

**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA**  
***Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial***



Proyecto fin de carrera

**Diseño de la sección de purificación de  
una planta de producción de MTBE**

**Titulación:** I.T.I. Química Industrial  
**Intensificación:** Procesos Químicos  
**Alumno/a:** Tulia Espinosa Rodríguez  
**Director/a/s:** Carlos Godínez Seoane

Cartagena 30 de Septiembre de 2008

# ÍNDICE

1. MEMORIA DESCRIPTIVA.....	2
1.1. ANTECEDENTES.....	2
1.1.1. GASOLINAS. ÍNDICE DE OCTANO.....	2
1.1.2. MTBE.....	7
1.2. OBJETO DEL PROYECTO.....	11
1.3. TITULAR DE LA INDUSTRIA.....	11
1.4. CLASE Y NÚMERO DE LA INDUSTRIA SEGÚN C.N.A.E.....	11
1.5. EMPLAZAMIENTO DE LA INDUSTRIA.....	11
1.6. NORMATIVA Y LEGISLACIÓN APLICABLE.....	11
1.7. TERRENOS Y EDIFICACIONES.....	12
1.8. PROCESO INDUSTRIAL.....	13
1.9. MAQUINARIA E INSTALACIONES.....	13
1.10. PRODUCTOS UTILIZADOS.....	14
1.11. PRODUCTOS OBTENIDOS.....	14
1.12. SEGURIDAD.....	15
2. CÁLCULOS JUSTIFICATIVOS.....	19
2.1. CÁLCULO DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN T-100.....	19
2.1.1. DISEÑO BÁSICO.....	19
2.1.2. DISEÑO HIDRODINÁMICO.....	25
2.1.3. DISEÑO MECÁNICO.....	43
2.1.4. HOJA DE ESPECIFICACIONES.....	49
2.2. CÁLCULO DEL CONDENSADOR E-101.....	51
2.2.1. CÁLCULO DE LA CARGA TÉRMICA $Q$ .....	52
2.2.2. ASIGNACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN GEOMÉTRICA.....	55
2.2.3. COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSMISIÓN DE CALOR.....	59
2.2.4. CÁLCULO DEL ÁREA REQUERIDA.....	64
2.2.5. EVALUACIÓN DEL DISEÑO.....	65
2.2.6. HOJA DE ESPECIFICACIONES.....	67
2.3. CÁLCULO DEL REHERVIDOR E-102.....	69
2.3.1. CÁLCULO DE LA CARGA TÉRMICA $Q$ .....	70
2.3.2. ASIGNACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN GEOMÉTRICA.....	72
2.3.3. COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSMISIÓN DE CALOR.....	77
2.3.4. EVALUACIÓN DEL DISEÑO.....	83
2.3.5. HOJA DE ESPECIFICACIONES.....	84
2.4. CÁLCULO DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR E-103.....	86
2.4.1. DATOS DE LAS CORRIENTES.....	86
2.4.2. PROPIEDADES EVALUADAS A LA TEMPERATURA MEDIA.....	86
2.4.3. ESTIMACIÓN PRELIMINAR DEL ÁREA.....	87
2.4.4. DISTRIBUCIÓN DE LOS FLUIDOS Y MATERIALES DE CONSTRUCCIÓN.....	88
2.4.5. ASIGNACIÓN DE LA GEOMETRÍA.....	88
2.4.6. CÁLCULO DEL LADO DE LOS TUBOS.....	90
2.4.7. CÁLCULO DEL LADO DE LA CARCASA.....	91
2.4.8. CÁLCULO DEL ÁREA REQUERIDA.....	92
2.4.9. EVALUACIÓN DEL DISEÑO.....	92
2.4.10. HOJA DE ESPECIFICACIONES.....	93
2.5. CÁLCULO DE LA COLUMNA DE EXTRACCIÓN T-101.....	95
2.5.1. DISEÑO BÁSICO.....	95
2.5.2. DISEÑO MECÁNICO.....	97
2.5.3. HOJA DE ESPECIFICACIONES.....	104
3. PRESUPUESTO.....	107
3.1. PRESUPUESTOS PARCIALES CON PRECIOS UNITARIOS.....	107
3.1.1. COSTE DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN.....	108
3.1.2. COSTE DEL CONDENSADOR E-101.....	109
3.1.3. COSTE DEL REHERVIDOR E-102.....	110
3.1.4. COSTE DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR E-103.....	110
3.1.5. COSTE DE LA COLUMNA DE EXTRACCIÓN.....	111
3.2. PRESUPUESTO TOTAL.....	111
4. PLANOS.....	113
4.1. SITUACIÓN GEOGRÁFICA.....	113
4.2. EMPLAZAMIENTO.....	114
5. ANEXOS.....	118
Anexo I: Balance de Materia.....	119
Anexo II: Método UNIFAC.....	120
Anexo III: Constantes de Antoine.....	138
Anexo IV: Cálculo de propiedades.....	139
Anexo V: Tabla del intercambiador de calor.....	166
Anexo VI: Tablas para el cálculo del coste básico de los equipos.....	167



# 1. MEMORIA DESCRIPTIVA

# 1. MEMORIA DESCRIPTIVA

## 1.1. ANTECEDENTES

### 1.1.1. GASOLINAS. ÍNDICE DE OCTANO.

El presente proyecto trata de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE, uno de los aditivos de las gasolinas que eleva su índice de octano, por lo que se expone una breve introducción de éstas.

La gasolina (en Argentina y Uruguay se conoce como nafta, en Chile como bencina) es una mezcla de hidrocarburos derivada del petróleo que se utiliza como combustible en motores de combustión interna con encendido a chispa.

Tiene una densidad de 720 g/L (un 15% menos que el gasoil, que tiene 850 g/L). Un litro de gasolina tiene una energía de 34,78 MJ, aproximadamente un 10% menos que el gasoil, que posee una energía de 38,65 MJ por litro de carburante. Sin embargo, en términos de masa, la gasolina tiene una energía de 48,31 MJ/kg frente a los 45,47 MJ/kg del gasóleo.

#### Índice de octano

El octanaje o índice de octano es una escala que mide la resistencia que presenta un combustible (como la gasolina) a detonar prematuramente cuando es comprimido dentro del cilindro de un motor. Dicho octanaje tiene que ver con la estructura química del combustible utilizado.

La expresión que relaciona el rendimiento de un motor y la relación de compresión de un combustible con los calores específicos de dicho combustible, dependientes de su estructura química, fue propuesta por Tyzard y Pye y es la siguiente:

$$R = 1 - \left( \frac{1}{r} \right)^{c-1}$$

Donde “ $R$ ” es el rendimiento del motor, “ $r$ ” es la relación de compresión (cociente entre el volumen total del cilindro y el volumen no utilizado) y “ $c$ ” es el cociente de los calores específicos a presión y volumen constante para un determinado combustible.

De lo anterior se deduce que para que se obtenga un mayor rendimiento, “ $r$ ” debe aumentar. Por contra, al intentar elevar el valor de “ $r$ ” puede aparecer una detonación. Aquí entra el papel del índice de octano.

El octanaje indica la presión y temperatura a que puede ser sometido un combustible carburado (mezclado con aire) antes de auto-detonarse al alcanzar su temperatura de autoignición debido a la Ley de los gases ideales. Si el combustible no tiene el índice de octano suficiente en motores con elevadas relaciones de compresión (oscilan entre 8,5 y 10,5), se producirá el "autoencendido" de la mezcla, es decir, la combustión es demasiado rápida y dará lugar a una detonación prematura en la fase de compresión, que hará que el pistón sufra un golpe brusco y se reduzca drásticamente el rendimiento del motor, llegando incluso a provocar graves averías. Este fenómeno también se conoce entre los mecánicos como picado de bielas o cascabeleo.

Dicho índice de octano se obtiene por comparación del poder detonante de la gasolina con el de una mezcla de heptano e isoctano. Al isoctano se le asigna un poder antidetonante de 100 y al heptano de 0, de esta manera una gasolina de 95 octanos correspondería en su capacidad antidetonante a una mezcla con el 95% de isoctano y el 5% de heptano.

Hay tres clases de octanajes:

- Research Octane Number (RON) - Octanaje medido en el laboratorio.
- Motor Octane Number (MON) - Octanaje probado en un motor estático.
- Road ON - Octanaje probado en la carretera.

El valor del RON se determina comparando el golpeteo que produce la gasolina con respecto al golpeteo que produce una sustancia patrón. Como patrón se utiliza una mezcla de isoctano (2,2,4-Trimetilpentano) y n-heptano. De esta forma se determina el número de octanos del combustible, con respecto al porcentaje de isoctano en la mezcla estándar. De esta forma, una gasolina que produce el mismo ruido que la mezcla de 87 (87% isoctano y 13% n-heptano), se dice que tiene un octanaje de 87 octanos.

En los motores a gasolina de baja eficiencia, se recomienda usar gasolinas con bajo nivel de octanaje, ya que tienen poca compresión. A mayor compresión se requiere mayor octanaje, para que sea eficiente el uso del combustible.

Existe otro tipo de octanaje llamado MON que indica de manera más exacta cómo se comporta el combustible cuando se carga. Esta definición también se basa en la mezcla de isoctano y n-heptano. La diferencia con el RON es que se sobrecarga más el motor en el ensayo: se utiliza una mezcla precalentada, el motor más revolucionado y tiempos de ignición variables. Dependiendo de la composición del combustible, el MON de una gasolina moderna estará 10 puntos por debajo del RON. Normalmente las especificaciones de combustible requieren de un RON y MON.

Las gasolinas no son un producto directo del refino del petróleo, sino que se tratan de naftas especialmente acondicionadas para su uso como carburante de motores de combustión interna con encendido mediante chispa (normalmente conocidos como motores de explosión). Este acondicionamiento se consigue mediante un proceso de blending (mezclado) de distintas sustancias a fin de que el producto resultante cumpla con las especificaciones fijadas por la normativa aplicable en cada país, como es el caso del índice de octano, pero también otros parámetros como de emisiones al medioambiente, relativos a la estabilidad/seguridad del producto durante su transporte

y/o almacenamiento, su comportamiento en las condiciones de funcionamiento del motor, etc.

La gasolina se obtiene del petróleo en una refinería. En general se obtiene a partir de la nafta de destilación directa, que es la fracción líquida más ligera del petróleo (exceptuando los gases). La nafta también se obtiene a partir de la conversión de fracciones pesadas del petróleo (gasoil de vacío) en unidades de proceso denominadas FCC (craqueo catalítico fluidizado) o hidrocráquer. La gasolina es una mezcla de cientos de hidrocarburos individuales desde C4 (butanos y butenos) hasta C11 como, por ejemplo, el metilnaftaleno.

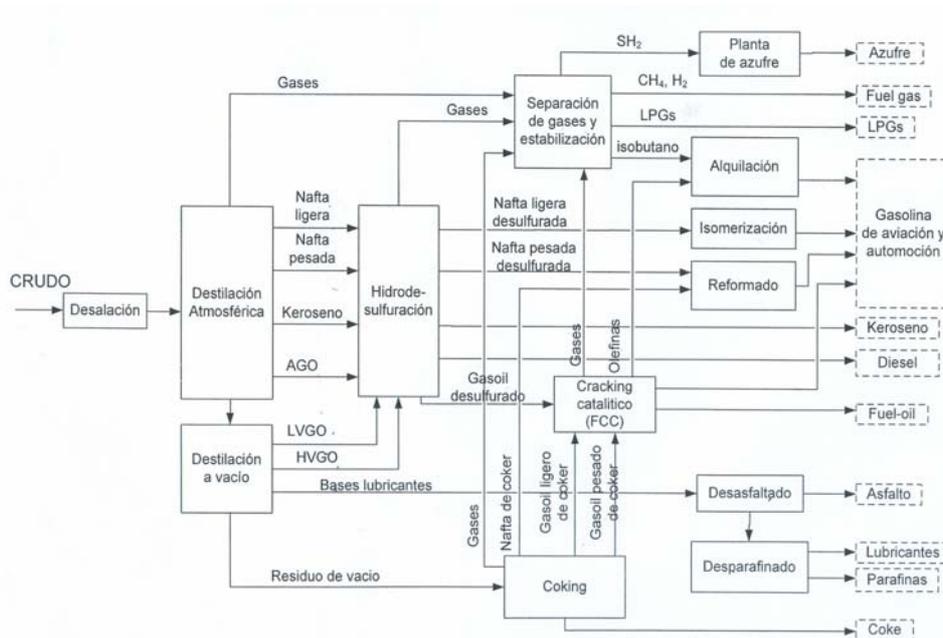


Fig. 1.1. Esquema general de una refinería.

Normalmente se considera nafta a la fracción del petróleo cuyo punto de ebullición se encuentra aproximadamente entre 28 y 177 °C (umbral que varía en función de las necesidades comerciales de la refinería).

A su vez, este subproducto se subdivide en nafta ligera (hasta unos 100 °C) y nafta pesada (el resto). La nafta ligera es uno de los componentes de la gasolina, con unos números de octano en torno a 70. La nafta pesada no tiene la calidad suficiente como para ser utilizada para ese fin, y su destino es la transformación mediante reformado catalítico, proceso químico por el cual se obtiene también hidrógeno, a la vez que se aumenta el octanaje de dicha nafta.

Además de la nafta reformada y la nafta ligera, otros componentes que se usan en la formulación de una gasolina comercial son la nafta de FCC, la nafta ligera isomerizada, la gasolina de pirólisis desbencenizada, butano, butenos, **MTBE**, ETBE, alquilato y etanol. Las fórmulas de cada refinería suelen ser distintas (incluso

perteneciendo a las mismas compañías), en función de las unidades de proceso de que dispongan y según sea verano o invierno.

La nafta se obtiene por un proceso llamado fluid catalytic cracking FCC (a veces denominada gasolina de FCC) de gasoil pesado. Si no está refinada puede tener hasta 1000 ppm de azufre. Tiene alrededor de un 40% de aromáticos y 20% de olefinas. Sus números de octano (MON/RON) están en torno a 80/93.

La nafta ligera isomerizada (isomerato) se obtiene a partir de la nafta ligera de destilación directa, mediante un proceso que usa catalizadores sólidos en base platino/aluminio o zeolíticos. Es un componente libre de azufre, benceno, aromáticos y olefinas, con unos números de octano (MON/RON) en torno a 87/89.

La gasolina de pirólisis desbencenizada se obtiene como subproducto de la fabricación de etileno a partir de nafta ligera. Está compuesta aproximadamente por un 50% de aromáticos (tolueno y xilenos) y un 50% de olefinas (isobuteno, hexenos). Tiene en torno a 200 ppm de azufre. El benceno que contiene en origen suele ser purificado y vendido como materia prima petroquímica. Sus números de octano (MON/RON) están en torno a 85/105.

El alquilato se obtiene a partir de isobutano y butenos, mediante un proceso que usa catalizadores ácidos (bien ácido sulfúrico bien ácido fluorhídrico). Tampoco tiene azufre, benceno, aromáticos ni olefinas. Sus números de octano (MON/RON) están en torno a 94/95.

### **Gasolina con plomo**

A partir de los años 20 y como consecuencia de los mayores requerimientos de los motores de explosión, derivados del aumento de compresión para mejorar su rendimiento, se inicia el uso de compuestos para aumentar su octanaje a base de plomo (Pb) y manganeso (Mn) en las gasolinas.

El uso de antidetonantes a base de plomo y manganeso en las gasolinas obedece principalmente a que no hay forma más barata de incrementar el octanaje en las gasolinas que usando compuestos de ellos (Tetraetilo de Plomo-TEP-, Tetrametilo de Plomo -TMP- y a base de manganeso conocido por sus siglas en inglés como MMT) comparando con los costos que conllevan las instalaciones que producen componentes de alto octanaje (reformado de naftas, desintegración catalítica, isomerización, alquilación, producción de éteres-MTBE, TAME-, etc.).

El uso de compuestos de plomo en las gasolinas tenía dos razones:

- Alcanzar el octanaje requerido por los motores con mayor relación de compresión.
- Proteger los motores contra el fenómeno denominado Recesión del Asiento de las Válvulas de Escape (Exhaust Valve Seat Recession, EVSR) junto a la labor lubricante que el plomo ejerce en la parte alta del cilindro (pistón, camisa, segmentos y asientos de válvula).

Sin embargo, las desventajas de esta adición son numerosas y están presentes sobre todo en aspectos medioambientales.

Los metales "pesados" (plomo, manganeso, mercurio, cadmio, etc.) resultan perniciosos tanto para el medio ambiente como para la salud humana. Se fijan en los tejidos llegando a desencadenar procesos mutagénicos en las células. Desde el punto de vista de la salud, la presencia de plomo en el aire que respiramos tiene diferentes efectos en función de la concentración presente y del tiempo a que se este expuesto. Algunos de sus principales efectos clínicos, detectados por el envenenamiento agudo con plomo, son:

- interferencia en la síntesis de la hemoglobina
- anemia
- problemas en el riñón, bazo e hígado
- afectación del sistema nervioso

los cuales se pueden manifestar cuando se detectan concentraciones por encima de 60 mg de Pb por cada 100 mililitros de sangre.

En los años 70, ante los graves problemas de deterioro ambiental del planeta y su impacto sobre los seres humanos que lo habitan, los gobiernos de los países iniciaron una serie de acciones para detener y prevenir esta problemática ambiental. Se impusieron leyes cuyo fin consistió en reducir paulatinamente el uso de aditivos basados en plomo y manganeso de las gasolinas. Las empresas petroleras se vieron obligadas a desarrollar nuevas gasolinas de mayor octanaje sin el uso del plomo o el manganeso. Por otro lado, los fabricantes de motores, tuvieron que empezar a utilizar materiales más resistentes que no dependiesen de la lubricación del plomo para su mejor conservación (en concreto la mejora de la resistencia de los asientos de las válvulas).

Además, para reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> a la atmósfera se empezaron a utilizar catalizadores, los cuales se destruyen rápida e irremediamente con el plomo haciéndolos incompatibles. La Unión Europea fijó un plazo para la retirada de los combustibles con plomo del mercado, el 1 de enero de 2000, pero, ante la situación de algunos mercados, la Comisión Europea concedió una moratoria a España, Italia y Grecia hasta el 1 de enero de 2002.

Tras la retirada del Plomo como aditivo antidetonante de las gasolinas se han buscado alternativas. Deben cumplirse una serie de especificaciones requeridas para que el motor funcione bien y otras de tipo ambiental, ambas reguladas por ley en la mayoría de los países. La especificación más característica es el índice de octano.

A nivel mundial, se han desarrollado varias tecnologías relacionadas entre sí para elevar el octanaje de las gasolinas, destacando las siguientes:

- Aplicación de nuevas tecnologías de refinación, de reformado catalítico, isomerización y otros procesos, que permiten obtener gasolinas con elevados números de octano limpios, es decir, sin aditivos. Esto ha llevado a reducir en forma importante e inclusive a eliminar el tetraetilo de plomo, dando como

resultado gasolinas de mejor calidad, que cumplen con los requerimientos de protección ecológica que se han establecido a nivel mundial.

- Paralelamente, se han desarrollado nuevos aditivos oxigenados denominados ecológicos en sustitución el tetraetilo de plomo (que es altamente contaminante), tales como el Metil-Terc-Butil-Eter (MTBE), el Terc-Amil-Metil-Eter (TAME) y el Etil-Terc-Butil-Eter (ETBE), entre otros.

Estos aditivos oxigenados, se adicionan a las gasolinas para elevar su número de octano, proporcionando a la vez una mayor oxigenación, lo que incide directamente en una combustión más completa y en un mejor funcionamiento de los motores.

De estos aditivos oxigenados, los que han tenido un mayor uso a nivel mundial (incluso en nuestro país), han sido el MTBE y el TAME, debido a su alto valor de octano en la mezcla con gasolina, a su baja presión de vapor y sobre todo a su alta disponibilidad, al producirse en plantas integradas a las refinerías, donde son aprovechadas las materias primas de refinación requeridas para su elaboración (metanol, butanos, butilenos, isobutilenos e isoamileno), con las ventajas económicas que ello representa.

### **1.1.2. MTBE**

#### **Características generales**

El éter metil terc-butílico, MTBE o metil terc-butil éter es un líquido inflamable de olor característico desagradable. Se fabrica combinando sustancias químicas como isobutileno y metanol, y se ha usado desde los años 1980 como aditivo para incrementar el octanaje de la gasolina sin plomo.

IDENTIFICACIÓN DE LA SUSTANCIA		COMENTARIOS
Nombre o nombres comerciales, vulgares o industriales	MTBE, Metiltercbutiléter, Metil-1,1-dimetiletiléter, Terc-butil metil éter	
Nombre (IUPAC) sistemático	Metil-Terc-Butil-Éter	
Nº registro del CAS	1634-04-4	
Fórmula empírica	C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> O	
Fórmula estructural	$  \begin{array}{c}  \text{CH}_3 \\    \\  \text{CH}_3 - \text{C} - \text{O} - \text{CH}_3 \\    \\  \text{CH}_3  \end{array}  $	
Número de ONU	2398	
Grado de pureza. Naturaleza y porcentaje de las impurezas	Grado de pureza: 98% a 99,8% ó mas de sustancia pura	
PROPIEDADES GENERALES		COMENTARIOS
Estado de agregación	líquido	
Apariencia	inoloro	
Presión crítica	33,7 bar	
Temperatura crítica	496,4 K	
Densidad	0,74 g/cm <sup>3</sup>	
Masa	88,15 u	
Punto de fusión	164,6 K (-108,6°C)	
Punto de ebullición	328,5 K (55,3°C)	
Presión de vapor a dos temperaturas	298K → 326,6mbar	
Solubilidad en agua	26 g/l (10 °C) (42 g/l a 20°C)	Moderadamente soluble en agua
Capacidad calorífica a la temperatura de saturación a 1013mbar (J/kgK) y en las condiciones del proceso.	Vapor 328,3 K → 1642 J/kgK	
Límite inferior de inflamabilidad en aire %Vol.	1,65	
Límite superior de inflamabilidad en aire %Vol.	8,4	
Punto de inflamabilidad (flash point)	245 (-28°C) (c.c.)	En copa cerrada
Reactividad del producto con los componentes atmosféricos distinta de la combustión		No reacciona con el agua
Dosis letal 50 (DL50) oral	4000 mg/kg	Para rata
Dosis letal 50 (DL50) dérmica	10000 mg/kg	Para conejo
Concentración letal 50 (CL50) en aire mg/kg	23600ppm/4horas 39120ppm	Para rata Para ratón
Temperatura de autoignición	733 (460°C)	

Tabla 1.1. Propiedades MTBE. Valores en el SI y en condiciones normales (0 °C y 1 atm), salvo que se indique lo contrario.

### **MTBE en gasolinas**

Una vez analizadas las propiedades del MTBE, se valorará su influencia en el comportamiento de la gasolina.

El MTBE eleva el octanaje de la mezcla con gasolina según las propiedades de la gasolina base llevando a valores del RON de entre 115 y 135 y valores para el MON de entre 98 y 110. Dicha elevación del índice de octano es mayor cuanto menor es el número de octano de la gasolina inicial, mayor el contenido de saturados en la misma y mayor es la concentración de MTBE. Se permite una concentración de hasta un 15% de MTBE.

Además de incrementar el índice de octano en las gasolinas, el MTBE tiene numerosos efectos técnicos en el motor.

En la Tabla 1.1 se registra la moderada solubilidad del MTBE en agua por lo que no aparecen problemas de tolerancia con ésta. Por otro lado, cabe señalar la alta solubilidad en hidrocarburos sin la formación de azeótropos.

La adición de MTBE a la gasolina no afecta a su temperatura de cristalización ni a la formación de hielo, incluso evita la congelación de algunos componentes de la gasolina.

Puesto que, como se registra en la Tabla 1.1, el punto de ebullición del MTBE es de 55,3 °C, temperatura equiparable a la de las fracciones más ligeras de las gasolinas, el MTBE eleva la cantidad de antidetonante de la fracción de la gasolina que destila por debajo de 100 °C, por lo que se ve facilitado el funcionamiento del motor cuando éste se está calentando.

Debido a su bajo punto de ebullición, se produce un incremento de la volatilidad de la gasolina a baja temperatura. Dicho aumento evita problemas de congelación en el carburador, mejora el encendido del motor y su funcionamiento en las fases de aceleración, tanto en frío como en caliente.

En cuanto a los sistemas actuales de distribución de los automóviles, no se ven modificados por dicha adición, además de presentar el MTBE compatibilidad con los aceites lubricantes comerciales.

En cuanto al medioambiente y seguridad, ya se han señalado las numerosas ventajas de dicho producto frente a los compuestos de plomo. Un breve resumen sería:

- Desde 1992 se usa el MTBE en gasolina en muchos países para cumplir con las especificaciones medioambientales que requieren que aditivos oxigenados sean añadidos a la gasolina para reducir la emisión de CO.
- Permite el uso de catalizadores en el tubo de escape que reduzcan las emisiones de inquemados.
- Se elimina la emisión de plomo a la atmósfera, evitando los graves problemas de salud y medioambientales que éstas ocasionan.
- Presenta estabilidad frente a la oxidación y formación de polímeros.

En contraposición, el MTBE es un alto contaminante para aguas subterráneas y tarda más tiempo en degradarse que otros componentes de la gasolina.

### Producción de MTBE

La primera planta de producción mundial de MTBE se construyó en Rabenna (Italia) por la empresa ENI (hoy día ENICHEM). La puesta en marcha tuvo lugar en septiembre de 1973.

Repsol-YPF produce MTBE en La Coruña (40000 t/año), Puertollano (60000t/año), Tarragona (120000 t/año). Petronor también produce MTBE en Somorrostro (60000 t/año).

El cuadro de producción de MTBE en Europa es el que se muestra a continuación:

Compañía	Pais	Localización	Capacidad	Alimentación
Lyondell	Francia	Fos sur Mer	610000	TBA
Lyondell	Holanda	Botlek	590000	TBA
Oxeno	Alemania	Marl	210000	SC
Total Fina Elf	Bélgica	Antwerp	180000	SC/FCC
Ecofuel	Italia	Ravenna	160000	SC
Shell Chemie	Holanda	Pernis	160000	SC
DSM	Holanda	Beek	130000	SC
Exxon Chemical	Reino Unido	Fawley	125000	SC/FCC
Repsol YPF	España	Tarragona	120000	SC/FCC
Fortum	Finlandia	Porvoo	120000	SC/FCC
OMW	Alemania	Karlsruhe	120000	FCC
Lindsey Oil	Reino Unido	Killingholme	100000	SC/FCC
PCK AG	Alemania	Schwedt	85000	FCC
Hellenic	Grecia	Aspropyrgos	70000	FCC
OMW	Austria	Schwechat	70000	SC
DEA Mineraloel	Alemania	Wesseling	65000	FCC
Nerefco	Holanda	Rotterdam	65000	FCC
RAM	Italia	Milazzo	60000	FCC
Repsol YPF	España	Puertollano	60000	SC/FCC
Petronor	España	Somorrostro	60000	FCC
Agip	Italia	Gela	55000	SC/FCC
Agip	Italia	Priolo	54000	SC/FCC
Borealis	Suecia	Stenungsund	50000	SC
Agip	Italia	Sannazaro	47000	FCC
Fortum	Portugal	Sines	45000	SC
Repsol YPF	España	La Coruña	40000	FCC
Motor Oil Hellas	Grecia	Corinth	34000	FCC
RVI	Alemania	Vohburg	25000	FCC
DEA Mineraloel	Alemania	Heide	15000	SC/FCC

Tabla 1.2. Producción actual de MTBE en Europa.

## **1.2. OBJETO DEL PROYECTO**

A petición de HUNTSMAN Inc. se redacta el presente cuyo objeto es el desarrollo de la Ingeniería Básica para la sección de purificación de una planta de producción de 120000 Tn/año de MTBE con un 99% en peso de pureza mediante la reacción entre el isobuteno y el metanol.

## **1.3. TITULAR DE LA INDUSTRIA**

El titular de la industria que se proyecta es la multinacional HUNTSMAN Inc. con domicilio social en Montecito nº 38, Piso 21, Oficina 38, Nápoles 03810 (Estado de Méjico).

## **1.4. CLASE Y NÚMERO DE LA INDUSTRIA SEGÚN C.N.A.E.**

La industria proyectada se incluye dentro del apartado DG-24 del listado de la CNAE correspondiente a la industria química y, más específicamente, se le asigna el número 2414 de fabricación de productos básicos de química orgánica.

## **1.5. EMPLAZAMIENTO DE LA INDUSTRIA**

El emplazamiento de la instalación tiene lugar en el polígono industrial Valle de Escombreras (Cartagena), Ctra. Alumbres-Escombreras, km. 9, parcela 321, CP:30350 Cartagena, Murcia (España).

Dicha instalación completará la instalación de producción de MTBE situada junto a ésta.

## **1.6. NORMATIVA Y LEGISLACIÓN APLICABLE**

- REAL DECRETO 314/2006, de 17 de marzo, por el que se aprueba el Código Técnico de la Edificación (Parte I).
- Resolución 14 de febrero de 1980.- Diámetros y espesores mínimos de tubos de cobre para instalaciones interiores de suministro de agua.
- REAL DECRETO 2102/1996, de 20 septiembre, sobre el control de emisiones de compuestos orgánicos volátiles (COV) resultantes de almacenamiento y distribución de gasolina desde las terminales a las estaciones de servicio.
- REAL DECRETO 1110/2007, de 24 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento unificado de puntos de medida del sistema eléctrico
- REAL DECRETO 842/2002, de 2 de agosto, por el que se aprueba el Reglamento electrotécnico para baja tensión.

- REAL DECRETO 942/2005, de 29 de julio, por el que se modifican determinadas disposiciones en materia de hidrocarburos.
- REAL DECRETO 919/2006, de 28 de julio, por el que se aprueba el Reglamento técnico de distribución y utilización de combustibles gaseosos y sus instrucciones técnicas complementarias ICG 01 a 11.
- LEY 34/2007, de 15 de noviembre, de calidad del aire y protección de la atmósfera.
- LEY 37/2003, de 17 de noviembre, del Ruido.
- LEY 10/1998, de 21 de abril, de Residuos.
- Real Decreto 60/2005, de 21 de enero, por el que se modifica el Real Decreto 1866/2004, de 6 de septiembre, por el que se aprueba el Plan nacional de asignación de derechos de emisión, 2005-2007.
- REAL DECRETO 379/2001, de 6 de abril por el que se aprueba el Reglamento de almacenamiento de productos químicos y sus instrucciones técnicas complementarias MIEAPQ-1, MIEAPQ-2, MIEAPQ-3, MIEAPQ-4, MIEAPQ-5, MIEAPQ-6 Y MIEAPQ-7.
- ORDEN de 16 de abril de 1998 sobre normas de procedimiento y desarrollo del Real Decreto 1942/1993, de 5 de noviembre, por el que se aprueba el Reglamento de Instalaciones de Protección contra Incendios y se revisa el anexo I y los apéndices del mismo.
- REAL DECRETO 2267/2004, de 3 de diciembre, por el que se aprueba el Reglamento de seguridad contra incendios en los establecimientos industriales.
- Orden de 10 de marzo de 1998, por la que se modifica la instrucción Técnica Complementaria MIE-AP5 del Reglamento de Aparatos a Presión sobre extintores de incendios.
- Orden de 11 de octubre de 1988, por la que se aprueba la Instrucción Técnica Complementaria MIE-AP-13 del Reglamento de Aparatos a Presión, referente a intercambiadores de calor de placas.
- LEY 31/95, de 8 de noviembre, de prevención de riesgos laborales (incluye las modificaciones realizadas por la LEY 54/03 de reforma del marco normativo de la prevención de riesgos laborales).
- REAL DECRETO 485/97, de 14 de abril, sobre disposiciones mínimas en materia de señalización de seguridad y salud en el trabajo.
- REAL DECRETO 47/2007, de 19 de enero, por el que se aprueba el Procedimiento básico para la certificación de eficiencia energética de edificios de nueva construcción.
- Ley del Suelo de la Comunidad Autónoma de Murcia.
- Plan General de Ordenamiento Urbano.

