

Artículo de investigación

Cómo citar: L. Cardona, V. Gómez, "Modelamiento matemático para correlacionar la viscosidad dinámica de refrigerantes utilizando la teoría de reacción absoluta de Eyring". *Inventum*, vol. 17, n.º 32, pp. 3-12, enero-junio 2022. doi: 10.26620/uniminuto.inventum.17.32.2022.3-12

Editorial: Corporación Universitaria Minuto de Dios - UNIMINUTO.

ISSN: 1909-2520
eISSN: 2590-8219

Fecha de recibido: 1 de febrero de 2022
Fecha de aprobado: 1 de marzo de 2022
Fecha de publicación: 15 de marzo de 2022

Conflicto de intereses: los autores han declarado que no existen intereses en competencia.

Modelamiento matemático para correlacionar la viscosidad dinámica de refrigerantes utilizando la teoría de reacción absoluta de Eyring

Mathematical modeling to correlate the dynamic viscosity of refrigerants using Eyring's absolute reaction theory

Modelando matemática para correlacionar a viscosidade dinâmica de refrigerantes usando a teoria da reação absoluta de Eyring¹

Resumen

En este trabajo se evalúa la capacidad de un modelo matemático basado en la teoría de la reacción absoluta de Eyring para describir la viscosidad líquida saturada de refrigerantes y sus mezclas. Para la estimación de las propiedades termodinámicas asociadas al modelo de viscosidad, se utiliza una versión modificada de la ecuación de estado de Peng-Robinson. El modelo tiene tres parámetros que son determinados utilizando datos pseudoexperimentales a partir de la base de datos de REFPROP 8 del NIST. En total, 660 datos pseudoexperimentales en un intervalo de temperatura entre 121 K y 479,98 K y de presión entre 2,18 kPa y 5782,6 kPa son utilizados en el proceso de ajuste. Las desviaciones absolutas promedio en la viscosidad son de 0,52 %, valor que se encuentra dentro de las incertidumbres experimentales. Posteriormente, el modelo es comparado con otros desarrollados en la literatura y este proporciona valores máximos de desviación inferiores de 6,86 %. Finalmente, el modelo es extendido a mezclas utilizando una regla de mezcla simple y las desviaciones promedio son de 2,01 %. En general, los resultados muestran que el modelo representa una alternativa apropiada para modelar la viscosidad saturada de líquidos de refrigerantes.

Palabras clave: viscosidad dinámica, teoría de reacción absoluta de Eyring, ecuación de estado de Peng-Robinson, refrigerantes, viscosidad líquida saturada.

Luis F. Cardona

Ingeniero Químico, Doctor en Ingeniería,
Universidad Católica Luis Amigó,
Medellín, Colombia
e-mail: luis.cardonapa@amigo.edu.co
Orcid: <https://orcid.org/0000-0002-6526-9508>

Viviana Gómez C.

Ingeniera Química, Doctora en Ingeniería,
Universidad Pontificia Bolivariana,
Grupo de Pulpa y Papel, Medellín, Colombia
e-mail: viviana.gomez@upb.edu.co
Orcid: <https://orcid.org/0000-0001-9693-0576>



¹ Producto derivado del proyecto de investigación "Desarrollo de un modelo que permita estimar la capacidad calorífica de líquidos iónicos", apoyado por la Universidad Católica Luis Amigó.

Abstract

In this work, the capability of a model based on the Eyring's absolute reaction theory is used to describe the saturated liquid viscosity of refrigerants and their mixtures is evaluated. To estimate the thermodynamic properties associated with the viscosity model, a modified Peng-Robinson equation of state is used. The model has three adjustable parameters that are determined using pseudo-experimental data from the NIST REFPROP 8 database. In total, 660 pseudo-experimental data in a temperature range between 121.00 K to 479.98 K and a pressure range between 2.18 kPa to 5782.6 kPa are used in the fitting process. The average absolute deviation of viscosity is around 0.52 %, this value is within the experimental uncertainties. Subsequently, the model is compared with others developed in the literature and this provides maximum values of deviations below 6.86 %. Finally, the model is extended to mixtures using a simple mixing rule and the average deviation is around 2.01 %. Overall results show that the model represents an appropriate alternative for modeling the liquid saturated viscosity of refrigerants.

Keywords: dynamic viscosity, Eyring's absolute rate theory, Peng-Robinson cubic equation of state, refrigerants, saturated liquid viscosity.

Resumo

Neste trabalho é avaliada a capacidade de um modelo baseado na teoria da reação absoluta de Eyring para descrever a viscosidade líquida dos refrigerantes e suas misturas. Para estimar as propriedades termodinâmicas associadas ao modelo de viscosidade, é utilizada uma versão modificada da equação de estado de Peng-Robinson. O modelo tem três parâmetros que são determinados usando dados pseudoexperimentais do banco de dados REFPROP 8 do NIST. No total, 660 dados pseudoexperimentais numa gama de temperatura entre 121 K a 479,98 K e uma gama de pressões entre 2,18 kPa a 5782,6 kPa são usados no processo de ajuste. Os desvios absolutos médios na viscosidade são de 0,52 %, este valor está dentro das incertezas experimentais. Posteriormente, o modelo é comparado com outros desenvolvidos na literatura e este fornece valores máximos de desvios abaixo de 6,86 %. Finalmente, o modelo é estendido para misturas usando uma regra de mistura simples e os desvios médios são de 2,01 %. No geral, os resultados mostram que o modelo representa uma alternativa adequada para modelar a viscosidade saturada de líquidos refrigerantes.

