	Número de Reynolds y el correspondiente coeficiente de convección del agua de enfriamiento calculado para los trabajos experimentales de la bibliografía.	76
5.5	Condiciones de trabajo utilizadas en el análisis de la independencia de malla.	91
5.6	Requerimientos de número de malla para los métodos y Re estudiados.	95
A.1	Valores de los coeficientes A para la estimación de la densidad (Ecuación (A.1)) [217].	162
A.2	Valores de los coeficientes B para la estimación de la viscosidad dinámica (Ecuación (A.2)) [217].	162

A.3	Valores de los coeficientes B para la estimación de la conductividad térmica (Ecuación (A.3)) [217].	162
A.4	Valores de los coeficientes para la estimación de la entalpía de la solución LiBr – H ₂ O (h_l) (Ecuación (A.3)) [220].	163
A.5	Valores de los coeficientes A y B de la Ecuación A.9	164
B.1	Coefficientes del vapor de agua puro utilizadas en las Ecuaciones (B.2) y (B.3) [230].	168

NOMENCLATURA

Símbolos griegos

α	Fracción volumétrica de la celda
Γ	Flujo de masa por unidad de longitud de la solución / ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)
Γ_{\min}^*	Flujo de masa mínimo adimensional por unidad de longitud
Δ_{\min}	Espesor adimensional correspondiente a Γ_{\min}^*
δ	Espesor del film / (m)
η	Rendimiento
θ	Ángulo circunferencial
κ	Coefficiente de transferencia de masa / (m s^{-1})
μ	Viscosidad dinámica / ($\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$)
Ψ	Ángulo de contacto
μ^*	Potencial químico / (kJ kmol^{-1})
ρ	Densidad / (kg m^{-3})
σ	Coefficiente de tensión superficial / (N m^{-1})
ϕ	Diámetro (m) / Ángulo de inclinación de la placa / Variable
χ	Curvatura local de la superficie (m^{-1})
φ	Variable escalar

Subíndices / Superíndices

in	Entrada
out	Salida
eq	Equivalente
<i>c</i>	Relativo a la celda computacional
<i>f</i>	Relativo a la cara de la celda computacional
<i>n</i>	Relativo a la fase
if	Interface
avg	<i>Average</i> , promedio
v	Vapor
tan	Tangencial
l	Líquido
abs	Absorbido
H	<i>High</i> , alta
in	Entrada
L	<i>Low</i> , baja
max	Máximo

Símbolos latinos

A	Área / (m^2)
A_{if}	Densidad de área interfacial / (m^{-1})
c	Concentración ($mol\ m^{-3}$)
D	Coefficiente de difusión o difusividad / ($m^2\ s^{-1}$)
D_0	Coefficiente de difusión de una disolución infinita / ($m^2\ s^{-1}$)
D_T	Coefficiente de termodifusión / ($m^2\ s^{-1}\ K^{-1}$)
d_{gota}	Diámetro de la gota (m)
F	Término fuente de fuerzas externas / ($N\ m^{-3}$)
F_σ	Término fuente de las fuerzas de tensión superficial / ($N\ m^{-3}$)
Ga_m	Número de Galileo modificado
g	Gravedad / ($m\ s^{-2}$)
H_2O	Agua
h_{abs}	Calor de absorción / ($kJ\ kg^{-1}$)
h_{H_2O}	Coefficiente de convección del agua de enfriamiento / ($W\ m^{-2}\ K^{-1}$)
h_{sol}	Coefficiente de transferencia de calor del lado da la solución / ($W\ m^{-2}\ K^{-1}$)
h_i	Entalpía de especies / ($kJ\ kg^{-1}$)
J_{H_2O}	Flujo de masa difusivo transportado en el interior del film / ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$)
J	Flujo de masa difusivo / ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$)
L	Longitud del tubo / (m)
L_c	Longitud característica / (m)
$LiBr$	Bromuro de litio
\dot{m}	Flujo de masa del fluido / ($kg\ s^{-1}$)
\dot{m}_{abs}	Flujo de masa absorbido / ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$)
$\dot{m}_{abs,D}$	Flujo de masa absorbido resultado de la diferencia de fracción másica / ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$)
\dot{m}_{abs,D_T}	Flujo de masa absorbido resultado de la diferencia de temperatura / ($kg\ m^{-2}\ s^{-1}$)
$N_{longitudinal}$	Número de elementos dirección longitudinal
$N_{transversal}$	Número de elementos dirección transversal
n	Coordenada normal / (m)
\hat{n}_W	Vector unitario normal
\hat{t}_W	Vector unitario tangencial
\hat{n}	Divergencia normal unitaria
Pr	Número de Prandtl
p	Presión / (kPa)
\dot{q}_{abs}	Flujo de calor absorbido, / ($W\ m^{-2}$)
$\dot{q}_{k,solucion}$	Flujo de calor transferido por conducción / ($W\ m^{-2}$)
Re	Número de Reynolds
Re_{min}	Número de Reynolds mínimo necesario para conseguir la mojabilidad completa
Re_0	Número de Reynolds crítico
Re_t	Número de Reynolds de transición
r	Vector de desplazamiento / (m)
S	Término fuente
$S_{l,n}$	Fuente de generación de la especie líquida / ($kg\ m^{-3}$)
S_Q	Término fuente de energía / ($W\ m^{-3}$)
S_{α_n}	Término fuente de masa ($kg\ m^{-3}$)
s	Distancia entre tubos / espesor de la malla refinada (m)
T	Temperatura
t	Tiempo / (s)
t_c	Tiempo de contacto / (s)
v	Velocidad / ($m\ s^{-1}$)
w_0	Fracción másica inicial
w	Fracción másica

Abreviaturas

E,e	<i>East</i> , este
P	Relativo a la celda computacional de estudio
Nu	Nusselt
MWCA	<i>Maximum wetting contact angle</i> , ángulo de contacto máximo para mojar completamente
W	<i>wall</i> Relativa a la pared / <i>West</i> , oeste
MLFT	<i>Minimum liquid film thickness</i> , espesor del film mínimo
MWR	<i>Minimum wetting ratio</i> , ratio de mojado mínimo
1D	Unidimensional
2D	Bidimensional
3D	Tridimensional
UDF	<i>User defined function</i> , Función definida por el usuario
FVM	<i>Finite volume method</i> , método de volúmenes finitos
VOF	<i>Volume of fluid</i>
CSF	<i>Continuum surface force model</i>
erf	<i>Error function</i> , función error
AHT	<i>Absorption heat transformer</i> , transformador de calor
COP	Coefficiente de operación
FFHX	<i>Falling film heat exchanger</i> , intercambiador de calor de película descendente
HT	<i>High temperature</i> , alta temperatura
IWH	<i>Industrial waste heat</i> , calor residual industrial
LT	<i>Low temperature</i> , baja temperatura
MT	<i>Medium temperature</i> , temperatura media
TFE	Trifluoroetanol
WR	<i>Wetting ratio</i> , ratio de mojado

Itxaso, Ekain, Argia, Edur eta nire familia osoari.

ESKERRAK

Eskerrik asko Itxaso bihotz bihotzez, urte hauetan zehar izan duzun pazientziagatik eta une zailetan eman didazun bultzadengatik. Zure laguntzarik gabe ezin izango nuke lan hau aurrera atera. Eskerrak baita tartean jaio zareten Ekain, Argia eta Edurri, zuen alaitasuna oso garrantzitsua izan da momentu txarrak gainditzeko.

Nola ez, eskerrak zuei ere, aita eta ama. Zuek emandako hezkuntza eta balorerik gabe ez nintzateke honaino iritsiko. Ezin aipatu gabe utzi ni lanean nengoen bitartean familian lagundu duzuen guztioi, Belen, Joxe, Eñaut,... Zuek gabe familia giroa mantentzea ezinezkoa litzateke. Eskerrak baita Begoña, Jose Luis eta Josuri, Arrasaten nengoen bitartean emandako languntzagatik. Aitona, amona, hau zuentzat da.

Eskerrik asko Mounir eta Manexi ere. Mila esker ikerketa munduak duen edertasuna transmititzeagatik. Tesi hau egiteak begiak ireki dizkit, eta gauzak beste ikuspuntu batetik begiratzea ahalbidetu dit. Bizitza profesionalean berriz jaiotzea bezala izan da. Pazientzia handia behar izan duzue ni bidetik ez ateratzeko eta mila esker nire ateraldiak eutsi izanagatik. Asko ikasi dut zuekin urte hauetan eta saiatuko naiz zuek transmititutako gogo eta ilusioa hurrengoei transmititzen. Kostako zait tesik doktoral bateko tempoak zuek bezain maisuki maneiatzea!

Ezin utzi eskertu gabe Angel, eskolan lan egiteko aukera emateagatik eta nigan konfidantza jartzeagatik, baita arloko besteei ere nigan egindako apostuagatik. Zorte handia dut benetan gustoko dudan lanean aritzea eta, egia esan, arloan dugun giro paregabearen gozada bat da zuekin lan egitea.

Eskerrik asko baita Tecnaliako Energia efizientzia eta plangintza arlokoei eta, bereziki, Asierri. Zuri esker hasi nintzen tesia egiten eta asko eskertzen dizut bidelagun izana urte hauetan zehar. Zure motibazioa eta teknologian duzun jakintzak asko lagundu naute.

Azkenik, eskerrak MGEP-i doktoretza tesik haur egiteko emandako laguntza eta sostenguagatik.

DECLARACIÓN DE ORIGINALIDAD

Yo Peru Fernandez Arroiabe Txapartegi declaro que este Trabajo de Tesis de tesis doctoral es original, fruto de mi trabajo personal, y que no ha sido previamente presentado para obtener otro título o calificación profesional. Las ideas, formulaciones, imágenes, ilustraciones tomadas de fuentes ajenas han sido debidamente citadas y referenciadas.

Arrasate, 2021eko Maiatzak 3

Peru Fernandez Arroiabe Txapartegi

LABURPENA

Doktorego tesi honetan LiBr – H₂O nahastearekin xurgapen teknologietan lan egiten duten beheranzko film (*falling film*) motako xurgatzaileen portaeran lan baldintzek eta garraio propietate termofisikoek duten eragina aztertu da. Horretarako, hainbat zenbakizko metodologia definitu eta ebaluatu dira, bolumen finituen metodoan oinarrituta (ingelesez *Finite Volume Method, FVM*).

Lan honi esker, bustigarritasun-propietateek hodi horizontaletako *falling film* fluxuaren portaera hidrodinamikoan duten eragina zehaztu ahal izan da, modelo iragankorren bidez. Era berean, 2D eta 3D ereduak aplikagarritasun-maila aztertu da, eta emaitzak bibliografiako lanekin alderatu dira. Modelo hauek erabiliz, fluxuaren portaera iragankorra aztertu da, baita bustitze-eremuaren bilakaera eta filmaren lodiera ere, ukipen-angelu desberdinetarako. Emaitzek erakutsi dute bustigarritasun-propietateek eragin handia dutela parametro horietan eta, beraz, kontuan hartu behar direla hodi horizontal motako *falling film* azterketetan.

Honez gain, bibliografian erabilitako formulazio matematikoak eta *falling film* erako xurgatzaileen masa eta bero-transferentzia aztertzeko metodologia ezberdinak alderatu dira, xurgapena aukeratutako metodologiaren arabera aldatzen dela frogatuz. Hautatutako metodoak Fick eta Higbie izan dira, masa frakzioa inposatu gabe, eta faseartean norabide bakarreko difusioa gertatzen dela suposatuz. Era berean, modeloaren emaitzak lan esperimentalekin alderatu dira, Fick 1D metodoa fidagarriagoa dela frogatuz.

Azkenik, termodifusioak *falling film* erako xurgatzaileen errendimenduan duen eragina aztertu da. Horretarako, kontzentrazio-gradienteez nahiz tenperatura-gradienteez eragindako masa-transferentzia hartu da kontuan. Definitutako metodologiaren bidez, lurrunaren xurgapena eta filmaren tenperatura- eta masa-frakzioaren profilak aztertu dira, hainbat lan-baldintza eta termodifusio balioetarako. Emaitzek agerian utzi dute, LiBr – H₂O nahasketaren Soret efektuaren izaera negatiboa dela eta, termodifusioak xurgapena areagotzen duela. Beraz, termodifusio koefiziente (D_T) negatiboaren balio absolutu handia duten fluidoak erabiltzeak xurgapen-makinen errentagarritasuna hobetu lezake. Hala ere, funtsezkoa da D_T koefizientea esperimentalki zehaztea, tenperatura-gradientearen bidez ematen den masa-transferentziaren mekanismoak xurgatzaileen errendimenduan duen benetako eragina kuantifikatzeko.

RESUMEN

En esta tesis doctoral se ha analizado la influencia de las condiciones de operación y las propiedades termofísicas de transporte en el comportamiento de los absorbedores de tipo *falling film* que operan con la mezcla LiBr – H₂O en tecnologías de absorción. Con este fin, se han definido y evaluado diferentes metodologías numéricas basadas en el método de los volúmenes finitos (en inglés *Finite Volume Method*, FVM).

Este trabajo, ha permitido determinar la influencia de las propiedades de mojabilidad en el comportamiento hidrodinámico del flujo *falling film* en tubos horizontales por medio de modelos transitorios. Asimismo, se ha estudiado el rango de aplicabilidad de los modelos 2D y 3D, comparando los resultados con las soluciones de la bibliografía. Mediante estos modelos se ha analizado el comportamiento transitorio del flujo, así como la evolución del área de mojado y el espesor del film para diferentes ángulos de contacto. Los resultados han mostrado que las propiedades de mojabilidad tienen un gran impacto en estos parámetros y, por consiguiente, deben ser consideradas en los estudios de *falling films* de tubos horizontales.

Además, se han comparado las diferentes formulaciones matemáticas y las metodologías de estudio de la transferencia de calor y masa de absorbedores *falling film* utilizados en la bibliografía, demostrando que la absorción varía en función de la metodología escogida. Los métodos seleccionados han sido Fick y Higbie sin imponer la fracción másica, suponiendo difusión unidireccional en la interface. De la misma forma, los resultados de los modelos han sido contrastados con resultados experimentales, demostrando mayor fiabilidad el método de Fick 1D.

Por último, se ha estudiado el efecto de la termodifusión en el rendimiento de los absorbedores *falling film*. Para ello, se ha considerado la transferencia de masa causada tanto por los gradientes de concentración, como de temperatura. A través de la metodología definida, se han examinado la absorción de vapor, y los perfiles de temperatura y fracción másica del film para diferentes condiciones de operación y valores de termodifusión. Los resultados han evidenciado que, debida a la naturaleza negativa del efecto Soret de la mezcla LiBr – H₂O, la termodifusión incrementa la absorción. Por lo tanto, el uso de fluidos con un alto valor absoluto del coeficiente negativo de termodifusión (D_T), podría mejorar la rentabilidad de las máquinas de absorción. No obstante, se prevé esencial la determinación experimental del coeficiente D_T para cuantificar el efecto real del mecanismo de la transferencia de masa bajo el gradiente de temperatura en el rendimiento de absorbedores.

ABSTRACT

In this doctoral thesis, the influence of operating conditions and thermophysical transport properties on the behaviour of falling film absorbers operating with the LiBr – H₂O mixture in absorption technologies has been analysed. To this end, different numerical methodologies based on the Finite Volume Method (FVM) have been defined and evaluated.

This work has made it possible to determine the influence of wettability properties on the hydrodynamic behaviour of the falling film flow in horizontal tubes by means of transient models. The range of applicability of the 2D and 3D models has also been studied, comparing the results with the solutions of the literature. The transient behaviour of the flow, as well as the evolution of the wetting area and the film thickness for different contact angles have been analysed by means of these models. The results have shown that the wettability properties have a great impact on these parameters and, therefore, must be considered in the studies of horizontal tube type falling films.

Furthermore, different mathematical formulations and methodologies for studying the heat and mass transfer of falling film absorbers used in the literature have been compared, showing that the absorption varies depending on the chosen methodology. The selected methods were Fick and Higbie without imposing the mass fraction, assuming unidirectional diffusion at the interface. In the same way, the results of the models have been contrasted with experimental studies, with the Fick 1D method proving to be more reliable.

Finally, the effect of thermodiffusion on the performance of falling film absorbers has been studied. For this purpose, the mass transfer caused by both concentration and temperature gradients has been considered. By means of the defined methodology, vapour absorption, temperature and mass fraction profiles have been examined for different operating conditions and thermodiffusion values. The results have shown that, as a result of the negative nature of the Soret effect of the LiBr – H₂O mixture, thermodiffusion increases the absorption. Therefore, the use of fluids with a high absolute value of the negative thermodiffusion coefficient (D_T) could improve the cost-effectiveness of absorption machines. However, it is essential to experimentally determine the D_T coefficient of the mixture LiBr – H₂O to quantify the real effect of the mass transfer mechanism under the temperature gradient on the absorber performance.

1 | INTRODUCCIÓN

1.1 Transformadores de calor por absorción

La energía residual está presente en cualquier proceso de producción de bienes. Esta energía residual se puede disipar a través de varias formas, y aunque tenga el nombre de residual, contiene grandes cantidades de exergía (potencial de trabajo útil). En la Figura 1.1 se pueden observar el potencial de la energía residual y el potencial de Carnot para diferentes sectores. El potencial de Carnot es la exergía del potencial de calor residual obtenida mediante el teorema de Carnot. Esta ley establece que el rendimiento máximo de una máquina térmica (η_{\max}) se determina por medio de las fuentes de alta temperatura (T_H) y baja temperatura (T_L) disponibles (Ecuación (1.1)):

$$\eta_{\max} = 1 - \frac{T_L}{T_H} \quad (1.1)$$

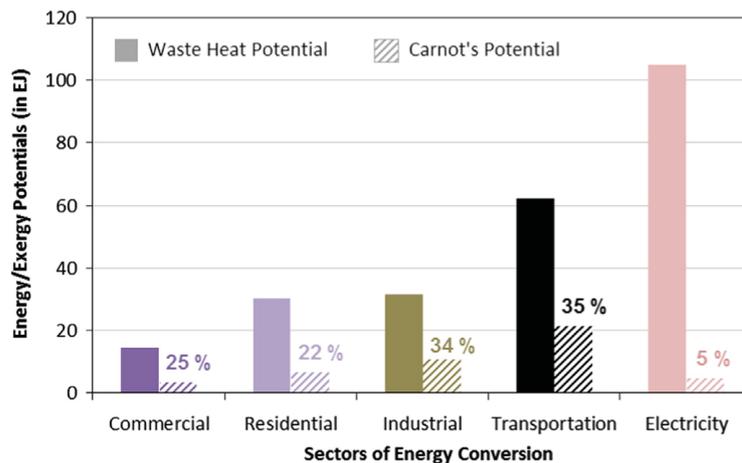


Figura 1.1: Potencial de la energía residual y potencial de Carnot para diferentes sectores [1].

De acuerdo con la Figura 1.1, existen varios sectores, tal como el sector eléctrico que, aunque teóricamente tenga un gran potencial de energía, se puede aprovechar solamente el 5% para generar trabajo útil. Por el contrario, el sector

industrial y el sector transporte contienen un enorme potencial tanto para la energía residual, como de Carnot. Por esta razón, la recuperación y el uso de energía de procesos productivos representa una enorme oportunidad. Euskadi, concretamente, se encuentra entre las regiones más industrializadas de Europa y por lo tanto, entre las que más energía consume [2]. Se han realizado diferentes estudios para evaluar el calor residual de Euskadi, tal y como se detalla en el trabajo de Miró et al. [3]. En la Figura 1.2 se muestra una comparación del potencial de calor residual industrial (IWH, del inglés *industrial waste heat*) entre España y Euskadi, así como la relación entre el potencial de calor residual y el consumo de combustible. Dicho estudio [3] subraya que la reutilización del calor residual industrial tendrá un gran impacto en Euskadi. Existen varias tecnologías

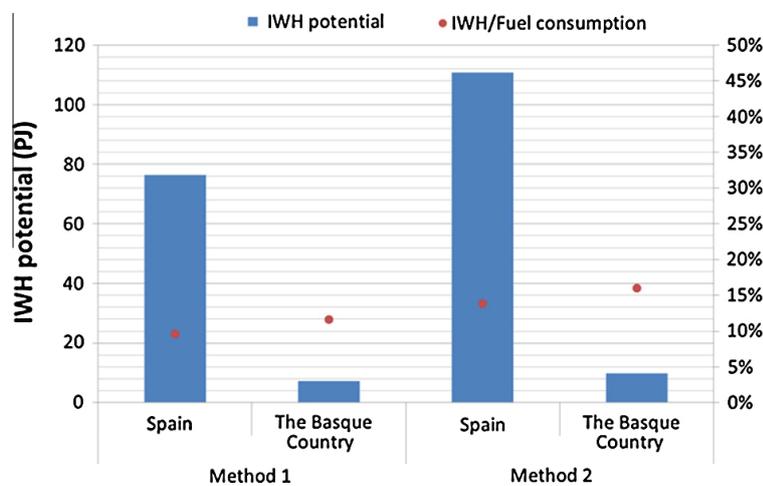


Figura 1.2: Comparación del potencial de energía residual industrial entre España y Euskadi y el porcentaje del consumo de combustible (2001) [3].

para la recuperación de calor residual. Según Brückner et al. [4], las tecnologías de recuperación de calor residual se pueden clasificar en 2 grandes categorías (Figura 1.3):

1. Tecnologías pasivas: Cuando el calor residual es usado directamente en el mismo nivel de temperatura (o menor).
2. Tecnologías activas: Cuando el calor residual es transformado a otra forma de energía o a un nivel mayor de temperatura.

La elección entre diferentes tecnologías depende, entre otros factores, básicamente de la temperatura del calor residual. En función de su temperatura, el calor residual se puede dividir en: alta temperatura (*HT*, $T > 400$ °C), temperatura intermedia (*MT*, 100 °C $< T < 400$ °C) y baja temperatura (*LT*, $T < 100$ °C). La Figura 1.4a muestra la temperatura del calor residual de diferentes sectores [4]. Por ejemplo, se puede observar que los sectores mineros y de producción de metal ofrecen grandes potenciales de energía residual a alta temperatura. Por el contrario, en el sector alimentario y en la industria del tabaco todo el requerimiento es a temperatura baja o intermedia. Asimismo, según la *US Energy*

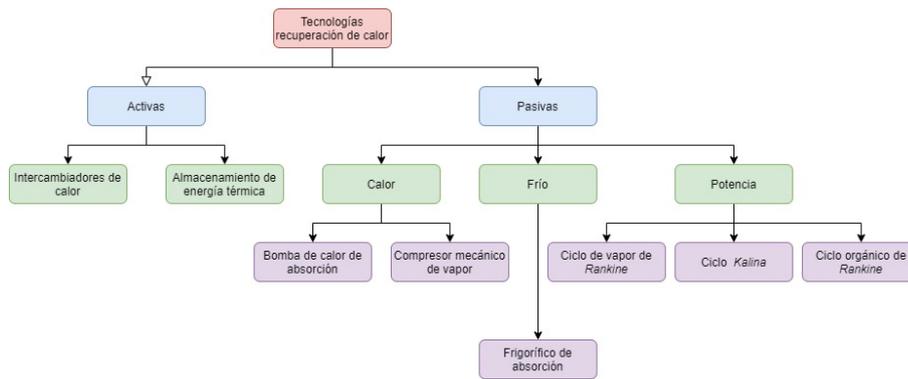
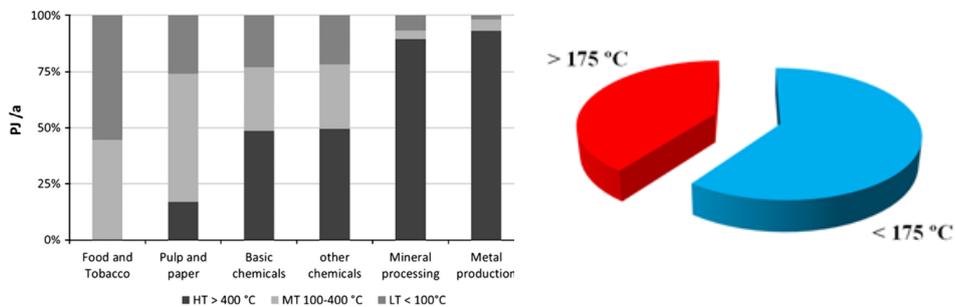


Figura 1.3: Tecnologías de recuperación de calor residual [4].

Protection Agency, casi el 60 % del calor residual se encuentra por debajo de 175 °C (Figura 1.4b).



(a) Diferentes sectores [4]

(b) En el sector industrial de EEUU (Fuente: US Energy Protection Agency).

Figura 1.4: Temperatura de calor residual.

Existen tecnologías maduras para aprovechar la energía residual que se encuentra a temperaturas por encima de 175 °C, por ejemplo, generando electricidad mediante turbinas. No obstante, la recuperación de la energía a baja temperatura no es económicamente viable con la tecnología actual. En el presente, existen varias tecnologías, pero son prototipos de investigación todavía en vías de desarrollo.

Entre ellas, destacan los Transformadores de Calor por Absorción (*Absorption Heat Transformers, AHT*) [5]. En los últimos años, el interés en esta tecnología ha crecido sustancialmente sobre todo a nivel académico. No obstante, este nivel de crecimiento no se ha producido en el entorno industrial, ya que existen sólo unos pocos en uso industrial [6].

Los AHTs son sistemas que se encuentran dentro de la categoría de Bombas de Calor de Sorción (*Sorption Heat Pumps*), concretamente dentro de las máquinas de absorción. No obstante, operan con un ciclo opuesto a las bombas de calor [7], mediante una solución constituida por dos fluidos. Se denomina refrigerante al fluido que cambia de fase; y absorbente al que se encuentra siempre en estado líquido [8]. Realmente, el absorbente igualmente puede cambiar de fase, pero las cantidades son despreciables. Los AHTs son capaces de transformar el calor

residual que se encuentra a baja temperatura en niveles más útiles, aumentando la temperatura de la fuente de calor. Asimismo, tienen la capacidad de recuperar hasta el 50 % del calor residual [9]. A continuación, se citan las ventajas (+) y desventajas (x) de los AHTs [7]:

- + Posibilidad de funcionar con otras fuentes de calor residual, así como con energía solar.
- + Como el único componente en movimiento es la bomba, es silencioso y requiere de poco mantenimiento.
- + Menor demanda de energía de entrada.
- + Tienen un diseño simple.
- x Tecnología relativamente poco ensayada.
- x Son equipos grandes y costosos.

En este contexto, se han realizado diferentes estudios económicos de prototipos para su posible aplicación industrial. Estos trabajos han concluido que los AHTs pueden ser perfectamente viables en diferentes aplicaciones, tal y como se detalla a continuación:

- Secado asistido por absorción [10]: La tecnología es económicamente viable a partir de 3.3 años [11].
- Evaporación asistida por absorción [12, 13]: El tiempo de viabilidad es de 2.7 años [14].
- Destilación asistida por absorción [15, 16]: Su viabilidad es de menos de 10 años [17].
- Recuperación de calor asistida por absorción [7, 18]: El periodo de reembolso es menor que 2 años [18].

De acuerdo con las diferentes aplicaciones, se han desarrollado diferentes configuraciones de AHTs. Como ilustra la Figura 1.5, los más simples transforman el calor operando en tres niveles de temperatura. El calor se introduce a un nivel de temperatura intermedio (T_c) y se produce calor al nivel máximo de temperatura (T_h). Como consecuencia de la Segunda Ley de la termodinámica, es necesario disipar una parte del calor introducido a un nivel de temperatura menor (T_e).

En función del tipo de ciclo, los AHTs se pueden clasificar en tres grupos: AHTs de simple etapa (*single stage AHTs*), AHTs de doble etapa y doble efecto (*double stage and double effect AHTs*) y AHTs triples (*triple AHTs*).

La Figura 1.6 ilustra el esquema de funcionamiento de un AHT de simple efecto. En esta configuración, el generador y el condensador se encuentran en la zona de baja presión y el absorbedor y el evaporador en la zona de alta presión. El calor residual a un nivel de temperatura intermedio (por ejemplo: agua proveniente de la geotermia, vapor o fluido residual industrial) se introduce en el generador, separando la solución. Este calor evapora el refrigerante, separando

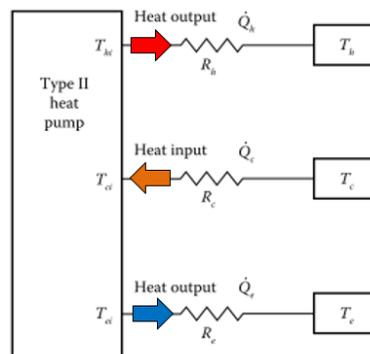


Figura 1.5: Principio de operación de AHTs [8]

el vapor de refrigerante de la solución absorbente-vapor a un nivel bajo de temperatura y presión. Por una parte, el vapor apartado pasa al condensador, donde el refrigerante se vuelve a convertir en estado líquido. Posteriormente, el vapor refrigerante se bombea hacia el evaporador, donde se convierte nuevamente en vapor, pero esta vez a un nivel mayor de presión.

Por otra parte, la solución rica en absorbente de alta concentración es impulsada hacia un intercambiador de calor, donde sufre un incremento de temperatura como consecuencia del intercambio de calor con la solución pobre en absorbente proveniente del absorbedor.

Las dos fases separadas anteriormente, se vuelven a unir en el absorbedor. En este caso, se unen la solución rica de absorbente, el cual ha sufrido un aumento de temperatura y presión proveniente del intercambiador de calor; y el refrigerante en estado vapor que ha padecido un aumento de presión al ser impulsado de la zona de baja presión a la de alta presión. Así, la solución rica en absorbente absorbe el vapor de refrigerante, generando calor. Este calor generado se emplea para aumentar la temperatura de un fluido, pero en este caso la temperatura alcanzada es mayor que la temperatura de la fuente inicial de calor residual. Como consecuencia, mediante una fuente de temperatura intermedia se genera una fuente de calor de mayor temperatura, el cual se podrá utilizar para reintroducirlo en el proceso, transformarlo en energía eléctrica, ...

La máxima elevación de temperatura que pueden conseguir los AHTs de simple etapa es de $30\text{ }^{\circ}\text{C} - 40\text{ }^{\circ}\text{C}$. Para lograr mayores subidas de temperatura se suelen utilizar los de doble efecto y doble etapa o los AHTs triples. Por ejemplo, los AHTs de doble etapa pueden llegar a incrementos de temperatura de $80\text{ }^{\circ}\text{C}$ [20], mientras los de triple efecto pueden llegar hasta los $145\text{ }^{\circ}\text{C}$ [21]. No obstante, estos sistemas tienen más componentes y, por lo tanto, su coste es mayor, además de presentar menores coeficientes de operación (COP). Por ejemplo, en el caso de los AHTs de doble etapa el COP puede llegar a 0.36; y 0.2 en el caso de los de triple etapa. [20, 21].

Como se ha mencionado anteriormente, los AHTs funcionan con dos fluidos de trabajo diferentes, denominados absorbente y refrigerante. El fluido de trabajo utilizado en los AHTs tiene una influencia considerable en el coste y los requerimientos de mantenimiento, por lo que su elección es crucial para la viabilidad económica de la máquina. Hasta 2013, la solución de agua y bromuro

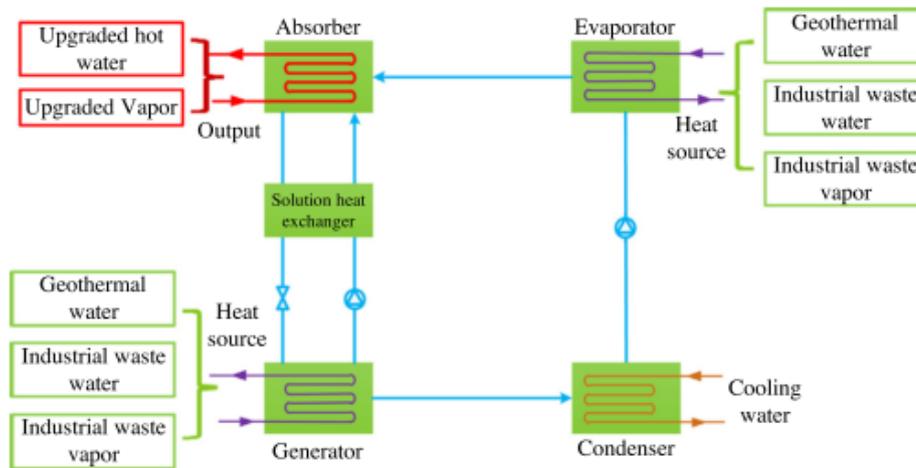


Figura 1.6: Diagrama de un AHT de simple efecto [19]

de litio ($\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$) era la única mezcla empleada con fines comerciales [22]. Sus principales ventajas (+) e inconvenientes (x) son [9, 16]:

- + Alta entalpía de vaporización.
- + Buenas capacidades de transferencia de calor y masa.
- + Baja toxicidad.
- + No es necesario el uso de rectificadores debido a su baja volatilidad.
- x Requerimientos de presiones de trabajo subatmosféricas.
- x Alta corrosividad.
- x Peligro de cristalización.

No obstante, se han realizado numerosos estudios para encontrar alternativas que tengan las mismas ventajas, pero con menos desventajas. Las más importantes son:

- Agua-amoniaco ($\text{H}_2\text{O} - \text{NH}_3$): Tiene baja corrosividad, pero los requerimientos de alta presión para su empleo en altas temperaturas reducen su idoneidad para los AHTs.
- Refrigerantes líquidos de trifluoroetanol (TFE): Tienen alta estabilidad térmica y una curva de presión de vapor casi horizontal, pero su alta toxicidad combinada con sus reducidas características termodinámicas, no indican que vayan a suplir a los $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$ [9].
- Solución agua-Carrol: La mezcla Carrol es solamente una mezcla simple de LiBr y etileno-glicol en la proporción de 1:4.5 [23]. Esta solución mantiene las mismas propiedades termodinámicas y la corrosividad de la solución $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$, pero incrementa la solubilidad de la sal disminuyendo el riesgo de cristalización y aumentando así las fracciones másicas hasta $w = 0.8$

[22]. Sin embargo, presenta una viscosidad mayor. Aun así, parece que pueden ser una buena alternativa.

- **Aditivos:** Los aditivos se utilizan para aumentar las propiedades de transferencia de calor y masa de la solución LiBr – H₂O. Debido a ello, en los resultados experimentales se han observado mejoras del COP de hasta un 40 % [24]. No obstante, no solucionan los principales problemas de alta corrosividad y baja solubilidad de la solución LiBr – H₂O.
- **Combinación de agua y sales:** Se han realizado muchos ensayos experimentales para suplir el LiBr por otras sales que trabajen bien con el agua, pero que sean menos corrosivos tales como CaCl₂, ZnCl₂, KOH... Donnellan et al. [25] concluyeron que, aunque las sales binarias no tengan las mismas propiedades termodinámicas que la solución LiBr – H₂O, pueden ser una alternativa debido a otras ventajas que aportan.

1.2 Absorbedores

Entre todos los componentes de los AHTs, el absorbedor es el componente más crítico como resultado de los bajos coeficientes de transferencia de calor y masa [26, 27]. Por esta razón, su diseño es vital tanto para el comportamiento del AHT, como para su viabilidad económica. Los principales tipos de absorbedores que se utilizan en AHTs son:

1. Absorbedores *falling film* (en general, *falling film heat exchangers*, FFHX): La solución rica se introduce y se reparte mediante toberas de spray u otros distribuidores desde la parte superior y desciende por gravedad, sea por un tubo horizontal (Figura 1.7a), un tubo vertical (Figura 1.7b) o una placa (Figura 1.7c). Conforme desciende, absorbe el vapor de refrigerante que se encuentra dentro de la cámara y el calor generado en la absorción es disipado por el fluido de refrigeración.

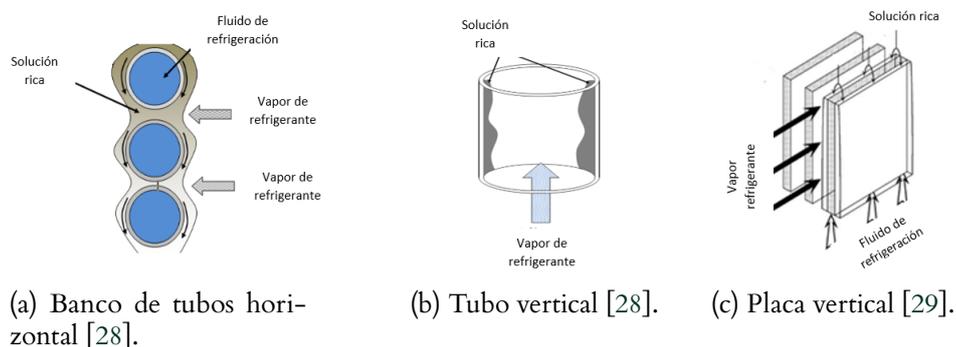


Figura 1.7: Configuraciones de absorbedores de tipo FFHX.

2. Absorbedores adiabáticos: Los absorbedores adiabáticos tienen separados los procesos de transferencia de calor y masa, reduciendo asimismo, su tamaño y coste. Normalmente la transferencia de masa es el proceso limitante, siendo la difusión molecular el factor de control del proceso de absorción

[30]. Como se observa en la Figura 1.8a, la solución rica en absorbente se inyecta en forma de gotas desde la parte superior y absorbe el vapor de la cámara. En este caso, la transferencia de calor ocurre posteriormente en un intercambiador de calor de una sola fase, el cual se encuentra en el exterior del absorbedor.

3. Absorbedores de burbuja: Con estos absorbedores se obtienen mayores coeficientes de transferencia de calor y masa, así como mejor mojabilidad y mezclado del líquido y el vapor [31]. Normalmente son más eficientes en bajos números de Reynolds. Sin embargo, existe el peligro de contaminar el evaporador con la solución, el cual puede acarrear serios problemas.
4. Absorbedores de membrana (Figura 1.8b): El uso de absorbedores de membrana está creciendo en los últimos años debido a su relativa simplicidad, sus altos parámetros de separación, su gran área interfacial y su baja necesidad de energía [32].

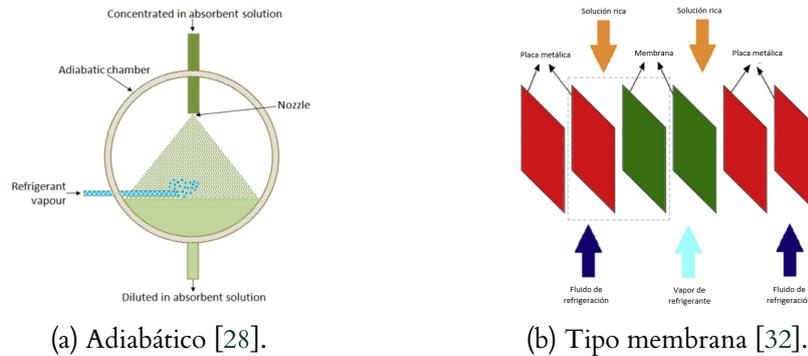


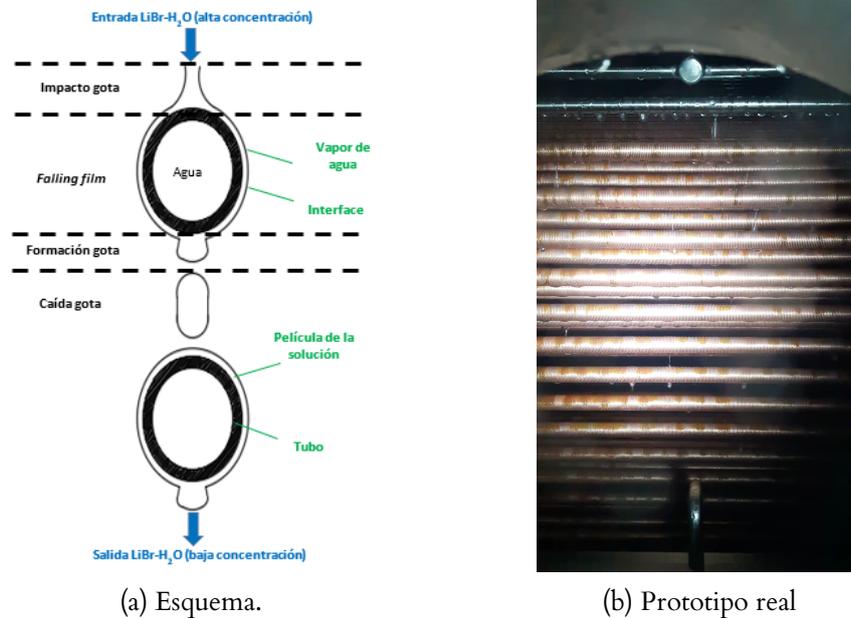
Figura 1.8: Configuraciones de absorbedores.

Entre todas las configuraciones, los FFHX de tubos horizontales (Figura 1.7a) son los más usados en máquinas de absorción. Sus principales ventajas (+) y desventajas (x) se enumeran a continuación:

- + Necesidad de menores cantidades de refrigerante [33, 34].
- + Mayores coeficientes de transferencia de calor y masa [35].
- + Su tamaño es más reducido [36].
- x Los problemas de mojabilidad disminuyen considerablemente su rendimiento [28, 37].
- x Requieren accesorios especiales de distribución de la solución que garantice la mojabilidad plena [36].
- x El flujo de vapor afecta a la distribución y conlleva que aparezcan zonas secas, disminuyendo considerablemente la transferencia de calor y masa [36].

x Todavía la experiencia de su diseño es insuficiente [36].

En la Figura 1.9 se exponen el esquema (Figura 1.9a) y una foto de un absorbedor FFHX de tubos horizontales real (Figura 1.9b), mientras que en la Figura 1.10 se muestra el esquema de los mecanismos de transferencia de calor y masa existentes en el proceso de absorción.



(a) Esquema.

(b) Prototipo real

Figura 1.9: Absorbedor FFHX de tubos horizontales.

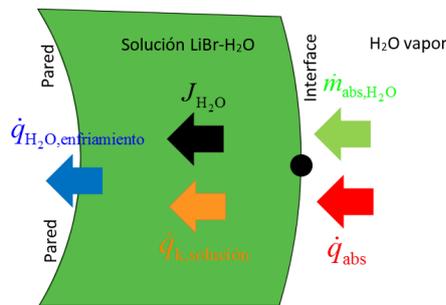


Figura 1.10: Esquema de la transferencia de calor y masa en el proceso de absorción.

El vapor de agua se encuentra en un régimen estacionario y en condiciones de saturación a lo largo del volumen de la cámara. La solución (en este caso solución LiBr – H₂O) fluye del distribuidor desde la parte superior de la cámara bajo la condición de la gravedad (Figura 1.9a). Conforme desciende la solución, ésta absorbe el vapor de agua ($\dot{m}_{\text{abs,H}_2\text{O}}$ de la Figura 1.10) y, como consecuencia, se genera calor en la interface (\dot{q}_{abs} de la Figura 1.10). Este calor generado es transferido por conducción hacia el interior del líquido ($\dot{q}_{\text{k,solución}}$ de la Figura 1.10) y, finalmente, es absorbido por el fluido de refrigeración que circula por el interior de los tubos ($\dot{q}_{\text{H}_2\text{O, enfriamiento}}$ de la Figura 1.10). Por otro lado, la cantidad de vapor absorbido es transportada hacia el interior ($J_{\text{H}_2\text{O}}$ de la Figura 1.10).

Concretamente, los mecanismos que ocurren en el proceso de absorción se pueden resumir a continuación:

- Transferencia de masa:
 - Difusión másica.
 - Difusión térmica (Soret).
 - Convección de Marangoni.
- Generación de calor:
 - Calor generado en la absorción de vapor.
- Transferencia de calor:
 - Convección.
 - Conducción.

Para conseguir maximizar tanto la transferencia de calor, como la de masa, las condiciones de diseño y de operación deberán conseguir las siguientes características:

- La mezcla del *falling film* tiene que ser frecuente.
- Maximizar el área de la superficie de la interface.
- Minimizar la resistencia a la transferencia de calor del fluido de refrigeración.

En la literatura se pueden encontrar numerosos trabajos orientados al estudio del comportamiento de absorbedores *falling film*, los cuales se pueden reorganizar en dos grupos:

1. Estudios experimentales (Sección 1.3).
2. Estudios analíticos/numéricos (Sección 1.5).

1.3 Estudios experimentales de absorbedores *falling film*

Para el análisis de los trabajos realizados, los estudios experimentales se han agrupado en función del objetivo del estudio:

1. Estudio de la transferencia de calor y masa.
2. Estudio de la hidrodinámica y el espesor del film (isotérmicos y adiabáticos).

En la literatura se pueden encontrar numerosos estudios experimentales de la transferencia de calor y masa específicos de absorbedores *falling film* que operan con diferentes fluidos.

De acuerdo con el interés de la presente tesis doctoral, la Sección 1.3.1 se ha centrado exclusivamente en absorbedores que operan con la solución LiBr – H₂O, con el objetivo de comprender las condiciones de diseño y operación más importantes, así como la comparación de los resultados.

1.3.1 Estudios experimentales orientados al análisis de la transferencia de calor y masa

Tubos horizontales

Killion y Garimella [27] realizaron un resumen de las investigaciones experimentales de la absorción de vapor de agua en *falling films* de tubos horizontales. Los autores concluyeron que, aunque la literatura contiene gran variedad de condiciones de operación y diseño, todavía existe una gran oportunidad para avanzar en su optimización. Especialmente en el avance del conocimiento de la transferencia de calor y masa con las siguientes prioridades:

- Cuantificar el efecto de los surfactantes a nivel superficial: Intensificar en medidas localizadas de transferencia de calor y masa y otras técnicas para la mejora de la comprensión de la convección de Marangoni, el efecto de los surfactantes en el comportamiento de la gota y el rol de los surfactantes en el ratio de absorción.
- Analizar la contribución de las gotas en la tasa de absorción: Entender el rol de las gotas y el efecto de su variación dentro del rango de condiciones de operación.
- Comprender el efecto de la geometría base del absorbedor: la geometría afecta directamente en el tipo de flujo y, por lo tanto, en el proceso de absorción y en los mecanismos de flujo.
- Caracterizar los efectos de interacción entre los diferentes parámetros de operación: la fracción másica de la solución, el subenfriamiento, la temperatura del agua de enfriamiento de entrada, el flujo de la solución...

Desde entonces se han realizado numerosos estudios con el objetivo de analizar tanto las condiciones geométricas de absorbedores, como de operación. Varios autores [38–43] han efectuado ensayos experimentales en diferentes configuraciones de absorbedores con tubos lisos. Los resultados ilustraron que, en el rango de estudio, el coeficiente de transferencia de calor y masa aumentaba de acuerdo con las siguientes condiciones:

- Aumentando el caudal de la solución.
- Aumentando la velocidad del fluido de refrigeración.
- Disminuyendo la temperatura del fluido de refrigeración.
- Disminuyendo el diámetro exterior de los tubos.
- Disminuyendo el número de tubos.

Además de la influencia del caudal, otros trabajos han analizado la influencia de los aditivos sobre el funcionamiento del absorbedor [43–46]. El objetivo inicial de estos aditivos fue, por medio de la reducción de la tensión superficial, incrementar la mojabilidad de los tubos [35]. Por ejemplo, en el trabajo de Zhang et al. [43],

los coeficientes de transferencia de calor y masa presentaron importantes mejoras de hasta 400 % y 200 %, respectivamente, y señalaron que este incremento fue debido al aumento de la mojabilidad, así como resultado de la contribución de la convección de Marangoni.

Otra forma de mejorar la mojabilidad es la utilización de tubos con superficies avanzadas mediante el uso de aletas y/o tratamientos superficiales (Figura 1.11) [26, 39, 44, 47–49]. Estos trabajos demostraron que los coeficientes de transferencia de calor y masa podían mejorar hasta un 100 % en comparación con los tubos convencionales. Asimismo, muchos de ellos analizaron la influencia del flujo másico por unidad de longitud y lado de la solución en el comportamiento del absorbedor. Cabe destacar que, en los estudios de Hoffmann et al. [44] e Islam et al. [39], la mejora del aumento de este flujo másico tenía una forma asintótica, llegando a un caudal límite ($\Gamma \approx 0.045 \text{ (kg m}^{-1} \text{ s}^{-1})$), por encima del cual el proceso de absorción no presentaba mejora alguna.

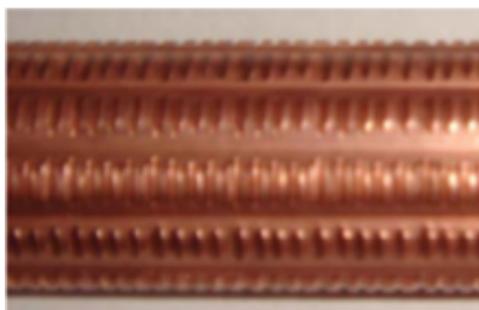


Figura 1.11: Tubo floral aleteado [43].

Por último, Behfar et al. [35] analizaron la influencia de la vibración en el comportamiento de absorbedores *falling film* para las mezclas de LiBr – H₂O, concluyendo que la generación de vibraciones mediante diferentes técnicas mejoraba las prestaciones del absorbedor.

Las diferentes condiciones geométricas y de operación utilizadas en los diferentes estudios mencionados dificultan en gran medida la comparación directa entre dicho estudios y, por lo tanto, la obtención de conclusiones sobre la influencia de las condiciones de operación. Como muestra de esta variabilidad, se han analizado los intervalos en los que operaron los casos de bibliografía estudiados en la Sección 1.3.1. En la Tabla 1.1, se presentan los intervalos de las condiciones geométricas. Asimismo, en las Tabla 1.2 y Tabla 1.3 se presentan los intervalos de las condiciones de operación, tales como: temperatura de entrada del agua de refrigeración ($T_{\text{in,H}_2\text{O}}$), coeficiente de convección del agua de refrigeración ($h_{\text{H}_2\text{O}}$), flujo másico de la solución por unidad de lado y longitud del absorbedor (Γ), número de Reynolds de la solución (Re), temperatura de entrada de la solución (T_{in}), fracción másica de entrada de la solución (w_{in}) y la presión del absorbedor (p). Por último, la Tabla 1.4 muestra el intervalo de los resultados obtenidos: coeficiente de transferencia de calor lado solución (h_{sol}), coeficiente transferencia de masa (κ) y flujo de masa de vapor absorbido (\dot{m}_{abs}).

Los resultados obtenidos en los trabajos experimentales de la bibliografía presentan importantes diferencias entre ellos. Por ejemplo, aunque las condiciones geométricas y de operación sean muy similares (el rango de caudales y el número

Tabla 1.1: Condiciones geométricas de los absorbedores estudiados en la bibliografía

Nº tubos	Longitud tubos (mm)	Ratio tubos/diámetro	Diámetro exterior (mm)	Tipo superficie
3-24	160-610	1-3	12-42.2	Lisa/estructurada

Tabla 1.2: Condiciones de operación de absorbedores empleados en la bibliografía.

$H_2O_{\text{refrigeracion}}$		LiBr – H_2O			
T_{in,H_2O} (°C)	h_{H_2O} ($W m^{-2} K^{-1}$)	Γ ($kg m^{-1} s^{-1}$)	Re	T_{in} (°C)	w_{in}
15 – 35	1100 – 7700	0.003 – 0.110	2 – 76	30 – 60	0.50 – 0.62

de tubos son idénticos), los coeficientes de transferencia de calor obtenidos por Deng y Ma [38] son casi un orden de magnitud mayores que los obtenidos por Hoffmann et al. [44]: $1.8 \leq h_{\text{sol}} \leq 3.3$ ($kW m^{-2} K^{-1}$) frente a $0.23 \leq h_{\text{sol}} \leq 0.63$ ($kW m^{-2} K^{-1}$). Se deduce que esta desigualdad puede ser debida a, entre otras razones, que la superficie mojada por la solución en los dos absorbedores sea muy diferente. Por ello, se deriva que la mojabilidad tiene una gran influencia. Sin embargo, como consecuencia de la complejidad de analizar su influencia en condiciones de operación de absorbedores, no ha sido muy estudiada. Asimismo, la influencia de las condiciones geométricas y de operación no está del todo clara, ya que existen contradicciones entre resultados de diferentes autores, por lo que se observa la necesidad de profundizar en el estudio de su influencia para optimizar el diseño del absorbedor.

Tubos verticales

Otra configuración de absorbedores analizada experimentalmente por numerosos autores ha sido la configuración de tubos verticales. Miller y Keyhani [50] propusieron correlaciones de la transferencia de calor y masa simultáneas, basadas en los resultados experimentales de un absorbedor de tubo vertical. El rango de flujos de masa de vapor absorbido que obtuvieron en los ensayos fue entre $0.0031 \leq \dot{m}_{\text{abs}} \leq 0.0038$ ($kg m^{-2} s^{-1}$). Por otra parte, Medrano et al. [51] estudiaron la influencia de las variables en la transferencia de calor y masa, tales como: presión de trabajo, flujo de masa de la solución y la temperatura del agua de refrigeración. El absorbedor empleado, así como las condiciones de trabajo, fueron similares a las de Miller y Keyhani [50]. Los autores obtuvieron flujos de masa de absorción promedio de entre $0.0021 \leq \dot{m}_{\text{abs}} \leq 0.0032$ ($kg m^{-2} s^{-1}$). Sorprendentemente, existen diferencias considerables entre los resultados de ambos estudios y, hasta el momento, no han sido explicadas las razones de esta discrepancia.

Asimismo, Takamatsu et al. [52] también estudiaron la absorción en un tubo vertical, los cuales dividieron en tres secciones de estudio la longitud total del

Tabla 1.3: Presión de trabajo de absorbedores.

p (kPa)
0.5 – 1.6

Tabla 1.4: Resultados obtenidos en la bibliografía.

h_{sol} (kW m ⁻² K ⁻¹)	κ (m h ⁻¹)	$\dot{m}_{\text{abs}} \cdot 10^3$ (kg s ⁻¹)
0.23 – 3.30	0.05 – 0.23	0.56 – 1.20

tubo. En este caso, la absorción fue inferior a los casos anteriores $0.001 \leq \dot{m}_{\text{abs}} \leq 0.0027$ (kg m⁻² s⁻¹).

Por último, recientemente, García-Rivera et al. [53, 54] analizaron tanto numérica, como experimentalmente la absorción de vapor en un tubo vertical de 1 m de longitud. La absorción fue significativamente menor que el obtenido por Miller y Keyhani [50]: $0.0018 \leq \dot{m}_{\text{abs}} \leq 0.0025$ (kg m⁻² s⁻¹); los valores estarían entre los de Medrano et al. [51] y Takamatsu et al. [52].

Todas estas diferencias entre los resultados en la bibliografía muestran sin duda la complejidad de estos estudios, ya que existen diferencias importantes en la absorción entre los cuatro trabajos mencionados. En este caso de tubos verticales, se descarta la hipótesis de la influencia de la mojabilidad, ya que los autores aseguran que la solución LiBr – H₂O moja todo el tubo en el rango de estudio correspondiente. Surge, por lo tanto, la necesidad de comprender a nivel local los diferentes mecanismos de transferencia de calor y masa para responder a la incertidumbre creada a raíz de la disparidad entre los distintos trabajos.

Placas planas

Por otra parte, en la literatura existen estudios experimentales de absorbedores de placas planas. Sin embargo, el campo de investigación experimental de absorbedores que operan con la solución LiBr – H₂O está relativamente poco desarrollado. Esto podría ser debido a la problemática ligada a la mojabilidad de la superficie de la placa. En la Sección 1.3.2, se muestra la revisión de la hidrodinámica de placas planas, en donde se observan zonas secas en los ensayos experimentales. Kim e Infante Ferreira [55, 56] estudiaron tanto experimental, como numéricamente la transferencia de calor y masa en una placa plana de 900 mm de longitud operando a bajos números de Reynolds ($40 \leq Re \leq 110$), con y sin aditivos. Es importante resaltar que los autores no pudieron conseguir la mojabilidad completa dentro del rango del número de Reynolds de los ensayos. Asimismo, los resultados revelaron la influencia de la superficie de mojado en el proceso de absorción. Asimismo, en el caso de la solución con aditivos se obtuvo una mejora de entre un 10% – 20%, el cual atribuyeron a la convección de Marangoni.

Diseños específicos

Por último, existen otras configuraciones diseñadas específicamente por los autores con el objetivo de mejorar la absorción. La mayor parte de las modificaciones se ha centrado en el control del flujo para aumentar la superficie que moja el líquido.

Md Raisud Islam [26] comparó un absorbedor tubular convencional con otro con inversión del film (Figura 1.12a). Estas reformas consistieron en la instalación de unas superficies extendidas (aletas) entre los tubos, con el propósito de guiar el film, mediante el cual se consiguió una mejora de un 100 % en la absorción. En la misma línea, Goel y Goswami [57] instalaron una malla entre los microcanales tubulares para mejorar la transferencia de calor y masa (Figura 1.12b). Los resultados demostraron mejoras de hasta el 26 % en comparación con los absorbedores de microcanales convencionales. Yoon et al. [58], Nabil et al. [59] y Ben Hafsia et al. [60] propusieron una configuración tubular-espiral (Figura 1.12c). Yoon et al. [58] concluyeron que la absorción es parecida en la configuración helicoidal, aunque el tamaño y el peso son considerablemente menores. Mientras, Nabil et al. [59] y Ben Hafsia et al. [60] utilizaron dichos resultados para validar sus modelos numéricos propuestos. Por último, Wu et al. [61] y Chen et al. [62] compararon un absorbedor convencional con un nuevo diseño específico desarrollado por los propios autores. En este nuevo diseño, se introdujo una malla corrugada con el fin de formar infinidad de capilares (Figura 1.12d) para incrementar las perturbaciones y aumentar el área de absorción. Lograron mejorar un 17.2 % la transferencia de masa promedio y un 29.4 % el coeficiente de transferencia de calor por convección (h_{sol}). En este caso, la influencia del caudal igualmente presentaba una forma asintótica.

En resumen, las diferencias en los resultados de los trabajos experimentales evidencian la incertidumbre de las diferentes variables en el comportamiento del absorbedor. Existe un consenso establecido sobre la importancia que tiene la mojabilidad, pero no se han investigado las causas en el que se basa la naturaleza física de este fenómeno en los absorbedores. Asimismo, hasta el presente, no ha habido un examen sistemático de la transferencia de calor y masa a nivel local con el fin de comprender el comportamiento de los absorbedores en su conjunto.

1.3.2 Estudios experimentales orientados al análisis de la hidrodinámica y el espesor del film

Otros trabajos han realizados estudios experimentales isotérmicos de *falling films*. Algunos estudios han orientado al análisis de la hidrodinámica, mientras otros han mostrado medidas del espesor del film y el área de mojado. A continuación, se resumen los resultados obtenidos por los diferentes estudios.

Hidrodinámica

Hasta el día de hoy existen muy pocos trabajos experimentales enfocados al estudio hidrodinámico que hayan usado la solución LiBr – H₂O como fluido de trabajo. Como consecuencia de la amplia aplicación de los absorbedores o

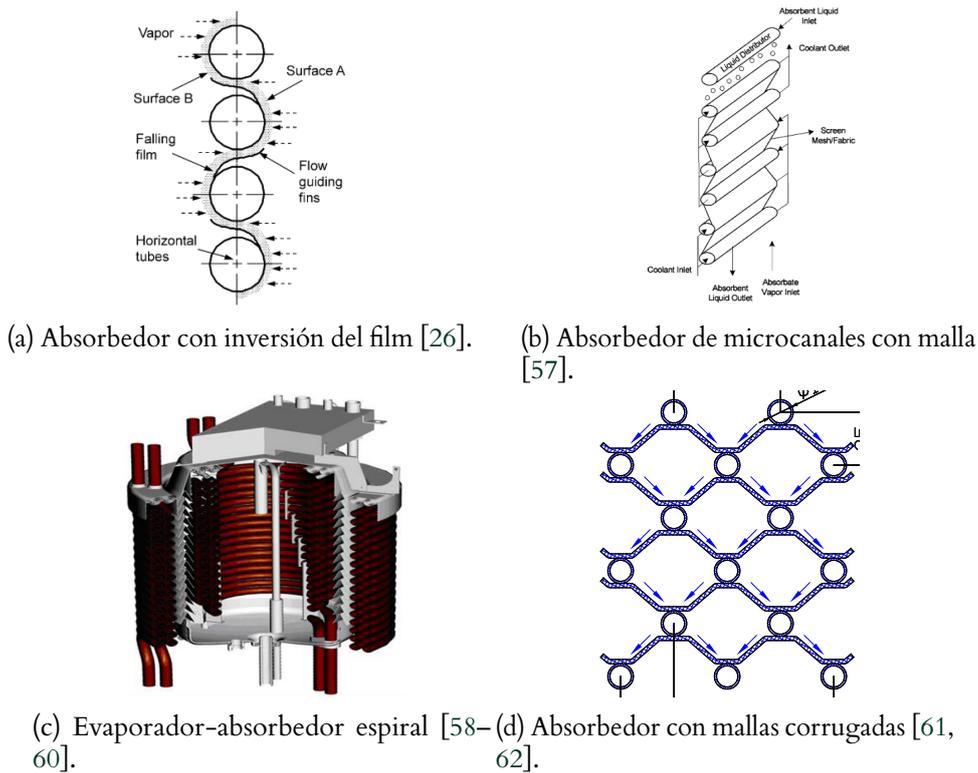


Figura 1.12: Diferentes configuraciones de absorbedores

evaporadores *falling film* de tubos horizontales en la desalinación de agua, existen numerosos trabajos donde se ha analizado la hidrodinámica de *falling films*, pero empleando agua u otra solución acuosa como fluido. En la esta Sección 1.3.2 se han analizado estos estudios.