## **1.7. TERRENOS Y EDIFICACIONES**

La instalación se encuentra ubicada en una parcela de 13.000 m<sup>2</sup> de superficie útil, en la que se han realizado las obras de adaptación necesarias para adecuarla al tipo de industria.

Como recoge la Red Natura 2000, dicha zona queda excluida de ser una ZEPA o un LIC. Además, con la aplicación la Ley del Suelo de la Comunidad Autónoma de Murcia, se permite la implantación de la planta en dicho lugar.

Ateniéndose al Plan General de Ordenamiento Urbano (PGOU), se concede la libertad para dar uso industrial al citado emplazamiento.

## 1.8. PROCESO INDUSTRIAL

El proceso industrial de la instalación proyectada tiene como fin la obtención de 120000 t/año de MTBE con un 99% de pureza tomando como alimentación los productos procedentes de la sección de reacción. Dicha alimentación se produce a 70°C y una presión de 6,5 atm, obteniéndose el producto a 30°C.

El diagrama de flujo del proceso es el que se muestra en la Fig. 1.2:

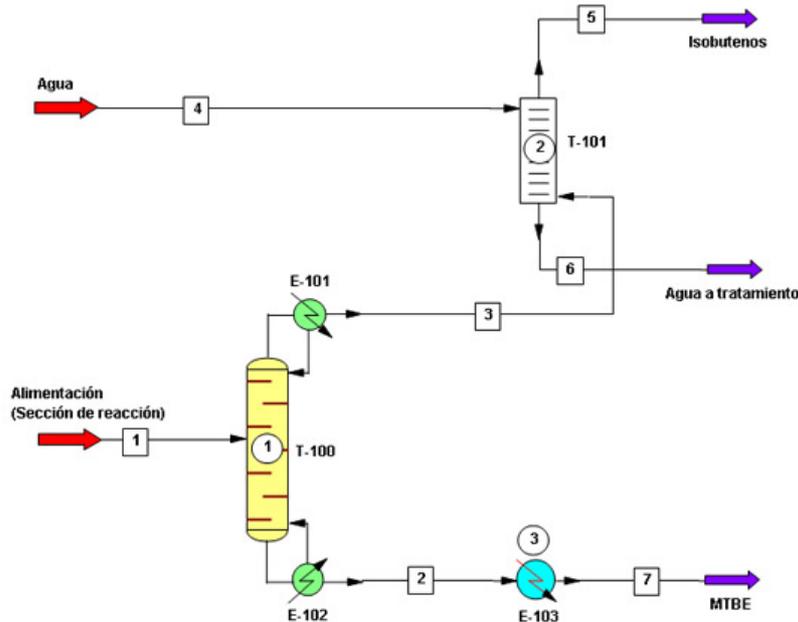


Fig. 1.2. Diagrama de flujo del proceso

## 1.9. MAQUINARIA E INSTALACIONES

La sección de purificación constará de una columna de destilación T-100 para separar el MTBE producto por el fondo y una columna de extracción T-101 con agua para purificar la corriente de isobutenos procedente de cabeza de la columna de destilación. En la cabeza de la columna se situará un condensador E-101 para obtener el reflujo necesario para la separación y en el fondo un rehervidor E-102. Además, se dispone de un intercambiador de calor E-103 para obtener el producto a la temperatura deseada.

### 1.10. PRODUCTOS UTILIZADOS

Como materia prima del proceso que nos ocupa se utilizará, como ya se ha especificado, el producto de la sección de reacción de la propia planta de producción de MTBE. La corriente procedente de la sección de reacción de la planta, acondicionada a 70°C y 6.5 atm de presión, tiene la composición expuesta en la tabla 1.3:

Componente	% Molar
Propileno	0.0427
Propano	0.0081
Isobutano	0.0044
Isobuteno	0.0133
1-Buteno	0.3437
1,3-Butadieno	0.0674
Butano	0.1621
Trans-2-Buteno	0.0337
Cis-2-Buteno	0.0281
Pentano	0.0006
Metanol	0.0319
Agua	0.0001
MTBE	0.2639

Tabla 1.3. Composición de la alimentación.

### 1.11. PRODUCTOS OBTENIDOS

Como producto fundamental de la instalación se obtiene MTBE al 99% de pureza.

Por otro lado, se obtiene la fracción de C3, C4 y el n-pentano a los cuáles se les ha extraído el metanol con agua.

Otro subproducto será el agua procedente de la columna de extracción que arrastra el metanol no reaccionado. Dicho subproducto se deberá llevar a tratamiento para separar el metanol y utilizarlo como materia prima en la producción de MTBE. El agua, a su vez, podrá usarse de nuevo para sucesivas extracciones o como medio refrigerante en intercambiadores de calor.

## **1.12. SEGURIDAD**

En cuanto a la seguridad, además de elaborar el Estudio básico de Seguridad, el Estudio de Seguridad e Higiene y el Plan de Seguridad se procede a la especificación de determinadas características del producto a tener en cuenta a la hora de la seguridad de la planta.

### **PROCEDIMIENTOS Y PRECAUCIONES RELATIVOS A LA MANIPULACIÓN Y AL ALMACENAMIENTO DE MTBE**

El MTBE está líquido a temperatura y presión ambiente. Se almacena también en forma líquida.

- Verificar que las instalaciones cumplen la normativa y de que se realiza un mantenimiento periódico de los sistemas de seguridad.
- Utilizar contenedores a prueba de líquidos inflamables.
- Impedir la presencia de cargas electrostáticas en los puntos de manipulación y almacenamiento (verificación de las instalaciones eléctricas).
- Evitar toda fuente de ignición, calor intensiva, llamas directas. No fumar.
- Cumplir las normas de seguridad cuando se manipula la sustancia.
- Almacenar en lugar fresco, seco y bien ventilado. Evitar la exposición del producto a la luz del sol.
- No almacenar junto con agentes fuertemente oxidantes, ya que existe riesgo de incendio y explosión, y ácidos fuertes, ya que en este caso existiría riesgo de que se produjera la hidrólisis del MTBE.

#### **En caso de manipulación o accidente mayor:**

- Protección respiratoria:

Utilizar máscaras con filtro respiratorio. Para elevadas concentraciones utilizar un aparato respiratorio independiente.

- Ropa protectora:

Se debería utilizar botas de goma, guantes, visores, gafas de seguridad y traje antifuego resistente e impermeable. Usar materiales compatibles como el polietileno dorado.

## **PROCEDIMIENTOS DE EMERGENCIA EN CASO DE DISPERSIÓN ACCIDENTAL**

El MTBE es un líquido altamente inflamable con una baja viscosidad.

### **Qué puede ocurrir:**

- Una fuga de MTBE genera grandes cantidades de vapores inflamables.
- Los vapores forman mezclas explosivas en contacto con oxidantes fuertes.
- El riesgo de explosión aumenta en áreas confinadas y en presencia de fuentes de calor.

### **Respuesta a emergencia:**

- Evacuar las zonas afectadas y áreas próximas e impedir el acceso a las personas sin protección.
- Mantener alejadas las fuentes de ignición. No fumar.
- Llevar el traje de protección y un aparato respiratorio.
- Intentar detener la fuga si no entraña peligro.
- Controlar el derrame con diques de contención, succión por bombes vacíos.
- Absorber con arena, tierra u otros materiales inertes absorbentes.
- Ventilar los sitios confinados.
- Si se forma un gran derrame, informar a las autoridades.
- Utilizar cortinas de agua pulverizada para abatir los vapores.

## **PROCEDIMIENTOS DE EMERGENCIA EN CASO DE INCENDIO ACCIDENTAL**

### **Qué puede ocurrir:**

- La combustión de la sustancia líquida genera humos y vapores irritantes. Formación de monóxido de carbono y dióxido de carbono.
- Los vapores pueden explotar violentamente en espacios cerrados o confinados debido al hecho de que se forman mezclas explosivas con el aire.
- Los contenedores pueden explotar y liberar de repente una gran cantidad de sustancia.

### **Respuesta a emergencia:**

- Evacuar la zona e impedir al acceso a personas sin protección.
- Llevar el traje protector anti-fuego y un aparato de protección de las vías respiratorias.
- Cortar el suministro si es posible.
- Extinguir con polvo seco, espuma anti alcohol o CO<sub>2</sub>.
- Utilizar cortinas de agua para limitar la disolución de humos y vapores a la atmósfera.
- Enfriar los contenedores expuestos al fuego con agua pulverizada y desde una distancia segura.

## **MEDIOS DE NEUTRALIZACIÓN, CON INDICACIÓN ESPECÍFICA DE LOS QUE SE DISPONE**

Se desconocen productos capaces de reducir la peligrosidad de la sustancia.

## **BREVES INDICACIONES SOBRE LOS RIESGOS PARA EL HOMBRE Y EL MEDIO AMBIENTE (INMEDIATOS Y DIFERIDOS)**

### **Riesgos para el hombre:**

Inmediatos:

- Por inhalación:

Elevadas concentraciones causan irritaciones en ojos, nariz y garganta, tos y mareos. Además, tiene una acción anestésica. Exposiciones prolongadas a elevadas concentraciones pueden provocar depresiones del sistema nervioso central. Puede acumularse temporalmente en el cuerpo humano (tejido).

- Por ingestión:

Puede dar lugar a depresiones del sistema nervioso central con síntomas de náuseas, vómitos, vértigos e inconsciencia.

- Por contacto:

El MTBE provoca una irritación leve y transitoria en los ojos. En caso de exposiciones prolongadas puede provocar dermatitis.

### **Riesgos para el medioambiente:**

En caso de incendio, reacciona como un contaminante carbonado debido a la formación de CO y CO<sub>2</sub>.

### **Primeros auxilios:**

- Inhalación:

Trasladar la víctima a un sitio ventilado si aparecen los síntomas. Avisar al médico si los síntomas persisten.

- Contacto:

Lavar inmediatamente los ojos con agua corriente (15 min.). En caso de contacto con la piel, quitarse la ropa contaminada y lavarse abundantemente con agua y jabón.



## 2. CÁLCULOS JUSTIFICATIVOS

### 2.1. CÁLCULO DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN T-100

#### 2.1.1. DISEÑO BÁSICO

Con la columna de destilación se pretende la separación de la fracción de C3, C4, el n-pentano y el metanol del MTBE para obtener éste por el fondo de la columna en un 99% en peso.

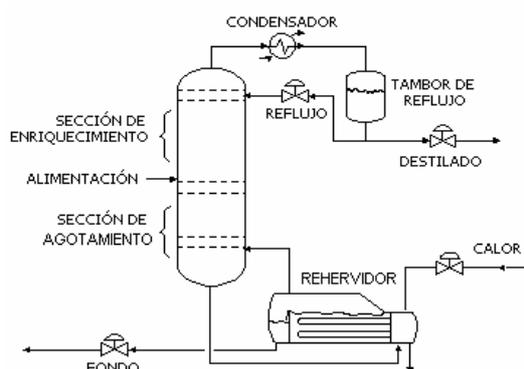


Fig. 2.1. Esquema de una columna de destilación

Para ello se comienza el cálculo con la determinación del número de etapas de equilibrio para llevar a cabo la separación deseada.

Como herramienta para dicho cálculo se utilizará un método aproximado, el método Fenske-Underwood-Gilliland, conocido también como método FUG, para la destilación multicomponente.

En primer lugar se identifican los componentes clave en la separación, asignando el nombre de componente clave ligero, o con sus siglas en inglés LK, al metanol y considerando como componente clave pesado, HK, al MTBE, según determina la tabla 2.1.

Propileno	Ligeros	
Propano		
i-Butano		
i-Buteno		
1-Buteno		
1,3-Butadieno		
n-Butano		
trans-2-buteno		
cis-2-buteno		
n-pentano		
Metanol		
MTBE	Pesado	HK

Tabla 2.1. Selección del clave ligero y del clave pesado

Seguidamente, en la tabla 2.2, se especifica la composición de la alimentación, su temperatura y su presión:

$$T = 70 \text{ }^{\circ}\text{C}$$

$$P = 6,5 \text{ atm}$$

Componente	$x_F$
Propileno	0,0427
Propano	0,0081
i-Butano	0,0044
i-Buteno	0,0133
1-Buteno	0,3437
1,3-Butadieno	0,0674
n-Butano	0,1621
trans-2-buteno	0,0337
cis-2-buteno	0,0281
n-pentano	0,0006
Metanol	0,0319
MTBE	0,2639

Tabla 2.2. Composiciones alimentación.

A continuación, se estiman las composiciones de los componentes clave en el destilado y en el fondo. Para ello se realiza un simple balance de materia sabiendo que entran 614 kmol/h de corriente total y que se pretende obtener 120000 t/año de MTBE al 99%.

Tras este balance, se estiman unas corrientes especificadas en la tabla 2.3:

Componente	Fondo		Cabeza	
	$x_B$	kmol/h	$x_D$	kmol/h
Propileno			0,0582	26,2178
Propano			0,0110	4,9734
i-Butano			0,0060	2,7016
i-Buteno			0,0181	8,1662
1-Buteno			0,4681	211,0318
1,3-Butadieno			0,0918	41,3836
n-Butano			0,2208	99,5294
trans-2-buteno			0,0459	20,6918
cis-2-buteno			0,0383	17,2534
n-pentano			0,0008	0,3684
Metanol	0,0073	1,19	0,0408	18,3923
MTBE	<b>0,9927</b>	161,96	0,0002	0,0706

Tabla 2.3. Composiciones del fondo y del destilado

El caudal total de fondo son 163,2 kmol/h y el de destilado 450,8 kmol/h.

La determinación de la presencia de interclaves, compuestos intermedios entre el componente clave ligero y el clave pesado, será el siguiente paso. En este proceso no hay interclaves y, por tanto, no es necesario estimar su composición en el fondo ni en el destilado.

Se considera un condensador total, es decir, sin purga, suponiendo una presión en cabeza de 6,7 atm y en fondo de 6,5 atm.

El siguiente paso consiste en el cálculo de los puntos de burbuja y de rocío en el destilado y en el fondo.

En primer lugar, se calcula la constante de equilibrio entre fases  $K_i$  para cada componente mediante la expresión:

$$K_i = \frac{\gamma_i f_i^0}{\phi_i^V P}$$

donde " $\gamma_i$ " es el coeficiente de actividad de cada componente en la mezcla, " $f_i^0$ " es la fugacidad, " $\phi_i^V$ " es el coeficiente de fugacidad y " $P$ " es la presión.

Esta expresión se puede simplificar si aproximamos la presión de vapor  $P_i^s$  a:

$$P_i^s = \frac{f_i^0}{\phi_i^V} \text{ obteniendo } \rightarrow K_i = \frac{\gamma_i P_i^s}{P}$$

Para el cálculo de los coeficientes de actividad se recurre al método UNIFAC explicado en el Anexo II, obteniéndose los resultados reflejados en la tabla 2.4:

Componente	Coeficientes de actividad $\gamma_i$	
	cabeza	fondo
Propileno	0,9964	
Propano	1,0505	
i-Butano	1,0659	
i-Buteno	1,0208	
1-Buteno	1,0126	
1,3-Butadieno	1,1368	
n-Butano	1,0660	
trans-2-buteno	1,0099	
cis-2-buteno	1,0099	
n-pentano	1,0379	
Metanol	12,7432	2,5033
MTBE	1,1170	1,0000

Tabla 2.4. Coeficientes de actividad en el destilado y en el fondo

Por otro lado, el cálculo de las presiones de vapor para cada componente se realiza haciendo uso de la ecuación de Antoine. La expresión para el cálculo es la siguiente:

$$\log(P_i^s) = A - \frac{B}{T + C}$$

donde " $A$ ", " $B$ " y " $C$ " son las constantes de Antoine para cada componente y vienen reflejadas en el Anexo III, la presión está en mmHg y la temperatura " $T$ " en °C.

El cálculo es iterativo puesto que se está estimando la presión y la temperatura. Se conoce que:  $K_i = y_i/x_i$ , siendo “x” e “y” las composiciones en equilibrio de líquido y vapor respectivamente, de manera que con la estimación vamos calculando la “y” en el fondo y la “x” en el destilado despejando de la expresión anterior conocida “K” y la composición del balance de materia. La iteración continúa hasta obtener que la suma de las “y” y la suma de las “x” sea 1 respectivamente. Se obtiene una temperatura de cabeza de **53,4 °C** y de fondo de **142,3 °C**. Para esas condiciones de temperatura y presión ya se puede aplicar la ecuación de Fenske.

Hay que destacar que las temperaturas obtenidas son aproximadas puesto que el método es aproximado. Con este método queremos calcular el número de platos pero las temperaturas reales se obtendrán del programa de simulación Chemcad.

### Método Fenske

Para llevar a cabo el método el primer lugar debemos calcular las volatilidades relativas  $\alpha_{ij}$  de cada componente mediante la expresión:

$$\alpha_{ij} = \frac{K_i}{K_j}$$

donde “ $\alpha_{ij}$ ” es el cociente entre la constante de equilibrio del componente i y la constante de equilibrio del componente pesado, en este caso, el MTBE.

La tabla obtenida con estos cálculos es la tabla 2.5:

Componente	Fondo				Cabeza			
	$P_{\text{vap}}$ (mmHg)	$K_i$	$\alpha_{ij}$	$y_i$	$P_{\text{vap}}$ (mmHg)	$K_i$	$\alpha_{ij}$	$x_i$
Propileno					16077	3,2427	19,89	0,0179
Propano					13424	2,8546	17,51	0,0039
i-Butano					5709	1,2319	7,55	0,0049
i-Buteno					4949	1,0227	6,27	0,0177
1-Buteno					4855	0,9952	6,10	0,4704
1,3- Butadieno					4631	1,0658	6,54	0,0861
n-Butano					4028	0,8693	5,33	0,2540
trans-2- buteno					3931	0,8038	4,93	0,0571
cis-2-buteno					3655	0,7472	4,58	0,0512
n-pentano					1326	0,2785	1,71	0,0029
Metanol	8711	4,2824	4,39	0,0313	482	1,2437	7,63	0,0328
MTBE	4969	0,9759	1	0,9687	721	0,1631	1,0000	0,0010

Tabla 2.5. Cálculos para las corrientes de salida

A continuación, se calcula  $\alpha_m$  a partir de la ecuación:  $\alpha_m = \sqrt{(\alpha_{ij})_{\text{fondo}} (\alpha_{ij})_{\text{cabeza}}}$  para el componente clave ligero.

Una vez hechos estos cálculos, ya es posible la aplicación de la ecuación de Fenske para determinar el número mínimo de etapas de equilibrio:

$$N_{\min} = \frac{\log \left[ \left( \frac{x_{i,N+1}}{x_{i,1}} \right) \left( \frac{x_{j,1}}{x_{j,N+1}} \right) \right]}{\log(\alpha_m)}$$

donde “*i*” representa al clave ligero y “*j*” al clave pesado, “*N+1*” representa la cabeza y “*1*” representa el fondo.

Se obtiene un valor para  $N_{\min}$  de 5,97, es decir, **6 etapas**.

### Método de Underwood

Una vez calculado el número mínimo de platos, se recurre a las ecuaciones de Underwood. Underwood (1948) derivó ecuaciones para estimar la relación de reflujo mínimo para la destilación multicomponente. Este método resuelve una ecuación la cual relaciona la composición de la alimentación, la condición térmica de la alimentación, y la volatilidad relativa para un factor  $\theta$  este factor es sustituido en una segunda ecuación la cual relaciona el reflujo mínimo a la volatilidad relativa y la composición del destilado.

El método asume volatilidad relativa constante y flujos molares constantes. Este método da aproximaciones de ingeniería razonables para sistemas que se aproximan a la idealidad. El método de Underwood ha sido tradicionalmente el más popular para determinación del reflujo mínimo. El método es:

1. Encontrar  $\theta$  (el cual debe estar entre los valores de las volatilidades relativas de los componentes claves) por un método de prueba y error usando la ecuación:

$$\sum \frac{\alpha_i x_{i,F}}{\alpha_i - \theta} = 1 - q$$

donde “ $\alpha_i$ ” es la volatilidad relativa del componente *i* con respecto a algún componente de referencia, usualmente el clave pesado y “ $x_{i,F}$ ” es la concentración del componente *i* en la alimentación y “*q*” depende de la condición de la alimentación.

2. Reemplazar  $\theta$  en la siguiente ecuación para calcular  $(L/D)_m = R_m$ :

$$R_m + 1 = \sum \frac{\alpha_i x_{i,D}}{\alpha_i - \theta}$$

donde “ $R_m$ ” es la relación mínima de reflujo y “ $x_{i,D}$ ” es la concentración del componente *i* en el destilado a reflujo mínimo.

De este modo, para las composiciones de alimentación, de destilado y las volatilidades calculadas y la condición de la alimentación  $1-q = 0,53$  se estima un parámetro  $\theta$  con un valor de 1,56 dando como resultado una relación de reflujo  $R_{min}=0,4$ .

Los cálculos se muestran a continuación, en la tabla 2.6:

	$\alpha$	$X_F$	$X_D$	$\frac{\alpha_i X_{i,F}}{\alpha_i - \theta}$	$\frac{\alpha_i X_{i,D}}{\alpha_i - \theta}$
Propileno	19,8863	0,0427	0,0582	0,0463	0,0631
Propano	17,5060	0,0081	0,0110	0,0089	0,0121
i-butano	7,5549	0,0044	0,0060	0,0055	0,0076
i-buteno	6,2721	0,0133	0,0181	0,0177	0,0241
l-buteno	6,1031	0,3437	0,4681	0,4622	0,6295
1,3-butadieno	6,5362	0,0674	0,0918	0,0886	0,1207
n-butano	5,3308	0,1621	0,2208	0,2294	0,3125
trans-2-buteno	4,9291	0,0337	0,0459	0,0494	0,0672
cis-2-buteno	4,5823	0,0281	0,0383	0,0427	0,0581
n-pentano	1,7082	0,0006	0,0008	0,0071	0,0097
metanol	7,6270	0,0319	0,0408	0,0401	0,0513
MTBE	1,0000	0,2639	0,0002	-0,4677	-0,0003
			$\Sigma =$	0,53	1,4

Tabla 2.6. Cálculo de la relación de reflujo mínimo

Si se quiere alcanzar una separación especificada entre los dos componentes clave lo normal es que la relación de reflujo y el número de platos sean superiores al mínimo anteriormente calculado.

### Correlación de Gilliland

La relación de reflujo a aplicar suele ser una consideración de tipo económico y generalmente se escoge una relación  $R/R_{min}$  de 1,3, como caso intermedio, por tanto, se obtiene un valor de  $R= 0,47$ . Una vez fijada la relación de reflujo se procede a estimar el número de platos necesarios, para ello se emplea una correlación empírica, la [correlación de Gilliland](#) (Fig. 2.2) que se ajusta bastante a la realidad.

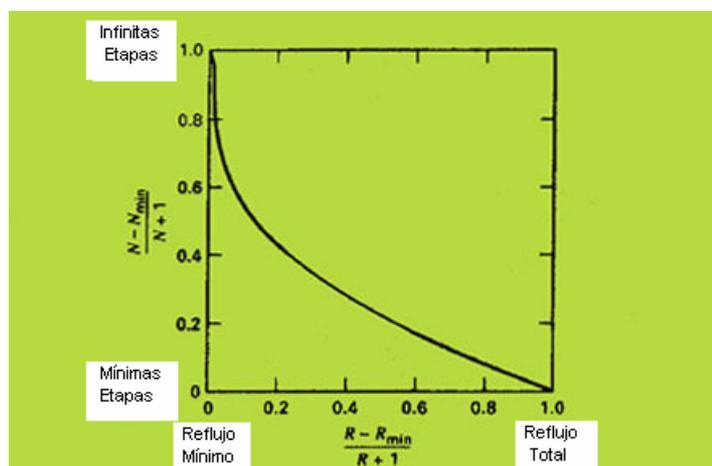


Fig. 2.2. Correlación de Gilliland

Esta correlación se puede expresar mediante las ecuaciones:

$$H = \frac{R - R_{\min}}{R + 1}$$

$$G = 1 - e^{\left[ \frac{(1+54,4H)(H-1)}{(11+117,2H)H^{0,5}} \right]}$$

$$G = \frac{N - N_{\min}}{N + 1}$$

Despejando  $N$  de la última ecuación se obtiene un valor de **16 etapas reales** para la columna en diseño.

### Ecuación de Kirkbride

Si se quiere obtener de manera aproximada el plato óptimo en el que debe ser introducida la alimentación se recurre a la siguiente ecuación empírica propuesta por Kirkbride.

$$\frac{N_R}{N_S} = \left[ \left( \frac{B}{D} \right) \left( \frac{x_{j,F}}{x_{i,F}} \right) \left( \frac{x_{i,B}}{x_{j,D}} \right)^2 \right]^{0,206}$$

donde “ $N_R$ ” es el número de etapas sobre el punto de alimentación, “ $N_S$ ” es el número de etapas por debajo de la alimentación, incluyendo al rehervidor, “ $B$ ” es el caudal de fondo y “ $D$ ” el caudal de destilado.

Aplicando este método, el plato óptimo para la introducción de la alimentación es el **plato 3**.

### 2.1.2. DISEÑO HIDRODINÁMICO

Una vez realizado el diseño básico que determina el número de etapas, la relación de reflujo y el punto de alimentación, se procede a la determinación de la altura y diámetro de la columna, la pérdida de carga, condiciones de inundación y tipo de columna.

#### Tipo de columna

La primera elección a realizar es la del tipo de columna. Se ha elegido una **columna de platos**.

Las torres de platos son particularmente muy usadas en comparación a las torres de relleno cuando pueden ocurrir fluctuaciones en la velocidad del líquido o vapor, o cuando se anticipan grandes cambios en la capacidad total de la columna. El líquido contenido en cada plato también hace a las columnas de platos apropiadas para casos donde se debe dar tiempo para una reacción química. Los problemas de pobre distribución de líquido o gas encontrados a varias capacidades de carga con torres de relleno pueden ser evitados con torres de platos, y las torres de platos son usualmente fáciles de limpiar cuando son involucrados depósitos de sólidos.

Por otro lado, las torres de relleno a menudo permiten una operación con más baja caída de presión que las unidades de platos lo cual puede ser una mayor ventaja para casos de servicio a alto vacío, y el coste de una torre de relleno capaz de hacer el servicio equivalente es a menudo considerablemente menor que el de una torre de platos.

La torre consiste de una serie de platos individuales, cada uno equipado con una serie de unidades de contacto para conseguir el contacto entra la fase gas y la fase líquida, y la transferencia de masa resultante.

### Eficiencia de la columna

Las eficiencias de plato y total de la columna, normalmente están entre 30 y 70 por ciento, y como una aproximación se puede usar 50 por ciento para diseños preliminares.

Un estimado rápido de la eficiencia total de la columna puede obtenerse a partir de la correlación dada por O'Connell (1946), la cual se muestra en la Fig. 2.3. La correlación se basaba inicialmente en datos obtenidos con sistemas de hidrocarburos, pero incluyendo algunos valores para solventes clorados y mezclas de alcohol-agua. Se ha encontrado para dar estimados reales de la eficiencia total de la columna para sistemas de hidrocarburos; y puede usarse para hacer un estimado aproximado de la eficiencia para otros sistemas. El método no considera parámetros de diseño del plato; e incluye solamente dos propiedades físicas variables.

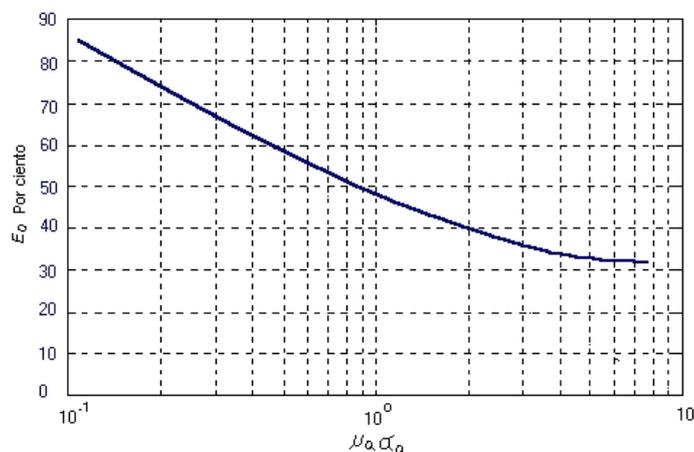


Fig. 2.3. Eficiencia total de la columna para fraccionamiento

Eduljee (1958) ha expresado la correlación de O'Connell en la forma de una ecuación:

$$E_o = 51 - 32,5 \log (\mu_a \alpha_a)$$

donde “ $\mu_a$ ” es la viscosidad molar promedio del líquido en mNs/m<sup>2</sup> y “ $\alpha_a$ ” es la volatilidad relativa promedio del clave ligero.

De este modo, partiendo de una viscosidad promedio de 0,0333 mN s/m<sup>2</sup> y una volatilidad de 5,79 para el clave ligero, se obtiene un valor de  $E_o$  del **74,23 %**.

Conocida la expresión:

$$E_o = \frac{n^\circ \text{ etapas } \_ \text{ideales}}{n^\circ \text{ etapas } \_ \text{reales}} \times 100$$

se procede al cálculo del número real de platos de la columna, a partir de los 16 platos teóricos obtenidos con el método Fenske-Underwood-Gilliland, dando como resultado un número de **21 platos reales**.

### Diseño hidrodinámico del plato

- Calcular los flujos máximos y mínimos de vapor y líquido, para la relación de retorno (“turndown”) requerida.
- Estimar las propiedades físicas del sistema.
- Seleccionar un supuesto espaciado de platos.
- Estimar el diámetro de la columna, basado en consideraciones de inundación.
- Decidir el modelo de flujo de líquido.
- Hacer una distribución estimada de plato: área del bajante, área activa, área de las perforaciones, tamaño de las perforaciones, altura del vertedero.
- Verificar la relación de goteo, si es insatisfactorio retornar al paso 6.
- Verificar la caída de presión del plato, si es muy alta retornar al paso 6.
- Verificar el bajante, si es muy alto retornar al paso 6 ó 3.
- Decidir los detalles de distribución del plato: áreas no perforadas. Verificar la distancia entre perforaciones, si es insatisfactorio retornar al paso 6.
- Recalcular el porcentaje de inundación basado en el diámetro de columna elegido.
- Verificar el arrastre, si es muy alto retornar al paso 4.
- Optimizar el diseño: repetir los pasos 3 a 12 para encontrar el menor diámetro y menor espaciado aceptables.

### Diámetro de la columna

Un estimado aproximado del tamaño total de la columna puede hacerse sobre la base de un número requerido de etapas reales para una separación dada. Esto es necesario para hacer un estimado preliminar del coste de capital para la evaluación de un proyecto.

La altura total de una columna dependerá del espaciado entre platos. Normalmente se usan espaciados de 0,15 m (6 pulg.) hasta 1m (36 pulg.). La elección del espaciado depende del diámetro de la columna y de las condiciones de operación. El espaciado entre platos en columnas grandes es usualmente determinado por la necesidad de un fácil acceso para mantenimiento e inspección. Con columnas con diámetros menores a 3 pies, el mínimo valor del espaciado es alrededor de 6 pulgadas. La tabla 2.7 presenta espaciados en función del diámetro.

Diámetro de torre	Espaciado del plato, l
	0,15 m (6") mínimo
1,2 m (4') o menos	0,45 a 0,50 m (18 a 20")
1,8 a 3,0 m (6 a 10')	0,6 m (24")
3,6 a 7,3 m (12 a 24')	0,9 m (36")

Tabla 2.7. Relación diámetro-espaciado

El principal factor que determina el diámetro de la columna es la velocidad de flujo del vapor. La velocidad del vapor debe ser menor a la que podría causar entrapamiento excesivo de líquido o una alta caída de presión. Este límite de velocidad se conoce como velocidad de vapor máxima permisible. La velocidad de vapor en una columna de platos puede ser limitada por la capacidad de manipular líquido por las bajantes o por el entrapamiento de las gotas de líquido en los vapores ascendentes. En la mayoría de los casos, las limitaciones de los bajantes, no establece la velocidad permisible del vapor; en cambio, las bases comunes de diseño para establecer las velocidades permisibles de vapor, es una función de la cantidad de gas retenido, el cual puede resultar de una operación inapropiada o de la inundación de la columna.