Palavras-chave: viscosidade dinâmica, teoria da reação absoluta de Eyring, equação de estado de Peng-Robinson, refrigerantes, viscosidade do líquido saturado.

I. INTRODUCCIÓN

El mundo actual requiere de sistemas de refrigeración y climatización para generar confort térmico en espacios habitados o en aplicaciones industriales como la agroalimentaria, la farmacéutica y la tecnológica. Por ejemplo, en la conservación de alimentos, medicinas, materiales y aparatos electrónicos, entre otros [1], [2]. Además, los refrigerantes son sustancias empleadas en sistemas de acondicionamiento de servicios industriales [3], que incluyen el desarrollo de redes de intercambiadores de calor y bombas, cumpliendo con diferentes requerimientos de diseño [4].

Entre las propiedades de transporte de especial interés en la industria se encuentra la viscosidad, ya que es utilizada para el diseño de equipos como torres de destilación, intercambiadores de calor o reactores químicos y biológicos [5], [6]. Cuando se carece de datos experimentales, la viscosidad se puede predecir utilizando diferentes tipos de modelos, ya sean teóricos, empíricos o semiempíricos [7], [9].

Los modelos teóricos se fundamentan en simulaciones moleculares y estadísticas, aplicadas principalmente en fase de vapor [10]. Los modelos empíricos se basan en el comportamiento experimental de la viscosidad en términos de la temperatura y presión [11], [13]. No obstante, los modelos generados tienen entre 3 y 25 constantes [11]. Finalmente, los modelos semiempíricos utilizan diferentes enfoques relacionados con la teoría de Eyring [14], [15], la teoría de fricción [16], [17], la teoría del volumen libre [18] y la teoría de entropía residual [19], entre otras [20], [21]. Las características más atractivas de estos modelos obedecen a que sus parámetros se determinan utilizando datos experimentales y son capaces de describir la viscosidad en intervalos de temperatura entre 65 K y 460 K y de presión entre 100 kPa y $2,5 \cdot 10^5$ kPa [21]. Sin embargo, algunos de estos son utilizados en hidrocarburos y tienen un gran número de parámetros [7-9], [11].

En [14] desarrollaron un modelo de viscosidad a partir de las formulaciones realizadas por [22] y [23], con el propósito de mejorar la predicción en condiciones de saturación en alta y baja temperatura. Este modelo es conocido como *teoría de reacción absoluta de Eyring*,

y se utilizó para predecir la viscosidad de diferentes tipos de sustancias polares y no polares que incluyen alcanos, alquenos, ácidos orgánicos, alcoholes, fenoles y aromáticos, entre otros. Las desviaciones promedio son de 1,34 % y los valores máximos, de 8,70 %. Posteriormente, en [15] incorporaron la teoría de la estructura significativa junto con el modelo propuesto por [14] en la predicción de la viscosidad en la curva de coexistencia líquido y vapor de propano y agua. Las desviaciones promedio se encuentran entre 2,17 % y 4,02 %. [24], por otra parte, realizó algunas modificaciones del modelo de [14] y [15], demostró que la adición de un parámetro genera una mejor descripción de la viscosidad. Sin embargo, este modelo no se ha utilizado para realizar predicciones en sustancias refrigerantes.

Los modelos capaces de describir la viscosidad de refrigerantes se han abordado poco en la literatura [25], [26]. En este trabajo se evalúa la capacidad del modelo de viscosidad basado en la teoría de reacción absoluta de Eyring [14], [15] para correlacionar la fase líquida saturada de diferentes tipos de refrigerantes con sus mezclas. Inicialmente, se determinan los parámetros del modelo de viscosidad utilizando datos pseudoexperimentales reportados por la base de datos REFPROP 8 (Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties Database, versión 8) del Instituto Nacional de Normas y Tecnología de los Estados Unidos (NIST, por sus siglas en inglés) [27]. Posteriormente, el modelo es comparado con otros reportados en la literatura. Finalmente, se extiende el modelo a mezclas empleando una regla de mezcla simple.

II. METODOLOGÍA

A. Modelo de viscosidad

A partir de la teoría de reacción absoluta de Eyring [22] y las formulaciones planteadas en [23] se desarrolló un modelo de viscosidad para la estimación del líquido saturado dado por la ecuación 1.

$$\mu_L = \frac{RT}{V_l} \cdot \frac{10^{10}}{\gamma} \exp \left[\alpha \frac{\Delta U_{vap}}{RT} \right] \exp(Z_l) \quad (1)$$

En donde, μ_L es la viscosidad líquida en μP (micropoises), V_l es el volumen molar en $\text{m}^3\cdot\text{kmol}^{-1}$, γ representa la frecuencia de salto de las partículas en s^{-1} , α es un parámetro que depende de cada sustancia, T es la temperatura en K , R es la constante de los gases ideales en $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, ΔU_{vap} es la energía interna de vaporización en $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, Z_l es el factor de compresibilidad del líquido. Posteriormente, en [14] mejoraron el desempeño del modelo en condiciones de alta y baja temperatura y presión en la fase líquida introduciendo un parámetro adicional (β) y aproximando el $\Delta U_{vap} = \Delta H_{vap} - RT\Delta Z_{vap}$ (ΔH_{vap} es la entalpía de vaporización en $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$, $\Delta Z_{vap} = Z_v - Z_l$). El modelo final se expresa mediante la ecuación 2.

$$\mu_L = \frac{RT}{V_l} \cdot \frac{10^{10}}{\gamma} \exp \left[\alpha \left(\frac{\Delta H_{vap}}{RT} - \Delta Z_{vap} \right)^\beta \right] \exp(Z_l) \quad (2)$$