Hu y Jacobi [63, 64] investigaron los diferentes modos de flujo en *falling films* de tubos horizontales. Realizaron ensayos experimentales para analizar la influencia de la viscosidad, la tensión superficial, la inercia y los efectos gravitacionales en las transiciones entre los diferentes modos de flujo. Los autores agruparon los patrones de los modos de flujo que pueden experimentar los *falling film* de tubos horizontales (Figura 1.13) como:

- Gota (*droplet*) (Figura 1.13a),
- Mezcla de gotas y columnas (*droplet-jet*), (Figura 1.13b),
- Columnas en línea (*in-line-jets*) (Figura 1.13c),
- Columnas escalonadas (*staggered jets*) (Figura 1.13d),
- Columnas no estacionarias (*unsteady jets*),
- Mezcla de columnas y láminas (*jet-sheet*) (Figura 1.13e),
- Lámina continua (*continuous liquid sheet*) (Figura 1.13f).

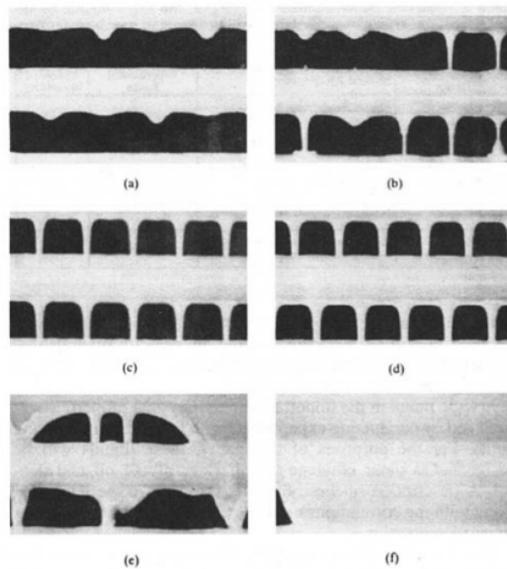


Figura 1.13: Modos de flujo observados para glicol-etileno a) gota; b) gota-columna; c) columnas en línea; d) columnas escalonadas; e) columna-lámina f) lámina [63].

Hu y Jacobi [63] propusieron correlaciones para el número de Reynolds de transición (Re_t) entre los diferentes modos de flujo en función del número de Galileo modificado (Ga_m , Ecuación (1.2)):

$$Re_t = a \cdot Ga_m^b, \quad (1.2)$$

donde a y b son coeficientes específicos para cada caso. Por su parte, el número de Galileo modificado se calcula mediante la Ecuación (1.3):

$$Ga_m = \frac{\rho_l \sigma^3}{\mu_l^4 g}, \quad (1.3)$$

siendo ρ_l la densidad del líquido; σ , la tensión superficial, μ_l , la viscosidad dinámica del líquido y g la constante gravitacional. En el caso de los *falling film*, el número de Reynolds se calcula mediante la Ecuación (1.4)

$$Re = \frac{4\Gamma_1}{\mu_l}, \quad (1.4)$$

donde Γ_1 es el caudal de la solución por unidad de longitud y lado del tubo y su valor se calcula con la Ecuación (1.5):

$$\Gamma_1 = \frac{\dot{m}}{2L}, \quad (1.5)$$

siendo L la longitud del tubo y \dot{m} el flujo de masa del fluido.

Roques et al. [65] y Roques y Thome [66] realizaron estudios experimentales de los modos de flujo para tubos con superficies mejoradas. Los fluidos utilizados fueron agua, glicol y mezcla agua-glicol. Compararon los modos de flujo con diferentes tubos (Figura 1.14). Los resultados fueron comprobados mediante la

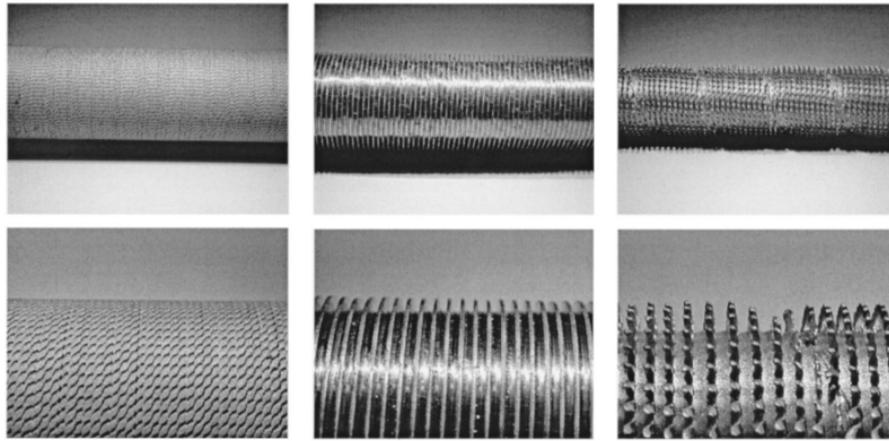


Figura 1.14: Fotografías de los tubos con superficies mejoradas ensayados por Roques et al. [65].

comparación con Hu y Jacobi [63], y observaron diferencias en las transiciones de flujo, proponiendo nuevas correlaciones para cada tubo de superficie mejorada. Nosoko et al. [67] completaron este estudio considerando el espaciado entre tubos, el cual evidenció que el espaciado tenía una gran influencia, y propusieron nuevas correlaciones.

Ribatski y Jacobi [68] realizaron una revisión de la bibliografía, pero enfocado a evaporadores de *falling film* de tubos horizontales. Concluyeron que, en general, las superficies mejoradas incrementaban la transferencia de calor. En opinión de los autores, la razón de este fenómeno no estaba claramente identificada, debido a su compleja dependencia a la geometría, disposición del tubo y las condiciones de operación. Asimismo, propusieron la necesidad de investigar más en la comprensión de la distribución del flujo y la aparición de zonas secas, los cuales tienen un rol muy importante en la mayoría de las aplicaciones de los FFHXs.

A. Mohamed [69] analizó las transiciones entre los modos de flujo en un tubo horizontal que rotaba sobre su eje de simetría. Los resultados ilustraron que, como resultado de la rotación, las transiciones ocurrían a menores números de Reynolds. El mismo autor demostró en otro artículo [70] que las transiciones entre modos de flujo también ocurren a menores números de Reynolds en tubos corrugados. Asimismo, observaron que el espesor disminuye al disminuir el paso de corrugado. Como consecuencia, la transferencia de calor mejoró un 45 % al utilizar estos tubos. Chen et al [71] también analizaron la transición en superficies mejoradas. En este caso, observaron que la histéresis del modo de flujo aumentaba con el espaciado y la inclusión de aletas bidimensionales, además de proponer una correlación en función de otros dos parámetros. Otros autores que analizaron las transiciones, pero en este caso en tubos rectangulares, fueron Wang et al. [72]. Los resultados revelaron que, además de los modos de flujo de tubos horizontales, en este tipo de tubos aparecían otros dos nuevos: lámina continua (*whole-sheet*) y lámina rota (*torn sheet*). Asimismo, observaron la influencia del espaciado de tubos en estas transiciones. La Figura 1.15 muestra los patrones observados en los tubos rectangulares ([72]): En otro trabajo [73], Wang et al. demostraron el

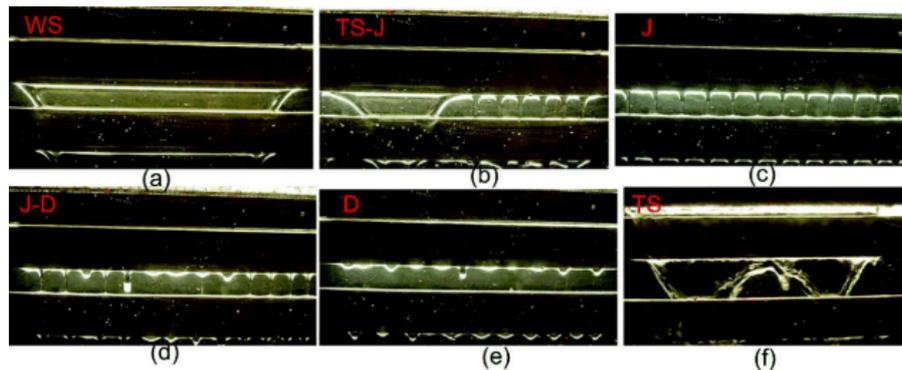


Figura 1.15: Patrones de flujo observados: (a) lámina continua (*whole sheet*); (b) lámina rota-columna (*torn sheet-jet*); (c) columna (*jet*); (d) columna-gota (*jet-droplet*); (e) gota (*droplet*) y (f) lámina rota (*torn-sheet*) [72].

importante efecto del distribuidor en las transiciones de los modos de flujo. Este trabajo concluyó que el incremento tanto de la distancia entre el distribuidor de flujo y el primer tubo, como del diámetro del orificio del distribuidor, conlleva a un incremento del número de Reynolds de transición. Además, propusieron correlaciones de los números de Reynolds de transición en función de la distancia entre el distribuidor y el primer tubo, así como del diámetro y espaciado de los orificios del distribuidor.

Originalmente, Liu et al. [74] focalizaron su estudio experimental en el modo de flujo gota para diferentes fluidos y espaciados entre tubos. Cuantificaron el diámetro de la gota por medio de una cámara de alta velocidad y propusieron una correlación para su cálculo. Asimismo, dividieron el modo de flujo gota en 4 diferentes procesos, los cuales se pueden ver en las fotos capturadas de la evolución de la gota en la Figura 1.16. Estas fases también fueron observadas por Killion y Garimella [27]. Por último, Yan et al. [75] analizaron el impacto del flujo de

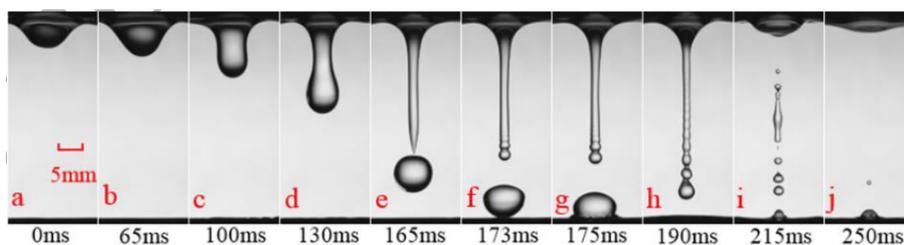


Figura 1.16: Progresión de la gota en el modo de flujo gota [74]: formación (a-b); caída (c-f); impacto (f-h), rotura del cuello y repliegue (e-j).

masa, la transferencia de calor y la disposición de los orificios del distribuidor en el modo de flujo, el espesor del film y la transferencia de calor en una matriz de tubos horizontales. Las imágenes ilustraron que el comportamiento del flujo se puede dividir en diferentes etapas (Figura 1.17):

- Formación del film sobre la parte superior del tubo.
- Expansión del film.

- Encogimiento del film en la parte central.
- Recopilación del líquido en la parte inferior.

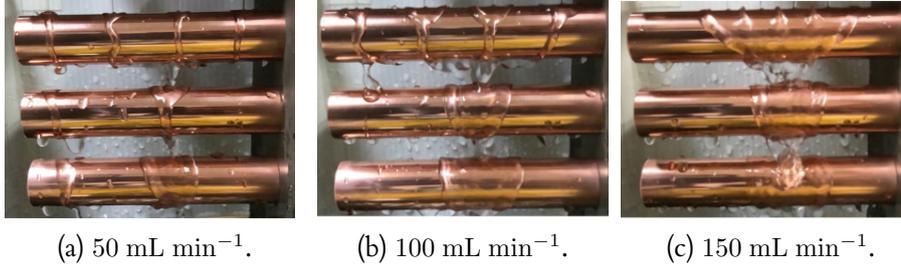


Figura 1.17: Hidrodinámica del flujo para diferentes caudales.

La Figura 1.17 muestra que, como consecuencia del encogimiento del film, la superficie mojada es mayor en la primera mitad del tubo. Por consiguiente, la máxima transferencia de calor de las mediciones se produce en esta zona. Además, como consecuencia de la reducción del área de mojado, la transferencia de calor disminuye en los tubos inferiores [75].

Con el objetivo de comparar las condiciones de trabajo de los estudios analizados en la sección 1.3.2, en la Tabla 1.5 se recogen el número de Reynolds y el número de Galileo modificado de los trabajos analizados orientados a la hidrodinámica, donde se muestra que la mayor parte de los estudios hidrodinámicos se centraron en mayores números de Reynolds que los que comúnmente se utilizan en absorbedores de tubos horizontales que trabajan con la mezcla LiBr – H₂O:

Tabla 1.5: Número de Reynolds y Galileo modificado para los diferentes ensayos experimentales de la bibliografía orientados al estudio hidrodinámico.

Autor	Reynolds	$(Ga_m)^{1/4}$
Hu y Jacobi [63]	0-580	5-531
Roques et al. [65]	50-900	17-455
Nosoko et al. [67]	10-150	455
A. Mohamed [69, 70]	0-1000	5-546 ¹
Wang et al. [72]	0-575	4-490
Wang et al. [76]	0-800	24-658
Chen et al. [71]	73-634	19-407
Liu et al. [74]	25-120	178-545
Yan et al. [77]	138-416	455

Una vez detallados los estudios hidrodinámicos, a continuación, se resumirán los resultados más importantes de los trabajos orientados al análisis del espesor del film.

¹A. Mohamed Mohamed [69, 70] proporcionó los datos del número de Galileo $Ga = \frac{\rho\sigma}{\mu^3g}$, no del número de Galileo modificado $Ga_m = \frac{\rho\sigma^3}{\mu^3g}$. Como no reporta las propiedades termofísicas de todos los fluidos del estudio, no es posible calcular este parámetro. Por esa razón, directamente se ha provisto el número de Galileo $(Ga)^{1/4}$.

Espesor del film

El espesor del film es otro de los factores determinantes en el comportamiento de absorbedores, ya que, tanto la transferencia de masa de la interface, tienen una gran dependencia. Por esta razón, numerosos autores han realizado el esfuerzo de medir experimentalmente el espesor del film en FFHX, sobre todo en los que operan con agua.

La revisión de la bibliografía se ha enfocado a los FFHX de tubos horizontales. La mayor parte de estos trabajos han comparado sus resultados con la teoría de Nusselt [78]. Éste realizó un estudio analítico para predecir el comportamiento del modo de flujo lámina despreciando los efectos de la cantidad de movimiento del fluido y las fuerzas de tensión superficial. Según su teoría, el espesor mínimo del film se obtenía cuando $\theta = 90^\circ$. Las expresiones propuestas para la predicción del espesor (δ) y la velocidad tangencial (v_{tan}) (Ecuación (1.6) y Ecuación (1.7), respectivamente) se presentan en la Figura 1.18:

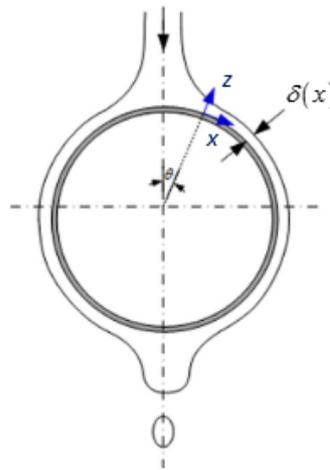


Figura 1.18: Evolución del espesor del film a lo largo de la dirección tangencial [79].

$$\delta = \left[\frac{3\mu_l \Gamma}{\rho_l (\rho_l - \rho_v) g \sin \theta} \right]^{1/3} \quad (1.6)$$

$$v_{\text{tan}} = \frac{\rho_l g \sin \theta}{2\mu_l} (2\delta z - z^2) \quad (1.7)$$

Varios autores han medido el espesor del film del agua usando una cámara de vídeo de alta velocidad para capturar imágenes de la interface iluminada mediante un láser, en contraste con el polvo fluorescente que se introduce en el fluido [80–83]. Estos autores concluyeron que la teoría de Nusselt se cumplía mejor en la parte superior del tubo que en la inferior y propusieron nuevas correlaciones para el cálculo del espesor del film. Concretamente, el espesor mínimo se situaba en ángulos circunferenciales mayores que la prevista por Nusselt $90^\circ < \theta < 135^\circ$. Concretamente, Chen et al. [80] afirmaron que el diámetro de los tubos no tiene mucha influencia en los resultados.

En lo que se refiere a la técnica de análisis, Xue et al. [83] cuantificaron que el error en la medición puede llegar casi a un 50 % debida a la distorsión óptica. Yang et al. [77], por su parte, compararon la técnica anterior con la técnica de absorción espectroscópica del diodo láser; en el cual obtuvieron desviaciones del 4.57 %. Hou et al. [84] realizaron la investigación experimental usando un micrómetro de desplazamiento para determinar la distribución del espesor del film de agua. En este caso, el film también presentó una distribución asimétrica alrededor del perímetro del tubo horizontal y aumentaba conforme decrecía la distancia entre tubos. Además de ello, vieron que el espesor obtenido en un tubo liso era mayor que el logrado en un tubo de superficie avanzada, donde el diámetro no tenía demasiada influencia.

Para identificar el modo de flujo de estos trabajos, se ha calculado el número de Reynolds, el cual se ilustra en la Tabla 5.

Tabla 1.6: Número de Reynolds del film de los diferentes ensayos experimentales orientados a la estimación del espesor.

Autores	Re
Gstoehl et al. [81]	26-744
Wang et al. [82]	180-574
Hou et al. [84]	150-800
Chen et al. [80]	184-368
Yang et al. [77]	320-640

Considerando la Ecuación (1.2) propuesta por Hu y Jacobi para el cálculo del número de Reynolds de transición, la mayor parte de los estudios el modo de flujo es de tipo columna y/o lámina; seguramente como consecuencia de la orientación hacia aplicaciones de desalinación. Solamente el trabajo de Gstoehl et al. [81] presenta valores de espesor en los modos de gota y columna. Sin embargo, se exponen valores promedios, imposibilitando el análisis del comportamiento transitorio del espesor del film producido en estos tipos de flujos. Por lo tanto, como el modo de flujo más común en los absorbedores de tubos horizontales es de tipo gota o columna (Tabla 1.4), la evolución del espesor en condiciones de trabajo de absorbedores es un área que no ha sido ampliamente estudiado hasta el día de hoy.

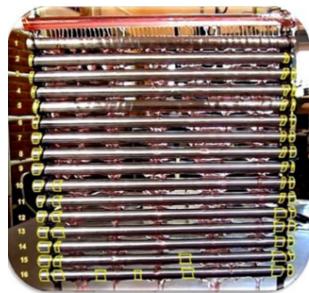
Área de mojado

Otro parámetro muy importante estudiado en los FFHX de forma experimental ha sido el área de mojado. Como se ha mencionado en la Sección 1.3.2, su influencia en el comportamiento del absorbedor y, por consiguiente, en el rendimiento del transformador de calor, es importante.

Stärk et al. [85] analizaron experimentalmente la mojabilidad de un *falling film* de tubos horizontales diseñado para destiladores de efecto múltiple, el cual operaba con dos fluidos diferentes: agua desionizada y agua salada. Dentro de su estudio, investigaron el considerable efecto que tienen en el área de mojado las

propiedades termofísicas de los fluidos y, sobre todo, el ángulo de contacto. Stárk et al. [85], al igual que Yan et al. [75], observaron en sus respectivos estudios que el área de mojado era mayor cuanto menor es el ángulo de contacto. Asimismo, este área disminuía en los tubos de las filas inferiores. Otro factor importante mostrado por Stárk et al. [85], fue la histéresis del área de mojado. En sus respectivos ensayos, la superficie mojada era mayor cuando el caudal de ensayo se fijaba comenzando de un caudal mayor, que cuando se partía desde un caudal menor.

Lazcano-Véliz et al. publicaron dos estudios sobre la mojabilidad de un generador de LiBr – H₂O: el primero, un haz de tubos horizontales [86] (Figura 1.19a) y el segundo, un banco helicoidal concéntrico [87] (Figura 1.19b). Observaron que, en el banco horizontal, los tubos inferiores se mojaban menos y propusieron un número de Reynolds óptimo de funcionamiento para el banco ($Re \approx 57$). Asimismo, repararon que el modo de flujo variaba a lo largo de la dirección vertical. En la Figura 1.19a se ilustra que, aunque teóricamente el modo de flujo es de tipo columna (Ecuación (1.2)), al unirse diferentes columnas, se forman grupos de flujos de tipo lámina en la parte inferior. En cuanto al banco helicoidal, se llegaron a obtener ratios de mojado del 99.52 % en el modo gota, el cual consideraron como muy favorable para la transferencia de calor y masa en FFHX [87]. Otros trabajos experimentales también han señalado la importancia



(a) Banco horizontal para $Re = 57$ [86]



(b) Banco helicoidal en modo gota [87].

Figura 1.19: Mojabilidad en diferentes configuraciones y condiciones de trabajo de *falling films*.

del área de mojado en la transferencia de calor y masa de FFHX. Ribatski y Thome [88] propusieron dividir la superficie en dos zonas diferentes (zona mojada y zona no mojada) para la estimación de la transferencia de calor promedio de un evaporador *falling film*. Para el caso del ratio de mojado (*wetting ratio*, WR), propusieron la siguiente Ecuación: $WR = 0.0024 Re^{0.91}$. El grupo de Garimella et al. relacionó en varios trabajos los resultados de un absorbedor de H₂O – NH₃ con la mojabilidad. Por ejemplo, con el absorbedor con microcanales [89], el WR creció hasta un $0.29 < WR < 0.82$, respecto al $0.21 < WR < 0.3$ del absorbedor previamente diseñado [90]. Asimismo, este grupo ha publicado recientemente un trabajo de documentación visual muy interesante en los FFHX horizontales en condiciones reales [91] (Figura 1.20). El modo de flujo fue mayormente de tipo gota y observaron que estas gotas aportaban un área adicional. Según este trabajo, la mayor parte de las gotas se forman por la cantidad de movimiento transmitido en el impacto de la gota del tubo anterior (Figura 1.20c). El movimiento axial (Figura 1.20b) observado después del impacto varía el espesor y el área de mojado a lo largo del tubo (Figura 1.20a). En el rango analizado, el

líquido no mojaba completamente los tubos; y los tubos superiores tenían un ratio de mojado mayor. Asimismo, concluyeron que las propiedades termofísicas afectan al comportamiento de una manera compleja.

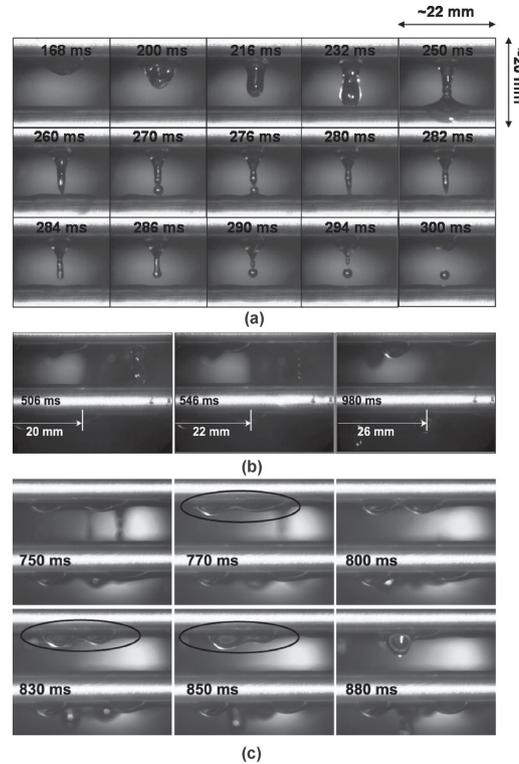


Figura 1.20: Características de la gota (a) Impacto de la gota. (b) Movimiento axial. (c) Interacción entre gotas [91].

En resumen, tanto la ecuación de Nusselt, como la mayor parte de los ensayos experimentales se han centrado en flujos de modo columna o lámina. No obstante, los absorbedores de $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$ operan entre los modos gota y columna. Asimismo, los resultados han demostrado que el espesor varía temporal, axial, radial y circunferencialmente, así como con las propiedades relacionadas con la mojabilidad: ángulo de contacto y tipo de superficie (mejorada/no mejorada). Éstos tienen una gran influencia en la hidrodinámica y el área de mojado y, por consiguiente, impactan en la transferencia de calor y masa. Sin embargo, hasta el día de hoy ningún trabajo ha cuantificado el efecto del ángulo de contacto sobre el comportamiento del absorbedor, por lo que se necesita investigar más para dar respuesta a las numerosas cuestiones relacionadas con este fenómeno.

1.4 Transferencia de calor y masa en la interface líquido-vapor

Tal y como ocurre en muchas aplicaciones, dentro de los diferentes mecanismos de transferencia de calor y masa, la difusión másica es el mecanismo limitante del proceso en los absorbedores de $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$. Esto se debe al bajo coeficiente de difusión (D) de la solución $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$ [32]. No obstante, en la mayoría de

los casos la difusión suele estar acompañada de otro fenómeno.

En la bibliografía, se pueden encontrar numerosos artículos que han analizado la transferencia de calor y masa entre un líquido y un gas desde el punto de vista teórico y/o numérico. Estos resultados han sido organizados de acuerdo a las siguientes aplicaciones:

- Absorción de CO_2 [92–97].
- Máquinas de absorción de amoníaco [33, 98–100] y bromuro de litio [54, 62, 79, 101–103].
- Sistemas de destilación [104–108].
- Deshumidificadores de desecantes líquidos [109–112].
- Biorreactores [113].

La mayoría de estos estudios ha considerado dos métodos para calcular la cantidad de masa transferida en la interface:

- La utilización de correlaciones teórico-experimentales de los coeficientes de transferencia de calor y masa, como por ejemplo en los siguientes trabajos [33, 39, 59, 109, 112, 114, 115].
- La utilización de formulaciones en función de las propiedades termofísicas y las variables termodinámicas, tal y como se detalla en la bibliografía [96, 101, 103, 113, 116].

El empleo de correlaciones teórico-experimentales dificulta el análisis de la influencia de diferentes variables en el comportamiento de la absorción, ya que muchas de ellas carecen de explicación física. Por lo tanto, en esta tesis doctoral se aplicará solamente el método en base a las formulaciones. Para la formulación de la difusión, en la bibliografía se han usado dos leyes fundamentales:

1. La ley de Fick: Esta ley es la más fundamental y la más empleada para describir la difusión, el cual se caracteriza por medio del coeficiente de difusión. Esta descripción es la más común en física, química, y biología.
2. Una segunda ley (no tiene un nombre formal) basada en el uso del coeficiente de transferencia de masa: El empleo de esta ley es muy frecuente en campos como la ingeniería química y la medicina.

Para la comparación de las dos leyes, Cussler [117] propone el siguiente ejemplo. La Figura 1.21 muestra dos recipientes conectados por un tubo capilar fino y largo. Los recipientes se encuentran a una presión y temperatura constantes, y tienen el mismo volumen. El recipiente superior contiene nitrógeno (N_2) y el otro dióxido de carbono (CO_2). Para medir la velocidad de mezclado, se mide la concentración de CO_2 en el recipiente superior, el cual presenta una evolución temporal lineal. En estas condiciones, el flujo de masa se define con la Ecuación

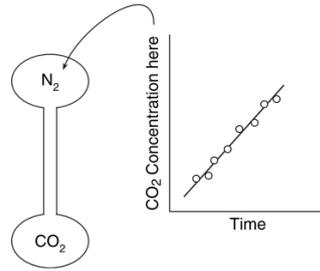


Figura 1.21: Experimento simple para la difusión [117].

(1.8):

$$\text{Flujo CO}_2 = \frac{\text{Cantidad masa transferida}}{\text{tiempo (área capilar)}} \quad (1.8)$$

Asumiendo que el flujo es proporcional a la concentración, se define el coeficiente de transferencia de masa κ . Así, el flujo se puede expresar en función de la concentración como (Ecuación (1.9)):

$$\text{Flujo CO}_2 = \kappa \left(\begin{array}{c} \text{Diferencia} \\ \text{concentración} \\ \text{CO}_2 \end{array} \right) \quad (1.9)$$

Por otro lado, se puede asumir que el flujo es inversamente proporcional a la longitud capilar. Si se define D como el coeficiente de difusión, se puede determinar el flujo de masa para la Ley de Fick como (Ecuación (1.10)):

$$\text{Flujo CO}_2 = D \left(\frac{\text{Diferencia concentración CO}_2}{\text{Longitud capilar}} \right) \quad (1.10)$$

Aunque las dos leyes funcionan correctamente en la mayor parte de los casos, resulta que ninguna de las dos suposiciones es adecuada para todos los casos. Por ejemplo, cuando el capilar es fino o existe alguna reacción química entre los dos gases, el flujo podría no ser proporcional a la diferencia de concentración. Normalmente, se tiende a expresar los resultados mediante la ley de Fick, por la naturaleza física de su definición. Sin embargo, en muchos casos es conveniente utilizar una aproximación más fenomenológica para calcular las transferencias de masa promedios en función de la posición y el tiempo, por medio de coeficientes de transferencia de masa.

A continuación, se definen las dos leyes fundamentales.

1.4.1 Ley de Fick

En 1855, Fick [118] formuló que la razón de difusión másica de una especie en una mezcla gaseosa es proporcional al gradiente de concentración de esa especie. Concretamente, definió el flujo de masa usando la analogía de Fourier [119]. La concentración se puede expresar en base a la fracción másica o molar.

En este trabajo, el término w se referirá a la fracción másica de la especie; es decir, la cantidad de masa de una especie respecto a la cantidad de masa total. Para la concentración molar, se utilizará el término c . Como la solución analizada en este trabajo es el LiBr – H₂O, la fracción másica de LiBr, y la concentración molar, se definirán con las Ecuaciones (1.11a) y (1.11b), respectivamente.

$$w_{\text{LiBr}} = \frac{m_{\text{LiBr}}}{m_{\text{total}}} = \frac{\rho_{\text{LiBr}}}{\rho_{\text{total}}}, \quad (1.11a)$$

$$c_{\text{LiBr}} = \frac{N_{\text{LiBr}}}{V} \left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right). \quad (1.11b)$$

Así, el flujo de difusión unidimensional de especies por unidad de área (\mathbf{J}) en coordenadas cartesianas se calcularía con la Ecuación (1.12), el cual es conocido como la Primera Ley de Fick:

$$\mathbf{J} = -\rho D \frac{\partial w}{\partial z} \text{ (kg s}^{-1} \text{ m}^{-2}\text{)}, \quad (1.12)$$

donde D es el coeficiente de difusión. Fick determinó la siguiente ecuación de conservación (Ecuación (1.13)), algunas veces llamado como la Segunda Ley de Fick:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = D \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}. \quad (1.13)$$

En función de la naturaleza de la difusión, la ley de Fick adquiere diferentes formas. En el caso de la difusión estacionaria (Figura 1.22), como el flujo es constante, el perfil de fracciones másicas a través del film para un régimen puramente difusivo es lineal.

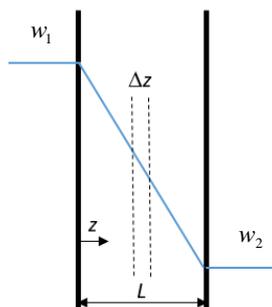


Figura 1.22: Difusión estacionaria a través de un film [117].

Así, el flujo de masa se calcularía mediante la Ecuación (1.14):

$$\mathbf{J} = -\rho D \frac{(w_2 - w_1)}{L}. \quad (1.14)$$

La mayor parte de los artículos analíticos y numéricos analizados en esta tesis doctoral han utilizado la ley de Fick para el cálculo del flujo de masa absorbido [40, 53, 56, 60, 97, 102, 103, 110, 116, 120–140].

1.4.2 Teorías de coeficientes de transferencia de masa

Este punto de vista asume que los cambios en la concentración/fracción másica se limitan a la interface y que en las demás regiones los fluidos están bien mezclados. En función de la definición, el coeficiente de transferencia de masa puede tener diferentes unidades. La definición más empleada es aquella en el cual el flujo (N_1) es definido como la cantidad de moles transferido por unidad de área y tiempo (Ecuación (1.15)):

$$N_1 = \kappa (c_{if} - c_\infty) \quad (1.15)$$

donde c_{if} y c_∞ son la concentración molar de equilibrio en la interface y en el resto del líquido, respectivamente.

Normalmente, los coeficientes se calculan mediante correlaciones que utilizan números adimensionales. Éstas se dividen en correlaciones para fluido-sólido o fluido-fluido y tienen una precisión del orden del 30 %. Por ejemplo, una correlación utilizada en los *falling film* es (Ecuación (1.16), [117]):

$$\frac{\kappa z}{D} = 0.69 \left(\frac{z v_{avg}}{D} \right)^{0.5} \quad (1.16)$$

donde v_{avg} es la velocidad promedio del film. Como se puede observar, el coeficiente de transferencia de masa depende del coeficiente de difusión y la velocidad, ambos elevados a 0.5. Por lo tanto, cualquier teoría debería incluir ambas variables. No obstante, la Ley de Fick (Ecuación (1.12)) no considera la variable de la velocidad. Para la necesidad de la inclusión de la velocidad, se han desarrollado diferentes teorías. En este caso se resumen las dos teorías principales:

Teoría del film

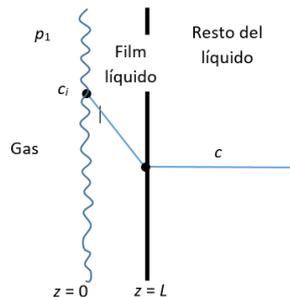


Figura 1.23: Esquema de la interface del film para la transferencia de masa.

Esta teoría fue propuesta por Nernst en 1904 [141] y asume que existe un film líquido que se encuentra estancado en la interface (Figura 1.23). Asimismo, se realizan las siguientes hipótesis:

- Las regiones están divididas en gas libre, el film líquido y el resto del líquido.
- La transferencia de masa y el flujo del fluido ocurre en un delgado film de la interface.

- El flujo de masa a través del film es estacionario.

La teoría asume que el refrigerante tiene una difusión lenta dentro del absorbente y que esa difusión se genera únicamente en la dirección transversal del film, el flujo se podría calcular mediante la Ecuación (1.15).

Como se ha considerado un flujo estacionario, se puede suponer que el perfil de concentraciones es lineal. Igualando con la ley de Fick, se obtiene la Ecuación (1.17) para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa:

$$\kappa = \frac{D}{L}. \quad (1.17)$$

El flujo másico se calcularía de la siguiente manera (Ecuación (1.18)), en función de las fracciones másicas:

$$J_1 = \rho\kappa (w_{if} - w_\infty) = \frac{\rho D}{L} (w_{if} - w_\infty). \quad (1.18)$$

Como se observa, según esta teoría el coeficiente de transferencia de masa κ es directamente proporcional al coeficiente de difusión D e independiente de la velocidad, el cual no coincide con las correlaciones observadas en la bibliografía [117] (Ecuación (1.16)). Aun así, esta teoría es válida porque proporciona una visión física simple del problema y predice con precisión la transferencia de masa causada por soluciones concentradas para algunas condiciones de trabajo [117].

Teoría de Penetración de Higbie

Esta segunda teoría fue propuesta por R. Higbie en 1934 [142] y ofrece una mejor visión física que la anterior, aunque con una complejidad matemática mayor. Esta teoría ha sido utilizada en numerosos trabajos, tal y como se refleja en la bibliografía [62, 96, 111, 113, 143–147]. Excepto en los estudios de Chen et al. [62] y Wen et al. [111], en todos los demás casos que han utilizado esta teoría la concentración/fracción másica del refrigerante/gas absorbido en el líquido absorbente ha sido muy baja.

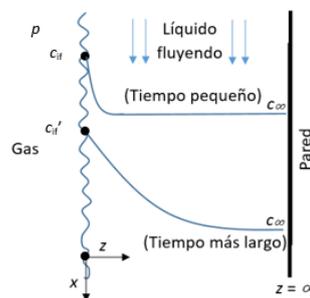


Figura 1.24: Teoría de penetración de Higbie.

Según esta teoría, la transferencia de masa por difusión ocurre en el film que se encuentra cerca de la interface. Considerando que en la interface la concentración se encuentra en equilibrio con el gas, junto con las hipótesis realizadas en la teoría del film, esta teoría realiza las siguientes suposiciones :

- El espesor del líquido es muy grueso.
- La difusión únicamente es importante en la dirección transversal.
- La convección solamente es relevante en la dirección longitudinal.
- Cada elemento del líquido permanece en contacto el mismo periodo de tiempo con el gas/vapor.

La resolución de este problema se realiza por medio de la segunda ley de Fick (Ecuación (1.13)). Para su resolución, se aplica el método de combinación de variables de Boltzmann [148], con las siguientes condiciones de contorno (Ecuaciones (1.19a), (1.19b) y (1.19c)).

$$t = 0, \quad z > 0, \quad c_{if} = c_{\infty}, \quad (1.19a)$$

$$t > 0, \quad z = 0, \quad c = c_{if}^{eq}, \quad (1.19b)$$

$$z = \infty, \quad c = c_{\infty}. \quad (1.19c)$$

Tal y como se ha realizado anteriormente, suponiendo que el coeficiente de difusión D es constante, se puede obtener la relación de c_{if} a lo largo de z en un instante de tiempo t (Ecuación (1.20)).

$$\frac{c_{if}^{eq} - c}{c_{if}^{eq} - c_{\infty}} = \operatorname{erf} \frac{z}{2\sqrt{Dt}}, \quad (1.20)$$

donde c_{∞} es la concentración en el resto del fluido, c , la concentración a una distancia z de la interface y c_{if}^{eq} la concentración de equilibrio en la interface. La función error, erf , se define en la Ecuación (1.21):

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-z^2) dz. \quad (1.21)$$

Suponiendo que la difusión másica se produce en las dos direcciones de la interface (dirección líquido-gas y dirección gas-líquido), el cual se denominará difusión 2D, y combinando con la primera ley de Fick (Ecuación (1.12)) se obtiene la Ecuación (1.22) en base másica:

$$\mathbf{J} = \rho \sqrt{\frac{D}{\pi t}} e^{-\frac{z^2}{4Dt}} (w_{if}^{eq} - w_{\infty}). \quad (1.22)$$

Como el objetivo es calcular el flujo en la interface, esto es, cuando $z = 0$, la ecuación tomaría la siguiente forma:

$$\mathbf{J} = \rho \sqrt{\frac{D}{\pi t}} (w_{if}^{eq} - w_{\infty}). \quad (1.23)$$

Este flujo de masa es para el instante t , y no un promedio sobre el tiempo. Así, el coeficiente de transferencia de masa para un instante t resulta

$$\kappa(t) = \sqrt{\frac{D}{\pi t}}. \quad (1.24)$$

El coeficiente promedio de la transferencia de masa (κ_{avg}) en un intervalo de tiempo (t_c también llamado tiempo de contacto) se calcularía integrando la Ecuación (1.25)

$$\kappa_{\text{avg}} = \frac{1}{t_c} \int_0^{t_c} \kappa(t) dt = 2\sqrt{\frac{D}{\pi t_c}}. \quad (1.25)$$

Existen diferentes hipótesis para el cálculo del tiempo de contacto. Como en este caso se ha utilizado la hipótesis de que el tiempo de contacto es corto, se calcula con la Ecuación (1.26)

$$t_c = \frac{x}{v_{\text{max}}}, \quad (1.26)$$

donde v_{max} es la velocidad máxima de la interface. Por lo tanto, el coeficiente de transferencia de masa promedio se obtiene mediante la Ecuación (1.27):

$$\kappa_{\text{avg}} = 2\sqrt{\frac{Dv_{\text{max}}}{\pi x}}. \quad (1.27)$$

Por consiguiente, el flujo de masa promedio absorbido se calcularía por medio de

$$J_{\text{avg}} = 2\rho\sqrt{\frac{Dv_{\text{max}}}{\pi x}} (w_{\text{if}}^{\text{eq}} - w_{\infty}). \quad (1.28)$$

Esta misma ecuación (Ecuación (1.28)) se obtiene por medio de la Teoría de renovación de superficie [149]. Ésta fue propuesta por Danckwerts en 1951 y, dividiendo la geometría considerada por Higbie en dos regiones, calcula el coeficiente de transferencia de masa promedio utilizando la probabilidad.

Es importante resaltar que estas teorías no son muy satisfactorias en algunas aplicaciones. De hecho, en 1977 Schlunder [150] señaló que la hipótesis de que la velocidad es uniforme difiere mucho de la realidad y, por consecuencia, los coeficientes de transferencia de masa medidos experimentalmente son mayores que los previstos por medio de estas teorías.

Cabe destacar que la mayor parte de los estudios teóricos y numéricos de la transferencia de calor y masa en los procesos de absorción de vapor han sido formulados mediante la ley de Fick [40, 53–55, 60, 93, 97, 102, 110, 116, 120–140, 151]. Aún así, es importante subrayar que en la absorción de gases como el CO_2 prevalece la ley de Higbie [62, 111, 113, 143–147, 152]. Por lo tanto, hasta el presente no hay un consenso establecido que priorice alguna ley en los procesos de absorción. Además, a pesar de la amplia investigación en el campo de la absorción, no existe un solo estudio unificado que aborde la diferencia existente entre las diferentes formas de determinar la absorción.

Asimismo, los estudios que emplean la ley de Fick han realizado dos diferentes hipótesis del tipo de difusión existente en la interface. Algunos han supuesto que la difusión másica en la interface ocurre en las dos direcciones (difusión 2D) y, por lo tanto, el flujo de absorción ha sido calculado mediante la Ecuación de Fick (1.12), como por ejemplo en [29, 55, 93, 97, 102, 121, 123, 137, 151].

Por el contrario, otros trabajos han considerado que el absorbente no es volátil y, por consiguiente, que no existe transferencia de masa líquido-vapor (difusión 1D) [40, 54, 60, 110, 120, 122, 124, 126–129, 134–136, 138–140, 153, 154]. Este fenómeno ha sido nombrado de forma diferente como, por ejemplo, difusión unilateral [155]. Como resultado, la ecuación para la estimación del flujo local de absorción ha sido modificada, introduciendo el término de la fracción másica del absorbente en el denominador ($w_{\text{LiBr,if}}$). El desarrollo para la obtención de esta ecuación se detalla en la Sección 5.2.6.

Hasta el momento, la literatura no muestra una evidencia acerca de qué hipótesis es más conveniente, ya que la mayor parte se ha limitado a realizar el análisis de la absorción con una metodología concreta y no hay ningún trabajo comparativo entre las diferentes metodologías. Además, el efecto de la hipótesis en los resultados de los modelos de absorción tampoco ha sido examinada en detalle.

1.5 Estudios analíticos y numéricos de absorbedores *falling film heat exchangers*

La investigación sobre la absorción en FFHX desde el punto de vista analítico y numérico es una preocupación constante dentro de la comunidad científica y ha sido estudiada por muchos investigadores. Existe una gran variedad de artículos de diferentes tipologías de absorbedores (placa plana, tubos horizontales y verticales, de membranas, ...) operando con distintas mezclas de líquido-gas bajo distintas condiciones de trabajo.

Killion y Garimella [157] realizaron un resumen de los modelos orientados a la absorción de *falling films* de tubos horizontales que incluían la transferencia de calor y masa. Sus principales conclusiones fueron las siguientes:

- La comprensión de la hidrodinámica del film necesita ser mejorada, ya que tiene un gran impacto en los resultados. Además, la asunción de flujo laminar continuo no es muy apropiada, ya que en la práctica se buscan inestabilidades del flujo para mejorar la absorción.
- Se requieren modelos tridimensionales (3D) que incluyan efectos de la mojabilidad de la superficie para predecir la variación del fenómeno de la mojabilidad tanto espacial, como temporalmente.
- Los modelos deberían contener el efecto del impacto de la gota y de las ondas generadas debido a su influencia en la redistribución de la concentración.
- La hidrodinámica tiene que ser considerada de manera acoplada con la transferencia de calor y masa, ya que éstas alteran las propiedades termofísicas.

Desde entonces, existen numerosos estudios de análisis de absorbedores de LiBr – H₂O realizados mediante modelos analíticos y numéricos en la literatura. Para facilitar el seguimiento del estado del arte, estos trabajos se han clasificado como:

- Modelos analíticos y numéricos desarrollados por diferentes autores.

- Modelos numéricos que usan el *Finite Volume Method*.

Esta clasificación se ha realizado debido a que los modelos analíticos y numéricos desarrollados no han considerado las propiedades de mojabilidad del absorbedor. Éstos, con el objetivo de adecuar los resultados de los modelos a los experimentales, han introducido ajustes mediante correlaciones empíricas. Además, en el caso de los modelos analíticos estudiados, no se ha realizado ningún trabajo para predecir la hidrodinámica o el espesor del film, se han limitado solamente en analizar los trabajos orientados a la predicción de la transferencia de calor y masa.

1.5.1 Modelos analíticos y numéricos de absorbedores desarrollados por diferentes autores

En los FFHX de tubos horizontales que operan con la solución LiBr – H₂O, se han realizado diversos modelos, tanto analíticos [158–160], como numéricos [33, 40, 42, 116, 122, 133, 138] y asumiendo a la vez, diferentes simplificaciones e hipótesis. El objetivo de estos trabajos ha sido predecir la transferencia de calor y masa de absorbedores de tubos horizontales que operan con la solución LiBr – H₂O. No obstante, todos estos estudios tomaron como hipótesis la mojabilidad completa de los tubos.

Los primeros que usaron el concepto de ratio de mojabilidad o *Wetting Ratio* (WR) en sus modelos fueron Jeong y Garimella [161]. El WR fue definido como:

$$WR = \frac{A_{\text{mojada}}}{A_{\text{total}}} \quad (1.29)$$

Desde entonces, numerosos autores han incluido valores constantes del WR en sus modelos [43, 60, 126, 140, 162]. Los resultados de estos modelos fueron comparados con ensayos experimentales. Cabe destacar que utilizaron el mismo valor de WR para todos los tubos, aunque Sultana et al. [140] recalcaron la importancia de incluir un WR variable en función del número de tubos. Los valores de WR utilizados para la correlación de resultados estaban dentro del rango $0.50 < WR < 0.83$. Todos estos autores subrayaron la importancia de este parámetro en los resultados de los modelos, sobre todo en caudales bajos.

Posteriormente, Giannetti et al. [79, 163] propusieron calcular el WR en función del número de Reynolds crítico necesario para conseguir la mojabilidad completa, Re_0 (Ecuación (1.30)):

$$WR = \frac{Re}{Re_0}. \quad (1.30)$$

En el primer trabajo [163], usaron la relación propuesta por Maron et al. [164]. Sin embargo, en el segundo trabajo [79] propusieron una correlación propia.

Nagaravapu y Garimella [100] emplearon de una forma similar una correlación propuesta por Krishna y Garimella [165]. En este caso el absorbedor fue de H₂O – NH₃. Los valores de WR oscilaron entre $0.80 < WR < 0.83$.

Por otro lado, los FFHX de LiBr – H₂O de placas planas [29, 102, 114, 129, 134–137, 154, 166, 167] y tubo verticales [53, 54, 139] también han sido estudiados por muchos investigadores por medio de modelos propios. Sin embargo,

todos estos modelos han considerado que el dominio computacional tiene solamente dos dimensiones (2D) y a la vez, la hipótesis de mojabilidad plena. Por lo tanto, en estos modelos no se ha evaluado la influencia de la mojabilidad, sobre todo en la FFHX de placas planas.

En resumen, la mayoría de los estudios se ha centrado en utilizar ratios de mojado puramente empíricos o incluso una mojabilidad completa, lejos de la realidad experimental y, por lo tanto, existe la necesidad de analizar el comportamiento de los absorbedores FFHX considerando el efecto de la mojabilidad.

1.5.2 Modelos numéricos de absorbedores basados en el *Finite Volume Method*

Debido al interés de su comportamiento y el avance de herramientas numéricas basadas en el método de volúmenes finitos (FVM, del inglés *Finite Volume Method*), los absorbedores *falling film* han sido ampliamente estudiados por medio de este método. Todos estos estudios tienen en común la utilización del método *Volume of Fluid* (VOF), propuesto por Hirt y Nichols [168], para la captura de la interface líquido vapor y el método *Continuum Surface Force Model* (CSF), formulado por Brackbill et al. [169] para la inclusión de la fuerza creada por la tensión superficial. Sin embargo, el análisis del estado del arte no se ha centrado solamente en modelos de la solución LiBr – H₂O de absorbedores. Con el objetivo de profundizar en estos modelos, el estudio se ha extendido a otras soluciones y configuraciones de FFHXs.

Para el análisis de estos estudios, la Sección 1.5.2 se ha dividido en tres grupos:

1. Estudio de la transferencia de calor y masa.
2. Estudio de la hidrodinámica y el espesor del film (isotérmicos y adiabáticos).
3. Estudios de FFHXs que consideran el ángulo de contacto.

Estudios de la transferencia de calor y masa

Con el objetivo de estudiar el comportamiento del flujo de modo gota en los tubos horizontales, Killion y Garimella [170] fueron los primeros en realizar modelos isotérmicos de LiBr – H₂O en 2D y 3D basados en el FVM. La elección de este modo de flujo fue, según los autores, debido a que las gotas contribuyen significativamente en el proceso de absorción. Modelaron un tubo y usaron condiciones de contorno periódicas para modelar la interacción entre subsiguientes gotas. Observaron que los modelos 2D no predecían correctamente el flujo. Subramaniam y Garimella [103, 151] extendieron este trabajo incluyendo la transferencia de calor y masa. Los mismos autores observaron que la formación, separación y el impacto de las gotas afectaba considerablemente en la transferencia de calor y masa, ya que homogeneizaban la solución y con ella mejoraba considerablemente la transferencia de calor y masa.

En la misma línea, varios autores [171, 172] realizaron modelos 2D de FFHX de LiBr – H₂O de un tubo horizontal, así como en los tubos verticales y placas

planas [32, 123, 124, 131]. Sin embargo, el número de Reynolds de los estudios fue muy alto ($1702 \leq Re \leq 4171$), fuera del rango de operación de los absorbedores de LiBr – H₂O (Tabla 1.2).

Posteriormente, Chen et al. [62] analizaron en 3D la absorción de vapor de la solución LiBr – H₂O para un nuevo diseño de absorbedor. En este caso, el número de Reynolds de la solución fue de $Re = 20$. En los resultados de los modelos observaron que el nuevo diseño mejoraba considerablemente la mojabilidad de los tubos y, por consiguiente, la transferencia de calor y masa mejoraba hasta un 33.4%. De la misma forma, Hosseinnia et al. [132] analizaron la transferencia de calor y masa de un FFHX de tubos horizontales operando en los modos de flujo gota y columna. Estos concluyeron que el vapor absorbido era mayor en el modo gota, atribuyendo este comportamiento a su naturaleza transitoria.

Por otra parte, también se han realizado varios análisis de la transferencia de calor y masa en evaporadores para aplicaciones de desalinización. Abraham y Mani [104] realizaron un modelo 2D para analizar el efecto del caudal ($73 \leq Re \leq 1512$), el diámetro del tubo y la temperatura de la pared. Los resultados del espesor del film fueron comparados con Hou et al. [84]. La principal novedad fue que la transferencia de calor aumentaba disminuyendo el diámetro. Qi et al. [173] propusieron un modelo numérico 3D de un tubo ovalado para un rango de número de Reynolds de $28 \leq Re \leq 520$. La principal aportación fue la utilización de un ángulo de contacto de $\Psi = 30^\circ$ en las simulaciones, aunque este valor no coincide con el ángulo de contacto estático entre el agua y aluminio-latón (material de los tubos), tal y como se observa en el trabajo de Martínez-Urrutia et al. [174]. Los autores observaron que el coeficiente de transferencia de calor mejoraba un 20 – 22 % respecto a un tubo circular. En la misma línea, Yang et al. [175] realizaron un modelo en 2D para entender mejor los mecanismos microscópicos de la transferencia de calor en evaporadores *falling film* para números de Reynolds altos ($600 \leq Re \leq 1250$), los cuales concluyeron que tanto la conducción, como la convección, contribuyen significativamente en los mecanismos microscópicos de transferencia de calor.

Como se ha podido observar, en la mayoría de los trabajos orientados al análisis de la transferencia de calor y masa de modelos basados en el método FVM, el rango del número de Reynolds es mayor que el rango típico de los absorbedores de AHTs (Tabla 1.2). Solamente Killion y Garimella [170] y Chen et al. [62] para el caso de LiBr – H₂O, y Qi et al. [173] para el caso del agua, analizaron en el modo de flujo gota. No obstante, este último trabajo ha sido el único en tomar en cuenta las propiedades de mojabilidad, ya que todos los demás han considerado que las propiedades de mojabilidad son ideales (el ángulo de contacto ha sido de $\Psi = 0^\circ$). Es muy importante resaltar que el ángulo considerado en el estudio de Qi et al. [173] ha sido menor que el ángulo estático entre el agua y el aluminio-latón, que tiene un valor de alrededor de $\Psi = 60^\circ$ a temperatura ambiente, el cual fue medido por Martínez-Urrutia et al. [174]. Por todo ello, se confirma que a día de hoy no se ha estudiado en profundidad la influencia que tienen las propiedades de mojabilidad en los modelos de absorbedores basados en el FVM que operan con la mezcla LiBr – H₂O en flujos de modo gota.

Estudio de la hidrodinámica y el espesor del film

En los últimos años, se han multiplicado los esfuerzos para simular el comportamiento hidrodinámico del fluido en *falling films* mediante el método de FVM, utilizando el agua como fluido base y en condiciones isotérmicas y adiabáticas.

Sun et al. [176] estudiaron numéricamente las características del flujo de agua en 2 tubos horizontales. Los resultados fueron comparados con los resultados experimentales de Ouldhadda et al. [177] y la tendencia dentro del rango $30 \leq \theta \leq 120$ fue similar. En este caso el número de Reynolds del modelo fue alto ($Re > 400$).

Qiu et al. [178] realizaron un modelo en 2D de dos tubos horizontales con el objetivo de analizar la variación temporal del flujo de lámina y estudiar en detalle la distribución del espesor del film en la dirección circunferencial. Analizaron la influencia que tenían en estos parámetros el número de Reynolds de la solución ($300 \leq Re \leq 1200$) y la distancia entre tubos para diferentes diámetros. Los autores concluyeron que el flujo llegaba a un estado estacionario una vez la solución mojaba toda la superficie del tubo. Asimismo, el valor mínimo del espesor lo obtuvieron dentro del rango $100 \leq \theta \leq 140$. Esta diferencia lo atribuyeron al efecto de la cantidad de movimiento del fluido, el cual no fue considerado por Nusselt [78].

Qiu et al. [179] extendieron el trabajo para estudiar el espesor en 3D de flujos de modo columna ($171 \leq Re \leq 368$). Los resultados fueron comparados con Chen et al. [180], obteniendo errores menores que el 20%. En el modelo de 2 columnas, observaron que el espesor máximo se encontraba en el centro entre las columnas.

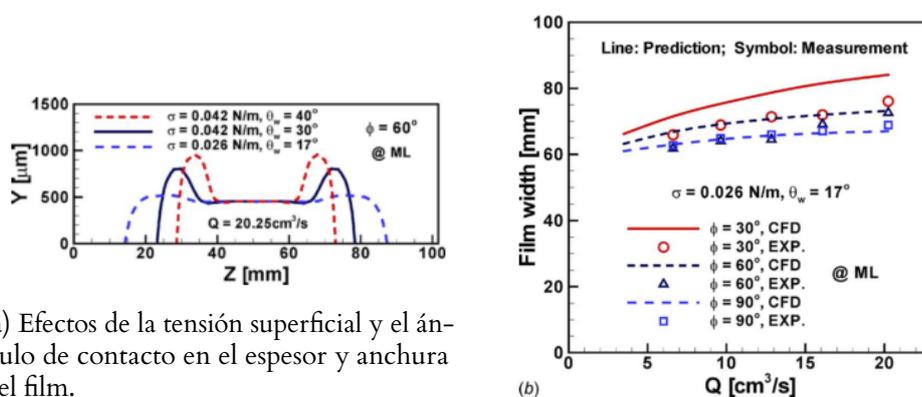
Chen et al. [181], por su parte, propusieron valores de los números de Reynolds críticos para diferentes modos de flujo de agua de un *falling film* mediante un modelo 3D de dos tubos, los cuales fueron validados experimentalmente por los mismos autores.

Paralelamente, Li et al. [182] estudiaron la influencia del contraflujo de gas en los tipos de flujo. Las principales novedades fueron que usaron una función propia (*User Defined Function*, UDF) que calculaba el arrastre producido por el gas y que utilizaban el modelo laminar o $k - \epsilon$ turbulento en función del número de Reynolds de transición, que lo estimaron en $Re = 350$. Los resultados para el tipo de flujo fueron validados mediante resultados experimentales realizados por ellos mismos. Observaron que, aumentando la velocidad del gas, aumentaban los números de Reynolds de transición entre modos de flujos, excepto en la transición columna-lámina.

Cabe destacar que, en todos los modelos isotérmicos, el número de Reynolds es mayor que en el rango de operación de absorbedores de AHTs (Tabla 1.2). Asimismo, todos estos modelos también asumen que las propiedades de mojabilidad son ideales. Por el contrario, los ensayos tanto de transferencia de calor y masa, como de caracterización de la mojabilidad del agua, han demostrado la influencia de estas propiedades, tales como el ángulo de contacto y la tensión superficial.

Estudios de *falling film heat exchangers* que consideran el ángulo de contacto

En la literatura existen varios modelos realizados para *falling films* de placas planas que resaltan la importancia de la mojabilidad en su comportamiento. Lan et al. [183] analizaron tanto numérica, como experimentalmente un FFHX con diferentes mezclas de agua y surfactante (*Surfynol 465*)². Observaron que, cuanto mayor era el ángulo de contacto, mayor era el espesor del film y menor el área de mojado del agua. La Figura 1.25a muestra que el área de contacto (Z) es mayor, mientras el espesor es menor (Y) en el caso del ángulo de contacto mínimo ($\theta = 17^\circ$) en una placa plana inclinada $\phi = 60^\circ$ respecto al eje vertical. Asimismo, afirmaron que los resultados numéricos estaban dentro de la incertidumbre de medida al realizar la comparación entre el área de mojado predicho con los resultados numéricos y el área medido en los ensayos experimentales para diferentes ángulos de contacto (Figura 1.25b). Igualmente, Qi et al. [184], Dong



(a) Efectos de la tensión superficial y el ángulo de contacto en el espesor y anchura del film.

(b) Comparación de los valores del film medidos y los obtenidos en la simulación.

Figura 1.25: Análisis de la mojabilidad en placas planas [183].

et al. [109] y Wen et al. [111] estudiaron el área de mojado y la absorción de humedad en un FFHX de placas planas de diferentes materiales con distintas propiedades de mojabilidad, operando con agua desionizada y $\text{LiCl} - \text{H}_2\text{O}$. Los resultados de los modelos confirmaron que las propiedades de mojabilidad tienen una influencia muy grande en el comportamiento del deshumidificador (Figura 1.26). Obtuvieron unos resultados muy parecidos a los experimentales y lograron mejoras de hasta el 28 % en el ratio de humedad al pasar de $\Psi = 85^\circ$ a $\Psi = 5^\circ$ en el ángulo de contacto. Para concluir con los deshumidificadores, recientemente Wen et al. [111] analizaron la influencia del ángulo de contacto en el ratio de absorción de humedad por medio de un modelo 3D basado en el FVM. Los resultados del modelo predecían el área de contacto de la placa plana con un error máximo de 3.58 %. Asimismo, mediante el uso de superficies hidrofílicas y curvadas, se consiguieron mejoras en el ratio de absorción de humedad de hasta un 70 %. En la misma línea, Singh et al. [185] investigaron la influencia del ángulo de contacto en el área de mojado de un FFHX de placa plana inclinada.