En primer lugar, a partir del balance, se determinan los caudales máscicos L y V en la cabeza y L' y V' en el fondo obteniéndose lo reflejado en la tabla 2.8:

Cabeza		Fondo	
L (kg/h)	12287,16	L' (kg/h)	43824,62
V (kg/h)	38430,05	V' (kg/h)	31095,49

Tabla 2.8. Caudales máscicos de líquido y vapor.

A continuación, se determina la densidad y la tensión superficial para cada corriente (tabla 2.9).

Cabeza		Fondo	
$\rho_V$ (kg/m <sup>3</sup> )	15,61	$\rho_V$ (kg/m <sup>3</sup> )	21,21
$\rho_L$ (kg/m <sup>3</sup> )	565,45	$\rho_L$ (kg/m <sup>3</sup> )	617,87
$\sigma$ (N/m)	0,0099	$\sigma$ (N/m)	0,0082
T (K)	333,12	T (K)	397,45

Tabla 2.9. Propiedades de las corrientes.

Se estima la presión base, se asume la eficiencia de la columna calculada con el método de O'Connell y se toma el rehervidor como equivalente a una etapa ideal. De esta forma, el número de etapas reales es de 21. Si se supone una pérdida de presión por plato de 100 mm H<sub>2</sub>O, la caída de presión total en la columna cumplirá la siguiente expresión:

$$\Delta P_t = \text{caída de presión total} = 9,81 \times 10^{-3} \times h_t \times \rho_L \times n^\circ \text{ etapas}$$

donde “ $\Delta P_t$ ” es la caída de presión total en Pa(N/m<sup>2</sup>) y “ $h_t$ ” es la caída de presión total en el plato en mm líquido.

Calculada de este modo, la caída de presión es de **20601 Pa** lo que se corresponde con la diferencia calculada en el balance de **0,2 atm** (6.5-6.7) entre la cabeza y el fondo.

Las condiciones de inundación fijan el límite superior de la velocidad del vapor. Una velocidad de vapor alta es necesaria para altas eficiencias de plato, y la velocidad normalmente será entre 70 a 90 por ciento de la que podría causar inundación. Para diseño, podría usarse un valor de 80 a 85 por ciento de la velocidad de inundación.

Una torre debe tener suficiente área de sección transversal para manipular los gases ascendentes sin un excesivo arrastre de líquido de un plato a otro. Asumiendo que el arrastre de vapor sobre las gotas suspendidas de líquido podría no exceder del peso promedio de una gota, Souders y Brown derivaron la siguiente ecuación aplicable para cualquier ubicación específica en la columna:

$$u_f = K_1 \sqrt{\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_L}}$$

donde “ $u_f$ ” es la velocidad de inundación del vapor, basada en sección transversal neta de torre vacía en m/s y “ $K_1$ ” es una constante empírica en m/s obtenida de la Fig.2.4 para el SI.

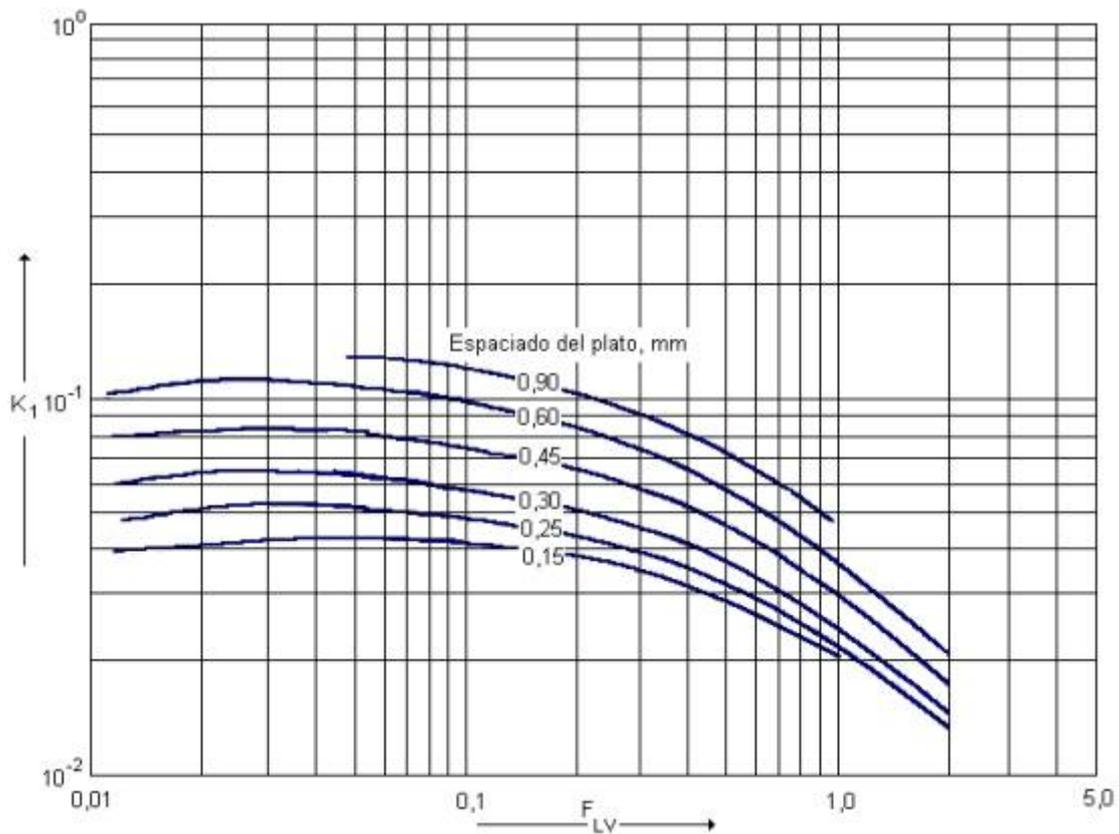


Fig. 2.4. Determinación de  $K_1$

El factor de flujo líquido-vapor  $F_{LV}$  en la Fig. 2.4 es dado por:

$$F_{LV} = \frac{L}{V} \sqrt{\frac{\rho_V}{\rho_L}}$$

donde “ $L$ ” es el flujo de masa del líquido en kg/s y “ $V$ ” EL flujo de masa del vapor en kg/s.

Se obtiene así un  $F_{LV}$  para la cabeza de **0,053** y para el fondo de **0,261**. Además, se ha seleccionado un **espaciado de 24”** entre platos, es decir, 0,6 m.

Con estos valores, nos vamos a la Fig. 2.4 y obtenemos valores de  $K_1$  para la cabeza de 0,11 y de 0,08 para el fondo. Estos valores deben ser corregidos ya que los valores de  $K$  están dados para una tensión superficial del líquido de 0,02 N/m, para otras tensiones superficiales se debe multiplicar el valor por:

$$\left[ \frac{\sigma}{0.02} \right]^{0.2}$$

Una vez corregidos, los valores finales de  $K_1$  a sustituir en la fórmula de la velocidad son: **0,096** en cabeza y **0,067** en el fondo. Las velocidades de inundación obtenidas a partir de la ecuación de Souders y Brown serán, por consiguiente, de 0,57 m/s para la cabeza y 0,35 m/s para el fondo.

Como ya se ha especificado, la velocidad de diseño se toma como un porcentaje de esta velocidad de inundación. Tomamos un **85%** de dicha velocidad obteniendo finalmente un valor de 0,48 m/s para la cabeza y 0,30 m/s para el fondo.

Para calcular el diámetro, se requiere un estimado del área neta  $A_n$ . Como un primer supuesto se toma el área del bajante como 12 % del área transversal total y se asume que la relación de área de perforación/ área activa es de un 10 %.

Para el cálculo del área bajante se utiliza la expresión:  $v = Q/A \rightarrow A = Q/v$  donde “v” es la velocidad anteriormente calculada en m/s y “Q” el caudal volumétrico en m<sup>3</sup>/s. Además es conocido que  $Q = \text{caudal másico} / \text{densidad}$  (tabla 2.10).

Cabeza		Fondo	
$u_f$ (m/s)	0,48	$u_f$ (m/s)	0,30
$Q$ (m <sup>3</sup> /s)	0,68	$Q$ (m <sup>3</sup> /s)	0,41
$A_b$ (m <sup>2</sup> )	1,42	$A_b$ (m <sup>2</sup> )	1,35
$A_t$ (m <sup>2</sup> )	1,61	$A_t$ (m <sup>2</sup> )	1,53

Tabla 2.10. Cálculo del área transversal.

Aplicando la fórmula  $A = \pi D^2/4$  se despeja el diámetro que debe tener la columna para poseer esa área transversal total, obteniéndose un diámetro de 1,40 m en cabeza y 1,39 en fondo, de manera que se toma como **diámetro de diseño 1,4 m** (4,6 pies). Se usa el mismo diámetro sobre y debajo de la alimentación, reduciendo el área perforada para los platos bajo la alimentación. En este caso, la diferencia es muy pequeña, pudiéndose utilizar el mismo tipo de plato, con la misma área perforada en ambos puntos.

### Modelo de flujo del líquido

La elección de tipo de plato (reverso, simple paso o múltiple paso) dependerá del flujo de líquido y el diámetro de la columna. Una selección inicial puede hacerse usando la Fig. 2.5, la cual ha sido adaptada de una figura similar dada por Huang y Hodson (1959).

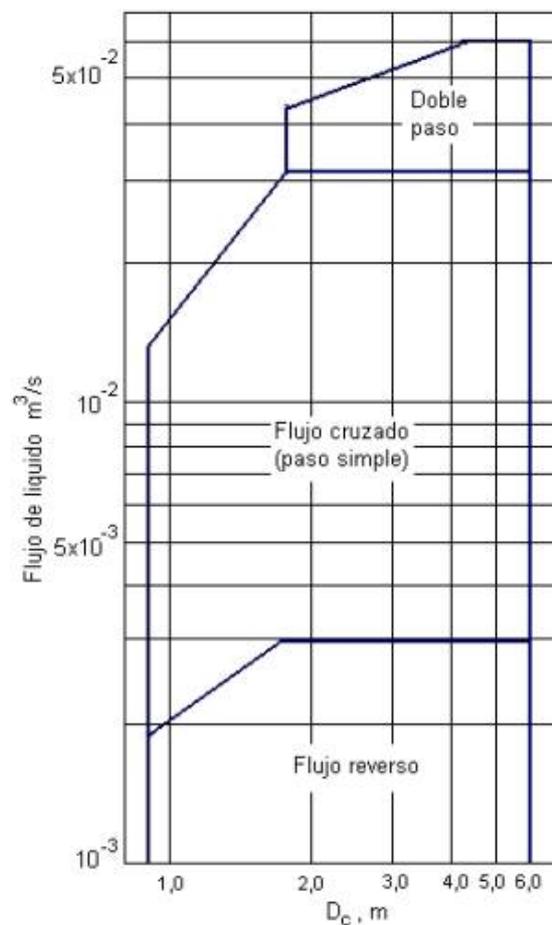


Fig. 2.5. Selección de modelo de flujo de líquido.

El flujo volumétrico máximo de líquido en la columna es el resultado de dividir el caudal másico por su densidad, obteniéndose un flujo de  $0,02 \text{ m}^3/s$ .

Si se tiene en cuenta el diámetro de 1,4 m y el flujo de  $0,02 \text{ m}^3/s$ , queda situado dentro de la zona de **flujo cruzado y paso simple**. Es decir el plato sería como se muestra en la figura 2.6.

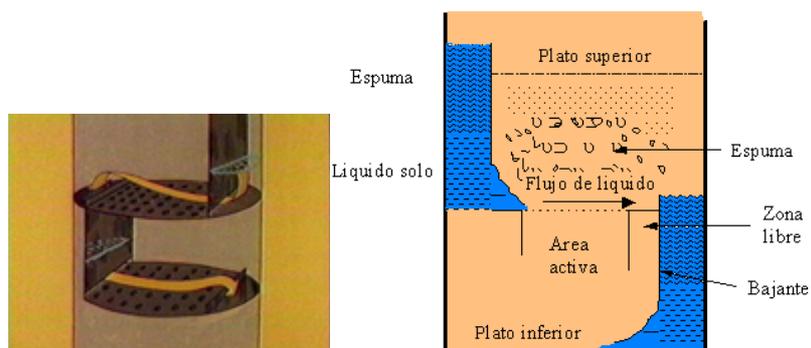


Fig. 2.6. Modelo de flujo cruzado y paso simple

**Diseño del plato**

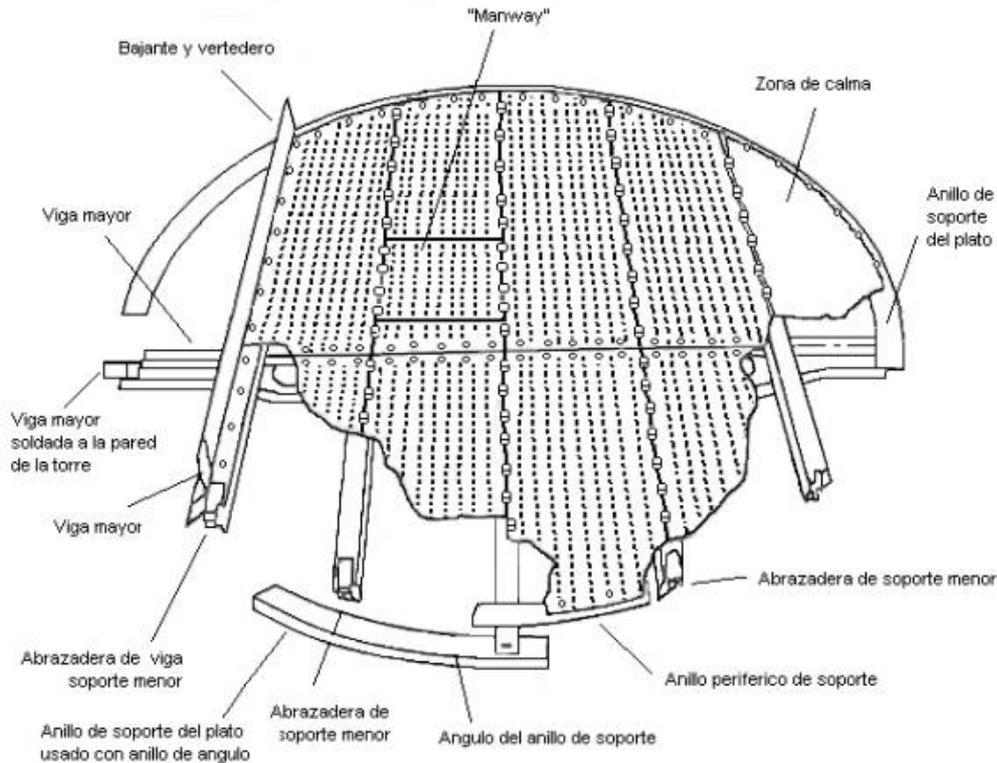


Fig. 2.7. Estructura de un plato.

Una vez calculado el diámetro de la columna ( $D_c = 1,4 \text{ m}$ ) y el área transversal ( $A_c = 1,54 \text{ m}^2$ ), se procede al cálculo del resto de superficies significativas en el diseño de la hidráulica del plato.

El área del bajante ( $A_d$ ), el área neta ( $A_n$ ), el área activa ( $A_a$ ) y el área de las perforaciones ( $A_h$ ) se calcula mediante las siguientes expresiones:

Área del bajante  $A_d = 12\% A_c = 0,1848 \text{ m}^2$

Área neta  $A_n = A_c - A_d = 1,54 - 0,18 = 1,36 \text{ m}^2$

Área activa  $A_a = A_c - 2A_d = 1,1704 \text{ m}^2$

Área de las perforaciones  $A_h = 10\% A_a = 0,117 \text{ m}^2$

Con bajantes segmentados, la longitud del vertedero fija el área del bajante. La longitud del vertedero normalmente será entre 0,6 a 0,85 del diámetro de la columna. Un buen valor para usar es 0,77, equivalente a un área de bajante de 12 %.

La relación entre longitud del vertedero y área del bajante se da en la Fig. 2.8. En el eje "x" se representa  $l_w/D_c$  y en el "y" se representa  $A_d/A_c$  %.

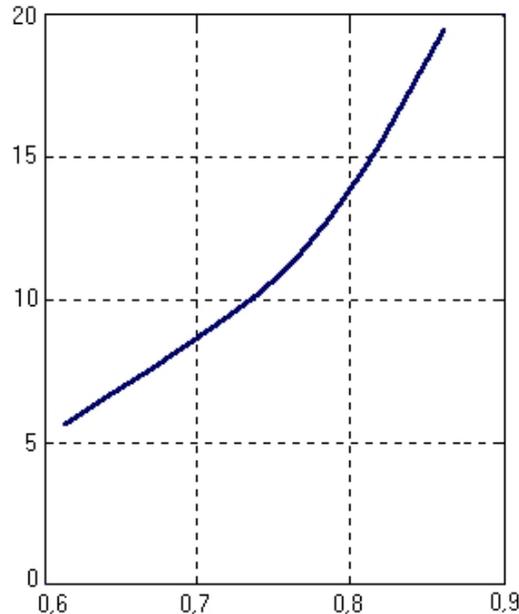


Fig. 2.8. Relación entre área del bajante y longitud del vertedero

Para el valor obtenido de 0,77, la longitud del bajante  $l_w$  es de **1,08 m**.

A continuación, se supone una **altura del vertedero** ( $h_w$ ) de **50 mm**, el **diámetro de las perforaciones** ( $d_h$ ) de **5 mm** y el **espesor del plato** ( $e$ ) de **5 mm**.

La altura del vertedero determina el volumen de líquido sobre el plato y es un importante factor para determinar la eficiencia del plato. Una mayor altura incrementará la eficiencia del plato pero a expensas de una alta caída de presión en el plato. Para columnas operando alrededor de la presión atmosférica, la altura del vertedero normalmente varía entre 40 a 90 mm (1,5 a 3,5 pulgadas); se recomienda 40 a 50 mm. Para operaciones al vacío se usan alturas cortas de vertedero para reducir la caída de presión; se recomienda de 6 a 12 mm (1/4 a 1/2 pulgadas).

### Verificación del goteo

El caudal másico máximo de líquido es de 12,17 kg/s por el fondo de la columna y, puesto que se produce un retorno en el rehervidor del 70 %, el mínimo es de 8,52 kg/s.

La altura de líquido en el plato es igual a la altura del vertedero  $h_w$ , además de la cresta de líquido sobre el vertedero  $h_{ow}$  (rebose del vertedero).

La altura del rebose del vertedero sobre el vertedero puede estimarse usando la fórmula de Francis. Para un bajante segmentado, esta puede escribirse como:

$$h_{ow} = 750 \left[ \frac{L}{\rho_L l_w} \right]^{2/3}$$

donde “ $l_w$ ” es la longitud del vertedero en m, “ $h_{ow}$ ” es el rebose del vertedero en mm de líquido y “ $L$ ” es el flujo de líquido en kg/s.

Calculado de este modo, la altura de rebose del vertedero máxima y mínima es 52 y 41 mm respectivamente. A flujo mínimo,  $h_w + h_{ow}$  vale **91mm**.

El límite inferior del rango de operación ocurre cuando el derrame de líquido a través de las perforaciones del plato es excesivo, se produce inundación. Esto se conoce como el punto de inundación. La velocidad del vapor al punto de inundación es el mínimo para una operación estable. El área de las perforaciones debe ser elegida para dar la velocidad de vapor mas baja aún operando sobre el punto de inundación.

La velocidad de vapor mínima de diseño está dada por:

$$u_h = \frac{[K_2 - 90(25,4 - d_h)]}{(\rho_v)^{1/2}}$$

donde “ $u_h$ ” es la velocidad de vapor mínima a través de las perforaciones (basada en el área de la perforación) en m/s, “ $d_h$ ” es el diámetro de la perforación y “ $K_2$ ” una constante que depende de la altura de líquido sobre el plato, obtenida de la Fig. 2.9.

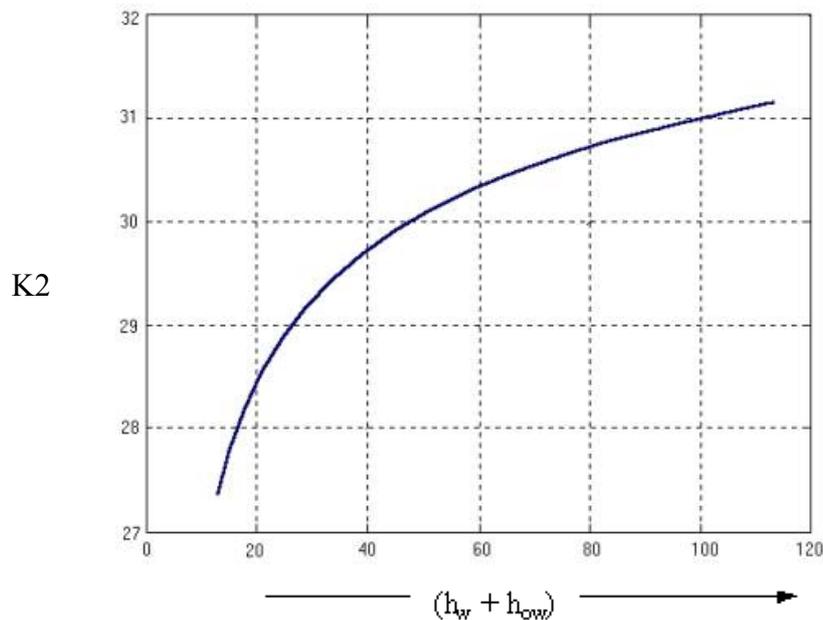


Fig. 2.9. Correlación para el punto de inundación

Para el caso que nos ocupa, la constante  $K_2$  vale 30,8 y la velocidad de vapor mínima  $u_h$  vale 2,7 m/s. La velocidad actual mínima sigue la expresión:

$$\text{Velocidad mínima de vapor actual} = \frac{\text{velocidad mínima de vapor}}{A_h}$$

Se obtiene un valor de  $u_{min}$  de 3,47 m/s, muy por encima del punto de goteo (2,7 m/s), por tanto, el plato es aceptable.

### Caída de presión en el plato

La caída de presión es una consideración de diseño importante. Existen dos causas principales para que ocurra la caída de presión:

1. La presión disminuye debido al flujo de vapor a través del conjunto de platos.
  - Contracción a medida que el gas entra a los casquetes o perforaciones.
  - Fricción en las perforaciones y en el espacio anular en una unidad de casquetes.
  - Fricción debido al cambio de dirección en los casquetes y en las válvulas.
2. Caída de presión debido a la columna de líquido sobre las ranuras, perforaciones o sobre las válvulas.

Un simple modelo de suma es normalmente usado para predecir la caída de presión total. La total es tomada como la suma de la caída de presión calculada para el flujo de vapor a través del plato seco (la caída de presión a través del plato  $h_h$ ); la columna de líquido sobre el plato ( $h_w + h_{ow}$ ) y un término para compensar otras causas menores de la caída de presión, denominadas caídas residuales  $h_r$ .

Las caídas residuales es la diferencia entre la caída de presión observada experimentalmente y la simple suma de la caída de presión en el plato seco y la altura de líquido. Esto influye sobre dos efectos: la energía para formar las burbujas de vapor y el hecho de que en un plato en operación la columna de líquido no será solamente líquido, sino que será líquido con espuma, y por lo tanto la densidad y el peso será diferente a líquido puro.

Es conveniente expresar la caída de presión en términos de mm de líquido en unidades de presión:

$$\Delta Pt = \text{caída de presión total} = 9,81 \times 10^{-3} h_t \rho_L$$

La caída de presión a través del plato seco puede estimarse usando expresiones derivadas para el flujo a través de orificios:

$$h_d = 51 \left[ \frac{u_h}{C_o} \right]^2 \frac{\rho_V}{\rho_L}$$

donde el coeficiente de orificio “ $C_o$ ” es una función del espesor del plato, diámetro de las perforaciones, y la relación de área de perforación a área perforada.  $C_o$  puede obtenerse de la Fig. 2.10.

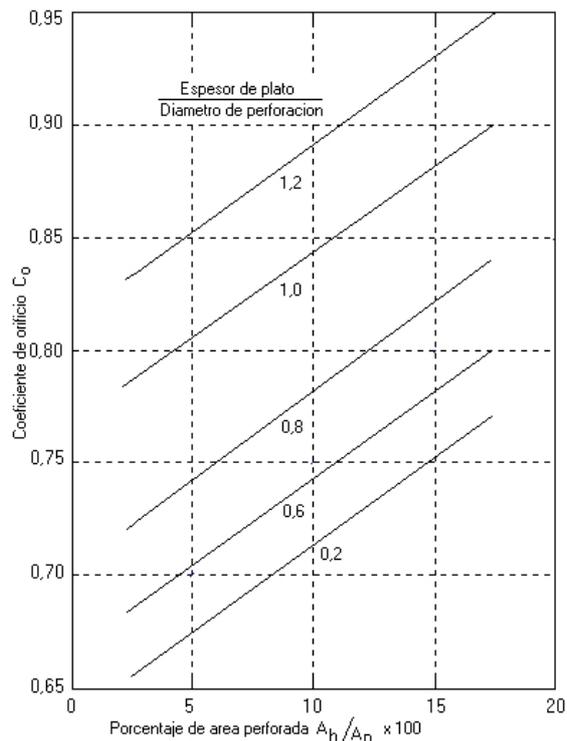


Fig. 2.10. Coeficiente de descarga. Platos perforados

Se han propuesto diferentes métodos para estimar la columna residual como una función de la tensión superficial del líquido, densidad de la espuma y altura de la espuma. Sin embargo, como este término de corrección es pequeño el uso de un método elaborado para su estimación no se justifica, y se puede usar la ecuación simple propuesta por Hunt et al:

$$h_r = \frac{12,5 \times 10^3}{\rho_L}$$

Esta ecuación es equivalente a tomar una caída residual como un valor fijo equivalente a 12,5 mm de agua (1/2 pulgadas).

La caída total en el plato está dada por:  $h_t = h_d + (h_w + h_{ow}) + h_r$  y si el gradiente hidráulico es significativo, la mitad de su valor se adiciona a la columna de líquido.

De este modo, obtenemos los valores representados en la tabla 2.11:

$C_0$	0,84
$h_d$	30 mm
$h_w+h_{ow}$	91 mm
$h_r$	20 mm
$h_t$	141 mm

Tabla 2.11. Caída de presión en el plato

Se había supuesto una caída de presión de 100 mm de H<sub>2</sub>O por plato y se ha obtenido **141 mm**. Los cálculos podrían repetirse con un nuevo supuesto pero los pequeños cambios en las propiedades físicas tendrán un efecto muy pequeño sobre el diseño del plato, 141 mm por plato se considera aceptable.

La caída de presión total en la columna es de **29000 Pa**, es decir **0,28 atm**, una caída de presión dentro de los límites de normalidad y, por tanto, adecuada.

### Retención de líquido en el bajante

El área del bajante y el espaciado entre platos deben ser tales que el nivel del líquido y la espuma en el bajante estén muy por debajo del tope de la salida del vertedero del plato superior. Si el nivel se eleva sobre la altura del vertedero, la columna se inundará.

La retención de líquido en el bajante es causada por la caída de presión en el plato (el bajante forma un tramo de tubo en U) y la resistencia al flujo en el bajante también lo es.

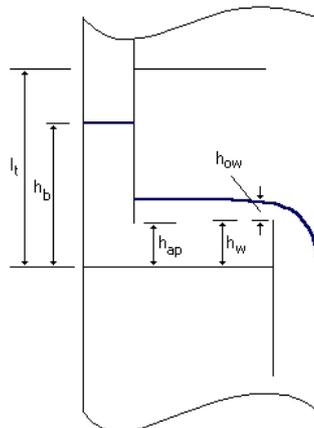


Fig. 2.11. Flujo en el bajante

En términos del líquido sin espuma, el flujo en el bajante está dado por:

$$h_b = (h_w + h_{ow}) + h_t + h_{dc}$$

donde “ $h_b$ ” es la retención en el bajante, medido a partir de la superficie del plato en mm y “ $h_{dc}$ ” es la pérdida de columna en el bajante también en mm.

La principal resistencia al flujo será causada por la contracción en la salida del bajante y la pérdida de columna en el bajante puede estimarse usando la ecuación dada por Cicalese et al. (1947):

$$h_{dc} = 166 \left[ \frac{L}{\rho_L A_m} \right]^2$$

donde “ $A_m$ ” puede tomarse como el área del bajante  $A_d$  o el área libre bajo el bajante  $A_{ap}$ ; la que sea más pequeña en  $m^2$ .

El área libre bajo el bajante esta dada por:  $A_{ap} = h_{ap} l_w$  y “ $h_{ap}$ ” es la altura del borde del delantal sobre el plato. Esta altura normalmente es ajustada de 5 a 10 mm (1/4 a 1/2 pulg.) debajo de la altura de salida del vertedero.

Tomando  $h_{ap} = h_w - 10 = 40$  mm, el área bajo el delantal será  $A_{ap} = 0,043 m^2$  que, si comparamos con  $A_d = 0,1848 m^2$ , es más pequeña y, por tanto, será la usada como  $A_m$  para calcular  $h_{dc}$ .

El valor que resulta para “ $h_{dc}$ ” es de 34,66 mm y el de “ $h_b$ ” finalmente es 266,97 mm.

Para predecir la altura de líquido con espuma sobre un plato, y la altura de la espuma en el bajante, es necesario algún medio de estimar la densidad de la espuma. La densidad del líquido con espuma será normalmente entre 0,4 a 0,7 la densidad del líquido puro. Se han propuesto varias correlaciones para estimar la densidad de la espuma como una función de la velocidad de flujo del vapor y las propiedades físicas del líquido; sin embargo, ninguna es particularmente realista, y para propósitos de diseño usualmente es satisfactorio asumir un promedio de 0,5 la densidad del líquido.

Este valor es también tomado como la densidad promedio del líquido en el bajante; lo cual permite que para un diseño seguro, el nivel de líquido ( $h_b$ ) no deberá exceder la mitad del espaciado del plato  $l_t$ , para evitar inundación.

Así, la altura permisible del vertedero debe cumplir:  $h_b < 1/2(l_t + h_w)$ . Se cumple (266,97 < 330 mm), por lo tanto, el espaciado del plato es aceptable.

### Verificar el tiempo de residencia

Se debe dar suficiente tiempo de residencia en el bajante para permitir el desprendimiento del vapor contenido en el líquido, para evitar que caiga por el bajante líquido con espuma. Se recomienda un tiempo no menor de 3 segundos.

El tiempo de residencia en el bajante es dado por:

$$t_r = \frac{A_d h_{bc} \rho_L}{L}$$

donde “ $t_r$ ” es el tiempo de residencia en segundos.

Obtenemos un  $t_r$  de **3,57 segundos**, por lo que la columna está trabajando en unas buenas condiciones de operación.

**Arrastre**

El arrastre puede ser estimado a partir de la correlación dada por Fair (1961), Fig. 2.12, la cual da el arrastre fraccional  $\psi$  (kg/ kg total de líquido) como una función del factor líquido-vapor  $F_{LV}$ , con el porcentaje aproximado de inundación como parámetro.

El porcentaje de inundación está dado por:

$$\%inundación = \frac{velocidad\_actual(basada\_en\_el\_área\_neta)}{Velocidad\_media} = \frac{V/A_n}{u_f} \times 100 = 84,7\%$$

El efecto del arrastre sobre la eficiencia del plato puede estimarse usando la correlación siguiente (Fig. 2.12). Como una aproximación, el límite superior de  $\psi$  puede tomarse como 0,1.