En donde, μ_L es la viscosidad en μP (micropoises), T es la temperatura en K , V_l es el volumen molar en $\text{m}^3\cdot\text{kmol}^{-1}$, R es la constante de los gases ideales ($8,314472 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$), ΔH_{vap} es la entalpía de vaporización en $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$ y ΔZ_{vap} se define como $\Delta Z_{vap} = Z_v - Z_l$ (donde Z_v y Z_l son los factores de compresibilidad del vapor y líquido, respectivamente), α , β , y γ son parámetros ajustables del modelo. Para realizar el cálculo de estas propiedades termodinámicas es necesario conocer la presión del sistema (P en kPa) que se obtiene a partir de los valores recomendados y aceptados por la base de datos REFPROP 8 [27]. En este trabajo, ΔH_{vap} y ΔZ_{vap} se calculan a partir de una modificación de la ecuación de estado de Peng-Robinson en [28]. Esta ecuación cúbica de estado representa una alternativa muy apropiada, ya que ha sido empleada con éxito en la predicción de diferentes propiedades termodinámicas, como el volumen molar, el factor de compresibilidad y la entalpía de vaporización [28], [29]. El modelo de ecuación de estado reportado en la literatura [29] es consistente en unidades, donde T es la temperatura en K , P es la presión en kPa , ω , χ y Z son adimensionales, V es el volumen molar en $\text{m}^3\cdot\text{kmol}^{-1}$ y ΔH_{vap} es la entalpía de vaporización en $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$.

Finalmente, se evalúa la capacidad del modelo para realizar predicciones en mezclas de refrigerantes utilizando la regla de mezcla simple propuesta por [10], cuya expresión matemática para una mezcla binaria se describe mediante la ecuación 3.

$$\ln \mu_m = x_1 \ln \mu_1 + x_2 \ln \mu_2 + x_1 x_2 G_{12} \quad (3)$$

En donde, μ_m es la viscosidad de la mezcla en μP , x_1 y x_2 son las composiciones del componente 1 y 2 (adimensional), μ_1 y μ_2 son las viscosidades del componente 1 y 2 y G_{12} es un parámetro de interacción que depende de cada mezcla. En este trabajo, $G_{12} = 0$ para todas las mezclas analizadas: $\mu_m = \exp(x_1 \ln \mu_1 + x_2 \ln \mu_2)$.

B. Selección de datos

Los datos pseudoexperimentales utilizados en este trabajo son obtenidos a partir de los valores recomendados como aceptados por la base de datos de la REFPROP 8 [27]. Esta base de datos ha sido utilizada en diferentes aplicaciones industriales y en el desarrollo de nuevos modelos termodinámicos [8], [30]. Por otro lado, la extensión a mezclas se realiza utilizando los datos experimentales reportados en [31] y [32].

Los refrigerantes son clasificados en dos categorías: 1) las sustancias utilizadas en el proceso de determinación de los parámetros óptimos del modelo de viscosidad (α , β , γ) y 2) la extensión del modelo a mezclas utilizando la ecuación de Grunberg y Nissan. En la tabla 1 se muestran las sustancias trabajadas en esta investigación. Para cada refrigerante (22 sustancias) se toman 30 datos pseudoexperimentales del líquido. En la columna 1 de la tabla 1 se muestra la lista de refrigerantes y en las columnas 2 a 4, el peso molecular y los intervalos de temperatura, presión y viscosidad trabajados en esta investigación. En general, son evaluados 660 datos pseudoexperimentales en intervalos de temperatura que varían entre 121 K y 479,98 K ; presión, entre 2,18 kPa y 5782,6 kPa , y viscosidad, entre 336,18 μP y 18129 μP . Por otro lado, la tabla 2 muestra las mezclas trabajadas en esta investigación con sus rangos de temperatura, viscosidad y composición a presión atmosférica ($P = 1 \text{ atm}$). Para mezclas, se evaluaron 475 datos experimentales (3 mezclas binarias y 1 mezcla ternaria) en un rango de temperatura entre 245,65 K y 345,11 K y composición entre 0,1 y 0,7. Las incertidumbres de los datos pseudoexperimentales (obtenidos de la base de datos REFPROP 8 [27]) y experimentales en [31] y [32] son menores del 2 %.

Sustancia	M (g/mol)	ΔT (K)	ΔP (kPa)	$\Delta \mu$ (μP)
R11	137,37	235,6-460	5,9133-3748,8	701,42-8699,2
R113	187,38	243,63-479,98	2,9113-3048,9	693,31-18129
R114	170,92	275-408,4	94,764-2725,5	656,1-3589
R115	154,47	176,58-317,84	2,8417-1466,4	1276,1-11688
R116	138,01	180-286,72	41,661-2607,5	692,24-5566,7
R12	120,91	192,48-384,75	5,8944-4108,6	418,04-7075,8
R123	152,93	228,47-411,25	2,5953-1696,2	1264,8-10626
R124	136,48	197,83-356,08	2,4923-1678,9	1273,5-10984
R134a	102,03	175-302,6	3,652-1546,7	1312,6-10812
R13	104,46	151-271,8	5,7394-1900,5	988,22-6351,1
R134a	102,03	187,09-336,76	2,1843-1830,2	1173,4-11968
R14	88,01	121-200	12,576-1552,3	977,9-3924,6
R141b	116,95	239,43-430,96	4,6502-2056,2	1067,2-9025,1
R142b	100,50	205,15-369	4,0726-1912,8	1063,8-7751,7
R143a	84,04	172,94-311,27	3,2701-1751	964,13-7855,6
R152a	66,05	193,22-347,8	3,611-2089	904,12-7264
R218	188,02	258-339	245,32-2311,9	700,66-3085,7
R22	86,47	184,65-358,65	5,4344-4076,8	692,06-7099,7
R23	70,01	149,51-292	4,0898-4045,6	603,28-7111,6
R236ea	152,04	250-406	25,795-3001,2	761,59-8355,7
R32	52,02	175,63-351,25	4,7491-5782,6	336,18-5319,5
R41	34,03	158,71-315,31	8,2606-5652	465,65-7142,8

Tabla 1. Lista de refrigerantes y rangos de temperatura, presión y viscosidad.
Fuente: Elaboración propia.