²En el trabajo de Lan et al. [183] el símbolo del ángulo de contacto empleado ha sido θ , mientras que en esta tesis doctoral se ha utilizado Ψ . Por esta razón, en el texto que se refiere a la Figura 1.25, θ representa al ángulo de contacto.

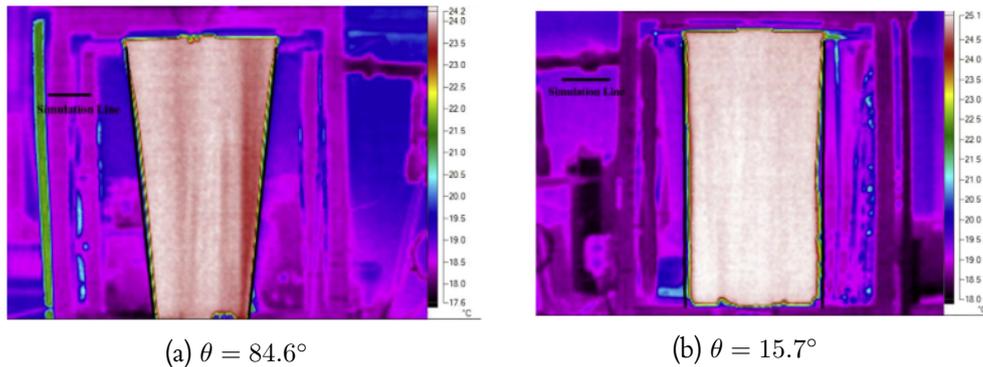


Figura 1.26: Comparación entre la interface obtenida por medio de modelos numéricos y en los ensayos experimentales para diferentes ángulos de contacto [109].

Concluyeron que el ángulo de contacto tiene una gran influencia en el área de mojado, aunque a partir de una inclinación de la placa de $\phi = 60^\circ$, el área de mojado permanece constante. Los resultados fueron validados mediante los resultados experimentales de Hoffmann et al. [186]. De la misma forma, Cooke et al. [187] efectuaron la comparación de su modelo con Hoffmann et al. [186], que tenía como novedad la utilización del refinamiento de malla avanzada (*Advanced Refinement Method*). En este caso, los resultados del área de mojado del modelo fueron menores que los resultados experimentales. Weber et al. [188] crearon dos modelos numéricos, uno para placas planas y otro para tubos horizontales, en dos códigos diferentes: *Open Foam* y *CFX*. El ángulo de contacto considerado para el agua fue de $\Psi = 70^\circ$. Los resultados ilustraron que *CFX* subestimaba el área de mojado, mientras que con *Open Foam* se conseguían mejores resultados, el cual atribuían al método semiexplícito empleado. Para terminar con los *falling film* de placa plana, Sebastia-Sáez et al. [152] observaron mejoras de hasta un 85 % en la transferencia de masa al pasar de un ángulo de contacto de $\Psi = 60^\circ$ a $\Psi = 20^\circ$.

En el caso de *falling films* de tubos horizontales, los primeros que analizaron la influencia de las propiedades de mojabilidad en un modelo FVM fueron Ji et al. [189]. Estos autores estudiaron el efecto del ángulo de contacto de un tubo hidrofílico ($\Psi < 90^\circ$) en la hidrodinámica, el área de mojado, el espesor y la velocidad de la solución LiBr – H₂O en un tubo horizontal mediante un modelo en 2D. El rango del número de Reynolds del estudio fue de $42 \leq Re \leq 264$ y observaron que el ángulo de contacto tiene una gran influencia en los resultados (excepto en la velocidad) y propusieron una ecuación alternativa para el cálculo del espesor.

Recientemente, el área de mojado y las propiedades de mojabilidad han cobrado una gran importancia en los análisis de FFHX de tubos horizontales.

Considerando el ángulo de contacto por medio de un modelo 2D, Zhao et al. [190] estudiaron la transferencia de calor en un FFHX de tubos horizontales, el cual operaba con tubos de cobre y agua. En este caso, emplearon un ángulo de contacto de $\Psi = 10^\circ$. Con un modelo FVM de 3D, pero en este caso usando un ángulo de contacto de $\Psi = 30^\circ$, Lee et al. [191] también investigaron la transferencia de calor en FFHX de tubos horizontales, pero en este caso orientado

a evaporadores.

Ding et al. [192] analizaron la influencia que tiene al ángulo de contacto ($0^\circ \leq \Psi \leq 60^\circ$) en el modo de flujo gota y columna. Asimismo, consideraron las condiciones iniciales de mojado por medio del ángulo de contacto de avance y de retroceso. Los resultados mostraron que el aumento del ángulo de contacto reducía el área de mojado y la velocidad de propagación del film y que las condiciones iniciales de mojado también influyen en la hidrodinámica del FFHX.

En el caso de los modelos isotérmicos, la mayoría de los modelos han utilizado agua como fluido de trabajo y los números de Reynolds analizados indican que en la mayoría de los casos el flujo era de modo columna-lámina o lámina. Además, la generalidad de estos modelos de tubos horizontales han asumido propiedades de mojabilidad ideales y no han considerado la interacción entre las entradas de solución adyacentes, ya que solamente han simulado una sola entrada de solución. Sin embargo, en *falling film* de placas planas, varios trabajos numéricos han resaltado la importancia de considerar el ángulo de contacto en los modelos numéricos para obtener resultados similares a los experimentales. En estos estudios se ha fijado el ángulo de contacto estático en los modelos.

No obstante, en los FFHX de tubos horizontales el ángulo de contacto ha sido considerado en pocas ocasiones. Además, en los trabajos que han tenido en cuenta las propiedades de mojabilidad, el ángulo de contacto utilizado ha sido menor que el ángulo de contacto estático. A pesar de la amplia investigación en el campo de la absorción, no existen trabajos que han considerado el efecto de la mojabilidad en la transferencia de calor y masa de absorbedores. La investigación en este área se ha limitado a estudiar la influencia del ángulo de contacto en la hidrodinámica de FFHX y no hay un acuerdo general respecto a ella. Además, existen trabajos que ponen en duda la idoneidad de utilizar ángulos de contacto estático, proponiendo el uso de ángulos de avance y retroceso [193–195] o ángulos dinámicos [196–200].

Por todas estas razones, el estudio de la influencia de la mojabilidad está cobrando cada vez más importancia e los FFHXs.

2 | MOTIVACIÓN Y OBJETIVOS

2.1 Motivación

La recuperación del calor residual es esencial para mejorar la sostenibilidad del planeta y, concretamente, la tecnología de los *AHTs* ofrece grandes oportunidades para su reutilización. El absorbedor es el componente que limita el comportamiento de los *AHTs* y los ensayos experimentales de absorbedores que operan con la solución $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$ indican que la mojabilidad es un factor clave en su rendimiento, por lo que su estudio es vital para el avance de esta tecnología. Asimismo, a raíz del uso de surfactantes, existe una necesidad de comprender a nivel local los mecanismos de transferencia de calor y masa. En conjunto, hoy día persiste la incertidumbre de la influencia que tienen las diferentes variables en la transferencia de calor y masa de *AHTs*.

En los absorbedores de tubos horizontales, los ensayos experimentales y modelos numéricos han demostrado que, debido a su naturaleza transitoria, el flujo de modo gota es el más propicio para maximizar la absorción. No obstante, este modo de flujo presenta una serie de inconvenientes. Por una parte, debido al bajo caudal, es muy frecuente la aparición de zonas secas. Por otra parte, los pocos estudios existentes no han sido capaces de identificar la variación temporal y espacial del espesor del film, cuya medición experimental es muy complicada. Además del espesor, para la optimización del comportamiento de los absorbedores es necesario el análisis conjunto de la influencia de las condiciones geométricas y de operación en los resultados relacionados con la hidrodinámica, el área de mojado y la transferencia de calor y masa. Lamentablemente, por todos estos motivos, la construcción de un banco de ensayos que incluya todos estos parámetros se presenta inviable. Precisamente, la mayoría de los estudios hidrodinámicos de la bibliografía se han centrado en modos de flujo entre columna y lámina.

La realización de modelos numéricos es una alternativa interesante para el estudio combinado de estos parámetros. Los modelos analíticos y numéricos propuestos hasta el día de hoy han mostrado resultados aceptables por medio de la consideración de la mojabilidad a través de la variable empírica denominada ratio de mojado. Desgraciadamente, la consideración de las propiedades de mojabilidad para la estimación de las fuerzas de adhesión en estos modelos empíricos es compleja, y no ha sido estudiado en profundidad.

Afortunadamente, los modelos FVM ofrecen la ventaja de poder estudiar este efecto. Sin embargo, dentro de los modelos basados en el FVM, la mayoría han considerado propiedades de mojabilidad ideales y modos de flujo entre

columna y/o lámina. Esta suposición tiene sus limitaciones, ya que los ensayos han demostrado que el rendimiento de absorbedores mejora mediante la disminución del ángulo de contacto.

Además, los modelos y los ensayos experimentales de absorbedores de placas planas han evidenciado que el ángulo de contacto tiene una gran influencia en la mojabilidad. En estos trabajos, el ángulo empleado ha sido el estático y, por medio de su inclusión, los resultados de los modelos han tenido mayor semejanza a los experimentos. Algunos modelos preliminares de la hidrodinámica de tubos horizontales igualmente han mostrado la notable influencia de la mojabilidad. Sin embargo, los pocos estudios de tubos horizontales que han considerado las fuerzas de adhesión han empleado ángulos de contacto inferiores al estático. En diversas aplicaciones, los resultados ilustran la idoneidad de usar ángulos de contacto de avance y retroceso, así como dinámicos en lugar de los estáticos. Por lo tanto, hasta el presente no hay un consenso establecido en este tema.

Por último, tampoco existe un acuerdo sobre el rol de los diferentes mecanismos de transferencia de masa, así como sobre el método idóneo para la cuantificación de la absorción de masa de vapor en la interface. En la literatura, existen diferentes corrientes; sin que la diferencia entre ambas haya sido examinada en detalle.

2.2 Objetivos

Por todo ello, el objetivo del presente trabajo de tesis doctoral ha sido “Analizar la influencia de las condiciones de operación y las propiedades termofísicas de transporte sobre el comportamiento de los absorbedores que operan con la mezcla LiBr – H₂O mediante metodologías numéricas basadas en el FVM.

Como objetivos específicos, se han definido los siguientes:

1. Definir un modelo transitorio en 3D de un absorbedor de película descendente (*FFHX*) de LiBr – H₂O que incluya las propiedades de mojabilidad.
2. Analizar la influencia de la mojabilidad en el comportamiento hidrodinámico del absorbedor bajo diferentes condiciones de operación.
3. Desarrollar una metodología numérica para el análisis local de la transferencia de calor y masa.
4. Estudiar las diferencias entre las distintas formas de estimar la absorción existentes en la bibliografía.
5. Cuantificar el efecto de las diferentes condiciones geométricas y de operación, así como las propiedades termofísicas en la transferencia de calor y masa del absorbedor.

3 | METODOLOGÍA

3.1 Introducción

En este Capítulo 3, se definirá la metodología utilizada en este trabajo de tesis doctoral desde un punto de vista general. Primero se presentan las ecuaciones de gobierno y los métodos de discretización. Seguidamente, se detallan los métodos de determinación de las variables, los gradientes y el acoplamiento presión-velocidad. Finalmente, se definen los métodos de discretización espacial y temporales. Los detalles particulares utilizados en los modelos concretos se especificarán en sus capítulos correspondientes. La discretización de la geometría, las condiciones de contorno y operación, las hipótesis escogidas y las propiedades termofísicas serán igualmente mostrados en estos respectivos capítulos.

3.2 Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones de conservación de masa (Ecuación (3.1a)) y de momento (Ecuación (3.1b)) se pueden escribir como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0, \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{v}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\mu \nabla \mathbf{v}) + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}, \quad (3.1b)$$

donde \mathbf{F} es el término fuente de fuerzas externas. Por medio de esta variable, se han considerado las fuerzas de adhesión debidas a la tensión superficial en el Capítulo 4, mientras que en los Capítulos 5 y 6 se ha utilizado para tomar en cuenta el momento generado en la interface como resultado de la absorción de vapor.

Para capturar la interface vapor-líquido, se ha usado el método VOF propuesto por Hirt y Nichols [168]. Este método emplea la fracción volumétrica, α , para identificar cada fase. Si $\alpha = 0$, la celda se encuentra en fase gas/vapor (v), mientras que si $\alpha = 1$, la celda pertenece a la fase líquida (l). Si el valor de la celda es $0 < \alpha < 1$, la celda representa la interface (if). En función del régimen (estacionario o transitorio) existen diferentes métodos para computar la interface. Así, la ecuación de la fracción volumétrica para la fase n se define como:

$$\frac{1}{\rho_n} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_n \rho_n) + \nabla \cdot (\alpha_n \rho_n \mathbf{v}_n) = S_{\alpha_n} \right], \quad (3.2)$$

donde S_{α_n} es el término fuente de masa, mediante el cual se considera la absorción de vapor en los Capítulos 5 y 6.

Por ejemplo, para la fase líquida, tanto la densidad, como la viscosidad dinámica de la interface se computan por medio de la interpolación lineal entre los valores de las fases puras usando la fracción volumétrica, presentados en las Ecuaciones (3.3a) y (3.3b), respectivamente.

$$\rho_{\text{int}} = \rho_v + \alpha(\rho_l - \rho_v), \quad (3.3a)$$

$$\mu_{\text{int}} = \mu_v + \alpha(\mu_l - \mu_v). \quad (3.3b)$$

En función del modelo numérico, se han utilizado diferentes métodos para capturar la interface entre distintas fases, los cuales se detallan en sus capítulos correspondientes.

Por su parte, la ecuación de energía, se define como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} c_p T) = \nabla \cdot (k \nabla T) + \sum_{i=1}^n (h_i \mathbf{J}_i) + S_Q, \quad (3.4)$$

donde i corresponde a cada especie de la mezcla, h_i es la entalpía de especies, \mathbf{J}_i el flujo de difusión de especies, y S_Q es el término fuente de energía. En el Capítulo 4, al ser un modelo adiabático y no considerar la absorción de vapor de agua, la Ecuación de energía no ha sido utilizada. Sin embargo, en los Capítulos 5 y 6, el término fuente S_Q se ha empleado para considerar el calor generado como resultado de la absorción de vapor.

En relación a la difusión, la transferencia de masa en el interior del film debida a la difusión de especies también ha sido tomada en cuenta en los Capítulos 5 y 6, el cual se ha resuelto mediante la ecuación de especies para el caso de flujos multifásicos (Ecuación (3.5)):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_n \rho_n w_{i,n}) + \nabla \cdot (\alpha_n \rho_n \mathbf{v}_n w_{i,n}) = -\nabla \cdot \alpha_n \mathbf{J}_{i,n} + \alpha_n S_{l,n}, \quad (3.5)$$

donde $S_{l,n}$ es la fuente de generación de la especie líquida y $\mathbf{J}_{i,n}$ el flujo de difusión de especies. Tanto el término fuente, como el flujo de difusión de especies no ha sido tenido en cuenta en el Capítulo 4, debido a que no se ha considerado la absorción de vapor. Sin embargo, en el Capítulo 5 se ha tomado en cuenta solamente la difusión de especies como resultado del gradiente de concentración, mientras que en el Capítulo 6 también se ha incluido el mecanismo de transferencia de masa como resultado del gradiente de temperatura. El desarrollo de las expresiones utilizadas para la consideración de la difusión se han detallado en sus capítulos correspondientes.

3.3 Discretización de las ecuaciones

Para resolverlas, las ecuaciones diferenciales parciales se convierten en ecuaciones algebraicas. La precisión y la robustez de la solución numérica puede variar mucho en función del método empleado. En este caso las ecuaciones se

han discretizado mediante el método FVM. Las ecuaciones de gobierno se integran primero en cada volumen de control para asegurar su cumplimiento. La integración de la ecuación de conservación para el escalar φ en un volumen de control arbitrario viene dado por:

$$\oint \rho \varphi \mathbf{v} \cdot d\mathbf{A} = \oint \Gamma_\varphi \nabla \varphi \cdot d\mathbf{A} + \int_V S_\varphi dV, \quad (3.6)$$

donde Γ_φ es el coeficiente de transporte para el escalar φ , y S_φ el ratio de generación de escalar φ por unidad de volumen.

Discretizando y aplicando la Ecuación (3.6) a cada celda se obtiene:

$$\sum_{f=1}^{N_{caras}} \rho_f \varphi_f \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{A}_f = \sum_{f=1}^{N_{caras}} \Gamma_\varphi (\nabla \varphi)_f \cdot \mathbf{A}_f + S_\varphi V, \quad (3.7)$$

donde N_{caras} es el número de caras que envuelven la celda y φ_f el valor de la variable que atraviesa la cara f .

3.4 Determinación de las variables de la cara

Aunque las variables se calculen en las celdas, la Ecuación (3.7) requiere de los valores de las variables en las caras. Existen diversos esquemas dentro del software. En este caso se ha considerado el esquema QUICK [201]. Este es un esquema de alto orden que usa mallas de forma rectangular hexahédrica. Está basado en la media ponderada entre el esquema *Second Order Upwind* y la interpolación central de la variable. La razón de su elección ha sido que es el esquema más preciso para mallas estructuradas alineados con el sentido del flujo [202].

3.5 Evaluación de los gradientes

En la ecuación (3.7), el gradiente $\nabla \varphi$ se usa para discretizar el término difusivo y el término convectivo. Existen diferentes esquemas para su evaluación. En este caso, se ha evaluado usando el *Green-Gauss Cell Based* (ecuación 3.8a), debido a que se basa en los valores de los escalares en la celda. En este método, el valor de la variable de la cara f se evalúa como el valor promedio de los centroides de todas las celdas adyacentes. Por ejemplo, si la cara estuviera rodeada por dos celdas, el valor de la variable en la cara f se determinaría por medio de la Ecuación 3.8b.

$$\nabla \varphi_{c0} = \frac{1}{V} \sum_f \bar{\varphi}_f \mathbf{A}_f, \quad (3.8a)$$

$$\bar{\varphi}_f = \frac{\varphi_{c0} + \varphi_{c1}}{2}. \quad (3.8b)$$

3.6 Acoplamiento presión-velocidad

Los algoritmos disponibles para el acoplamiento presión-velocidad son: *SIMPLE*, *SIMPLER* y *PISO* [202]. El algoritmo escogido ha sido el algoritmo *PISO*

introducido por Issa et al. [203], el cual es adecuado, igualmente, para flujos transitorios [204]. En este caso, el cálculo de presión y velocidad comprenden un paso predictivo y dos pasos correctores.

3.7 Discretización espacial

En el método FVM, se requieren los valores de las variables en las caras, φ_f , para utilizarlos en los términos convectivos, los cuales se obtienen interpolando entre los valores del centro de las celdas. El software Ansys Fluent tiene diversos métodos para la interpolación, tales como *upwind* de primer orden, *upwind* de segundo orden, *power law* y *QUICK*. En este caso, se ha optado por un esquema de alto orden, que no tenga dificultades de convergencia y un coste computacional excesivo. Concretamente, para las variables de las diferentes ecuaciones se ha utilizado el esquema *upwind* de segundo orden. Así, el valor de la celda se computa mediante

$$\varphi_f = \varphi + \nabla\varphi \cdot \mathbf{r}, \quad (3.9)$$

donde \mathbf{r} es el vector de desplazamiento que va desde el centroide de la celda que se encuentra aguas arriba, al centroide de la cara.

3.8 Discretización temporal

Para el método VOF, el único método de discretización temporal disponible es el implícito de primer orden [202], por lo que ha sido el método utilizado en los modelos transitorios.

4 | ANÁLISIS DE LA INFLUENCIA DE LA MOJABILIDAD EN *FALLING FILM* HEAT EXCHANGERS DE TUBOS HORIZONTALES

4.1 Introducción

Tal y como se ha mencionado en la Sección 1.2, entre todos los componentes, el absorbedor es el componente más crítico a causa de sus bajos coeficientes de transferencia de calor y masa en comparación con los demás elementos. Debido a ello, éste es el componente más grande y caro [157]. Entre los diferentes absorbedores, los de tipo *falling film* de tubos horizontales son los más usados porque tienen una gran eficiencia y necesitan poca cantidad de refrigerante [34]. No obstante, podrían sufrir problemas de mojabilidad, el cual es la principal razón de su transferencia de calor y masa inefectiva [37]. Estos absorbedores han sido estudiados ampliamente en la literatura, los cuales se pueden dividir en dos diferentes áreas: la transferencia de calor y masa, y la hidrodinámica del *falling film*.

Numerosos investigadores han analizado experimentalmente la influencia del flujo másico de la solución LiBr – H₂O, entre otros parámetros, en la transferencia de calor y/o masa usando diferentes tipos de tubos. Por ejemplo, Deng y Ma [38], Kyung et al. [40] y Yoon et al. [115] estudiaron tubos lisos; mientras Bredow et al. [47], por su parte, analizaron tubos aleteados. Por otra parte, Hoffman et al. [44], Park et al. [37], Kim e Infante Ferreira [48] y Köroglu et al. [205] compararon tubos lisos con tubos moleteados y sombreados, en los cuales observaron que la transferencia de calor y masa aumentaba con estas superficies avanzadas. Este comportamiento fue atribuido a la mejora de la mojabilidad. El rango del flujo de la solución de estos trabajos fue de $0.003 \leq \Gamma \leq 0.08 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ (número de Reynolds del film $2 \leq \text{Re} \leq 56$). De acuerdo con Hu et al. [63] (Ecuación (1.2)), en este rango, el modo de flujo podría ser gota, gota-columna o columna (Figura 1.13).

El comportamiento del absorbedor ha sido igualmente estudiado numéricamente por numerosos trabajos. Killion y Garimella [157] efectuaron una revisión crítica de los modelos acoplados de la transferencia de calor y masa en absorbedores *falling film*. Los autores concluyeron que se requieren modelos transitorios 3D que incluyan los efectos de la mojabilidad de las superficies para predecir de

manera espacial y temporal la variación del fenómeno de mojabilidad. Por otro lado, realizando diferentes hipótesis, varios modelos basados en diferentes esquemas [60, 140, 161, 162] han considerado el efecto de la mojabilidad mediante el uso de correlaciones empíricas para el ratio de mojado (Ecuación (1.29)) entre $0.5 \leq WR \leq 0.8$, mediante los cuales se repararon mejoras en la correlación numérico-experimental.

Asimismo, modelos 3D basados en el FVM también han sido empleados en el estudio de la transferencia de calor y masa [62, 103, 173]. Excepto Qi et al. [173], los cuales fijaron un ángulo de contacto de $\Psi = 30^\circ$, los demás modelos basados en el FVM asumieron que la superficie estaba completamente mojada (ángulo de contacto $\Psi = 0^\circ$).

El espesor del film y la hidrodinámica del *falling film* ha sido del mismo modo de gran interés para los investigadores. Algunos estudios han empleado diferentes técnicas para medir el espesor del film bajo diferentes condiciones geométricas y de operación [80, 81, 84]. Desafortunadamente, la mayoría de los test han sido realizados fuera del rango de interés de absorbedores de LiBr – H₂O ($Re > 150$). Así, el número de estudios que han medido directamente el espesor del film y el comportamiento del flujo bajo condiciones de operación de absorbedores de tubos horizontales (Tabla 1.2) ha sido muy baja. Otros investigadores también han estudiado la hidrodinámica del film en tubos horizontales usando modelos FVM [170, 173, 178, 179, 206]. No obstante, todos estos modelos fueron igualmente desarrollados bajo la hipótesis de que la mojabilidad del tubo era ideal, esto es, asumiendo un ángulo de contacto de $\Psi = 0^\circ$.

Otros trabajos han demostrado la influencia de las propiedades de mojabilidad de la superficie en el área de mojado y el espesor del film; pero en los intercambiadores de calor de placas planas [109, 183, 207]. Sus resultados confirmaron que el ángulo de contacto tiene un impacto considerable. Por ejemplo, a mayor ángulo de contacto, mayor es el espesor del film y menor el área de mojado. Originalmente, El-Genk y Saber [208] presentaron las predicciones para el ratio de mojado mínimo (*minimum wetting rate, MWR*) y el correspondiente espesor mínimo del film (*minimum liquid film thickness, MLFT*) en función del ángulo de contacto en una superficie vertical. Los resultados de los modelos mostraron un acuerdo dentro de un 20% con los ensayos experimentales realizados con el agua y la mezcla agua-glicerol.

Hasta el presente, la influencia del ángulo de contacto en *falling films* de tubos horizontales ha sido poco estudiado. Ji et al. [189] utilizaron un modelo FVM 2D de un tubo horizontal; sin embargo, este estudio omitió el comportamiento del flujo en la dirección axial, el cual tiene una importancia vital en la mojabilidad del tubo. En la misma línea, Ding et al. [192] observaron que el ángulo de contacto influye en el patrón de flujo por medio de modelos FVM en 3D.

En resumen, los estudios experimentales de los flujos de *falling films* han sido enfocados, principalmente, al análisis de modos de flujo y el espesor del film del agua, pero operando en altos números de Reynolds ($Re \geq 150$). Desafortunadamente, como se ha mostrado en la Sección 1.3.1, las condiciones de operación típicas de absorbedores de tubos horizontales que trabajan con LiBr – H₂O son menores ($2 \leq Re \leq 56$). Al ser menor el flujo, las zonas secas tienen un efecto clave en el comportamiento del absorbedor. A causa de las dificultades que presenta

la realización de trabajos experimentales para medir el área de mojado y el espesor del film bajo estas condiciones de operación, los modelos numéricos juegan un papel importante en el estudio del comportamiento del flujo de *falling films*. El estudio de la influencia de las propiedades de mojabilidad en el rendimiento es crucial, pero ha sido muy pocas veces considerado en absorbedores de tubos horizontales. Además, el análisis del comportamiento transitorio de flujos *falling film* en tubos horizontales bajo diferentes condiciones de mojabilidad tomando en cuenta la dirección axial tampoco ha sido demasiado explorado.

En este capítulo se examinará el comportamiento del flujo *falling film* de la solución LiBr – H₂O en un absorbedor de tubos horizontales por medio de un modelo transitorio 3D bifásico; basado en el FVM. La aplicabilidad de los modelos 2D, incluyendo las propiedades de mojabilidad, ha sido igualmente estudiado. Asimismo, en este capítulo se investiga la influencia del ángulo de contacto en el flujo *falling film*, en el área de mojado y en el espesor del film, para diferentes números de Reynolds en condiciones adiabáticas. El rango de número de Reynolds ha sido escogido de acuerdo con el trabajo experimental de Hu y Jacobi [63], con el objetivo de evaluar los modos de flujo gota, gota-columna y columna; típicos en los absorbedores de LiBr – H₂O.

4.2 Modelo numérico

En esta sección se presentan los detalles del modelo numérico. En primer lugar, se definen el dominio computacional, las condiciones de contorno y el mallado computacional del modelo. A continuación, se muestran las ecuaciones gobernantes y las propiedades del fluido seleccionadas en las Secciones 4.2.2 y 4.2.3, respectivamente. Por último, se muestra el análisis de independencia de malla del modelo numérico.

En cuanto a las hipótesis consideradas, el modelo numérico se ha basado en las siguientes:

1. El flujo es laminar y el fluido newtoniano.
2. El flujo másico de la solución se divide idealmente en 4 partes respecto al eje central.
3. Las fases líquida y vapor son incompresibles, y las propiedades termofísicas se mantienen constantes.
4. Las condiciones de trabajo son adiabáticas, y no existe transferencia de masa entre las fases.

4.2.1 Dominio computacional, condiciones de contorno y mallado

La Figura 4.1 muestra el dominio computacional, las condiciones de contorno y la malla base del modelo. El dominio computacional se compone de un distribuidor, el tubo central y la mitad del tubo inferior. En el modelo, la solución entra al dominio desde el distribuidor en la dirección vertical. Este agujero rectangular

ha sido asignado como condición de entrada de flujo de $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$. Concretamente, en este modelo se ha escogido el diseño del distribuidor de Álvarez et al. [209].

Por su parte, en las zonas inferiores y laterales del dominio, las caras han sido definidas como salidas de presión de la fase de vapor y la cara superior como entrada de presión, todos a una presión absoluta de $p_{\text{man}} = 1080 \text{ Pa}$. El distribuidor tiene un diámetro de $\phi_{\text{distribuidor}} = 12.7 \text{ mm}$, y los diámetros de los otros dos tubos son de $\phi_{\text{tubos}} = 19.05 \text{ mm}$ ($3/4$ pulgada), cuyas paredes han sido fijadas mediante la condición de contorno de no deslizamiento, y con el ángulo de contacto correspondiente. El espaciado entre los ejes de los tubos ha sido de $s = 12.25 \text{ mm}$.

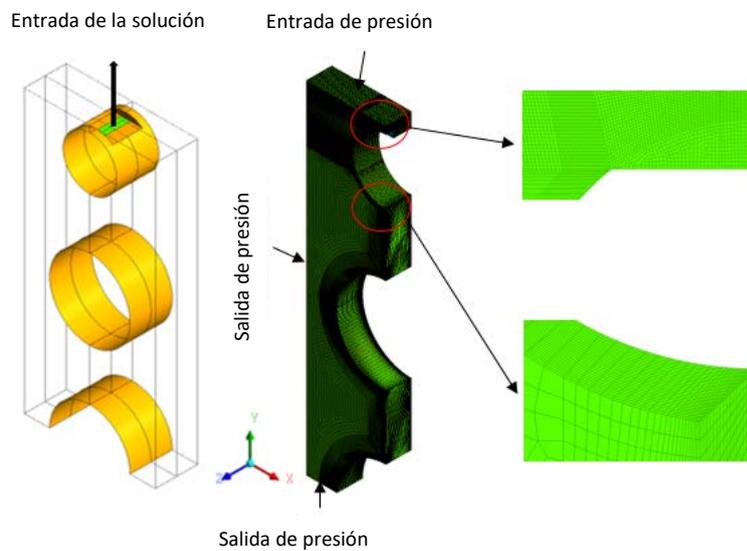


Figura 4.1: Dominio computacional, condiciones de contorno y la malla base del modelo.

Para reducir los esfuerzos computacionales, se ha considerado un cuarto de todo el dominio usando condiciones de contorno de simetría en las direcciones x y z , al igual que en el modelo de Subramaniam y Garimella [151]. La parte superior e inferior de ambos tubos han sido refinadas para modelizar propiamente la formación, separación y los efectos del impacto de gotas o columnas. Además, para capturar apropiadamente los esfuerzos viscosos y el efecto de la tensión superficial, también se ha refinado el mallado computacional en zonas próximas al distribuidor (zona superior del dominio) y cerca de las paredes, como se ha detallado en la Figura 4.1.

4.2.2 Ecuaciones gobernantes

Las ecuaciones de gobierno han sido resueltas en el software comercial ANSYS FLUENT 18.2. Para capturar la interface entre el líquido y el vapor, se ha usado el método VOF propuesto por Hirt y Nichols [168] (Ecuación (3.2) de la Sección 3.2). Como se ha mencionado en el Capítulo 3, este método emplea la fracción volumétrica, α , para identificar la fase. Se ha utilizado el modelo *geo-*

reconstruct basado en la interpolación lineal para capturar con precisión la interface entre las dos fases. En este caso, se ha tenido en cuenta solamente un componente en la fase líquida. Además, se ha considerado que no existe transferencia de calor ni masa. Por lo tanto, no se han considerado las ecuaciones de Energía y Especies (Ecuaciones (3.4) y (3.5), respectivamente).

Así, la Ecuación de conservación de masa (3.1a) y la Ecuación de momento (3.1b) han sido definidas en la Sección 3.2. En este caso, el término fuente \mathbf{F} , al incluir las fuerzas de tensión superficial entre fases, se ha denominado como \mathbf{F}_σ . En este estudio, se ha considerado el modelo continuo de fuerza superficial (*Continuum Surface Force, CSF*) propuesto por Brackbill et al. [169] para el cálculo de esta fuerza. Este modelo transforma la fuerza de tensión superficial 2D a uno 3D, tal como

$$\mathbf{F}_\sigma = \sigma \frac{\rho \chi \nabla \alpha}{0.5(\rho_l + \rho_v)}, \quad (4.1)$$

donde σ es el coeficiente de tensión superficial y χ la curvatura local de la superficie, el cual se define como la divergencia normal unitaria $\hat{\mathbf{n}}$ tal que,

$$\chi = \nabla \hat{\mathbf{n}}, \quad (4.2a)$$

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{n}}{|\mathbf{n}|}. \quad (4.2b)$$

La dirección normal \mathbf{n} a la superficie ha sido definida como el gradiente de la fracción volumétrica:

$$\mathbf{n} = \nabla \alpha. \quad (4.3)$$

En las celdas adyacentes a las paredes, el vector normal unitario ha sido sustituido con el objetivo de considerar las fuerzas de adhesión de las paredes. Este vector se ha ajustado usando el ángulo de contacto Ψ de la pared, tal como:

$$\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{n}}_W \cos \psi + \hat{\mathbf{t}}_W \sin \psi, \quad (4.4)$$

donde $\hat{\mathbf{n}}_W$ y $\hat{\mathbf{t}}_W$ son los vectores unitarios normales y tangenciales a la pared, respectivamente. Al inicio de la simulación, se ha asumido que todo el dominio computacional está lleno de vapor. Asimismo, se ha utilizado un paso temporal (*time step*) variable para cumplir el criterio de convergencia establecido.

4.2.3 Propiedades de los fluidos

Se han seleccionado agua saturada como fase vapor y la solución LiBr – H₂O ($w_{\text{LiBr}} = 0.6$) como fase líquida a una presión absoluta de $p = 1080$ Pa y temperatura $T = 320.15$ K. La Tabla 4.1 recoge las propiedades de los dos fluidos [132]:

No obstante, en este trabajo de tesis doctoral se ha medido el ángulo de contacto estático de la solución LiBr – H₂O para diferentes fracciones másicas. Las mediciones se realizaron en el rango $0 \leq w_{\text{LiBr}} \leq 0.55$ en 4 diferentes

Tabla 4.1: Propiedades termofísicas de la solución LiBr – H₂O y el vapor de agua.

Propiedad	Vapor de agua	Bromuro de Litio - Agua
$\rho / (\text{kg m}^{-3})$	0.00774	1750
$\mu / (\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1})$	$9.375 \cdot 10^{-6}$	$5.775 \cdot 10^{-3}$
$\sigma / (\text{N m}^{-1})$	-	0.088

materiales: cobre, aluminio, acero inoxidable y polytetrafluoretileno (PTFE) usando la técnica *sessile drop*. La Figura 4.2 muestra el ángulo de contacto Ψ medido en los 4 diferentes materiales, para dos diferentes fracciones másicas: $w_{\text{LiBr}} = 0$ y $w_{\text{LiBr}} = 0.55$.

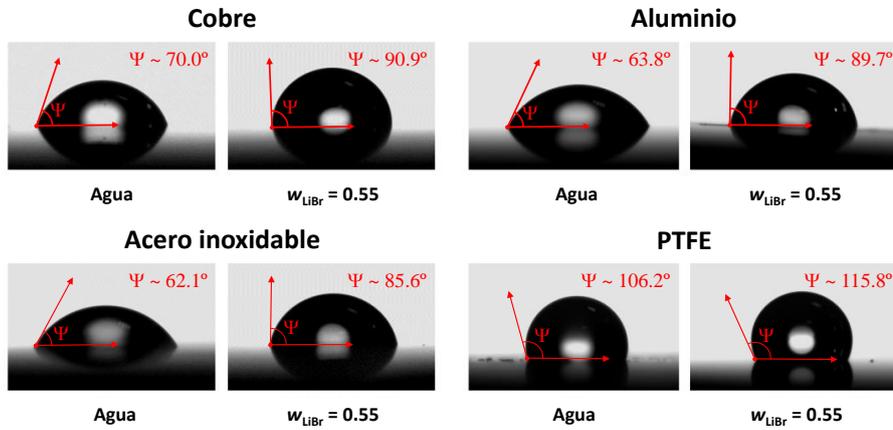


Figura 4.2: Ángulos de contacto del agua y de la solución LiBr – H₂O ($w_{\text{LiBr}} = 0.55$) en diferentes superficies: cobre, aluminio, acero inoxidable y PTFE [174].

Los resultados evidencian que, mientras tres materiales muestran un comportamiento hidrofílico ($\Psi < 90^\circ$), el PTFE tiene una conducta hidrofóbica ($\Psi > 90^\circ$). Por lo tanto, se demuestra que, en función del material, la variación del ángulo de contacto para la solución LiBr – H₂O no es despreciable. Asimismo, se observa que el ángulo de contacto de $\Psi = 30^\circ$ empleado por Qi et al. [173] no corresponde al ángulo de contacto estático de la solución LiBr – H₂O.

Por esta razón, en el presente capítulo se ha evaluado la influencia del ángulo de contacto en el comportamiento del *falling film* en base a las mediciones presentadas en la Figura 4.2. Por consiguiente, las paredes han sido especificadas para tener un ángulo de contacto de $0^\circ \leq \Psi \leq 120^\circ$.

4.2.4 Independencia de malla

Primero, se ha estudiado la independencia del modelo 3D. Para ello, se han definido tres mallas diferentes: una de 708 235 elementos con un espesor mínimo de $1.6 \cdot 10^{-1}$ mm, otra de 1 043 925 celdas y $6 \cdot 10^{-2}$ mm de espesor y la última de 1 555 688 elementos y $3 \cdot 10^{-2}$ mm de espesor mínimo. Los elementos más

pequeños se han localizado en las celdas adyacentes a las superficies de las paredes. Con el fin de comprobar el caso crítico, se ha analizado el caso de $Re = 7$ en todas las mallas porque, de acuerdo con la Ecuación 1.6 que describe el espesor de la película según Nusselt [78], este caso tendrá el espesor más fino entre todos los modelos analizados. Con el fin de garantizar que los resultados son independientes de la malla definida, en la Figura 4.3 se compara el ratio de mojado del distribuidor en función del tiempo para las tres mallas. Tal y como se observa en la Figura

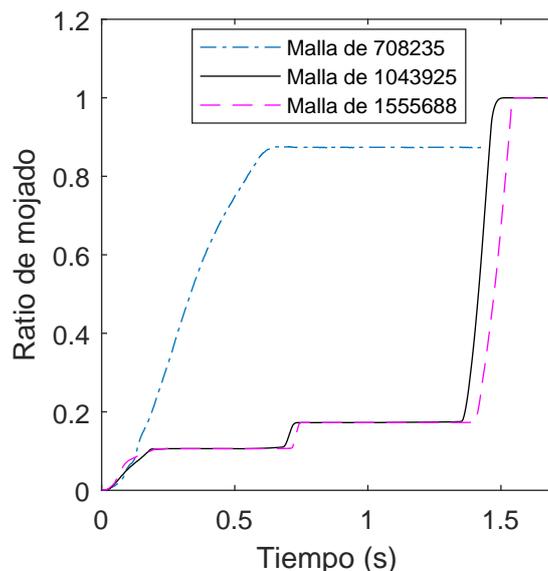


Figura 4.3: Ratio de mojado (WR) del distribuidor en función del tiempo para diferentes mallas, $Re = 7$ y $\Psi = 0^\circ$.

4.3, la evolución del ratio de mojado para las mallas de 1 043 925 y 1 555 688 son muy similares, evidenciando que los resultados obtenidos con la malla de tamaño medio ya son independientes de la malla.. Así, se ha escogido la malla de 1 043 925 celdas para los modelos 3D. Asimismo, las mallas 2D se han construido basándose en los criterios adoptados para definir esta malla.

4.3 Resultados y discusión

Primero, se ha realizado la comparación entre los modelos 2D y 3D, así como la comprobación de la validez de la metodología numérica (Sección 4.3.2). A continuación, se ha estudiado la influencia que tienen las propiedades de mojabilidad (ángulo de contacto Ψ) y el número de Reynolds en parámetros clave de absorbedores de $LiBr - H_2O$, tales como la hidrodinámica del *film* (Sección 4.3.3), el área de mojado (Sección 4.3.4) y el espesor del *film* (Sección 4.3.5).

4.3.1 Comparación entre los modelos de 2D y 3D

Con el objetivo de reducir los esfuerzos computacionales requeridos, los modelos FVM 2D han sido ampliamente utilizados en la bibliografía [170, 178,

189, 210, 211]. La hipótesis de mojabilidad completa asumida por los modelos, hace adecuados a estos trabajos en estudios donde se considere una mojabilidad completa. Sin embargo, su aplicabilidad a ángulos de contacto mayores, donde se pueden originar zonas secas, debe ser verificada. Por esta razón, se ha llevado a cabo la comparación del ratio de mojado entre los modelos 2D y 3D. La Figura 4.4 ilustra el ratio de mojado del tubo central en función del tiempo para ambos modelos cuando $Re = 53$ y para dos diferentes ángulos de contacto: $\Psi = 0^\circ$ y $\Psi = 60^\circ$. Para el caso de $\Psi = 0^\circ$, los resultados de ambos modelos son

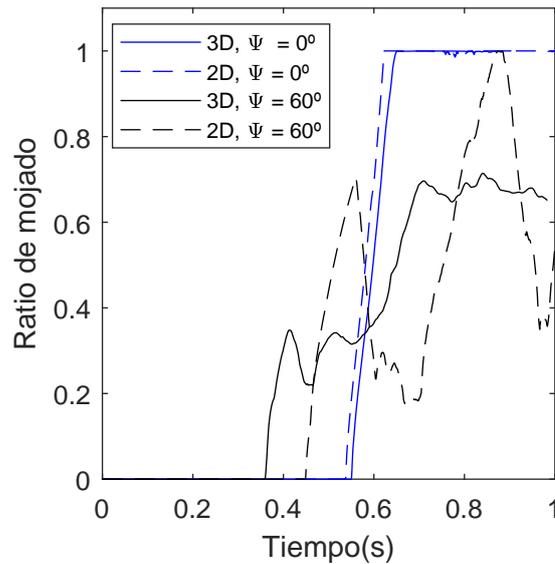


Figura 4.4: Comparación del ratio de mojado (WR) en el tubo central en función del tiempo para los modelos bidimensional (2D) y tridimensional (3D) cuando $Re = 53$ y para $\Psi = 0^\circ$ y $\Psi = 60^\circ$.

similares. Sin embargo, para $\Psi = 60^\circ$ existen diferencias considerables entre los dos modelos. En el modelo 2D, cuando $\Psi = 60^\circ$, la solución cubre todo el tubo, aunque disminuye inmediatamente después, hasta que llega la siguiente gota. En cuanto la siguiente gota impacta, el ratio de mojado comienza a aumentar. Por el contrario, en el modelo 3D, la solución nunca llega a mojar completamente el tubo. Además, los resultados revelan que el modelo 3D llega a un ratio de mojado cuasiestacionario.

Por lo tanto, esta comparación demuestra que cuando se asume mojabilidad completa, los modelos 2D son aplicables. Por el contrario, la consideración de la dimensión axial es esencial en casos de mojabilidad incompleta. Por consiguiente, los análisis se deben realizar con modelos 3D, tal y como muestran los resultados de las siguientes secciones.

4.3.2 Validación del modelo numérico

El espesor del *film* sobre tubos horizontales bajo flujo continuo ha sido ampliamente analizado en la literatura. Así, en el presente trabajo de tesis doctoral la validación del modelo se ha llevado a cabo considerando dos diferentes ecuaciones:

la solución de Nusselt [78] (Ecuación (1.6)) y la Ecuación propuesta por Ji et al. [189] (Ecuación (4.5)). Cabe destacar que la solución teórica de Nusselt fue basada en un dominio 2D, mientras que la ecuación propuesta por Ji et al. [189] fue calculada tomando en cuenta un modelo numérico 2D.

La solución de Nusselt [78], representada por la Ecuación (1.6), ha sido comúnmente usada en la literatura para comparar los resultados de la hidrodinámica alrededor de tubos horizontales [132]. Por su parte, la solución de Ji et al. [189] es similar, pero la posición del espesor mínimo del *film* se localiza en $\theta = 120^\circ$, y viene dada por

$$\delta_{Ji} = \left[\frac{3\mu_l\Gamma}{\rho_l(\rho_l - \rho_v)g \sin \frac{3\theta}{4}} \right]^{1/3}. \quad (4.5)$$

Como el modelo numérico del presente capítulo es en 3D, se ha usado el espesor promedio de la dirección axial del distribuidor para diferentes ángulos circunferenciales, θ , con el fin de comparar con las dos soluciones. El contraste se ha llevado a cabo para $Re = 7$ y $Re = 53$. Como en el caso de $Re = 7$, el espesor en el resto de tubos es transitorio y, por consiguiente, el valor del espesor depende de la posición y el instante de la gota (ver Sección 4.3.5), el análisis ha sido realizado en el distribuidor. Además, ambas soluciones asumieron una mojabilidad completa, considerando un ángulo de contacto de $\Psi = 0^\circ$. La Figura 4.5 ilustra la variación del espesor del *film* en la dirección longitudinal (θ) del distribuidor obtenido con el modelo numérico, y el espesor del *film* predicho con las soluciones de Nusselt [78] y Ji et al. [189].

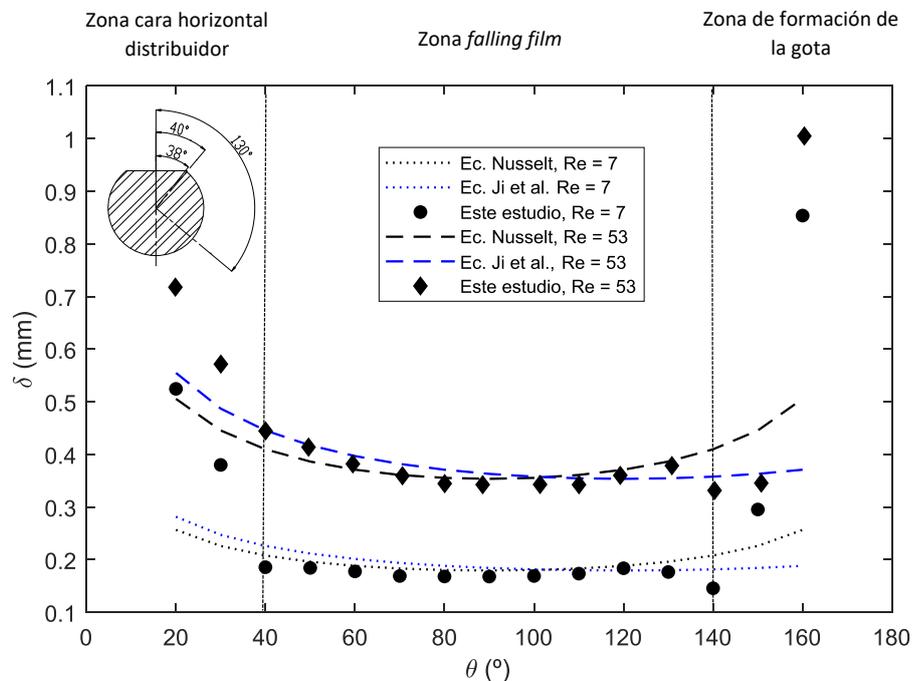


Figura 4.5: Distribución del espesor del *film* en función del ángulo circunferencial θ para diferentes números de Reynolds cuando $\Psi = 0^\circ$: comparación entre los resultados numéricos y las soluciones de Nusselt [78] y Ji et al. [189].

Para la comparación mostrada en la Figura 4.5, se han identificado tres diferentes regiones, las cuales dependen del comportamiento del *film* de la solución: la región de la superficie horizontal del distribuidor ($40^\circ < \theta$), la región *falling film* ($40^\circ \leq \theta \leq 130^\circ$) y la región de la formación de la gota ($\theta > 130^\circ$). En esta primera región, el espesor del *film* está fuertemente influenciado por la geometría del distribuidor, debido a que la cara horizontal del distribuidor termina cuando el ángulo es $\theta = 38^\circ$. Por el contrario, las soluciones de Nusselt [78] y Ji et al. [189] fueron basadas en tubos circunferenciales. Por lo tanto, los resultados del presente modelo no son comparables en esta región. En la región *falling film* el flujo es cuasiestacionario, por lo que es plausible compararlo con las soluciones de Nusselt [78] y Ji et al. [189], ambas basadas en flujos estacionarios. En esta región, los resultados del modelo han sido similares a los obtenidos con ambas correlaciones. Sin embargo, estos resultados tienen mayor semejanza a la solución de Nusselt [78], debido a que el espesor mínimo está localizado en $\theta = 90^\circ$. La diferencia máxima con la solución de Nusselt [78] es menor que un 8%. En la región de formación de gota, el espesor del *film* está influenciado por la constitución de la gota y, por consiguiente, el espesor varía transitoriamente en el tiempo dependiendo de la etapa en la que se encuentra dentro de la formación. Por el contrario, las soluciones de Nusselt [78] y Ji et al. [189] están basadas en el modo de flujo lámina ($Re > 106$), donde se considera que el espesor no varía temporalmente en todo el tubo. Como consecuencia de la disparidad del modo de flujo, el espesor obtenido en el modelo numérico tampoco es comparable en esta región.

4.3.3 Hidrodinámica del *film*

Una vez validado el modelo numérico, se han definido varios casos del absorbedor con la mezcla LiBr – H₂O para diferentes propiedades de mojabilidad del tubo ($0^\circ \leq \Psi \leq 120^\circ$) y números de Reynolds ($7 \leq Re \leq 53$).

La Figura 4.6 muestra el comportamiento transitorio de la hidrodinámica del *film* líquido cuando $Re = 7$ para 4 ángulos de contacto diferentes: Figura 4.6 (A) $\Psi = 0^\circ$, (B) $\Psi = 30^\circ$, (C) $\Psi = 60^\circ$ y (D) $\Psi = 90^\circ$. La región de color verde representa la interface entre la solución LiBr – H₂O y el vapor de agua, el cual se obtiene cuando la fracción volumétrica de la solución es de $\alpha = 0.5$. Tal y como ilustra la Figura 4.6, todos los casos estudiados presentan un comportamiento transitorio. La columna (a) representa el instante donde la solución comienza a fluir sobre el distribuidor. Por su parte, la columna (b) muestra el flujo en el distribuidor. Respecto a la columna (c), se puede observar la formación de la gota en la parte inferior del distribuidor. La columna (d) retrata el impacto de la gota contra el tubo del medio, mientras la columna (e) representa el flujo en el tubo del medio. En la columna (f) se puede reparar la formación de gota en el tubo del medio y, finalmente, la columna (g) ilustra el impacto contra el tubo inferior.

Cuando $\Psi = 0^\circ$ (Figura 4.6(A)), como la mojabilidad de todos los tubos es ideal, el *film* se propaga por todo el tubo distribuidor antes de comenzar a fluir, y el fluido contacta con las entradas de flujo adyacentes. Una vez comienza a moverse hacia abajo, el fluido exhibe un flujo continuo del *film* a lo largo del distribuidor. Además, conforme el *film* desciende, el distribuidor se moja completamente de forma gradual. Cuando el frente del fluido llega a la parte

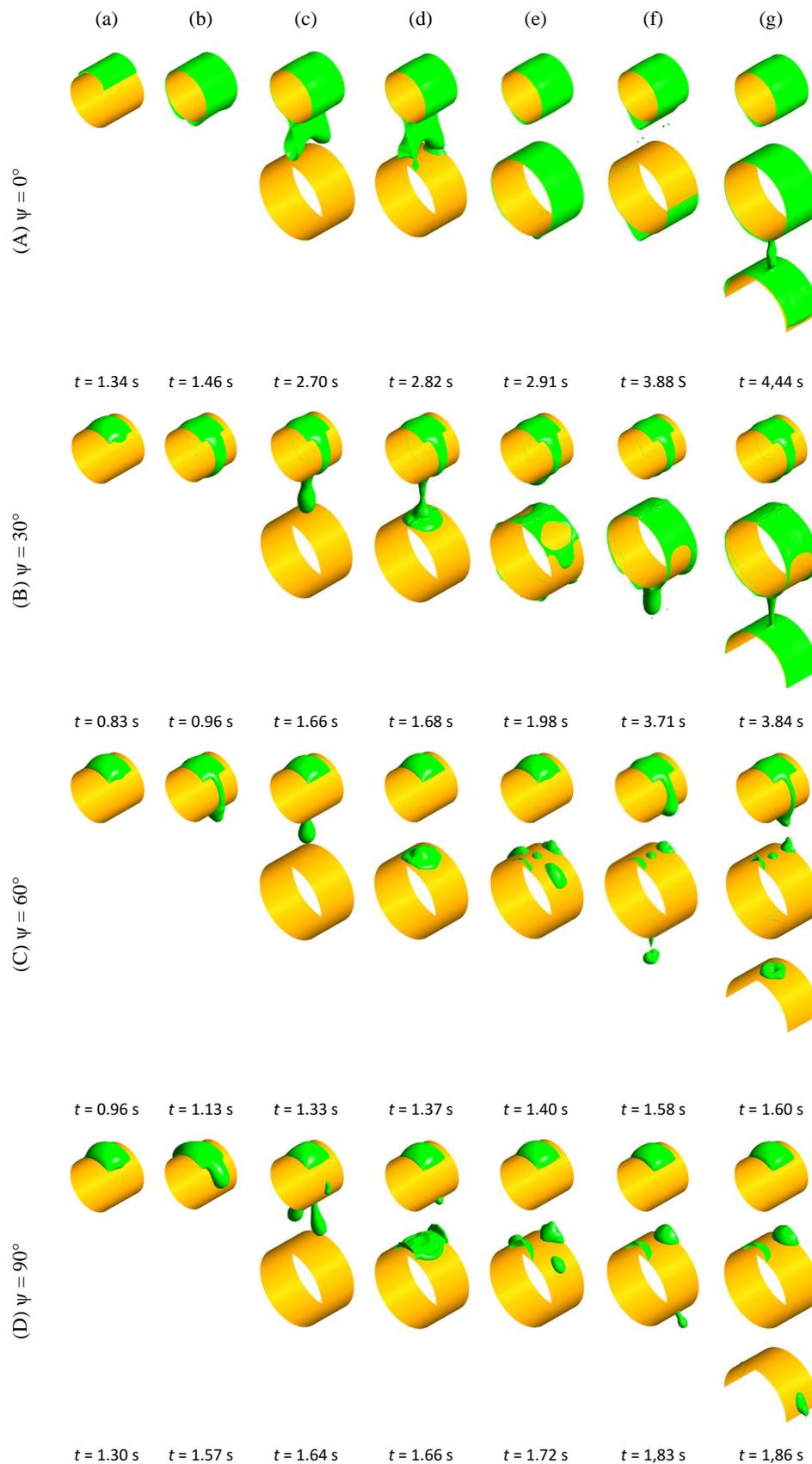


Figura 4.6: Hidrodinámica transitoria del *film* de la solución LiBr – H₂O cuando $Re = 7$ para diferentes valores del ángulo de contacto.

inferior del distribuidor, se inicia la formación de la gota. El volumen de la gota crece hasta que llega al tubo central. A continuación, el *film* se parte, y se propaga a lo largo del tubo como si fuera un *film* continuo. En este caso, el flujo del *film* cubre la totalidad del tubo central. Sin embargo, la frecuencia de la gota no es suficiente para mantenerlo mojado de forma continua. Finalmente, se inicia la formación de la gota en la parte inferior del tubo central hasta llegar al tubo inferior.

Para $\Psi = 30^\circ$ (Figura 4.6(B)), el comportamiento del flujo es similar al caso mostrado previamente, ya que el *film* es continuo en el distribuidor y la gota se crea en ambos tubos. No obstante, en este caso el flujo del *film* no impregna totalmente el distribuidor, además de no contactar con las entradas de flujo adyacentes. Asimismo, en el tubo central el flujo del *film* es discontinuo y no se alcanza la mojabilidad completa.

En contraste con ángulos de contacto menores, en el caso de $\Psi = 60^\circ$ (Figura 4.6(C)), el área de mojado del *film* en el distribuidor decrece, mientras que el periodo de formación de la gota es más corto. Además, la separación de la gota ocurre antes de llegar a la parte inferior del distribuidor. La gota se rompe en el impacto, pero permanece en contacto con el tubo central sin que se generen salpicaduras.

En el caso de $\Psi = 90^\circ$, el flujo no actúa como un *falling film*. En cambio, el flujo es de tipo gota. Asimismo, la separación de la gota ocurre antes de llegar a la parte inferior del distribuidor. Como consecuencia de las propiedades de mojabilidad y la mayor velocidad de impacto, en este caso, el *film* también exhibe una fractura en el impacto y, en el tubo central, la separación de la gota es igualmente prematura.

Por su parte, las Figuras 4.7 y 4.8 representan la hidrodinámica del *film* de la solución para los mismos ángulos de contacto de la Figura 4.6, pero en este caso para los números de Reynolds de $Re = 24$ (Figura 4.7) y $Re = 53$ (Figura 4.8).

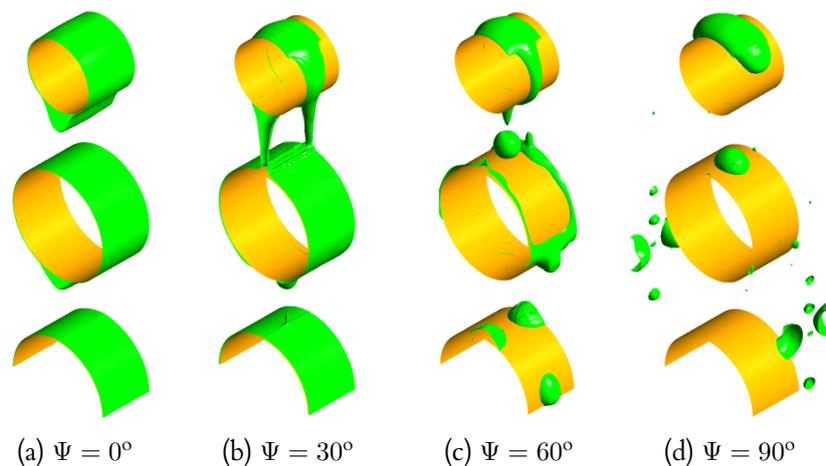


Figura 4.7: Hidrodinámica del *film* de la solución LiBr – H₂O cuando $Re = 24$ para diferentes valores del ángulo de contacto

Los resultados de las Figuras 4.7a-4.7d revelan que en todos los casos el modo de flujo es de tipo gota. Como se puede observar en el caso de $\Psi = 30^\circ$ (Figuras

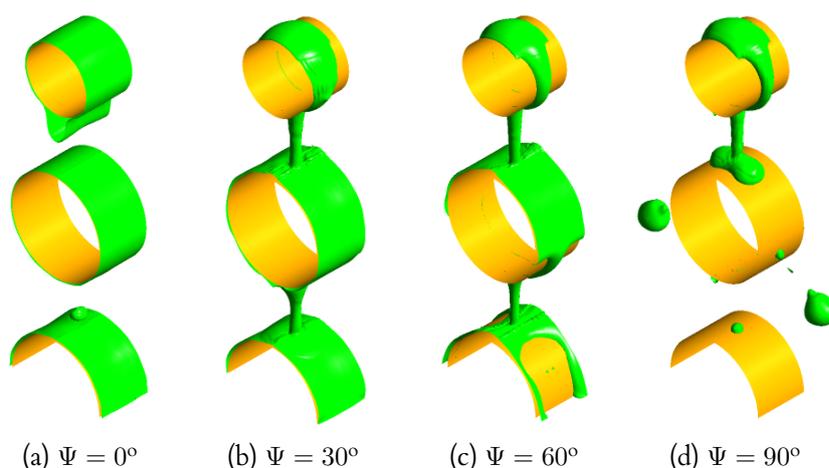


Figura 4.8: Hidrodinámica del *film* de la solución LiBr – H₂O cuando $Re = 53$ para diferentes valores del ángulo de contacto

4.7a y 4.7b, respectivamente), es posible que se forme una columna entre los tubos en un periodo de tiempo corto. No obstante, esta columna no se mantiene estacionariamente. Los resultados del flujo para cada ángulo de contacto son comparables a $Re = 7$. Sin embargo, cuando $\Psi = 0^\circ$ (Figura 4.7a) y $\Psi = 30^\circ$ (Figura 4.7b), la frecuencia de goteo entre tubos es suficiente para mantener estacionariamente mojados todos los tubos (exceptuando el distribuidor). Por último, cabe mencionar que cuando $\Psi = 60^\circ$ (Figura 4.7c), el flujo es una mezcla de pequeños *films* y gotas.