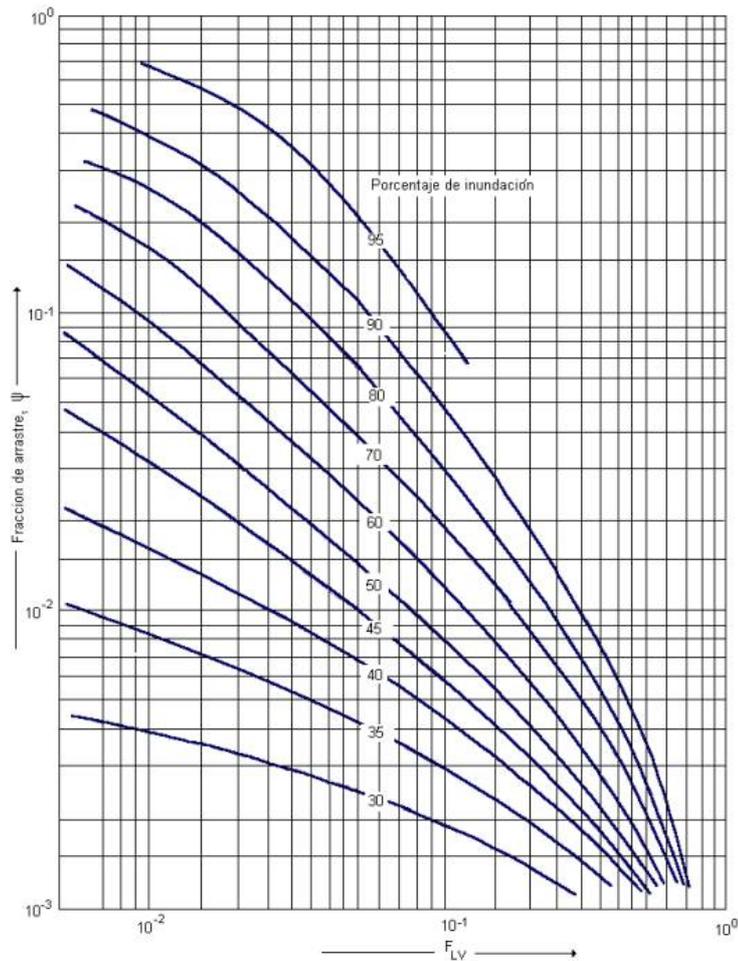


Fig. 2.12. Correlación para el arrastre en platos perforados.

Resulta un valor para  $\psi$  de **0,025**. Puesto que es mucho menor que 0,1, el arrastre es satisfactorio.

### Área perforada

El área disponible para perforación se reducirá por la obstrucción causada por las partes estructurales (tales como soportes, anillos y vigas), y por el uso de zonas libres. Las zonas libres son espacios no perforados del plato en los lados de salida y entrada. El ancho de cada zona es usualmente el mismo (tabla 2.12):

Diámetro de la columna	Ancho de la zona perforada
< 1,5 m	75 mm
>1,5 m	100 mm

Tabla 2.12. Valores recomendados zona perforada.

El ancho de los anillos de soporte para platos seccionados normalmente será de 50 a 75 mm; los anillos de soporte no deberán extenderse al área del bajante. El área no perforada puede calcularse a partir de la geometría del plato. Las relaciones entre el ancho de la cinta, la longitud de la cinta y el ángulo formado por la cinta que forma el vertedero, están dadas en la Fig. 2.13.

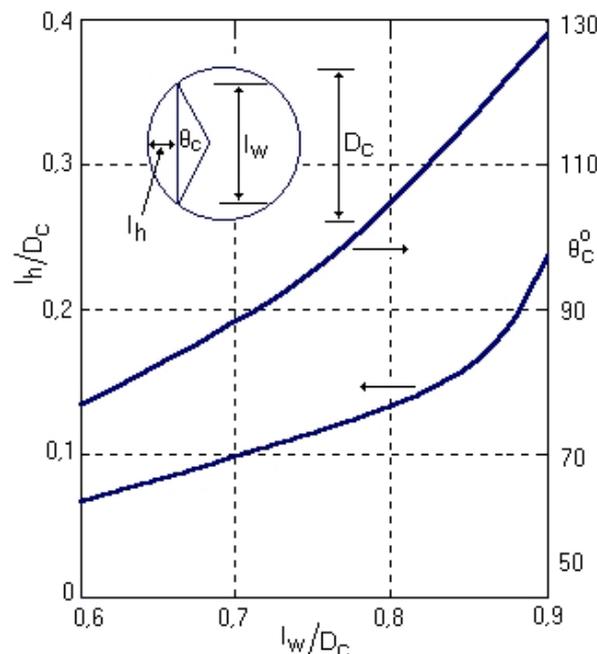


Fig. 2.13. Relaciones entre el ángulo subtendido por la cinta, altura de la cinta y longitud de la cinta

De la Fig. 2.13, a  $l_w/D_c = 0,77$ ,  $\theta_c = 99^\circ$ . El ángulo formado por los tramos no perforados será  $180 - 99 = 81^\circ$ . Se deja un espacio sin perforar  $l_u$  de 50 mm. La longitud media de los tramos no perforados se calcula con la expresión:

$$l_m = (D_c - l_u)\pi \times \frac{81}{180} = 1,9m$$

$$\text{Área de los tramos no perforados} = 50 \times 10^{-3} \times 1,9 = 0,095 \text{ m}^2.$$

$$\text{Área de zonas libres} = 2(50 \times 10^{-3}) \times (l_w - 2 \times 50 \times 10^{-3}) = 0,0978 \text{ m}^2.$$

$$\text{Área total disponible para perforaciones} = A_p = A_a - (0,0978 + 0,050) = 1,02 \text{ m}^2$$

La distancia entre los centros de las perforaciones  $l_p$  deberá no ser menor que 2,0 veces el diámetro de las perforaciones, y el rango normal variará entre 2,5 a 4,0 veces. Dentro de este rango, la distancia puede seleccionarse para dar el número requerido de perforaciones activas para el área total perforada especificada. Son usados arreglos cuadrado y triangular equilátero para la disposición de las perforaciones: se prefiere el modelo triangular. El área total de las perforaciones (como una fracción del área total perforada  $A_p$ ) es dada por la siguiente expresión, para un arreglo triangular:

$$\frac{A_h}{A_p} = 0,9 \left[ \frac{d_h}{l_p} \right]^2$$

Esta ecuación se grafica en la Fig. 2.14:

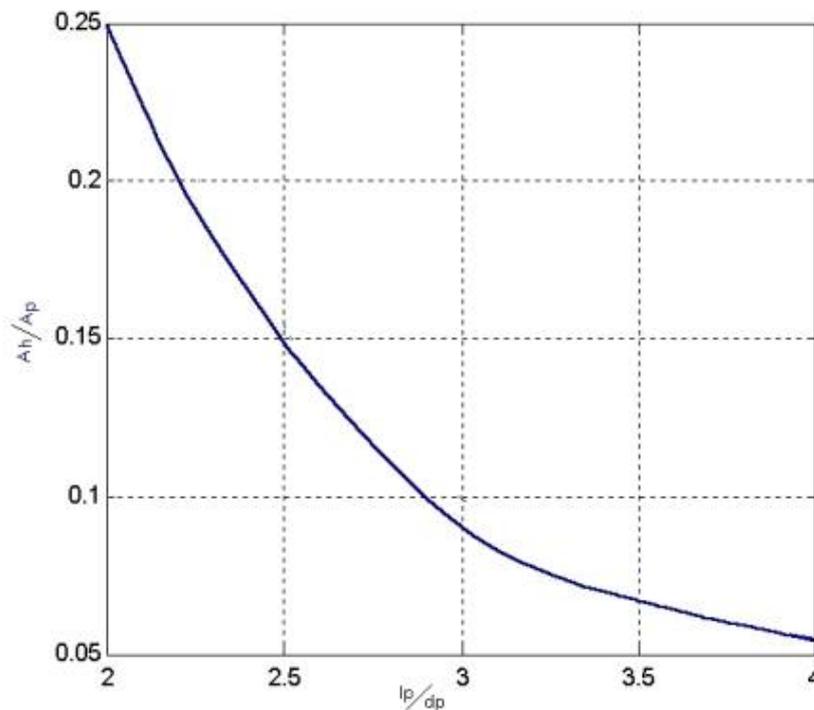


Fig. 2.14. Relación entre área de perforaciones y distancia.

$$\frac{A_h}{A_p} = \frac{0,117}{1,02} = 0,114$$

De la Fig. 2.14  $d_h/l_p = 2,7$ ; satisfactorio, dentro del rango de 2,5 a 4,0.

### Número de perforaciones

Se ha escogido un diámetro de 5 mm para las perforaciones de manera que el área de una perforación será de  $1,9635 \times 10^{-5} \text{ m}^2$ . Para hallar el número de perforaciones dividimos el área total de las perforaciones entre esta área obteniendo un número de **5961** perforaciones.

### Altura total de la columna

La altura total de la columna esta dada por la ecuación:  $H = Z + S + T$ , donde “ $H$ ” es la altura total de la columna en m, “ $Z$ ” la altura neta (ocupada por las etapas de contacto) en m, “ $S$ ” la altura de la base, aproximadamente 1,8 m (6 pies) y “ $T$ ” la altura de la parte superior, aproximadamente de 0,5 a 1 m (2 a 3 pies).

La altura neta,  $Z$  de la columna esta dada por:

$$Z = \left( \frac{N-1}{E_0} \right) \times l$$

donde “ $N$ ” es el número de etapas teóricas, “ $E_0$ ” la eficiencia global de la columna y “ $T$ ” el espaciado entre platos.

La altura neta “ $Z$ ” calculada de ese modo resulta un valor de 12,32 m, es decir, 40,4 pies. La altura de la base “ $S$ ” es 1,8 m y la altura de la parte superior “ $T$ ” es 0,8 m. Por tanto, la altura total de la columna es de **14,9 m** (49 pies).

### 2.1.3. DISEÑO MECÁNICO

El diseño mecánico incluye el material de construcción y el tipo de perforaciones en el plato, adjuntándose además la hoja de especificación técnica de la columna y del plato.

Los factores principales a considerar cuando se compara la operación de platos perforados, platos con casquetes de burbujeo y platos de válvula son: costo, capacidad, rango de operación, eficiencia y caída de presión.

#### Tipo de plato

Se ha elegido un **plato perforado** frente al de casquetes o de válvulas por su menor coste y porque, para la operación en proceso, no es necesario otro tipo más complejo.

Este es el tipo más simple de plato de flujo cruzado. El vapor asciende a través de las perforaciones en el plato; y el líquido es retenido sobre el plato por el flujo de vapor. No se produce sello de líquido, y a velocidades bajas de vapor, el líquido se derrama a través de las perforaciones, reduciendo la eficiencia del plato. Las perforaciones son usualmente pequeños agujeros, pero pueden usarse grandes agujeros y aberturas.

La caída de presión en el plato dependerá del diseño detallado del plato pero, en general, los platos perforados dan una menor caída de presión seguidos de los platos de válvula, con los casquetes de burbujeo dando la más alta caída de presión.

Los platos perforados son los más baratos y satisfactorios para la mayoría de aplicaciones. Los platos de válvula pueden considerarse en casos específicos donde no se puedan usar platos perforados. Los casquetes de burbujeo se usarán solamente cuando se deban manipular caudales de vapor (gas) muy bajos.

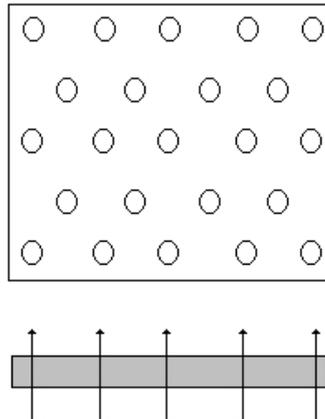


Fig. 2.15. Típico plato perforado de flujo cruzado

El canal del bajante es formado por una placa plana llamada delantal, la cual se extiende desde el vertedero. Los delantales son usualmente verticales, pero pueden ser inclinados para incrementar el área aprovechable del plato para perforación. Si es requerido un sello más positivo para el bajante a la salida, puede colocarse un vertedero en la entrada o un sello negativo. Bajantes circulares (tuberías) son a veces usados para pequeños flujos de líquido. Se ha elegido un **delantal vertical**.

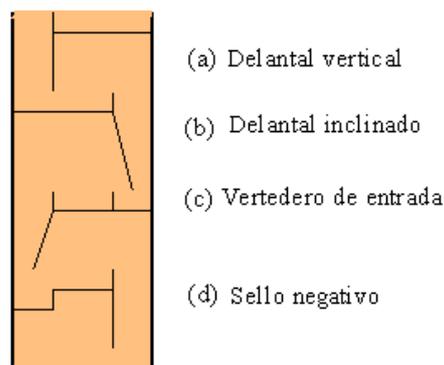


Fig. 2.16 Diseño del bajante.

Los platos perforados, tienen perforaciones de 2,5 mm a 12 mm (1/8 a 1/2 pulg.) de diámetro, siendo el tamaño común de 5 mm (3/16 pulg.) las perforaciones se hacen siguiendo un arreglo triangular o cuadrado con una distancia entre centros entre 2 a 5 veces el diámetro de las perforaciones (el óptimo es 3,8). La velocidad de entrada en el bajante no deberá exceder a 0,12 m/s (0,4 pies/s) para permitir una adecuada área para el desprendimiento del vapor. Se ha elegido un **arreglo triangular** y un diámetro de perforaciones de **5 mm**.

Espesores típicos usados de los platos son: 5 mm (3/16 pulg.) para acero al carbono, y 3 mm (0,12 pulg.) para acero inoxidable. Se ha escogido un espesor de **5mm**.

Las secciones del plato son soportadas sobre un anillo soldado a través de la pared de la carcasa, y sobre vigas. Las vigas y los anillos tienen 50 mm de ancho, con las vigas colocadas en un espaciado de 0,6 m. Las vigas son secciones de ángulos o canales construidas a partir de hojas plegadas. Abrazaderas especiales pueden usarse en las secciones que son ensambladas solamente de un lado. Se diseña una sección removible (“manway”) para permitir el paso del encargado de hacer mantenimiento. Esto reduce el número de “manways” necesarios sobre la carcasa, lo cual reduce el coste de la misma.

### **Carcasa**

La cubierta está formada por una serie de **virolas** soldadas unas con otras, entendiéndose por virola un trozo de tubería o una chapa que convenientemente curvada y soldada forma un cilindro sin soldaduras circunferenciales. Se pueden colocar agarraderas para dar acceso a los platos individuales para la limpieza, mantenimiento e instalación.

La unión de varias virolas forma la cubierta, de forma que la suma de las alturas de los cilindros obtenidos por las virolas sea la requerida por la cubierta.

Las soldaduras de una virola son axiales o longitudinales, ya que están realizadas siguiendo la generatriz del cilindro, al contrario, las soldaduras que unen virolas, o los cabezales con la cubierta, son circunferenciales o transversales, por estar realizadas siguiendo una circunferencia situada, obviamente, en un plano perpendicular al eje del cilindro.

Cuando el diámetro de cubierta es menor de 24 pulgadas (60.9 cm.) se utiliza, normalmente, tubería, y en diámetros superiores se realiza a partir de chapa. En este caso se ha utilizado **chapa**.

### **Material**

Tanto las características de corrosión de los fluidos involucrados y los costos deciden al material aceptable para la construcción de la carcasa y los platos.

Se ha elegido **acero inoxidable AISI 304** tanto para la construcción de la carcasa como para los platos al no ser especialmente corrosivos los componentes de la corriente de proceso.

El acero inoxidable AISI 304 es una aleación con 18 % Cr y 8 % Ni con excelente resistencia a la corrosión, a la presión y disponibilidad en el mercado. La temperatura máxima de operación para el acero inoxidable AISI 304 es de 760° C. No obstante, debido a la corrosión bajo tensión e intergranular, la temperatura para servicio continuo del acero inoxidable AISI 304 se limita a 420 °C. La dureza del acero inoxidable AISI 304 es de 160 HB.

## Cabezales

Los cabezales o fondos son las tapas que cierran la carcasa. Normalmente son bombeados, existiendo una gran diversidad de tipos entre ellos. Se ha escogido tanto para el cabezal superior como para el inferior el tipo **elíptico**. Son los fondos formados por una elipse de revolución. Los fondos utilizados son los elípticos con relación de ejes 2:1. Este tipo de fondos son, junto con los Policéntricos, los más utilizados para bajas y medias presiones.

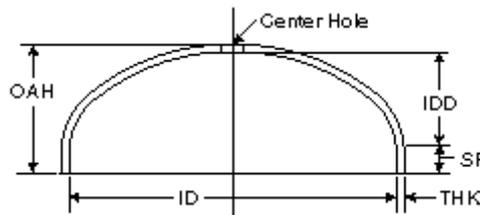


Fig. 2.17. Cabezal elíptico.

## Apoyo o sujeción

La disposición de la columna de destilación es vertical y como apoyo se utilizará un **faldón cilíndrico** o cónico. En los recipientes que no pueden ser soportados por patas, bien sea por su tamaño o por tener que transmitir esfuerzos grandes, se utilizan los faldones cilíndricos, consistentes en un cilindro soldado al fondo. Con este tipo de apoyo la carga se reparte uniformemente a lo largo del perímetro de la circunferencia de soldadura, evitando concentraciones de esfuerzos en la envolvente y disminuyendo la presión transmitida al suelo.

Los pernos de anclaje se sitúan a lo largo del perímetro de la circunferencia de apoyo y a una distancia entre 400 mm y 600 mm, según el tamaño y el número requerido. En todo caso, el número de pernos deberá ser múltiplo de 4 (4,8,12,20,24).

Para evitar momentos debidos al peso del recipiente se debe realizar el faldón de forma que su diámetro medio coincida con el diámetro medio de la cubierta.

Este tipo de apoyo es el más utilizado para torres, reactores y recipientes de tamaño medio y grande.

Al diseñar el faldón se debe tener en cuenta que ha de incluirse un acceso a su interior y unas ventilaciones para evitar la acumulación de gases en su parte interna.

## Conexiones

Todo recipiente debe tener como mínimo una conexión de entrada del fluido y otra de salida, aunque siempre tienen muchas más. Seguidamente se indican los servicios más comunes que precisan conexiones en el recipiente:

- De entrada y salida de fluidos.
- Para instrumentos, como manómetros, termómetros, indicadores o reguladores de nivel.
- Para válvula de seguridad
- Para servicios tales como drenaje, venteo, de limpieza, paso de hombre, paso de mano, etc.

Salvo en casos excepcionales, las conexiones se realizan embridadas, ya que permiten su montaje y desmontaje sin tener que realizar ningún corte ni soldadura. Solamente en casos de fluidos extremadamente tóxicos, o altamente explosivos en contacto con el aire, se realizan las conexiones soldadas. Se ha realizado el diseño con **conexiones embridadas**.

Las diversas partes que conforman la conexión embridada son las siguientes:

- Tubuladura.
- Placas de refuerzo.
- Brida.
- Pernos y turcas.
- Juntas o guarniciones.
- Tapas o bridas ciegas para las conexiones de servicios.

En la parte exterior de la envolvente van soldados numerosos accesorios, de los cuales se indican los más comunes:

- Soportes de instalación del **aislamiento**: Cuando la temperatura del fluido interior es superior a 60° C (como en nuestro caso), o bien inferior a 0° C, se debe instalar un aislante para impedir la pérdida de calor o evitar el calentamiento del interior, así como por protección personal. Para poder aplicar el aislamiento se sueldan unos anillos que servirán de soporte de las mantas de aislamiento.
- Anclajes para aplicación de **protección contra incendios**: Si un equipo está instalado en una zona donde existe peligro de incendio, se aplica a su parte inferior (soporte normalmente) un cemento que los protege del fuego. Para aplicar este cemento se sueldan unos anclajes que sirven de soporte del cemento antifuego.
- **Soportes** de escalera y plataformas: Cuando se prevé instalar escaleras y plataformas, se sueldan unas pequeñas placas en la envolvente (clips), a las que se atornillan estas escaleras y plataformas para su sujeción.
- Soportes para tuberías: De igual forma que para las escaleras se instalan unos clips para el soporte de las tuberías que bajan a lo largo del recipiente.

- **Pescantes:** Si el recipiente contiene elementos pesados en su interior, como platos, rellenos, etc., es necesario instalar un pescante en la parte superior del equipo para facilitar la instalación la retirada de dichos elementos.

### Espesor

El espesor de la carcasa se calcula mediante la siguiente expresión:

$$t = \frac{PR}{SE - 0.6P} + C$$

donde “P” es la presión máxima de trabajo en PSI , “t” es el espesor de la cubierta, en pulgadas, “R” es el radio interno, en pulgadas, “S” es el esfuerzo máximo admisible, en lb/pulg<sup>2</sup>, “E” es la eficacia de soldadura y “C” es la concesión de corrosión, en pulgadas.

La presión máxima de trabajo es el resultado de multiplicar la presión de trabajo por 1,25. De manera que: P = 6,7 x 1, 25 = 8,375 atm = **123,079 PSI**.

Se ha consultado el código ASME para la determinación del esfuerzo máximo admisible del acero inoxidable 304 siguiendo la figura 2.18:

Código ASTM	Aplicación	Tensión permisible (Código ASME, Sección VIII) en Kpsi/in <sup>2</sup> , T en °C													
		-30	340	375	400	425	450	480	510	540	560	600	625	650	
A-285	Servicio común, baja T	19,7	13,7	13,2	12	10,2	8,3	6,5	-	-	-	-	-	-	
A-515	Servicio común, media y alta T	17,5	17,5	16,6	14,7	12	9,2	6,5	4,5	2,5	-	-	-	-	
A-387	Resistencia al H <sub>2</sub> y H <sub>2</sub> S	13,7	13,7	13,7	13,7	13,7	13,6	13	11	7,5	5	2,8	1,5	1	
A-302	Alta resistencia para altas presiones	20	20	20	20	19,1	16,8	13,2	10	6,2	-	-	-	-	
A-533		20	20	20	20	19,1	16,8	13,2	10	6,2	-	-	-	-	
304	Revestimientos internos y servicios de alta corrosión	16,7	11,2	11	10,8	10,5	10,3	10,1	9,9	9,7	9,5	8,8	7,7	6	
316		18,7	11,5	11,3	11,1	11	10,9	10,8	10,7	10,6	10,5	10,3	9,3	7,4	
321		18,7	11,1	10,9	10,8	10,7	10,6	10,6	10,5	10,4	9,2	6,9	5	3,6	

Fig. 2.18. Tensión máxima permisible en kpsi/pulg<sup>2</sup> para diferentes materiales a diferentes temperaturas.

Interpolando para la temperatura media de trabajo (T = 92,3 °C) se obtiene un valor de tensión de 16,22 kPSI/pulg<sup>2</sup>, es decir, **S = 16220 PSI/pulg<sup>2</sup>**.

En cuanto a la eficacia de la soldadura, E, se ha tomado una eficiencia correspondiente a soldadura doble inspeccionada visualmente, es decir, de valor **0,85**.

Por último, la concesión de corrosión, **C, vale 0,125** pulgadas.

Es necesario saber que se deben cumplir las siguientes expresiones:

$$P_{\max} \leq 0,665 \times S \times E$$

$$t \leq 0,356 \times R$$

Con los datos anteriores y aplicando la fórmula obtenemos el espesor que se muestra en la tabla 2.13:

	Valor	Unidades	Valor	Unidades
$P_{max}$	8,375	atm	123,079	PSI
R	0,700	m	27,559	pulgadas
S	16,221	kPSI/pulg <sup>2</sup>	16220,845	PSI/pulg <sup>2</sup>
E	0,850	-	-	-
C	0,003	m	0,125	pulgadas
$0,665 \times S \times E$	-	-	9168,832	PSI
<b>espesor t</b>	<b>0,009</b>	<b>m</b>	<b>0,372</b>	<b>pulgadas</b>
$0,356 \times R$	0,249	m	9,811	pulgadas

Tabla 2.13. Cálculo del espesor de la cubierta.

Puesto que se cumplen las condiciones límite, el espesor para la carcasa que se utilizará en el diseño es de **10 mm**.

En cuanto a los cabezales, la expresión a utilizar para el cálculo del espesor es ligeramente diferente:

$$t = \frac{PR}{2SE - 0.2P} + C$$

Además, las condiciones límite en este caso son:

$$P_{max} \leq 0,385 \times S \times E$$

$$t \leq 0,5 \times R$$

Con los datos anteriores y aplicando la fórmula obtenemos el espesor reflejado en la tabla 2.14:

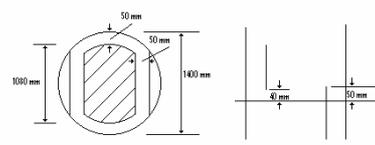
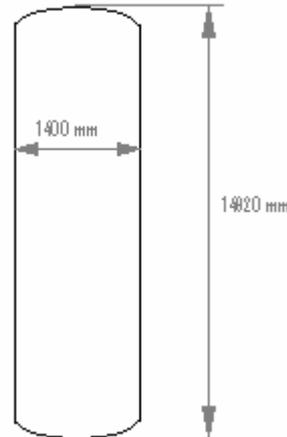
	Valor	Unidades	Valor	Unidades
$P_{max}$	8,375	atm	123,079	PSI
R	0,700	m	27,559	pulgadas
S	16,221	kPSI/pulg <sup>2</sup>	16220,845	PSI/pulg <sup>2</sup>
E	0,850	-	-	-
C	0,003	m	0,125	pulgadas
$0,385 \times S \times E$	-	-	5308,271	PSI
<b>espesor t</b>	<b>0,006</b>	<b>m</b>	<b>0,25</b>	<b>pulgadas</b>
$0,5 \times R$	0,35	m	13,779	pulgadas

Tabla 2.14. Cálculo del espesor de los cabezales.

Aquí también se cumplen las condiciones límite y, por tanto, el espesor seleccionado es de **6 mm**.

#### 2.1.4. HOJA DE ESPECIFICACIONES

	<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES COLUMNA DE DESTILACIÓN</b>			<b>Item n°:</b> T-100											
	CLIENTE: HUNTSMAN Inc.		SOLICITUD N°: 001												
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)		FECHA: Septiembre 2008													
SERVICIO DE LA UNIDAD:															
<b>CONDICIONES DE OPERACIÓN</b>															
Fluido circulante	-	Corriente de proceso													
Caudal total entrada	kmol/h	614,00													
Fracción vapor	-	0,53													
Caudal cabeza	kmol/h	689,01													
Caudal fondo	kmol/h	504,43													
Destilado (producto)	kmol/h	468,71													
Fondo (producto)	kmol/h	145,29													
Relación de reflujo	-	0,47													
Temperatura entada	°C	70,00													
Temperatura cabeza	°C	60,12													
Temperatura fondo	°C	124,45													
Temperatura destilado	°C	49,70													
Temperatura producto	°C	125,63													
Presión entrada	atm	6,50													
Presión cabeza	atm	6,50													
Presión fondo	atm	6,70													
Tipo de columna	-	Columna de platos													
<b>DISEÑO DEL PLATO</b>															
N° de platos	-	21													
Eficiencia	%	74,23													
Retorno en el rehervidor	%	70,00													
Plato de alimentación	-	3													
Tipo de plato	-	Perforado paso simple													
Espaciado entre platos	m	0,61													
Longitud del bajante	m	1,08													
Altura del vertedero	m	0,05													
Díámetro perforaciones	m	0,005													
Espesor del plato	m	0,005													
Material	-	Acero inox. AISI 304													
Caída de presión	atm	0,01													
Perforaciones activas	-	5961													
<b>DIMENSIONES COLUMNA</b>															
Díámetro interior cubierta	m	1,40													
Altura total columna	m	14,92													
Caída presión total	atm	0,28													
Espesor cubierta	m	0,01													
Cabezales	-	Elípticos													
Espesor cabezal	m	0,006													
Apoyo y sujeciones	-	Faldón													
<b>MATERIALES</b>															
Cubierta	Acero inox. AISI 304	Toberas	Acero inox. AISI 304												
Cabezales	Acero inox. AISI 304	Soportes internos	Acero inox. AISI 304												
<b>CONSTRUCCIÓN</b>															
Presión diseño	atm	623,90	Inspección taller	OK											
Presión prueba	atm	100	Radiografía	0,85											
Temperatura diseño	°C	420	Prueba Hidrostática	OK											
<b>NOTAS</b>															
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td rowspan="2" style="width: 25%;">Departamento de Ingeniería Química y Ambiental</td> <td style="width: 10%;">N° rev:</td> <td style="width: 15%;">Fecha:</td> <td style="width: 15%;">Revisado por:</td> <td style="width: 15%;">Comprobado</td> <td style="width: 20%;">Aprobado</td> </tr> <tr> <td>001</td> <td>Sep. 2008</td> <td></td> <td></td> <td></td> </tr> </table>					Departamento de Ingeniería Química y Ambiental	N° rev:	Fecha:	Revisado por:	Comprobado	Aprobado	001	Sep. 2008			
Departamento de Ingeniería Química y Ambiental	N° rev:	Fecha:	Revisado por:	Comprobado		Aprobado									
	001	Sep. 2008													



## 2.2. CÁLCULO DEL CONDENSADOR E-101

El condensador y el vaporizador son la primera y última etapa ideal en el cálculo de las columnas de destilación. La composición local de estos platos y la entalpía de las corrientes determina la capacidad que va a necesitarse en estas unidades.

Se desea realizar una condensación total del vapor que sale de la columna de destilación devolviendo parte de él en una relación de reflujo de 0,47.

Dicho vapor sale a 60,12 °C y 6,5 atm con la siguiente composición:

Componente	$x_D$
Propileno	0,05594
Propano	0,01061
i-Butano	0,00576
i-Buteno	0,01742
1-Buteno	0,45028
1,3-Butadieno	0,08830
n-Butano	0,21237
trans-2-buteno	0,04415
cis-2-buteno	0,03681
n-pentano	0,00060
Metanol	0,03888
MTBE	0,03886

Tabla 2.15. Composiciones de entrada al condensador.

Como fluido refrigerante se utiliza agua que se encuentra en una red de agua de refrigeración en la planta. El agua varía su temperatura de 20 a 40 °C y está a presión atmosférica.

El esquema general a seguir en el condensador (intercambiador de calor con cambio de fase) es el mostrado en la figura 2.19:

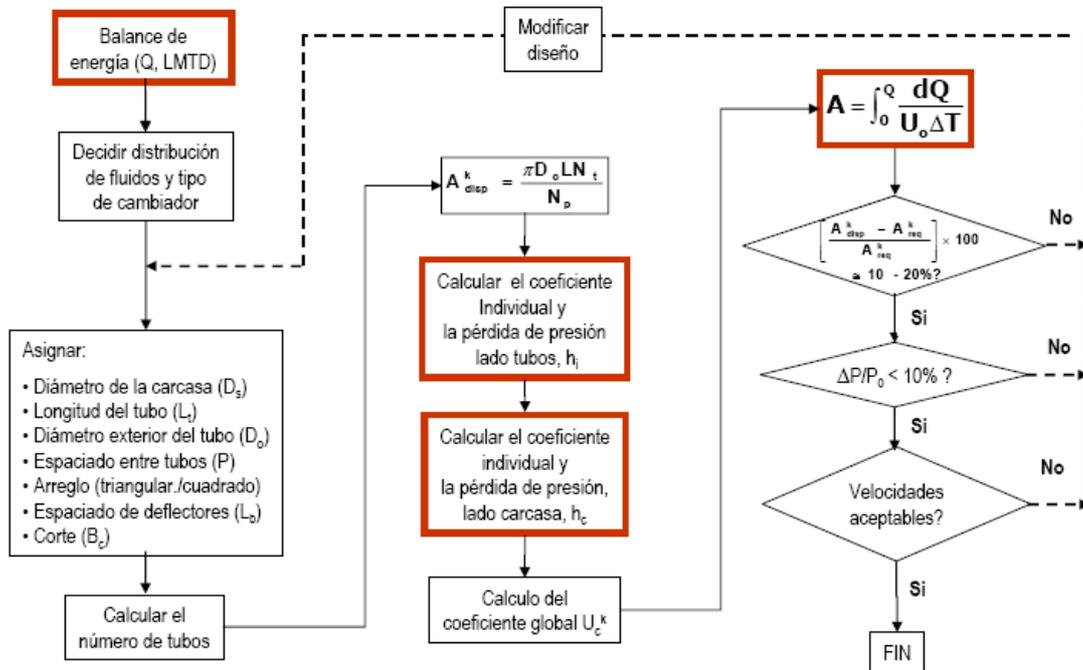


Fig. 2.19. Esquema general de diseño de un condensador.