Mezclas	N.º de datos	ΔT (K)	$\Delta \mu$ (μP)	Δx_i	Ref.
(1) R32 + (2) R134a	148	246,07-335,1	997-3157	0,3-0,7	[31]
(1) R125 + (2) R134a	156	248,85-345,11	856-3440	0,3-0,7	[31]
(1) R32 + (2) R124	14	252,29-310,09	1530-3045	0,455-0,485	[32]
(1) R125 + (2) R134a + (3) R32	157	245,65-340,23	911-2973	0,1-0,34	[31]

Tabla 2. Lista de mezclas de refrigerantes y rangos de temperatura y viscosidad a presión atmosférica.
Fuente: Elaboración propia.

C. Determinación de parámetros del modelo de viscosidad

Inicialmente los parámetros del modelo (α , β , γ) son determinados utilizando los datos pseudoexperimentales y a partir de la siguiente función objetivo a minimizar dada por la ecuación 4 y utilizando el método del gradiente reducido generalizado incorporado en Solver de MS Excel 2017® [12].

$$F.O. = \%AAD\mu_L(\vec{X}) = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\mu_{L,cal}(\vec{X}) - \mu_{L,exp}}{\mu_{L,exp}} \right| \quad (4)$$

Donde $X = \{\alpha, \beta, \gamma\}$. En la ecuación 4, $F.O.$ es la función objetivo relacionada con la desviación absoluta relativa promedio, N es el número de datos de viscosidad de cada sustancia, $\mu_{L,exp}$ y $\mu_{L,cal}$ representan las viscosidades de líquido experimental y calculada y \vec{X} es el vector de parámetros del modelo que depende de cada sustancia (i). Es importante aclarar que los parámetros del modelo son estimados para cada refrigerante de manera individual, utilizando la función objetivo representada en la ecuación 4. Con el propósito de conocer la bondad del modelo, se calculan la desviación relativa promedio ($\%AD\mu_L$, ecuación 5) y el valor máximo de la desviación absoluta relativa ($\%MD\mu_L$, ecuación 6).

$$\%AD\mu_L = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\mu_{L,cal} - \mu_{L,exp}}{\mu_{L,exp}} \right) \quad (5)$$

$$\%MD\mu_L = \text{valor máximo de } 100 \cdot \left| \frac{\mu_{L,cal} - \mu_{L,exp}}{\mu_{L,exp}} \right| \quad (6)$$

Las ecuaciones 4 a 6 son fundamentales para evaluar la bondad y robustez del modelo.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la tabla 3 se muestran los valores estimados de los parámetros del modelo con 4 cifras decimales. Las desviaciones absolutas promedio son de 0,52 % y el valor máximo de la desviación absoluta es de 6,86 %, mientras que la desviación relativa promedio es de -0,10 %. Valores que se encuentran dentro de la incertidumbre experimental reportada en la literatura [27]. La figura 1 muestra la capacidad de correlación del modelo de viscosidad. Tal como se observa en esta figura, el modelo describe los datos experimentales con una baja desviación absoluta promedio. El refrigerante R113 exhibe a bajas temperaturas las mayores desviaciones absolutas ($T = 243,63 \text{ K}$, $AAD\mu_L = 6,86 \%$). En [25] reportan para el mismo refrigerante desviaciones promedio de 7,49 %

con valores máximos de 35,33 %, valores superiores a los encontrados en este trabajo. Es decir, en la figura 1, el modelo desarrollado en este trabajo presenta la misma tendencia y un apropiado ajuste de los datos pseudo-experimentales. Es importante aclarar que los datos pseudoexperimentales son obtenidos por la base de datos REFPROP 8 [27].

Para realizar una comparación con otros trabajos reportados en la literatura, se seleccionó un conjunto de modelos que incluyen la teoría de los estados correspondientes, la teoría de entropía residual, el concepto de similitud geométrica, las redes neuronales y la teoría de fricción. Para efectuar la comparación, se tomaron las sustancias comunes. En la tabla 4 se ilustra la comparación del modelo de viscosidad. En [33] desarrollaron un modelo basado en la teoría de los estados correspondientes utilizando el R134a (1,1,1,2-tetrafluoroetano) como fluido de referencia. Este modelo requiere unos factores de forma específicos para cada refrigerante y los parámetros moleculares de Lennard-Jones. Además, tiene 11 parámetros ajustables. Para el R23, las desviaciones medias reportadas son de 5 % ($MD\mu_L = 20 \%$) (tabla 4, columna 6), mientras que en este trabajo son de 0,54 %.