En cuanto $Re = 53$ (Figuras 4.8), el modo de flujo es de tipo columna excepto cuando $\Psi = 30^\circ$ (Figura 4.8a). Además, el *film* es continuo en el tubo del medio, aunque la solución solamente cubre el tubo completamente cuando $\Psi = 0^\circ$ y $\Psi = 30^\circ$ (Figuras 4.8a y 4.8b, respectivamente). Por su parte, cuando $\Psi = 60^\circ$ (Figura 4.8c), la parte superior del tubo es cubierta completamente por el *film*. Sin embargo, una vez se alcanza $\theta \approx 100^\circ$, se forma un pequeño riachuelo (*rivulet*) en el plano central. Por el contrario, cuando $\Psi = 90^\circ$ (Figura 4.8d), se produce un flujo de tipo columna entre el distribuidor y el tubo central, aunque la gota se desprende antes de llegar a la parte inferior. Por lo tanto, el contacto del fluido con el tubo inferior es casi nulo.

En resumen, los resultados de la Sección 4.3.3 revelan que, en los casos de mojabilidad incompleta, los perfiles difieren en la dirección axial. Por consiguiente, es necesaria la utilización de modelos numéricos 3D para analizar propiamente el comportamiento del flujo en estos casos. Asimismo, el análisis hidrodinámico ha demostrado que, tanto el ángulo de contacto, como el número de Reynolds impactan en la hidrodinámica del *film* y el modo de flujo. Como resultado, tal y como ilustran las Figuras 4.6-4.8, las propiedades de mojabilidad varían el área que moja el fluido. Así, en la Sección 4.3.4 se estudiará la variación del ratio de mojado (WR) con las propiedades de mojabilidad, en este caso desde un punto de vista cuantitativo.

4.3.4 Ratio de mojado de la solución LiBr – H₂O

Tal y como se ha demostrado, se generan áreas secas cuando los absorbedores operan a números de Reynolds bajos y/o cuando el ángulo de contacto es alto. El impacto de estas regiones es perjudicial para la transferencia de calor y, en consecuencia, también para la transferencia de masa. Con el objetivo de analizar la influencia que tienen las propiedades de mojabilidad del tubo en el área de contacto entre la solución y el tubo, la Figura 4.9 presenta el ratio de mojado en función del tiempo para diferentes ángulos de contacto ($0^\circ \leq \Psi \leq 90^\circ$) y números de Reynolds ($7 \leq Re \leq 53$). Los resultados se presentan hasta que el ratio de mojado llega a un valor estacionario, o en caso de no alcanzar esta condición, hasta que presenta un comportamiento periódico. Inicialmente, la solución no moja el tubo central debido a que todavía se encuentra en el distribuidor.

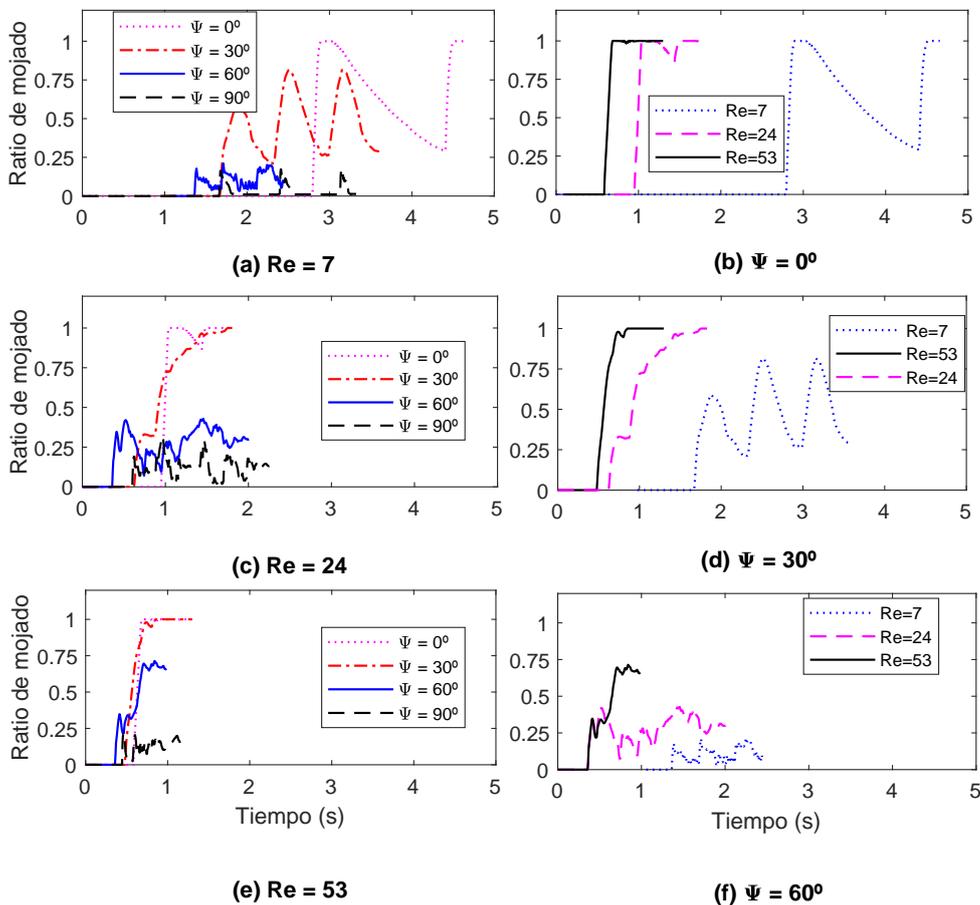


Figura 4.9: Ratio de mojado para el tubo central en función del tiempo para diferentes valores de Re y Ψ .

Cuando $Re = 7$ (Figura 4.9(a)) el modo de flujo es de tipo gota y el ratio de mojado muestra un comportamiento periódico para todos los ángulos de contacto. En estos casos, el ratio de mojado disminuye con el ángulo de contacto. Como se ilustra igualmente en la Figura 4.6, cuando $\Psi = 0^\circ$, el *film* cubre completamente el tubo en un periodo corto de tiempo. No obstante, la frecuencia de la gota no es lo suficientemente alta para mantenerlo mojado estacionariamente y el ratio

de mojado comienza a disminuir cuando empieza la formación de gota en la parte inferior del tubo. Cuando $\Psi = 30^\circ$, ocurre lo mismo, pero en este caso, la solución no cubre completamente la totalidad del tubo. Por el contrario, cuando $\Psi = 60^\circ$ y $\Psi = 90^\circ$, el ratio de mojado es menor que en los casos de menor ángulo.

Para el caso de $Re = 24$, Figura 4.9(c), cuando $\Psi = 0^\circ$ y $\Psi = 30^\circ$, la solución moja completamente toda la superficie estacionariamente. No obstante, el ratio de mojado es menor para el resto de los ángulos de contacto, y fluctúa caóticamente debido a la rotura de la gota en el impacto contra el tubo.

Por su parte, cuando $Re = 53$ y $\Psi = 0^\circ$ o $\Psi = 30^\circ$ (Figura 4.9(e)), de la misma forma que cuando $Re = 24$ (Figura 4.9(c)), el tubo está completamente mojado. En los demás casos, la solución no cubre totalmente el tubo y los valores del ratio de mojado no llegan a un valor estacionario.

En cuanto a los resultados donde se mantiene constante el ángulo de contacto, (Figuras 4.9(b) 4.9(d) y 4.9(f)), los resultados muestran que el ratio de mojado aumenta con el número de Reynolds. Sin embargo, cuando $\Psi = 0^\circ$ y $\Psi = 30^\circ$ (Figura 4.9(b) y Figura 4.9(d)), el tubo se mantiene completamente mojado tanto cuando $Re = 24$, como $Re = 53$. Esto se debe a que ambos números de Reynolds son mayores que el número de Reynolds mínimo para mantener el tubo mojado completamente.

No obstante, tal y como muestra la Figura 4.9, en algunos casos, no se alcanza un valor estacionario del ratio de mojado. Con el objetivo de comparar los resultados transitorios con los resultados estacionarios, se ha estimado el valor promedio en el tiempo del ratio de mojado entre dos gotas subsiguientes en estos casos transitorios. Sin embargo, cabe mencionar que, en algunos casos, debido al comportamiento caótico, la elección apropiada del intervalo de tiempo es compleja. La Figura 4.10 presenta el ratio de mojado promedio en función del ángulo de contacto para diferentes números de Reynolds. En esta figura, también han sido incluidos los ángulos de contacto $\Psi = 45^\circ$ y $\Psi = 120^\circ$, con el fin de proporcionar más información.

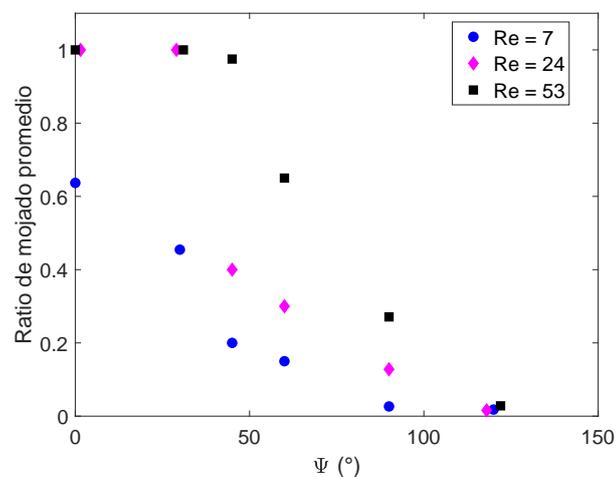


Figura 4.10: Ratio de mojado promedio del tubo central para diferentes valores de Re y Ψ .

Los resultados de la Figura 4.10 evidencian que, para cada ángulo de contacto, existe un mínimo número de Reynolds para mantener la superficie completamente mojada. El-Genk y Saber [208] también observaron que, en placas planas verticales, existe un mínimo ratio de mojado (*Minimum wetting rate*, MWR), el cual depende del ángulo de contacto. Cuanto mayor es el ángulo de contacto, mayor es MWR. En el presente estudio, cuando el ángulo de contacto está entre $\Psi = 0^\circ$ y $\Psi = 30^\circ$, el número de Reynolds mínimo para mojar completamente el tubo estaría en el rango $7 < Re < 24$ (Figura 4.10). Asimismo, cuando $\Psi = 45^\circ$ el valor de MWR estaría cerca de $Re \approx 53$ y para $\Psi \geq 60^\circ$, $Re > 53$. En los casos donde el flujo de masa fuera mayor que el MWR, el espesor del *film* también sería más grueso. Por consiguiente como el área mojada sería la misma, esto habría sido perjudicial para el rendimiento del absorbedor. Además, se puede observar que el número de Reynolds no impacta en el ratio de mojado cuando $\Psi = 120^\circ$, como consecuencia de su carácter hidrofóbico.

En la misma línea, se puede definir el ángulo de contacto máximo en el cual el tubo se moja completamente (*maximum wetting contact angle*, MWCA). El valor de MWCA para $Re = 53$ sería de $MWCA \approx 45^\circ$, mientras para $Re = 24$, estaría en el rango $30^\circ < MWCA < 45^\circ$ (Figura 4.10). En cambio, algunos números de Reynolds no tienen el correspondiente MWCA, como en el caso de $Re = 7$. Esto significa que bajo estas condiciones de operación, la obtención de la mojabilidad completa es inalcanzable.

Asimismo, los resultados revelan que, cuando el valor del ángulo de contacto es mayor que el MWCA correspondiente a las condiciones de operación, el ratio de mojado decrece con el incremento del ángulo de contacto. Sin embargo, cuando el valor es menor, el ángulo de contacto no tiene ninguna influencia en el ratio de mojado. No obstante, tal y como ilustra la Figura 4.6(a,b,e,f), el ángulo de contacto afecta el comportamiento del flujo del distribuidor, por lo que se debería de considerar en los modelos numéricos de absorbedores con este tipo de distribuidores.

Por otra parte, los resultados obtenidos se han contrastado con la ecuación propuesta por El-Genk y Saber [208], el cual se basa en el criterio de la energía mínima total (*minimum total energy*, MTE). Según los autores, la ecuación propuesta presenta un excelente acuerdo con los resultados empíricos, el cual relaciona el MWR con el ángulo de contacto como:

$$\Gamma_{\min}^* = 0.67\Delta_{\min}^{2.83} + 0.26\Delta_{\min}^{9.51}, \quad (4.6a)$$

$$\Delta_{\min} = (1 - \cos \Psi)^{0.22}, \quad (4.6b)$$

donde Γ_{\min}^* es el flujo de masa mínimo adimensional por unidad de longitud y Δ_{\min} el espesor adimensional correspondiente a este flujo mínimo. Estas variables se relacionan con las propiedades del flujo tal que,

$$\Gamma_{\min}^* = \frac{\Gamma}{\left(\frac{\rho_l \mu_l \sigma^3}{g}\right)^{1/5}}, \quad (4.7a)$$

$$\Delta_{\min} = \delta \left(\frac{\rho_l^3 g^2}{15 \mu_l^2 \sigma} \right)^{1/5}, \quad (4.7b)$$

donde Γ es el flujo de masa por unidad de longitud.

Así, por medio de la Ecuación (4.7a) y la Ecuación (4.7b) se ha examinado el ángulo de contacto mínimo para mojar completamente el tubo (MWCA), concretamente para los casos analizados en el desarrollo de esta tesis doctoral. La Figura 4.11 muestra la MWCA en función del número de Reynolds adimensional estimada con las Ecuaciones (4.7a) y (4.7b), así como las isólineas del número de Reynolds adimensional calculadas para $Re = 7$, $Re = 24$ y $Re = 53$. En este caso, el flujo adimensional mínimo necesario coincide con los valores donde se cruzan la curva de El Genk y Saber [208] y las isólineas.

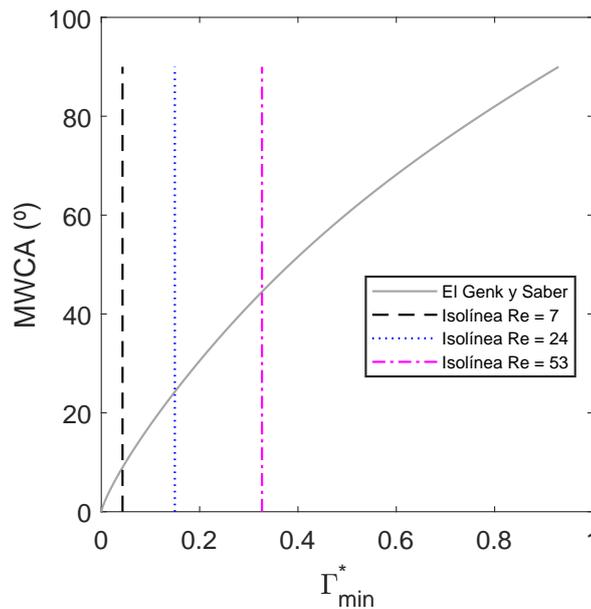


Figura 4.11: Resultados del flujo mínimo de mojado en función del ángulo de contacto y las isólineas de flujo mínimo adimensional calculados con los números de Reynolds de $Re = 7$, $Re = 24$ y $Re = 53$.

Según El Genk y Saber [208], si el ángulo de contacto es menor que el valor de MWCA donde coinciden las isólineas y la curva propuesta, la solución mojaría todo el tubo. Así, se ha calculado el MWCA con los números de Reynolds estudiados en este capítulo utilizando la Ecuación (4.7a), los cuales se presentan en la Tabla 2.

Tabla 4.2: Valores de MWCA estimados con las Ecuaciones propuestas por El Genk y Saber [208] y los calculados con el modelo numérico propuesto en el trabajo de esta tesis doctoral

	MWCA (°)	
	El Genk y Saber [208]	CFD de este estudio
$Re = 7$	9.0	-
$Re = 24$	24.0	30.0-45.0
$Re = 53$	44.5	≈ 45.0

Los resultados de la Tabla 4.2 muestran que los valores estimados por las Ecuaciones (4.7a) y (4.7b) y los obtenidos en los modelos propuestos coinciden en el caso de $Re = 53$. En cambio, cuando $Re = 7$ y $Re = 24$, el MWCA propuesto por El-Genk y Saber [208] es menor que en los modelos. Cabe destacar que cuando $Re = 7$, la solución en el modelo CFD no llega a mojar por completo ni tan siquiera cuando $\Psi = 0^\circ$. Además, es importante resaltar que cuando $Re = 7$ y $Re = 24$, el flujo es de tipo gota, mientras que para $Re = 53$ el flujo es de tipo columna. Como en el caso de placas planas el modo de flujo se asemeja al modo columna o lámina, la propuesta de El-Genk y Saber [208] podría ser válida en *falling films* de tubos horizontales solamente para flujos de este tipo.

Para verificar la validez de la propuesta de El-Genk y Saber [208] en tubos horizontales, se han extendido los modelos para el rango entre ($60^\circ \leq \text{MWCA} \leq 90^\circ$). El flujo másico introducido en el modelo ha sido el calculado por medio de la Ecuación (4.7a) de El-Genk y Saber [208], correspondientes a los ángulos analizados, los cuales se presentan en la Tabla 4.3:

Tabla 4.3: Número de Reynolds mínimo correspondiente a diferentes ángulos de contacto

Ψ	Re_{\min}
60	80.4
75	112.6
90	150

La Figura 4.12 presenta los resultados de la hidrodinámica obtenidos con el modelo propuesto para las condiciones de operación mostradas en la Tabla 4.3.

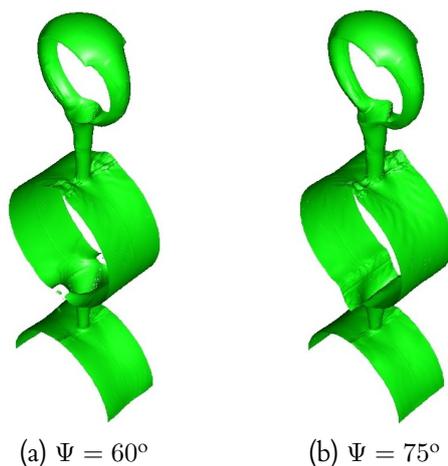


Figura 4.12: Hidrodinámica del *film* para las condiciones de operación mostradas en la Tabla 4.3.

Los resultados de las Figuras 4.12a y 4.12b revelan que, cuando $\Psi = 60^\circ$ y $\Psi = 75^\circ$, la solución moja totalmente la superficie del tubo. En el caso de $\Psi = 90^\circ$, el ratio de mojado es del 70 %, como resultado de la aparición de zonas

secas en la parte inferior del tubo. Además, en todos los casos el modo de flujo es de tipo columna.

Por lo tanto, los resultados demuestran que las Ecuaciones (4.7a) y (4.7b) del MWR de El-Genk y Saber [208] pueden utilizarse para asegurar números de Reynolds que mojen completamente el tubo cuando el flujo es de modo columna para condiciones hidrofílicas. Sin embargo, para la confirmación que el número de Reynolds propuesto es el mínimo para conseguir mojar completamente el tubo, se observa necesaria la extensión de este estudio.

Tal y como se ha mencionado en la Sección 4.1, la aparición de zonas secas conlleva el incremento del espesor en zonas locales, así como asimetrías en la dirección axial. En la Sección 4.3.5 se analiza el impacto que tienen las propiedades de mojabilidad en el espesor.

4.3.5 Espesor del *film* de la solución

Cuando no se alcanza la mojabilidad completa, el área de mojado de la solución y el espesor son inversamente proporcionales. Cuanto mayor es el área de mojado, menor es el espesor del *film*. Este aumento puede tener un gran impacto en la transferencia de calor y masa del absorbedor como resultado del bajo coeficiente de difusión de la solución. Debido al régimen transitorio del flujo y su tridimensionalidad, los valores del espesor varían tanto en el tiempo, como en la dirección axial y circunferencial. Así, es necesario realizar modelos transitorios 3D para captar correctamente la variación de este *film* y, por consiguiente, las conmutaciones en la transferencia de calor y masa.

La Figura 4.13 muestra la evolución del espesor en el tiempo cuando $Re = 53$ para cuatro diferentes ángulos de contacto: $\Psi = 0^\circ$, $\Psi = 30^\circ$, $\Psi = 60^\circ$ y $\Psi = 90^\circ$. Los valores de espesor coinciden con el plano central y ángulo circunferencial de $\theta = 90^\circ$. Asimismo, se ilustra la línea del espesor constante calculado con la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)) para ese mismo punto, $\delta_{Nusselt}(Re = 53)$.

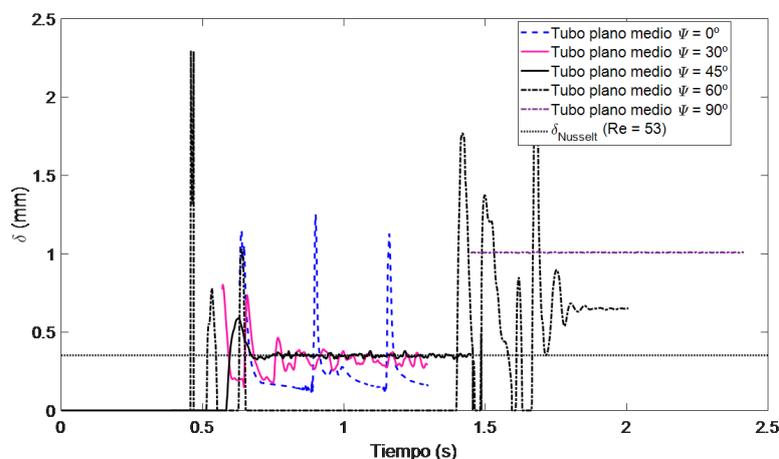


Figura 4.13: Evolución temporal del espesor en el plano medio cuando $Re = 53$ para diferentes ángulos de contacto, así como el valor estimado del espesor mediante la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)).

Los resultados de la Figura 4.13 ilustran que, cuando el flujo es de modo gota ($\Psi = 0^\circ$), el comportamiento del espesor es periódico. En consecuencia, el valor del espesor del *film* depende de la posición en la que se encuentra el frente de la gota. Cuando ésta coincide con la posición analizada, el espesor aumenta y disminuye de manera brusca en un instante; y se mantiene en un valor muy pequeño hasta que llega la siguiente gota. Asimismo, en la mayor parte del tiempo, el valor del espesor es menor que el espesor teórico calculado con la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)).

Por el contrario, cuando el modo de flujo es de tipo columna ($\Psi = 30^\circ$, $\Psi = 45^\circ$, $\Psi = 60^\circ$ y $\Psi = 90^\circ$), el espesor tiende a un valor estacionario estable, además de tener oscilaciones muy pequeñas en el tiempo. Cuanto mayor es el ángulo de contacto, el tiempo necesario para llegar a un valor estable es mayor. Asimismo, cuando la solución moja en totalidad la superficie del tubo ($\Psi = 30^\circ$ y $\Psi = 45^\circ$), el valor del espesor es muy similar al estimado mediante la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)) una vez estabilizado su valor. Concretamente, este espesor dependerá de la interacción existente con las columnas adyacentes. En el caso de $\Psi = 30^\circ$, las fluctuaciones del espesor en el periodo estacionario son mayores. Esta tendencia también fue observada en el trabajo experimental de Gstoehl et al. [81].

En cambio, en los casos donde aparecen zonas secas ($\Psi = 60^\circ$ y $\Psi = 90^\circ$), los espesores de la posición analizada son mayores que en los previstos con la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)), los cuales aumentan con el ángulo de contacto. Esta afirmación coincide con los resultados obtenidos en el ratio de mojado, ya que el espesor es inversamente proporcional al ratio de mojado.

Sin embargo, este espesor no es constante a lo largo de la dirección circunferencial (θ) y axial (z). La Figura 4.14 presenta el perfil del espesor del *film* a lo largo de la dirección axial cuando $Re = 53$, para cuatro diferentes ángulos de contacto entre $30^\circ \leq \Psi \leq 90^\circ$, así como el valor de espesor calculado con la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)) ($\delta_{Nu}(Re = 53)$). Todos los casos coinciden con el modo de flujo de tipo columna, además de haber sido calculados en el plano medio del tubo central, en un instante de tiempo determinado.

Los resultados de la Figura 4.14 muestran que cuando no se alcanza la mojabilidad completa, la diferencia del espesor en la dirección axial tiene mayores fluctuaciones que cuando se moja completamente. Asimismo, tal y como se ha demostrado en la Figura 4.13, en los casos de mojabilidad plena ($\Psi = 30^\circ$ y $\Psi = 45^\circ$) el espesor es muy similar a la estimada con la ecuación de Nusselt, además de ser más homogénea en la dirección axial.

En resumen, en la Sección 4.3.5 se ha verificado que el espesor varía transitoriamente con el tiempo además de en la dirección axial, sobre todo en los modos de flujo gota que no logran la mojabilidad completa (muy típicos en absorbedores de tubos horizontales de LiBr – H₂O). Por lo tanto, el empleo de modelos 2D estacionarios y la no consideración del ángulo de contacto pueden conllevar a errores en la estimación de la transferencia de calor y masa, debido a las diferencias existentes entre las hipótesis realizadas y las condiciones de trabajo.

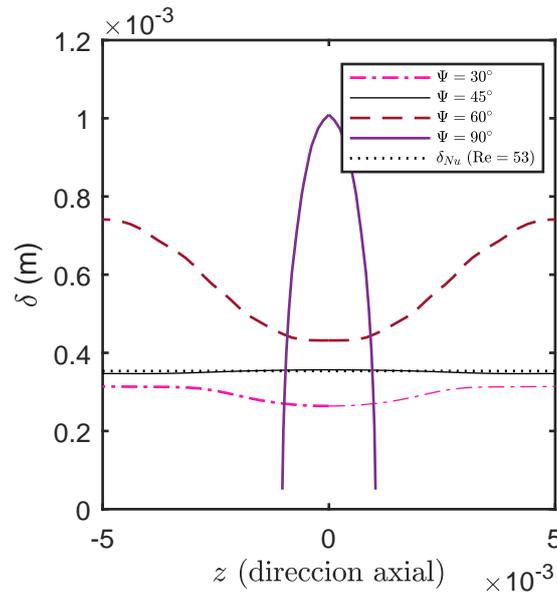


Figura 4.14: Espesor del *film* del plano medio en la dirección axial para diferentes ángulos de contacto y el espesor del *film* estimado por la Ecuación de Nusselt (Ecuación (4.6)).

4.4 Conclusiones

El estudio del Capítulo 4 mejora la comprensión de la influencia de las propiedades de mojabilidad del tubo en el comportamiento del flujo *falling film*. Se han definido modelos 2D y 3D transitorios de flujo bifásico con el fin de estudiar el rango de aplicabilidad de estos modelos, concluyendo la necesidad de utilizar modelos 3D en los casos de mojabilidad incompleta. Los resultados de los modelos 3D propuestos han sido comparados con los resultados de las soluciones de Nusselt [78] y Ji et al. [189]. Este contraste presenta un buen acuerdo entre ellos, validando la metodología numérica aplicada. Usando este modelo 3D validado, se han analizado el comportamiento transitorio del flujo y las evoluciones del área de mojado y el espesor del *film* para diferentes ángulos de contacto ($0^\circ \leq \Psi \leq 120^\circ$).

Los resultados revelan que la hidrodinámica del *film* y el modo de flujo varían con el ángulo de contacto. En función de las condiciones de operación, para un mismo número de Reynolds, el modo de flujo puede variar desde gota a columna en ciertas condiciones de operación, modificando solamente las propiedades de mojabilidad. Por otro lado, los resultados del área de mojado muestran que existe un número de Reynolds para lograr la mojabilidad completa, el cual aumenta con el ángulo de contacto. De la misma forma, para un número de Reynolds dado, se ha definido el ángulo de contacto máximo para una mojabilidad completa. Para valores mayores de éste ángulo, el ratio de mojado descende con el incremento del ángulo de contacto o la reducción del número de Reynolds. Sin embargo, en valores menores a MWCA, el ratio de mojado permanece constante con la reducción del ángulo de contacto. De hecho, bajo ciertas condiciones de operación el objetivo de mojabilidad completa es inalcanzable. En estos casos, se ha demostrado que el espesor del *film* varía transitoriamente en el tiempo, así

como en la dirección axial.

Asimismo, se han comparado los modelos numéricos con las ecuaciones propuestas El-Genk y Saber [208] para el cálculo del número de Reynolds mínimo para conseguir una mojabilidad plena. Los resultados demuestran que por medio de estas ecuaciones se obtienen valores del número de Reynolds que consiguen mojar completamente el tubo cuando el modo de flujo es columna o lámina, pero no en el modo de flujo gota. Asimismo, se propone la extensión del estudio realizado en el trabajo de esta tesis doctoral para verificar que los números de Reynolds mínimos propuestos realmente coinciden con los valores mínimos para mojar completamente.

En resumen, este estudio ilustra que el ángulo de contacto tiene una gran influencia en el comportamiento del flujo, y debería ser considerado en los análisis de absorbedores de tubos horizontales que operan con LiBr – H₂O trabajando en los modos de flujo gota y columna. Además, se requieren modelos transitorios 3D para captar correctamente las variaciones en el ratio de mojado, la hidrodinámica y en el espesor tanto en la dirección tangencial, como en la dirección axial. Por lo tanto, la metodología propuesta es una herramienta válida para el diseño de intercambiadores de calor *falling film* eficientes.

5 | METODOLOGÍA PARA EL ANÁLISIS DE LA TRANSFERENCIA DE CALOR Y MASA EN ABSORBEDORES *FALLING FILM HEAT EXCHANGERS*

5.1 Introducción

Como se ha discutido en el Capítulo 4, la mojabilidad tiene un gran efecto en el área de intercambio y, por lo tanto, en el espesor de la solución. Por consiguiente, también influye en la transferencia de calor y masa que ocurre en el absorbedor.

La mayor parte de los trabajos de la literatura que analizan la transferencia de calor y masa líquido-vapor por medio de modelos numéricos utilizan dos diferentes métodos para el cálculo de flujo de masa absorbido en la interface: La Ley de Fick [118] y la Ley de Higbie [142]. Estas leyes han sido descritas en la Sección 1.4.1 y Sección 1.4.2, respectivamente, y han sido utilizadas en los diferentes trabajos de la literatura bajo dos hipótesis básicas.

Por un lado, muchos trabajos de la literatura asumen que la difusión másica en la interface ocurre en las dos direcciones: líquido-vapor y vapor-líquido [29, 55, 93, 97, 102, 121, 123, 137, 151]. Esto significa que en una mezcla binaria los flujos molares de las dos especies tienen la misma magnitud, pero signos opuestos [156]. En este estudio, a esta hipótesis se le denominará difusión bidireccional o difusión 2D.

Por otro lado, en muchos casos prácticos, la presión de vapor del absorbente es despreciable, lo cual significa que se considera que el absorbente no es volátil [40, 54, 60, 110, 120, 122, 124, 126, 127, 129, 134–136, 138–140, 153, 154]. Como resultado, la transferencia de masa líquido-vapor de la especie absorbente en la interface no existe, por lo que asumen que la difusión ocurre solamente en una dirección. A este fenómeno se le denomina relación Eckert-Schneider [102, 110, 129] o difusión unidireccional [155]. En el presente trabajo, se le denominará difusión unidireccional o difusión 1D.

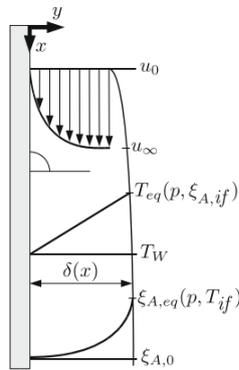
Asimismo, la consideración de la absorción también se ha realizado mediante diferentes métodos.

Por una parte, algunos trabajos de la literatura han utilizado la fracción másica [29, 39, 40, 60, 93, 121, 123, 124, 129, 131, 133, 160] o temperatura de equilibrio [53–55, 97, 102, 116, 122, 126, 127, 135–139, 153, 154, 159, 162, 212] como una

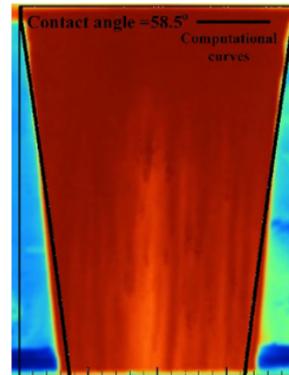
condición de contorno. La mayoría de los estudios numéricos han escogido este método, de los cuales mayoritariamente han sido estudios 2D que solamente han modelado el dominio líquido. Entre ellos, lo más común ha sido adimensionalizar las variables físicas y las ecuaciones de transporte. En cuanto a geometrías, se han propuesto modelos de tubos cilíndricos horizontales [39, 40, 102, 127, 133, 135–138, 159, 163], así como placas planas y tubos verticales [26, 29, 122, 131, 139, 154]. Los trabajos que han empleado magnitudes dimensionales con este método han asumido que el espesor del film es constante, tal y como se detalla en el estudio de Shi et al. [213].

Por otra parte, otros trabajos han calculado el flujo de masa absorbido en la interface y lo contemplan en las ecuaciones de transporte como término fuente dependiente de este flujo [32, 128, 130, 132, 146, 151].

En cuanto a la modelización de la interface, algunos estudios han modelado por medio de una celda, considerando solamente el dominio líquido, esto es, han realizado modelos monofásicos (Figura 5.1a), tal y como se detalla por ejemplo en los siguientes trabajos [116, 129, 136, 163]. En estos casos, la interface está solamente formada por una cara que coincide exactamente con el contorno exterior. No obstante, en otros modelos [62, 93, 95, 96, 103, 111, 121, 123, 128, 132, 214], la interface ha sido modelada con varias celdas para considerar tanto el dominio líquido, como el vapor (modelos multifásicos, Figura 5.1b) aplicando el método VOF [168] descrito en la Sección 3.2.



(a) Modelización de la fase líquida. [102]



(b) Modelización multifásica. [111]

Figura 5.1: Diferentes métodos de modelización [183].

Sin embargo, tal y como se ha demostrado en el Capítulo 4, la mojabilidad es clave en el comportamiento del absorbedor. En los absorbedores de tubos horizontales y placas planas, es muy difícil conseguir mojar completamente toda la superficie de intercambio. No obstante, estos estudios numéricos de la bibliografía no han considerado el análisis de la mojabilidad, por lo que los resultados de los modelos pueden no ser comparables con los experimentales.

En resumen, existen diferentes metodologías para la modelización de la transferencia de calor y masa líquido-vapor en la literatura. Por esta razón, en el Capítulo 5 se van a examinar en profundidad las diferentes metodologías con el fin de seleccionar la más apropiada para el estudio de la transferencia de calor y masa en absorbedores de LiBr – H₂O. Para analizar los fenómenos de transferencia de calor y masa a nivel local y poder realizar la comparación con

resultados experimentales que no incluyan la incertidumbre de la mojabilidad, se han definido dominios computacionales bidimensionales de tubos verticales.

A continuación, se detalla la organización del presente capítulo:

En la Sección 5.2 se define la metodología utilizada en el modelo numérico. En primer lugar, se detalla el dominio computacional, las condiciones de contorno y discretización definida en el modelo numérico. Después, se especifican las condiciones de trabajo, el procedimiento usado para el cálculo de las propiedades termofísicas y las ecuaciones gobernantes del modelo. En este caso, se han definido diferentes metodologías para la estimación del flujo de absorción de la interface, los cuales se puntualizarán en la Sección 5.2.6. Como en estos métodos es necesario el cálculo de las condiciones de equilibrio, se continúa explicando este procedimiento de cálculo. Por último, en la Sección 5.2.8 se definen las diferentes formas de modelizar la interface, así como los métodos de discretización empleados en los modelos.

Una vez definidas las diferentes metodologías, en la Sección 5.3 se mostrará el análisis de la independencia de malla y la comparación de los modelos de este estudio con los existentes en la bibliografía. A continuación, se comparan las diferentes metodologías definidas en la Sección 5.2 para modelizar absorbedores de LiBr – H₂O. Una vez seleccionados los métodos más favorables para su estudio, se analizará la influencia de diferentes parámetros como el número de Reynolds, la transferencia de calor del agua de refrigeración y la fracción másica de entrada en el absorbedor. Por último, se compararán los resultados de los modelos con los ensayos experimentales de la bibliografía.

Para finalizar el Capítulo 5 se presentarán las conclusiones obtenidas.

5.2 Modelo numérico

5.2.1 Introducción

En la Sección 5.2.1 se detallan el dominio computacional, las condiciones de contorno y la discretización definida en los modelos. A continuación, se definen las condiciones de trabajo y el procedimiento usado para el cálculo de las propiedades termofísicas de los modelos, junto con la presentación de las ecuaciones gobernantes utilizadas. Como se ha comentado en la Sección 5.1, en el Capítulo 5 se analizan las diferentes metodologías. Por esta razón, se continúa con la concreción de las distintas metodologías para la estimación del flujo másico local en la interface. En estas metodologías, es necesario el cálculo de las condiciones de equilibrio de la interface, el cual se definirá en la Sección 5.2.7. Por último, se definen las diferentes formas de modelizar la interface, junto con los métodos de discretización empleados en los modelos numéricos.

Particularmente, en la definición del modelo numérico, se han asumido las siguientes hipótesis:

1. El flujo es laminar y el fluido es newtoniano.
2. Se asume que en la interface existe el equilibrio de la presión de vapor.

3. No se consideran los efectos Duffour y Marangoni.
4. La fase líquida y de vapor son incompresibles.

5.2.2 Dominio computacional, condiciones de contorno y discretización

La Figura 5.2 muestra el esquema de un intercambiador *falling film* de tubo vertical (Figura 5.2a), así como las condiciones de contorno y la discretización del modelo (Figura 5.2b). La solución de mayor fracción másica de LiBr, entra por la parte superior del dominio al espacio anular existente entre el diámetro externo del tubo interior y el diámetro interno del tubo exterior con una temperatura y fracción másica determinadas: T_{in} y w_{in} , respectivamente. Esta temperatura puede estar en equilibrio ($T_{in} = T_{eq}$), en estado de subenfriamiento (*subcooling*, $T_{in} < T_{eq}$) o en estado de sobrecalentamiento (*overheated*, $T_{in} > T_{eq}$). Se denomina temperatura de equilibrio cuando la solución se encuentra en equilibrio termodinámico con el vapor de agua que lo rodea. Conforme la solución desciende, el vapor que circula en contracorriente es absorbido por la solución, disminuyendo así la fracción másica del LiBr ($w_{out} < w_{in}$) en la mezcla. Por la sección interna del tubo interior circula el agua de enfriamiento, el cual absorbe el calor generado en la absorción. Como resultado, aumenta la temperatura del agua a la salida ($T_{w,out}$).

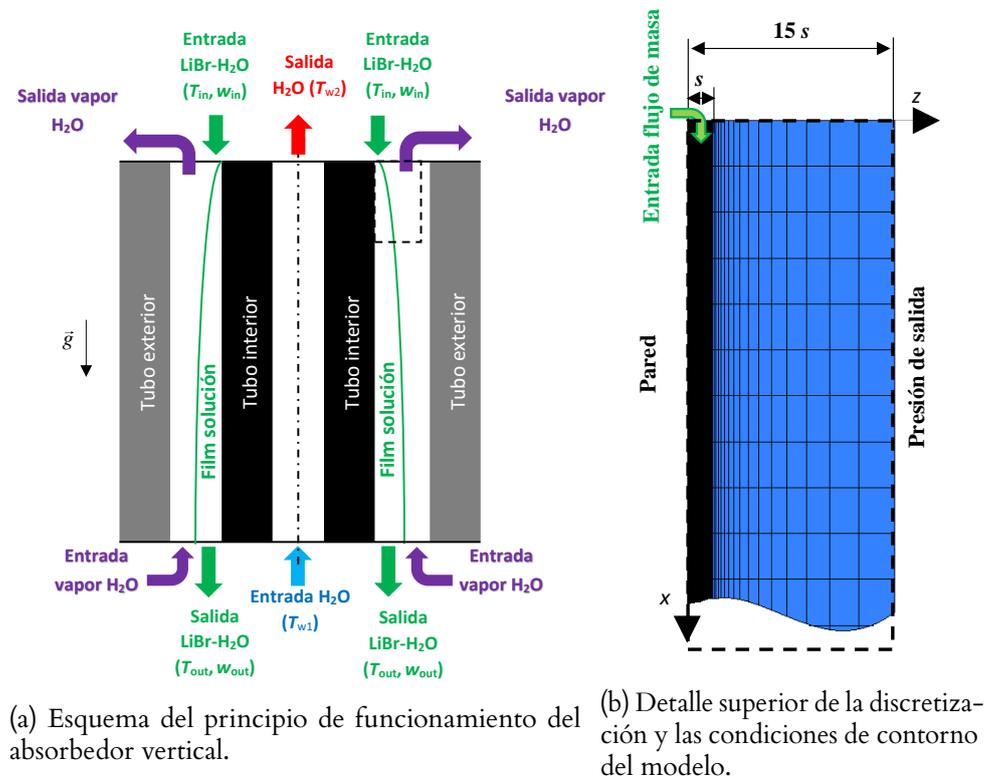


Figura 5.2: Modelo numérico del tubo vertical.

Para realizar la comparación entre los diferentes modelos numéricos y resultados experimentales de la bibliografía, se han analizado diferentes geometrías y

condiciones de trabajo. Por esta razón, y con el objetivo de optimizar el coste computacional, el dominio ha sufrido variaciones en función del caudal analizado. En la Tabla 5.1 y la Tabla 5.2 de la Sección 5.2.3 se detallan las dimensiones de los diferentes modelos propuestos.

La longitud s del dominio en la dirección transversal z , ha sido calculada en función del espesor teórico que tiene el film líquido, denominado δ_{Nu} . Este espesor teórico ha sido calculado por medio de la ecuación de Nusselt (Ecuación (1.6)) [78] para cada condición de trabajo. Para considerar en el modelo el aumento del espesor debido a la absorción, se ha incrementado el espesor de esta región un 10 %.

$$s = 1.1\delta_{Nu}. \quad (5.1)$$

En este caso se ha optado por un dominio axisimétrico. Por esta razón, se ha definido una malla 2D. Esta consideración implica que la mojabilidad del absorbedor es plena, por lo que la solución moja completamente la superficie de intercambio de calor del tubo. Desde el punto de vista analítico, la formulación teórica de Nusselt es idéntica para un *falling film* tanto de tipo placa vertical plana, como de tubo vertical. Los resultados de los modelos se van a comparar con los resultados experimentales de la bibliografía realizados con tubos verticales. A saber, que, para el caso de las placas planas, no existe ningún trabajo experimental en la bibliografía que asegure la mojabilidad plena.

La condición de presión de salida ha sido asumida en los contornos z_{max} y x_{max} . El valor definido de la presión ha sido idéntica a la presión de trabajo. En el lado de la pared, en este caso z_{min} , se ha introducido la condición de contorno de pared sin deslizamiento. Asimismo, se ha considerado que en la superficie interna existe una transferencia de calor por convección. Como las condiciones del fluido de enfriamiento han sido dispares en los ensayos experimentales de tubos verticales de la bibliografía [50–54], cada modelo se ha ajustado a las condiciones experimentales, en lo que se refiere al coeficiente de convección y la temperatura.

En cuanto al contorno x_{min} , se han considerado dos condiciones diferentes (Ecuaciones (5.2a) y (5.2b)). En el primer caso, se ha supuesto que la dimensión de la entrada de la solución es igual al espesor teórico de Nusselt correspondiente a cada caudal calculado con la Ecuación (5.1). Así, este espesor delimitará el contorno en dos diferentes partes en función de la cota z en la que se encuentra.

$$0 \leq z \leq \delta_{Nu} \rightarrow \text{Flujo másico de entrada} \quad (5.2a)$$

$$\delta_{Nu} < z \leq 15s \rightarrow \text{Presión de salida} \quad (5.2b)$$

Para capturar correctamente las fuerzas viscosas, así como la transferencia de calor y masa de la interface, la malla ha sido refinada en el dominio líquido, esto es, cuando $0 \leq z \leq 1.1s$. Sin embargo, en el resto del dominio se ha construido una malla más gruesa para reducir el coste computacional. Para asegurar la transición entre los dos tamaños de malla, el crecimiento máximo entre mallas contiguas ha sido del 10 %. Los detalles de las dimensiones del mallado computacional se especificarán en la Sección 5.3.1.

5.2.3 Condiciones de operación

Con el objetivo de validar los modelos, los resultados obtenidos se contrastarán con trabajos experimentales. No obstante, las condiciones de estos estudios difieren entre ellos, por los que en este trabajo de tesis doctoral se han realizado modelos con diferentes condiciones.

En cuanto a los estudios de modelización numérica, hasta el día de hoy se han publicado cuatro trabajos de absorbedores de tubos verticales: Yoon et al. [29], Karami y Farhanieh [154], Bo et al. [124] y Hosseinnia et al. [131]. Sin embargo, en los trabajos de Karami y Farhanieh [154] y Bo et al. [124] no se especifica la metodología de estimación de las propiedades termofísicas. Asimismo, en el estudio de Hosseinnia et al. [131], la estimación del gradiente de fracción másica se ha realizado mediante un método de interpolación entre nodos. Como en el presente trabajo se propone calcular el gradiente interpolando entre las celdas cuando la interface se modeliza en una sola celda (el contraste entre ambos métodos se realiza en la Sección 5.2.8), los resultados de los modelos del presente estudio se compararán con los obtenidos por los modelos de Yoon et al. [29]. Este estudio se basa en la hipótesis de la concentración de equilibrio en la interface. Como en el presente trabajo de tesis doctoral se analizará igualmente el método basado en la temperatura de equilibrio, los resultados del modelo también se han comparado con el modelo de Mittermaier et al. [102]. En la Tabla 5.1 se resumen las condiciones geométricas y de operación de ambos estudios:

Tabla 5.1: Condiciones geométricas y de operación del estudio de Yoon et al. [29] y Mittermaier et al [102].

Variable	Yoon et al. [29]	Mittermaier et al [102]
Presión de trabajo, p (kPa)	1.0	1.5
Longitud efectiva, x (mm)	1000	1000
Coefficiente de convección del agua de enfriamiento, $h_{\text{H}_2\text{O}}$ ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)	∞	∞
Temperatura del fluido de enfriamiento, $T_{\text{H}_2\text{O}}$ ($^{\circ}\text{C}$)	32 – 36 (lineal)	27
Número de Reynolds de la solución, $\text{Re}_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}$	14	36
Temperatura de entrada, $T_{\text{LiBr-H}_2\text{O},\text{in}}$ ($^{\circ}\text{C}$)	46.00	32.15
Fracción másica de LiBr de la mezcla en la entrada, $w_{\text{LiBr},\text{in}}$	0.602	0.504
Estimación de la absorción	Fick 1D ¹	Fick2D

De la misma forma, los resultados de los modelos propuestos en el presente estudio se compararán con los autores de tres trabajos experimentales de tubos verticales de la bibliografía: García-Rivera et al. [53], Takamatsu et al. [52] y Medrano et al. [51]. En la Tabla 5.2 se resumen las condiciones geométricas y de trabajo correspondientes. Estos trabajos experimentales, han verificado

¹ver Sección 5.2.7

que la solución moja completamente el tubo, ya que han incluido el análisis de la superficie mojada en función del número de Reynolds. A continuación, se enumeran los números de Reynolds mínimos correspondientes para asegurar la mojabilidad de los estudios experimentales [51–53]:

Tabla 5.2: Condiciones geométricas y de operación de los estudios experimentales de tubos verticales de la bibliografía [51–53].

Variables/autores	García-Rivera et al. [53]	Takamatsu et al. [52]	Medrano et al. [51]
Presión de trabajo, p (kPa)	1.30	1.33	1.30
Diámetro interior del tubo interno, d_{in} (mm)	18.00	16.05	22.10
Diámetro exterior del tubo interno, d_{out} (mm)	22.00	19.05	26.60
Longitud efectiva, x (mm)	1000	1200	1500
Flujo másico (kg s^{-1}) / Número de Reynolds del agua de enfriamiento	0.0360/3200	0.1860/15000	0.1196/10500
Temperatura de entrada del fluido de enfriamiento, T_{in,H_2O} ($^{\circ}\text{C}$)	30	20 y 25	35
Número de Reynolds de la solución, $\text{Re}_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}$	80 – 120	50 – 550	50 – 300
Subenfriamiento, $\Delta T = T_{eq} - T_{in}$ ($^{\circ}\text{C}$)	0	0 – 5	0
Fracción másica de LiBr de la mezcla en la entrada, $w_{\text{LiBr},in}$	0.602	0.530	0.600

- Medrano et al. [51]: $\text{Re}_{\text{mín}} \approx 40$
- Takamatsu et al. [52]: $\text{Re}_{\text{mín}} \approx 130$
- García-Rivera et al. [53]: Realizaron un análisis de la mojabilidad del tubo para diferentes fluidos [215]. Los resultados obtenidos se muestran en la Tabla 5.3.

Tabla 5.3: Fluido de trabajo, material del tubo y número de Reynolds mínimo reportado en el trabajo de García-Rivera et al. [53, 215].

Fluido de trabajo	Material	$\text{Re}_{\text{mín}}$
H ₂ O	Acero	730
LiBr – H ₂ O	Acero	82
H ₂ O	Cobre	217
LiBr – H ₂ O	Cobre	20

En cuanto al coeficiente de convección del agua de enfriamiento que circula por el interior del tubo interno, éste se relaciona con el número de Nusselt (Nu) [156] como:

$$\text{Nu} = \frac{hL_c}{k}, \quad (5.3)$$

donde k es la conductividad térmica del fluido y L_c la longitud característica, el cual en estos sistemas es el diámetro. Para el cálculo del número de Nusselt, es necesario estimar el número de Reynolds (Ecuación (5.4)) en las condiciones de cada ensayo, ya que, dependiendo del régimen de flujo, el método de cálculo varía.

$$\text{Re}_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{\rho v L_c}{\mu}. \quad (5.4)$$

Para el cálculo de Nusselt, se ha considerado la ecuación de Dittus-Boelter [216] (Ecuación (5.5)):

$$\text{Nu} = 0.023 \cdot \text{Re}^{0.8} \text{Pr}^n, \quad (5.5)$$

donde Pr es el número adimensional de Prandtl y n un exponente, el cual adquiere un valor de $n = 0.4$ para el calentamiento y $n = 0.3$ para el enfriamiento del fluido. En la Tabla 5.4 se muestra el número de Reynolds y el coeficiente de convección calculado para cada caso analizado en la comparación.

Tabla 5.4: Número de Reynolds y el correspondiente coeficiente de convección del agua de enfriamiento calculado para los trabajos experimentales de la bibliografía.

Autor / Variable	$\text{Re}_{\text{H}_2\text{O}}$	$h_{\text{H}_2\text{O}}$ ($\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$)
García-Rivera et al. [53]	10500	2557.9
Takamatsu et al. [52]	3200	1146
Medrano et al. [51]	15000	2714

5.2.4 Propiedades termofísicas

Las propiedades de los fluidos han sido calculadas en función de la temperatura y la fracción másica de LiBr. Tal y como ha sido utilizado, por ejemplo, en el trabajo de Hofmann y Kuhlmann [129], se han considerado las correlaciones de Patterson y Pérez Blanco [217] para la estimación de las propiedades de la solución LiBr – H₂O. Por ejemplo, la densidad se ha calculado por medio de la Ecuación (5.6):

$$\rho_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}(w, T) = \left(\sum_{i=0}^4 \sum_{j=0}^2 A_{ij} w^i T^j \right) \cdot 1000 \text{ (kg} \cdot \text{m}^{-3}\text{)}, \quad (5.6)$$

donde los valores de los coeficientes A se obtienen de las correlaciones [217]. En el Apéndice A se detallan todas las correlaciones empleadas, así como las ecuaciones de estimación de las otras propiedades termofísicas.

Mientras, el coeficiente de difusión másica ha sido evaluado por medio de la correlación empleada por Miller y Keyhani [218]:

$$D = D_0 e^{\left(\frac{1}{(T+273)} \left(\frac{E}{R}(w_f)\right)\right)}, \quad (5.7)$$

donde D_0 es el coeficiente de difusión en una disolución infinita, $D_0 = 7.1317 \cdot 10^{-8} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{)}$; T la temperatura promedio de la solución; y el coeficiente $\frac{E}{R}(X_f)$ se calcularía para cada fracción másica. La definición del cálculo de la difusión másica se ha especificado igualmente en el Apéndice A.

En cuanto al calor de absorción (h_{abs}) se ha estimado mediante la Ecuación (5.8):

$$h_{\text{abs}} = h_v - h_l, \quad (5.8)$$

donde h_v y h_l son las entalpías de vapor y líquido saturados, respectivamente. La entalpía del vapor de agua ha sido calculada mediante las tablas de Haar et al. [219], mientras la entalpía parcial del agua en la solución LiBr – H₂O ha sido evaluada con la expresión propuesta por Yuan y Herold [220].

La dependencia del calor de absorción con la temperatura para una fracción másica dada en el rango de trabajo del presente estudio es prácticamente lineal. Igualmente, para una misma temperatura, el calor de absorción evoluciona de forma cuadrática respecto a la fracción másica. Consecuentemente, se ha obtenido la Ecuación (5.9) para la estimación del calor de absorción h_{abs} en función de la temperatura y la fracción másica:

$$h_{\text{abs}} = A(w)T + B(w). \quad (5.9)$$

Aplicando el método de mínimos cuadrados, se han logrado los coeficientes de los polinomios de $A(w)$ y $B(w)$. El cálculo de estos coeficientes, junto con todo el procedimiento que se ha seguido para el cálculo de las propiedades termofísicas se detallan igualmente en el Apéndice A.

5.2.5 Ecuaciones gobernantes

De la misma forma que en el Capítulo 4, en esta tesis doctoral se ha utilizado el software Ansys Fluent basado en el método de FVM para resolver las ecuaciones gobernantes. En esta ocasión, las ecuaciones de continuidad, momento y energía han sido resueltas para la mezcla de líquido y vapor. La ecuación de conservación de masa es idéntica a la considerada en el Capítulo 3 (Ecuación (3.1a)).

En cuanto a la ecuación de energía (Ecuación (3.4)), se ha tenido en cuenta el calor generado en la absorción por medio del término de fuente de energía S_Q . En este caso, la difusión solamente ocurre en la fase líquida.

La fracción volumétrica de la fase ha sido estimada utilizando la ecuación basada en el método VOF (Ecuación (3.2)) detallado en el Capítulo 3, donde el efecto de la absorción de vapor en la fracción volumétrica (α) de la fase n se ha considerado por medio del término fuente (S_{α_n}).

Además, como uno de los objetivos del modelo es analizar la transferencia de masa en la solución líquida, se ha resuelto la ecuación de especies para múltiples fases (Ecuación (3.5)), en este caso para el bromuro de litio (Ecuación (5.10)), tal como

$$\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q w_{\text{LiBr}}) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \mathbf{v} w_{\text{LiBr}}) = -\nabla \cdot \alpha_q \mathbf{J}_{\text{LiBr}} + \alpha_q S_{\text{LiBr}}, \quad (5.10)$$

donde S_{LiBr} es la fuente de generación de la especie líquida y \mathbf{J}_{LiBr} el flujo de difusión de especies. Similarmente a la fracción volumétrica, la fracción másica también cumple que las dos fracciones másicas suman la unidad (Ecuación (5.11)).

$$w_{\text{LiBr}} + w_{\text{H}_2\text{O}} = 1. \quad (5.11)$$

En este caso solamente se ha considerado la transferencia de masa debido a la difusión másica. Por lo tanto, el flujo de difusión de especies, \mathbf{J}_{LiBr} , se estimará mediante la Ecuación (5.12):

$$\mathbf{J}_{\text{LiBr}} = -\rho_l D \nabla w_{\text{LiBr}}. \quad (5.12)$$

La interface se ha modelado por medio del algoritmo de tipo Sharp [202]. Los términos fuente asociados a la absorción, S_{α_n} (Ecuación (3.2)) y S_{LiBr} (Ecuación (5.10)), están relacionados con el flujo másico de absorción (\dot{m}_{abs}) y con la densidad de área interfacial (A_{if}) como [221]:

$$S_l = S_{\alpha_n} = \dot{m}_{\text{abs}} \cdot A_{\text{if}}. \quad (5.13)$$

En función de la metodología de estimación del flujo local absorbido y la modelización de la interface, estos términos fuente se determinan de manera diferente. El método de cálculo del flujo de absorción se detalla en la Sección 5.2.6, mientras la formulación para la estimación de la densidad de área interfacial se muestra en la Sección 5.2.8.

5.2.6 Estimación del flujo másico local de la interface

Tal y como se ha mencionado en la Sección 5.1, en la literatura, la transferencia de masa en la interface debido a la absorción de vapor de agua se cuantifica mediante dos diferentes leyes: Fick [118] y Higbie [142]. Además, el valor del flujo también depende de la hipótesis del tipo de difusión existente en la interface:

1. Difusión bidireccional (2D)
2. Difusión unidireccional (1D).

A continuación, se analizarán las diferencias entre estas cuatro variantes de estimación del flujo de masa absorbido.

Ley de Fick

En el caso de la ley de Fick, en la bibliografía se pueden encontrar trabajos que han utilizado tanto la difusión 2D, [29, 55, 93, 97, 102, 121, 123, 137, 151], como la 1D [40, 54, 60, 110, 120, 122, 124, 126, 127, 129, 134–136, 138–140, 153, 154] indistintamente. Por esta razón, en el presente trabajo se analizarán las diferencias entre ambas hipótesis. A continuación, se presentan las dos ecuaciones con las que se estimará el flujo de masa absorbido en la interface mediante la ley de Fick.

Difusión bidireccional (Fick 2D)

Como la ley de Fick asume que en una mezcla binaria la transferencia de masa de ambas especies son opuestas, en el caso de difusión bidireccional directamente se empleará la ley de Fick (Ecuación (1.14)) para la estimación del flujo local. Aplicándolo a la mezcla LiBr – H₂O:

$$\dot{m}_{\text{abs,Fick 2D}} = -\rho_l D \left[\frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_{\text{if}}, \quad (5.14)$$

donde $\left[\frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_{\text{if}}$ es la derivada de la fracción másica en la dirección normal a la interface. El procedimiento de cálculo de este gradiente se detalla en la Sección 5.2.8.

Difusión unidireccional (Fick 1D)

Al asumir difusión unidireccional en la interface, el balance de masas en la interface varía. La Figura 5.3 ilustra el elemento diferencial del líquido del *falling film*, en este caso, LiBr – H₂O.

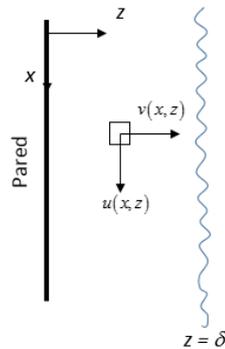


Figura 5.3: Elemento diferencial del *falling film*.

De manera similar al trabajo de Mittermaier et al. [136], aplicando el balance de masas en el eje z para la especie LiBr en la interface, se calcula:

$$\dot{m}_{\text{LiBr,if}}(x) = \dot{m}_{\text{LiBr}}(x, z = \delta(x)) = \rho_{l,\text{if}} v_{\text{if}} w_{\text{LiBr,if}} + \rho_{l,\text{if}} D_{\text{if}} \left. \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial z} \right|_{\text{if}}, \quad (5.15)$$

donde x es la dirección longitudinal; z , la dirección transversal; δ , el espesor del *film*; y v_{if} , la velocidad transversal del *film*.