### 2.2.1. CÁLCULO DE LA CARGA TÉRMICA Q

#### Estimación del coeficiente global de transmisión de calor

En primer lugar, al tratarse de un fluido orgánico refrigerado con agua, de la figura 2.20 estimamos un coeficiente global de transmisión de calor U de **225W/m<sup>2</sup>K** ya que éste puede variar entre 200 y 900.

Fluidos		U (W/m <sup>2</sup> ·°C)	
		Min	Max
Gas	Gas	10	50
Agua	Gas	20	300
Agua	Aceite pesado	60	300
Agua	Compuesto orgánico	200	900
Agua	Agua o solución acuosa	700	1750
Compuesto orgánico	Compuesto orgánico	60	350
Aceite pesado	Aceite pesado	60	250
Aceite térmico	Gas	20	250
Aceite térmico	Aceite pesado	50	350

Fig. 2.20. Coeficiente U.

### Cálculo de la LMTD

En un cambiador de calor la diferencia de temperatura entre los fluidos va cambiando de un extremo a otro del equipo. Con fines prácticos, interesa conocer un valor medio representativo de la fuerza impulsora del equipo. Esta es la media logarítmica de la diferencia de temperaturas (*LMTD*) en el extremo caliente ( $\Delta T_1$ ) y la diferencia de temperaturas en el extremo frío ( $\Delta T_2$ ).

Conocida la expresión integrada del calor:  $Q = U A LMTD$ , se dispone al cálculo de la media logarítmica de la temperatura, *LMTD*, sabiendo que los fluidos se disponen a contracorriente y que las diferencias de temperaturas se reflejan en la figura 2.21:

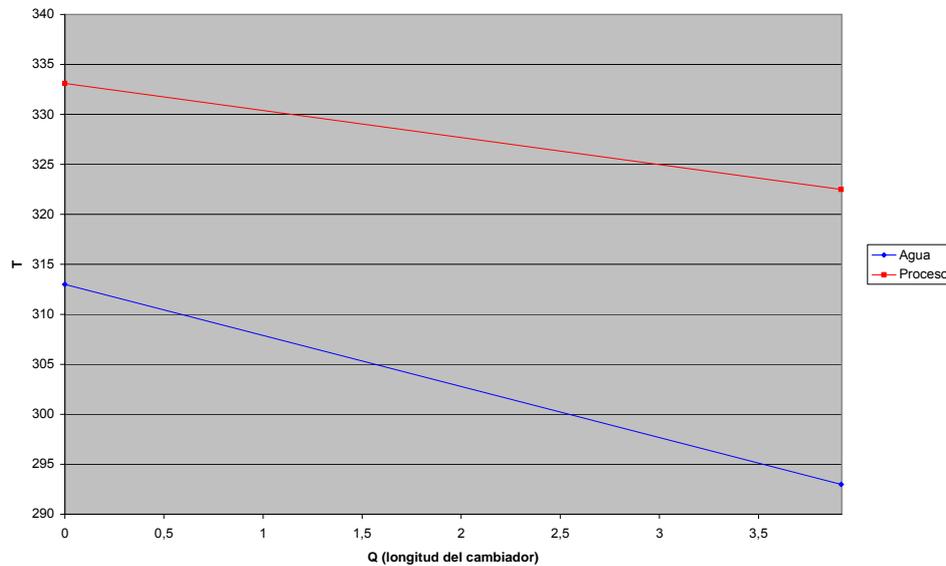


Fig. 2.21. Variación de temperatura de los fluidos en proceso.

El contacto en contracorriente permite obtener fuerzas impulsoras medias mayores que en paralelo. Además posibilita el cruce de temperaturas.

La expresión destinada al cálculo de la *LMTD* tiene la forma:

$$LMTD = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}}$$

Para el condensador en diseño:

Agua	$T_e = 293 \text{ K}$	$T_s = 313 \text{ K}$
Proceso	$T_e = 333,1 \text{ K}$	$T_s = 322,5 \text{ K}$
$\Delta T_1 = T_s(\text{agua}) - T_e(\text{proceso})$		29,5
$\Delta T_2 = T_e(\text{agua}) - T_s(\text{proceso})$		20,1
<i>LMTD</i>		<b>24,5</b>

Tabla 2.16. Cálculo de la LMTD.

**Curva de calor**

Haciendo uso del programa informático de simulación Chemcad con un intercambiador de calor “Simple Heat Exchanger”, especificando la temperatura de salida de la corriente para una condensación total, obtenemos la curva de calor de la figura 2.22.

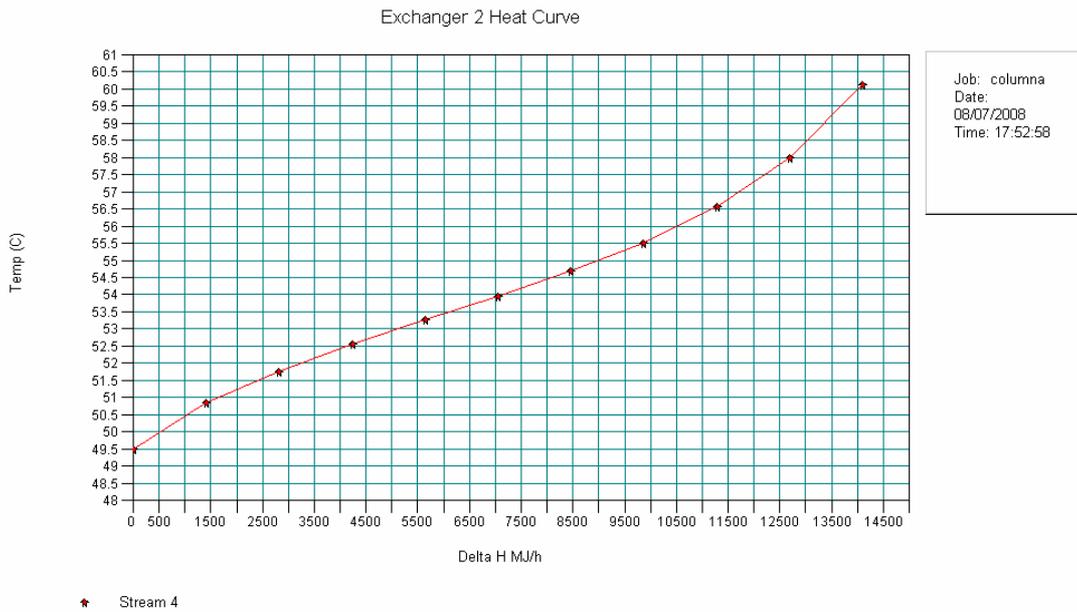


Fig. 2.22. Curva de calor para el condensador.

De manera que se obtiene el calor por etapa para las 11 etapas en las que se ha decidido dividir el rango de condensación obteniendo la siguiente tabla:

Etapa	T(°C)	Tv (K)	V(kg/s)	L(kg/s)	$\psi=V/(V+L)$	Q <sub>acum</sub> (MW)
1	60,1	333,1	10,6750	0,0000	1,0000	0,00
2	58	331	9,6294	1,0456	0,9021	0,39
3	56,6	329,6	8,5592	2,1158	0,8018	0,78
4	55,5	328,5	7,4764	3,1986	0,7004	1,18
5	54,7	327,7	6,3889	4,2861	0,5985	1,57
6	54	327	5,3019	5,3731	0,4967	1,96
7	53,3	326,3	4,2189	6,4561	0,3952	2,35
8	52,6	325,6	3,1422	7,5328	0,2944	2,74
9	51,8	324,8	2,0750	8,6000	0,1944	3,13
10	50,8	323,8	1,0214	9,6536	0,0957	3,53
11	49,5	322,5	0,0000	10,6750	0,0000	3,92

Tabla 2.17. Cálculo del calor por etapa.

Una vez obtenida la cantidad de calor necesaria para la condensación  $Q=3,92\text{MW}$ , se puede hacer una estimación preliminar del área.

Hay que señalar que para cada temperatura y composición en cada etapa, se han calculado para la corriente de proceso la densidad  $\rho$ , la conductividad térmica  $k$ , la capacidad calorífica  $C_p$ , el calor latente de vaporización  $\lambda$ , la viscosidad  $\mu$  y el peso molecular  $P_m$  y para el agua de refrigeración la capacidad calorífica, la viscosidad, la conductividad y el peso molecular, como se refleja en el Anexo IV.

### Estimación preliminar del área

Despejando de la expresión del calor ya expuesta anteriormente, el área necesaria para que el intercambio de calor requerido se lleve a cabo es  $A_{\text{prel}} = 710,5 \text{ m}^2$ .

## 2.2.2. ASIGNACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN GEOMÉTRICA

### Distribución de los fluidos

Se ha determinado que el fluido que debe ir por el interior de los tubos es el de proceso y por la carcasa el agua porque ésta es más limpia y hay mayor facilidad de limpiar el interior de los tubos que la carcasa. Por tanto, la **condensación** se produce en el **lado de los tubos**.

### Selección del tipo de intercambiador

El condensador diseñado es vertical de tipo (TEMA) **AEL** de placas tubulares fijas. La elección del tipo de condensador se ha llevado a cabo siguiendo el esquema de la figura 2.23:

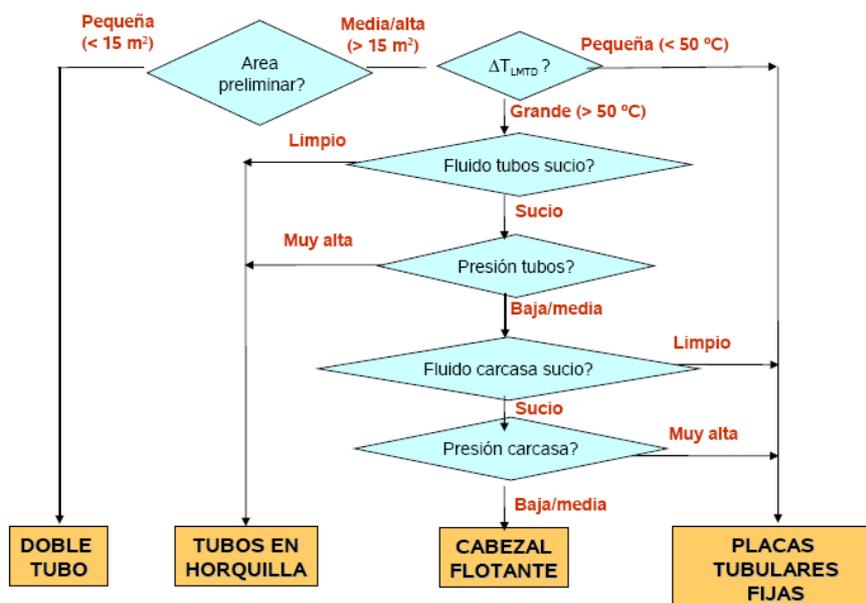
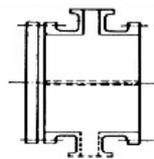


Fig. 2.23. Selección del tipo de intercambiador.

Puesto que el área es mayor de  $15 \text{ m}^2$  y que la *LMTD* es pequeña, el esquema te lleva a la elección de un condensador de **placas tubulares fijas**. Las ventajas de este equipo son su bajo coste, que los tubos pueden limpiarse mecánicamente pero la carcasa sólo químicamente, cosa que no preocupa puesto que el fluido en la carcasa es limpio, y que minimiza las fugas en el fluido del lado de la carcasa. Por otro lado, los inconvenientes son que está limitado a fluidos limpios por la carcasa, que es incapaz de absorber el stress térmico de grandes diferencias de temperatura y que está limitado a pequeños saltos térmicos. Sin embargo, en las condiciones de diseño, esto no afecta.

La TEMA (“Tubular Exchanger Manufacturers Association”) ha establecido un código de tres letras que describe como son cada uno de los tres componentes principales de un intercambiador.

Se ha elegido el **cabezal tipo A** -o tipo carrete- (Fig. 2.24) que es la configuración estándar para fluidos sucios en el lado de los tubos pues permite limpiar los tubos con facilidad tan solo con desmontar la tapa, no siendo necesario desmontar las conexiones a proceso.



**Tipo A**  
(carrete)

Fig. 2.24. Cabezal.

La carcasa es el recipiente contenedor del fluido que circula por el exterior de los tubos que dispone además de las toberas de entrada y salida del fluido. Normalmente es de sección circular, estando su diámetro limitado solamente por la necesidad de extraer el haz de tubos. Por tanto, los de placas tubulares fijas pueden tener diámetros de hasta 3 m y longitudes de hasta 12 m.

Las carcasas menores de 24” se fabrican cortando tuberías del tamaño deseado. Las carcasas de más de 24” se obtienen rolando placa de acero de dimensiones adecuadas soldando la unión longitudinal. La redondez de las carcasas es importante para que la tolerancia entre la carcasa y los deflectores sea pequeña.

La **carcasa tipo E** (Fig. 2.25) es la más común. Es una carcasa en un solo paso en donde el fluido entra por un extremo y sale por el otro.



**Tipo E**

Fig. 2.25. Carcasa.

El **cabezal de retorno** escogido es el **tipo L** (Fig. 2.26). Con estos cabezales de retorno, el haz de tubos queda fijado por ambos extremos a las placas tubulares por lo que se les llama cambiadores de placas tubulares fijas. Su principal ventaja es su bajo coste debido a la sencillez de sus cabezales. Otra ventaja es que minimiza las fugas por tanto es adecuado para fluidos peligrosos. Sus principales desventajas son que está limitado a fluidos limpios por la carcasa (no puede limpiarse mecánicamente) y al estar fijo no tiene libertad para dilatar quedando limitado a pequeños saltos térmicos.

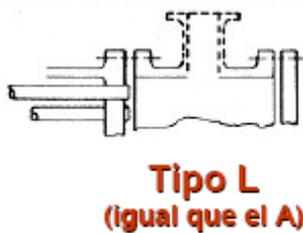


Fig. 2.26. Cabezal de retorno.

Como material de diseño, tanto para la carcasa como para los tubos se ha elegido el **acero inoxidable AISI 304** (18% Cr, 8% Ni) por su bajo coste y ya que no se precisa un material más resistente a la corrosión puesto que el fluido de proceso no es corrosivo.

### Diseño de los tubos

Se ha seleccionado un espesor de tubo  $x_w$  de **20 BWG**, es decir, 0,9 mm y un diámetro exterior  **$D_{ot}$  de 3/4"**, es decir, 19,05 mm. Sabiendo que  $D_{it} = D_{ot} - 2x_w$ , el diámetro interior calculado es de **0,68"**, es decir, 17,3 mm.

Por otro lado, se ha asignado una **longitud del tubo de 16 pies**, es decir, 4,9 m.

En cuanto a la resistencia al ensuciamiento,  $x_w/k_w$ , al haber elegido como material el acero inoxidable 304, la  **$k_w$  es 14,7 kcal/m·h·K**.

Una vez obtenidos estos datos, podemos calcular el número de tubos como:

$$A = \pi D_T L_T N_T \rightarrow N_T = \frac{A}{\pi D_T L_T} = 2434$$

Siguiendo las tablas del Perry (Anexo V), el número de tubos que más se aproxima es **2861**, así que éste será el número de tubos de diseño. Con este número de tubos y esta asignación geométrica para los tubos, el área disponible es  **$A_{disp} = 835 \text{ m}^2$** .

### Carcasa

A partir de las tablas del Perry para tubos de 3/4", 1 paso, arreglo triangular y TEMA L se obtiene un diámetro para la carcasa **De de 54"**, es decir, 1,37 m.

El espaciado entre tubos en la carcasa  $P$  equivale a  $1,25x D_{ot}$  y vale **23,8 mm**. Además, el claro entre tubos  $C$  es el resultado de restarle al espaciado el diámetro exterior del tubo (Fig. 2.27) dando como resultado **4,8 mm**.

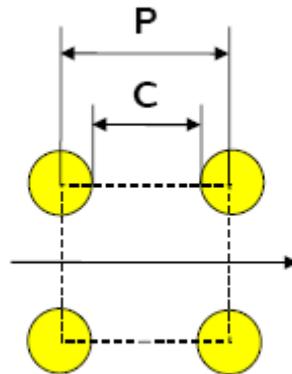


Fig. 2.27. Espaciado y claro entre tubos.

Se ha seleccionado un **arreglo triangular** para la disposición de los tubos. La distribución triangular permite la colocación de un mayor número de tubos que la cuadrada, para una misma carcasa (mayor superficie). Sin embargo, no es posible la limpieza exterior de los tubos por medios mecánicos (no caben los cepillos) debiendo hacerse por medios químicos. La distribución triangular se utiliza en cambiadores de placas tubulares fijas donde no se puede extraer el haz para limpieza mecánica de la carcasa. En la triangular, las diferencias entre un arreglo normal o rotado son muy pequeñas y si bien la colocación normal produce un coeficiente de transmisión de calor ligeramente superior, también ocasiona una pérdida de carga superior.

El ángulo del arreglo triangular dispuesto es de **30°** (Fig. 2.28).

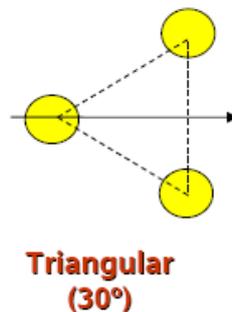


Fig. 2.28. Arreglo de los tubos.

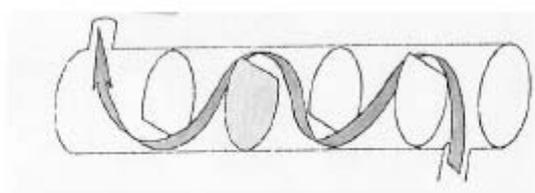
El número de pasos en la carcasa depende del cabezal de retorno. Con el escogido para el diseño, el **número de pasos** sólo puede ser **1**.

## Deflectores

El espaciado entre deflectores  $L_b$  es un valor tabulado que vale  $0,45x D_c$ , resultando **0,62 m**.

El número de deflectores será, por tanto, el cociente entre la longitud de la carcasa y el espaciado entre los deflectores menos uno. En el diseño hay **7 deflectores** con un **corte del 25%**.

Los deflectores serán **segmentados** (Fig. 2.29). Los deflectores tienen como función principal el guiar al fluido que circula por la carcasa, aumentando mediante su correcto diseño el coeficiente de transmisión de calor. Los deflectores segmentados dan un alto coeficiente de transmisión de calor.



### SEGMENTADOS

Fig. 2.29. Deflectores.

## 2.2.3. COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSMISIÓN DE CALOR

### Tipo de régimen

La transferencia de calor está controlada por la fuerza gravitatoria a bajos caudales y por la fuerza de corte a altos caudales. Para decidir cuando estamos en un régimen o en otro evaluamos el parámetro  $C_{gt}$ :

$$C_{gt} = \frac{\sqrt{D_{ii} g \rho_V (\rho_L - \rho_V) (1 - \psi) / \psi}}{G_t}$$

donde " $G_t$ " es el cociente entre el caudal en kg/s y el área transversal de paso expresado en  $\text{kg/m}^2\text{s}$ .

Si el parámetro  $C_{gt}$  es menor de 0,3 el régimen es de corte y si es mayor de 0,7 el régimen es gravitatorio (Fig. 2.30). En el condensador E-101, el régimen es de corte al principio y luego se vuelve gravitatorio.

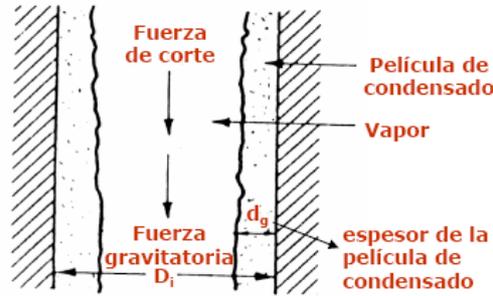


Fig. 2.30. Tipos de regímenes.

### Ecuación para el cálculo de U

Para calcular el coeficiente global de transferencia de calor  $U$  es necesario ir calculando una serie de parámetros.

$$U_0 = \frac{1}{\frac{1}{h_i} \frac{D_{ot}}{D_{it}} + R_p + \frac{1}{h_o}}$$

donde los términos  $h_i$ ,  $R_p$  y  $h_o$  se calculan:

$$R_p = Ri \frac{D_{ot}}{D_{it}} + \frac{x_w}{k_w} \frac{D_{ot}}{D_{mt}} + R_0$$

$$h_i = \frac{1}{\frac{1}{h_{sv}(1+\varphi_d)} + \frac{1}{h_{ef}}}$$

$$h_o = \frac{0,36 Re_C^{0,55} Pr_L^{0,3} k}{D_e}$$

donde “Re” es el número de Reynolds, “Pr” el número de Prandtl y “ $D_e$ ” es el diámetro equivalente calculado en pulgadas y pasado a metros:

$$D_e (\text{pulgadas}) = \frac{3,44P^2 - \pi D_{ot}^2}{\pi D_{ot}}$$

Las resistencias de ensuciamiento por el lado de los tubos  $R_i$  y por el de la carcasa  $R_o$ , se obtienen de la figura 2.31:

Fluido	R (m <sup>2</sup> ·°C/W)
Agua destilada	0,0001
Vapor de agua limpio	0,0001
Agua de mar	0,0002
Gas natural	0,0002
Gases ácidos	0,0002
Gasolina	0,0002
Lubricantes	0,0002
Nafta	0,0002
Queroseno	0,0002
Vapor de agua exhausto	0,0002
Agua de refrigeración	0,00035
Agua tratada	0,00035
Aire	0,00045
Amoniaco	0,00045
Gas-oil ligero	0,00045
Soluciones causticas	0,00045
Soluciones de aminas	0,00045
Aceites vegetales	0,0007
Gas-oil pesado	0,0007
Crudo	0,0008
Fuel-oil	0,001
Asfalto	0,002

Fig. 2.31. Resistencias de ensuciamiento.

En el diseño propuesto, las resistencias son las de agua de refrigeración (**0,00035**) y gasoil ligero (**0,00045**).

El término  $D_{mt}$  se refiere a la logarítmica media de los diámetros exterior e interior y vale **18,15mm**.

Puesto que el calor es una contribución del calor transferido del vapor al condensado y del condensado a la pared, habrá que calcular los términos de  $h_{sv}$  y  $h_{cf}$ .

**Cálculo de  $h_{cf}$** 

El cálculo de  $h_{cf}$  depende del tipo de régimen. Para régimen de corte y condensación en el interior de tubos:

$$Nu_c = \frac{h_{cf} D_{it}}{k_L} = 0,022 Re_G^{0,8} Pr_L^{0,4} F_{tp}$$

donde:

$$F_{tp} = \left[ 1 + \frac{C_{sh}}{\chi} + \frac{1}{\chi^2} \right]^{0,5}$$

$$C_{sh} = 2,75 \left[ 1 + \frac{2}{\chi^{0,5}} \right] \left[ 1 - \frac{\rho_V}{\rho_L} \right]^{1,5}$$

$$\chi = \left( \frac{1-\psi}{\psi} \right)^{0,9} \left( \frac{\rho_V}{\rho_L} \right)^{0,5} \left( \frac{\mu_L}{\mu_V} \right)^{0,1}$$

donde “ $\chi$ ” es el parámetro de Lockhart-Martinelli.

Para régimen gravitatorio y condensación en el interior de tubos verticales:

$$Nu_c = \frac{h_{cf} d_g}{k_L} = 1,47 Re_G^{-1/3}$$

donde:

$$Re_G = \frac{4W_t(1-\psi)}{\pi D_{it} \mu_L N_t}$$

$$d_g = \left( \frac{\mu_L^2}{\rho_L (\rho_L - \rho_V) g} \right)^{1/3}$$

donde “ $W_t$ ” es el caudal másico total en kg/h y “ $d_g$ ” el espesor de la película de condensado.

En el caso de que el régimen sea de transición, el parámetro  $h_{cf}$  se calcula con la siguiente expresión:

$$h_{cf} = \eta(h_{cf})_{grav} + (1-\eta)(h_{cf})_{corte}$$

$$\eta = 2,5C_{gt} - 0,75$$

**Cálculo de  $h_{sv}$** 

El cálculo de  $h_{sv}$  se realiza por los métodos habituales para transmisión de calor en fase simple. Es decir, se calcula el coeficiente de transmisión de calor para el lado de los tubos.

Este coeficiente se calcula dependiendo del régimen de flujo: laminar, turbulento o de transición, despejando de las siguientes expresiones:

- Régimen laminar ( $Re < 2000$ ), ecuación de Hansen:

$$\frac{h_{sv} D_{it}}{k} = 1,86 Gz^{0,33} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} \rightarrow Gz = Re Pr \left( \frac{D_{it}}{L} \right)$$

donde el cociente de viscosidades podemos aproximarlos a 1, “ $Re$ ” es el número de Reynolds, “ $Pr$ ” el de Prandtl, “ $L$ ” la longitud de los tubos y “ $k$ ” la conductividad térmica.

- Régimen de transición ( $2000 < Re < 8000$ ):

$$(h_{sv})_{tran} = (h_{sv})_{lam} + [(h_{sv})_{turb} - (h_{sv})_{lam}] \left( \frac{Re - 2000}{8000} \right)$$

- Régimen turbulento ( $Re > 8000$ ), ecuación de Sieder-Tate:

$$\frac{h_{sv} D_{it}}{k} = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,3} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14}$$

En el diseño el Reynolds comienza siendo laminar y crece hasta hacerse turbulento.

**Factor de difusión**

Ward y Bell propusieron un método abreviado para la estimación del factor de difusión ( $\varphi_d$ ).

- dominio gravitacional:  $\varphi_d = 0.90 \varphi_{d0}^{0.9}$
- dominio de fuerzas de corte:  $\varphi_d = 1.20 \varphi_{d0}$

donde:

$$\varphi_{d0} = \frac{\lambda_{vap}}{\psi C p_V} \left( \frac{\Delta \psi}{\Delta T_V} \right) + \frac{C p_L}{C p_V} \left( \frac{1 - \psi}{\psi} \right)$$

donde “ $\Delta T_V$ ” es la variación de temperatura en cada etapa.

### 2.2.4. CÁLCULO DEL ÁREA REQUERIDA

Una vez calculados todos estos parámetros, se está en condiciones de calcular  $U_o$  para poder obtener el área real requerida para el intercambio como un sumatorio:

$$A = \int_0^Q \frac{dQ}{U_o \Delta T} = \frac{1}{2} \sum \left[ \left( \frac{1}{U_o \Delta T} \right)_i + \left( \frac{1}{U_o \Delta T} \right)_{i+1} \right] \times (Q_{i+1} - Q_i)$$

donde “ $\Delta T$ ” =  $T_v - T_r$  (temperatura del vapor – temperatura del refrigerante).

A partir de estas expresiones se obtiene la siguiente tabla para el cálculo del área requerida para el intercambio.

$Q(W)$	$T_v$	$h_{sv}$	$h_{cf}$	$\Phi_d$	$U_o$	$1/(U_o \Delta T)$	Área
0	333,1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00E+00	0,00
388888,8889	331	14,39	1428,11	14,13	142,02	3,52E-04	136,92
777777,7778	329,6	18,16	1126,98	24,38	218,86	2,22E-04	223,17
1177777,778	328,5	18,74	980,46	35,88	255,54	1,82E-04	161,53
1566666,667	327,7	20,20	888,44	57,76	297,71	1,48E-04	128,33
1958333,333	327	21,72	823,40	79,47	316,94	1,31E-04	109,45
2350000	326,3	23,38	774,23	99,83	325,40	1,21E-04	99,07
2741666,667	325,6	25,25	735,56	133,86	333,27	1,13E-04	91,76
3133333,333	324,8	73,58	704,60	178,05	354,27	1,02E-04	83,95
3525000	323,8	80,69	679,81	126,74	344,87	1,01E-04	79,20
3916666,667	322,5	85,62	348,19	0,00	58,08	5,84E-04	268,02
						<b>Área requerida</b>	<b>690,69</b>

Tabla 2.18. Cálculo del área requerida.

## 2.2.5. EVALUACIÓN DEL DISEÑO

### Sobredimensionado

El diseño propuesto está sobredimensionado desde el punto de vista térmico. Para llegar a este diseño se ha ido recalculando el área disponible modificando los parámetros geométricos (diámetro exterior del tubo, longitud del tubo, diámetro de la carcasa y número de tubos y espesor) ateniéndose a la figura 2.32:

	Efecto del aumento en							
	Diámetro de la carcasa (*)	Longitud de los tubos	Diámetro exterior del tubo (**)	Espaciado entre tubos (solo)	Espesor del tubo (BWG)	Numero de pasos	Espaciado entre deflectores (solo)	Corte de los deflectores (***)
<b>Sobredimensionado</b>	↑	↑	↓	↓	↓	↓	↓	
(Δ P/P0), tubos	↓	↑	↓	↑	↑	↑	NA	
(Δ P/P0), carcasa	↓	↑	↓	↓	NA	NA	↓	
Velocidad, tubos	↓	NA	↓	↑	↑	↑	NA	
Velocidad, carcasa	↓	NA	NA	↓	NA	NA	↓	

↑ = aumenta  
↓ = disminuye  
NA = no afecta

(\*) Cuando se varia el diámetro de la carcasa se modifica indirectamente el espaciado entre deflectores, pues este se expresa como un porcentaje de aquel  
(\*\*) Cuando se varia el diámetro de los tubos se modifica indirectamente el espaciado entre deflectores, pues este se expresa como un porcentaje de aquel  
(\*\*\*) El efecto del corte de los deflectores solo puede estimarse con el método Bell-Delaware

Fig. 2. 32. Evaluación del diseño.

El condensador está sobredimensionado, siendo S %:

$$S\% = \frac{A_{disp} - A_{req}}{A_{req}} \times 100 = 20,9\%$$

El **sobredimensionado es aceptable**, eliminando los cuellos de botella que se producirían si se desea aumentar la capacidad del equipo en futuras mejoras en la planta.

### Pérdida de carga

La caída de presión es otro parámetro a tener en cuenta en el diseño de un cambiador de calor.

La caída de presión total en los tubos es la suma de dos contribuciones: la caída de presión en los tramos rectos y la caída de presión en los cabezales de retorno debido al cambio de dirección:

$$\Delta P_{tot} = \Delta P_t + \Delta P_r$$

$$\Delta P_t = f \frac{nL_t \rho u_t^2}{2D_{it}}$$

$$\Delta P_r = Kn \frac{\rho u_t^2}{2}$$

donde “ $f$ ” es el factor de fricción, “ $K$ ” vale 1,8 y es el factor de fricción que incluye las pérdidas a la entrada y salida de los tubos y las pérdidas en el cabezal, “ $n$ ” es el número de pasos y “ $u_t$ ” la velocidad del fluido en los tubos.

El coeficiente de fricción en los tubos se ha correlacionado tradicionalmente con el número de Reynolds y la rugosidad del material del tubo ( $\varepsilon$ ) según la ecuación de Chen:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4 \log \left\{ \frac{(\varepsilon/D)}{3.7065} - \frac{5.0452}{Re} \log \left[ \frac{(\varepsilon/D)^{1.1098}}{2.8257} + \frac{5.8506}{Re^{0.8981}} \right] \right\}$$

Siguiendo este método de cálculo y sabiendo que “ $\varepsilon$ ” para el acero es **0,046 mm**, se obtiene una caída de presión en el lado de los tubos de **1,2 Pa**, totalmente despreciable.