Sustancia	α	β	$\gamma \cdot 10^{-7}$	$\%AD\mu_L$	$\%AAD\mu_L$	$\%MD\mu_L$
R11	0,2008	1,0496	51770,2583	-0,07	0,48	2,85
R113	0,1545	1,1573	33825,6354	-0,28	0,70	6,86
R114	0,1378	1,1797	38100,3242	0,03	0,26	1,00
R115	0,1941	1,0613	37110,5854	-0,04	0,22	1,54
R116	0,1646	1,1424	33614,6627	-0,09	0,29	2,02
R12	0,1864	1,0604	50326,7188	-0,09	0,81	2,88
R123	0,2502	0,9653	54077,0094	-0,14	0,95	4,10
R124	0,2515	0,9633	53061,8546	-0,18	0,54	3,41
R134a	0,1979	1,0459	48039,9559	-0,05	0,20	1,28
R13	0,2817	0,9284	64630,4521	-0,06	0,59	2,26
R134a	0,1202	1,1995	48517,0717	-0,09	0,21	1,89
R14	0,1167	1,2003	46468,7477	-0,06	0,22	1,12
R141b	0,2491	0,9901	69351,5115	-0,09	0,49	2,67
R142b	0,2253	0,9962	62509,0876	-0,05	0,58	2,58
R143a	0,1276	1,1864	54068,7862	-0,03	0,16	0,89
R152a	0,1593	1,1083	78224,3777	-0,04	0,61	2,60
R218	0,0874	1,3866	24986,8198	0,05	0,16	0,83

Sustancia	α	β	$\gamma \cdot 10^{-7}$	%AD μ_L	%AAD μ_L	%MD μ_L
R22	0,1734	1,0637	62612,6229	-0,15	0,61	3,89
R23	0,1021	1,2378	60287,6061	-0,07	0,54	2,66
R236ea	0,0974	1,3021	31682,6642	-0,24	0,55	6,07
R32	0,0765	1,3059	75891,8855	-0,23	1,66	5,72
R41	0,0968	1,3039	76344,0365	-0,13	0,63	2,68

Tabla 3. Resumen de las desviaciones obtenidas utilizando el modelo de viscosidad en refrigerantes puros.

Fuente: Elaboración propia.

N.º	Modelo	Refrigerante	ΔT (K) / ΔP (kPa)	Resultados de la literatura, %AAD μ_L / %MAD μ_L	En este trabajo, %AAD μ_L / %MAD μ_L	Ref.
1	Teoría de estados correspondientes	R23	No reportado	5 % / 20 %	0,54 % / 2,66 %	[33]
2	Teoría de entropía residual	R22	184,65-358,65 / 5.4344-4076,8	1 % / 25 %	0,61 % / 3,89 %	[26]
3	Similitud geométrica	R114	275-408,4 / 94,764-2725,5	8,79 % / 23,50 %	0,26 % / 1,00 %	[25]
4	Redes neuronales	R152a	193,22-347,8 / 3,611-2089	1,88 % / 7,50 %	1,66 % / 5,72 %	[35]
5	Teoría de fricción	R32	175,63-351,25 / 4,7491-5782,6	4,60 % / 17,15 %	1,66 % / 5,72 %	[34]

Tabla 4. Comparación con diferentes trabajos realizados en la literatura.

Fuente: Elaboración propia.

En [34] utilizaron la teoría de fricción propuesta años atrás por [16] con el R134a como fluido de referencia. Este modelo tiene 18 parámetros ajustables y genera desviaciones para el R32 de 4,60 % ($MD\mu_L = 17,15$ %), valores superiores a los encontrados en este trabajo ($AAD\mu_L = 1,66$ %, $MD\mu_L = 5,72$ %). Los modelos anteriormente descritos requieren de un fluido de referencia que es seleccionado por tener la mayor cantidad de datos experimentales, en comparación con este trabajo, en el que no se requiere utilizar ningún fluido de referencia. Por otro lado, el modelo empírico basado en el concepto de similitud geométrica como el desarrollado por [25] se basa en comparar dos diagramas termodinámicos como el TV (volumen molar) P y $T\mu$ (viscosidad) P . Este modelo tiene 3 parámetros ajustables, y para el R114 genera desviaciones absolutas promedio de 8,79 % ($MD\mu_L = 23,50$ %), en comparación con las obtenidas en este trabajo, que son de 0,26 % ($MD\mu_L = 1$ %). Otra alternativa para modelar la viscosidad es utilizar redes neuronales artificiales [35] con 5 capas, lo que produce desviaciones absolutas promedio de 1,88 % y valores máximos de 7,50 % para el refrigerante R152a, en comparación con este trabajo, en el cual se obtienen desviaciones promedio de 1,66 % y valores máximos de 5,72 %. No obstante, este modelo genera una ecuación con muchas constantes. Finalmente en [26] utilizaron la teoría de entropía residual para modelar la viscosidad de refrigerantes, con 4 parámetros ajustables

por sustancia. Las desviaciones para el R22 son de 1 % ($MD\mu_L = 25$ %), en comparación con las obtenidas en este trabajo, que son de 0,61 % ($MD\mu_L = 3,89$ %). En general, el modelo desarrollado en este trabajo proporciona desviaciones inferiores al 6,86 %, valores que son menores que los obtenidos en la literatura.

Por otro lado, la tabla 5 muestra los resultados del modelo junto con la regla de mezcla establecida por [10]. Las desviaciones absolutas promedio son de 2,01 % con un valor máximo de 20,48 %. El valor máximo de desviación absoluta se obtiene en condiciones de alta temperatura (similar a lo encontrado en refrigerantes puros); por tal motivo, se recomienda utilizar este modelo en condiciones inferiores a las críticas. Se obtienen valores de desviaciones promedio relativas cercanas a cero (-0,86 %), lo que demuestra que los errores se encuentran distribuidos entre valores positivos y negativos. Estos resultados se ilustran en la figura 2, donde los datos experimentales son graficados (puntos de colores) junto con el modelo (línea sólida). En esta figura se muestra cómo el modelo tiene una apropiada tendencia y ajuste de los datos experimentales. Es importante aclarar que los datos experimentales son obtenidos en un laboratorio y las condiciones de temperatura, presión y los equipos utilizados se encuentran reportados por [31] y [32].