Para la especie H₂O se calcularía de manera similar:

$$\dot{m}_{\text{H}_2\text{O,if}}(x) = \dot{m}_{\text{H}_2\text{O}}(x, z = \delta(x)) = \rho_{l,\text{if}} v_{\text{if}} w_{\text{H}_2\text{O,if}} + \rho_{l,\text{if}} D_{\text{if}} \left. \frac{\partial w_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial z} \right|_{\text{if}}. \quad (5.16)$$

Al asumir que la presión de vapor es despreciable (difusión 1D), se supone que no existe transferencia de masa entre el líquido y el gas de la especie LiBr. Por lo tanto, el flujo de masa absorbido quedaría:

$$\dot{m}_{\text{LiBr,if}} = 0 \Rightarrow \rho_{\text{l,if}} v_{\text{if}} = - \frac{\rho_{\text{l,if}} D_{\text{if}}}{w_{\text{LiBr,if}}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial z} \Big|_{\text{if}}. \quad (5.17)$$

Como es una solución binaria, la suma de las dos fracciones másicas tiene que ser 1 (Ecuación (5.11)), reordenando la Ecuación (5.17):

$$\rho_{\text{l,if}} v_{\text{if}} = - \frac{\rho_{\text{l,if}} D_{\text{if}}}{1 - w_{\text{H}_2\text{O,if}}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial z} \Big|_{\text{if}}, \quad (5.18)$$

y, en función de la fracción másica del agua ($w_{\text{H}_2\text{O}}$)

$$\rho_{\text{l,if}} v_{\text{if}} = \frac{\rho_{\text{l,if}} D_{\text{if}}}{1 - w_{\text{H}_2\text{O,if}}} \frac{\partial w_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial z} \Big|_{\text{if}}. \quad (5.19)$$

Combinando las Ecuaciones (5.16) y (5.19), se obtiene:

$$\dot{m}_{\text{H}_2\text{O,if}} = \frac{w_{\text{H}_2\text{O,if}}}{1 - w_{\text{H}_2\text{O,if}}} \rho_{\text{l,if}} D_{\text{if}} \frac{\partial w_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial z} \Big|_{\text{if}} + \rho_{\text{l,if}} D_{\text{if}} \frac{\partial w_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial z} \Big|_{\text{if}}. \quad (5.20)$$

Así, en estos casos, la ley de Fick es modificada por una expresión de difusión unidireccional (Fick 1D, Ecuación 5.21) [136]

$$\dot{m}_{\text{abs,Fick 1D}} = \frac{1}{1 - w_{\text{H}_2\text{O,if}}} \rho_{\text{l,if}} D_{\text{if}} \frac{\partial w_{\text{H}_2\text{O}}}{\partial z} \Big|_{\text{if}} = - \frac{1}{w_{\text{LiBr,if}}} \rho_{\text{l,if}} D_{\text{if}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial z} \Big|_{\text{if}}. \quad (5.21)$$

Ley de Higbie

En el caso de la ley de Higbie, la ecuación habitualmente utilizada en la literatura para el cálculo del flujo absorbido es la Ecuación 5.22 :

$$\dot{m}_{\text{abs,Higbie}} = 2\rho \sqrt{\frac{D u_{\text{máx}}}{\pi x}} \left(w_{\text{LiBr,if}}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty} \right), \quad (5.22)$$

siendo $w_{\text{LiBr,if}}^{\text{eq}}$ y $w_{\text{LiBr},\infty}$ la fracción másica de equilibrio y la fracción másica al lado de la pared, respectivamente.

Aunque algunos trabajos han aplicado la Ecuación 5.22 para la estimación del flujo local, tal y como se ha descrito en la Sección 1.4.2, esta expresión fue propuesta para calcular la difusión promedio de toda la interface (Ecuación (1.28)). Asimismo, en el desarrollo de esta ecuación se ha realizado una de las siguientes hipótesis:

1. Difusión de masa bidireccional (2D)

2. Difusión de masa unidireccional (1D) y la fracción másica del absorbente en la interface es despreciable. Por ejemplo, en el caso de la solución LiBr – H₂O, $w_{\text{H}_2\text{O},\text{if}} = 0$

No obstante, en los absorbedores de LiBr – H₂O, como por ejemplo los analizados en los trabajos de Gutiérrez-Urueta et al. [222] o Jeong y Garimella [34], el valor de la fracción másica de LiBr a la entrada está cerca del $w_{\text{LiBr}} = 0.5$. Por lo tanto, la segunda hipótesis no parece apropiada para su aplicación.

Con el fin de analizar la diferencia entre las hipótesis (1D y 2D), de la misma manera que con la ley de Fick, se considerarán dos diferentes ecuaciones para la estimación del flujo local. Sin embargo, en vez de utilizar la expresión del flujo promedio, se usará la ecuación del flujo de difusión local (Ecuación (1.23)) para ello.

Difusión bidireccional (Higbie 2D)

Al considerar difusión 2D, el flujo local de masa de vapor absorbido (Ecuación (5.23)) será igual al flujo local de difusión másica de la interface de la Ecuación (1.23), tal como:

$$\dot{m}_{\text{abs,Higbie,2D}} = J_{\text{if}} = \rho_{\text{l,if}} \sqrt{\frac{Dv_{\text{max}}}{\pi x}} \left(w_{\text{LiBr,if}}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty} \right). \quad (5.23)$$

Difusión unidireccional (Higbie 1D)

En el desarrollo de la Ecuación (1.23) de Higbie de la Sección 1.4.2, se ha supuesto que la difusión en la interface es bidireccional. No obstante, asumiendo difusión unidireccional, la Ecuación (1.22) obtendría la siguiente forma al combinarlo con la ley de Fick 1D (Ecuación (5.23)):

$$J_{\text{if}} = \frac{\rho_{\text{l,if}}}{w_{\text{LiBr}}} \sqrt{\frac{D}{\pi t}} e^{-\frac{z^2}{4Dt}} \left(w_{\text{LiBr,if}}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty} \right). \quad (5.24)$$

Así, continuando con el desarrollo definido en la Sección 1.4.2, el flujo de masa absorbido en la interface mediante la ley de Higbie asumiendo difusión 1D, resulta:

$$\dot{m}_{\text{abs,Higbie,1D}} = \frac{\rho_{\text{l,if}}}{w_{\text{LiBr,if}}} \sqrt{\frac{Dv_{\text{max}}}{\pi x}} \left(w_{\text{LiBr,if}}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty} \right). \quad (5.25)$$

5.2.7 Cálculo de las condiciones de equilibrio de la interface

Tanto para el cálculo del flujo absorbido mediante la ley de Fick (Ecuaciones (5.14) y (5.21)), como con la ley de Higbie (Ecuaciones (5.23) y (5.25)), es necesaria la estimación de las condiciones de equilibrio en la interface para determinar la fracción másica del soluto ($w_{\text{LiBr,if}}^{\text{eq}}$). Tal y como ha ocurrido con los diferentes métodos, en la bibliografía existen diferentes formas de determinar esta fracción másica.

Por una parte, mientras algunos autores han utilizado la ley de Henry [92, 96, 113, 121, 125, 144, 147, 223–225], otros han calculado las condiciones de

la interface utilizando la ley de presión parcial de Dalton [226], tales como [128, 227, 228]. Sin embargo, la mayor parte de los trabajos que se encuentran en la literatura consideran la hipótesis del equilibrio termodinámico para el cálculo de la fracción másica y temperatura de equilibrio. Esta hipótesis también es denominada como el equilibrio de la presión de vapor. En este caso se considera que una fase gaseosa y una solución líquida están en equilibrio cuando el potencial químico μ_l^* del líquido es igual al potencial químico del gas μ_g^* absorbido en la solución. (Ecuación (5.26)).

$$\mu_l^*(w, T, p) = \mu_g^*(T, p). \quad (5.26)$$

Basándose en esta relación, algunos trabajos han utilizado el método de Newton Raphson para el cálculo de la fracción másica de equilibrio en función de la temperatura [130–132, 135, 136, 151]. No obstante, la relación quasi-lineal entre la temperatura y la fracción másica de equilibrio, ha motivado que en la mayor parte de los trabajos hayan asumido una relación lineal [29, 39, 59, 60, 120, 129, 133, 137–140, 159, 160, 212, 229]. La expresión considerada para este fin se denomina como ecuación de Duhring.

Como se observa en la Ecuación (5.26), es necesario estimar los potenciales químicos de ambos fluidos para establecer la relación. El potencial químico del vapor de agua ha sido calculado utilizando las correlaciones de Ziegler y Trepp [230], mientras el potencial químico del agua en la solución binaria se ha estimado utilizando las correlaciones de Yuan y Herold [220].

En el presente trabajo de tesis doctoral, mediante el método de Newton-Raphson, se ha obtenido la relación entre la fracción másica y la temperatura y el ajuste se ha realizado mediante el método de mínimos cuadrados. Este desarrollo se detalla en el Apéndice B. La Figura 5.4 muestra los resultados de la función de equilibrio (línea sólida) y la función de equilibrio lineal (línea discontinua), a una presión de $p = 1$ kPa. La máxima diferencia entre ambas líneas en el rango de temperaturas de este trabajo de tesis doctoral ha sido del 0.36%. Por lo tanto, la evaluación de las condiciones de equilibrio de la interface se ha realizado por medio de esta función lineal.

5.2.8 Modelización de la interface

En todos los métodos de cálculo del flujo es necesaria la identificación de la interface. Para su identificación, en la bibliografía existen dos formas:

1. Considerar la interface en una única celda: En este caso la interface en la dirección transversal está constituida por una sola celda y, tanto la absorción, como el calor generado se introducen en una sola celda. Este método se ha utilizado sobre todo en los modelos adimensionales monofásicos que han considerado el dominio líquido.
2. Considerar la interface en más de una celda: La interface la conforman varias celdas (siempre y cuando cumpla con la condición $0 < \alpha < 1$) y la absorción es evaluada en todas estas celdas. Este método se ha utilizado

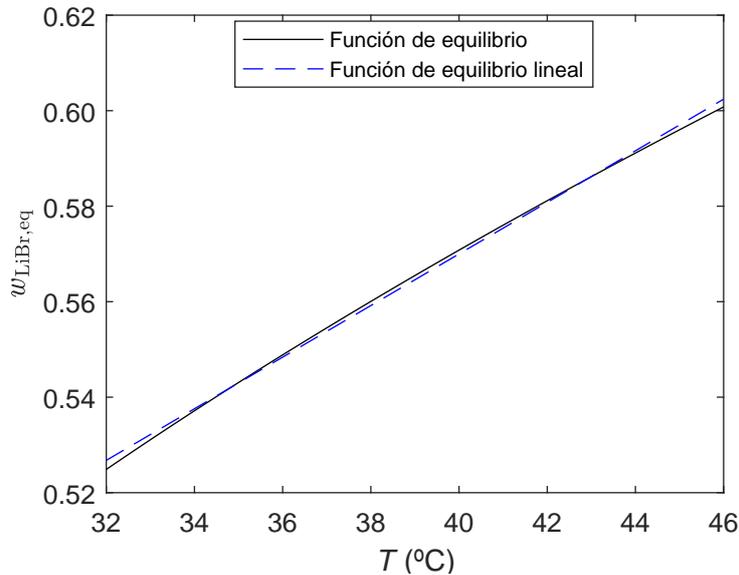


Figura 5.4: Función de equilibrio y función de equilibrio lineal de la mezcla LiBr – H₂O para $p = 1$ kPa.

en los modelos multifásicos VOF, donde el dominio del vapor ha sido igualmente considerado.

En función de la forma de modelizar esta interface, el procedimiento para la consideración de la absorción también varía. A continuación, se detallarán las diferencias entre ambos métodos.

Interface de una sola celda

En la literatura, este método se ha utilizado cuando la interface coincide con la condición de contorno exterior. Por consiguiente, en estos casos la fase de vapor no ha sido considerada. La Figura 5.5 presenta el esquema de modelización de la interface en estos modelos monofásicos, donde la interface coincide con la cara exterior de la parte derecha, tal y como se recoge, por ejemplo, en los siguientes trabajos: [129, 135, 160].

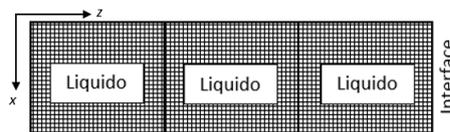


Figura 5.5: Modelización de la interface mediante una sola celda utilizada en modelos monofásicos.

Con el objetivo de analizar y comparar los resultados con los trabajos de la bibliografía, uno de los métodos empleados ha sido modelizar la interface mediante una celda. Como en el presente estudio se va a trabajar con modelos multifásicos, cuando la interface es de una sola celda se considerará que ésta

coincide con la celda que pasa por la isolínea de $\alpha = 0.5$. En el caso de la Figura 5.6, las mayúsculas representan los centroides de las celdas, mientras las minúsculas corresponden a los centroides de las caras. En este caso, la interface la conformaría la celda P .

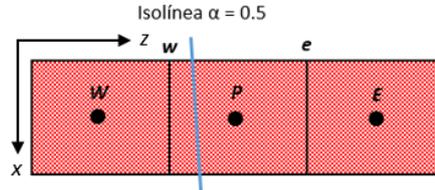


Figura 5.6: Esquema de la modelización de la interface en una sola celda utilizada en el presente estudio.

En los estudios donde la interface ha sido conformada por una sola celda, la absorción se ha considerado mediante dos diferentes procedimientos:

1. Imponiendo las condiciones de equilibrio: En este caso, como en el presente estudio se consideran tanto la fase líquida, como de vapor, la interface no coincide con el contorno exterior. Por esta razón, se ha empleado el método llamado "*internal boundary condition*" propuesto por S.V. Patankar [231] para imponer las condiciones de equilibrio termodinámico en la interface usando el concepto de la linealización de los términos fuente.
2. Sin imponer las condiciones de equilibrio: En esta ocasión, la absorción es considerada por medio de los términos fuente en las ecuaciones de transporte (Ecuaciones (5.10), (3.2) y (3.4)) dependientes del flujo de masa absorbido calculado.

En general, los términos fuente (S_ϕ) se pueden expresar en base a la variable dependiente ϕ como

$$S_\phi = S_c + S_p\phi, \quad (5.27)$$

donde S_c es el término explícito y $S_p\phi$ la parte implícita, siendo $S_p \leq 0$. De acuerdo con S.V. Patankar [231], se puede obtener un valor deseado de la variable (ϕ_{deseado}) ajustando los valores de S_c y S_p como

$$S_c = 10^{30}, \quad (5.28a)$$

$$S_p = -10^{30}. \quad (5.28b)$$

En ambas ecuaciones, 10^{30} representa un valor alto para convertir los demás insignificantes en las ecuaciones de transporte, cuya consecuencia es que

$$S_c + S_p\phi \approx 0, \quad (5.29a)$$

$$\phi = -\frac{S_c}{S_p} = \phi_{\text{deseado}}. \quad (5.29b)$$

Tal y como se ha mencionado en la Sección 5, algunos autores han impuesto la temperatura de equilibrio en la interface, mientras otros han usado la fracción

másica de equilibrio. En consecuencia, la manera de calcular difiere en ambos casos. Cabe destacar que todos ellos han usado la ley de Fick, asumiendo difusión 1D o 2D. Como no se han encontrado en la literatura metodologías que imponen las condiciones de equilibrio usando la ley de Higbie, en el presente trabajo de tesis doctoral este último método no ha sido considerado.

Por un lado, cuando se asume la temperatura de equilibrio en la interface, ésta se determina por medio de la ecuación de Duhring. Por lo tanto, usando la nomenclatura de la Figura 5.6, la temperatura impuesta en la interface se especifica como

$$T_P = T_{eq}(p, w_P), \quad (5.30)$$

donde, T_P es la temperatura de la interface, y T_{eq} la temperatura de equilibrio a la presión p y fracción másica w_P . La fracción másica en la interface se determina acoplando el balance de energía:

$$k \left(\frac{dT}{dn} \right)_{if} = \dot{m}_{abs} h_{abs}(T_{eq}(p, w_P), w_P). \quad (5.31)$$

Sin embargo, dependiendo de la hipótesis de la difusión, la expresión de la masa absorbida es diferente y, por consiguiente, la fracción másica. Asumiendo difusión 2D, la fracción másica en la interface ($w_{LiBr,P,Fick2D}$) se calcula usando la Ecuación 5.32

$$k \frac{T_{eq}(p, w_P) - T_W}{\Delta z_{P,W}} = -\rho_l D_{if} \frac{w_{LiBr,P,Fick2D} - w_{LiBr,W}}{\Delta z_{P,W}} h_{abs}(T_{eq}(p, w_P), w_P). \quad (5.32)$$

Alternativamente, considerando difusión 1D en la interface, se emplea la Ecuación (5.33)

$$k \frac{T_{eq}(p, w_P) - T_W}{\Delta z_{P,W}} = -\frac{\rho_l D_{if}}{w_{LiBr,P,Fick1D}} \frac{w_{LiBr,P,Fick1D} - w_{LiBr,W}}{\Delta z_{P,W}} h_{abs}(T_{eq}(p, w_P), w_P). \quad (5.33)$$

Por otro lado, cuando se impone la fracción másica, ésta se estima en base a la presión y la temperatura de la interface

$$w_{LiBr,P} = w_{LiBr,eq}(p, T_P). \quad (5.34)$$

Como en el caso anterior, se han desarrollado dos expresiones diferentes para evaluar los valores de la temperatura para la difusión 2D ($T_{P,Fick2D}$, Ecuación (5.35a)), así como para difusión 1D ($T_{P,Fick1D}$, Ecuación (5.35b))

$$k \frac{T_{P,Fick2D} - T_W}{\Delta z_{P,W}} = -\rho_l D_{if} \frac{w_{LiBr,eq}(p, T_P) - w_{LiBr,W}}{\Delta z_{P,W}} h_{abs}(T_{eq}(p, w_P), w_P) \quad (5.35a)$$

$$k \frac{T_{P,Fick1D} - T_W}{\Delta z_{P,W}} = -\frac{\rho_l D_{if}}{w_{LiBr,eq}} \frac{w_{LiBr,eq}(p, T_P) - w_{LiBr,W}}{\Delta z_{P,W}} h_{abs}(T_{eq}(p, w_P), w_P) \quad (5.35b)$$

Así, dependiendo de la hipótesis de difusión escogida, la ley usada para la determinación del ratio de absorción y la variable de equilibrio seleccionada, las propiedades de la interface se pueden calcular con cuatro ecuaciones diferentes (Ecuaciones (5.32), (5.33), (5.35a) y (5.35b)). Estas fracciones másicas y temperaturas calculadas han sido establecidas como variables deseadas (ϕ_{deseado} , Ecuación (5.29b)) para determinar los términos fuente de las ecuaciones de energía (Ecuación (3.4)) y especies (Ecuación (5.10)).

En el caso de no imponer la fracción másica, los términos fuente dependen del flujo local de masa de vapor absorbido. En el caso de modelizar la interface con una sola celda, el flujo de masa absorbido de la interface será igual al valor del flujo del centroide de la celda P , por el cual pasa la isolínea de $\alpha = 0.5$, $\dot{m}_{\text{abs,if}} = \dot{m}_{\text{abs},P}$ (ver Figura 5.6). Ésta se calcula en función del método de estimación del flujo de masa de vapor absorbido seleccionado (Sección 5.2.6). Por lo tanto, en este caso se aplican las siguientes 4 ecuaciones:

$$\dot{m}_{\text{abs},P,\text{Fick2D}} = -\rho_1 D \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\rho_1 D \frac{(w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},W})}{\Delta z_{P,W}}, \quad (5.36a)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},P,\text{Higbie2D}} = \rho_1 \sqrt{\frac{Du_P}{\pi x_P}} (w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}), \quad (5.36b)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},P,\text{Fick1D}} = -\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \frac{(w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},W})}{\Delta z_{P,W}}, \quad (5.36c)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},P,\text{Higbie1D}} = \frac{\rho_1}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \sqrt{\frac{Du_P}{\pi x_P}} (w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}). \quad (5.36d)$$

Por ejemplo, en el caso de Fick 1D, si en vez de las Ecuaciones (5.36c) y (5.36d) se presentaran los valores de la isolínea $\alpha = 0.5$, y éstas se obtuvieran mediante la interpolación entre los nodos de las caras, el valor de los centroides de las caras w y e de la Figura 5.6 se estimaría con las Ecuaciones (5.37) y (5.38), respectivamente:

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\text{abs},w,\text{Fick1D}} &= \dot{m}_{\text{abs},W} + \frac{\partial \dot{m}_{\text{abs}}}{\partial WP} \Delta z_{w,P} = 0 + \frac{\left[-\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_P - 0}{\Delta z_{W,P}} \Delta z_{w,P} \\ &= -\frac{1}{2} \left[\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_P, \end{aligned} \quad (5.37)$$

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\text{abs},e,\text{Fick1D}} &= \dot{m}_{\text{abs},P} + \frac{\partial \dot{m}_{\text{abs}}}{\partial \Delta z_{P,E}} \Delta z_{P,e} \\ &= \left[\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_P + \frac{0 - \left[\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_P}{\Delta z_{P,E}} \Delta z_{P,e} \quad (5.38) \\ &= -\frac{1}{2} \left[\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr},\alpha=0.5}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_P. \end{aligned}$$

Realizando la interpolación para la isolínea $\alpha = 0.5$:

$$\begin{aligned} \dot{m}_{\text{abs},\alpha=0.5,\text{Fick1D}} &= \dot{m}_{\text{abs},w} + \frac{\partial \dot{m}_{\text{abs}}}{\partial w, \alpha = 0.5} \Delta z_{w,\alpha=0.5} = \frac{1}{2} \left[-\frac{\rho_l D}{w_{\text{LiBr}}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_P + 0 \\ &= -\frac{1}{2} \left[\frac{\rho_l D}{w_{\text{LiBr}}} \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_P. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Por lo tanto, comparando los valores de la Ecuación (5.39) con la Ecuación (5.36c), la diferencia al presentar los valores de la isolínea es de un 50 % respecto a los valores de la celda. Por esta razón, en el presente trabajo de tesis doctoral, cuando la interface se modela con una sola celda, el valor del flujo de vapor absorbido se estimará interpolando entre los valores de los centroides de las celdas (Ecuaciones (5.36a)-(5.36d))

El siguiente paso ha sido adaptar el flujo másico a las ecuaciones de transporte. Así, los términos fuente de las Ecuaciones de especies (S_{LiBr} , Ecuación (5.10)) y VOF (S_{α_n} , Ecuación (3.2)) es igual al producto del flujo de masa absorbido (\dot{m}_{abs}) multiplicado por la densidad de área interfacial (A_{if}) [221]:

$$S_{\text{LiBr}} = S_{\alpha_n} = \dot{m}_{\text{abs}} A_{\text{if}}. \quad (5.40)$$

Tal y como se realiza en algunos modelos, cuando la interface se modela con una sola celda, la densidad de área interfacial se calcula directamente con la Ecuación (5.41) [232, 233]:

$$A_{\text{if}} = \frac{|\mathbf{A}|}{V}, \quad (5.41)$$

donde \mathbf{A} es el vector normal a la interface del área de la celda, y V el volumen de la celda. Este método es el que se ha empleado cuando la interface se ha modelizado con una sola celda.

Una vez conocidos los términos fuente relacionados con la masa de vapor absorbidos, la fuente volumétrica de calor, S_Q , se calcula usando el calor de absorción:

$$S_Q = S_{\text{LiBr}} H_{\text{abs}}. \quad (5.42)$$

Resumiendo, cuando las condiciones de equilibrio no fueron impuestas en la interfaz, los términos fuente han sido considerados en función del flujo de masa absorbido. Dependiendo de la hipótesis y la ley de difusión elegidas, se han empleado cuatro ecuaciones diferentes para calcular este flujo absorbido (Ecuaciones (5.22)-(5.25)). Por el contrario, cuando se impone el equilibrio, se utiliza la Ecuación (5.29) para determinar el término fuente de energía y especies, el cual depende de la variable deseada (ϕ_{deseado} , Ecuación (5.29b)) calculada utilizando las condiciones de equilibrio. En este método, también se han utilizado cuatro expresiones diferentes (Ecuaciones (5.32), (5.33), (5.35a) y (5.35b)) para calcular los valores deseados, dependiendo de la metodología e hipótesis adoptadas.

Interface en varias celdas

Como se ha explicado en la Sección 5.2.8, en el caso de considerar más de una celda, en el presente trabajo se ha utilizado el método VOF [168]. En esta opción la interface está formada por celdas que contienen ambas fases: líquido y vapor. La cantidad de cada fase depende de la fracción volumétrica (α). La interface la componen las celdas cuyo valor de la fracción volumétrica es $0 < \alpha < 1$.

La Figura 5.7 muestra el esquema de la modelización de la interface mediante varias celdas. En este caso, la interface estaría constituida por las celdas W , P y E . Las propiedades de la interface se calculan interpolando para la isolínea $\alpha = 0.5$. El número de celdas de la interface depende del tratamiento de interpolación de la interface: agudo (*Sharp*) o difuso [202]. Esta técnica ha sido utilizada por numerosos autores en la literatura, tales como [62, 103, 132].

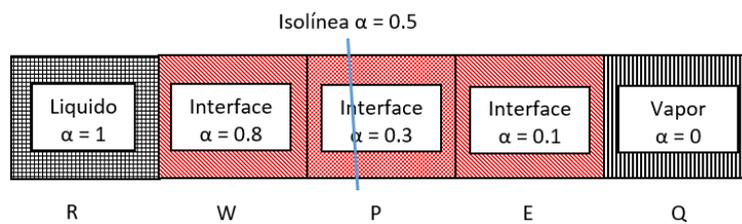


Figura 5.7: Esquema de la modelización de la interface en varias celdas empleada en el presente estudio.

En este caso no se podrían imponer las condiciones de equilibrio en la interface, ya que si no, las tres celdas que conforman la interface (W , P y E) tendrían la fracción másica de equilibrio. Esto conllevaría a que el gradiente de fracción másica/temperatura para la isolínea $\alpha = 0.5$ fuera muy pequeño. Por lo tanto, cuando la interface es conformada por varias celdas, se utilizará el método sin imponer anteriormente descrita. No obstante, a diferencia del caso de 1 celda, en este caso los términos fuente se aplicarán en las celdas W , P y E (Figura 5.7). El flujo de masa local absorbido de la Ecuación (5.41), se calculará en función de la metodología empleada: Ecuaciones (5.43a)-(5.43f) en el caso difusión 2D, y Ecuaciones (5.44a)-(5.44f) cuando se considera difusión 1D:

$$\dot{m}_{\text{abs},W,\text{Fick}2\text{D}} = -\rho_l D \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\rho_l D \frac{(w_{\text{LiBr},R} - w_{\text{LiBr},W}^{\text{eq}})}{\Delta z_{W,R}} \quad (5.43a)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},P,\text{Fick}2\text{D}} = -\rho_l D \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\rho_l D \frac{(w_{\text{LiBr},W} - w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}})}{\Delta z_{W,P}} \quad (5.43b)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},E,\text{Fick}2\text{D}} = -\rho_l D \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\rho_l D \frac{(w_{\text{LiBr},P} - w_{\text{LiBr},E}^{\text{eq}})}{\Delta z_{P,E}} \quad (5.43c)$$

$$m_{\text{abs},W,\text{Higbie},2\text{D}} = \rho_l \sqrt{\frac{Du_W}{\pi x_W}} (w_{\text{LiBr},W}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}) \quad (5.43d)$$

$$m_{\text{abs},P,\text{Higbie},2\text{D}} = \rho_l \sqrt{\frac{Du_P}{\pi x_P}} (w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}) \quad (5.43e)$$

$$m_{\text{abs},E,\text{Higbie},2\text{D}} = \rho_l \sqrt{\frac{Du_E}{\pi x_E}} (w_{\text{LiBr},E}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}) \quad (5.43f)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},W,\text{Fick}1\text{D}} = -\rho_l D \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\frac{\rho_l D}{w_{\text{LiBr},W}^{\text{eq}}} \frac{(w_{\text{LiBr},R} - w_{\text{LiBr},W}^{\text{eq}})}{\Delta z_{W,R}} \quad (5.44a)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},P,\text{Fick}1\text{D}} = -\rho_l D \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\frac{\rho_l D}{w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}}} \frac{(w_{\text{LiBr},W} - w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}})}{\Delta z_{W,P}} \quad (5.44b)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},E,\text{Fick}1\text{D}} = -\rho_l D \frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} = -\frac{\rho_l D}{w_{\text{LiBr},E}^{\text{eq}}} \frac{(w_{\text{LiBr},P} - w_{\text{LiBr},E}^{\text{eq}})}{\Delta z_{P,E}} \quad (5.44c)$$

$$m_{\text{abs},W,\text{Higbie},1\text{D}} = \frac{\rho_l}{w_{\text{LiBr},W}^{\text{eq}}} \sqrt{\frac{Du_W}{\pi x_W}} (w_{\text{LiBr},W}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}) \quad (5.44d)$$

$$m_{\text{abs},P,\text{Higbie},1\text{D}} = \frac{\rho_l}{w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}}} \sqrt{\frac{Du_P}{\pi x_P}} (w_{\text{LiBr},P}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}) \quad (5.44e)$$

$$m_{\text{abs},E,\text{Higbie},1\text{D}} = \frac{\rho_l}{w_{\text{LiBr},E}^{\text{eq}}} \sqrt{\frac{Du_E}{\pi x_E}} (w_{\text{LiBr},E}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty}) \quad (5.44f)$$

En esta ocasión, estas expresiones tienen que ser igualmente adaptadas a las ecuaciones de transporte, para el cual se ha utilizado la densidad de área interfacial. No obstante, al modelizar con más de una celda, como el volumen de la celda está compuesto por dos fases, muchos estudios han realizado el cálculo por medio de la fracción volumétrica de cada fase [96, 113, 130, 132, 182, 234–238], tal y como se describe en la Ecuación (5.45):

$$A_{\text{if}} = |\nabla \alpha|. \quad (5.45)$$

Algunos autores han realizado comparaciones de diferentes métodos de estimación de la densidad de área interfacial para flujos multifásicos. Höhne et al. [234] y Bach et al. [113], además de la Ecuación (5.45), aplicaron la siguiente

Ecuación (5.46) en procesos de absorción de gotas:

$$A_{if} = \frac{6\alpha}{d_{gota}}, \quad (5.46)$$

donde d_{gota} es el diámetro de la gota.

Por su parte, Boltès et al. [239] realizaron una pequeña adaptación en su modelo aplicado a emulsiones aceite-agua:

$$A_{if} = \frac{6\alpha}{d_{gota}(1-\alpha)}. \quad (5.47)$$

Originalmente, Soh et al. [221] compararon diferentes métodos de cálculo de la densidad de área interfacial, junto con el algoritmo que propusieron, con los resultados experimentales de Chaoqun et al. [240]. Concluyeron que, por detrás del algoritmo propuesto, la Ecuación (5.45) era el que mejores resultados ofrecía para la estimación de la transferencia de masa.

Por esta razón, cuando la interface se modeliza con varias celdas, en el presente trabajo de tesis doctoral se utilizará la Ecuación (5.45) para la estimación de la densidad de área interfacial. Por ejemplo, en el caso de la Figura 5.7, la densidad de área interfacial se calcularía de la siguiente forma:

$$A_{if,W} = |\nabla\alpha_W|, \quad (5.48a)$$

$$A_{if,P} = |\nabla\alpha_P|, \quad (5.48b)$$

$$A_{if,E} = |\nabla\alpha_E|. \quad (5.48c)$$

5.2.9 Discretización

Por último, se detallan los métodos de discretización empleados en el modelo:

- Algoritmo de resolución de ecuaciones: SIMPLE
- Discretización espacial:
 - Evaluación de gradientes: Green-Gauss cell based
 - Momento: Upwind de segundo orden
 - Fracción volumétrica: Compressive
 - Energía: Upwind de segundo orden
 - Especies: Upwind de segundo orden

5.3 Resultados y discusión

En la Sección 5.3, primero se analizará la independencia de malla de los modelos para los diferentes métodos utilizados. A continuación, se compararán los resultados con varios modelos de la bibliografía. Después, en la Sección 5.3.3 se evaluará la diferencia entre las diferentes metodologías de considerar y estimar el calor de absorción, así como las formas de modelar la interface. Una vez escogida

la metodología, en la Sección 5.3.4 se estudiará la influencia de diferentes condiciones de operación. Por último, en la Sección 5.3.5 se compararán los resultados de la metodología numérica propuesta con varios ensayos experimentales de la bibliografía.

5.3.1 Independencia de malla

En primer lugar, se ha analizado la independencia de malla de los modelos numéricos para los diferentes métodos descritos para considerar la absorción. Para realizar este análisis, las condiciones de trabajo seleccionadas se enumeran en la Tabla 5.5:

Tabla 5.5: Condiciones de trabajo utilizadas en el análisis de la independencia de malla.

Condición	Valor
Presión de trabajo, p (kPa)	1.3
Diámetro exterior del tubo interno, d_{ext} (mm)	22.10
Longitud efectiva, x (mm)	1500
Coefficiente de convección del agua de enfriamiento, h_{H_2O} ($W\ m^{-2}\ K^{-1}$)	6000
Temperatura del agua de enfriamiento, T_{H_2O} ($^{\circ}C$)	35
Número de Reynolds de la solución, Re_{LiBr-H_2O}	50,290
Subenfriamiento, $\Delta T = T_{eq} - T_{in}$ ($^{\circ}C$)	0
Fracción másica de LiBr de la mezcla en la entrada, $w_{LiBr,in}$	0.6

Tal y como se ha reflejado en la Tabla 5.5, el análisis se ha realizado para dos diferentes números de Reynolds de la solución: $Re = 50$ y $Re = 290$. Esto se debe a la diferencia en el desarrollo de la capa límite y el espesor del *film*. En el caso de $Re = 50$, como el espesor de *film* es más pequeño (Ecuación de Nusselt (1.6)), el desarrollo de la capa límite térmica e hidrodinámica en la entrada del absorbedor se logra en una distancia longitudinal menor, por lo que el mallado del modelo tiene que ser capaz de captar bien este desarrollo. Por el contrario, en el caso de $Re = 290$, el espesor del *film* es mayor (Ecuación de Nusselt (1.6)) y, consecuentemente, el número de elementos necesarios en el *film* para la correcta modelización de la difusión másica puede ser diferente.

Asimismo, la interface se ha modelizado con una sola celda (Sección 5.2.8) y se han considerado que las propiedades termofísicas son constantes. Concretamente, se ha comparado la influencia que tienen las siguientes variables en la absorción:

1. Número de mallas del *film* líquido a en la dirección transversal z : $25 \leq N_{transversal} \leq 200$
2. Número de elementos en la dirección longitudinal x : $500 \leq N_{longitudinal} \leq 10000$

El análisis se reorganizará en base a dos diferentes metodologías de cálculo e introducción del flujo másico de absorción, que son Fick 1D y Higbie 1D, ambas descritas en la Sección 5.2.6. En el caso de Fick 1D, se estudiarán las dos formas

de considerar la absorción: imponiendo las condiciones de equilibrio (en este caso la fracción másica) en la interface y sin imponer (Sección 5.2.8). Como en el presente trabajo de tesis doctoral no se ha impuesto la fracción másica en la interface con el método Higbie, el análisis de la independencia de malla de este método se ha realizado solamente en el caso de no imponer la fracción másica. A continuación, se analiza la independencia de ambas metodologías.

Fick 1D

En primer lugar, se ha analizado la influencia que tiene el tamaño de malla en el método Fick unidireccional imponiendo la fracción másica. La Figura 5.8 muestra la diferencia en la absorción de vapor para diferentes mallas ($N_{\text{transversal}} \times N_{\text{longitudinal}}$) cuando $Re = 290$. La Figura 5.8a muestra el flujo de masa de vapor local absorbido (eje vertical) a lo largo de la dirección longitudinal (x) del tubo (eje horizontal) para diferentes mallas ($N_{\text{transversal}} \times N_{\text{longitudinal}}$). Para ello, se ha mantenido el número de mallas en la dirección longitudinal en 3000 celdas, mientras que se ha modificado el número de mallas del *film* en la dirección z : 50, 75, 100, 150 y 200 celdas. Para realizar una comparación cuantitativa entre ellas, la Figura 5.8b ilustra la diferencia (%) en el flujo de absorción promedio de la respectiva malla, respecto a la malla más densa (200 × 3000). Los resultados de la

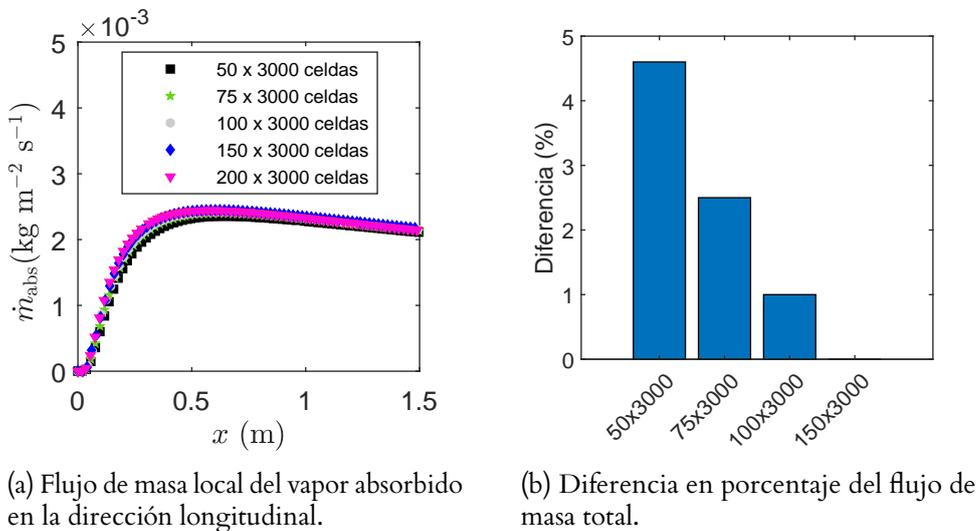
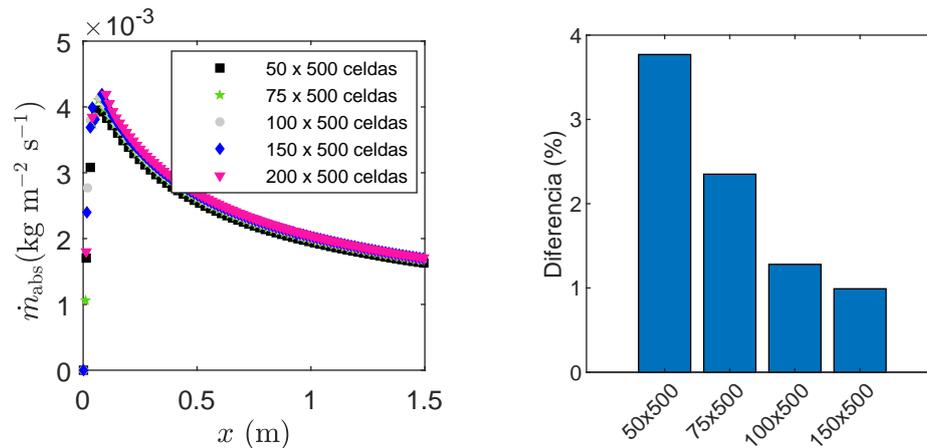


Figura 5.8: Efecto de malla en la dirección transversal para $Re = 290$ empleando el método Fick 1D imponiendo la fracción másica sobre:

Figura 5.8a muestran que el flujo de absorción aumenta en las zonas cercanas a la entrada del absorbedor, mientras que comienza a decrecer a partir de $x \approx 0.5$ m. Aunque los resultados son muy similares, la velocidad de crecimiento inicial es mayor cuanto más fina es la malla. En la fase de decrecimiento esta similitud es mayor. Así, a raíz de que la diferencia es menor que el 1% (Figura 5.8b), se considera que el modelo es independiente cuando $N_{\text{transversal}} = 100$.

Este análisis se ha extendido al número de Reynolds mínimo. La Figura 5.9 ilustra un análisis idéntico a la Figura 5.8, pero en este caso cuando $Re = 50$.



(a) Flujo de masa local del vapor absorbido en la dirección longitudinal. (b) Diferencia en porcentaje del flujo de masa total.

Figura 5.9: Efecto de malla en la dirección transversal para $Re = 50$ empleando el método Fick 1D imponiendo la fracción másica sobre:

Cuando $Re = 50$ (Figura 5.9a), la pendiente de crecimiento inicial y el pico máximo del flujo de masa local son mayores que en $Re = 290$ (Figura 5.8a). Ambos son mayores cuanto mayor es la malla, aunque las diferencias no son muy elevadas. Sin embargo, el descenso del flujo a partir del pico máximo es mayor en comparación con $Re = 290$. Además, para $Re = 50$, la cantidad de mallas necesaria en la dirección transversal para lograr la independencia es mayor que para $Re = 290$, concretamente $N_{transversal} = 150$ (Figura 5.9b).

Una vez fijado el tamaño necesario de la celda en la dirección transversal en cada flujo, se ha realizado el estudio en la dirección longitudinal. La Figura 5.10 muestra el flujo de masa absorbido a lo largo de la longitud del tubo para diferentes números de Reynolds: $Re = 290$ (Figura 5.10a) y $Re = 50$ (Figura 5.10b). En cada caso, se ha mantenido constante el número de mallas en la dirección transversal determinado en el análisis anterior.

En los dos casos se observa que el número de mallas no influye prácticamente en la absorción. Concretamente, la diferencia en ambos casos está por debajo del 0.25 %.

Finalizado este análisis, también se verifica que la malla definida es válida para el caso de Fick 1D sin imponer la fracción másica. Como se puede observar en la Figura 5.11, una malla de 100×500 proporciona resultados independientes.

Higbie 1D

Por otro lado, también se ha estudiado la independencia de la malla al considerar el método de Higbie 1D sin imponer la fracción másica, debido a que el tamaño mínimo de elemento necesario no tiene por qué ser el mismo para los diferentes métodos. La Figura 5.12 presenta el flujo de masa local en la dirección longitudinal para diferentes mallas cuando: $Re = 290$ (Figura 5.12a) y $Re = 250$ (Figura 5.12b).

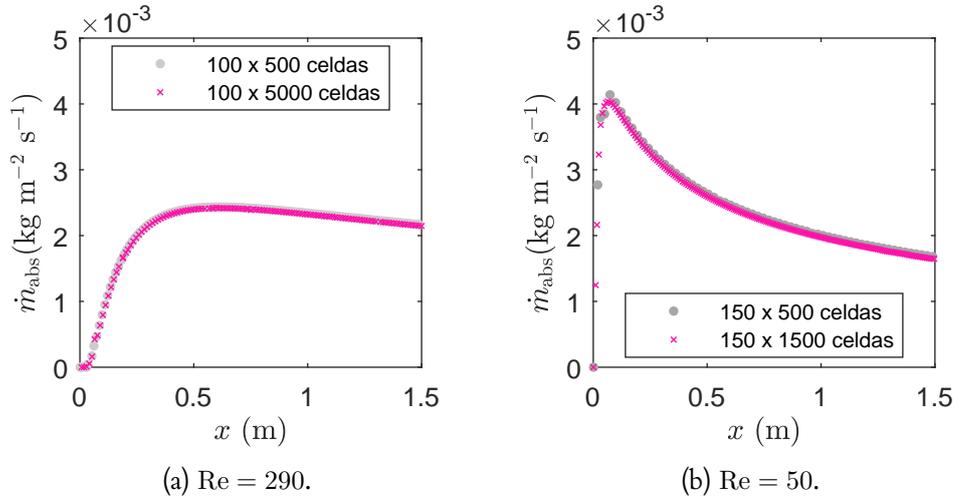


Figura 5.10: Flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal empleando el método Fick 1D imponiendo la fracción másica para diferentes número de celdas en la dirección longitudinal.

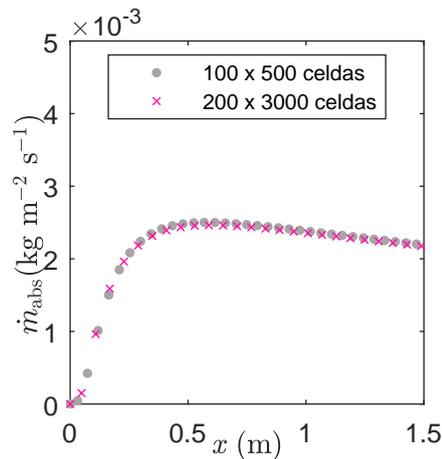


Figura 5.11: Flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal para diferentes mallas empleando el método Fick 1D sin imponer para $Re = 290$.

Los resultados de la Figura 5.12 demuestran que la malla no tiene influencia dentro del rango estudiado cuando se emplea el método de Higbie unidireccional sin imponer la fracción másica.

En la Tabla 5.6 se resume el número mínimo de las celdas en la dirección transversal y longitudinal, a partir del cual el efecto de la malla será despreciable en los cálculos numéricos para los dos modelos (Fick 1D y Higbie 1D), para diferentes números de Reynolds:

En resumen, en la Sección 5.3.1 se ha determinado que se requiere una densidad de malla mayor cuando el flujo de masa absorbido es calculado con la ley de Fick. Asimismo, en este caso los resultados demuestran que el mallado es dependiente del número de Reynolds. Cuanto menor Reynolds, el número de celdas necesario en la dirección transversal del *film* es mayor. Sin embargo, en la dirección longitudinal el número de celdas necesario no es tan condicionante.

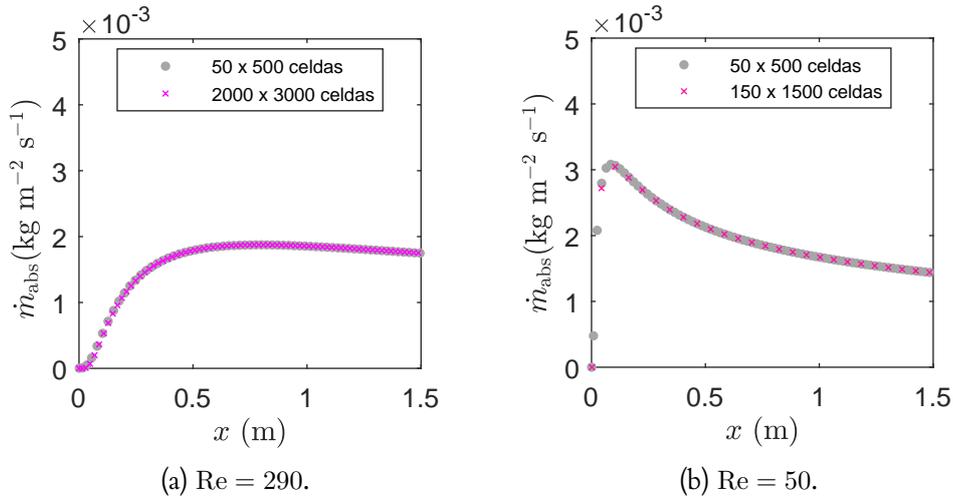


Figura 5.12: Flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal para diferentes número de celdas empleando el método de Higbie 1D.

Tabla 5.6: Requerimientos de número de malla para los métodos y Re estudiados.

	Fick 1D		Higbie 1D	
	Transversal	Longitudinal	Transversal	Longitudinal
Re = 50	150	500	50	500
Re = 290	100	500	50	500

Esto se debe a que, al ser los gradientes de las diferentes variables (velocidad, temperatura, fracción másica,...) menores en esta dirección, 500 celdas han resultado suficientes para analizar correctamente el fenómeno.

Conjuntamente, este estudio ha ilustrado que cuando se usa el método de Higbie unidireccional, como no es necesaria la captura del gradiente de fracción másica en la interface, los requerimientos de malla son menores. Esta propiedad puede ser interesante en los análisis de sistemas mayores, ya que las necesidades de computación disminuyen considerablemente.

Frente a la evidencia recabada, se ha optado por utilizar para el rango de Reynolds analizado dos mallas diferentes para cada método con el fin de minimizar el coste computacional, los cuales han sido los siguientes:

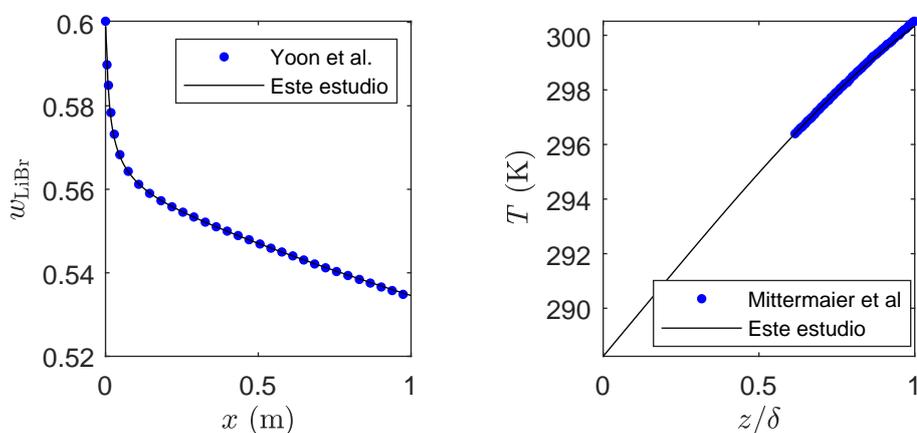
- Fick: 150 × 500 celdas.
- Higbie: 50 × 500 celdas.

5.3.2 Comparación con los modelos de la bibliografía

Tal y como se ha explicado en la Sección 5.2.3, una vez seleccionada la malla computacional, y con el fin de validar el modelo, se han comparado los resultados obtenidos en esta tesis doctoral con los resultados de Yoon et al. [29] y

Mittermaier et al. [102]. Las condiciones de operación se han presentado en la Tabla 5.1. Ambos trabajos asumieron difusión 2D en la interface y determinaron el flujo de masa absorbido mediante la Ley de Fick imponiendo las condiciones de equilibrio en la interface. Sin embargo, mientras Yoon et al. [29] impusieron la fracción másica de equilibrio, Mittermaier et al. [102] impusieron la temperatura de equilibrio. Por esta razón, la comparación con los primeros se ha realizado en base a la fracción másica de la interface. Por el contrario, con Mittermaier et al. [102] se ha verificado en base a la temperatura. No obstante, éstos mostraron solamente resultados de los perfiles de temperatura de la interface para condiciones de subenfriamiento, no para condiciones de saturación. En cambio, presentaron perfiles de temperatura en la dirección transversal para condiciones de entrada de saturadas. Como en el presente trabajo de tesis doctoral el estudio se ha realizado en condiciones de saturación, la comparación se ha efectuado en base al perfil de temperaturas transversal.

Con este propósito, la Figura 5.13a muestra a modo de comparación los resultados del flujo local de masa de vapor absorbido a lo largo de la dirección longitudinal obtenidos con los modelos numéricos de este estudio y los de obtenidos por Yoon et al. [29]. Por su parte, la Figura 5.13b presenta el perfil de temperaturas en la dirección transversal (en este caso usando la coordenada transversal adimensional z/δ), cuando $x = 0.031$ m obtenidos en el presente estudio y en el trabajo de Mittermaier et al. [102].



(a) Yoon et al. [29], perfil de la fracción másica de LiBr de la interface en la dirección longitudinal.

(b) Mittermaier et al. [102], perfil de la temperatura en la dirección transversal adimensional z/δ cuando $x = 0.031$ m .

Figura 5.13: Comparación entre el presente trabajo y dos estudios numéricos de la literatura:

Los resultados de la Figura 5.13 muestran que la modelización de la absorción realizada en este trabajo de tesis doctoral coincide con ambos modelos, verificando la validez del modelo propuesto.

5.3.3 Análisis de las diferentes metodologías para modelar absorbedores de LiBr – H₂O

Una vez validado el modelo numérico, se ha procedido a analizar y comparar las diferentes metodologías definidas en la Sección 5.2, de acuerdo a diferentes hipótesis. Las metodologías que se han contrastado han sido:

- Metodología de consideración de la absorción:
 - Imponer la fracción másica de equilibrio frente a imponer la temperatura de equilibrio.
 - Imponer la fracción másica frente a no imponer.
 - Difusión 1D frente a Difusión 2D.
- Forma de modelar la interface:
 - 1 celda frente a varias celdas.

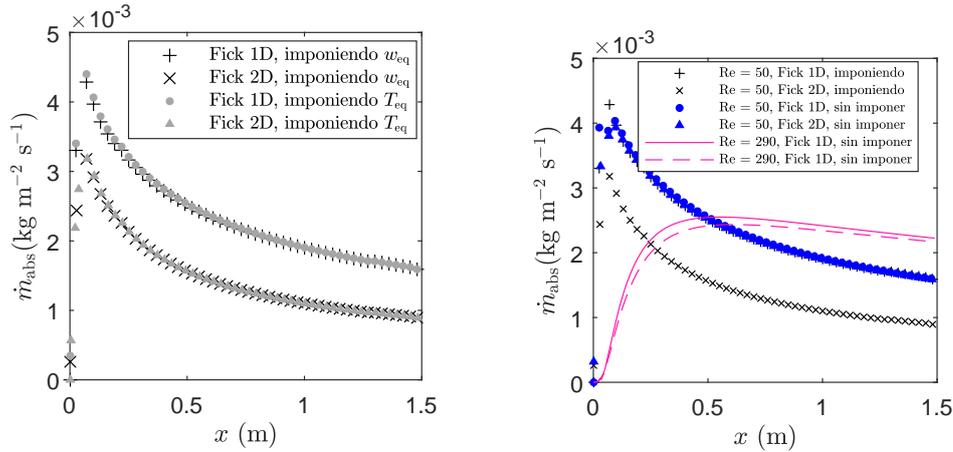
Consideración y estimación de la absorción

En primer lugar, se ha estudiado si existen diferencias entre imponer la temperatura de equilibrio e imponer la fracción másica de equilibrio en la interface. Con este propósito, la Figura 5.14 proporciona el flujo de masa local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal cuando $Re = 50$, usando diferentes hipótesis de difusión e imponiendo dos condiciones de equilibrio diferentes en la interface:

- (i) Fick1D fracción másica de equilibrio
- (ii) Fick2D fracción másica de equilibrio.
- (iii) Fick1D temperatura de equilibrio.
- (iv) Fick2D temperatura de equilibrio.

Los resultados de la Figura 5.14a muestran que los perfiles de flujo de masa absorbido para ambas condiciones de equilibrio impuestas (T_{eq} y w_{eq}) son casi idénticos. Debido a ello, los próximos modelos del presente trabajo de tesis doctoral que emplean el método impuesto estarán basados solamente en la fracción másica de equilibrio, descartando la temperatura de equilibrio. Por el contrario, los resultados revelan que la hipótesis de difusión tiene una gran influencia en la absorción. En particular, cuando se imponen las condiciones de equilibrio, el flujo de masa de absorción en la interface es mucho mayor para la hipótesis de difusión 1D que para la 2D en ambos casos.

La Figura 5.14b presenta resultados idénticos para el método de imposición. Sin embargo, esta figura también compara el flujo de masa local a lo largo de la longitud del flujo determinado para diferentes hipótesis de difusión cuando $Re = 50$ y $Re = 290$, pero, en este caso, incluyendo dos métodos diferentes para considerar la absorción: imponiendo y sin imponer la fracción másica de equilibrio en la interface. Se puede observar que, cuando se considera Fick1D,



(a) Fick1D y Fick2D imponiendo dos diferentes condiciones de equilibrio: Temperatura de equilibrio y fracción másica de equilibrio cuando $Re = 50$.

(b) Fick1D y Fick2D imponiendo y sin imponer la fracción másica de equilibrio cuando $Re = 50$.

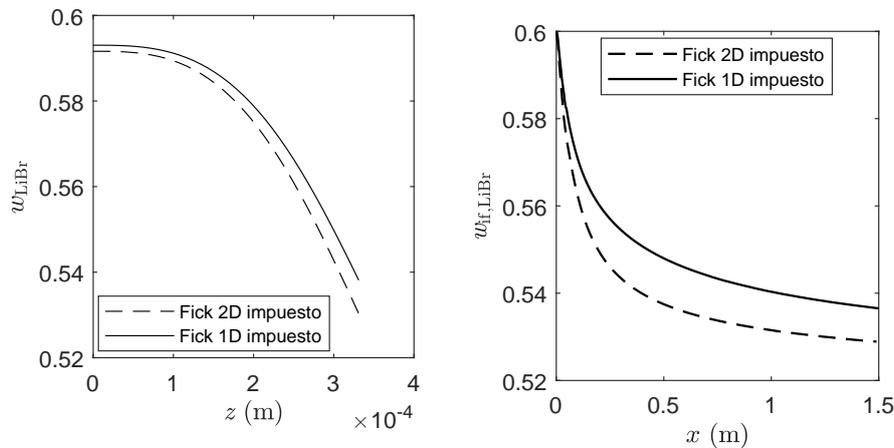
Figura 5.14: Comparación del flujo de masa absorbido localmente a lo largo de la longitud del flujo para diferentes metodologías y números de Reynolds:

el flujo de masa local para los métodos de imposición y sin imposición son casi coincidentes. Sin embargo, esta similitud no está presente cuando la absorción se estima mediante Fick2D. Para este caso, tal y como se observa en la Figura 5.14b, el flujo de masa absorbido es mayor cuando no se impone el equilibrio en la interfaz. Por lo tanto, para $Re = 50$, el procedimiento de consideración de la absorción (imponer vs sin imponer) no tiene una influencia significativa para Fick1D, mientras que sí la tiene cuando se considera la hipótesis Fick2D (Figura 5.14b).

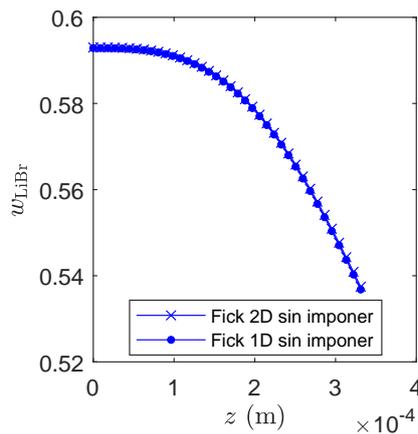
Se ha observado un efecto similar para la hipótesis de difusión de masa escogida. Cuando se impone la fracción másica, la hipótesis de difusión tiene una gran influencia en la masa absorbida (Figura 5.14b), mientras que su trascendencia es casi imperceptible cuando no se impone la fracción de masa de equilibrio en la interfaz para $Re = 50$. Sin embargo, esta diferencia varía con el número de Reynolds. Por ejemplo, en el caso de $Re = 290$, se produce un ligero aumento del flujo de masa absorbido local cuando se asume la difusión 1D.

Para entender la causa de esta disparidad, la Figura 5.15a ilustra el perfil de la fracción másica sobre la dirección transversal (z) a la salida del tubo vertical ($x = 1.5$ m), mientras que la Figura 5.15b presenta la fracción másica en la interfaz a lo largo de la longitud del flujo, para $Re = 50$ y condiciones de imposición.

De acuerdo con los resultados de la Figura 5.15a, la disminución de la fracción de masa a lo largo de la dirección transversal y, por lo tanto, la absorción, es mayor cuando se asume la difusión 2D. Por el contrario, esto contradice lo observado en la Figura 5.14a y en la Figura 5.14b, ya que el flujo de masa de vapor absorbido local es mayor para Fick1D que para Fick2D cuando se imponen condiciones de equilibrio. Esta contradicción puede deberse a que, cuando se fuerzan las condiciones de equilibrio en la interfaz, la cantidad de flujo de masa de vapor absorbido no se incluye directamente en el término fuente. En su lugar,



(a) Fracción másica de LiBr de la interface a lo largo de la dirección transversal z a la salida del tubo ($x = 1.5$ m) para el método de Fick impuesto y dos diferentes hipótesis de difusión.
 (b) Fracción másica de LiBr en la interface a lo largo de la longitud del flujo para el método de Fick impuesto y dos diferentes hipótesis de difusión.



(c) Fracción másica de LiBr en la interface a lo largo de la dirección transversal z a la salida del tubo ($x = 1.5$ m) utilizando el método de Fick no impuesto y dos hipótesis de difusión.

Figura 5.15: Diferentes perfiles de fracción másica de LiBr para diferentes metodologías cuando $Re = 50$.

la cantidad de agua que se transfiere al líquido de la solución depende del flujo de difusión de especies (\mathbf{J}_{LiBr} , Ecuación (5.12)) de la ecuación de especies (Ecuación (5.10)), el cual se basa en la ley de Fick y supone una difusión 2D.

Así, como la absorción evaluada al imponer la fracción másica es mayor en el caso 1D (Figura 5.14), el calor generado también aumenta, incrementando la temperatura en la interface. En consecuencia, la fracción de masa de equilibrio (determinada por la ecuación de Dühring, Figura 5.4) es mayor para 1D que para 2D. Este aumento de la fracción de masa conduce a una reducción del gradiente, disminuyendo la absorción de masa de vapor en la interface, el cual depende de la diferencia de fracción másica. Como resultado, aunque en el caso de imponer Fick1D el valor estimado de la masa absorbida es superior, la cantidad de

agua que entra en la película considerada por el modelo es menor. Esto también resulta en una mayor fracción de masa de LiBr en la salida para Fick1D. Por lo tanto, el método Fick propuesto que impone la fracción de masa no representa correctamente la hipótesis de difusión 1D. Debido a esto, se descarta el método de Fick1D imponiendo las condiciones de equilibrio y no se utilizará más en el presente trabajo de tesis doctoral.

Para el método de Fick sin imposición, la Figura 5.15c muestra los resultados del perfil de la fracción másica en la dirección transversal (z) a la salida del tubo ($x = 1.5$ m) para $Re = 50$. Lo interesante de los datos de la Figura 5.15c es que el perfil de la fracción másica es casi igual para ambas hipótesis (2D y 1D). Estos resultados son comparables a los presentados en la Figura 5.14b, ya que el flujo de masa local obtenido en ambos casos es similar.