Por otro lado, según el método de Kern, la caída de presión en el lado de la carcasa es proporcional al número de veces que el fluido cruza el haz entre los deflectores y a la distancia a través del haz cada vez que lo cruza.

$$\Delta P_c = f \frac{\rho u_c^2 D_c}{2D_e} (N + 1)$$

donde “ $N$ ” es el número de cruces entre deflectores =  $L_t/L_{bc}$ , “ $D_e$ ” es el diámetro equivalente del haz de tubos, “ $f$ ” el factor de fricción y “ $u_c$ ” la velocidad del fluido en la carcasa.

El coeficiente de fricción ( $f$ ) se determina gráficamente con la figura 2.33:

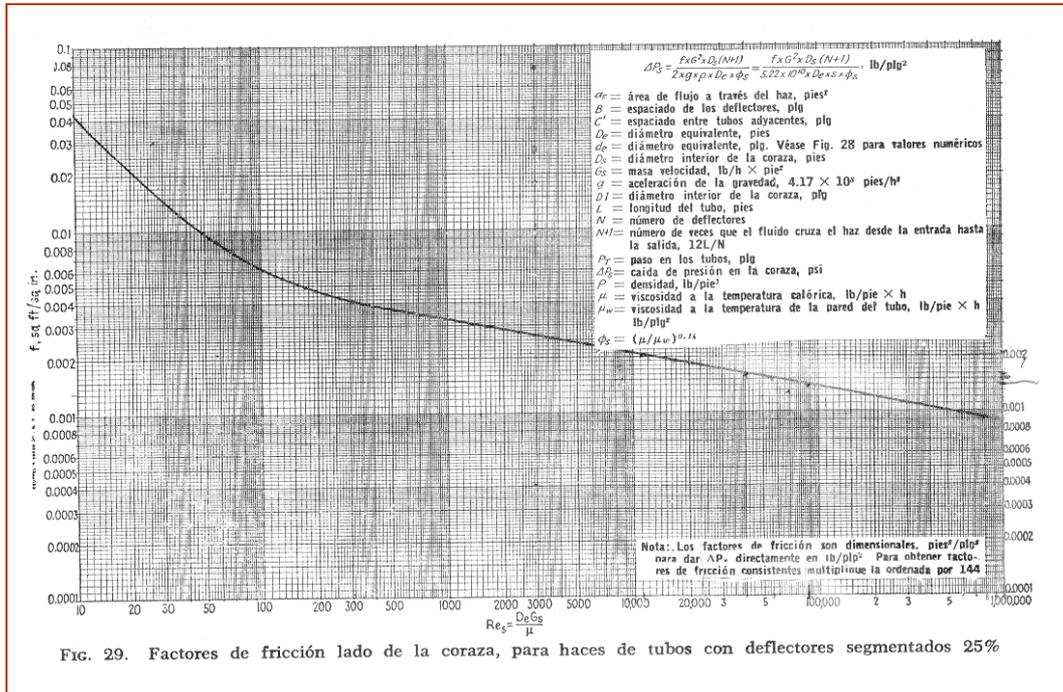
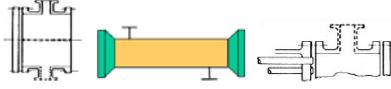


Fig. 2.33. Determinación del factor de fricción.

Como cifra orientativa, se conoce que para un número de Reynolds entre 1000 y 10000 el valor está entre 0,4752 y 0,2880. Para un Reynolds como el de diseño de 6919, interpolando, obtenemos un factor de fricción de 0,35.

A partir de este valor y de la ecuación propuesta, la caída de presión en el lado de la carcasa es de **717 Pa**, es decir, también despreciable.

### 2.2.6. HOJA DE ESPECIFICACIONES

		<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES INTERCAMBIADOR DE CALOR</b>		<b>Item N°:</b> E-101			
<b>CLIENTE:</b> HUNTSMAN Inc.		<b>Solicitud N°:</b> 002					
<b>PLANTA:</b> Valle de Escombreras (Cartagena)		<b>Fecha:</b> Sep. 2008					
<b>SERVICIO DE LA UNIDAD:</b>							
<b>CONDICIONES DE OPERACIÓN</b>							
		<b>TUBOS</b>		<b>CARCASA</b>			
<b>Fluido circulante</b>	-	C. Proceso		Agua			
<b>Caudal total</b>	kmol/h	689,01		9354,81			
<b>Fase</b>	-	Gas/Líquido		Líquido			
<b>Temperatura entrada</b>	°C	60,12		20			
<b>Temperatura salida</b>	°C	49,50		40			
<b>Presión</b>	atm	6,5		6,5			
<b>PROPIEDADES EVALUADAS A LA TEMPERATURA MEDIA</b>							
		<b>LÍQUIDO</b>	<b>GAS</b>	<b>LÍQUIDO</b>			
<b>Peso Molecular</b>	kg/kmol	56,97		18			
<b>Densidad</b>	kg/m <sup>3</sup>	565,13	15,53	992,9			
<b>Capacidad Calorífica</b>	J/kmol·K	139632,73	89025,74	75316,71			
<b>Viscosidad</b>	Pa·s	0,00013	8,66E-06	0,0008			
<b>Conductividad Térmica</b>	W/m·K	0,1016		0,613			
<b>DATOS DE DISEÑO</b>							
<b>Calor intercambiado</b>	MW	3,9167					
<b>LMTD</b>	°C	24,50					
<b>Área requerida</b>	m <sup>2</sup>	690,69					
<b>Coefficiente de transmisión</b>	W/m <sup>2</sup> ·K	225					
<b>Área disponible</b>	m <sup>2</sup>	835,02					
<b>TEMA</b>	-	AEL					
<b>Deflectores</b>	-	Segmentados					
<b>N° deflectores</b>	-	7					
<b>Longitud deflectores</b>	m	0,62					
<b>Corte</b>	%	25					
<b>Sobredimensionado</b>	%	20,89					
<b>DISEÑO TUBOS</b>			<b>DISEÑO CARCASA</b>				
<b>N° Tubos</b>	-	2861	<b>Disposición</b>	-	Vertical		
<b>Diámetro exterior</b>	pulgadas	3/4	<b>Diámetro carcasa</b>	pulgadas	54		
<b>Diámetro interior</b>	pulgadas	0,68	<b>Diámetro haz de tubos</b>	pulgadas	52,53		
<b>Espesor</b>	BWG	20	<b>Espesor</b>	m			
<b>Espaciado</b>	pulgadas	0,94	<b>Longitud</b>	pies	16		
<b>Claro</b>	pulgadas	0,19					
<b>Resistencia ensuciamiento</b>	m <sup>2</sup> ·K/W	0,00045	<b>Resistencia de ensuciamiento</b>	m <sup>2</sup> ·K/W	0,00035		
<b>Pérdida de carga</b>	atm	0,000	<b>Pérdida de carga</b>	atm	0,007		
<b>Velocidad</b>	m/s	0,028	<b>Velocidad</b>	m/s	0,071		
<b>MATERIALES</b>							
<b>Carcasa</b>	ACERO INOX. AISI 304	<b>Deflectores</b>	ACERO INOX. AISI 304				
<b>Cabezales</b>	ACERO INOX. AISI 304	<b>Toberas</b>	ACERO INOX. AISI 304				
<b>Tubos</b>	ACERO INOX. AISI 304	<b>Aislamiento</b>					
<b>CONSTRUCCIÓN</b>							
<b>Presión de diseño</b>	atm		<b>Inspección taller</b>	-			
<b>Presión de prueba</b>	atm		<b>Radiografía</b>	-			
<b>Temperatura de diseño</b>	°C		<b>Prueba Hidrostática</b>	-			
<b>NOTAS</b>							
<b>Departamento de Ingeniería Química y Ambiental</b>		<b>N° Rev:</b> 001	<b>Fecha:</b> Sep. 2008	<b>Revisado por</b>	<b>Aprobado</b>	<b>Comprobado</b>	<b>Firma</b>

### 2.3. CÁLCULO DEL REHERVIDOR E-102

Para llevar a cabo el diseño del equipo E-102, un vaporizador, hay ciertas diferencias respecto al diseño del equipo E-101 anteriormente descrito.

El esquema general de diseño en este caso es el representado en la figura 2.34:

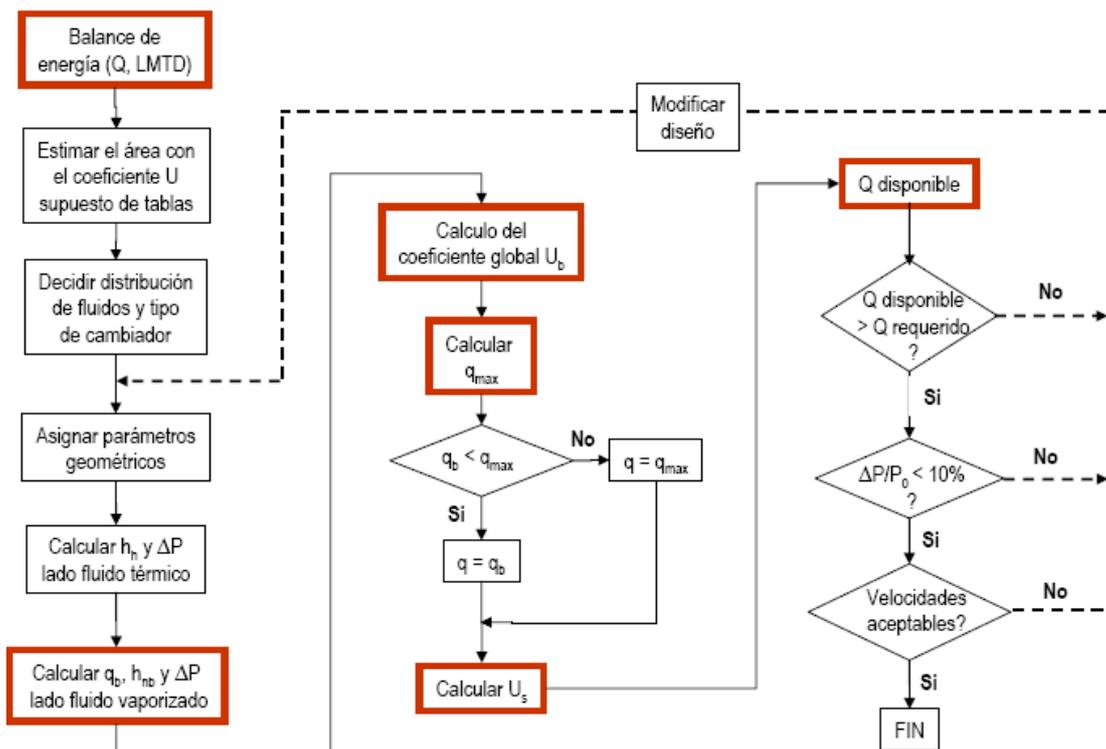


Fig. 2.34. Esquema general de diseño en un vaporizador.

Se desea realizar una vaporización parcial del líquido que sale por el fondo de la columna para devolver parte de él a la torre de destilación.

Dicho líquido sale a 124,48 °C y 6,7 atm con la composición de la tabla 2.19:

Componente	$x_D$
n-pentano	0.00108
Metanol	0.02232
MTBE	0.97660

Tabla 2.19. Composiciones de entrada al vaporizador.

Como fluido térmico se utiliza un aceite térmico, **Dowterm**, ya que no podemos utilizar agua líquida puesto que la temperatura es superior a 100 °C, punto de ebullición de ésta. El Dowterm varía su temperatura de 170 a 150 °C. El aceite proviene de un horno disponible en las instalaciones de la planta.

### 2.3.1. CÁLCULO DE LA CARGA TÉRMICA Q

#### Estimación del coeficiente global de transmisión de calor

En primer lugar, al tratarse de un fluido orgánico con Dowterm, de la figura 2.35 estimamos un coeficiente global de transmisión de calor U de **165 W/m<sup>2</sup>K** ya que éste puede variar entre 50 y 350.

Fluido vaporizado	Medio calefactor	U (W/m <sup>2</sup> ·°C)	
		Min	Máx
Agua	Vapor	1500	4250
Aceites ligeros	Vapor	300	900
Aceites pesados	Vapor	50	500
Compuestos orgánicos	Vapor	600	1250
Aceites pesados	Dowtherm	50	350

Fig. 2.35. Coeficiente U.

#### Cálculo de la LMTD

Los fluidos se disponen a contracorriente y las diferencias de temperaturas se reflejan en la figura 2.36:

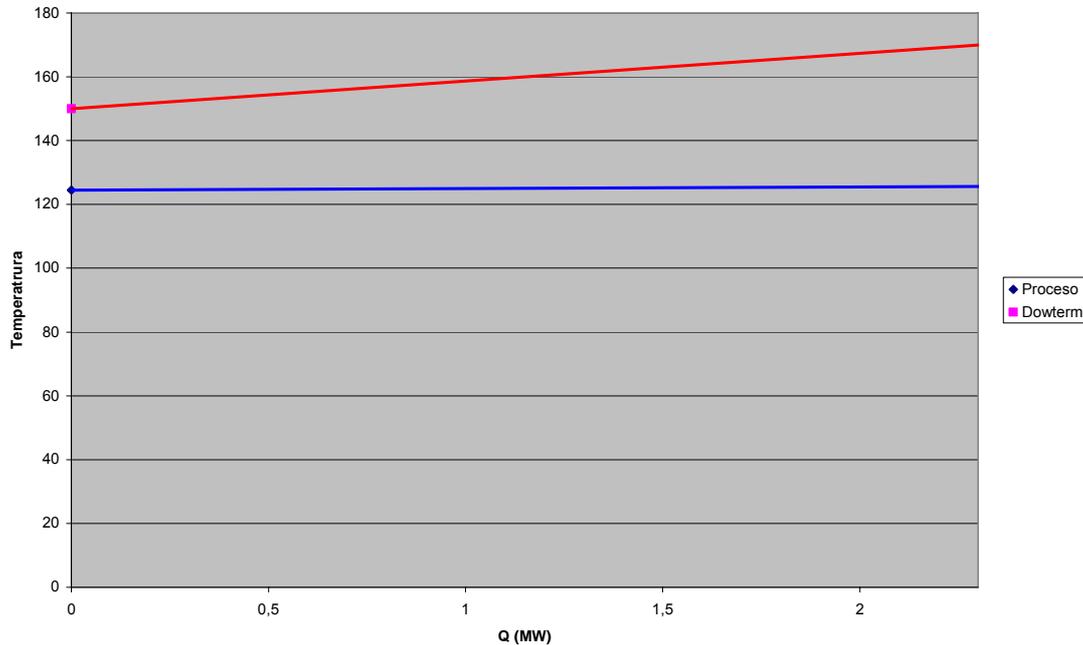


Fig. 2.36. Variación de temperatura de los fluidos en proceso.

Sin embargo, para el vaporizador en diseño, el número de pasos es 2 y la LMTD se calcula de manera diferente. La computación de la LMTD en una configuración de pasos múltiples se hace multiplicando la LMTD calculada como si el contacto fuera a contracorriente puro mediante un factor F.

Este factor de corrección se puede encontrar de forma gráfica en numerosos textos especializados. Las representaciones son función de dos parámetros:

$$R = \frac{\left( \text{Intervalo\_del\_fluido} \right)}{\left( \text{en\_la\_carcasa} \right)} \quad P = \frac{\left( \text{Intervalo\_del\_fluido} \right)}{\left( \text{en\_los\_tubos} \right)}$$

$$R = \frac{\left( \text{Intervalo\_del\_fluido} \right)}{\left( \text{en\_los\_tubos} \right)} \quad P = \frac{\left( \text{Máxima\_diferencia} \right)}{\left( \text{de\_temperaturas} \right)}$$

No deben diseñarse cambiadores con valores de F inferiores a 0.75. Si  $F < 0.75$  buscar otra alternativa de contacto.

En este caso, **R vale 0,0575** y **P vale 0,45**, en la figura 2.37, **F≈1**, por tanto, no hay que corregir la LMTD.

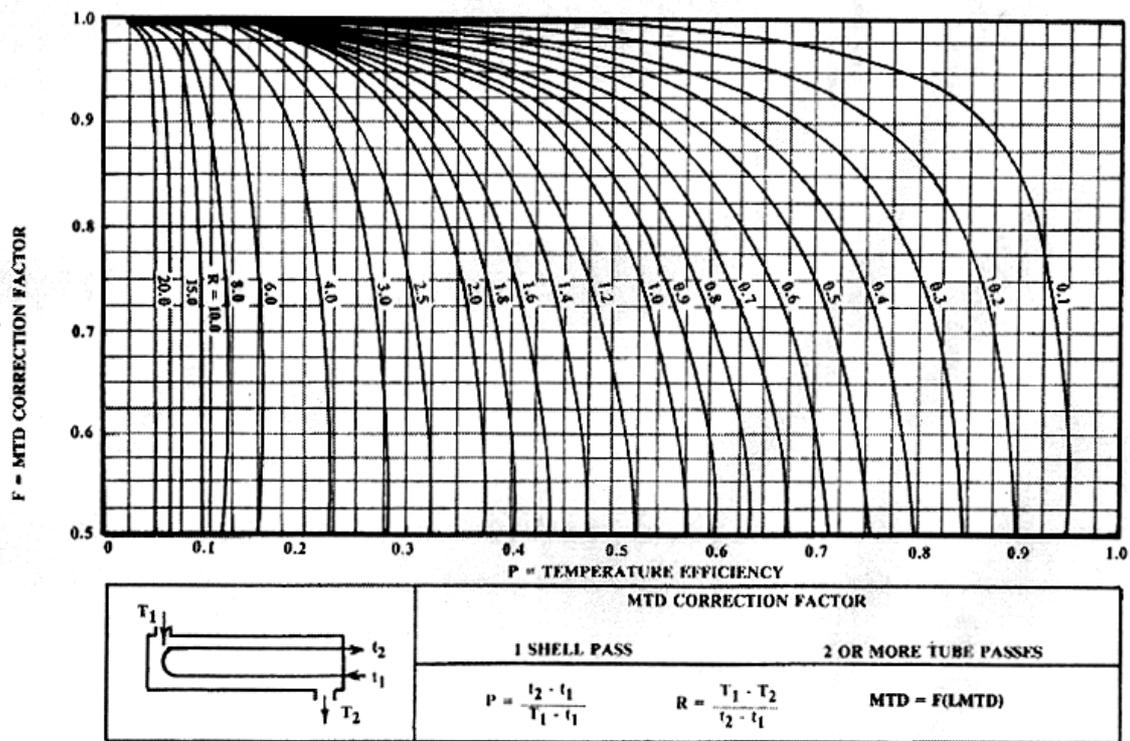


Fig. 2.37. Factor de corrección de la LMTD.

Para el vaporizador en diseño se obtiene la tabla 2.20:

Dowterm	$T_e = 170 \text{ °C}$	$T_s = 150 \text{ °C}$
Proceso	$T_e = 124,48 \text{ °C}$	$T_s = 125,63 \text{ °C}$
$\Delta T_1 = T_s (\text{Dowterm}) - T_e (\text{proceso})$		25,41
$\Delta T_2 = T_e (\text{Dowterm}) - T_s (\text{proceso})$		44,37
<b>LMTD</b>		<b>34,1</b>

Tabla 2.20. Cálculo de la LMTD.

## Calor

El líquido a vaporizar es un líquido casi puro (97 % MTBE) y además el rango de ebullición es muy pequeño (1 °C), por tanto, para calcular el calor podemos suponer que se cumple la expresión:

$$Q = \lambda_{vap} V$$

donde “ $Q$ ” es el calor global en W, “ $\lambda_{vap}$ ” es el calor latente de vaporización en J/kmol y “ $V$ ” es el caudal que se introduce en la columna en kmol/s.

Una vez obtenida la cantidad de calor necesaria para la vaporización  $Q=2,3\text{MW}$ , se puede hacer una estimación preliminar del área.

## Estimación preliminar del área

Despejando de la expresión del calor  $Q=U A LMTD$  ya expuesta anteriormente, el área necesaria para que el intercambio de calor requerido se lleve a cabo es  $A_{prel}=410,4 \text{ m}^2$ .

## 2.3.2. ASIGNACIÓN DE LA CONFIGURACIÓN GEOMÉTRICA

### Distribución de los fluidos

Se ha determinado que el fluido que debe ir por el interior de los tubos es el Dowterm y por la carcasa el de proceso. Por tanto, la **vaporización** se produce en el **lado de la carcasa**.

### Selección del tipo de intercambiador

El vaporizador diseñado es un **Kettle** (Fig. 2.38). En el tipo Kettle el haz de tubos es en “U” y está dentro de una carcasa de diámetro aumentado para facilitar la separación del vapor. Un rebosadero mantiene el nivel de líquido por encima del haz de tubos.

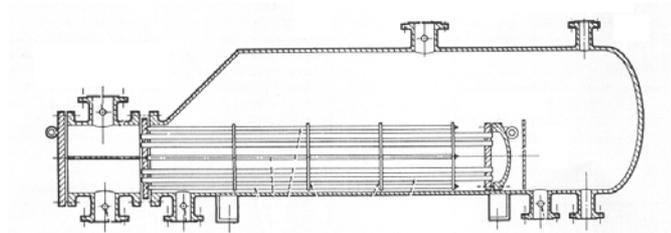


Fig. 2.38. Intercambiador tipo Kettle.

El Kettle permite altos flujos de transmisión de calor. El coste es intermedio. El aumento de coste por la mayor carcasa se compensa por el menor coste en tuberías. En cuanto a su operación, es muy estable, siendo insensible a grandes cambios en los caudales y condiciones de proceso.

La elección del tipo de vaporizador se ha llevado a cabo siguiendo el esquema de la figura 2.39:

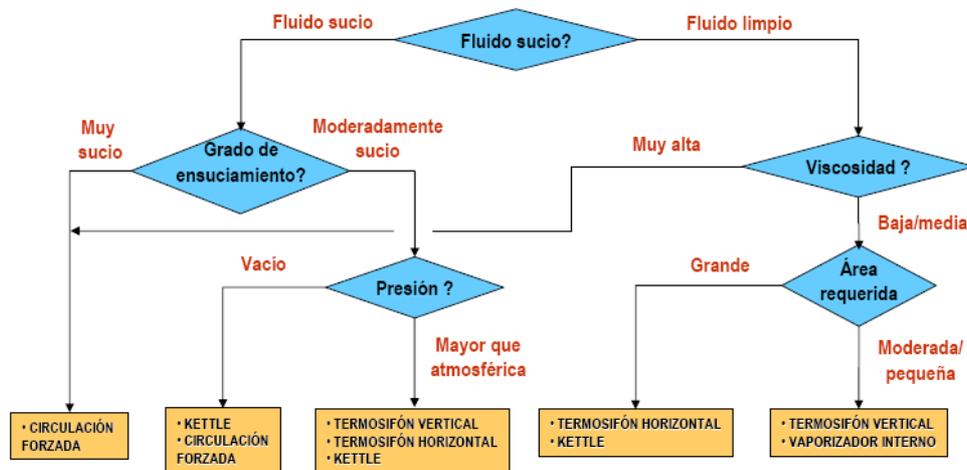


Fig. 2.39. Selección del tipo de intercambiador.

Puesto que el fluido es limpio, de baja viscosidad y gran área requerida (410 m<sup>2</sup>) se ha seleccionado el Kettle.

### TEMA (AKU)

Se ha elegido el **cabezal tipo A** -o tipo carrete- (Fig. 2.40) que permite la limpieza los tubos con facilidad tan solo con desmontar la tapa, no siendo necesario desmontar las conexiones a proceso.

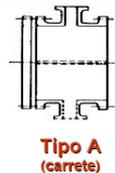


Fig. 2.40. Cabezal.

Se ha escogido la **carcasa tipo K** (Fig. 2.41). La carcasa tipo K es una carcasa de flujo cruzado, empleada en los evaporadores de marmita (Kettle). Se caracteriza por presentar un espacio superior para la separación del vapor en forma de una carcasa de mayor diámetro.

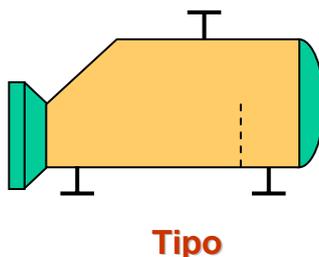


Fig. 2.41. Carcasa.

El **cabezal de retorno** escogido es el tipo **U** (Fig. 2.42).

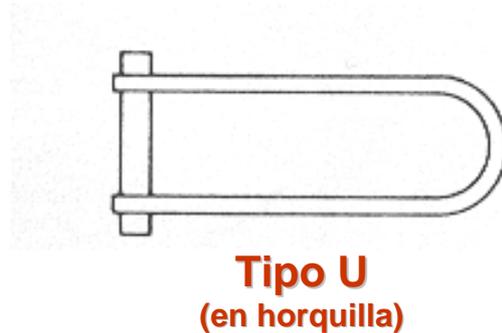


Fig. 2.42. Cabezal de retorno.

No es propiamente un cabezal, pero de cualquier manera es una manera de hacer retornar el fluido.

Es de bajo coste pero además permite la limpieza exterior de los tubos extrayendo la carcasa. También permite expandirse y contraerse ante grandes saltos térmicos.

Su principal desventaja es que está limitado a fluidos limpios por los tubos ya que la forma en "U" impide el acceso a esta zona de los cepillos limpiadores.

Como material de diseño, tanto para la carcasa como para los tubos se ha elegido el **acero inoxidable AISI 304** (18% Cr, 8% Ni) por su bajo coste y ya que no se precisa un material más resistente a la corrosión puesto que el fluido de proceso no es corrosivo.

### Diseño de los tubos

Se ha seleccionado un espesor de tubo  $x_w$  de **14 BWG**, es decir, 2 mm y un diámetro exterior  **$D_{ot}$  de 5/8"**, es decir, 15,9 mm. El diámetro interior calculado es de **0,47"**, es decir, 11,9 mm.

Por otro lado, se ha asignado una longitud del tubo de 30 pies, es decir, 9,1 m.

En cuanto a la resistencia al ensuciamiento,  $x_w/k_w$ , al haber elegido como material el acero inoxidable 304, la  **$k_w$  es 14,7 kcal/m·h·K**.

Una vez obtenidos estos datos, podemos calcular el número de tubos como:

$$A = \frac{\pi D_T L_T N_T}{N_p} \rightarrow N_T = \frac{A N_p}{\pi D_T L_T} = 1800$$

Ya que en las tablas del Perry no viene recogido ese diámetro a la hora de seleccionar el número de tubos, se ha buscado una correlación que relacione el número de tubos con el diámetro de la carcasa.

El diámetro de la carcasa se debe seleccionar de tal manera que se pueda obtener cierto espacio “luz” entre el diámetro del haz de tubos  $D_b$  y el diámetro interior de la carcasa  $D_c$ . Este espacio dependerá del tipo de intercambiador y las tolerancias de los fabricantes. Valores típicos son dados en la figura 2.43:

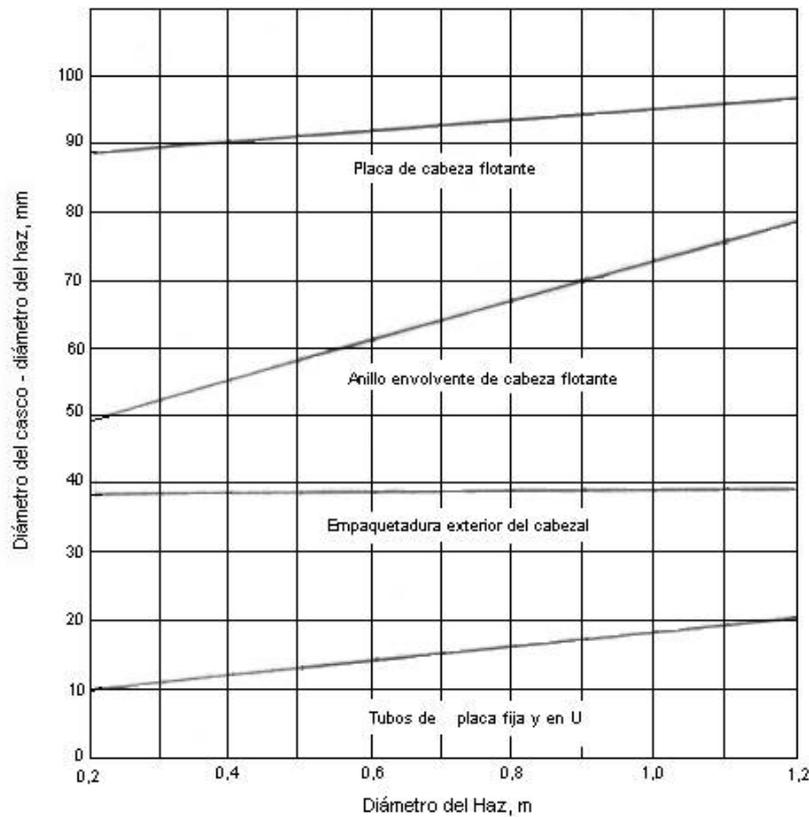


Fig. 2. 43. Relación diámetro carcasa-diámetro haz.

El diámetro del haz de tubos depende del número de tubos, y de la distribución. Un estimado del diámetro del haz de tubos  $D_b$  se puede obtener de la siguiente expresión, la cual es una ecuación empírica basada en distribuciones estándar de tubos. Las constantes para usarlas en esta ecuación, para arreglos triangular y cuadrado son dadas en la tabla 2.21:

$$D_b = D_{ot} \left( \frac{N_t}{K_1} \right)^{1/\alpha}$$

donde “ $N_t$ ” es el número de tubos, “ $D_b$ ” es el diámetro del haz de tubos y “ $D_{ot}$ ” es el diámetro exterior de los tubos, mm.

Arreglo triangular, $P = 1,25 D_{ot}$					
No. De pasos	1	2	4	6	8
$K_I$	0,319	0,249	0,175	0,0743	0,0365
$\alpha$	2,142	2,207	2,285	2,499	2,675
Arreglo cuadrado, $P = 1,25 D_{ot}$					
No. De pasos	1	2	4	6	8
$K_I$	0,215	0,156	0,158	0,0402	0,0331
$\alpha$	2,207	2,291	2,263	2,617	2,643

Tabla 2.21. Constantes empleadas.

Aplicando esta ecuación y haciendo uso de la Fig.2.41 obtenemos la tabla 2.22:

Cálculo del diámetro de la carcasa				
$D_b$	0,91	m		
$K_I$	0,249			
$\alpha$	2,207			
$D_s$	<b>0,93</b>	<b>m</b>	<b>36,45</b>	<b>pulgadas</b>

Tabla 2.22. Cálculo del diámetro de la carcasa.

Para tener un diámetro estandarizado de carcasa, cogemos **1882 tubos** que ocupan un diámetro de **37"**, es decir, 0,94 m.

Con este número de tubos y esta asignación geométrica para los tubos, el área disponible es  $A_{disp} = 429,1 \text{ m}^2$ .

### Carcasa

Como se acaba de citar, el diámetro de la carcasa es de 37".

El espaciado entre tubos en la carcasa  $P$  equivale a  $1,25x D_{ot}$  y vale 19,8 mm. Además, el claro entre tubos  $C$  es el resultado de restarle al espaciado el diámetro exterior del tubo dando como resultado 3,96 mm.

Se ha seleccionado un **arreglo triangular** para la disposición de los tubos. El ángulo del arreglo triangular dispuesto es de **30 °**.

El número de pasos en la carcasa depende del cabezal de retorno. Con el escogido para el diseño, el **número de pasos**, como ya se ha dicho, es **2**.

### Deflectores

El espaciado entre deflectores  $L_b$  es un valor tabulado que vale  $0,45x D_c$ , resultando **0,42 m**. En el diseño hay **20 deflectores** con un **corte del 25%**. Los deflectores serán **segmentados**.