En conclusión, mediante el uso de una regla de mezcla simple junto con el modelo de viscosidad acoplado a una ecuación cúbica es posible llevar a cabo predicciones adecuadas de mezclas en condiciones líquidas.

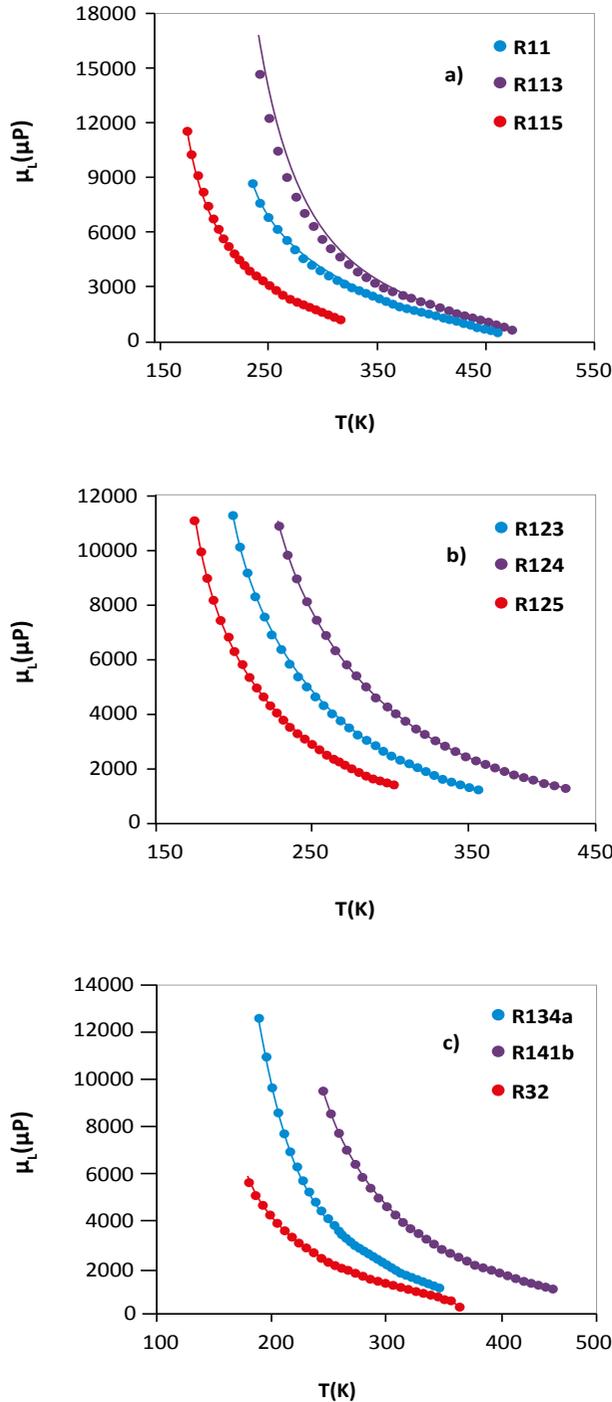


Figura 1. Comparación entre los valores pseudoexperimentales y el modelo de viscosidad. Los puntos coloreados son datos experimentales y la línea sólida el modelo. a) R11, R113, R115, b) R123, R124, R125, c) R134a, R141b, R32.

Fuente: Elaboración propia.

Mezclas	%AD μ_m	%AAD μ_m	%MD μ_m
(1) R32+(2) R134a	-0,94	1,32	3,62
(1) R125+(2) R134a	-2,38	3,57	20,48
(1) R32+(2) R124	0,39	1,55	3,40
(1) R125+(2) R134a+(3) R32	-0,50	1,61	8,71
General	-0,86	2,01	20,48

Tabla 5. Resumen de las desviaciones obtenidas utilizando el modelo de viscosidad en mezclas de refrigerantes.

Fuente: Elaboración propia.

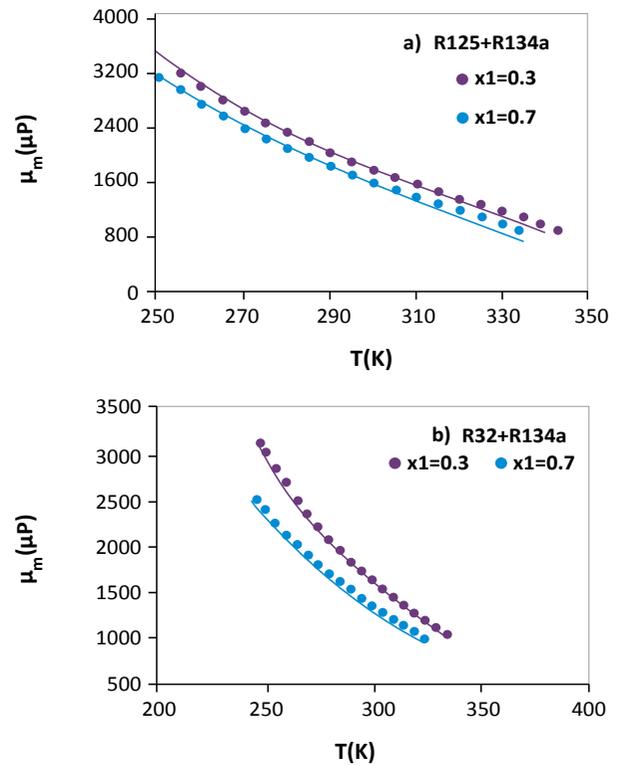


Figura 2. Comparación entre los valores experimentales y la regla de mezcla de Grunberg y Nissan. Los puntos coloreados son datos experimentales y la línea sólida el modelo.

a) R125+R134a, b) R32+R134a.