La diferencia respecto al método impuesto podría residir en que en el método sin imponer, el término fuente de las ecuaciones de conservación está directamente relacionado con el flujo de masa estimado en la interface. Como se puede observar comparando las Ecuaciones (5.14) y (5.15), la diferencia reside en el denominador del lado derecho. Por lo tanto, para un mismo perfil de fracción másica en el líquido, el flujo de masa absorbido es mayor para Fick1D respecto a Fick2D y, como resultado, los términos fuente. Esta mayor absorción tiene varias consecuencias.

Por un lado, debido al aumento del calor generado, la temperatura y, por consiguiente, la fracción másica en la interface aumentan (Figura 5.4). Por otro lado, debido al crecimiento del vapor absorbido, la fracción de masa de LiBr en el interior del film disminuye. Ambos efectos conducen a fracciones másicas menores en la interface.

Así, cuando $Re = 50$, el aumento del flujo de masa debido a la hipótesis 1D es neutralizado por la disminución del gradiente de la fracción másica, alcanzando niveles de absorción similares en ambas hipótesis (1D y 2D). Para $Re = 290$, el comportamiento es también similar, pero las diferencias son ligeramente superiores.

Por último, se ha procedido a comparar la influencia de la hipótesis de la difusión en el método de Higbie. Descartado el método de imposición, en el caso de Higbie no se ha impuesto la fracción másica en la interface. La Figura 5.16 muestra en modo de comparación los resultados del flujo local en la dirección longitudinal para ambas hipótesis (1D y 2D) cuando $Re = 50$.

En la Figura 5.16 es aparente que, en este caso, la hipótesis tiene una gran influencia en la absorción, siendo considerablemente mayor en el caso de difusión 1D. En el método Higbie, el cálculo de flujo de masa no depende del perfil de la fracción másica en el *film*. Por lo tanto, según Higbie el aumento del vapor absorbido no influye en la estimación de la absorción. Por esta razón, con el método de Higbie, la hipótesis de difusión másica escogida tiene un gran efecto, siendo mayor el flujo de masa absorbido en el caso de difusión unidireccional.

Resumiendo, en este apartado se ha demostrado que la metodología y la hipótesis empleada para el cálculo de flujo de masa absorbido influyen en los resultados del modelo. Asimismo, los resultados han ilustrado que imponer la temperatura de equilibrio o la fracción másica de equilibrio es indiferente. Además,

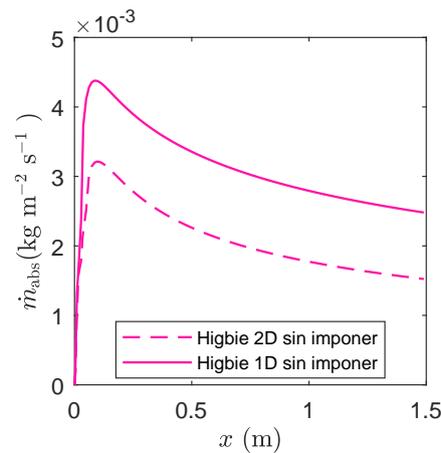


Figura 5.16: Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal con el método Higbie 1D y Higbie 2D sin imponer la concentración cuando $Re = 50$.

en este apartado se ha demostrado que, cuando se imponen las condiciones de equilibrio en la interface, el ratio de absorción calculado no coincide con el vapor introducido en el *film* en el caso de Fick1D. Por esta razón, el método de imposición ha sido descartado. Igualmente, como la difusión vapor-líquido de LiBr en la interface es despreciable, la hipótesis de difusión másica unidireccional (1D) ha sido la seleccionada para los modelos numéricos. Sin embargo, en esta sección se ha demostrado que, desde el punto de vista de la absorción, tanto Fick 1D, como Higbie 1D pueden ser válidos. Por lo tanto, en los posteriores análisis se aplicarán estos dos métodos en los modelos, sin imponer la fracción másica en ambos:

- Fick unidireccional (1D) sin imponer la fracción másica.
- Higbie unidireccional (1D) sin imponer la fracción másica.

Modelización de la interface

Como se ha comentado anteriormente en la Sección 5.2.8, en la bibliografía existen dos tendencias para la introducción del análisis de la absorción:

1. Considerar la interface en una única celda.
2. Considerar la interface en varias celdas.

En este apartado se estudiarán las diferencias existentes en los resultados de la forma de considerar la interface. Este análisis se ha efectuado para las dos metodologías escogidas: Fick 1D y Higbie 1D, sin imponer las condiciones de equilibrio en ambas.

Tal y como se ha realizado al considerar la interface en una única celda (Sección 5.3.1), se ha analizado la independencia de malla cuando la interface es

modelada por medio de varias celdas. Como en este caso la interface es compartida por varias celdas, el número de elementos necesarios en la dirección transversal es de 200 tanto para el caso de Fick, como para Higbie.

La Figura 5.17 muestra el flujo absorbido de masa en la dirección x para $Re = 50$ (Figura 5.17a) y para $Re = 290$ (Figura 5.17b) obtenidos con el método Fick 1D empleando las dos formas de modelar la interface: 1 celda y varias celdas.

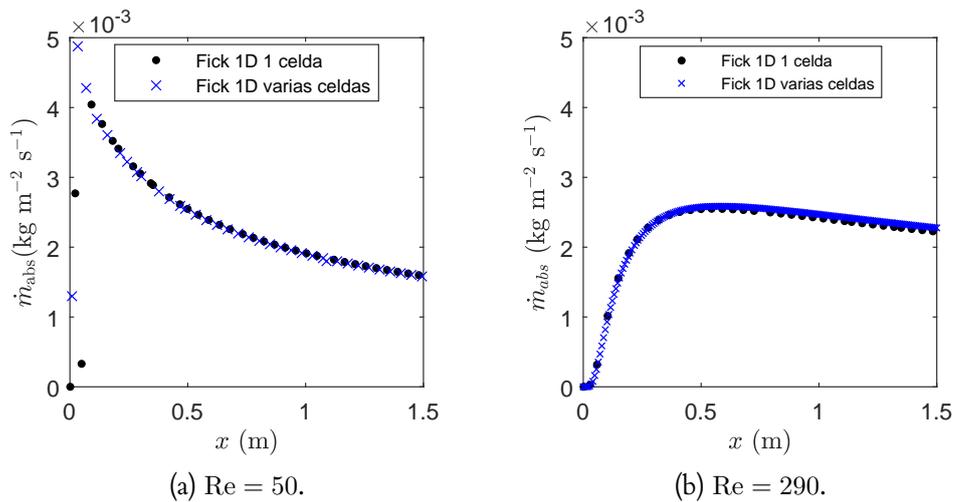


Figura 5.17: Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal con el método Fick 1D con 2 diferentes formas de modelar la interface.

En la Figura 5.17 se observa que, tanto para $Re = 50$ (Figura 5.17a), como para $Re = 290$ (Figura 5.17b), los resultados de ambas formas de modelar son similares. En el caso de $Re = 50$, existe una ligera diferencia en el valor máximo del flujo.

Por su parte, en el caso de Higbie 1D los resultados del flujo local de vapor absorbido son igualmente semejantes (Figura 5.18).

Por lo tanto, los resultados de esta Sección demuestran que, aunque los resultados del flujo másico de absorción sean similares para ambas formas de modelizar la interface, el coste computacional del modelo es mayor cuando la interface se modela con varias celdas. Por esta razón, se descarta la modelización de la interface por medio de varias celdas. Así, en los modelos que se presentan a continuación la interface se ha modelado mediante una celda.

5.3.4 Análisis de la influencia de las condiciones de operación en la absorción

Una vez desarrollada la metodología de los modelos, se ha analizado la influencia de diferentes condiciones de operación en la absorción. Concretamente, las variables analizadas han sido:

1. Número de Reynolds del flujo de la solución.
2. Transferencia de calor del agua de enfriamiento.

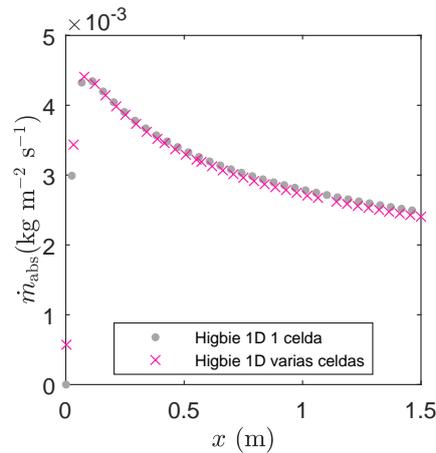


Figura 5.18: Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal con el método Higbie 1D con 2 diferentes formas de modelar la interface cuando $Re = 290$.

3. Fracción másica de entrada de la solución.

Efecto del número de Reynolds

En este apartado se va a analizar la influencia del número de Reynolds de la solución modelizando la interface con una celda y empleando las propiedades termofísicas constantes en las dos metodologías escogidas: Fick 1D sin imponer y Higbie 1D sin imponer.

Para analizarlo desde un punto de vista global, la Figura 5.19 presenta los resultados del flujo de masa de vapor absorbido promedio (Figura 5.19a) y flujo de calor absorbido promedio por el agua de refrigeración (Figura 5.19b) obtenidos con las dos metodologías en el rango de Reynolds de $50 \leq Re \leq 290$. Las condiciones de trabajo han sido idénticas a las empleadas en la Sección 5.3.1.

Los resultados muestran una misma tendencia entre los dos modelos. En el caso del flujo de masa absorbido, ambos obtienen el valor máximo cuando $Re = 75$ (Figura 5.19a). Y para el caso del flujo de calor, crece con el número de Reynolds (Figura 5.19b). Sin embargo, los valores obtenidos en ambos casos son mayores en el caso de Fick 1D y, básicamente, esta diferencia se mantiene constante.

Con el objetivo de analizar las diferencias, la Figura 5.20 muestra el flujo de masa local absorbido para diferentes números de Reynolds calculados con Fick 1D (Figura 5.20a) y Higbie 1D (Figura 5.20b) en el rango $50 \leq Re \leq 290$.

Con los dos métodos se observa que, a bajos números de Reynolds, el pico máximo del flujo de masa absorbido es mayor. Cuanto menor es Reynolds, menores son el flujo de masa de la solución (Ecuación (1.4)) y el espesor del *film* (Ecuación de Nusselt (1.6)). Por consiguiente, la disminución de la temperatura de la interface es mayor en bajos números de Reynolds. Como resultado, la fracción másica de equilibrio también es menor (Figura 5.4) y, por lo tanto, el flujo de masa de vapor absorbido aumenta. Además, como la capa límite térmica

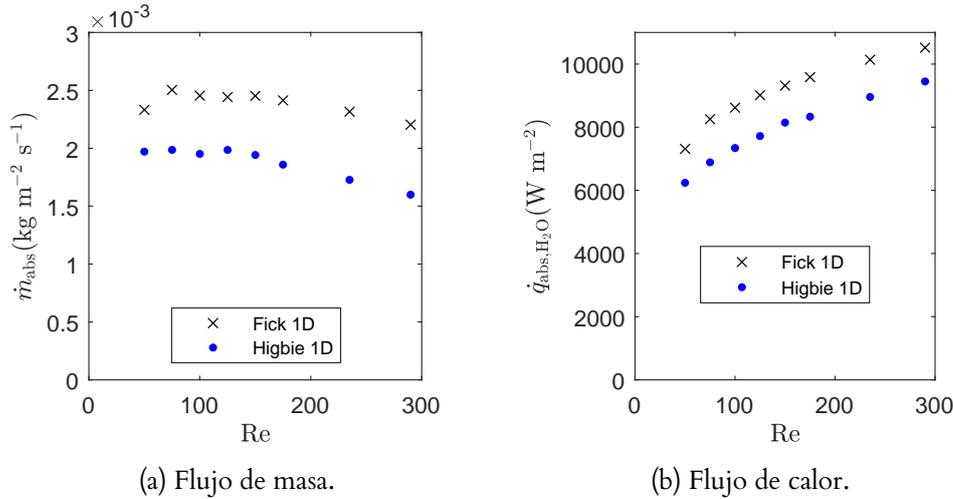


Figura 5.19: Resultados globales obtenidos con el modelo numérico para diferentes números de Reynolds y metodologías.

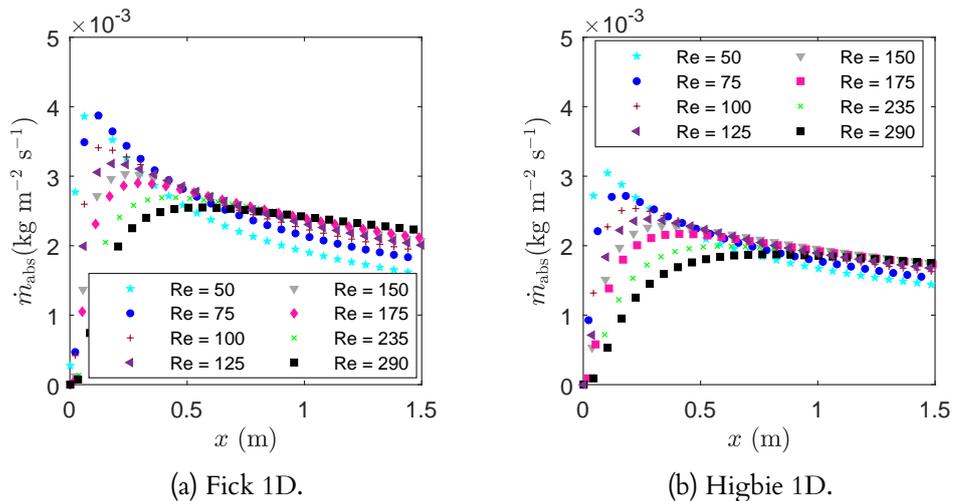


Figura 5.20: Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal para diferentes números de Reynolds obtenidos con diferentes metodologías.

se desarrolla antes en bajos números de Reynolds, este punto máximo se produce en una distancia longitudinal más próxima a la entrada. Por el contrario, cuanto mayor es el número de Reynolds, más se retrasa el punto de absorción máximo longitudinalmente y menor es su valor.

No obstante, en Reynolds bajos se origina un descenso notable del flujo local aguas abajo del pico. Esta disminución es menor cuanto mayor es el número de Reynolds. Asimismo, en el rango de estudio, el flujo de absorción tiende a un valor constante a la salida del absorbedor, el cual aumenta con el número de Reynolds. Por consiguiente, existirá un número de Reynolds que maximiza el flujo absorbido para cada longitud de tubo. Esta conclusión también fue reportada, por ejemplo, por Hofmann y Kuhlmann [129] y García-Rivera et al. [53]. Este Reynolds óptimo será menor cuanto menor es la longitud del tubo.

En el rango de los números de Reynolds de este estudio, cuando se utiliza Fick 1D, el pico máximo es mayor que con Higbie 1D. Sin embargo, como resultado de la alta absorción, la disminución del flujo de masa absorbido es menor con Higbie 1D. Por lo tanto, los resultados de flujo local no varían tanto con Higbie 1D. Esto es debido a que, en el método de Higbie, la cantidad de vapor absorbida no tiene tanta repercusión (Ecuación (1.27)). Por lo tanto, se observa que el método de Fick 1D es más sensible a los cambios de fracción másica debidos a la absorción que el modelo de Higbie 1D.

Efecto de la transferencia de calor del agua de enfriamiento

En el análisis de la influencia del número de Reynolds, se ha comentado que el flujo de absorción también depende de la transferencia de calor en la dirección transversal. No obstante, su influencia no es similar para todos los números de Reynolds. En este contexto, la Figura 5.21 presenta los resultados de flujo de masa absorbido local obtenidos con los métodos de Fick 1D (Figura 5.21a) y Higbie 1D (Figura 5.21b) para un intervalo de Reynolds entre $Re = 50$ y $Re = 290$, operando con tres diferentes coeficientes de convección del agua de enfriamiento.

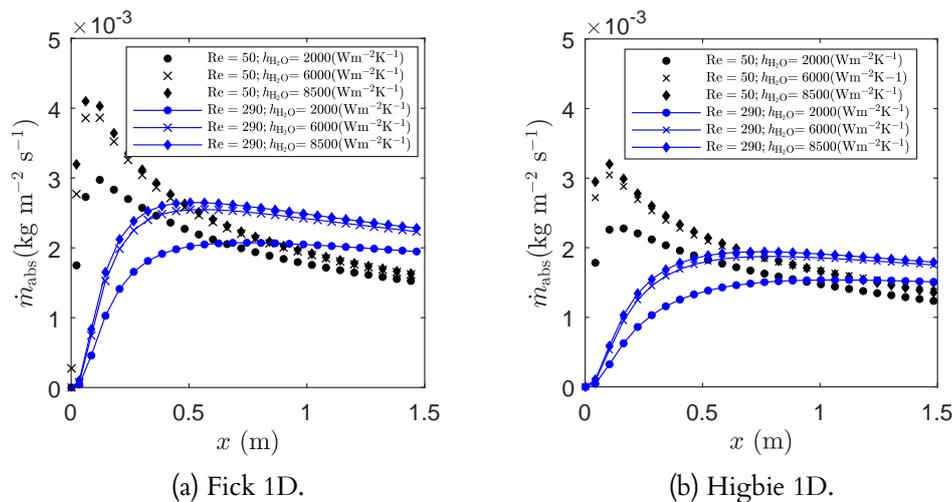


Figura 5.21: Flujo de masa de vapor local absorbido a lo largo de la dirección longitudinal para $Re = 50$ y $Re = 290$ y diferentes coeficientes de convección del agua de enfriamiento.

Tanto en el método de Fick 1D (Figura 5.21a), como en el caso de Higbie 1D (Figura 5.21b), el flujo aumenta con el incremento del coeficiente de convección. Asimismo, el pico máximo de absorción se crea en una distancia longitudinal menor con el aumento de la carga convectiva. Esto se debe a que el aumento de la convección mejora la capacidad de transferir calor del agua de enfriamiento. Como resultado, la capa límite térmica se desarrolla a mayor velocidad y la disminución de la temperatura se logra en una distancia longitudinal menor.

De acuerdo con los resultados de la Figura 5.21, la mejora de la convección tiene un mayor impacto en la absorción en el caso de $Re = 290$. El espesor del *film* aumenta con el número de Reynolds, así como la mayor cantidad de masa

del flujo. Por consiguiente, es necesario que la carga de enfriamiento sea mayor para conseguir disminuir la temperatura de la interface.

Asimismo, se observa que el efecto también es mayor para el método de Fick 1D (Figura 5.21a), que para Higbie 1D (Figura 5.21b). El flujo local de absorción calculado y, por consiguiente, el calor generado en la absorción, son mayores en el caso del método de Fick 1D. Así, cuanto mayor es la absorción (Fick 1D), la mejora obtenida con el aumento de la convección del agua de enfriamiento es mayor.

Sin embargo, el incremento obtenido al pasar de $h_{\text{H}_2\text{O}} = 6000 \text{ (W m}^{-2} \text{ K}^{-1}\text{)}$ a $h_{\text{H}_2\text{O}} = 8000 \text{ (W m}^{-2} \text{ K}^{-1}\text{)}$ no es muy considerable. Por lo tanto, la mejora de la absorción se satura a partir de una carga de enfriamiento del agua, por lo que no sería interesante desde el punto de vista de diseño.

En resumen, los resultados de los modelos revelan que el aumento de la convección del agua de enfriamiento mejora la absorción, aunque, para el caso analizado, este incremento se satura a partir de $h_{\text{H}_2\text{O}} = 6000 \text{ (W m}^{-2} \text{ K}^{-1}\text{)}$. Asimismo, este aumento en la absorción es mayor en el caso de $\text{Re} = 290$, así como para el método de Fick 1D.

Efecto de la fracción másica de LiBr inicial de la solución

Tanto los resultados experimentales [50, 51], como los numéricos [29, 129] de la literatura han demostrado la influencia de la fracción másica de entrada en la absorción. Para analizar cómo influye esta variable en los dos métodos, la Figura 5.22 presenta la evolución del flujo local de masa absorbido para las dos fracciones másicas ($w_{\text{in,LiBr}} = 0.6$ y $w_{\text{in,LiBr}} = 0.58$), cuando $\text{Re} = 50$ y $\text{Re} = 290$. En este caso se han utilizado el método de Fick 1D (Figura 5.22a) y el método de Higbie 1D (Figura 5.22b). El resto de condiciones de trabajo se han resumido en la Tabla 5.5.

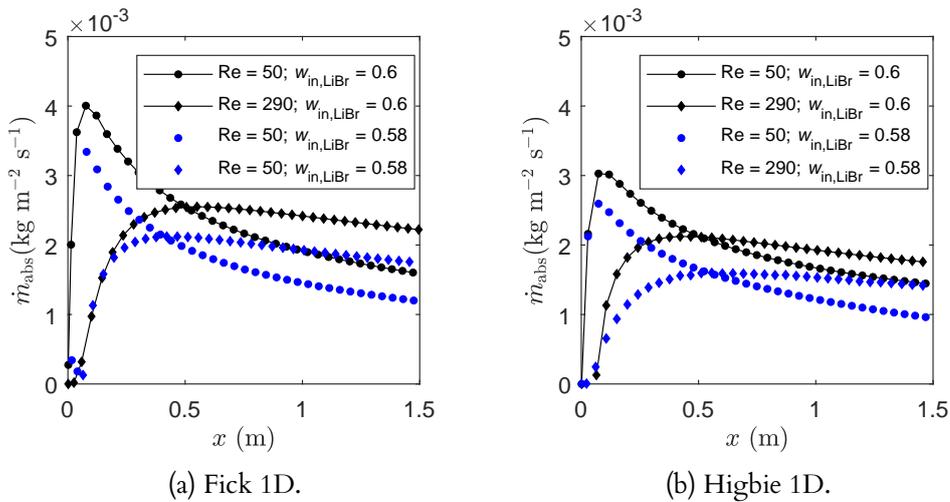


Figura 5.22: Resultados de flujo local de masa absorbido para diferentes fracciones másicas de entrada ($w_{\text{in,LiBr}} = 0.6$ y $w_{\text{in,LiBr}} = 0.58$) y números de Reynolds ($\text{Re} = 50$ y $\text{Re} = 290$), obtenidos utilizando dos diferentes métodos.

Los resultados de la Figura 5.22 muestran que el flujo local disminuye considerablemente con la bajada de la fracción másica de entrada en el rango de estudio, tanto para Fick 1D, como para Higbie 1D. Este descenso es mayor cuando se utiliza Fick 1D. Por lo tanto, tal y como se ha evidenciado en el análisis de la influencia del número de Reynolds de la solución, el método de Fick 1D es más sensible a las variaciones de fracción másica. La disminución observada en los modelos también fue reparada en los trabajos experimentales de Miller y Keyhani [50], Medrano et al. [51] y García-Rivera et al. [53]. Así, con el objetivo de maximizar la absorción, la fracción másica de entrada tendrá que ser la máxima posible, siempre y cuando no se generen problemas de cristalización.

5.3.5 Comparación con los resultados experimentales

Como se ha mencionado en la Sección 5.1, en la bibliografía se han utilizado diferentes formulaciones en los modelos numéricos y cálculos analíticos. En algunos casos, los resultados de los modelos han sido comparados con datos experimentales. No obstante, todavía no se ha comparado la diferencia existente entre las diferentes metodologías de cálculo y procedimientos de introducción del flujo de absorción, frente a los resultados experimentales.

Por esta razón, se analizan y comparan los resultados numéricos considerando las mismas condiciones de trabajo de los estudios experimentales. Debido a la falta de información sobre las condiciones de trabajo, se ha descartado el estudio de Miller y Keyhani [50] para el contraste. Los trabajos contrastados han sido los siguientes y las condiciones de operación han sido descritas en la Tabla 5.2:

- Medrano et al.[51].
- Takamatsu et al. [52].
- García-Rivera et al. [53].

Con el objetivo de realizar la evaluación de los modelos propuestos, en primer lugar la Figura 5.23 muestra la comparación de los resultados obtenidos con los modelos del presente trabajo de tesis doctoral y los ensayos de Medrano et al. [51].

Los resultados de la Figura 5.23 revelan que tanto con el método Fick 1D, como con Higbie 1D, los resultados de los modelos no cumplen con la tendencia de los resultados experimentales: el aumento de la absorción con el número de Reynolds. Al contrario, en los dos métodos usados en los modelos numéricos la absorción disminuye con Reynolds en el rango de estudio.

Asimismo, cuando $Re = 70$, el resultado experimental y el numérico de Fick 1D son similares. Sin embargo, la diferencia entre los resultados experimentales y numéricos aumenta con el número de Reynolds, siendo mayor el desacuerdo con Higbie 1D. Por ejemplo, cuando $Re = 290$, la diferencia con Fick 1D ha sido del 36 %, mientras que con Higbie 1D del 53 %.

La segunda comparación se ha efectuado con los resultados experimentales obtenidos por Takamatsu et al. [52]. La Figura 5.24 presenta el contraste entre

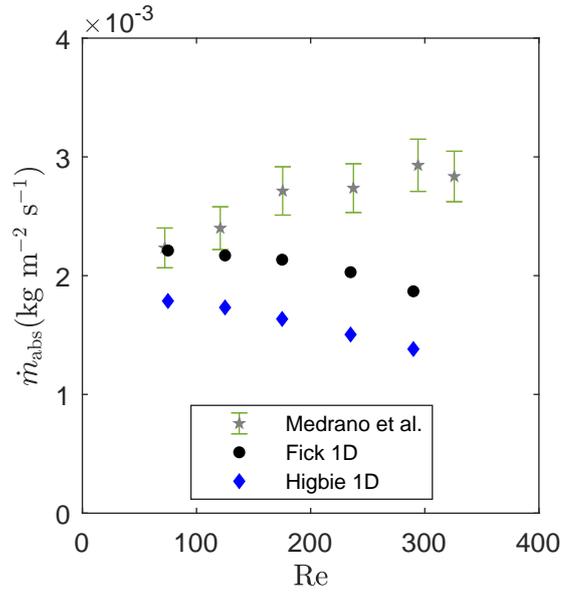


Figura 5.23: Comparación del flujo de masa de vapor absorbido entre resultados experimentales del trabajo de Medrano et al. [51] y los resultados numéricos.

los resultados experimentales [52] y los numéricos obtenidos en este trabajo de tesis doctoral para dos diferentes condiciones de temperatura de entrada del agua de enfriamiento: $T_{H_2O} = 20\text{ }^\circ\text{C}$ y $T_{H_2O} = 25\text{ }^\circ\text{C}$.

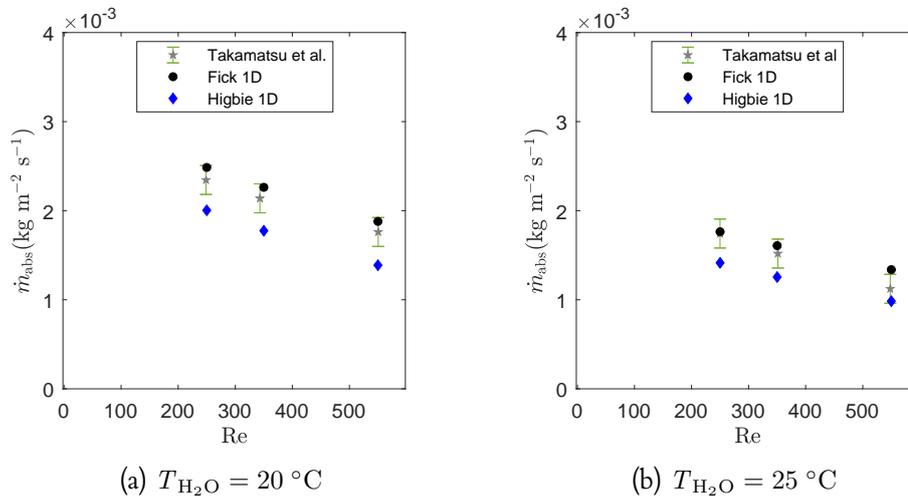


Figura 5.24: Comparación del flujo de masa de vapor absorbido entre resultados experimentales del trabajo de Takamatsu et al. [52] y los resultados numéricos, para dos diferentes condiciones de entrada de temperatura del agua.

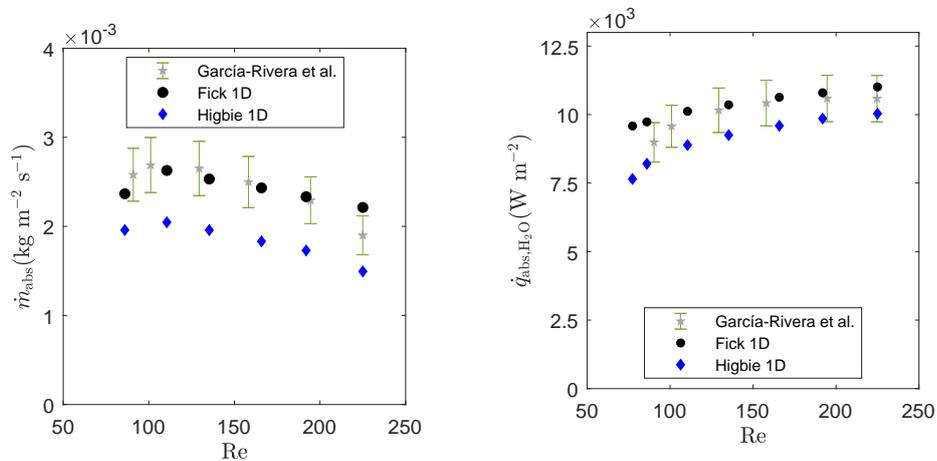
Los resultados de la Figura 5.24 ilustran que, a diferencia de la comparación con Medrano et al. [51], los resultados de los modelos y los resultados experimentales siguen la misma tendencia. En todos los casos el flujo de absorción disminuye con el número de Reynolds en el rango de estudio.

Entre los dos métodos, el método de Fick 1D es el que ofrece resultados

más similares a la experimentación de Takamatsu et al. [52] (Figura 5.24). Casi la totalidad de los flujos de absorción obtenidos con Fick 1D están dentro del rango de incertidumbre de las mediciones. Excepto en el caso de $Re = 550$ y $T_{H_2O} = 25\text{ }^\circ\text{C}$, la diferencia del resto de resultados está por debajo del 6%.

En el caso de Higbie 1D, las diferencias entre los resultados numéricos y experimentales han sido mayores. La máxima diferencia ha sido del 20% (Figura 5.24).

Para finalizar con la comparación, se ha examinado la diferencia entre los resultados experimentales de García-Rivera et al. [53] y los obtenidos con los modelos numéricos del presente estudio (Figura 5.25). La Figura 5.25a muestra la diferencia en el flujo de masa de vapor absorbido, mientras la Figura 5.25b presenta la comparación del flujo de calor absorbido por el agua de refrigeración.



(a) Flujo de masa de vapor absorbido. (b) Flujo de calor absorbido por el agua de refrigeración.

Figura 5.25: Comparación entre resultados experimentales del trabajo de García-Rivera et al. [53] y los resultados numéricos.

Tal y como ocurre en la comparación con Takamatsu et al. (Figura 5.24), los resultados numéricos tanto del flujo de masa absorbido (Figura 5.25a), como del flujo de calor (Figura 5.25b), siguen la misma tendencia que los resultados experimentales.

El flujo de masa absorbido aumenta con el número de Reynolds hasta $Re \approx 110$, donde comienza a descender con el número de Reynolds (Figura 5.25a). Por lo cual, tanto los resultados numéricos como experimentales señalan que existe un número de Reynolds óptimo que maximiza la absorción de vapor. En las condiciones de trabajo del absorbedor analizado, este número de Reynolds tendría un valor de $Re \approx 110$.

En el caso del flujo de calor (Figura 5.25b), éste aumenta con el número de Reynolds, aunque, en números de Reynolds altos, la velocidad de crecimiento disminuye tanto en los resultados experimentales, como en los numéricos. Asimismo, al igual que con el flujo de masa absorbido, los resultados obtenidos con el método Fick 1D están dentro de la incertidumbre de medida. En el caso de Higbie 1D, los resultados tienen mayor diferencia con el experimental, aunque

muchos de ellos están igualmente dentro de la incertidumbre de medida.

En definitiva, los resultados obtenidos con el método Fick 1D han sido más parejos a los experimentales. Éstos reflejan una correlación positiva con los resultados de Takamatsu et al. [52] y García-Rivera et al. [53] cuando se emplea Fick 1D. La mayor parte de estos resultados están dentro de la incertidumbre de medida de estos resultados de ensayos experimentales. Además, en estos casos la absorción en el modelo sigue la misma tendencia que en los experimentos. Los resultados obtenidos con Higbie 1D siguen esta misma tendencia, pero las diferencias con los experimentales han sido mayores. Esto puede ser debido al método escogido del tiempo de contacto, por lo que la reformulación de este tiempo de contacto podría igualar estas diferencias.

5.4 Conclusiones

A lo largo del Capítulo 5 se han definido las formulaciones matemáticas y las diferentes metodologías que se han utilizado en los modelos numéricos, realizando la comparación entre ellas. Los resultados de la absorción han mostrado que éstas varían en función de los tres criterios seleccionados para modelar la absorción: i) la metodología para considerar la absorción (imponer la fracción másica o no); ii) la manera de determinar el flujo de masa absorbido (Fick frente a Higbie); y iii) de la hipótesis de la difusión en la interface (1D frente a 2D).

Los resultados han mostrado que, en el método de imposición, es indiferente imponer en la interface la fracción másica de equilibrio o la temperatura de equilibrio. Además, se ha observado que, al imponer la fracción másica en la interface con el método Fick 1D, el flujo de absorción calculado y la cantidad de agua introducida en la solución líquida no coinciden. Una conclusión de estos resultados es que con el método Fick 1D imponiendo las condiciones de equilibrio se obtienen resultados incoherentes, por lo que se ha descartado este método. Asimismo, debida a la volatilidad insignificante del LiBr, se ha considerado la hipótesis de difusión unidireccional y, por consiguiente, los métodos seleccionados han sido Fick 1D y Higbie 1D sin imponer la fracción másica. En cuanto a la modelización de la interface, se ha optado por realizarlo con una sola celda debido al menor coste computacional.

Una vez escogida la metodología, se ha estudiado la influencia del número de Reynolds, la refrigeración del agua y la fracción másica de entrada. Los resultados han evidenciado que existe un número de Reynolds que maximiza la absorción de vapor para cada longitud de tubo. Igualmente, se ha observado que la mejora debida al aumento del poder de refrigeración del agua de enfriamiento se satura a partir de un número de Reynolds, específico para cada configuración de absorbedor. Además, los resultados han mostrado que la disminución de la fracción másica de entrada reduce considerablemente la absorción local.

Comparando los dos métodos, la tendencia del flujo local de absorción en la dirección longitudinal ha sido la misma. No obstante, la absorción obtenida con Fick 1D ha sido superior y éste ha mostrado mayor sensibilidad a los cambios de la fracción másica. Sin embargo, el bajo coste computacional característico del modelo Higbie 1D resulta un gran atractivo para su aplicación en modelos 3D.

Cabe destacar que la diferencia entre métodos se ha mantenido estable. Por lo tanto, una reformulación del tiempo de contacto en el método de Higbie podría igualar estas disparidades.

Por último, la comparación con los resultados experimentales de Takamatsu et al. [52] y García-Rivera et al. [53] ha demostrado una mayor fiabilidad del modelo de Fick 1D, ya que la mayor parte de los resultados obtenidos están dentro del rango de incertidumbre de medida de los ensayos, además de tener la misma tendencia. Por lo tanto, se verifica que la metodología propuesta basada en Fick con difusión unidimensional es una metodología válida para el análisis de los fenómenos de transferencia de calor y masa de absorbedores.

6 | ANÁLISIS DEL EFECTO DE LA TERMO-DIFUSIÓN EN ABSORBEDORES *FALLING FILM HEAT EXCHANGERS*

6.1 Introducción

En el Capítulo 5 se ha estudiado la diferencia existente entre las diferentes metodologías y procedimientos en la transferencia de calor y masa de absorbedores de tubo vertical, demostrando que, en el interior del film de la mezcla binaria, se generan gradientes de temperatura y fracción másica. Éstos dan pie a diferentes mecanismos de transferencia de calor y masa.

Tal y como se ha mencionado en las Sección 1.5, Killion y Garimella efectuaron una revisión crítica de los modelos acoplados de la transferencia de calor y masa en absorbedores *falling film* [157]. No obstante, es importante resaltar que, en este artículo de revisión, los análisis que incluyeron el efecto Marangoni y las inestabilidades de no-equilibrio de Rayleigh no fueron considerados. Asimismo, varios trabajos han analizado la influencia de diferentes parámetros en la transferencia de calor y masa simultáneos de tubos y placas verticales. Yoon et al. [29] y Bo et al. [123] concluyeron que la transferencia de calor y masa crece de manera repentina en la región de entrada y, decrece aguas abajo. Además, Mittermaier y Ziegler [102] determinaron en su trabajo numérico que el efecto de las propiedades variables en la transferencia de calor y masa es pequeño.

Destacadamente, la mayor parte de los trabajos estudiados en los Capítulos 1, 3 y 4 solamente consideraron la transferencia de masa como consecuencia del gradiente de fracción másica. Originalmente, Soto et al. [241] atribuyeron las diferencias entre los resultados de su modelo y los experimentales a los efectos colaterales de no-equilibrio, y sugirieron que los altos gradientes de temperatura de la interface podrían jugar un cierto rol en los fenómenos de transporte de absorbedores.

En cuanto a los análisis experimentales de las propiedades de transporte de las soluciones binarias, Colombani et al. [242] midieron experimentalmente el coeficiente Soret de la mezcla de agua y cloruro de litio ($\text{LiCl} - \text{H}_2\text{O}$) por medio de la técnica de interferometría holográfica. Los resultados mostraron que el coeficiente Soret es negativo, del orden de $-3 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$. Como resultado, el componente más denso, en este caso el cloruro de litio, migra hacia la región más caliente. Así, la transferencia de masa producida a causa del gradiente térmico

mejoraría el transporte de la sal hacia la interface (en este caso la región de alta temperatura). Este impacto podría generar diferencias en la transferencia de calor y masa en la interface y, por lo tanto, a lo largo del *film* de la solución. Asimismo, según Hosseinnia et al. [131], podría esperarse el mismo efecto para las soluciones LiBr – H₂O.

Desafortunadamente, la atención prestada a la influencia del mecanismo térmico de transferencia de masa en absorbedores *falling film* ha sido limitada. Originalmente, Hosseinnia et al. [131] analizaron el impacto de la interdifusión y el efecto Soret, así como el efecto Duffour, en un absorbedor de tipo tubo vertical usando un modelo numérico basado en el FVM. Los autores reportaron que, considerando todos estos mecanismos, los coeficientes de transferencia de calor y masa mejoraban alrededor de un 9.5 % y 4 %, respectivamente. No obstante, este estudio solamente analizó el efecto en la interface, sin tener en cuenta el impacto de la transferencia de masa térmica en el interior del *film*.

Por lo tanto, en vistas de todo lo mencionado hasta ahora, existe la posibilidad de que el mecanismo de transferencia de masa debido al gradiente de temperatura tenga un rol importante en el comportamiento de absorbedores de LiBr – H₂O. Sin embargo, existe muy poco conocimiento sobre este efecto. Así, la presente sección examinará la influencia de la termodifusión en un absorbedor de LiBr – H₂O de tipo *falling film* vertical por medio de un modelo numérico bidimensional de dos fases, basado en el método de volúmenes finitos.

La estructura del presente capítulo es el siguiente.

En la Sección 6.2 se define la metodología numérica utilizada, donde se especifican el mallado y las condiciones de contorno (Sección 6.2.1), las condiciones de operación y propiedades térmicas (Sección 6.2.2), así como las ecuaciones gobernantes (Sección 6.2.3) y la metodología utilizada para la modelización de la absorción incluyendo el efecto de la termodifusión (Sección 6.2.4).

Una vez definida la metodología numérica, en la Sección 6.3 se muestran los resultados obtenidos con los modelos. Primero, en la Sección 6.3.1 se estudia el impacto que genera la termodifusión en la absorción por medio de las dos metodologías seleccionadas en el Capítulo 5. A continuación, se examina cómo influye el valor del coeficiente de termodifusión en las cantidades de vapor absorbidas (Sección 6.3.2). Para concluir el capítulo, se investiga el impacto de las condiciones de operación en el efecto de la termodifusión.

Para finalizar, en la Sección 6.4 se presentan las conclusiones obtenidas en este capítulo.

6.2 Modelo numérico

6.2.1 Dominio computacional, condiciones de contorno y discretización.

A diferencia del modelo del Capítulo 5, el modelo numérico está basado en las siguientes hipótesis:

1. El flujo es laminar.

2. El equilibrio de la presión de vapor es asumido en la interface.
3. Los efectos de Duffour y Marangoni no han sido considerados.
4. Las fases de líquido y vapor son incompresibles.

El dominio computacional, las condiciones de trabajo y el mallado se han mostrado en la Figura 5.2 de la Sección 5.2.2. De la misma forma que en el Capítulo 5, el dominio del modelo se ha transformado en función del espesor calculado por medio de la ecuación de Nusselt (Ecuación (1.6)) [78], el cual se ha estimado a través de la Ecuación 5.1.

Por su parte, las condiciones de trabajo se han enumerado en la Tabla 5.5. En la misma línea del Capítulo 5, el mallado del dominio líquido ha sido refinado para capturar propiamente las fuerzas viscosas, así como la transferencia de calor y masa.

Gracias a que el estudio de la independencia de malla se ha realizado en la Sección 5.3.1, en el Capítulo 6 se ha utilizado la misma discretización de celdas: 150×500 (dirección z y x , respectivamente). Del mismo modo, los métodos de discretización de las ecuaciones han sido idénticos a los considerados en la Sección 5.2.9.

6.2.2 Condiciones de operación y propiedades termofísicas

Las condiciones de operación se han resumido en la Tabla 5.5 de la Sección 5.3.1. En cuanto a las propiedades termofísicas, se ha supuesto que éstas no varían con la temperatura y la fracción másica. Excepto el coeficiente de termodifusión, D_T , el cálculo del resto de las propiedades se ha realizado tal y como se ha detallado en la Sección 5.2.4.

Respecto al coeficiente de termodifusión D_T de la solución binaria LiBr – H₂O, éste no ha sido medido hasta el día de hoy. Por esta razón, en el Capítulo 6 se ha estudiado la influencia que tiene la termodifusión en la absorción para diferentes valores de D_T dentro del rango $-5 \cdot 10^{-11} \leq D_T \leq 0$. La elección del signo negativo ha sido a raíz de la existencia de varios trabajos que muestran que el coeficiente D_T de una solución salina es negativo. Colombani et al. [242] midieron una solución salina similar, el cloruro de litio, a diferentes fracciones másicas y observaron que el coeficiente de termodifusión de la mezcla era negativo. Asimismo, se han realizado diferentes ensayos para la medición de este coeficiente por medio de la técnica de la columna termogravitacional [243] en el laboratorio del Grupo de Mecánica de Fluidos de Mondragon Unibertsitatea. Desafortunadamente, la mezcla de LiBr – H₂O no puede llegar a la condición estacionaria debido al gradiente de densidad adverso generado, el cual es termohidrodinámicamente inestable bajo el efecto termogravitacional [244]. Por lo tanto, este hecho confirma que el coeficiente de termodifusión de esta mezcla (LiBr – H₂O) a $w_{\text{LiBr}} = 0.6$ es negativo.

6.2.3 Ecuaciones gobernantes

El modelo numérico se ha basado en el modelo del Capítulo 5. La única diferencia reside en la inclusión del componente de la transferencia de masa térmica en la absorción de vapor de la interface, así como en la transferencia de masa en el interior del *film*. Por lo tanto, las ecuaciones de conservación de masa, momento, especies y energía, así como la ecuación VOF han sido previamente definidas (Ecuaciones 3.1a, 3.1b, 5.10, 3.4 y 3.2, respectivamente).

No obstante, en este caso se ha incluido el término de transferencia de masa térmica en el flujo de difusión de especies (\mathbf{J}_{LiBr}) de la Ecuación 5.10, además de transformar los términos fuente relacionadas con la absorción de vapor (S_{LiBr} , S_{α_n} y S_Q). Concretamente, para el cálculo del flujo de difusión de especies, se ha utilizado la expresión descrita en [245], en el cual el mecanismo de transferencia de masa térmica depende de la fracción másica inicial ($w_{0,\text{LiBr}}$).

$$\mathbf{J}_{\text{LiBr}} = -\rho_1 D \nabla w_{\text{LiBr}} - \rho_1 D_T w_{0,\text{LiBr}} (1 - w_{0,\text{LiBr}}) \nabla T. \quad (6.1)$$

6.2.4 Metodología

Basándose en la metodología definida en el Capítulo 5, en este Capítulo 6 la interface se ha modelizado mediante una sola celda (Sección 5.2.8). Por lo tanto, los términos fuente se han calculado por medio del flujo local de masa de vapor absorbido (\dot{m}_{abs}). Sin embargo, de la misma forma que en el caso de la difusión de especies (Ecuación (6.1)), el flujo de vapor absorbido es calculado considerando los flujos de masa absorbidos originados por el gradiente de fracción másica ($\dot{m}_{\text{abs},D}$) y el gradiente de temperaturas (\dot{m}_{abs,D_T}), el cual se representa mediante la Ecuación (6.2):

$$\dot{m}_{\text{abs}} = \dot{m}_{\text{abs},D} + \dot{m}_{\text{abs},D_T}. \quad (6.2)$$

El análisis de la influencia de la termodifusión en la absorción se ha basado en las dos metodologías escogidas en el Capítulo 5: Fick 1D y Higbie 1D, ambos sin imponer la fracción másica en la interface. Así, de manera similar a la parte final del Capítulo 5, el cálculo del flujo másico absorbido como resultado de la diferencia de fracción másica se ha realizado mediante dos diferentes leyes (Fick o Higbie), así como dos hipótesis (difusión 1D y difusión 2D) (Ecuaciones (6.3a)-(6.3d)), cuyo desarrollo se ha definido en la Sección 5.2.6:

$$\dot{m}_{\text{abs},D,\text{Fick 2D}} = -\rho_1 D \left[\frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_{\text{if}}, \quad (6.3a)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},D,\text{Fick 1D}} = -\frac{\rho_1 D}{w_{\text{LiBr}}} \left[\frac{\partial w_{\text{LiBr}}}{\partial n} \right]_{\text{if}}, \quad (6.3b)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},D,\text{Higbie2D}} = \rho_1 \sqrt{\frac{D u_{\text{max}}}{\pi x}} \left(w_{\text{LiBr},\text{if}}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty} \right), \quad (6.3c)$$

$$\dot{m}_{\text{abs},D,\text{Higbie1D}} = \frac{\rho_1}{w_{\text{LiBr},\text{if}}} \sqrt{\frac{D u_{\text{max}}}{\pi x}} \left(w_{\text{LiBr},\text{if}}^{\text{eq}} - w_{\text{LiBr},\infty} \right). \quad (6.3d)$$

Por su parte, el flujo de masa como resultado de la termodifusión, ha sido calculado mediante la Ecuación (6.4):

$$\dot{m}_{\text{abs},D_T} = -\rho_l D_T w_{0,\text{LiBr}} (1 - w_{0,\text{LiBr}}) \left[\frac{\partial T}{\partial n} \right]_{\text{if}}, \quad (6.4)$$

donde $\left[\frac{\partial T}{\partial n} \right]_{\text{if}}$ es el gradiente de la temperatura en la dirección normal de la interface.

Asimismo, se ha considerado la suposición de equilibrio termodinámico en la interface. Por consiguiente, el cálculo de la fracción másica de equilibrio de la interface se ha realizado de la misma forma en la que se ha definido en la Sección 5.2.7. Igualmente, la densidad de área interfacial se ha calculado por medio de la Ecuación (5.47).

6.3 Resultados y discusión

En la Sección 6.3, se ha estudiado el efecto de la termodifusión aplicando los dos métodos seleccionados en el Capítulo 5. Una vez escogida la metodología, en la Sección 6.3.2 se ha analizado la influencia del coeficiente de termodifusión en la absorción. Por último, en la Sección 6.3.2 se examina el fenómeno de la termodifusión bajo diferentes condiciones de operación y propiedades termofísicas tales como el coeficiente de termodifusión, el número de Reynolds, la transferencia de calor del agua de enfriamiento y la fracción másica de LiBr de la entrada.

6.3.1 Análisis de la termodifusión

Durante el desarrollo del Capítulo 5 se han seleccionado las metodologías Fick 1D y Higbie 1D, ambas sin imponer la fracción másica en la interface. Por esta razón, primero se ha analizado la influencia que conlleva la consideración del mecanismo de transferencia de masa térmica en ambas metodologías.

Con el objetivo de comparar la influencia de la termodifusión en las dos metodología escogidas, la Figura 6.1 muestra el flujo de absorción local a lo largo de la dirección longitudinal para los métodos Fick 1D y Higbie 1D sin imponer la fracción másica para $D_T = 0$ y $D_T = -5 \cdot 10^{-11} \text{ m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$, cuando $Re = 50$.

Los resultados de la Figura 6.1 revelan que, en ambos métodos, la termodifusión incrementa el flujo de masa local absorbido. Este comportamiento también fue observado por Hosseinnia et al. [132]. Esta mejora de la absorción es mayor para el método Fick 1D. Por el contrario, la influencia en el método Higbie no es tan considerable. El incremento del flujo de absorción debido al mecanismo térmico crece hasta llegar al pico máximo de absorción. Aguas abajo del pico, esta mejora se mantiene relativamente constante.

Este avance en la absorción depende del efecto en los dos flujos másicos de absorción definidos (Ecuación (6.2)): uno a causa del gradiente de la fracción másica ($\dot{m}_{\text{abs},D}$) y el otro como resultado del gradiente de la temperatura (\dot{m}_{abs,D_T}). La Figura 6.2 representa los diferentes flujos másicos de absorción locales a lo largo de la longitud del flujo para $Re = 50$ obtenidos con los dos métodos: Fick

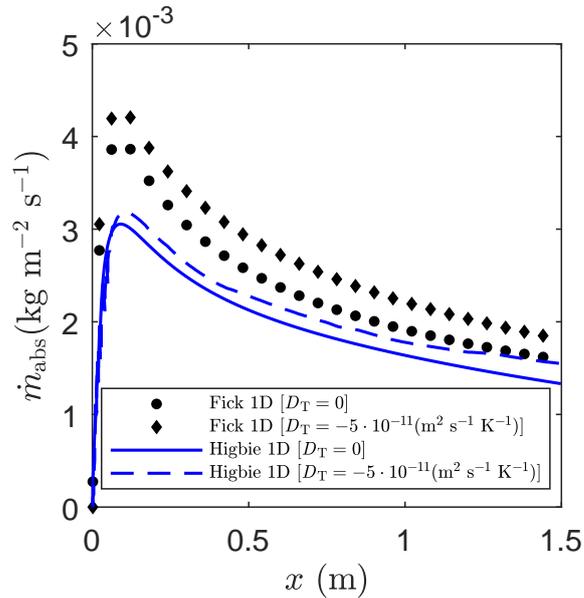


Figura 6.1: Efecto de la termodifusión en el flujo de masa local de vapor absorbido en la dirección longitudinal para las dos metodologías escogidas cuando $Re = 50$.

1D (Figura 6.2a) y Higbie 1D (Figura 6.2b), ambos sin imponer la fracción másica. Por un lado, se ilustra el flujo másico local absorbido sin considerar el efecto de la termodifusión $\dot{m}_{abs}[D_T = 0]$. Obviamente, en este caso el flujo másico total (\dot{m}_{abs}) es igual al flujo másico absorbido como resultado del gradiente de fracción másica ($\dot{m}_{abs,D}$), ya que no existe la absorción como resultado de la diferencia de temperaturas ($\dot{m}_{abs,D_T}[D_T = 0] = 0$). Por otro lado, se presentan las tres expresiones diferentes del flujo de masa absorbido cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11} (\text{m}^2 \text{s}^{-1} \text{K}^{-1})$: el flujo de masa local debido al gradiente de fracción másica ($\dot{m}_{abs,D}$), el flujo local debido al gradiente de temperaturas (\dot{m}_{abs,D_T}) y la suma de ambos términos, esto es, el flujo de masa local absorbido total (\dot{m}_{abs}).

En el caso del método Fick 1D (Figura 6.2a), los resultados revelan que el flujo de absorción causado por el gradiente de fracción másica ($\dot{m}_{abs,D}$) en el caso con termodifusión es bastante mayor que el flujo total en el caso sin termodifusión ($\dot{m}_{abs}[D_T = 0]$). Asimismo, los resultados muestran que el incremento observado en este término es considerablemente superior al componente térmico (\dot{m}_{abs,D_T}). Al sumar ambos efectos, la mejora en la absorción es importante.

En cuanto al método de Higbie 1D (Figura 6.2b), la mejora total en la absorción es menor que en el caso de Fick 1D. En este caso la absorción no depende de la transferencia de masa próxima a la interface (esto es, no depende del gradiente de la fracción másica en la interface). Además, el incremento de la absorción aumenta la temperatura de la interface. Como resultado, en la mayor parte de la longitud el flujo de masa total local sin considerar la termodifusión ($\dot{m}_{abs}[D_T = 0]$) es mayor que el originado por el gradiente de fracción másica cuando se toma en cuenta la termodifusión ($\dot{m}_{abs,D}$). Por lo tanto, el incremento del flujo de absorción debido a la termodifusión está relacionado con el término térmico (\dot{m}_{abs,D_T}). Así, el incremento del flujo debido a la termodifusión es pequeño.

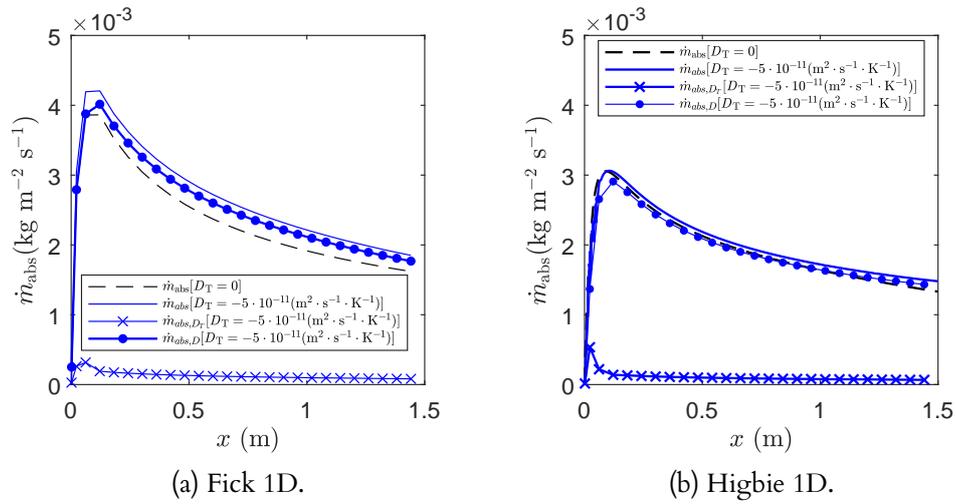


Figura 6.2: Efecto de la termodifusión en el flujo de masa absorbido total (\dot{m}_{abs}), flujo de masa absorbido originado por el gradiente de fracción másica ($\dot{m}_{abs,D}$) y el flujo de masa absorbido originado por el gradiente de temperaturas (\dot{m}_{abs,D_T}) a lo largo de la dirección longitudinal cuando $Re = 50$ para diferentes métodos:

Con el objetivo de comprender mejor el fenómeno, la Figura 6.3 muestra el esquema del fenómeno de transporte en un *falling film* vertical de la mezcla LiBr – H₂O en el caso de que el coeficiente de termodifusión es negativo ($D_T < 0$, Figura 6.3a) y cuando es positivo ($D_T > 0$, Figura 6.3b). Como el componente absorbido es el agua, éste ha sido considerado como referencia para señalar los mecanismos de transferencia de masa de la Figura 6.3. Así, $\mathbf{J}_{H_2O,D}$ es el flujo de transferencia de masa de la especie H₂O dentro de la mezcla líquida causado por el gradiente de fracción másica, mientras que \mathbf{J}_{H_2O,D_T} se origina por medio del gradiente de temperatura.

Cuando el coeficiente de termodifusión es negativo, $D_T < 0$, (Figura 6.3a), como resultado de la transferencia de masa térmica, el componente más denso del *film* líquido (en este caso LiBr) migra hacia la parte más caliente, mientras que el menos denso (en este caso H₂O) se dirige hacia la parte fría (\mathbf{J}_{H_2O,D_T}). Asimismo, en este caso, la transferencia de masa del agua dentro de la mezcla a causa del gradiente de fracción másica ($\mathbf{J}_{H_2O,D}$) también tiene la misma dirección debido al incremento de la fracción másica de agua como resultado de la absorción en la zona de la interface. Por lo tanto, ambos mecanismos de transferencia de masa se suman.

Por el contrario, cuando el coeficiente de termodifusión es positivo, $D_T > 0$ (Figura 6.3b), ambos términos tienen direcciones opuestas. Esto se debe a que el componente de transferencia de masa en base al gradiente térmico (\mathbf{J}_{H_2O,D_T}), en este caso cambia de dirección (parte hacia la zona caliente), mientras que la dirección de ($\mathbf{J}_{LiBr,D}$) continúa inalterada.

Además, cuando $D_T > 0$, como la dirección de la transferencia de masa en base al gradiente de temperatura del agua es hacia el exterior, no se genera la absorción producida por el efecto de la termodifusión (Figura 6.3b). Por el contrario, cuando $D_T < 0$, al migrar el agua hacia la parte fría por termodifusión, se genera una absorción a causa del mecanismo térmico ($\dot{m}_{abs\ H_2O,D_T} > 0$), así

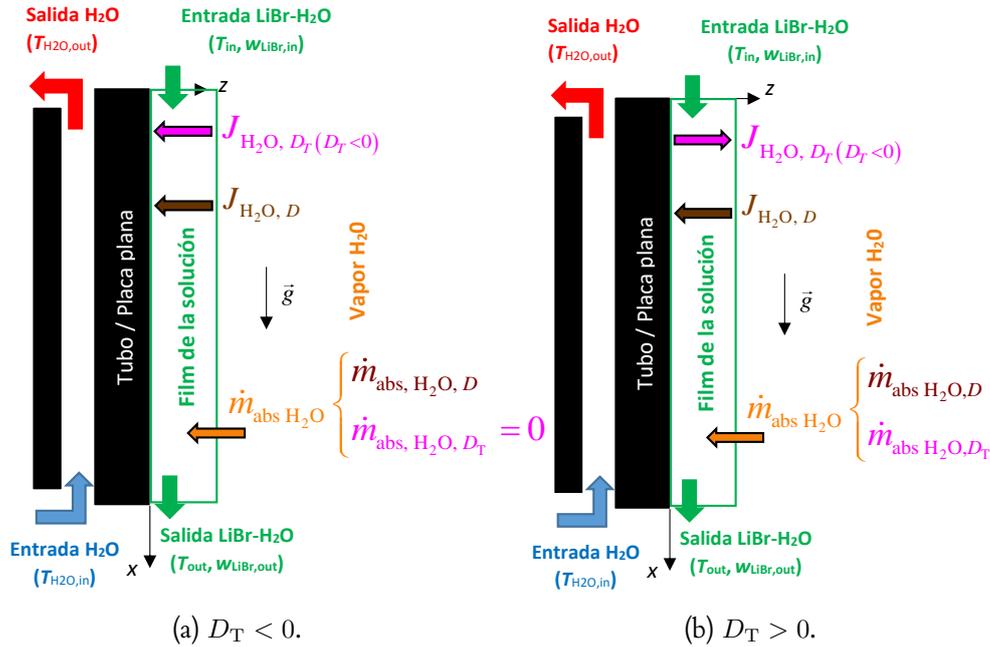


Figura 6.3: Esquema del fenómeno de transporte en un *falling film* vertical con la mezcla LiBr – H₂O para:

como la absorción debido al gradiente de fracción másica $\dot{m}_{abs, H_2O, D}$. Juntos, ambos efectos conllevan al incremento de la absorción total de agua en la interface, incrementando el calor generado.

En resumen, los resultados demuestran que el efecto de la termodifusión mejora la absorción en los absorbedores de LiBr – H₂O como resultado de la misma dirección de los dos mecanismos de transferencia de masa, el cual se debe a la naturaleza negativa del coeficiente de termodifusión de la mezcla. Este impacto ha sido mayor utilizando el método Fick 1D que en Higbie 1D. Asimismo, se ha observado que el método propuesto por Higbie no es capaz de considerar correctamente el efecto que tiene la termodifusión en la absorción, debido a que en esta teoría el componente másico del flujo de masa absorbido $\dot{m}_{abs, H_2O, D}$ no depende del transporte de masa en el interior del *film*. Una opción para tomarse en cuenta este fenómeno podría ser integrar la transferencia de masa térmica en el desarrollo definido por Higbie (Sección 1.4.2). Esto se podría lograr combinando la primera ley de Fick [118] (Ecuación (1.12)) y la Ecuación (6.1), para la obtención de la Ecuación (1.22). Sin embargo, este análisis no está directamente alineado con los objetivos de esta tesis doctoral. Por lo tanto, los modelos para el estudio de la influencia de la termodifusión se han realizado utilizando el método de Fick 1D sin imponer la fracción másica en la interface.