### 2.3.3. COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSMISIÓN DE CALOR

#### Tipo de régimen

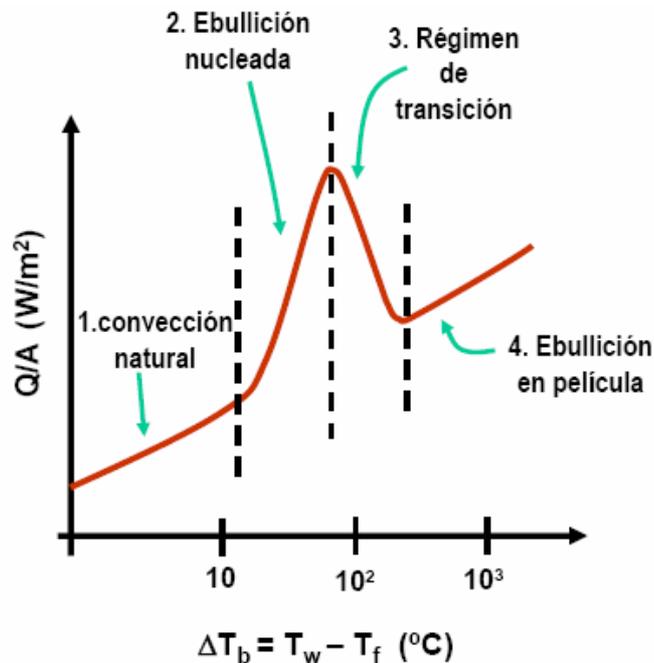


Fig.2.44. Tipos de regímenes en un vaporizador.

1.- A valores de  $\Delta T_b < 10$   $^{\circ}C$  el calor se transmite por convección natural hacia la superficie libre del líquido donde se libera formando vapor. No hay formación de burbujas en el seno del líquido.

2.- Se forman núcleos de vapor en oquedades de la superficie. Estos núcleos crecen vaporizando el líquido que los rodea hasta que la fuerza de empuje los eleva a la superficie en forma de burbujas. Los vaporizadores se diseñan para operar en este régimen.

3.- Régimen intermedio caracterizado por la formación ocasional de una película de vapor que aísla térmicamente la superficie del seno del líquido. Transmisión de calor inestable. Debe evitarse este régimen.

4.- A grandes valores de  $\Delta T_b$  se forma una película de vapor prácticamente estática entre la superficie del tubo y el seno del líquido.

**Ecuación para el cálculo de U**

Para calcular el coeficiente global de transferencia de calor  $U$  es necesario ir calculando una serie de parámetros.

$$U_0 = \frac{1}{\frac{1}{h_h} \frac{D_{ot}}{D_{it}} + R_p + \frac{1}{h_{nb,haz}}}$$

donde “ $h_h$ ” es el coeficiente del lado del fluido térmico en  $W/m^2K$ , “ $h_{nb,haz}$ ” es el coeficiente del lado del fluido vaporizado y “ $R_p$ ” es la resistencia combinada de la pared y de ensuciamiento en  $m^2K/W$ .

$$R_p = R_i \frac{D_{ot}}{D_{it}} + \frac{x_w}{k_w} \frac{D_{ot}}{D_{mt}} + R_0$$

Las resistencias de ensuciamiento por el lado de los tubos  $R_i$  y por el de la carcasa  $R_o$ , se obtienen de la figura 2.45:

Fluido	R ( $m^2 \cdot ^\circ C/W$ )
Agua destilada	0,0001
Vapor de agua limpio	0,0001
Agua de mar	0,0002
Gas natural	0,0002
Gases ácidos	0,0002
Gasolina	0,0002
Lubricantes	0,0002
Nafta	0,0002
Queroseno	0,0002
Vapor de agua exhausto	0,0002
Agua de refrigeración	0,00035
Agua tratada	0,00035
Aire	0,00045
Amoniaco	0,00045
Gas-oil ligero	0,00045
Soluciones causticas	0,00045
Soluciones de aminas	0,00045
Aceites vegetales	0,0007
Gas-oil pesado	0,0007
Crudo	0,0008
Fuel-oil	0,001
Asfalto	0,002

Fig. 2.45. Resistencias de ensuciamiento.

En el diseño propuesto, las resistencias son las del aceite (**0,0007**) y gasoil ligero (**0,00045**), respectivamente.

**Cálculo de  $h_h$** 

El cálculo de  $h_h$  se realiza por los métodos habituales para transmisión de calor en fase simple. Es decir, se calcula el coeficiente de transmisión de calor para el lado de los tubos.

Este coeficiente se calcula dependiendo del régimen de flujo: laminar, turbulento o de transición, despejando de las siguientes expresiones:

- Régimen laminar ( $Re < 2000$ ), ecuación de Hansen:

$$\frac{h_h D_{it}}{k} = 1,86 Gz^{0,33} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} \rightarrow Gz = Re Pr \left( \frac{D_{it}}{L} \right)$$

donde el cociente de viscosidades podemos aproximar a 1, “ $Re$ ” es el número de Reynolds, “ $Pr$ ” el de Prandtl, “ $L$ ” la longitud de los tubos y “ $k$ ” la conductividad térmica.

- Régimen de transición ( $2000 < Re < 8000$ ):

$$(h_h)_{tran} = (h_h)_{lam} + [(h_h)_{turb} - (h_h)_{lam}] \left[ \frac{Re - 2000}{8000} \right]$$

- Régimen turbulento ( $Re > 8000$ ), ecuación de Sieder-Tate:

$$\frac{h_h D_{it}}{k} = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,3} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14}$$

En el diseño el Reynolds es 6328 y, por tanto, se calcula el de transición obteniendo un valor de **292,76 W/m<sup>2</sup>K**.

**Cálculo de  $h_{nb}$** 

Los vaporizadores se diseñan para operar en el régimen de ebullición nucleada. Para el coeficiente de transmisión de calor, la mayoría de los diseñadores utilizan la ecuación de Mostinski(1963):

$$h_{nb} = h_{nb,ref} + h_{nc}$$

$$h_{nb,ref} = A^* q_b^{0,7} F_p \rightarrow \begin{cases} A^* = 0,0658 P_c^{0,69} \\ q_b = [A^* F_p]^{3,33} \Delta T^{3,33} \\ F_p = 1,8 P_r^{0,17} + 4 P_r^{1,2} + 10 P_r^{10} \\ \Delta T = T_w - T_F \end{cases}$$

$$Nu_{nc} = \frac{h_{nc} D_{ot}}{k} = 0,53 [Gr Pr]^{1/4} \rightarrow \begin{cases} Gr = \frac{D_{ot} \rho^2 g \beta \Delta T}{\mu^2} \text{Número\_de\_Grashoff} \\ Pr = \frac{\mu C_p}{k} \text{Número\_de\_Pr\_andtl} \end{cases}$$

donde " $h_{nb,ref}$ " es el coeficiente de transmisión en ebullición nucleada a una presión reducida de referencia ( $P_r = 0,029$ ) en  $W/m^2$ ; " $P_c$ " es la presión crítica en kPa; " $q_b$ " es el calor en  $W/m^2$ ; " $\beta$ " es el coeficiente de expansión térmica, " $T_w$ " es la temperatura de la pared y " $T_F$ " la temperatura del fluido.

El coeficiente de expansión térmica " $\beta$ " tiene la siguiente expresión:

$$\beta = \frac{1}{Vol(T)} \cdot \frac{\Delta Vol(T)}{\Delta T} = \frac{d \ln\left(\frac{1}{\rho}\right)}{dT}$$

Para calcularlo debemos hacer una representación gráfica de  $\ln(1/\rho)$  frente a la temperatura y obtener la pendiente ( $\beta$ ) para la temperatura media del fluido de proceso.

Resulta una función como la representada en la figura 2.46:

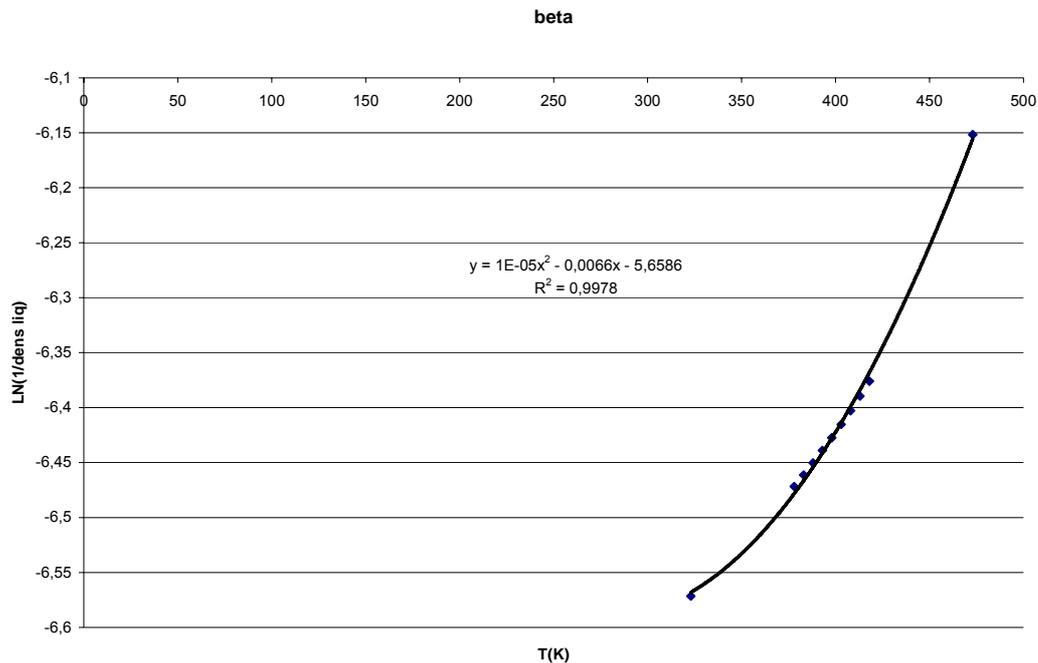


Fig. 2.46. Cálculo de  $\beta$ .

Con estos datos, la pendiente ( $dy/dx$ ) para la temperatura media da un coeficiente de expansión térmica de **0,0093**.

A su vez, el coeficiente de transmisión de calor  $h_{nb}$  aparece en la siguiente expresión de balance en la interfase:

$$h_h(\text{tubos})(T_{m,t} - T_w) = h_{nb}(\text{carcasa})(T_w - T_{m,c})$$

donde " $T_m$ " es la temperatura media en los tubos y en la carcasa.

Como puede apreciarse, el cálculo de  $h_{nb}$  es un proceso iterativo, ya que requiere el conocimiento de  $\Delta T = T_w - T_F$  para el cual hace falta  $T_w$  que a su vez sólo puede obtenerse con un balance en la interfase de la pared del tubo, que a su vez requiere el conocimiento de  $h_{nb}$ . Los cálculos pueden sistematizarse de la siguiente manera:

- Se supone un valor para  $h_{nb}$ , por ejemplo, se comienza con  $h_h$ .
- Se despeja  $T_w$  de la ecuación del balance en la interfase.
- Se calcula  $q$  y el  $h_{nb}$  nuevo.
- Si no coincide, se repite el proceso con el valor obtenido de  $h_{nb}$  hasta que coincida.
- Para ese valor,  $q$  será el calor disponible en  $W/m^2$ .

Con este procedimiento y las expresiones anteriormente citadas, se obtiene un valor para  $h_{nb}$  de **1526  $W/m^2$** , con un calor de **6584  $W/m^2$** .

## Calor

A la hora de obtener el calor disponible debemos coger el menor de entre dos calores calculados: el calculado anteriormente  $q$  y el flujo de calor crítico o  $q_{max}$ .

El  $q_{max}$  puede estimarse mediante la ecuación de Lienhardy Dhir [Trans ASME J. Heat Transfer, 95, 152-158 (1973)]:

$$q_{max} = 0,1309 \rho_V^{1/2} \lambda_{vap} \sqrt[4]{g \sigma (\rho_L - \rho_V)}$$

donde “ $q_{max}$ ” es el flujo de calor crítico en un tubo en  $W/m^2$  y “ $\sigma$ ” es la tensión superficial en N/m.

Haciendo este cálculo, obtenemos un valor de **422000  $W/m^2$** , por tanto, se coge como valor para el flujo de calor el calculado en el apartado anterior que es mucho menor.

El calor disponible será el producto de éste por el área disponible, obteniéndose un valor de **2,82 MW**.

## Cálculo de $h_{nb,haz}$

Para la obtención del coeficiente de transmisión para el haz de tubos, se utiliza la siguiente expresión:

$$h_{nb,haz} = 0,714 h_{nb} \left( \frac{P - D_{ot}}{0,305} \right)^\alpha \left( \frac{1}{N_{rv}} \right)^\beta$$

donde:

$$\alpha = 0,86 \cdot 10^{-5} \left( \frac{\pi D_{ot} U_{est} \Delta T}{\lambda_{vap} (P - D_{ot})} \right)$$

$$\beta = -0,24 [1,75 + \ln(1 / N_{rv})]$$

$$N_{rv} = \frac{D_c}{2P \cos(\theta / 2)}$$

“ $N_{rv}$ ” se calcula así para un arreglo triangular y “ $\theta$ ” es el ángulo del arreglo.

## Cálculo de U

Sustituyendo los valores obtenidos en la expresión para el cálculo de U, obtenemos un valor de **112,6  $W/m^2K$** , muy próximo al valor estimado ( $165 W/m^2K$ ).

### 2.3.4. EVALUACIÓN DEL DISEÑO

#### Sobredimensionado

El diseño propuesto está sobredimensionado desde el punto de vista térmico. Para llegar a este diseño se ha ido recalculando el flujo de calor disponible modificando los parámetros geométricos (diámetro exterior del tubo, longitud del tubo, diámetro de la carcasa y número de tubos y espesor).

El vaporizador está sobredimensionado, siendo S %:

$$S\% = \frac{Q_{disp} - Q_{req}}{Q_{req}} \times 100 = 22,6\%$$

El **sobredimensionado es aceptable**, eliminando los cuellos de botella que se producirían si se desea aumentar la capacidad del equipo en futuras mejoras en la planta.

#### Pérdida de carga

La pérdida de carga o caída de presión se calcula de igual modo que en el caso del condensador siendo ésta de **65549 Pa** (0,65 atm) en el lado de los tubos y **0,03 Pa** en el lado de la carcasa, ambas aceptables aunque la pérdida en el lado de los tubos sea mucho mayor. Ya que la pérdida de presión relativa debe ser inferior al 10% y vale:

$$\frac{\Delta P_t}{P_0} \times 100 = \frac{0,65}{6.7} \times 100 = 9,6\%$$

#### Distribución de resistencias

- Convección, lado de los tubos:

$$Rt(\%) = \frac{(1/h_h)(D_{ot}/D_{it})}{1/U_o} \times 100 = 51,42\%$$

- Ensuciamiento, lado de los tubos:

$$Ret(\%) = \frac{R_i(D_{ot}/D_{it})}{1/U_o} \times 100 = 10,54\%$$

- Pared metálica:

$$Rm(\%) = \frac{(x_w/k_w)(D_{ot}/D_m)}{1/U_o} \times 100 = 1,52\%$$

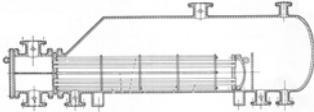
- Ensuciamiento, lado de la carcasa:

$$R_{es}(\%) = \frac{R_o}{1/U_0} \times 100 = 5,06\%$$

- Convección, lado de la carcasa:

$$R_s(\%) = \frac{1/h_{nb,haz}}{1/U_0} \times 100 = 31,46\%$$

### 2.3.5. HOJA DE ESPECIFICACIONES

		<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES INTERCAMBIADOR DE CALOR</b>			<b>Item N°: E-102</b>		
		CLIENTE: HUNTSMAN Inc.			Solicitud N°: 003		
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)			Fecha: Sep. 2008				
<b>SERVICIO DE LA UNIDAD:</b>							
<b>CONDICIONES DE OPERACIÓN</b>							
		<b>TUBOS</b>		<b>CARCASA</b>			
Fluido circulante	-	Dowterm		C. proceso			
Caudal total	kmol/h	1273,20		504,43			
Fase	-	Líquido		Líquido/Gas			
Temperatura entrada	°C	170		124,48			
Temperatura salida	°C	150		125,63			
Presión	atm	1		6,7			
<b>PROPIEDADES EVALUADAS A LA TEMPERATURA MEDIA</b>							
Peso Molecular	kg/kmol	166		86,46676			
Densidad	kg/m <sup>3</sup>	5,69419299	GAS		LÍQUIDO		
			21,4371063		618,458758		
Capacidad Calorífica	J/kmol·K	325804,563		223063,77			
Viscosidad	Pa·s	0,0005285		0,00014394			
Conductividad Térmica	W/m·K	0,1162982		0,0960			
<b>DATOS DE DISEÑO</b>							
Calor intercambiado	MW	2,30					
LMTD	°C	34,08					
Coefficiente de transmisión	W/m <sup>2</sup> ·K	112,60					
Área disponible	m <sup>2</sup>	429,1					
TEMA	-	AKU					
Deflectores	-	Segmentados					
N° deflectores	-	20					
Longitud deflectores	m	0,42					
Corte	%	25					
Sobredimensionado	%	22,60					
<b>DISEÑO TUBOS</b>			<b>DISEÑO CARCASA</b>				
N° Tubos	-	1882		<b>Disposición</b>		-	
Diámetro exterior	pulgadas	5/8		<b>Diámetro carcasa</b>		pulgadas 37	
Diámetro interior	pulgadas	0,47		<b>Diámetro haz de tubos</b>		pulgadas 35,74	
Espesor	BWG	14		<b>Espesor</b>		m	
Espaciado	pulgadas	0,78		<b>Longitud</b>		pies 30	
Claro	pulgadas	0,16					
Resistencia ensuciamiento	m <sup>2</sup> ·K/W	0,0007		<b>Resistencia de ensuciamiento</b>		m <sup>2</sup> ·K/W 0,00045	
Coefficiente de transmisión	W/m <sup>2</sup> ·K	292,76		<b>Coefficiente de transmisión</b>		W/m <sup>2</sup> ·K 357,95	
Pérdida de carga	atm	0,6		<b>Pérdida de carga</b>		atm 0,000	
<b>MATERIALES</b>							
Carcasa	ACERO INOX. AISI 304		<b>Deflectores</b>		ACERO INOX. AISI 304		
Cabezales	ACERO INOX. AISI 304		<b>Toberas</b>		ACERO INOX. AISI 304		
Tubos	ACERO INOX. AISI 304		<b>Aislamiento</b>				
<b>CONSTRUCCIÓN</b>							
Presión de diseño	atm			<b>Inspección taller</b>		-	
Presión de prueba	atm			<b>Radiografía</b>		-	
Temperatura de diseño	°C			<b>Prueba Hidrostática</b>		-	
<b>NOTAS</b>							
Departamento de Ingeniería Química y Ambiental		N° Rev:	Fecha:	Revisado por	Aprobado	Comprobado	Firma

## 2.4. CÁLCULO DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR E-103

### 2.4.1. DATOS DE LAS CORRIENTES

El intercambiador en diseño (E-103) se dispone a continuación de la salida del fondo de la columna de destilación para enfriar el producto objeto del proyecto hasta 30°C.

La corriente a enfriar es prácticamente MTBE puro. La composición exacta es la que se refleja en la tabla 2.23:

Componente	Composición
Metanol	0,01
MTBE	0,99

Tabla 2.23. Composiciones entrada intercambiador de calor.

El caudal molar de entrada al intercambiador son 145,29 kmol/h de la corriente de proceso a 125,63 °C y 6,7 atm de presión.

Como medio refrigerante se usa el agua de refrigeración disponible en la planta a 20 °C, cuya temperatura de salida es 40 °C y está a presión atmosférica.

### 2.4.2. PROPIEDADES EVALUADAS A LA TEMPERATURA MEDIA

Para la temperatura media de ambas corrientes se ha calculado la masa molecular, la densidad, la conductividad térmica, la capacidad calorífica y la viscosidad (tabla 2.24).

	Corriente de proceso	Agua de refrigeración
Temperatura media (°C)	77,82	30
Masa molecular, Pm (kg/kmol)	87,59	18
Densidad, $\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	681,53	992,90
Conductividad térmica, k (W/mK)	0,106	0,613
Capacidad calorífica, Cp (J/kmolK)	205134,9	75316,7
Viscosidad, $\mu$ (Pa s)	$2 \cdot 10^{-4}$	$8,3 \cdot 10^{-4}$

Tabla 2.24. Propiedades evaluadas a la temperatura media.

### 2.4.3. ESTIMACIÓN PRELIMINAR DEL ÁREA

#### Carga térmica

Para la estimación del calor o carga térmica  $Q$  (W) necesaria para el enfriamiento se resuelve la siguiente expresión.

$$Q = FC_p(T_2 - T_1) = 791696,12 \text{ W} = 2850 \text{ MJ/h}$$

donde “ $F$ ” es el caudal de la corriente de proceso en kmol/s, “ $C_p$ ” es la capacidad calorífica en J/kmolK y “ $(T_2 - T_1)$ ” es la diferencia entre la temperatura de salida y la de entrada en K.

Ahora podemos también calcular el caudal de agua de refrigeración aplicando la ecuación anterior a la corriente de agua, sabiendo que el calor intercambiado es el mismo. Dicho caudal resulta **0,53 kmol/s**.

#### Coefficiente de transmisión de calor $U$

Se ha estimado un coeficiente de transmisión de calor  $U$  de **200 W/m<sup>2</sup>K** sabiendo que el intercambio se produce entre un fluido orgánico y agua de refrigeración siguiendo la figura 2.47.

Fluidos		U (W/m <sup>2</sup> ·°C)	
		Min	Max
Gas	Gas	10	50
Agua	Gas	20	300
Agua	Aceite pesado	60	300
Agua	Compuesto orgánico	200	900
Agua	Agua o solución acuosa	700	1750
Compuesto orgánico	Compuesto orgánico	60	350
Aceite pesado	Aceite pesado	60	250
Aceite térmico	Gas	20	250
Aceite térmico	Aceite pesado	50	350

Fig. 2.47. Estimación del coeficiente global de transmisión de calor.

#### Cálculo de la $LMTD$

Para el intercambiador en diseño obtenemos la tabla 2.25:

Agua	$T_e = 293 \text{ K}$	$T_s = 313 \text{ K}$
Proceso	$T_e = 398,63 \text{ K}$	$T_s = 303 \text{ K}$
$\Delta T_1 = T_s(\text{agua}) - T_e(\text{proceso})$		85,63
$\Delta T_2 = T_e(\text{agua}) - T_s(\text{proceso})$		10
$LMTD$		<b>35,22</b>

Tabla 2.25. Cálculo de la  $LMTD$ .

### Área estimada

Para la estimación preliminar del área se aplica la expresión que aparece a continuación:

$$Q = U \cdot A \cdot LMTD \rightarrow A_{prel} = \frac{Q}{U \cdot LMTD} = 112,4m^2$$

### 2.4.4. DISTRIBUCIÓN DE LOS FLUIDOS Y MATERIALES DE CONSTRUCCIÓN

Se ha dispuesto que el fluido que transcurre por los tubos sea el de proceso y por la carcasa el agua de refrigeración ya que ésta es mas limpia.

Como material de construcción se ha seleccionado el **acero inoxidable AISI 304** por el mismo motivo que los otros dos cambiadores.

Las resistencias de ensuciamiento son las expuestas en la tabla 2.26:

Resistencia de ensuciamiento, $k_w$ (kcal/m·K·h)	14,7
Resistencia de la pared, $R_o$ (m <sup>2</sup> K/W)	0,00035
Resistencia de la pared, $R_i$ (m <sup>2</sup> K/W)	0,00045

Tabla 2.26. Resistencias de ensuciamiento.

La rugosidad absoluta por tratarse de acero inoxidable es de  $\epsilon = 0,046$  mm.

### 2.4.5. ASIGNACIÓN DE LA GEOMETRÍA

#### Tipo de cambiador (TEMA)

Se ha seleccionado un cambiador de placas tubulares fijas de TEMA **AEL** (Fig.2.48).

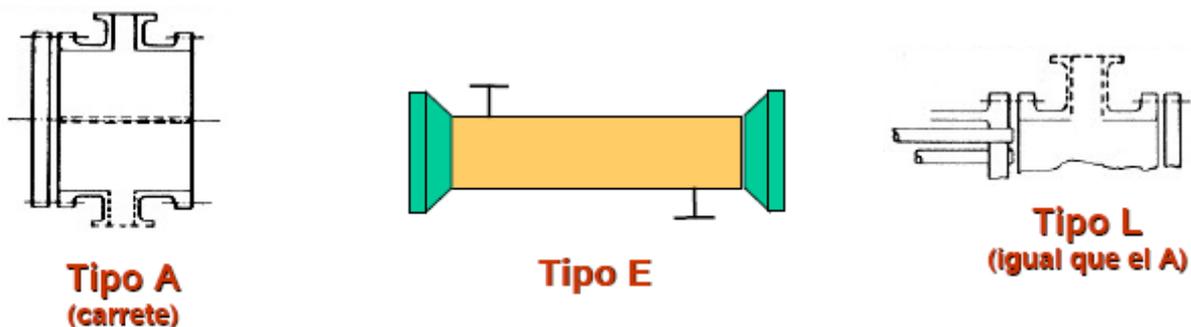


Fig. 2.48. TEMA.

## Tubos

Se ha seleccionado un espesor de tubo  $x_w$  de **20 BWG**, es decir, 0,9 mm y un diámetro exterior  $D_{ot}$  de **3/8"**, es decir, 9,5 mm. El diámetro interior calculado es de **0,305"**, es decir, 7,75 mm.

Por otro lado, se ha asignado una longitud del tubo de **30 pies**, es decir, 9,1 m.

Una vez obtenidos estos datos, podemos calcular el número de tubos como:

$$A = \frac{\pi D_T L_T N_T}{N_p} \rightarrow N_T = \frac{A N_p}{\pi D_T L_T} = 410,8$$

Ya que en las tablas del Perry no viene recogido ese diámetro a la hora de seleccionar el número de tubos, se ha aplicado la correlación que relaciona el número de tubos con el diámetro de la carcasa.

Aplicando la correlación y haciendo uso de la Fig.2.41 obtenemos la tabla 2.27:

Cálculo del diámetro de la carcasa				
$D_b$	0,27	m		
$K_I$	0,319			
$\alpha$	2,142			
$D_s$	<b>0,28</b>	<b>m</b>	<b>11,15</b>	<b>pulgadas</b>

Tabla 2.27. Cálculo del diámetro de la carcasa.

Para tener un diámetro estandarizado de carcasa, cogemos **413** tubos que ocupan un diámetro de **12"**, es decir, 0,3048 m.

Con este número de tubos y esta asignación geométrica para los tubos, el área disponible es  $A_{disp} = 113 \text{ m}^2$ .

## Carcasa

Como se acaba de citar, el diámetro de la carcasa es de 12".

El espaciado entre tubos en la carcasa  $P$  equivale a  $1,25x D_{ot}$  y vale 11,9 mm. Además, el claro entre tubos  $C$  es el resultado de restarle al espaciado el diámetro exterior del tubo dando como resultado 2,4 mm.

Se ha seleccionado un **arreglo triangular** para la disposición de los tubos. El ángulo del arreglo triangular dispuesto es de **30 °**.

El número de pasos en la carcasa depende del cabezal de retorno. Con el escogido para el diseño, el **número de pasos** sólo puede ser **1**.

El diámetro equivalente de la carcasa para una disposición triangular se calcula con la ecuación que viene a continuación:

$$D_e = \frac{3,44P^2 - \pi D_{ot}^2}{\pi D_{ot}} = 0,27''$$

donde el diámetro exterior del tubo y el espaciado vienen expresados en pulgadas y el diámetro equivalente también.

### Deflectores

El espaciado entre deflectores  $L_b$  es un valor tabulado que vale  $0,45x D_c$ , resultando **0,137 m**. En el diseño hay **65 deflectores** con un corte del **25%**. Los deflectores serán segmentados.

## 2.4.6. CÁLCULO DEL LADO DE LOS TUBOS

### Cálculo del coeficiente de transmisión de calor $h_i$

La expresión utilizada para el cálculo del coeficiente de transmisión de calor depende del Reynolds y, por tanto, de si el régimen es de tipo laminar, de transición o turbulento.

- Régimen laminar ( $Re < 2000$ ), ecuación de Hansen:

$$\frac{h_i D_{it}}{k} = 1,86 Gz^{0,33} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14} \rightarrow Gz = Re Pr \left( \frac{D_{it}}{L} \right)$$

donde el cociente de viscosidades podemos aproximarlo a 1, “ $Re$ ” es el número de Reynolds, “ $Pr$ ” el de Prandtl, “ $L$ ” la longitud de los tubos y “ $k$ ” la conductividad térmica.

- Régimen de transición ( $2000 < Re < 8000$ ):

$$(h_i)_{tran} = (h_i)_{lam} + [(h_i)_{urb} - (h_i)_{lam}] \left( \frac{Re - 2000}{8000} \right)$$

- Régimen turbulento ( $Re > 8000$ ), ecuación de Sieder-Tate:

$$\frac{h_i D_{it}}{k} = 0,023 Re^{0,8} Pr^{0,3} \left( \frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14}$$

En el diseño el Reynolds es 6906 y, por tanto, se calcula el de transición obteniendo un valor de **387 W/m<sup>2</sup>K**.

### Cálculo de la pérdida de presión

Utilizando la ecuación de Chen expresada en el apartado 2.2.5 se obtiene el factor de fricción  $f = 0,01$ .

La pérdida de presión en el lado de los tubos es una contribución de la pérdida en los tubos y en los retornos, como también viene reflejado en dicho apartado. La pérdida total de presión es **336,9 Pa**, es decir, 0,003 atm.

### Velocidad

La velocidad es el cociente entre el caudal volumétrico y el área transversal de paso, calculada según la expresión:

$$S_t = \frac{\pi D_{it}^2}{4} = 0,02 m^2$$

La velocidad resulta **0,27 m/s**.

## 2.4.7. CÁLCULO DEL LADO DE LA CARCASA

### Cálculo del coeficiente de transmisión de calor $h_o$

Para el cálculo del coeficiente de transmisión de calor se utiliza la expresión:

$$\frac{h_o D_e}{k} = 0,36 Re_c^{0,55} Pr^{0,3} \rightarrow h_o = 3236,9 W / m^2 K$$

### Cálculo de la pérdida de presión

Utilizando también las ecuaciones propuestas en el apartado 2.2.5. para el lado de la carcasa, la caída de presión resultante es de **2300 Pa**, es decir, 0,02 atm.

### Velocidad

En este caso, la superficie transversal se paso se calcula:

$$A_s = \frac{D_c L_c C}{144 P} = 0,5 pies^2$$

La velocidad es **0,13 m/s**.

## 2.4.8. CÁLCULO DEL ÁREA REQUERIDA

### Coefficiente global de transmisión de calor

La expresión destinada al cálculo de  $U$  es la que aparece seguidamente:

$$U_o = \frac{1}{\frac{1}{h_i} \frac{D_{ot}}{D_{it}} + R_i \frac{D_{ot}}{D_{it}} + \frac{x_w}{k_w} \frac{D_{ot}}{D_{it}} + R_o + \frac{1}{h_o}} = 225 W / m^2 K$$

### Área requerida

El área requerida que se obtiene utilizando el coeficiente de transmisión de calor calculado anteriormente y vale **99,95 m<sup>2</sup>**.

## 2.4.9. EVALUACIÓN DEL DISEÑO

### Sobredimensionado

El diseño propuesto está sobredimensionado, siendo este sobredimensionado del **13,06 %**. Dicho valor es aceptable y podemos dar el diseño por válido.