Fuente: Elaboración propia.

IV. CONCLUSIONES

Del presente trabajo se extraen las conclusiones que se exponen a continuación.

Se modeló la viscosidad líquida saturada de refrigerantes utilizando la teoría de reacción absoluta de Eyring acoplada a una ecuación cúbica de estado. El modelo tiene 3 parámetros ajustables que dependen de la sustancia, los cuales se determinaron en un rango de temperatura que varía entre 95,28 K y 625,1 K y presión entre 0,13

kPa y 3520,1 kPa en la región de líquido saturado. Las desviaciones absolutas promedio son de 0,52 % (con un valor máximo de desviación de 6,86 %). No obstante, el modelo no es capaz de describir las condiciones cercanas a la temperatura y la presión críticas.

Las desviaciones absolutas reportadas en la literatura son inferiores a 25 %, mientras que el modelo basado en la teoría de reacción absoluta de Eyring presenta una desviación absoluta promedio inferior a 6,86 %. Por lo anterior, el modelo desarrollado en este trabajo constituye una alternativa para estimar la viscosidad líquida saturada de refrigerantes y puede ser utilizado en el dimensionamiento de equipos de cambio de fases como separadores y torres de destilación.

Los resultados de la evaluación de la extensión del modelo a mezclas utilizando una regla de mezcla simple demuestran que el modelo es apropiado para describir la viscosidad de mezclas de refrigerantes con desviaciones absolutas promedio de 2,01 %.

El modelo basado en la teoría de reacción absoluta de Eyring acoplado a una ecuación cúbica de estado proporciona resultados adecuados cuando se utiliza para describir la viscosidad líquida de refrigerantes y sus mezclas. Son necesarios trabajos posteriores para extender el modelo a condiciones de alta presión (cercanas al punto crítico) y regiones de una sola fase.

AGRADECIMIENTOS

LFC agradece a la Universidad Católica Luis Amigó, sede Medellín (Colombia), por el apoyo en la realización de la presente investigación. VGC agradece a la Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín (Colombia), por el apoyo en la realización de la presente investigación.

REFERENCIAS

- [1] H. Zhang, S. Shao, H. Zou, C. Tian, "Performance analysis on hybrid system of thermosiphon free cooling and vapor compression refrigeration for data centers in different climate zones of China", *Energy Procedia*, vol. 61, pp. 428-431, jun. 2015.
- [2] Y. Castro-García, N. Velázquez-Limón, R. Villa-Angulo, D. Saucedo-Carvajal, "Análisis termodinámico de un sistema de absorción tipo GAX enfriado por aire, para acondicionamiento térmico de espacios en climas cálidos extremos", *Inf. Tecnol.*, vol. 25, n.º 3, pp. 167-176, jun. 2014.
- [3] K. J. Park, T. Seo, D. Jung, "Performance of alternative refrigerants for residential air-conditioning applications", *Appl. Energy*, vol. 84, n.º 10, pp. 985-991, oct. 2007.
- [4] A. Kasaeian, S. M. Hosseini, M. Sheikhpour, O. Mahian, W. M. Yan, S. Wongwises, "Applications of eco-friendly refrigerants and nanorefrigerants: A review", *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 96, pp. 91-99, nov. 2018.
- [5] C. Henao. *Simulación y evaluación de procesos químicos*. Medellín, Colombia: Universidad Pontificia Bolivariana, 2006.
- [6] R. Turton, R. Bailie, W. Whiting, J. Shaeiwitz. *Analysis, synthesis, and design of chemical processes*. Michigan: Pearson Education, 2008.
- [7] L. F. Cardona, "Calculation of the viscosity of hydrocarbons based on the cubic equation of state of Jarrahian-Heidaryan", *Rev. Mexic. Ing. Quim.*, vol. 15, n.º 3, pp. 1019-1025, sep. 2016.
- [8] L. F. Cardona, L. A. Forero, J. A. Velásquez, "Modelamiento de la Viscosidad con Base en una Ecuación Cúbica μ TP del Tipo Peng-Robinson", *Inf. Tecnol.*, vol. 30, n.º 4, pp. 259-272, ago. 2019.
- [9] M. Bonyadi, M. Rostami, "A new viscosity model based on Soave-Redlich-Kwong equation of state", *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 451, n.º 15, pp. 40-47, nov. 2017.
- [10] B. E. Poling, J. M. Prausnitz, J. P. O'Connell. *Properties of gases and liquids* (5.ª ed.). Nueva York: McGraw-Hill, 2001.
- [11] T. B. Fan, L. S. Wang, "A viscosity model based on Peng-Robinson equation of state for light hydrocarbon liquids and gases", *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 247, pp. 59-69, sept. 2006.
- [12] J. O. Valderrama, L. F. Cardona, R. E. Rojas, "Correlation and prediction of ionic liquid viscosity using Valderrama-Patel-Teja cubic equation of state and the geometric similitude concept. Part I: pure ionic liquids", *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 497, pp. 164-177, oct. 2019.
- [13] J. O. Valderrama, L. F. Cardona, R. E. Rojas, "Correlation of ionic liquid viscosity using Valderrama-Patel-Teja cubic equation of state and the geometric similitude concept. Part II: binary mixtures of ionic liquids", *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 497, pp. 178-194, oct. 2019.