6.3.2 Análisis de la influencia de las condiciones de operación en la absorción

Efecto del coeficiente de termodifusión

Una vez estudiado el efecto de la termodifusión utilizando los dos métodos seleccionados en el Capítulo 5, se ha analizado la influencia de diferentes valores de D_T en la absorción estimada por medio del método Fick 1D sin imponer la fracción másica. La Figura 6.4 expone el flujo de masa local absorbido en la interface y en la dirección longitudinal para diferentes valores de D_T ($-5 \cdot 10^{-11} < D_T < 0$ ($\text{m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$)), cuando $\text{Re} = 50$.

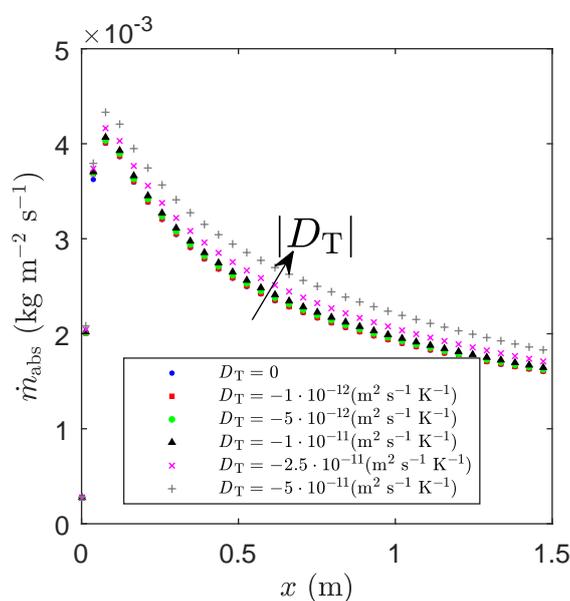


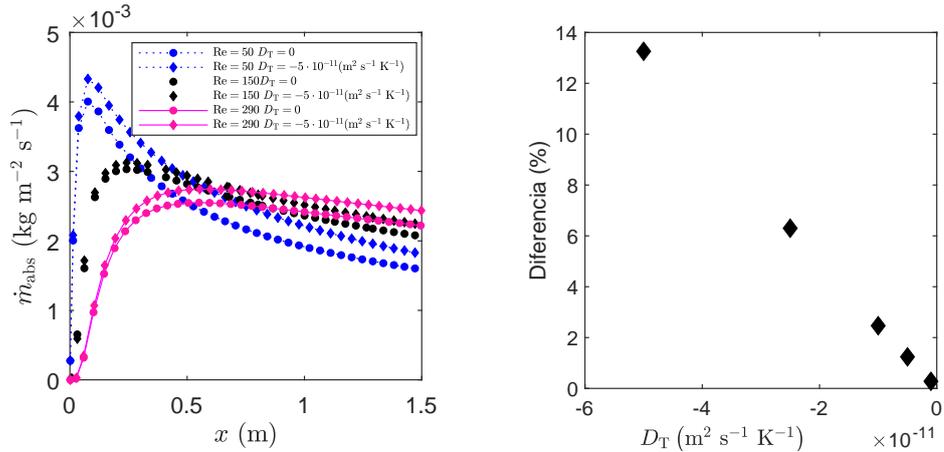
Figura 6.4: Flujo de masa de vapor absorbido en la interface para $\text{Re} = 50$ y para diferentes valores de D_T .

Los resultados de la Figura 6.4 ilustran que cuanto mayor es el valor absoluto de D_T , mayor es el flujo de masa total absorbido. Sin embargo, la mejora se hace más evidente a partir de $|D_T| > 1 \cdot 10^{-11}$ ($\text{m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$).

Con el objetivo de analizar este impacto cuantitativamente, la Figura 6.5 muestra el flujo de masa total promedio absorbido (Figura 6.5a) y la diferencia en porcentaje respecto al caso sin termodifusión (Figura 6.5b) para diferentes valores de D_T , cuando $\text{Re} = 50$.

Los resultados evidencian que la mejora en la absorción con el coeficiente de termodifusión tiende a una relación lineal. A partir de valores de $|D_T| > 1 \cdot 10^{-11}$ ($\text{m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}$), se obtienen incrementos mayores que el 2.5% en comparación con el caso sin considerar la termodifusión.

En lo que a termodifusión se refiere, hasta la actualidad, se ha prestado muy poca atención al rol del mecanismo térmico de la transferencia de masa térmica en la fracción másica y la temperatura en el interior del *film*. Los pocos estudios de investigación hasta la fecha se han centrado solamente sobre su efecto en la interface, en vez de en la parte interna del *film*. No obstante, la absorción depende



(a) Flujo de masa de vapor total promedio absorbido.

(b) Diferencia en porcentaje del flujo de masa total absorbido.

Figura 6.5: Influencia del coeficiente de difusión térmica D_T cuando $\text{Re} = 50$:

de la evolución de las variables termodinámicas en ambas partes. Asimismo, el estudio de los perfiles de las variables mencionadas proporciona una visión más amplia de la causa del incremento de la absorción. Con este objetivo, la Figura 6.6 presenta el perfil de la fracción másica de LiBr en la dirección transversal cuando $x = 0.5$ m para diferentes valores de D_T , cuando $\text{Re} = 50$.

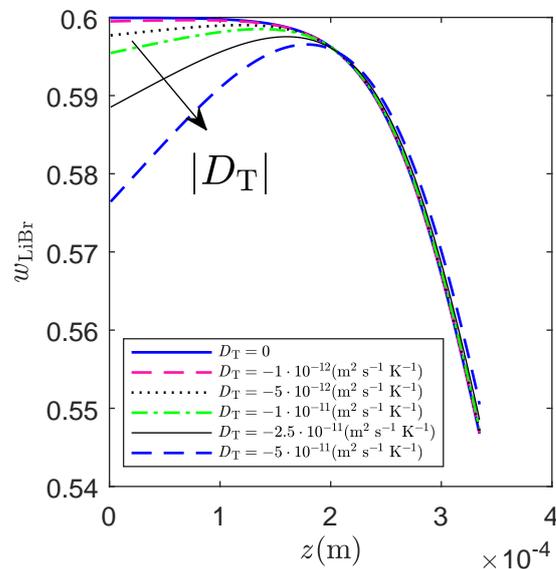


Figura 6.6: Perfil de la fracción másica de LiBr cuando $x = 0.5$ m a diferentes D_T cuando $\text{Re} = 50$.

El aspecto más resaltable de los resultados de la Figura 6.6 es que, al considerar la transferencia de masa térmica, el perfil de la fracción másica varía significativamente. Sin tener en cuenta los efectos de la termodifusión, la fracción másica de LiBr comienza a descender en la interface, como resultado de la absorción de vapor. Por el contrario, considerando el mecanismo térmico, la fracción másica

decrece en ambos extremos del *film* líquido, creando dos diferentes capas límites de fracción másica. La primera capa límite se genera debido al gradiente de temperatura en las zonas adyacentes a la pared fría (extremo izquierdo de la Figura 6.6), mientras que en la interface (extremo derecho de la Figura 6.6) se origina como resultado de ambos efectos en la interface (la absorción y el mecanismo térmico). Una implicación de esto es que, como consecuencia de la naturaleza negativa del efecto Soret, ambas transferencias de masa, una a causa del gradiente de fracción másica de la mezcla, y la otra debida al gradiente térmico, tienen la misma dirección en la interface. Por el contrario, en zonas cercanas a la pared fría, estas direcciones son opuestas, esto es, se crea el efecto Soret. En ambos casos, cuanto mayor es el valor absoluto de D_T , mayor es la disminución en la fracción másica en zonas adyacentes a la pared fría y, por consiguiente, el gradiente es superior.

Finalmente, se ha estudiado la influencia de D_T en el desempeño del absorbedor. La Figura 6.7 muestra la influencia del coeficiente de difusión térmica D_T en el flujo de calor promedio absorbido por el fluido de enfriamiento (Figura 6.7a) y la diferencia en porcentaje respecto al caso sin termodifusión (Figura 6.7b), ambas cuando $Re = 50$.

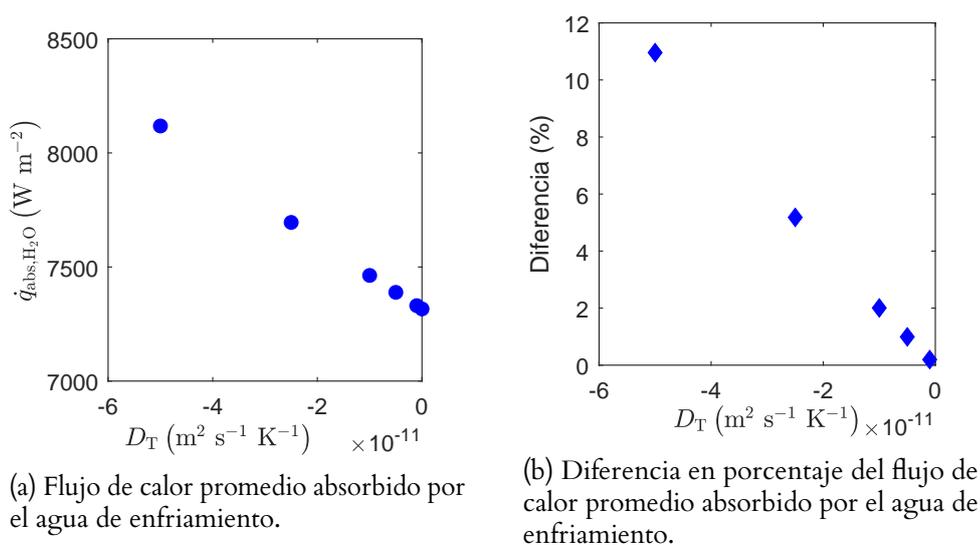


Figura 6.7: Influencia del coeficiente de termodifusión en el flujo de calor promedio absorbido por el agua de enfriamiento cuando $Re = 50$:

Tal y como ocurre con el flujo de vapor absorbido (Figura 6.5), el incremento en el flujo de calor crece linealmente con el valor absoluto del coeficiente de termodifusión. Sin embargo, esta mejora es ligeramente inferior a la obtenida en el flujo de masa absorbido. A pesar de ello, interesantemente, el flujo de calor absorbido por el absorbedor podría incrementarse en un 11 % cuando $Re = 50$.

En resumen, los resultados han mostrado que el incremento de la absorción (tanto de masa, como de calor) es linealmente proporcional al valor absoluto del coeficiente de termodifusión D_T . Por lo tanto, el uso de fluidos con altos valores negativos del coeficiente de termodifusión podría contribuir significativamente a la mejora de absorbedores. Asimismo, se ha observado que, a causa de la

termodifusión, se generan dos capas límites de fracción másica: una al lado de la pared fría, y la otra en la interface, las cuales varían la transferencia de masa en el interior del *film*.

Efecto del número de Reynolds

Hasta ahora se ha estudiado el efecto de la termodifusión con una sola condición de trabajo: $Re = 50$. Sin embargo, como se ha mostrado en el Capítulo 5, esta influencia puede variar con el número de Reynolds. Para analizar el efecto del número de Reynolds, en esta sección se han estudiado tres diferentes casos: $Re = 50$, $Re = 150$ y $Re = 290$, todos ellos considerando que el coeficiente de termodifusión es de $D_T = -5 \cdot 10^{-11} \text{ (m}^2 \text{ s}^{-1} \text{ K}^{-1})$. La Figura 6.8 presenta el flujo total local en la interface a lo largo de la dirección longitudinal, para los tres números de Reynolds mencionados; con y sin considerar el efecto de la termodifusión.

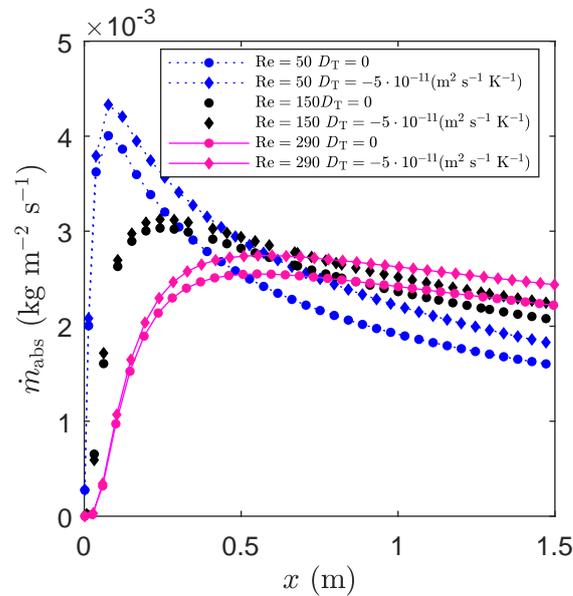


Figura 6.8: Flujo local de vapor total absorbido en la interface a lo largo de la dirección longitudinal para diferentes valores de Re y D_T .

Los resultados de la Figura 6.8 demuestran que el efecto de la termodifusión varía en función del número de Reynolds, siendo su impacto mayor a bajos números de Reynolds. Asimismo, a causa de que el espesor del *film* es inferior, se ha observado que cuanto menor es el número de Reynolds, antes comienza la mejora como resultado de la termodifusión.

Para realizar la comparación desde un punto de vista cuantitativo, la Figura 6.9 presenta el incremento de la absorción como resultado de la consideración de la termodifusión para $Re = 50$, $Re = 150$ y $Re = 290$.

Los resultados de la Figura 6.9 revelan que, a medida que el número de Reynolds aumenta, la mejora promedio debido a la transferencia de masa térmica es menor. Cuando $Re = 290$, el incremento de la absorción se reduce hasta casi

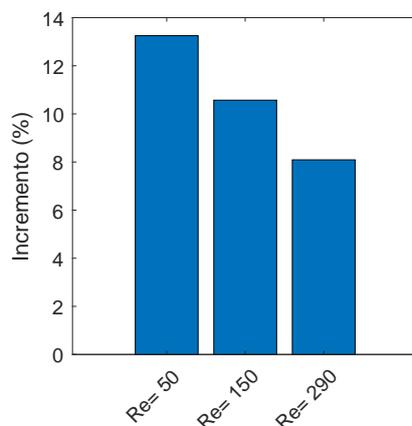


Figura 6.9: Incremento en porcentaje del flujo local de vapor total promedio absorbido para diferentes valores de Re cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$.

un 8 %, en comparación con el caso de $Re = 50$, en el cual el efecto es mayor que el 13 %.

Con el objetivo de estudiar detalladamente este fenómeno, la Figura 6.10 ilustra el perfil de la fracción másica en la dirección transversal del *film* para tres diferentes longitudes de flujo: $x = 0.1 \text{ m}$, $x = 0.5 \text{ m}$ y $x = 1.25 \text{ m}$; y para dos diferentes números de Reynolds: $Re = 50$ (Figura 6.10a) y $Re = 290$ (Figura 6.10b). Asimismo, en la Figura 6.10c se muestra un *zoom* de la Figura 6.10b.

Cuando $Re = 50$ (Figura 6.10a), al considerar la termodifusión la reducción de la fracción másica es mayor en la zona de la interface que al lado de la pared fría para las tres longitudes de flujo. Asimismo, el coeficiente D_T tiene una menor influencia cuando $x = 0.1 \text{ m}$ en comparación con las otras dos longitudes de flujo. Este hecho concuerda con lo observado en la Figura 6.8, ya que el efecto de la termodifusión es más evidente aguas abajo del pico máximo, el cual se encuentra en una longitud de flujo mayor que $x = 0.1 \text{ m}$. Además, al tomar en cuenta la termodifusión, los dos frentes de ambas capas límite todavía no han llegado a coincidir cuando $x = 0.1 \text{ m}$. Por el contrario, cuando $x = 0.5 \text{ m}$, las dos capas límite se han unido, por lo que todo el *film* ha tenido una reducción de la fracción másica aguas abajo de $x = 0.5 \text{ m}$. Por el contrario, cuando $D_T = 0$, solamente se crea una capa límite de fracción másica y el frente todavía no ha alcanzado la pared fría cuando $x = 1.25 \text{ m}$. Como consecuencia, las zonas adyacentes a esta pared no han sufrido ninguna variación en la fracción másica.

Por el contrario, cuando $Re = 290$ (Figura 6.10b) y el mecanismo térmico es tomado en cuenta, cuando $x = 0.1 \text{ m}$ la reducción de la fracción másica al lado de la pared es mayor que en la interface. En esta longitud de flujo, la capa límite térmica no acaba de desarrollarse y, por lo tanto, la absorción en la interface es muy pequeña, además de que el efecto de la termodifusión es casi inexistente en esta zona. Por esta razón, tal y como se ha mencionado en la Sección 6.3.2, el efecto de la termodifusión se retrasa con el aumento del número de Reynolds. En este caso, en concordancia con lo mostrado en la Figura 6.8, el efecto en la fracción másica es menor cuando $Re = 290$. Esto se debe, entre otros factores, al aumento del espesor y la velocidad de la interface. Al contrario que en el caso de

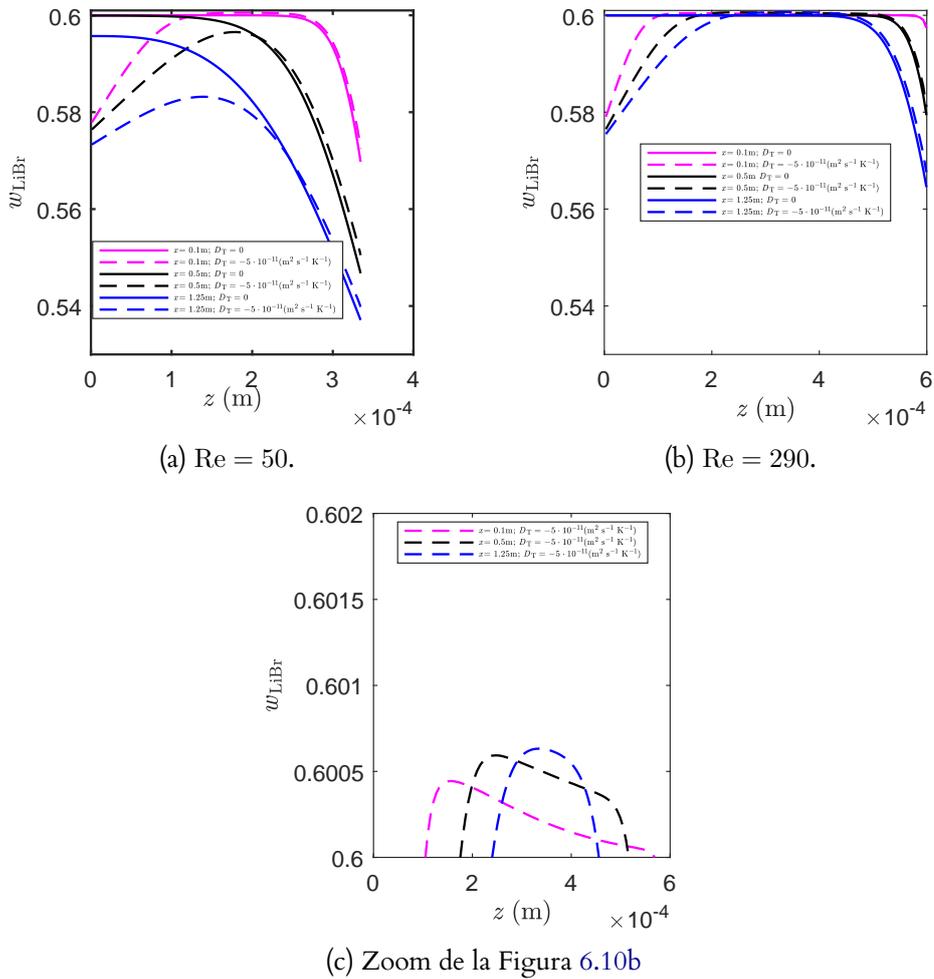


Figura 6.10: Perfil de la fracción másica de LiBr a lo largo de la dirección transversal del *film* para diferentes longitudes de flujo.

$Re = 50$, en este caso las capas límites no se unen. Además, en ambos casos se demuestra que se genera un descenso brusco de la fracción másica en las zonas adyacentes a la pared fría en las zonas cercanas a la entrada, mientras aguas abajo la velocidad de esta disminución ya no es tan notable. Por el contrario, cuando $D_T = 0$, solamente se crea una capa límite de fracción másica y el frente todavía no ha alcanzado la pared fría cuando $x = 1.25$ m. Como consecuencia, las zonas adyacentes a esta pared no han sufrido ninguna variación en la fracción másica.

Interesantemente, cuando $Re = 290$, como resultado del efecto Soret en la zona de la pared, donde los dos mecanismos tienen la misma dirección en la zona de la interface, la fracción másica de LiBr es mayor que la fracción másica inicial en algunas zonas centrales del *film* en las tres longitudes de flujo (Figura 6.10c). Esta zona disminuye con el aumento de la longitud de flujo.

Tal y como se ha definido en la Ecuación (6.4), el impacto del mecanismo térmico de transferencia de calor depende del gradiente de temperaturas. Por lo tanto, la evaluación del perfil de la temperatura dentro del *film* también tiene importancia para comprender su impacto. Para analizar esta influencia, la

Figura 6.11 representa el perfil de la temperatura en la dirección transversal con y sin considerar la termodifusión: $D_T = 0$ y $D_T = -5 \cdot 10^{-11} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$. Concretamente, la Figura 6.11a presenta para una misma longitud de flujo $x = 0.1 \text{ m}$, mientras que la Figura 6.11b muestra para un mismo número de Reynolds $Re = 290$.

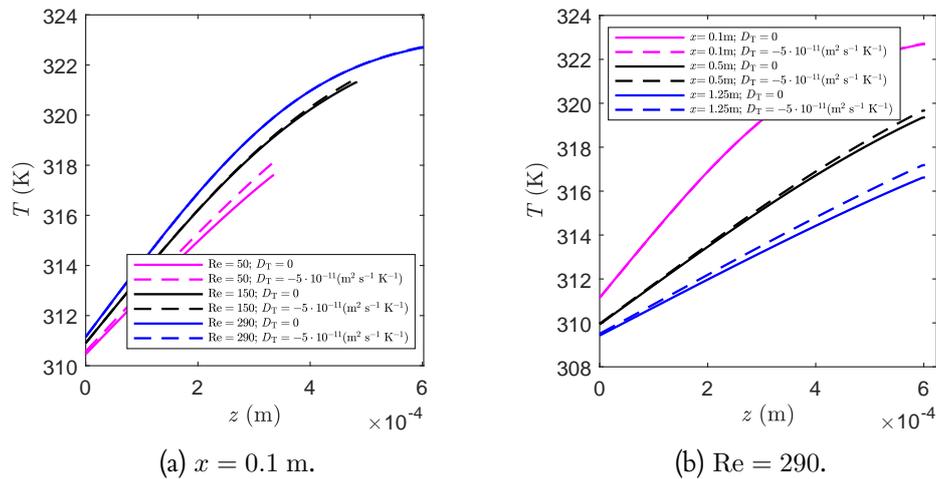


Figura 6.11: Perfil de la temperatura a lo largo de la dirección transversal del *film*.

Lo que destaca en la Figura 6.11 es que la consideración de la termodifusión implica un pequeño incremento en el gradiente térmico del *film*. Por lo tanto, el efecto del mecanismo térmico mejora tanto el transporte debido al gradiente de temperatura dentro del *film*, como la absorción causada por este mecanismo térmico. No obstante, el impacto no comienza hasta que el frente de la capa límite térmica alcanza la interface.

Los resultados de Figura 6.11a revelan que, cuando $x = 0.1 \text{ m}$, el efecto del mecanismo térmico de transferencia de masa es mayor cuando $Re = 50$. Esto se debe a que, la capa límite tiene que desarrollarse completamente para apreciar su influencia. En los casos de $Re = 150$ y $Re = 290$, como la capa límite no está completamente desarrollada cuando $x = 0.1 \text{ m}$, el perfil de temperatura es casi independiente de D_T . Por el contrario, existe un incremento significativo del gradiente de temperaturas como resultado de la termodifusión para $Re = 50$.

Por su lado, la Figura 6.11b muestra un comportamiento muy similar. A causa del desarrollo de la capa límite, el efecto de D_T solamente se puede apreciar en las mayores longitudes de flujo. Asimismo, una vez alcanza la interface el frente de la capa límite, como la capacidad de enfriamiento es mayor que el calor generado, el gradiente de temperatura se reduce aguas abajo. Estos resultados coinciden con los observados en el estudio del perfil de la fracción másica de LiBr (Figura 6.10).

Para concluir con la sección, se ha efectuado el análisis del desempeño del absorbedor para diferentes números de Reynolds. La Figura 6.12 revela el incremento en porcentaje del flujo de calor promedio absorbido por el agua de enfriamiento como resultado de la inclusión de la termodifusión.

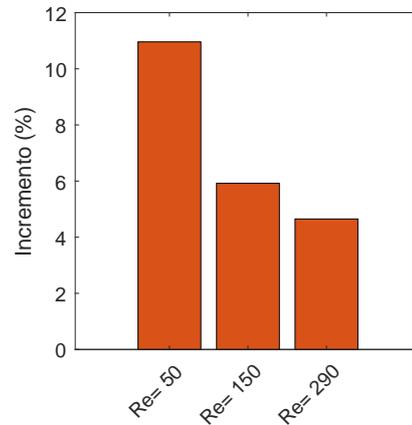


Figura 6.12: Incremento en porcentaje del flujo de calor promedio absorbido por el agua de enfriamiento para diferentes valores de Re cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$.

Los resultados de la Figura 6.12 muestran que, tal y como ocurre con el flujo de masa absorbido, el incremento en el flujo de calor disminuye exponencialmente con el número de Reynolds. Aun así, cuando $Re = 290$, el incremento obtenido ha sido del del 4.6 %, nada despreciable desde el punto de vista ingenieril.

Efecto de la transferencia de calor del agua de enfriamiento

Como se ha demostrado en la Sección 5.3.4, la capacidad de enfriamiento tiene efecto en la absorción, aun sin considerar el mecanismo de transferencia de masa bajo el gradiente térmico. Por consiguiente, realizando el análisis del perfil de temperaturas de la Figura 6.11, se prevé que igualmente impacte en el comportamiento de la termodifusión. Para estudiar esta influencia, se ha examinado el resultado de los diferentes coeficientes de convección analizados en la Sección 5.3.4: $2027 \leq h_{\text{H}_2\text{O}} \leq 8500 \text{ (W m}^{-2} \text{K}^{-1}\text{)}$.

La Figura 6.13 muestra el incremento en porcentaje del flujo de masa de vapor promedio absorbido como resultado de la termodifusión para diferentes coeficientes de convección cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$ y para dos diferentes números de Reynolds: $Re = 50$ y $Re = 290$.

Los resultados de la Figura 6.13 demuestran que el mecanismo de transferencia térmica depende de las condiciones de trabajo del fluido de enfriamiento, aunque el peso del vínculo con estas variables puede ser diferente en función del número de Reynolds. De acuerdo con los resultados, el coeficiente de convección aumenta el impacto de la termodifusión. Sin embargo, tal y como se ha observado en la Sección 5.3.4, esta mejora se satura a partir de $h_{\text{H}_2\text{O}} = 6000 \text{ W m}^{-2} \text{K}^{-1}$. Asimismo, el incremento conseguido con la termodifusión es similar para ambos números de Reynolds para la misma transferencia de calor del agua de enfriamiento.

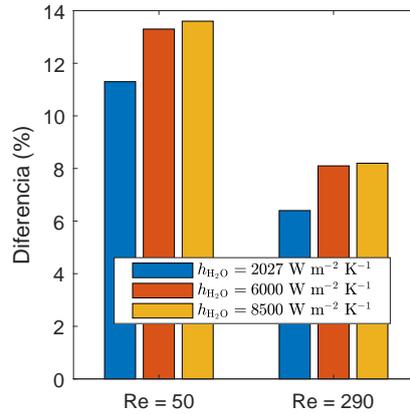


Figura 6.13: Incremento en porcentaje del flujo de masa de vapor promedio absorbido para diferentes valores de h_{H_2O} cuando $D_T = -5 \cdot 10^{-11} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$ y para $Re = 50$ y 290 .

Efecto de la fracción másica de LiBr inicial de la solución

Tal y como se ha mostrado tanto en los resultados de la Sección 5.3.4, como en los ensayos experimentales y modelos numéricos de la bibliografía [29, 50, 51, 129], la fracción másica inicial tiene un impacto muy grande en el comportamiento del absorbedor. Por consiguiente, en esta sección se ha examinado igualmente la diferencia existente en el efecto de la termodifusión. Para este cometido, la Figura 6.14 muestra la influencia de la termodifusión en la evolución del flujo local de masa absorbido para dos fracciones másicas ($w_{in,LiBr} = 0.6$ y $w_{in,LiBr} = 0.58$) y para dos números de Reynolds ($Re = 50$ y $Re = 290$)

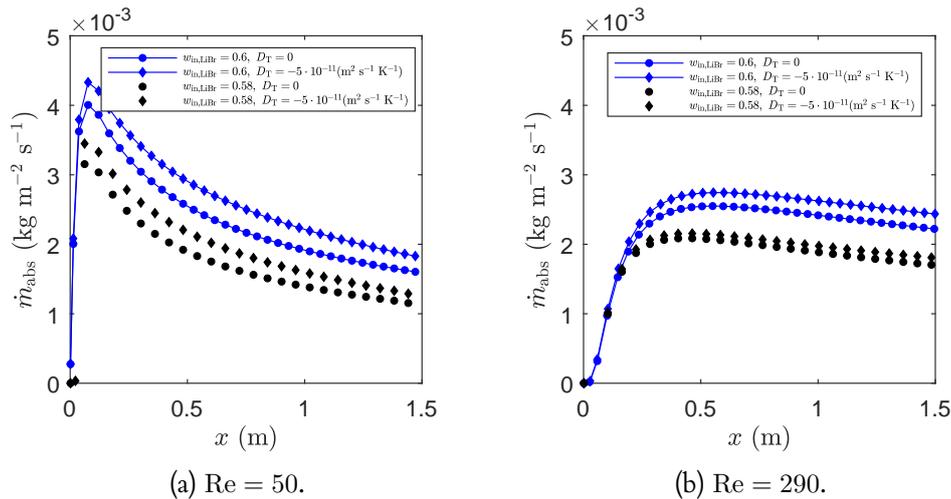


Figura 6.14: Flujo local de masa absorbido para diferentes fracciones másicas de la mezcla inicial ($w_{in,LiBr} = 0.6$ y $w_{in,LiBr} = 0.58$) con y sin coeficientes de termodifusión.

Los resultados de la Figura 6.14 muestran que la mejora atribuida a la termodifusión disminuye con el descenso de la fracción másica de entrada. Como

resultado de la notable diferencia en la absorción entre los dos números de Reynolds, esta caída es mayor para el caso de $Re = 290$, ya que la diferencia en el calor de absorción es igualmente importante, lo cual conlleva a la disminución del gradiente de la temperatura.

En resumen, en esta sección se ha demostrado que las condiciones de operación tienen influencia sobre el efecto de la termodifusión. Los resultados han mostrado que, cuanto menor es el número de Reynolds, la mejora en la absorción como consecuencia del mecanismo de transferencia de masa térmica es mayor. Sin embargo, esta influencia es igualmente altamente dependiente de la transferencia de calor del agua de enfriamiento y la fracción másica de entrada. Cuanto mayor son ambos parámetros, la mejora de la absorción por medio de la termodifusión es mayor.

6.4 Conclusiones

En este Capítulo 6 se ha analizado el efecto de la termodifusión en el rendimiento de absorbedores *falling film* verticales de LiBr – H₂O. Concretamente, se han definido modelos numéricos bifásicos 2D con el objetivo de analizar el comportamiento de la transferencia de masa en el absorbedor. Estos modelos han considerado tanto la absorción, como la transferencia de masa causada por los gradientes de concentración y temperatura. Por medio de la metodología definida, se ha analizado la absorción de la interface, los perfiles de temperatura y concentración dentro de la solución, así como la influencia de las condiciones de operación para diferentes números de Reynolds ($75 \leq Re \leq 290$) y diferentes valores del coeficiente de termodifusión ($-5 \cdot 10^{-11} \leq D_T \leq -1 \cdot 10^{-12} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}$).

Se ha comparado el efecto que tiene la consideración de la termodifusión en las dos metodologías escogidas en el Capítulo 5: Fick 1D y Higbie 1D, ambas sin imponer la fracción másica en la interface. Los resultados han indicado que, en general, como consecuencia de la naturaleza negativa del efecto Soret de la mezcla LiBr – H₂O, el impacto de la termodifusión incrementa la absorción de vapor en *falling films* verticales. Este aumento es significativamente mayor al usar la metodología Fick, en comparación con el método Higbie. Asimismo, se ha observado que la metodología de Higbie no es capaz de tomar en cuenta el efecto de la termodifusión para la estimación de la absorción, el cual se podría considerar integrando la transferencia de masa térmica en el desarrollo original propuesto por Higbie.

Una vez seleccionada la metodología Fick 1D sin imponer la fracción másica, se ha estudiado la influencia del coeficiente de termodifusión y las diferentes condiciones de operación en la absorción: el número de Reynolds, la transferencia de calor del agua de enfriamiento y la fracción másica de entrada de la mezcla binaria. Los resultados han revelado que, cuanto mayor es el valor absoluto negativo del coeficiente D_T , mayor es igualmente la absorción de vapor. Por lo tanto, por medio del uso de fluidos con un alto valor absoluto del coeficiente negativo D_T , el absorbedor podría ser menor, mejorando la rentabilidad de los transformadores de calor, bombas de calor y enfriadores. Sin embargo, se requiere investigar más en el desarrollo de este tipo de fluidos para mejorar la rentabilidad de estas máquinas.

Bajo las condiciones de este estudio, la mejora obtenida es mayor para bajos números de Reynolds, y decrece con el incremento del número de Reynolds. Asimismo, se ha observado que la mejora del efecto de la termodifusión a raíz del aumento de la carga de enfriamiento se satura a partir de un valor específico del coeficiente de convección. Además, se ha observado que este impacto es menor cuando se reduce la fracción másica de entrada.

De la misma forma, los resultados han evidenciado que, en las condiciones investigadas, al considerar los efectos de la transferencia de masa térmica, la capa límite de fracción másica comienza a desarrollarse en ambos lados del *film*, esto es, adyacente a la pared fría y al lado de la interface. Sin embargo, al no considerar este efecto, el gradiente de fracción másica solamente se localiza en la interface. Asimismo, el mecanismo térmico también aumenta el gradiente de la temperatura dentro del *film*. Los resultados de esta sección indican que en mezclas con altos valores absolutos de D_T negativos, se deberían de considerar estas diferencias en los perfiles.

No obstante, todavía quedan varias cuestiones a resolver. Se prevé esencial la determinación experimental de D_T de la mezcla LiBr – H₂O a diferentes fracciones másicas con el objetivo de confirmar su influencia. La determinación experimental del coeficiente D_T de la mezcla LiBr – H₂O sería interesante para cuantificar el efecto real de la transferencia de masa bajo el gradiente de temperatura en el rendimiento de los absorbedores y así poder comparar con los resultados experimentales disponibles en la bibliografía.

7 | CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS

En esta Sección se presentan las conclusiones obtenidas en esta tesis doctoral, además de las líneas futuras propuestas.

7.1 Conclusiones

En concordancia con los objetivos definidos, en esta tesis doctoral se ha definido una metodología numérica basada en el FVM para el estudio del impacto de las propiedades termofísicas y las condiciones de operación en el comportamiento de absorbedores de $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$. Principalmente, en este trabajo se ha analizado la influencia que tienen las propiedades de mojabilidad y el coeficiente de termodifusión, junto con el número de Reynolds, la transferencia de calor del agua de enfriamiento y la fracción másica de LiBr de entrada en diferentes tipos de absorbedores que operan con la mezcla binaria $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$.

Para estudiar el comportamiento transitorio del flujo para diferentes ángulos de contacto, se ha definido una herramienta numérica 3D transitoria de flujo bifásico que incluye las propiedades de mojabilidad en los intercambiadores *falling film* de tubos horizontales, el cual ha sido validado mediante los trabajos de la bibliografía. Los resultados han evidenciado que las propiedades de mojabilidad tienen una gran influencia en el comportamiento del flujo, y se recomienda considerarlo en los análisis de absorbedores de $\text{LiBr} - \text{H}_2\text{O}$ donde no se logre la mojabilidad completa. Para una condición de operación dada, el ángulo de contacto puede variar el modo de flujo y, por lo tanto, la evolución transitoria de los valores de la hidrodinámica, el espesor del film (tanto en la dirección radial, como en la axial) y el ratio de mojado. Asimismo, se ha observado que cuanto mayor es el ángulo de contacto, menor es el área de mojado. Así, se ha demostrado que existe un ángulo de contacto máximo para lograr mojabilidad completa para unas condiciones de operación dadas y que, bajo ciertas condiciones de operación, el objetivo de mojabilidad completa es inalcanzable.

Además, con el objetivo de desarrollar una metodología numérica para el análisis de la transferencia de calor y masa en absorbedores, se ha realizado la comparación entre las diferentes metodologías para la consideración y determinación de la absorción de absorbedores *falling film* basado en tres diferentes criterios:

1. Metodología para considerar la absorción: Imponer las condiciones de equilibrio vs no imponer.

2. Procedimiento de determinar el flujo de vapor absorbido: Fick vs Higbie.
3. Hipótesis de difusión en la interface: 1D vs 2D.

Esta comparación ha proporcionado el desarrollo de un modelo numérico 2D de flujo bifásico para intercambiadores de tipología vertical. Los resultados apoyan la idea de que la metodología tiene un impacto considerable en los resultados de la absorción. Además, en esta tesis doctoral se ha demostrado que cuando se usa el método impuesto Fick1D, se pueden obtener resultados incoherentes desde el punto de vista físico y, por esta razón, este método ha sido descartado. Como la presión de vapor del LiBr es despreciable, se ha considerado difusión unidireccional en la interface. Los métodos seleccionados después de realizar el estudio comparativo han sido Fick 1D y Higbie 1D sin imponer la fracción másica, modelizando la interface en una sola celda y considerando propiedades termofísicas constantes.

Ambos métodos muestran tendencias similares en el análisis del impacto de las condiciones de operación. No obstante, la absorción determinada con Fick 1D ha sido superior y ha mostrado mayor sensibilidad a las variaciones de la fracción másica en la interface como resultado de la absorción. Sin embargo, el bajo coste computacional de Higbie 1D, junto con una posible futura reformulación del tiempo de contacto, podrían convertirlo igualmente en un método muy atractivo.

Ambas metodologías han sido comparadas con tres trabajos experimentales [51–53] de la bibliografía. La metodología Fick 1D ha demostrado mayor fiabilidad debido a que la mayor parte de los resultados están dentro del rango de incertidumbre de medida de los ensayos, verificando la metodología propuesta para el análisis de fenómenos locales de la transferencia de calor y masa en absorbedores de LiBr – H₂O.

Asimismo, en esta metodología propuesta se ha estudiado la absorción y la transferencia de masa generada en el líquido debido al fenómeno de termodifusión. Por consecuencia de su menor sensibilidad a los cambios de la fracción másica cercanas a la interface, la metodología de Higbie no es capaz de representar correctamente este efecto, aunque esta carencia se podría solventar integrando el mecanismo térmico en el desarrollo original de Higbie.

Los resultados de este estudio indican que, como consecuencia de la naturaleza negativa del efecto Soret de la mezcla LiBr – H₂O, el efecto de la termodifusión incrementa la absorción, siendo mayor cuanto más alto es el valor absoluto del coeficiente de termodifusión. La mejora aumenta con el descenso del número de Reynolds, el incremento de la carga de refrigeración y el aumento de la fracción másica de LiBr de entrada.

7.2 Líneas futuras

Debido a la complejidad de los fenómenos de transferencia de calor y masa que ocurren en los absorbedores de LiBr – H₂O, todavía quedan bastantes preguntas que responder.

En estos momentos, sería interesante realizar las mediciones del ángulo de avance y retroceso, junto con el dinámico, de la mezcla de LiBr – H₂O. Asimismo,

se necesitan estudios experimentales de la mojabilidad a nivel local del área de mojado de los diferentes configuraciones de FFHX (tubo horizontal, placa vertical, tubo vertical,...) bajo diferentes condiciones de operación. En estos análisis se considera muy importante que el tipo de distribuidor no influya en los resultados. Por esta razón, se recomienda ejecutar el análisis a nivel local. Por medio de estos dos estudios, se podrían relacionar las propiedades de mojabilidad con el área de mojado. En paralelo, sería recomendable incluir los diferentes ángulos en la metodología 3D propuesta en este estudio para determinar cuál es el ángulo característico para el análisis numérico de la mojabilidad de diferentes configuraciones de FFHX de LiBr – H₂O y así optimizar su geometría. Una vez alcanzado esta meta, sería interesante igualmente estudiar el efecto del distribuidor en la mojabilidad, tanto numérica, como experimentalmente.

También se recomienda encarecidamente una mayor investigación experimental de los fenómenos de absorción a nivel local, sobre todo cerca de la interface. La hipótesis de la condición de equilibrio empleada en la inmensa mayoría de los modelos de la literatura puede tener limitaciones en función de la aplicación y los próximos estudios podrían evaluar la transitoriedad de la evolución de la fracción másica en la interface, junto con la idoneidad de esta hipótesis. Junto a ello, convendría comprender el fenómeno de las inestabilidades debidas al efecto Marangoni que ocurre cuando se absorbe la molécula de surfactante añadida a la mezcla LiBr – H₂O, empleando tanto bancos de ensayos, como modelos numéricos a nivel local. Este fenómeno mejora sustancialmente la absorción y su control podría incrementar significativamente la rentabilidad de la tecnología de absorción. Junto a ello, los futuros estudios también deberían de concretar el impacto de la termodifusión y el flujo ondulado en la absorción. Profundizar en ambos conocimientos ayudaría a establecer y cuantificar su efecto y, en caso de ser considerable, abriría nuevas líneas de investigación en el desarrollo de nuevos fluidos orientados a la tecnología de absorción.

En paralelo, también se necesita investigar más para extrapolar la metodología propuesta para el análisis local de la transferencia de calor y masa a modelos 3D de diferentes configuraciones de FFHXs y validarlos experimentalmente. Sería interesante ir incluyendo los avances comentados anteriormente en este modelo 3D. Además, convendría profundizar en nuevas formulaciones basadas en la ley de Higbie para obtener resultados más acordes a los ensayos experimentales. El bajo coste computacional necesario para la aplicación de esta ley puede dar pie en un futuro a modelos 3D robustos más ágiles.

PUBLICACIONES

Artículos de revista

- Fernandez de Arroiabe, P., A. Martinez-Urrutia, X. Peña, M. Martinez-Agirre, and M. Mounir Bou-Ali. On the Thermodiffusion Effect in Vertical Plate Heat Exchangers. *European Physical Journal E*. 42, no. 7 (2019). <https://doi.org/10.1140/epje/i2019-11850-7>.
- Martinez-Urrutia, Asier, Peru Fernandez de Arroiabe, Miguel Ramirez, Manex Martinez-Agirre, and M. Mounir Bou-Ali. Contact Angle Measurement for LiBr Aqueous Solutions on Different Surface Materials Used in Absorption Systems. *International Journal of Refrigeration* 95 (2018): 182–88. <https://doi.org/10.1016/J.IJREFRIG.2018.05.041>.
- Fernandez de Arroiabe, Peru, Asier Martinez-Urrutia, Xabier Peña, Manex Martinez-Agirre, and M. Mounir Bou-Ali. Influence of the Contact Angle on the Wettability of Horizontal-Tube Falling Films in the Droplet and Jet Flow Modes. *International Journal of Refrigeration* 90 (2018): 12–21. <https://doi.org/10.1016/j.ijrefrig.2018.04.003>.

Bajo revisión

- Fernandez de Arroiabe, P., M. Martinez-Agirre, and M. Mounir Bou-Ali. Numerical analysis of different mass transfer models for falling film absorbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer* (2021).

Conferencias

- Peru Fernandez de Arroiabe, Asier Martinez-Urrutia, Xabier Peña, Manex Martinez-Agirre, M. Mounir Bou-Ali. Study of the contact angle influence on horizontal-tube falling film absorbers. *International Conference on Materials and Energy (ICOME)*. San Sebastián. 30 April- 4 May, 2018.
- A. Martinez Urrutia, P. Fernandez Arroiabe, M. Ramírez, M. Brizuela, M. Martinez-Agirre, M. M. Bou-Ali. Experimental analysis of the wetted area on horizontal-tubes falling film heat exchangers. *International Conference on Materials and Energy (ICOME)*. San Sebastián. 30 April- 4 May, 2018.

- P. Fernandez Arroiabe, A. Martinez Urrutia, L. Alonso, M. Martinez-Agirre, M. M. Bou-Ali. CFD simulation of the influence of contact angle in falling film heat exchangers. *13ème Congrès de Mécanique*. Meknès. 11-14 Avril, 2017.
- A. Martinez Urrutia, P. Fernandez Arroiabe, M. Martinez-Agirre, M. M. Bou-Ali, S. Sáinz, M. Brizuela. Lithium Bromide contact angle study on different roughness stainless steel surfaces. *International Sorption Heat Pump Conference (ISHPC)*. Tokyo. 7-10 August, 2017.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Clemens Forman, Ibrahim Kolawole Muritala, Robert Pardemann, and Bernd Meyer. Estimating the global waste heat potential. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 57:1568–1579, 2016.
- [2] Frauke Schorcht, Ioanna Kourti, Bianca Maria Scalet, Serge Roudier, and Luis Delgado Sancho. Best Available Techniques (BAT) Reference Document for the Production of Cement, Lime and Magnesium Oxide: Industrial Emissions Directive 2010/75/EU:(Integrated Pollution Prevention and Control). Technical report, European IPPC Bureau, Sevilla, Spain, 2013.
- [3] Laia Miró, Sarah Brueckner, Russell McKenna, and Luisa F. Cabeza. Methodologies to estimate industrial waste heat potential by transferring key figures: A case study for Spain. *Applied Energy*, 169:866–873, 2016.
- [4] Sarah Brückner, Selina Liu, Laia Miró, Michael Radspieler, Luisa F Cabeza, and Eberhard Lävemann. Industrial waste heat recovery technologies : An economic analysis of heat transformation technologies. *Applied Energy*, 151:157–167, 2015.
- [5] W. Rivera, R. Best, M. J. Cardoso, and R. J. Romero. A review of absorption heat transformers. *Applied Thermal Engineering*, 91:654–670, 2015.
- [6] Adnan Sözen and H. Serdar Yücesu. Performance improvement of absorption heat transformer. *Renewable Energy*, 32(2):267–284, 2007.
- [7] Ilhami Horuz and Bener Kurt. Absorption heat transformers and an industrial application. *Renewable Energy*, 35(10):2175–2181, 2010.
- [8] K.E. Herold, R. Radermacher, and S.A. Klein. *Absorption Chillers and Heat Pumps*. CRC Press, Taylor & Francis Group, 2016.
- [9] Juan Yin, Lin Shi, Ming Shan Zhu, and Li Zhong Han. Performance analysis of an absorption heat transformer with different working fluid combinations. *Applied Energy*, 67(3):281–292, 2000.
- [10] J.S. Currie and C.L. Pritchard. Energy recovery and plume reduction from an industrial spray drying unit using an absorption heat transformer. *Journal of Recovery Systems*, 14(3):239–248, may 1994.

- [11] K. Abrahamsson, A. Gidner, and Å Jernqvist. Design and experimental performance evaluation of an absorption heat transformer with self-circulation. *Journal of Recovery Systems*, 15(3):257–272, 1995.
- [12] A. Gidner, Å. Jernqvist, and G. Aly. An energy efficient evaporation process for treating bleach plant effluents. *Applied Thermal Engineering*, 16(1):33–42, jan 1996.
- [13] M. Scott, Å. Jernqvist, J. Olsson, and G. Aly. Experimental and theoretical study of an open multi-compartment absorption heat transformer for different steam temperatures. Part I: hydrodynamic and heat transfer characteristics. *Applied Thermal Engineering*, 19(3):279–298, 1999.
- [14] M. Scott, Å. Jernqvist, and G. Aly. Experimental and theoretical study of an open multi-compartment absorption heat transformer for different steam temperatures. Part III: application to process industry. *Applied Thermal Engineering*, 19(4):431–448, 1999.
- [15] Rabah Gomri. Thermal seawater desalination: Possibilities of using single effect and double effect absorption heat transformer systems. *Desalination*, 253(1-3):112–118, 2010.
- [16] W. Rivera, H. Martínez, J. Cerezo, R. J. Romero, and M. J. Cardoso. Exergy analysis of an experimental single-stage heat transformer operating with single water/lithium bromide and using additives (1-octanol and 2-ethyl-1-hexanol). *Applied Thermal Engineering*, 31(16):3525–3532, 2011.
- [17] Yasmine Ammar, Hanning Li, Conor Walsh, Patricia Thornley, Vida Sharifi, and Anthony P. Roskilly. Desalination using low grade heat in the process industry: Challenges and perspectives. *Applied Thermal Engineering*, 48:446–457, 2012.
- [18] Xuehu Ma, Jiabin Chen, Songping Li, Qingyun Sha, Aiming Liang, Wei Li, Jiayan Zhang, Guojun Zheng, and Zhihao Feng. Application of absorption heat transformer to recover waste heat from a synthetic rubber plant. *Applied Thermal Engineering*, 23(7):797–806, 2003.
- [19] Wei Wu, Baolong Wang, Wenxing Shi, and Xianting Li. Absorption heating technologies: A review and perspective. *Applied Energy*, 130:51–71, 2014.
- [20] H Martínez and W Rivera. Energy and exergy analysis of a double absorption heat transformer operating with water/lithium bromide. *International Journal of Energy Research*, 31(August 2007):135–147, 2009.
- [21] Philip Donnellan, Edmond Byrne, and Kevin Cronin. Internal energy and exergy recovery in high temperature application absorption heat transformers. *Applied Thermal Engineering*, 56(1-2):1–10, 2013.
- [22] J. Ibarra-Bahena, R. J. Romero, L. Velazquez-Avelar, C. V. Valdez-Morales, and Y. R. Galindo-Luna. Evaluation of the thermodynamic effectiveness of a plate heat exchanger integrated into an experimental

- single stage heat transformer operating with Water/Carrol mixture. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 51:257–263, 2013.
- [23] W. Rivera, M.J. Cardoso, and R.J. Romero. Single-stage and advanced absorption heat transformers operating with lithium bromide mixtures used to increase solar pond's temperature. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 70(3):321–333, 2001.
- [24] W. Rivera and J. Cerezo. Experimental study of the use of additives in the performance of a single-stage heat transformer operating with water-lithium bromide. *International Journal of Energy Research*, 29(2):121–130, feb 2005.
- [25] Philip Donnellan, Kevin Cronin, and Edmond Byrne. Recycling waste heat energy using vapour absorption heat transformers: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 42:1290–1304, 2015.
- [26] Md Raisul Islam, N. E. Wijesundera, and J. C. Ho. Performance study of a falling-film absorber with a film-inverting configuration. *International Journal of Refrigeration*, 26(8):909–917, 2003.
- [27] Jesse D. Killion and Srinivas Garimella. Gravity-driven flow of liquid films and droplets in horizontal tube banks. *International Journal of Refrigeration*, 26(5):516–526, 2003.
- [28] Jonathan Ibarra-Bahena and Rosenberg J. Romero. Performance of different experimental absorber designs in absorption heat pump cycle technologies: A review. *Energies*, 7(2):751–766, 2014.
- [29] Jung In Yoon, Thanh Tong Phan, Choon Geun Moon, and Pradeep Bansal. Numerical study on heat and mass transfer characteristic of plate absorber. *Applied Thermal Engineering*, 25(14-15):2219–2235, 2005.
- [30] R. Ventas, A. Lecuona, M. Legrand, and M.C. Rodríguez-Hidalgo. On the recirculation of ammonia-lithium nitrate in adiabatic absorbers for chillers. *Applied Thermal Engineering*, 30(17):2770–2777, 2010.
- [31] Yong Tae Kang, Atsushi Akisawa, and Takao Kashiwagi. Analytical investigation of two different absorption modes: falling film and bubble types. *International Journal of Refrigeration*, 23(6):430–443, sep 2000.
- [32] Faisal Asfand, Youssef Stiriba, and Mahmoud Bourouis. CFD simulation to investigate heat and mass transfer processes in a membrane-based absorber for water-LiBr absorption cooling systems. *Energy*, 91:517–530, 2015.
- [33] Nitin Goel and D. Yogi Goswami. A Compact Falling Film Absorber. *Journal of Heat Transfer*, 127(9):957, 2005.
- [34] S. Jeong and Srinivas Garimella. Optimal Design of Compact Horizontal Tube LiBr / Water Optimal Design of Compact Horizontal Tube LiBr / Water Absorbers. *HVAC&R Research*, 11:1(July 2013):27–44, 2005.

- [35] Alireza Behfar, Ziqi Shen, Josephine Lau, and Yuebin Yu. Heat and mass transfer enhancement potential on falling film absorbers for water-LiBr mixtures via a literature review (RP-1462). *HVAC&R Research*, 20(5):570–580, 2014.
- [36] José Fernández-Seara and Ángel Á Pardiñas. Refrigerant falling film evaporation review: Description, fluid dynamics and heat transfer. *Applied Thermal Engineering*, 64(1-2):155–171, 2014.
- [37] Chan Woo Park, Sung Soo Kim, Hyun Churl Cho, and Yong Tae Kang. Experimental correlation of falling film absorption heat transfer in micro-scale hatched tubes. *International Journal of Refrigeration*, 26(7):758–763, 2003.
- [38] S. M. Deng and W. B. Ma. Experimental studies on the characteristics of an absorber using LiBr/H₂O solution as working fluid. *International Journal of Refrigeration*, 22(4):293–301, 1999.
- [39] Md Raisul Islam. Absorption process of a falling film on a tubular absorber: An experimental and numerical study. *Applied Thermal Engineering*, 28(11-12):1386–1394, 2008.
- [40] I Kyung, Keith E. Herold, and Yong Tae Kang. Model for absorption of water vapor into aqueous LiBr flowing over a horizontal smooth tube. *International Journal of Refrigeration*, 30(4):591–600, 2007.
- [41] Ananda Krishna Nagavarapu and Srinivas Garimella. Falling-Film Absorption Around Microchannel Tube Banks. *Journal of Heat Transfer*, 135(12):122001, 2013.
- [42] S Seol and Sang Hyuk Lee. Experimental study of film flow and heat/mass transfer in LiBr–H₂O solution flowing over a cooled horizontal tube. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 32:445–453, 2005.
- [43] Huan Zhang, Dazhen Yin, Shijun You, Wandong Zheng, and Shen Wei. Experimental investigation of heat and mass transfer in a LiBr–H₂O solution falling film absorber on horizontal tubes: Comprehensive effects of tube types and surfactants. *Applied Thermal Engineering*, 146(July 2018):203–211, 2019.
- [44] L. Hoffmann, I. Greiter, A. Wagner, V. Weiss, and G. Alefeld. Experimental investigation of heat transfer in a horizontal tube falling film absorber with aqueous solutions of LiBr with and without surfactants. *International Journal of Refrigeration*, 19(5 SPEC. ISS.):331–341, 1996.
- [45] Ick-Soo Kyung and Keith E Herold. Performance of Horizontal Smooth Tube Absorber With and Without 2-Ethyl-Hexanol . *Journal of Heat Transfer*, 124(1):177–183, jun 2001.
- [46] J. I. Yoon, E. Kim, K. H. Choi, and W. S. Seol. Heat transfer enhancement with a surfactant on horizontal bundle tubes of an absorber. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(4):735–741, 2001.

- [47] Daniel Bredow, Priyank Jain, Arnold Wohlfeil, and Felix Ziegler. Heat and mass transfer characteristics of a horizontal tube absorber in a semi-commercial absorption chiller. *International Journal of Refrigeration*, 31(7):1273–1281, 2008.
- [48] Jin Kyeong Kim, Chan Woo Park, and Yong Tae Kang. The effect of micro-scale surface treatment on heat and mass transfer performance for a falling film H₂O/LiBr absorber. *International Journal of Refrigeration*, 26(5):575–585, 2003.
- [49] Jung-in Yoon, Oh-kyung Kwon, and Choon-geun Moon. Experimental investigation of heat and mass transfer in absorber with enhanced tubes. *KSME International Journal*, 13(9):640–646, 1999.
- [50] William a. Miller and Majid Keyhani. The Correlation of Simultaneous Heat and Mass Transfer Experimental Data for Aqueous Lithium Bromide Vertical Falling Film Absorption. *Journal of Solar Energy Engineering*, 123(1):30, 2001.
- [51] Marc Medrano, Mahmoud Bourouis, and Alberto Coronas. Absorption of water vapour in the falling film of water – lithium bromide inside a vertical tube at air-cooling thermal conditions. *International Journal of Thermal Sciences*, 41:891–898, 2002.
- [52] Hiroshi Takamatsu, Hikaru Yamashiro, Nobuo Takata, and Hiroshi Honda. Vapor absorption by LiBr aqueous solution in vertical smooth tubes. *International Journal of Refrigeration*, 26(6):659–666, 2003.
- [53] E. García-Rivera, J. Castro, J. Farnós, and A. Oliva. Numerical and experimental investigation of a vertical LiBr falling film absorber considering wave regimes and in presence of mist flow. *International Journal of Thermal Sciences*, 109:342–361, 2016.
- [54] E. García-Rivera, J. Castro, J. Farnós, and C. Oliet. Numerical and experimental study of absorption of H₂O vapor in wavy falling film of LiBr aqueous solution in vertical tubes and in presence of non-absorbables. *International Journal of Refrigeration*, 100:184–195, 2019.
- [55] D. S. Kim and C. A. Infante Ferreira. Analytic modelling of a falling film absorber and experimental determination of transfer coefficients. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(21-22):4757–4765, 2009.
- [56] D. S. Kim and C. A. Infante Ferreira. Flow patterns and heat and mass transfer coefficients of low Reynolds number falling film flows on vertical plates: Effects of a wire screen and an additive. *International Journal of Refrigeration*, 32(1):138–149, 2009.
- [57] Nitin Goel and D Yogi Goswami. Experimental verification of a new heat and mass transfer enhancement concept in a microchannel falling film absorber. *Journal of Heat Transfer*, 129(2):154–161, 2007.
- [58] Jung-In Yoon, Oh-Kyung Kwon, P.K. Bansal, Choon-Geun Moon, and Ho-Saeng Lee. Heat and mass transfer characteristics of a small helical absorber. *Applied Thermal Engineering*, 26(2-3):186–192, 2006.

- [59] Ben Hafsia Nabil, Chaouachi Bechir, and Gabsi Slimane. Global modeling of heat and mass transfers in spiral tubular absorber of a water–lithium bromide absorption chiller. *International Journal of Refrigeration*, 38(1):323–332, 2014.
- [60] Nabil Ben Hafsia, Bechir Chaouachi, and Slimane Gabsi. A study of the coupled heat and mass transfer during absorption process in a spiral tubular absorber. *Applied Thermal Engineering*, 76:37–46, 2015.
- [61] Jiafeng Wu, Zheyu Yi, Yaping Chen, Ruibing Cao, Cong Dong, and Shaojie Yuan. Enhanced heat and mass transfer in alternating structure of tubes and longitudinal trough mesh packing in lithium bromide solution absorber. *International Journal of Refrigeration*, 53(2):34–41, 2015.
- [62] Yaping Chen, Ruibing Cao, Jiafeng Wu, Zheyu Yi, and Guangju Ji. Alternate heat and mass transfer absorption performances on staggered tube bundle with M-W corrugated mesh guider inserts. *International Journal of Refrigeration*, 66:10–20, 2016.
- [63] X Hu and A M Jacobi. The intertube falling film. II. Mode effects on sensible heat transfer to a falling liquid film. *Journal of Heat Transfer*, 118:626–633, 1996.
- [64] X. Hu and A.M. Jacobi. Departure-site spacing for liquid droplets and jets falling between horizontal circular tubes. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 16(4):322–331, 1998.
- [65] J. F. Roques, V. Dupont, and J. R. Thome. Falling Film Transitions on Plain and Enhanced Tubes. *Journal of Heat Transfer*, 124(3):491, 2002.
- [66] Jean-francois Roques and John R Thome. Falling Film Transitions Between Droplet, Column, and Sheet Flow Modes on a Vertical Array of Horizontal 19 FPI and 40 FPI Low-Finned Tubes. *Heat Transfer Engineering*, 24(6):40–45, 2010.
- [67] T. Nosoko, A. Miyara, and T. Nagata. Characteristics of falling film flow on completely wetted horizontal tubes and the associated gas absorption. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(13):2729–2738, 2002.
- [68] Gherhardt Ribatski and Anthony M. Jacobi. Falling-film evaporation on horizontal tubes - A critical review. *International Journal of Refrigeration*, 28(5):635–653, 2005.
- [69] A. Mohamed. Flow behavior of liquid falling film on a horizontal rotating tube. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 31(4):325–332, 2007.
- [70] A. Mohamed. Experimental study of heat transfer and flow characteristics of liquid falling film on a horizontal fluted tube. *Heat and Mass Transfer*, 46:841–849, 2010.
- [71] Jingdong Chen, Jili Zhang, and Zhixian Ma. Falling film mode transitions on horizontal enhanced tubes with two-dimensional integral fins: Effect of tube spacing and fin structures. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 101(April 2018):241–250, 2019.