- [14] R. Macías-Salinas, F. García-Sánchez, O. Hernández-Garduza, “Viscosity model for pure liquids based on Eyring theory and cubic EOS”, *AIChE J.*, vol. 49, n.º 3, pp. 799-804, mar. 2003.
- [15] G. Cruz-Reyes, G. Luna-Bárceñas, J. F. Javier Alvarado, I. C. Sánchez, R. Macías-Salinas, “Simultaneous correlation of saturated viscosities of pure gases and liquids using the significant structure theory”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 44, n.º 6, pp. 1960-1966, feb. 2005.
- [16] S. E. Quiñones-Cisneros, C. K. Zéberg-Mikkelsen, E. H. Stenby, “Accurate density and viscosity modeling of nonpolar fluids based on the “f-theory” and a noncubic equation of state”, *Int. J. Thermophys.*, vol. 23, n.º 1, pp. 41-55, ene. 2002.
- [17] S. E. Quiñones-Cisneros, U. K. Deiters, “Generalization of the friction theory for viscosity modeling”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 10, n.º 25, pp. 12820-12834, jun. 2006.
- [18] F. Llovel, R. M. Marcos, L. F. Vega, “Free-volume theory coupled with soft-SAFT for viscosity calculations: comparison with molecular simulation and experimental data”, *J. Phys. Chem. B*, vol. 117, n.º 27, pp. 8159-8171, jun. 2013.
- [19] L. T. Novak, “Fluid viscosity-residual entropy correlation”, *Int. J. Chem. Reactor Eng.*, vol. 9, n.º 1, pp. 1-27, nov. 2011.
- [20] I. V. Derevich, “Thermodynamic model of viscosity of hydrocarbons and their mixtures”, *Int. J. Heat Mass Transf.*, vol. 53, pp. 3823-3830, sept. 2010.
- [21] X. Liu, C. Zhu, M. He, Y. Zhang, “Correlation for viscosities of pure liquids at high pressures”, *J. Mol. Liq.*, vol. 231, pp. 404-410, abr. 2017.
- [22] S. Glasstone, J. Laidler, H. Eyring. *The theory of rate process*. Nueva York: McGrawHill, 1941.
- [23] L. Qun-Fang, H. Yu-Chun, L. Rui-Sen, “Correlation of viscosities of pure liquids in a wide temperature range”, *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 140, pp. 221-231, December 1997.
- [24] L. F. Izquierdo, “Modelado de la viscosidad de compuestos puros en amplios intervalos de temperatura y presión”, tesis de maestría, Inst. Politéc. Nac., México, 2013.
- [25] S. Khosharay, M. Pierantozzi, G. Di Nicola, “Modeling investigation on the viscosity of pure refrigerants and their liquid mixtures by using the Patel-Teja viscosity equation of state”, *Int. J. Refrig.*, vol. 85, pp. 255-267, en. 2018.
- [26] X. Yang, X. Xiao, E. F. May, I. H. Bell, “Entropy scaling of viscosity—iii: application to refrigerants and their mixtures”, *J. Chem. Eng. Data*, vol. 66, n.º 3, pp. 1385-1398, feb. 2021.
- [27] E. Lemmon, M. Huber, and M. McLinden, REFPROP Standard reference database 23, U.S. Nat. Inst. of Standards and Technol., 2007, ver. 8.0.
- [28] L. A. Forero, J. A. Velásquez, “Representación simultánea del equilibrio líquido-vapor, el volumen molar y la entalpía de exceso de mezclas complejas mediante una ecuación de estado tipo Peng-Robinson”, *Inf. Tecnol.*, vol. 30, n.º 6, pp. 21-34, dic. 2019.
- [29] L. A. Forero, J. A. Velásquez, “A generalized cubic equation of state for non-polar and polar substances”, *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 418, pp. 74-87, jun. 2016.
- [30] J. C. Bloxham, M. E. Redd, N. F. Giles, IV, T. A. Knotts, W. V. Wilding, “Proper Use of the DIPPR 801 Database for Creation of Models, Methods, and Processes”, *J. Chem. Eng. Data*, vol. 66, n.º 1, pp. 3-10, dic. 2020.
- [31] A. Laesecke, R. F. Hafer, D. J. Morris, “Saturated-liquid viscosity of ten binary and ternary alternative refrigerant mixtures. Part I: Measurements”, *J. Chem. Eng. Data*, vol. 46, n.º 2, pp. 433-445, feb. 2001.
- [32] D. Ripple, O. Matar, “Viscosity of the saturated liquid phase of six halogenated compounds and three mixtures”, *J. Chem. Eng. Data*, vol. 38, n.º 4, pp. 560-564, oct. 1993.
- [33] M. L. Hubet, J. F. Ely, “Prediction of viscosity of refrigerants and refrigerant mixtures”, *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 80, pp. 239-248, nov. 1992.
- [34] X. Wang, J. Wu, Z. Liu, “Viscosity modeling of several HFC refrigerants using the friction theory”, *Fluid Ph. Equilibria*, vol. 262, pp. 251-263, dic. 2007.
- [35] L. H. Zhi, P. Hu, L. X. Chen, G. Zhao, “Viscosity prediction for six pure refrigerants using different artificial neural networks”, *Int. J. Refr.*, vol. 88, pp. 432-440, abr. 2018.