- [72] Xiaofei Wang, Hrnjak, Elbel, Jacobi, and Maogang. Flow Modes and Mode Transitions for Falling Films on Flat Tubes. *Journal of Heat Transfer*, 134(2):021801, 2012.
- [73] Xiaofei Wang, Maogang He, K A I Lv, Hualiang Fan, and Anthony M Jacobi. Effects of Liquid Supply Method on Falling-Film Mode Transitions on Horizontal Tubes. *Heat Transfer Engineering*, 34(7):562–579, 2013.
- [74] Shanlin Liu, Shengqiang Shen, Xingsen Mu, Yali Guo, and Dayuan Yuan. Experimental study on droplet flow of falling film between horizontal tubes. *International Journal of Multiphase Flow*, 118:10–22, 2019.
- [75] Wei Mon Yan, Chun Wei Pan, Tien Fu Yang, and Mohammad Ghalambaz. Experimental study on fluid flow and heat transfer characteristics of falling film over tube bundle. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 130:9–24, 2019.
- [76] X. F. Wang, P. S. Hrnjak, S. Elbel, a. M. Jacobi, and M. G. He. Heat Transfer Performance for a Falling-Film on Horizontal Flat Tubes. *Journal of Heat Transfer*, 135(7):072901, 2013.
- [77] Huinan Yang, Yong Jiang, Yufeng Guo, Ling Li, and Mingxu Su. Investigation into falling film outside horizontal tube based on diode laser absorption spectroscopy. *Measurement Science and Technology*, 30(1):015202, dec 2018.
- [78] W. Nusselt. W. Nusselt, Die oberflaechenkondensation des Wasserdampfes. *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieur*, 60(27):541–546, 1916.
- [79] Niccolò Giannetti, Andrea Rocchetti, Seiichi Yamaguchi, and Kiyoshi Saito. Heat and mass transfer coefficients of falling-film absorption on a partially wetted horizontal tube. *International Journal of Thermal Sciences*, 126(December 2017):56–66, 2018.
- [80] Xue Chen, Shengqiang Shen, Yaoxuan Wang, Juexian Chen, and Jieshan Zhang. Measurement on falling film thickness distribution around horizontal tube with laser-induced fluorescence technology. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 89:707–713, 2015.
- [81] D. Gstoehl, J. F. Roques, P. Crisinel, and J. R. Thome. Measurement of Falling Film Thickness Around a Horizontal Tube Using a Laser Measurement Technique. *Heat Transfer Engineering*, 25(8):28–34, 2004.
- [82] Xiaofei Wang, Maogang He, Hualiang Fan, and Ying Zhang. Measurement of falling film thickness around a horizontal tube using laser-induced fluorescence technique. *Journal of Physics: Conference Series*, 147:012039, 2009.
- [83] Ting Xue, Zhuolin Li, Chenyang Li, and Bin Wu. Measurement of thickness of annular liquid films based on distortion correction of laser-induced fluorescence imaging. *Review of Scientific Instruments*, 90(3), 2019.

- [84] Hao Hou, Qincheng Bi, Hong Ma, and Gang Wu. Distribution characteristics of falling film thickness around a horizontal tube. *Desalination*, 285:393–398, 2012.
- [85] Alexander Stärk, Katell Loisel, Karine Odier, Achim Feßenbecker, Andreas Kempter, Stephan Nied, and Heike Glade. Wetting behaviour of different tube materials and its influence on scale formation in multiple-effect distillers. *Desalination and Water Treatment*, 55(9):2502–2514, 2014.
- [86] Y. Lazcano-Véliz, J. Siqueiros, D. Juárez-Romero, L. I. Morales, and J. Torres-Merino. Analysis of effective wetting area of a horizontal generator for an absorption heat transformer. *Applied Thermal Engineering*, 62(2):845–849, 2014.
- [87] Y. Lazcano-Véliz, J. A. Hernández, D. Juárez-Romero, A. Huicochea-Rodríguez, A. Álvarez Gallegos, and J. Siqueiros. Improved of effective wetting area and film thickness on a concentric helical bank of a generator for an absorption heat transformer. *Applied Thermal Engineering*, 106:1319–1328, 2016.
- [88] Gherhardt Ribatski and John R. Thome. Experimental study on the onset of local dryout in an evaporating falling film on horizontal plain tubes. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 31(6):483–493, 2007.
- [89] Srinivas Garimella, Matthew D. Determan, J. Mark Meacham, Sangsoo Lee, and Timothy C. Ernst. Microchannel component technology for system-wide application in ammonia/water absorption heat pumps. *International Journal of Refrigeration*, 34(5):1184–1196, 2011.
- [90] J. Mark Meacham and Srinivas Garimella. Ammonia-water absorption heat and mass transfer in Microchannel absorbers with visual confirmation. *2004 Winter Meeting - Technical and Symposium Papers, American Society of Heating, Refrigerating and Air-Conditioning Engineers*, pages 513–520, 2004.
- [91] Lalit Kumar Bohra, Sangsoo Lee, and Srinivas Garimella. Visual Documentation of Transfer Processes in Horizontal-Tube Falling-Film Ammonia-Water Absorbers. *International Journal of Refrigeration*, 2019.
- [92] Siyuan Chen, Tao Zhang, Li Lv, Yanxiao Chen, Yongchang Yang, and Shengwei Tang. Intensification of the liquid side mass transfer in double-side falling film microchannels by micro-mixing structures. *Chemical Engineering Science*, 193:264–275, 2019.
- [93] Jianguang Hu, Xiaogang Yang, Jianguo Yu, and Gance Dai. Numerical simulation of carbon dioxide (CO₂) absorption and interfacial mass transfer across vertically wavy falling film. *Chemical Engineering Science*, 116:243–253, 2014.
- [94] Yoshiyuki Iso, Jian Huang, Mariko Kato, Shinsuke Matsuno, and Kenji Takano. Numerical and experimental study on liquid film flows on packing elements in absorbers for post-combustion CO₂ capture. *Energy Procedia*, 37:860–868, 2013.

- [95] L. Raynal, F. Ben Rayana, and A. Royon-Lebeaud. Use of CFD for CO₂ absorbers optimum design : from local scale to large industrial scale. *Energy Procedia*, 1(1):917–924, 2009.
- [96] Daniel Sebastia-Sáez, Sai Gu, Panneerselvam Ranganathan, and Konstantinos Papadikis. Micro-scale CFD modeling of reactive mass transfer in falling liquid films within structured packing materials. *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 33:40–50, 2015.
- [97] Yuqi Shi, Guangming Chen, Qin Wang, and Qi Chen. Simulation on falling film absorption based on lattice Boltzmann method at moderate Reynolds number. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 128:991–998, 2019.
- [98] José Fernández-Seara, Jaime Sieres, and Manuel Vázquez. Heat and mass transfer analysis of a helical coil rectifier in an ammonia-water absorption system. *International Journal of Thermal Sciences*, 42(8):783–794, 2003.
- [99] J. V. Herrera, O. García-Valladares, V. H. Gómez, and R. Best. Numerical simulation and experimental results of horizontal tube falling film generator working in a NH₃-LiNO₃ absorption refrigeration system. *Applied Thermal Engineering*, 30(13):1751–1763, 2010.
- [100] Ananda Krishna Nagavarapu and Srinivas Garimella. Experimentally validated models for falling-film absorption around microchannel tube banks: Heat and mass transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 139:303–316, 2019.
- [101] G. Grossman. Simultaneous heat and mass transfer in film absorption under laminar flow. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 26(3):357–371, 1983.
- [102] M. Mittermaier, P. Schulze, and F. Ziegler. A numerical model for combined heat and mass transfer in a laminar liquid falling film with simplified hydrodynamics. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 70:990–1002, 2014.
- [103] V Subramaniam and S. Garimella. Numerical study of heat and mass transfer in lithium bromide-water falling films and droplets. *International Journal of Refrigeration*, 40:211–226, 2014.
- [104] Raju Abraham and A. Mani. Heat transfer characteristics in horizontal tube bundles for falling film evaporation in multi-effect desalination system. *Desalination*, 375:129–137, 2015.
- [105] Saeed Azimibavil and Ali Jafarian Dehkordi. Dynamic simulation of a Multi-Effect Distillation (MED) process. *Desalination*, 392:91–101, 2016.
- [106] Andreas Hoffmann, Ilja Ausner, Jens Uwe Repke, and Günter Wozny. Fluid dynamics in multiphase distillation processes in packed towers. *Computer Aided Chemical Engineering*, 18(C):199–204, 2004.

- [107] Felix Wunder, Sabine Enders, and Raphael Semiat. Numerical simulation of heat transfer in a horizontal falling film evaporator of multiple-effect distillation. *Desalination*, 401:206–229, 2017.
- [108] Luopeng Yang, Chen Xue, Bo Zhang, Kun Zhang, and Shen Tao. Numerical analysis of thermodynamic behaviour of falling film outside a horizontal tube. *Desalination and Water Treatment*, 51(4–6):872–876, 2013.
- [109] Chuanshuai Dong, Lin Lu, and Ronghui Qi. Model development of heat/mass transfer for internally cooled dehumidifier concerning liquid film shrinkage shape and contact angles. *Building and Environment*, 114:11–22, 2017.
- [110] J Emhofer, B Beladi, P Dudzinski, T Fleckl, and H C Kuhlmann. Analysis of a cross-flow liquid-desiccant falling-film. *Applied Thermal Engineering*, 2017.
- [111] Tao Wen, Yimo Luo, Weifeng He, Wenjie Gang, and Liyuan Sheng. Development of a novel quasi-3D model to investigate the performance of a falling film dehumidifier with CFD technology. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 132:431–442, 2019.
- [112] Tao Wen and Lin Lu. Numerical and experimental study on internally cooled liquid desiccant dehumidification concerning film shrinkage shape and vapor condensation. *International Journal of Thermal Sciences*, 136(July 2018):316–327, 2019.
- [113] Christian Bach, Jifeng Yang, Hilde Larsson, Stuart M. Stocks, Krist V. Gernaey, Mads O. Albaek, and Ulrich Krühne. Evaluation of mixing and mass transfer in a stirred pilot scale bioreactor utilizing CFD. *Chemical Engineering Science*, 171:19–26, 2017.
- [114] Isamu Fujita and Eiji Hihara. Heat and mass transfer coefficients of falling-film absorption process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(13):2779–2786, 2005.
- [115] Jung-In Yoon, Thanh Tong Phan, Choon-Geun Moon, Ho-Saeng Lee, and Seok-Kwon Jeong. Heat and mass transfer characteristics of a horizontal tube falling film absorber with small diameter tubes. *Heat and Mass Transfer*, 44(4):437–444, 2007.
- [116] Hein Auracher, Arnold Wohlfeil, and Felix Ziegler. A simple physical model for steam absorption into a falling film of aqueous lithium bromide solution on a horizontal tube. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, 44(12):1529–1536, 2008.
- [117] E. L. Cussler. Fundamentals of Mass Transfer. *Diffusion*, pages 237–273, 2007.
- [118] R Fick. *Medizinische Physik*, 1856.
- [119] J.B. Fourier. Theory analytique de la chaleur. Technical report, Envres de Fourier, 1822.

- [120] A. Acosta-Iborra, N. García, and D. Santana. Modelling non-isothermal absorption of vapour into expanding liquid sheets. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 52(13-14):3042–3054, 2009.
- [121] Christoph Albert, Holger Marschall, and Dieter Bothe. Direct numerical simulation of interfacial mass transfer into falling films. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 69:343–357, 2014.
- [122] Farid Babadi and Bijan Farhanieh T. Characteristics of heat and mass transfer in vapor absorption of falling film flow on a horizontal tube B. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 32:1253–1265, 2005.
- [123] Shoushi Bo, Xuehu Ma, Zhong Lan, Jiabin Chen, and Hongxia Chen. Numerical simulation on the falling film absorption process in a counter-flow absorber. *Chemical Engineering Journal*, 156(3):607–612, 2010.
- [124] Shoushi Bo, Xuehu Ma, Hongxia Chen, and Zhong Lan. Numerical simulation on vapor absorption by wavy lithium bromide aqueous solution films. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, 47(12):1611–1619, 2011.
- [125] Dieter Bothe and Stefan Fleckenstein. A Volume-of-Fluid-based method for mass transfer processes at fluid particles. *Chemical Engineering Science*, 101:283–302, 2013.
- [126] J. Castro, A. Oliva, C. D. Perez-Segarra, and C. Oliet. Modelling of the heat exchangers of a small capacity, hot water driven, air-cooled H₂O-LiBr absorption cooling machine. *International Journal of Refrigeration*, 31(1):75–86, 2008.
- [127] L. Harikrishnan, M. P. Maiya, and Shaligram Tiwari. Investigations on heat and mass transfer characteristics of falling film horizontal tubular absorber. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(11-12):2609–2617, 2011.
- [128] A Hassanvand and S H Hashemabadi. Direct numerical simulation of interphase mass transfer in gas – liquid multiphase systems. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 38(7):943–950, 2011.
- [129] Ernst Hofmann and Hendrik C. Kuhlmann. On the optimum mass transfer of flat absorbing falling films. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(25-26):7686–7697, 2012.
- [130] Seyed Mojtaba Hosseinnia, Mohammad Naghashzadegan, and Ramin Kouhikamali. CFD simulation of adiabatic water vapor absorption in large drops of water-LiBr solution. *Applied Thermal Engineering*, 102:17–29, 2016.
- [131] Seyed Mojtaba Hosseinnia, Mohammad Naghashzadegan, and Ramin Kouhikamali. Numerical study of falling film absorption process in a vertical tube absorber including Soret and Dufour effects. *International Journal of Thermal Sciences*, 114:123–138, 2017.

- [132] Seyed Mojtaba Hosseinnia, Mohammad Naghashzadegan, and Ramin Kouhikamali. CFD simulation of water vapor absorption in laminar falling film solution of water–LiBr – Drop and jet modes. *Applied Thermal Engineering*, 115:860–873, 2017.
- [133] Md Raisul Islam, N. E. Wijesundera, and J. C. Ho. Evaluation of heat and mass transfer coefficients for falling-films on tubular absorbers. *International Journal of Refrigeration*, 26(2):197–204, 2003.
- [134] Shahram Karami and Bijan Farhanieh. Numerical modeling of incline plate LiBr absorber. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, 47(3):259–267, 2011.
- [135] M. Mittermaier and F. Ziegler. Theoretical evaluation of absorption and desorption processes under typical conditions for chillers and heat transformers. *International Journal of Refrigeration*, 59:91–101, 2015.
- [136] M. Mittermaier and F. Ziegler. The impact of viscosity on the combined heat, mass and momentum transfer in laminar liquid falling films. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, pages 1–17, 2017.
- [137] Mehdi Mortazavi and Saeed Moghaddam. Laplace transform solution of conjugate heat and mass transfer in falling film absorption process. *International Journal of Refrigeration*, 66:93–104, 2016.
- [138] V. D. Papaefthimiou, D. C. Karampinos, and E. D. Rogdakis. A detailed analysis of water–vapour absorption in LiBr–H₂O solution on a cooled horizontal tube. *Applied Thermal Engineering*, 26(17–18):2095–2102, 2006.
- [139] E. D. Rogdakis, V. D. Papaefthimiou, and D. C. Karampinos. A realistic approach to model LiBr–H₂O smooth falling film absorption on a vertical tube. *Applied Thermal Engineering*, 23(17):2269–2283, 2003.
- [140] Papia Sultana, N. E. Wijesundera, J. C. Ho, and C. Yap. Modeling of horizontal tube–bundle absorbers of absorption cooling systems. *International Journal of Refrigeration*, 30(4):709–723, 2007.
- [141] W. Nernst. Theory of reaction velocity in heterogenous systems. *Zeit. Physikal. Chem.*, 47:52–55, 1904.
- [142] R Higbie. *The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure*. University of MICHIGAN, 1934.
- [143] M. Assar, H. Abolghasemi, M. Rajabi Hamane, S. J. Hashemi, and H. Fatoorehchi. A new approach to analyze entrance region mass transfer within a falling film. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, 50(5):651–660, 2014.
- [144] Pierre François Biard, Aurélie Coudon, Annabelle Couvert, and Sylvain Giraudet. A simple and timesaving method for the mass-transfer assessment of solvents used in physical absorption. *Chemical Engineering Journal*, 290:302–311, 2016.

- [145] Maryam [Mazarei Sotoodeh], Mortaza Zivdar, and Rahbar Rahimi. Cfd modeling of multiphase flow in reactive distillation column. *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 129:1 – 9, 2018.
- [146] Y. Xu, Steve Paschke, Jens Uwe Repke, J. Q. Yuan, and Günter Wozny. Computational Approach to Characterize the Mass Transfer between the Counter-Current Gas-Liquid Flow. *Chemical Engineering & Technology*, 32(8):1227–1235, 2009.
- [147] Dan Yu, Dapeng Cao, Zhazhan Li, and Qunsheng Li. Experimental and CFD studies on the effects of surface texture on liquid thickness, wetted area and mass transfer in wave-like structured packings. *Chemical Engineering Research and Design*, 129(1998):170–181, 2018.
- [148] L. Boltzmann. Zur Integration der Diffusionsgleichung bei variablen Diffusionscoefficienten. *Annalen der Physik und Chemie*, 53:959, 1894.
- [149] P.V. Danckwerts. No Title. *Industrial and Engineering Chemistry*, 43:1460, 1951.
- [150] E.U. Schlünder. On the mechanism of mass transfer in heterogeneous systems—in particular in fixed beds, fluidized beds and on bubble trays. *Chemical Engineering Science*, 32(8):845–851, jan 1977.
- [151] Vishwanath Subramaniam and Srinivas Garimella. From measurements of hydrodynamics to computation of species transport in falling films. *International Journal of Refrigeration*, 32(4):607–626, 2009.
- [152] Daniel Sebastia-Sáez, Sai Gu, and Marco Ramaioli. Effect of the contact angle on the morphology , residence time distribution and mass transfer into liquid rivulets : A CFD study. *Chemical Engineering Science*, 176:356–366, 2018.
- [153] J. Castro, L. Leal, C. D. Pérez-Segarra, and P. Pozo. Numerical study of the enhancement produced in absorption processes using surfactants. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 47(14-16):3463–3476, 2004.
- [154] Shahram Karami and Bijan Farhanieh. A numerical study on the absorption of water vapor into a film of aqueous LiBr falling along a vertical plate. *Heat and Mass Transfer/Wärme- und Stoffuebertragung*, 46(2):197–207, 2009.
- [155] Martin Mittermaier. *Theoretische Untersuchung des Wärme- und Stoffübergangs am laminaren Fallfilm*. genehmigte dissertation, Technischen Universität Berlin, 2018.
- [156] M. A Cengel, Y. A., & Boles. *Thermodynamics : an engineering approach*. McGraw-Hill., Boston, 6 edition, 2001.
- [157] J D Killion and S Garimella. A critical review of models of coupled heat and mass transfer in falling-film absorption. *International Journal of Refrigeration*, 24(8):755–797, 2001.

- [158] N I Grigoryeva and V E Nakoryakov. Exact solution of combined heat- and mass-transfer problem during film absorption. *Journal of Engineering Physics (English Translation of Inzhenerno-Fizicheskii Zhurnal)*, 33(5):1349–1353, 1977.
- [159] T. Meyer. Analytical solution for combined heat and mass transfer in laminar falling film absorption with uniform film velocity - Diabatic wall boundary. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 80:802–811, 2015.
- [160] V E Nakoryakov and N I Grigoryeva. Nonisothermal Absorption in Thermotransformers. *Journal of Engineering Thermophysics*, 19(4):196–271, 2010.
- [161] Siyoung Jeong and Srinivas Garimella. Falling-film and droplet mode heat and mass transfer in a horizontal tube LiBr/water absorber. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 45(7):1445–1458, 2002.
- [162] V. D. Papaefthimiou, I. P. Koronaki, D. C. Karampinos, and E. D. Rogdakis. A novel approach for modelling LiBr-H₂O falling film absorption on cooled horizontal bundle of tubes. *International Journal of Refrigeration*, 35(4):1115–1122, 2012.
- [163] Niccolo Giannetti, Andrea Rocchetti, Seiichi Yamaguchi, and Kiyoshi Saito. Analytical solution of film mass-transfer on a partially wetted absorber tube. *International Journal of Thermal Sciences*, 118:176–186, 2017.
- [164] D. Moalem Maron, G. Ingel, and N. Brauner. Wettability and break-up of thin films on inclined surfaces with continuous and intermittent feed. *Desalination*, 42(1):87–96, 1982.
- [165] Ananda Krishna and Srinivas Garimella. Experimentally validated models for falling-film absorption around microchannel tube banks : Hydrodynamics. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 134:815–827, 2019.
- [166] Martin Mittermaier and Felix Ziegler. Impact of a Developing Velocity Profile on Heat and Mass Transfer in Absorbing Laminar Falling Films. *Chemie Ingenieur Technik*, 88(1-2):139–146, 2016.
- [167] Dazhi Yu, Jacob Chung, and Saeed Moghaddam. Parametric study of water vapor absorption into a constrained thin film of lithium bromide solution. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 55(21-22):5687–5695, 2012.
- [168] C W Hirt and B D Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of Computational Physics*, 39(1):201–225, 1981.
- [169] J. U. Brackbill, D. B. Kothe, and C. Zemach. A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics*, 100(2):335–354, 1992.
- [170] Jesse D. Killion and Srinivas Garimella. Simulation of Pendant Droplets and Falling Films in Horizontal Tube Absorbers. *Journal of Heat Transfer*, 126(6):1003, 2004.

- [171] Lin Cong Luo, Guan Min Zhang, Ji Hong Pan, and Mao Cheng Tian. Flow and heat transfer characteristics of falling water film on horizontal circular and non-circular cylinders. *Journal of Hydrodynamics*, 25(3):404–414, 2013.
- [172] Shehara. CFD simulation of heat and mass transfer of Lithium bromide flow over absorber circular tubes. *International Journal of Applied Science and Engineering Research*, 1(1):117–126, 2012.
- [173] Chun Hua Qi, Hou Jun Feng, Hong Qing Lv, and Chao Miao. Numerical and experimental research on the heat transfer of seawater desalination with liquid film outside elliptical tube. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 93:207–216, 2016.
- [174] Asier Martinez-Urrutia, Peru Fernandez de Arroiabe, Miguel Ramirez, Manex Martinez-Agirre, and M. Mounir Bou-Ali. Contact angle measurement for LiBr aqueous solutions on different surface materials used in absorption systems. *International Journal of Refrigeration*, 95:182–188, 2018.
- [175] Luopeng Yang, Yang Liu, Yan Yang, and Shengqiang Shen. Microscopic mechanisms of heat transfer in horizontal-tube falling film evaporation. *Desalination*, 394:64–71, 2016.
- [176] Fengdan Sun, Songlin Xu, and Yongchuan Gao. Numerical simulation of liquid falling film on horizontal circular tubes. *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, 6(3):322–328, 2012.
- [177] D. Ouldhadda, A. Il Idrissi, and M. Asbik. Heat transfer in non-Newtonian falling liquid film on a horizontal circular cylinder. *Heat and Mass Transfer/Waerme- und Stoffuebertragung*, 38(7-8):713–721, 2002.
- [178] Q. Qiu, Xiaojing Zhu, Lin Mu, and Shengqiang Shen. Numerical study of falling film thickness over fully wetted horizontal round tube. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 84:893–897, 2015.
- [179] Qinggang Qiu, Chuiju Meng, Shenglin Quan, and Weishu Wang. 3-D simulation of flow behaviour and film distribution outside a horizontal tube. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 107:1028–1034, 2017.
- [180] Jingdong Chen, Ruihang Zhang, and Runping Niu. Numerical simulation of horizontal tube bundle falling film flow pattern transformation. *Renewable Energy*, 73:62–68, 2014.
- [181] Wenying Chen, Xiang Yin, and Ding Ma. A bottom-up analysis of China's iron and steel industrial energy consumption and CO₂ emissions. *Applied Energy*, 136(2014):1174–1183, 2014.
- [182] Meijun Li, Yuan Lu, Shijie Zhang, and Yunhan Xiao. A numerical study of effects of counter-current gas flow rate on local hydrodynamic characteristics of falling films over horizontal tubes. *Desalination*, 383:68–80, 2016.

- [183] H. Lan, J. L. Wegener, B. F. Armaly, and J. A. Drallmeier. Developing Laminar Gravity-Driven Thin Liquid Film Flow Down an Inclined Plane. *Journal of Fluids Engineering*, 132(8):081301, 2010.
- [184] Ronghui Qi, Lin Lu, Hongxing Yang, and Fei Qin. Influence of plate surface temperature on the wetted area and system performance for falling film liquid desiccant regeneration system. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 64:1003–1013, 2013.
- [185] Rajesh K. Singh, Janine E. Galvin, and Xin Sun. Three-dimensional simulation of rivulet and film flows over an inclined plate: Effects of solvent properties and contact angle. *Chemical Engineering Science*, 142:244–257, 2016.
- [186] Andreas Hoffmann, Ilja Ausner, Jens-Uwe Repke, and G?nter Wozny. Fluid dynamics in multiphase distillation processes in packed towers. *Computers & Chemical Engineering*, 29(6):1433–1437, may 2005.
- [187] J.J. Cooke, L.M. Armstrong, K.H. Luo, and S. Gu. Adaptive mesh refinement of gas-liquid flow on an inclined plane. *Computers & Chemical Engineering*, 60:297–306, 2014.
- [188] Alex Weber, Nicoleta Herzog, and Thomas Bergmann. Numerical simulations of gas-liquid flow in thermal sorption processes. *Computers and Chemical Engineering*, 84:171–179, 2016.
- [189] Ge Ji, Jiafeng Wu, Yaping Chen, and Guangju Ji. Asymmetric distribution of falling film solution flowing on hydrophilic horizontal round tube. *International Journal of Refrigeration*, 78:83–92, 2017.
- [190] Chuang Yao Zhao, Wen Tao Ji, Ya Ling He, Ying Jie Zhong, and Wen Quan Tao. A comprehensive numerical study on the subcooled falling film heat transfer on a horizontal smooth tube. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 119:259–270, 2018.
- [191] Yee Ting Lee, Sihui Hong, Chaobin Dang, Liang Han Chien, Li Wang Chang, and An Shik Yang. Heat transfer characteristics of obliquely dispensed evaporating falling films on an elliptic tube. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 132:238–248, 2019.
- [192] Hongbing Ding, Peng Xie, Derek Ingham, Lin Ma, and Mohamed Pourkashanian. Flow behaviour of drop and jet modes of a laminar falling film on horizontal tubes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 124:929–942, 2018.
- [193] Terence D. Blake. The physics of moving wetting lines. *Journal of Colloid and Interface Science*, 299(1):1–13, 2006.
- [194] Ilias Malgarinos, Nikolaos Nikolopoulos, Marco Marengo, Carlo Antonini, and Manolis Gavaises. VOF simulations of the contact angle dynamics during the drop spreading: Standard models and a new wetting force model. *Advances in Colloid and Interface Science*, 212:1–20, 2014.

- [195] K.R. Morison, Q.a.G. Worth, and N.P. O’dea. Minimum Wetting and Distribution Rates in Falling Film Evaporators. *Food and Bioproducts Processing*, 84(December):302–310, 2006.
- [196] Auro Ashish Saha and Sushanta K. Mitra. Effect of dynamic contact angle in a volume of fluid (VOF) model for a microfluidic capillary flow. *Journal of Colloid and Interface Science*, 339(2):461–480, 2009.
- [197] Subhasish Mitra, Mayur J. Sathe, Elham Doroodchi, Ranjeet Utikar, Milin K. Shah, Vishnu Pareek, Jyeshtharaj B. Joshi, and Geoffrey M. Evans. Droplet impact dynamics on a spherical particle. *Chemical Engineering Science*, 100:105–119, 2013.
- [198] H V Patel, S Das, J A M Kuipers, J T Padding, and E A J F Peters. A coupled Volume of Fluid and Immersed Boundary Method for simulating 3D multiphase flows with contact line dynamics in complex geometries. *Chemical Engineering Science*, 166:28–41, 2017.
- [199] I. V. Roisman, L. Opfer, C. Tropea, M. Raessi, J. Mostaghimi, and S. Chandra. Drop impact onto a dry surface: Role of the dynamic contact angle. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 322(1–3):183–191, 2008.
- [200] Š Šikalo, H. D. Wilhelm, I. V. Roisman, S. Jakirlić, and C. Tropea. Dynamic contact angle of spreading droplets: Experiments and simulations. *Physics of Fluids*, 17(6):1–13, 2005.
- [201] BP Leonard and S Mokhtari. ULTRA-SHARP nonoscillatory convection schemes for high-speed steady multidimensional flow. Technical Report April 1, NASA Lewis Research Center Cleveland, OH., United States, 1990.
- [202] Inc Ansys. ANSYS FLUENT theory guide.
- [203] R. I. Issa. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 62(1):40–65, 1986.
- [204] Jesús Manuel Fernández Oro. *Técnicas numéricas en ingeniería de fluidos*. Editorial Reverté, 2012.
- [205] Batikan Köroğlu, Kee Sung Lee, and Chanwoo Park. Nano/micro-scale surface modifications using copper oxidation for enhancement of surface wetting and falling-film heat transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 62(1):794–804, 2013.
- [206] Qinggang Qiu, Xiaocui Zhang, Shenglin Quan, Xiaojing Zhu, and Shengqiang Shen. 3D numerical study of the liquid film distribution on the surface of a horizontal-tube falling-film evaporator. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 124:943–952, 2018.
- [207] Ronghui Qi, Lin Lu, and Yu Jiang. Investigation on the liquid contact angle and its influence for liquid desiccant dehumidification system. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 88:210–217, 2015.

- [208] Mohamed S. El-Genk and Hamed H. Saber. Minimum thickness of a flowing down liquid film on a vertical surface. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44(15):2809–2825, 2001.
- [209] María E. Álvarez, José A. Hernández, and Mahmoud Bourouis. Modelling the performance parameters of a horizontal falling film absorber with aqueous (lithium, potassium, sodium) nitrate solution using artificial neural networks. *Energy*, 102:313–323, 2016.
- [210] Maria Fiorentino and Giuseppe Starace. Numerical and Experimental Performance Analysis of Evaporative Condensers. *Energy Procedia*, 101(September):26–33, 2016.
- [211] Qinggang Qiu, Xiaojing Zhu, Lin Mu, and Shengqiang Shen. An investigation on the falling film thickness of sheet flow over a completely wetted horizontal round tube surface. *Desalination and Water Treatment*, 57(35):16277–16287, 2015.
- [212] Taebeom Seo and Eunjun Cho. Coupled Heat and Mass Transfer in Absorption of Water Vapor into LiBr-H₂O Solution Flowing on Finned Inclined Surfaces. *KSME International Journal*, 18(7):1140–1149, 2004.
- [213] Chengming Shi, Canjun Xu, Huili Hu, and Yang Ying. Study on falling film generation heat transfer of lithium bromide solution in vertical tubes. *Journal of Thermal Science*, 18(3):241–245, 2009.
- [214] Anders Åkesjö, Mathias Gourdon, Lennart Vamling, Fredrik Innings, and Srdjan Sasic. Experimental and numerical study of heat transfer in a large-scale vertical falling film pilot unit. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 125:53–65, 2018.
- [215] Eduardo García-Rivera. *Modelling and Experimental Validation of Water Vapor Absorption by Falling Films of LiBr Aqueous Solution Under Wave Regimes Conditions and Presence of Non-Absorbable Gases*. Doctoral thesis, Universidad Politècnica de Catalunya. Departament de Màquines i Motors Tèrmics, 2015-04-17.
- [216] FW Dittus and L.M.K Boelter. *Publications on Engineering 2*. University of California on Engineering 2, 1930.
- [217] M.R. Patterson and H. Perez-Blanco. Numerical fits of the properties of lithium-bromide water solutions. *ASHRAE annual meeting*, pages 2059–2077, 1988.
- [218] William A Miller. *The Experimental Analysis of Aqueous Lithium Bromide Vertical Film Absorption*. Ph.d. dissertation, The University of Tennessee, 1998.
- [219] I. Haar, JS. Gallaguer, and JS. Kellk. *Steam tables*. Mc Graw Hill, 1984.
- [220] Zhe Yuan and Keith E Herold. Thermodynamic Properties of Aqueous Lithium Bromide Using a Multiproperty Free Energy Correlation. *HVAC&R Research*, 11(3):377–393, 2005.

- [221] Gim Yau Soh, Guan Heng Yeoh, and Victoria Timchenko. An algorithm to calculate interfacial area for multiphase mass transfer through the volume-of-fluid method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 100:573–581, 2016.
- [222] G. Gutiérrez-Urueta, P. Rodríguez, M. Venegas, F. Ziegler, and M. C. Rodríguez-Hidalgo. Experimental performances of a LiBr-water absorption facility equipped with adiabatic absorber. *International Journal of Refrigeration*, 34(8):1749–1759, 2011.
- [223] Y. Haroun, D. Legendre, and L. Raynal. Volume of fluid method for interfacial reactive mass transfer: Application to stable liquid film. *Chemical Engineering Science*, 65(10):2896–2909, 2010.
- [224] Y. Haroun, D. Legendre, and L. Raynal. Direct numerical simulation of reactive absorption in gas-liquid flow on structured packing using interface capturing method. *Chemical Engineering Science*, 65(1):351–356, 2010.
- [225] Y. Haroun, L. Raynal, and D. Legendre. Mass transfer and liquid hold-up determination in structured packing by CFD. *Chemical Engineering Science*, 75:342–348, 2012.
- [226] J Dalton. Essay IV. On the expansion of elastic fluids by heat. *Memoirs of the Literary and Philosophical Society of Manchester*, 5(2):595–602, 1802.
- [227] R. Banerjee. A numerical study of combined heat and mass transfer in an inclined channel using the VOF multiphase model. *Numerical Heat Transfer; Part A: Applications*, 52(2):163–183, 2007.
- [228] Philip Donnellan, Kevin Cronin, William Lee, Shane Duggan, and Edmond Byrne. Absorption of steam bubbles in lithium bromide solution. *Chemical Engineering Science*, 119:10–21, 2014.
- [229] Liang Pu, Qiang Li, Xiangyu Shao, Lan Ding, and Yanzhong Li. Effects of tube shape on flow and heat transfer characteristics in falling film evaporation. *Applied Thermal Engineering*, 148(April 2018):412–419, 2019.
- [230] B. Ziegler and Ch Trepp. Equation of state for ammonia-water mixtures. *International Journal of Refrigeration*, 7(2):101–106, mar 1984.
- [231] S V Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Pub. Corp, Washington, 1980.
- [232] Hanzhi Wang, Huashan Li, Xianbiao Bu, and Lingbao Wang. Optimum performance of a double absorption heat transformer. *Energy Conversion and Management*, 122:350–356, 2016.
- [233] Ming Zhu, Chun Jiang Liu, Wei Wei Zhang, and Xi Gang Yuan. Transport phenomena of falling liquid film flow on a plate with rectangular holes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 49(22):11724–11731, 2010.

- [234] Thomas Höhne, Deendarlianto, and Dirk Lucas. Numerical simulations of counter-current two-phase flow experiments in a PWR hot leg model using an interfacial area density model. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 32(5):1047–1056, 2011.
- [235] Teng Li, Yonggao Yin, Zhiqi Liang, and Xiaosong Zhang. Experimental study on heat and mass transfer performance of falling film absorption over a vertical tube using LiCl solution. *International Journal of Refrigeration*, 85:109–119, 2017.
- [236] Lirong Li, Hwan Suk Lim, and Yong Tae Kang. Mass transfer characteristics for CO₂ absorption in nanoabsorbents. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 129:650–659, 2019.
- [237] Furkan Özkan, Achim Wenka, Edgar Hansjosten, Peter Pfeifer, and Bettina Kraushaar-Czarnetzki. Numerical investigation of interfacial mass transfer in two phase flows using the VOF method. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 10(1):100–110, 2016.
- [238] Bo Sun, Ming Zhu, Bo Tan Liu, Chun Jiang Liu, and Xi Gang Yuan. Investigation of falling liquid film flow on novel structured packing. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 52(13):4950–4956, 2013.
- [239] Karina Boltes, Ainhoa Caro, Pedro Leton, Antonio Rodriguez, and Eloy Garcia-Calvo. Gas-liquid mass transfer in oil-water emulsions with an airlift bio-reactor. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 47(12):2408–2412, 2008.
- [240] Yao Chaoqun, Zhao Yuchao, Ye Chunbo, Dang Minhui, Dong Zhengya, and Chen Guangwen. Characteristics of slug flow with inertial effects in a rectangular microchannel. *Chemical Engineering Science*, 2013.
- [241] Victor Manuel Soto Francés and José Manuel Pinazo Ojer. Validation of a model for the absorption process of H₂O(vap) by a LiBr(aq) in a horizontal tube bundle, using a multi-factorial analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 46(17):3299–3312, 2003.
- [242] J Colombani. Thermal diffusion in (LiCl, RH₂O). *Journal of Chemical Physics*, 110(17):8622–8627, 1999.
- [243] M M Bou-Ali, O Ecenarro, J A Madariaga, C M Santamaría, and J J Valencia. Thermogravitational measurement of the Soret coefficient of liquid mixtures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 10(15):3321–3331, 1998.
- [244] M. M. Bou-Ali, O. Ecenarro, J. A. Madariaga, C. M. Santamaría, and J. J. Valencia. Measurement of negative Soret coefficients in a vertical fluid layer with an adverse density gradient. *Physical Review E - Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics*, 62(1 B):1420–1423, 2000.
- [245] Jean K. Platten. The Soret Effect: A Review of Recent Experimental Results. *Journal of Applied Mechanics*, 73(1):5–15, 04 2005.

-
- [246] T Uemura. Properties of refrigerant-absorbent systems used for absorption-type refrigeration machines. *Reito*, 52(600), 1975.

A | PROPIEDADES TERMOFÍSICAS

Las propiedades de los fluidos han sido calculadas en función de la temperatura y la fracción másica de LiBr. Tal y como ha sido utilizado, por ejemplo, en el trabajo de Hosseinnia et al. [132], para el cálculo de las propiedades de la solución LiBr – H₂O se han empleado las correlaciones de Patterson y Pérez Blanco [217]. Estas correlaciones fueron calculadas mediante ajustes numéricos utilizando los resultados experimentales de T. Uemura [246]. A continuación, se enumeran las ecuaciones de las correlaciones de la densidad, viscosidad dinámica y conductividad térmica en las ecuaciones (A.1), (A.2) y (A.3), respectivamente:

$$\rho_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}(w_{\%}, T) = \left(\sum_{i=0}^4 \sum_{j=0}^2 A_{ij} w_{\%}^i T^j \right) \cdot 1000 \text{ (kg} \cdot \text{m}^{-3}\text{)}, \quad (\text{A.1})$$

$$\mu_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}(w_{\%}, T) = \left(\sum_{i=0}^5 \sum_{j=0}^2 B_{ij} w_{\%}^i T^j \right) \cdot 10^3 \text{ (N} \cdot \text{m}^{-1}\text{s}^{-1}\text{)}, \quad (\text{A.2})$$

$$k_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}(w_{\%}, T) = \left(\sum_{i=0}^4 \sum_{j=0}^2 F_{ij} w_{\%}^i T^j \right) \cdot 1.6 \text{ (W} \cdot \text{m}^{-1}\text{K}^{-1}\text{)}. \quad (\text{A.3})$$

donde A , B y F son coeficientes específicos de las correlaciones; $w_{\%}$, la fracción másica de LiBr (%), T la temperatura en ($^{\circ}\text{C}$). Los coeficientes de las correlaciones para la densidad, viscosidad dinámica y conductividad térmica se muestran en la Tabla A.1), Tabla A.2) y Tabla A.3, respectivamente.

Sin embargo, el coeficiente de difusión (D) ha sido estimado mediante la Ecuación (A.4), el cual fue empleada por Miller et al. [218]:

$$D = D_0 e^{\left(\frac{1}{(T+273)} \left(\frac{E}{R} (w_f) \right) \right)}, \quad (\text{A.4})$$

donde D_0 es la difusividad en una dilución infinita, $D_0 = 7.1317 \cdot 10^{-8} \text{ (m}^2\text{s}^{-1}\text{)}$; T la temperatura promedio de la solución; y el coeficiente $\frac{E}{R} (X_f)$ se calcula mediante la Ecuación (A.5):

$$\frac{E}{R} (X_f) = -1179.7591 + 5.9558 (100C) - 0.13624(100C)^2, \quad (\text{A.5})$$

Tabla A.1: Valores de los coeficientes A para la estimación de la densidad (Ecuación (A.1)) [217].

A_{ij}	0	1	2
0	$9.939006 \cdot 10^{-1}$	$-5.631094 \cdot 10^{-4}$	$1.392527 \cdot 10^{-6}$
1	$1.046888 \cdot 10^{-2}$	$1.633541 \cdot 10^{-5}$	$-2.801009 \cdot 10^{-7}$
2	$-1.667939 \cdot 10^{-4}$	$-1.110273 \cdot 10^{-6}$	$1.734979 \cdot 10^{-8}$
3	$5.332835 \cdot 10^{-6}$	$2.882292 \cdot 10^{-8}$	$-4.232988 \cdot 10^{-10}$
4	$-3.440005 \cdot 10^{-8}$	$-2.523579 \cdot 10^{-10}$	$3.503024 \cdot 10^{-12}$

Tabla A.2: Valores de los coeficientes B para la estimación de la viscosidad dinámica (Ecuación (A.2)) [217].

B_{ij}	0	1	2
0	$1.488747 \cdot 10^0$	$-4.164814 \cdot 10^{-2}$	$3.404030 \cdot 10^{-4}$
1	$1.143975 \cdot 10^{-1}$	$9.636832 \cdot 10^{-4}$	$-2.794515 \cdot 10^{-5}$
2	$-1.278729 \cdot 10^{-2}$	$-5.981025 \cdot 10^{-5}$	$2.580301 \cdot 10^{-6}$
3	$6.999985 \cdot 10^{-4}$	$-1.282435 \cdot 10^{-7}$	$-9.737750 \cdot 10^{-8}$
4	$-1.638074 \cdot 10^{-5}$	$5.703002 \cdot 10^{-8}$	$1.585609 \cdot 10^{-9}$
5	$1.456348 \cdot 10^{-7}$	$-9.842266 \cdot 10^{-10}$	$-7.922925 \cdot 10^{-12}$

Tabla A.3: Valores de los coeficientes B para la estimación de la conductividad térmica (Ecuación (A.3)) [217].

F_{ij}	0	1	2
0	$4.815196 \cdot 10^{-1}$	$1.858174 \cdot 10^{-3}$	$-7.923126 \cdot 10^{-6}$
1	$-2.217277 \cdot 10^{-3}$	$9.614755 \cdot 10^{-6}$	$-1.869392 \cdot 10^{-7}$
2	$-1.994141 \cdot 10^{-5}$	$-1.139291 \cdot 10^{-6}$	$1.408951 \cdot 10^{-8}$
3	$3.727255 \cdot 10^{-7}$	$2.107608 \cdot 10^{-8}$	$-2.740806 \cdot 10^{-10}$
4	$-2.489886 \cdot 10^{-9}$	$-1.330532 \cdot 10^{-10}$	$1.810818 \cdot 10^{-12}$

Por su parte, el calor de absorción (h_{abs}) se ha estimado por medio de la ecuación (A.6)

$$h_{\text{abs}} = h_v - h_l, \quad (\text{A.6})$$

donde h_v y h_l son las entalpías de vapor y líquido, respectivamente. La entalpía del vapor de agua ha sido calculada mediante las tablas de Haar et al. [219], mientras la entalpía parcial del agua en la solución LiBr – H₂O ha sido estimada con la expresión propuesta por Yuan y Herold [220]. Precisamente, la ecuación

utilizada ha sido:

$$\begin{aligned}
h(w_{\%}, T, p) &= g + Ts = g - T \left(\frac{\partial g}{\partial T} \right)_{p, w_{\%}} \\
&= (A_0 + A_1 w_{\%} + A_2 w_{\%}^2 + A_3 w_{\%}^3 + A_4 w_{\%}^{1.1}) \\
&\quad - T^2 (C_0 + C_1 w_{\%} + C_2 w_{\%}^2 + C_3 w_{\%}^3 + C_4 w_{\%}^{1.1}) \\
&\quad - 2T^3 (D_0 + D_1 w_{\%} + D_2 w_{\%}^2 + D_4 w_{\%}^{1.1}) \\
&\quad - 3T^4 (E_0 + E_1 w_{\%}) + (F_0 + F_1 w_{\%}) \left(\frac{1}{T - T_0} + \frac{T}{(T - T_0)^2} \right), \\
&\quad + p (V_0 + V_1 w_{\%} + V_2 w_{\%}^2 - V_6 T^2 - V_7 w_{\%} T^2) \\
&\quad + (\ln(T) - 1) (L_0 + L_1 w_{\%} + L_2 w_{\%}^2 + L_3 w_{\%}^3 + L_4 w_{\%}^{1.1}) \\
&\quad - T (M_0 + M_1 w_{\%} + M_2 w_{\%}^2 + M_3 w_{\%}^3 + M_4 w_{\%}^{1.1}), \tag{A.7}
\end{aligned}$$

donde T se introduce en unidades Kelvin; $w_{\%}$ en % de LiBr; y p en kPa. La constante T_0 tiene un valor de $T_0 = 220$ K y el valor de los coeficientes se muestra en la Tabla A.4.

Tabla A.4: Valores de los coeficientes para la estimación de la entalpía de la solución LiBr – H₂O (h_l) (Ecuación (A.3)) [220].

	0	1	2	3	4
$A_i, i = 0..4$	$5.506219979 \cdot 10^3$	$5213228937 \cdot 10^2$	7.774930356	$-4575233382 \cdot 10^{-2}$	$-5.792935726 \cdot 10^2$
$B_i, i = 0..4$	$1.452749674 \cdot 10^2$	$-4.984840771 \cdot 10^{-1}$	$8.83691918 \cdot 10^{-2}$	$-4.870995781 \cdot 10^{-4}$	-2.905161205
$C_i, i = 0..4$	$2.648364473 \cdot 10^{-2}$	$-2.311041091 \cdot 10^{-3}$	$7.55973662 \cdot 10^{-6}$	$-3.763934193 \cdot 10^{-8}$	$1.176240649 \cdot 10^{-3}$
$D_i, i = 0..2, 4$	$-8.52651695 \cdot 10^{-6}$	$1.320154794 \cdot 10^{-6}$	$2.791995438 \cdot 10^{-11}$	NaN	$-8.511514931 \cdot 10^{-7}$
$E_i, i = 0..1$	$-3.840447174 \cdot 10^{-11}$	$2.625469387 \cdot 10^{-11}$	NaN	NaN	NaN
$F_i, i = 0..1$	$-5.159906276 \cdot 10^1$	1.114573398	NaN	NaN	NaN
$L_i, i = 0..4$	$-2.183429482 \cdot 10^3$	$-1.266985094 \cdot 10^2$	-2.364551372	$1.389414858 \cdot 10^{-2}$	$1.583405426 \cdot 10^2$
$M_i, i = 0..4$	$-2.267095847 \cdot 10^{-1}$	$2.983764494 \cdot 10^{-1}$	$-1.259393234 \cdot 10^{-2}$	$6.849632068 \cdot 10^{-5}$	$2.767986853 \cdot 10^{-1}$
$V_i, i = 0..4$	$1.176741611 \cdot 10^{-3}$	$-1.002511661 \cdot 10^{-5}$	$-1.695735875 \cdot 10^{-8}$	$-1.497186905 \cdot 10^{-6}$	$2.538176345 \cdot 10^{-8}$
$V_i, i = 5..7$	$5.815811591 \cdot 10^{-11}$	$3.057997846 \cdot 10^{-9}$	$-5.129589007 \cdot 10^{-11}$	NaN	NaN

La Figura A.1 muestra los valores del calor de absorción calculados para diferentes temperaturas y fracciones másicas cuando $p = 1$ kPa.

Tal y como se observa, el calor de absorción varía considerablemente con la temperatura y la fracción másica de bromuro de litio. Para tener en cuenta este cambio, se ha procedido al desarrollo de una ecuación que relacione el calor de absorción con la temperatura y la fracción másica. Para obtener los coeficientes, primero se ha analizado la dependencia del calor de absorción respecto a la temperatura. Como se observa en la Figura A.1, esta relación es lineal. Por lo tanto, la ecuación de la relación tendrá la forma:

$$h_{\text{abs}} = A(w)T + B(w), \tag{A.8}$$

donde $A(w)$ y $B(w)$ son coeficientes dependientes de la fracción másica. Así, primero se ha examinado la relación de los dos coeficientes con la fracción másica. Para ello, se han estimado los coeficientes para cada fracción másica usando el método de mínimos cuadrados. La Figura A.2 presenta los coeficientes y el ajuste realizado para diferentes fracciones másicas, así como los residuales para

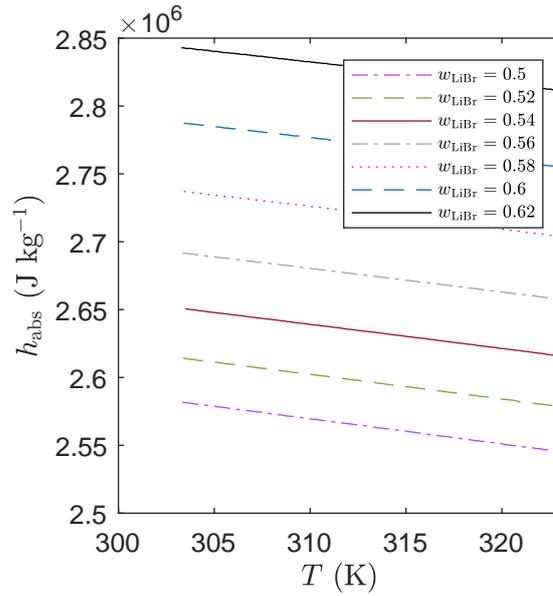


Figura A.1: Valores del calor de absorción h_{abs} en función de la temperatura para diferentes fracciones másicas cuando $p = 1\text{kPa}$ calculados mediante la ecuación (A.6).

los coeficientes A , mientras la Figura A.3 muestra para el coeficiente B , ambos cuando $p = 1\text{kPa}$.

Como muestra la Figura A.2, la relación del coeficiente A con la fracción se acerca a una relación lineal, mientras que para el coeficiente B la relación es cuadrática (Figura A.3). De esta manera, se ha ajustado la nube de puntos a una curva y se han obtenido los coeficientes de los polinomios mediante el método de los mínimos cuadrados. Así, cuando $p = 1\text{kPa}$, los coeficientes A y B quedarían:

$$A = A_1(w_{\text{LiBr}}) + A_2, \quad (\text{A.9a})$$

$$B = B_1(w_{\text{LiBr}}^2) + B_2(w_{\text{LiBr}}) + B_3. \quad (\text{A.9b})$$

y los coeficientes se muestran en la Tabla A.5:

Tabla A.5: Valores de los coeficientes A y B de la Ecuación A.9

	1	2	3
A	$2.0954 \cdot 10^3$	$-2.9001 \cdot 10^3$	-
B	$5.4668 \cdot 10^6$	$-4.5854 \cdot 10^6$	$4.0695 \cdot 10^6$

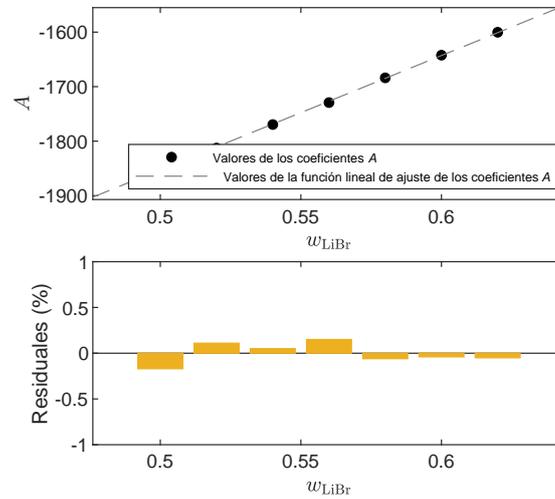


Figura A.2: Coeficientes y funciones ajustadas y residuales en función de la fracción másica para el coeficiente A.

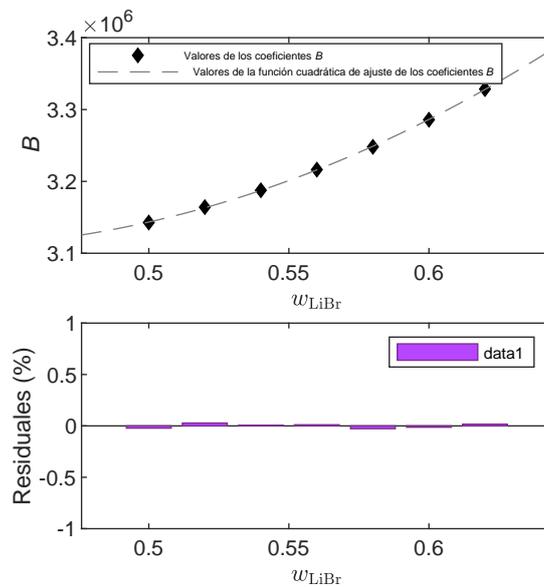


Figura A.3: Coeficientes y funciones ajustadas y residuales en función de la fracción másica para el coeficiente A.

B | CÁLCULO DE LAS CONDICIONES DE EQUILIBRIO DE LA INTERFACE

Tal y como se ha mostrado en la Sección 5.2.7, la condición de equilibrio termodinámico se ha estimado por medio de la Ecuación 5.26.

Para el cálculo del potencial químico de la solución binaria ($\mu_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}^*(w, T, p)$), se ha empleado la Ecuación (B.1) propuesto por Yuan y Herold [220].

$$\begin{aligned}
 \mu_{\text{LiBr-H}_2\text{O}}^*(w_{\%}, T, p) = & \\
 & A_0 + A_1 + A_2 (2w_{\%} - w_{\%}^2) + A_3 (3w_{\%}^2 - 2w_{\%}^3) + A_4 (1.1w_{\%}^{0.1} - 0.1w_{\%}^{1.1}) \\
 & + T (B_0 + B_1 + B_2 (2w_{\%} - w_{\%}^2) + B_3 (3w_{\%}^2 - 2w_{\%}^3) + B_4 (1.1w_{\%}^{0.1} - 0.1w_{\%}^{1.1})) \\
 & + T^2 (C_0 + C_1 + C_2 (2w_{\%} - w_{\%}^2) + C_3 (3w_{\%}^2 - 2w_{\%}^3) + C_4 (1.1w_{\%}^{0.1} - 0.1w_{\%}^{1.1})) \\
 & + T^3 (D_0 + D_1 + D_2 (2w_{\%} - w_{\%}^2) + D_4 (1.1w_{\%}^{0.1} - 0.1w_{\%}^{1.1})) \\
 & + T^4 (E_0 - E_1) + \frac{F_0 + F_1}{T - T_0} \\
 & + p [V_0 + V_1 + V_2 (2w_{\%} - w_{\%}^2) + V_3 T + V_4 T + V_5 T (2w_{\%} - w_{\%}^2) + V_6 T^2 + V_7 T^2] \\
 & + \ln(T) [L_0 + L_1 + L_2 (2w_{\%} - w_{\%}^2) + L_3 (3w_{\%}^2 - 2w_{\%}^3) + L_4 (1.1w_{\%}^{0.1} - 0.1w_{\%}^{1.1})] \\
 & + \text{Tin}(T) [M_0 + M_1 + M_2 (2w_{\%} - w_{\%}^2) + M_3 (3w_{\%}^2 - 2w_{\%}^3) + M_4 (1.1w_{\%}^{0.1} - 0.1w_{\%}^{1.1})]
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Los coeficientes se muestran en la Tabla A.4 [220]. Igual que en el Apéndice A, el valor la temperatura de referencia es de $T_0 = 220$ K

Por su parte, el potencial químico del vapor agua se ha estimado por medio de la Ecuación (B.2) propuesto por Ziegler y Trepp [230].

$$\begin{aligned}
 \mu_{\text{R}}^{*g} = & h_{\text{oR}}^g - T_{\text{R}} s_{\text{oR}}^g \\
 & + \int_{T_{\text{oR}}}^{T_{\text{r}}} c_{\text{pR}}^{\text{go}} dT_{\text{r}} - T_{\text{R}} \int_{T_{\text{oR}}}^{T_{\text{r}}} c_{\text{pR}}^{\text{go}/T_{\text{r}}} dT_{\text{r}} \\
 & + T_{\text{r}} \ln(p_{\text{r}}/p_{\text{oR}}) \\
 & + C_1 (p_{\text{R}} - p_{\text{oR}}) \\
 & + C_2 (p_{\text{R}}/T_{\text{R}}^3 - 4p_{\text{oR}}/T_{\text{oR}}^3 + 3p_{\text{oR}}T_{\text{R}}/T_{\text{oR}}^4) \\
 & + C_3 (p_{\text{R}}/T_{\text{R}}^{11} - 12p_{\text{oR}}/T_{\text{oR}}^{11} + 11p_{\text{oR}}T_{\text{R}}/T_{\text{oR}}^{12}) \\
 & + C_4 (\rho_{\text{R}}^3/T_{\text{R}}^{11} - 12p_{\text{oR}}^3/T_{\text{oR}}^{11} + 11p_{\text{oR}}^3T_{\text{R}}/T_{\text{oR}}^{12}) / 3
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

donde c_{pR}^{go} se calcula utilizando la Ecuación (B.3) [230].

$$c_{pR}^{go} = D_1 + D_2 T_R + D_3 T_R^2 \quad (\text{B.3})$$

Los valores de los coeficientes de las Ecuaciones (B.2) y (B.3) se muestran en la Tabla B.1:

Tabla B.1: Coeficientes del vapor de agua puro utilizadas en las Ecuaciones (B.2) y (B.3) [230].

H ₂ O	
C_1	$2.136131 \cdot 10^{-2}$
C_2	$-3.169291 \cdot 10^1$
C_3	$-4.634611 \cdot 10^{-4}$
C_4	0
D_1	4.01917
D_2	$-5.17555 \cdot 10^{-2}$
D_3	$1.951939 \cdot 10^{-2}$
h_{0R}^g	60.965058
s_{0R}^g	13.453430
T_{0R}	5.0705
p_{0R}	3

Las propiedades adimensionales, se han calculado mediante las ecuaciones (B.4a)-(B.4f) [230].

$$T_R = T/T_B, \quad (\text{B.4a})$$

$$p_R = p/p_B, \quad (\text{B.4b})$$

$$g_R = g/RT_B, \quad (\text{B.4c})$$

$$h_R = h/RT_B, \quad (\text{B.4d})$$

$$c_{pR} = c_p/R, \quad (\text{B.4e})$$

$$S_R = s/R, \quad (\text{B.4f})$$

y los valores constantes T_R , p_B y R son:

$$T_B = 100 \text{ K} \quad (\text{B.5a})$$

$$p_B = 10 \text{ bar} \quad (\text{B.5b})$$

$$R = 8.314 \text{ kJ kmol}^{-1} \text{ K}^{-1} \quad (\text{B.5c})$$

De esta manera, utilizando el método de Newton Raphson se resuelve la Ecuación 5.26, obteniendo la relación lineal de la concentración de equilibrio en función de la temperatura, mostrada en la Figura 5.4.