### Pérdida de presión relativa

La pérdida de carga relativa tanto en el lado de los tubos como en la carcasa es completamente despreciable y vale:

$$\frac{\Delta P_t}{P_o} \times 100 = 0,05\%$$

$$\frac{\Delta P_c}{P_o} \times 100 = 0,34\%$$

### Distribución de resistencias

- Convección, lado de los tubos:

$$R_t(\%) = \frac{(1/h_i)(D_{ot}/D_{it})}{1/U_o} \times 100 = 71,64\%$$

- Ensuciamiento, lado de los tubos:

$$R_{et}(\%) = \frac{R_i(D_{ot}/D_{it})}{1/U_o} \times 100 = 12,48\%$$

- Pared metálica:

$$R_m(\%) = \frac{(x_w/k_w)(D_{ot}/D_m)}{1/U_o} \times 100 = 1,3\%$$

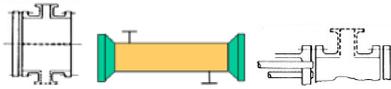
- Ensuciamiento, lado de la carcasa:

$$R_{es}(\%) = \frac{R_o}{1/U_o} \times 100 = 7,9\%$$

- Convección, lado de la carcasa:

$$R_s(\%) = \frac{1/h_o}{1/U_o} \times 100 = 6,7\%$$

### 2.4.10. HOJA DE ESPECIFICACIONES

		<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES INTERCAMBIADOR DE CALOR</b>			<b>Item N°:</b> E-103		
<b>CLIENTE:</b> HUNTSMAN Inc.			<b>Solicitud N°:</b> 004				
<b>PLANTA:</b> Valle de Escombreras (Cartagena)			<b>Fecha:</b> Sep. 2008				
<b>SERVICIO DE LA UNIDAD:</b>							
<b>CONDICIONES DE OPERACIÓN</b>							
		<b>TUBOS</b>		<b>CARCASA</b>			
<b>Fluido circulante</b>	-	C. Proceso		Agua			
<b>Caudal total</b>	kmol/h	145,29		1892,08			
<b>Fase</b>	-	Líquido		Líquido			
<b>Temperatura entrada</b>	°C	125,63		20			
<b>Temperatura salida</b>	°C	30		40			
<b>Presión</b>	atm	6,7		6,5			
<b>PROPIEDADES EVALUADAS A LA TEMPERATURA MEDIA</b>							
<b>Peso Molecular</b>	kg/kmol	87,59		18			
<b>Capacidad Calorífica</b>	J/kmol·K	205134,88		75316,71			
<b>Viscosidad</b>	Pa·s	0,0002		0,0008			
<b>Conductividad Térmica</b>	W/m·K	0,106		0,613			
<b>DATOS DE DISEÑO</b>							
<b>Calor intercambiado</b>	W	791696,12					
<b>LMTD</b>	°C	35,22					
<b>Área requerida</b>	m <sup>2</sup>	99,68					
<b>Coefficiente de transmisión</b>	W/m <sup>2</sup> ·K	225,52					
<b>Área disponible</b>	m <sup>2</sup>	113					
<b>TEMA</b>	-	AEL					
<b>Deflectores</b>	-	Segmentados					
<b>N° deflectores</b>	-	65					
<b>Longitud deflectores</b>	pulgadas	5					
<b>Corte</b>	%	25					
<b>Sobredimensionado</b>	%	13,37					
<b>DISEÑO TUBOS</b>			<b>DISEÑO CARCASA</b>				
<b>N° Tubos</b>	-	413		<b>Disposición</b>	-	Vertical	
<b>Diámetro exterior</b>	pulgadas	3/8		<b>Diámetro carcasa</b>	pulgadas	12	
<b>Diámetro interior</b>	pulgadas	0,31		<b>Diámetro haz de tubos</b>	pulgadas	10,64	
<b>Espesor</b>	BWG	20		<b>Espesor</b>	m		
<b>Espaciado</b>	pulgadas	0,47		<b>Longitud</b>	pies	30	
<b>Claro</b>	pulgadas	0,09					
<b>Resistencia ensuciamiento</b>	m <sup>2</sup> ·K/W	0,00045		<b>Resistencia de ensuciamiento</b>	m <sup>2</sup> ·K/W	0,00035	
<b>Coefficiente de transmisión</b>	W/m <sup>2</sup> ·K	387,05		<b>Coefficiente de transmisión</b>	W/m <sup>2</sup> ·K	3370,04	
<b>Pérdida de carga</b>	atm	0,003		<b>Pérdida de carga</b>	atm	0,105	
<b>Velocidad</b>	m/s	0,27		<b>Velocidad</b>	m/s	0,15	
<b>MATERIALES</b>							
<b>Carcasa</b>	ACERO INOX. AISI 304		<b>Deflectores</b>	ACERO INOX. AISI 304			
<b>Cabezales</b>	ACERO INOX. AISI 304		<b>Toberas</b>	ACERO INOX. AISI 304			
<b>Tubos</b>	ACERO INOX. AISI 304		<b>Aislamiento</b>				
<b>CONSTRUCCIÓN</b>							
<b>Presión de diseño</b>	atm		<b>Inspección taller</b>	-			
<b>Presión de prueba</b>	atm		<b>Radiografía</b>	-			
<b>Temperatura de diseño</b>	°C		<b>Prueba Hidrostática</b>	-			
<b>NOTAS</b>							
Departamento de Ingeniería Química y Ambiental		<b>N° Rev:</b>	<b>Fecha:</b>	<b>Revisado por</b>	<b>Aprobado</b>	<b>Comprobado</b>	<b>Firma</b>
		001	Sep 2008				

## 2.5. CÁLCULO DE LA COLUMNA DE EXTRACCIÓN T-101

### 2.5.1. DISEÑO BÁSICO

El objetivo de la columna de extracción T-101 es extraer el metanol de la corriente de salida de la cabeza de la columna de destilación para utilizarlo de nuevo como materia prima en la producción de MTBE.

Como agente extractivo o disolvente se usará agua por su afinidad con el metanol. Es decir, el metanol se disuelve en agua en mayor grado que el resto de componentes que son casi insolubles.

El agua a tratamiento obtenida (agua-metanol) debe tener la composición especificada en el balance de materia (Anexo I).

La extracción líquido-líquido consiste en la separación de los constituyentes de una mezcla líquida por contacto con otro líquido inmiscible que disuelve preferentemente a uno de los constituyentes de la mezcla original, en este caso el metanol, dando lugar a la aparición de 2 capas líquidas inmiscibles que se separan en virtud a su diferente densidad.

El producto extracto en este caso será la solución agua-metanol y el refinado el resto de compuestos. El agua será posteriormente separada para obtener el metanol puro o casi puro.

Para un buen funcionamiento de una columna de extracción se requiere una serie de características fundamentales:

- Un contacto íntimo del disolvente y la alimentación.
- La separación física de las dos fases líquidas resultantes.
- La eliminación y recuperación del disolvente en cada fase.

Estos tres apartados de una unidad de extracción constituyen lo que se denomina etapa, que recibe el nombre de ideal o teórica cuando el contacto ha sido lo suficientemente íntimo para que las fases líquidas separadas tengan las concentraciones correspondientes a las condiciones de equilibrio.

La extracción en varias etapas se dispone de manera que se obtenga un contacto múltiple entre los líquidos. Se ha elegido el **contacto a contracorriente** en el que alimentación y disolvente entran por extremos opuestos de la columna de modo que la alimentación se pone en contacto en la primera etapa con el disolvente ya concentrado en soluto y cada vez se encuentra con el disolvente más limpio.

En el diseño básico se debe calcular el número de etapas de equilibrio necesarias para la separación deseada. Al recurrir al programa de simulación Chemcad para el cálculo de la columna, el número de etapas es un dato que se debe introducir al

programa para que la simulación tenga lugar. Por tanto, se va probando con diferentes números de etapas hasta obtener la separación deseada.

### Datos de las corrientes

A la columna de extracción entran las corrientes de la tabla 2.28:

Datos	Agua	Proceso
Caudal (kmol/h)	325	468,7
Temperatura (°C)	40	49,5
Presión (atm)	6,5	6,5

Tabla 2.28. Datos de las corrientes de entrada a la columna de extracción.

Además la corriente de entrada de proceso tiene la composición representada en la tabla 2.29 (salida de la columna de destilación):

Componente	Composición
Propileno	0,05594
Propano	0,01061
i-Butano	0,00576
i-Buteno	0,01742
1-Buteno	0,45028
1,3-Butadieno	0,08830
n-Butano	0,21237
trans-2-buteno	0,04415
cis-2-buteno	0,03681
n-pentano	0,00060
Metanol	0,03888
MTBE	0,03886

Tabla 2.29. Composiciones de entrada al extractor.

Se desea alcanzar una composición de aproximadamente un 5 % (v/v) de metanol y 94 % (v/v) de agua para el agua a tratamiento.

Si se introduce como dato en el equipo “Liquid/Liquid Extractor (EXTR)” del Chemcad un número de **etapas** igual a **5**, especificando la presión en la parte superior e inferior de la columna, obtenemos el valor deseado para la composición de salida. Dichas composiciones de salida vienen recogidas en la tabla 2.30:

Componente	Isobutenos	Agua a tratamiento
Propileno	0,0558	0,0005
Propano	0,0106	0,0000
i-Butano	0,0058	0,0000
i-Buteno	0,0175	0,0000
1-Buteno	0,4515	0,0014
1,3-Butadieno	0,0885	0,0004
n-Butano	0,2130	0,0005
trans-2-buteno	0,0443	0,0001
cis-2-buteno	0,0369	0,0001
n-pentano	0,0006	0,0000
Metanol	0,0000	0,0558
MTBE	0,0388	0,0004
Agua	0,0368	0,9408
Caudal	466,4 kmol/h	327,3 kmol/h
Presión	6,5 atm	13 atm

Tabla 2.30. Composiciones de salida de la columna de extracción.

## 2.5.2. DISEÑO MECÁNICO

### Tipo de columna

Se ha seleccionado para la extracción una **columna de relleno vertical** para garantizar el contacto continuo entre ambos líquidos e incrementar la capacidad de separación.

Las torres de relleno son empleadas cuando son suficientes de 5 a 10 etapas, como es el caso que nos ocupa.

La presión en la parte superior e inferior difiere en 6,5 atm para que se produzca un flujo ascendente de la corriente de proceso que se introduce por la parte inferior. El agua introducida en la parte superior cae por acción de la gravedad y así se produce el contacto.

## Relleno

Como relleno se ha escogido una distribución aleatoria de **anillos Pall** (Fig.2.49). Una torre de relleno industrial utiliza rellenos normalmente de 1 ½ ó 2 pulgadas (38,1 y 50,8 mm), presentando una capacidad equivalente a la de un plato perforado.



Fig. 2.49. Anillos Pall

Los rellenos más pequeños tienen valores menores de HETP (altura equivalente de plato teórico) y, por tanto, la torre es más económica (menor dimensiones), sin embargo, tienen mayor tendencia a la inundación y generalmente no se utilizan en columnas grandes.

## Características del relleno

Los anillos tipo Pall son cilindros con paredes ranuradas y costillas internas, siendo el diámetro y la altura iguales. Estas aberturas y superficies interiores eliminan el efecto de otros rellenos que impiden operaciones satisfactorias en las columnas, proporcionando un excelente contacto y redistribución de líquidos contra todas las superficies internas y externas.

Proveen un área máxima de transferencia de masas y un significativo incremento en la capacidad comparado con cargas convencionales. El diseño de pared abierta del anillo, mantiene la distribución inicial y permite a ambas áreas, interior y exterior del anillo, ser activas en el proceso de contacto. Los anillos mantienen el patrón de flujo uniforme. Los requerimientos de redistribución son mucho menos exigentes que para otros rellenos. La frecuencia de redistribución depende del tamaño del relleno, régimen líquido, diámetro de la columna, etc. pero generalmente no resulta económico distribuir más que cada **3 metros**.

Los rellenos tipo Pall, por su reducida caída de presión, permiten utilizar sopladores de menor potencia, logrando así un conveniente ahorro de energía.

## Materiales disponibles

Plásticos: polipropileno, polipropileno con fibra de vidrio, polietileno alta densidad, etc.

Metálicos: SAE 1010, AISI 304, 304L, 316, 316L, 410, 430, 904L, aluminio, titanio, hastelloy, etc.

## Instalación

El relleno puede ser vaciado rápidamente en seco **al azar** dentro de torres, columnas u otros equipos. Su diseño no requiere de manipuleo especial o preparación de la torre puesto que no hay peligro de roturas.

## Ventajas

Las superficies lisas evitan la deposición de sólidos y aunque ocasionalmente esto pueda ocurrir, estos pueden ser fácilmente limpiados "in situ" con vapor, aire, gases inertes, etc.

Roturas, barros de cerámicas, etc. son cosas del pasado cuando se utilizan estos rellenos; de esta forma se mantienen bajas caídas de presión y las torres pueden operar al máximo de capacidad y eficiencia.

## Material

Se ha escogido el **acero inoxidable AISI 304** para la construcción de la carcasa de la torre y para el relleno se ha escogido el **polipropileno**.

Las características que ofrece el relleno de anillos Pall de polipropileno son las reflejadas en la tabla 2.31:

Medida	1 ½"
Área superficial, a	130 m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>
Espacio libre, ε	93 %
Peso aproximado	72 kg/m <sup>3</sup>
Factor de relleno	28

Tabla 2.31. Características del relleno de polipropileno.

El relleno se ha seleccionado de polipropileno por las siguientes características químicas:

Debido a su naturaleza apolar, como hidrocarburo parafínico de alto peso molecular, el polipropileno posee una gran resistencia a los agentes químicos, que es tanto mayor cuanto más elevados son el peso molecular y la densidad.

La absorción de agua del polipropileno es mínima, inmerso en la misma tanto a temperatura ambiente como a 100 °C. La absorción del orden de un 0,2 %, que sólo puede determinarse analíticamente, y debe atribuirse principalmente a la adsorción sobre la superficie. Contrariamente a los plásticos que absorben mayor cantidad de agua, las propiedades físicas y la estabilidad dimensional de las piezas de polipropileno son independientes del grado de humedad del ambiente. Por tanto, es adecuado para el caso de extracción con agua.

El polipropileno no se ve atacado por ninguno de los componentes en proceso excepto por el butadieno cuando la concentración de éste es del 100 %. El polipropileno es resistente sólo bajo ciertas condiciones a la sustancia indicada, pudiendo sufrir un

hinchamiento del 3 al 8%. Se tolera una pérdida de peso de hasta un 5 %. Las pérdidas de resistencia al desgarre y de alargamiento de desgarre no deben exceder de un 50 %. En casos críticos, es necesario determinar mediante ensayos la idoneidad de las piezas para el uso al que están previstas.

Como en el proceso, la concentración del butadieno no asciende del 8,8 %, no hay problema con su uso.

### **Interior de la columna**

Los ajustes internos en una columna de relleno son más simples que para una columna de platos pero deben ser diseñados cuidadosamente para conseguir una buena operación. Como una regla general, deben especificarse las partes internas estándares desarrolladas por los fabricantes de rellenos.

### **Soportes del relleno**

La función de los platos de soporte es llevar el peso del relleno seco, lo cual permite una libre circulación del líquido. Un mal diseño de soportes dará una alta caída de presión y provocará la inundación local. Para incrementar el área de flujo se usan **rejillas** con espaciados anchos; con las capas de empaque de tamaño más grande apiladas en la reja para sostener el relleno al azar del tamaño pequeño.

### **Distribuidores de líquido**

La operación satisfactoria de una columna de relleno depende del mantenimiento de un flujo uniforme de líquido a través de la columna, para lo cual es esencial una buena distribución inicial de líquido. Son usados varios diseños de distribuidores. Para columnas de diámetros pequeños puede ser adecuada una tubería central de alimentación o un alimentador de boquilla de rociado “spray”.

Todos los distribuidores los cuales se basan en el flujo de líquido por gravedad, deben ser instalados en la base de la columna, de lo contrario ocurrirá una mala distribución de líquido.

Los redistribuidores son usados para recolectar el líquido que ha migrado a las paredes y eventualmente redistribuirlo sobre el empaque. Estos igualmente también corrigen una mala distribución que puede ocurrir dentro del relleno.

Un redistribuidor total combina las funciones de soporte de relleno y distribuidor de líquido.

Se ha elegido un redistribuidor tipo **spray**.

## Diámetro

Los rangos de tamaño recomendados son los expresados en la tabla 2.32:

Diámetro de la columna	Tamaño de relleno a usar
< 0,3 m (1 pie)	< 25 mm (1 pulg.).
0,3 a 0,9 m (1 a 3 pies)	25 a 38 mm (1 a 1,5 pulg.)
> 0,9 m	50 a 75 mm (2 a 3 pulg.)

Tabla 2. 32. Diámetro de la columna- Tamaño del relleno.

El diámetro de la columna en diseño es de **3 pies**, es decir, 0,9 m.

## HETP

Para el diseño de columnas de relleno esto se simplifica al tratar la separación como un proceso por etapas, y usar el concepto de la altura equivalente a una etapa de equilibrio para convertir el número requerido de etapas ideales a una altura de relleno.

La altura equivalente a una etapa de equilibrio, usualmente se denomina altura equivalente de un plato teórico (HETP), es la altura de relleno que dará la misma separación que una etapa de equilibrio. La HETP para un tipo y tamaño dado de relleno es esencialmente constante, e independiente de las propiedades físicas del sistema; siempre y cuando se prevea y mantenga una buena distribución de líquido. Los siguientes valores para anillos Pall pueden usarse para hacer un estimado aproximado de la altura de relleno requerida (tabla 2.33).

Tamaño, mm	HETP, m
25 (1 pulg.)	0,4 – 0,5
38 (1 ½ pulg.)	0,5 – 0,75
50 (2 pulg.)	0,75 – 1,0

Tabla 2.33. HETP.

La HETP para una columna de relleno de anillos Pall de **1 ½"** de tamaño, vale **1,5 pies**, es decir, 457,2 mm  $\approx$  0,5 m.

## Eficiencia

La eficiencia en columnas de extracción de relleno suele ser de alrededor de un **80 %**.

## Altura total de la columna

La altura total de la columna esta dada por la ecuación:

$$H = Z + S + T$$

donde “*H*” es la altura total de la columna, “*Z*” la altura neta (ocupada por las etapas de contacto), “*S*” la altura de la base, aproximadamente 1,8 m (6 pies) y “*T*” la altura de la zona superior, aproximadamente de 0,5 a 1 m (2 a 3 pies).

La altura neta,  $Z$  de la columna esta dada por:

$$Z = (N/E_o) \times \text{HETP} = (5/0,8) \times 1,5 \text{ pies} = 9,375 \text{ pies} = 2,9 \text{ m}$$

donde “ $N$ ” es el número de etapas teóricas y “ $E_o$ ” la eficiencia global de la columna.

Por tanto, la altura total valdrá:

$$H = 9,375 + 6 + 2 = 17,375 \text{ pies} = \mathbf{5,3 \text{ m}}$$

### Carcasa

La cubierta está formada por una serie de **virolas soldadas** unas con otras, entendiéndose por virola un trozo de tubería o una chapa que convenientemente curvada y soldada forma un cilindro sin soldaduras circunferenciales.

Las soldaduras de una virola son axiales o longitudinales, ya que están realizadas siguiendo la generatriz del cilindro, al contrario, las soldaduras que unen virolas, o los cabezales con la cubierta, son circunferenciales o transversales, por estar realizadas siguiendo una circunferencia situada, obviamente, en un plano perpendicular al eje del cilindro.

### Cabezales

Se ha diseñado la torre con los **cabezales superior e inferior de tipo elíptico** similares a los utilizados en la columna de destilación.

### Dispositivos de sujeción y apoyo

Se ha elegido una torre en disposición vertical sujeta por un **faldón cilíndrico**.

Si el recipiente contiene elementos pesados en su interior, como el relleno, es necesario instalar un **pescante** en la parte superior del equipo para facilitar la instalación la retirada de dicho elemento.

### Espesor

El espesor de la carcasa se calcula mediante la siguiente expresión (igual a la utilizada en el cálculo del espesor de la columna de destilación):

$$t = \frac{PR}{SE - 0.6P} + C$$

donde “ $P$ ” es la presión máxima de trabajo en PSI, “ $t$ ” es el espesor de la cubierta, en pulgadas, “ $R$ ” es el radio interno, en pulgadas, “ $S$ ” es el esfuerzo máximo admisible, en  $\text{lb/pulg}^2$ , “ $E$ ” es la eficacia de soldadura y “ $C$ ” es la concesión de corrosión, en pulgadas.

La presión máxima de trabajo es el resultado de multiplicar la presión de trabajo por 1,25. De manera que:  $P = 13 \times 1,25 = 16,25 \text{ atm} = \mathbf{238,809 \text{ PSI}}$ .

Interpolando para la temperatura media de trabajo ( $T = 49,5 \text{ }^\circ\text{C}$ ) se obtiene un valor de tensión de  $17,089 \text{ kPSI/pulg}^2$ , es decir,  $\mathbf{S = 17089 \text{ PSI/pulg}^2}$ .

En cuanto a la eficacia de la soldadura, E, se ha tomado una eficiencia correspondiente a soldadura doble inspeccionada visualmente, es decir, de valor  $\mathbf{0,85}$ .

Por último, la concesión de corrosión, C, vale  $\mathbf{0,125 \text{ pulgadas}}$ .

Es necesario saber que se deben cumplir las siguientes expresiones:

$$P_{\max} \leq 0,665 \times S \times E$$

$$t \leq 0,356 \times R$$

Con los datos anteriores y aplicando la fórmula obtenemos la tabla 2.34:

	Valor	Unidades	Valor	Unidades
$P_{\max}$	16,25	atm	238,809	PSI
R	0,914	m	36	pulgadas
S	17,089	kPSI/pulg <sup>2</sup>	17088,514	PSI/pulg <sup>2</sup>
E	0,850	-	-	-
C	0,003	m	0,125	pulgadas
$0,665 \times S \times E$	-	-	9659,282	PSI
<b>espesor t</b>	<b>0,018</b>	<b>m</b>	<b>0,723</b>	<b>pulgadas</b>
$0,356 \times R$	0,326	m	12,816	pulgadas

Tabla 2.34. Cálculo del espesor de la cubierta.

Puesto que se cumplen las condiciones límite, el espesor para la carcasa que se utilizará en el diseño es de  $\mathbf{18 \text{ mm}}$ .

En cuanto a los cabezales, la expresión es:

$$t = \frac{PR}{2SE - 0.2P} + C$$

Además, las condiciones límite en este caso son:

$$P_{\max} \leq 0,385 \times S \times E$$

$$t \leq 0,5 \times R$$

Con los datos anteriores y aplicando la fórmula obtenemos la tabla 2.35:

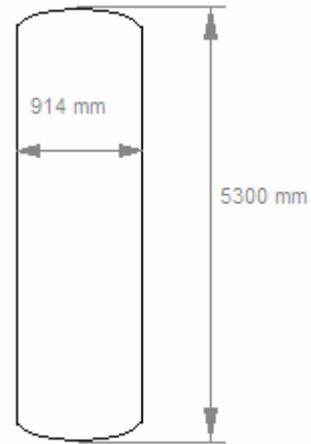
	Valor	Unidades	Valor	Unidades
$P_{max}$	16,25	atm	238,809	PSI
R	0,914	m	36	pulgadas
S	17,089	kPSI/pulg <sup>2</sup>	17088,514	PSI/pulg <sup>2</sup>
E	0,850	-	-	-
C	0,003	m	0,125	pulgadas
$0,385 \times S \times E$	-	-	5592,216	PSI
<b>espesor t</b>	<b>0,011</b>	<b>m</b>	<b>0,421</b>	<b>pulgadas</b>
$0,5 \times R$	0,457	m	18	pulgadas

Tabla 2.35. Cálculo del espesor de los cabezales.

Aquí también se cumplen las condiciones límite y, por tanto, el espesor seleccionado es de **11 mm**.

### 2.5.3. HOJA DE ESPECIFICACIONES

	<b>HOJA DE ESPECIFICACIONES COLUMNA DE EXTRACCIÓN</b>			<b>Item n°:</b> T-102
	CLIENTE: HUNTSMAN Inc.		SOLICITUD N°: 005	
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)		FECHA: Septiembre 2008		
SERVICIO DE LA UNIDAD:				
<b>CONDICIONES DE OPERACIÓN</b>				
Fluido circulante	-	Corriente de proceso/Agua		
Caudal entrada proceso	kmol/h	468,71		
Caudal entrada agua	Kmol/h	325,00		
Temperatura entada proceso	°C	49,5		
Temperatura entrada agua	°C	40,0		
Entrada cabeza	-	Agua		
Entrada fondo	-	Proceso		
Presión entrada proceso	atm	6,50		
Presión entrada agua	atm	6,50		
Presión cabeza	atm	6,5		
Presión fondo	atm	13,0		
Contacto	-	Contracorriente		
Tipo de columna	-	Columna de relleno		
<b>DISEÑO DEL RELLENO</b>				
HETP	m	0,46		
Eficiencia	%	80,00		
Tipo de relleno	-	Anillos Pall		
Disposición	-	azar		
Medida	pulgadas	1 ½		
Área superficial	m <sup>2</sup> /m <sup>3</sup>	130		
Espacio libre	%	93		
Peso aproximado	kg/m <sup>3</sup>	72		
Factor de relleno	-	28		
Material	-	Polipropileno		
Distribuidores	-	Cada 3 m		
N° distribuidores	-	2		
Sujeción	-	Rejas		
<b>DIMENSIONES COLUMNA</b>				
Diámetro interior cubierta	m	0,91		
Altura total columna	m	5,3		
Espesor cubierta	m	0,018		
Cabezales	-	Elípticos		
Espesor cabezal	m	0,011		
Apoyo y sujeciones	-	Faldón		
<b>MATERIALES</b>				
Cubierta	Acero inox. AISI 304		Toberas	Acero inox. AISI 304
Cabezales	Acero inox. AISI 304		Soportes internos	Acero inox. AISI 304
<b>CONSTRUCCIÓN</b>				
Presión diseño	atm	600	Inspección taller	OK
Presión prueba	atm	100	Radiografía	0,85
Temperatura diseño	°C	100	Prueba Hidrostática	OK
<b>NOTAS</b>				
Departamento de Ingeniería Química y Ambiental	N° rev: 001	Fecha: Sep. 2008	Revisado por:	Comprobado
				Aprobado





### 3. PRESUPUESTO

### 3. PRESUPUESTO

#### 3.1. PRESUPUESTOS PARCIALES CON PRECIOS UNITARIOS

##### Coste básico

En primer lugar, se procede al cálculo del coste básico de cada equipo, es decir, considerando acero al carbono y presión atmosférica.

Posteriormente se corregirá este valor con los factores de corrección de material y presión.

Tras esto, se debe actualizar el precio al año de diseño puesto que los cálculos vienen referidos al año 1996 según los coeficientes utilizados en el cálculo del coste obtenidos de la bibliografía (“Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes”, autor: R. Turton).

Para calcular el coste básico se utiliza la siguiente expresión:

$$\log C_p^0 = K_1 + K_2 \log A + K_3 (\log A)^2$$

donde “ $K_1$ ”, “ $K_2$ ” y “ $K_3$ ” son constantes que dependen del equipo y “ $A$ ” es un parámetro clave del equipo, en las columnas será el volumen y en los intercambiadores el área de intercambio.

Dichas constantes vienen recogidas en el Anexo VI.

##### Factor de corrección de material, $F_m$

Según el material utilizado en la construcción de los diferentes equipos, el factor de corrección tomará diferentes valores. Dichos valores vienen recogidos también en el Anexo VI.

##### Factor de corrección de presión, $F_p$

Para obtener el factor de corrección de presión se utiliza habitualmente la siguiente expresión aunque en algunos equipos esta expresión puede tomar otra forma:

$$\log F_p = C_1 + C_2 \log P + C_3 (\log P)^2$$

donde “ $C_1$ ”, “ $C_2$ ” y “ $C_3$ ” son constantes que dependen del equipo recogidas también en el Anexo VI y “ $P$ ” es la presión de operación real del equipo en bar.

**Factor de corrección,  $F_{BM}$** 

Para el cálculo del factor de corrección utilizamos la fórmula que se da a continuación:

$$F_{BM} = B_1 + B_2 F_m F_p$$

donde “ $B_1$ ” y “ $B_2$ ” son constantes también recogidas en el Anexo VI que dependen del equipo.

**Coste del equipo,  $C_{BM}$** 

El coste del equipo, aplicando los factores de corrección, se calcula finalmente mediante:

$$C_{BM} = C_p^0 F_{BM}$$

**Factor de actualización**

Teniendo en cuenta la inflación, se debe actualizar el coste calculado al año presente. Se ha utilizado en índice CEPCI para la actualización.

La expresión para el cálculo es la siguiente:

$$\frac{C_{eq}}{C_{BM}} = \frac{I_2}{I_1}$$

**3.1.1. COSTE DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN**

En el caso de la columna, el parámetro de diseño es el diámetro. Además, el cálculo del coste base varía con respecto a lo expuesto anteriormente.

$$C_p^0 = 235 + 19,80D + 75,07D^2$$

$$C_{BM} = C_p^0 N \cdot F_{BM} F_q$$

donde “ $N$ ” es el número de platos y “ $F_q$ ” es un factor basado en el número de platos en la columna. “ $F_q$ ” y “ $F_{BM}$ ” se obtienen también de las tablas expuestas en el Anexo VI.

Los datos obtenidos aparecen en la tabla 3.1:

	Columna
$D$ (m)	1,40
$C_p^0$	409,86
$F_{BM}$	2,00
$F_q$	1,00
$N$	21
$C_{BM}$	<b>17214,00 \$</b>
$I_1$ (1996)	381,70
$I_2$ (2007)	528,20
<b>Coste final</b>	<b>23820,90 \$</b>

Tabla 3.1. Cálculo del coste de la columna de destilación.

### 3.1.2. COSTE DEL CONDENSADOR E-101

Para el caso del condensador, sí podemos utilizar las expresiones generales. El coste del condensador E-101 se refleja en la tabla 3.2:

	Condensador
$K_1$	3,214
$K_2$	0,269
$K_3$	0,080
$A$	835,021
$C_1$	0,000
$C_2$	0,000
$C_3$	0,000
$P$	5,573
$F_m$	3,000
$B_1$	1,800
$B_2$	1,500
$C_p^0$	47723,088
$F_p$	1,000
$F_{BM}$	6,300
$C_{BM}$	<b>300655,457 \$</b>
$I_1$ (1996)	381,7
$I_2$ (2007)	528,2
<b>Coste total</b>	<b>416049,81 \$</b>

Tabla 3.2. Cálculo del coste del condensador.

**3.1.3. COSTE DEL REHERVIDOR E-102**

	Rehervidor
$K_1$	3,564
$K_2$	0,191
$K_3$	0,111
$A$	429,132
$C_1$	0,000
$C_2$	0,000
$C_3$	0,000
$P$	5,776
$F_m$	3,000
$B_1$	1,800
$B_2$	1,500
$C_p^0$	68042,725
$F_p$	1,000
$F_{BM}$	6,300
$C_{BM}$	<b>428669,17 \$</b>
$I_1$	381,7
$I_2$	528,2
<b>Coste total</b>	<b>593196,36 \$</b>

Tabla 3.3. Cálculo del coste del rehervidor.

**3.1.4. COSTE DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR E-103**

	Intercambiador de calor
$K_1$	3,214
$K_2$	0,269
$K_3$	0,080
$A$	113,006
$C_1$	0,000
$C_2$	0,000
$C_3$	0,000
$P$	5,776
$F_m$	3,000
$B_1$	1,800
$B_2$	1,500
$C_p^0$	12625,471
$F_p$	1,000
$F_{BM}$	6,300
$C_{BM}$	<b>79540,47 \$</b>
$I_1$ (1996)	381,7
$I_2$ (2007)	528,2
<b>Coste total</b>	<b>110068,84 \$</b>

Tabla 3.4. Cálculo del coste del intercambiador de calor.

### 3.1.5. COSTE DE LA COLUMNA DE EXTRACCIÓN

Al igual, que la columna de destilación, la columna de extracción tiene una forma diferente de cálculo. Al tratarse de una columna de relleno, el cálculo del coste base se realiza del mismo modo pero el parámetro utilizado es la altura del relleno.

En cuanto a la obtención del factor de corrección, “ $F_{BM}$ ” viene reflejada una tabla en el Anexo VI.

Los datos obtenidos están en la tabla 3.5:

	Columna
$K_1$	2,928
$K_2$	0,996
$K_3$	0,000
$H$ (m)	5,3
$C_p^0$	4454,892
$F_{BM}$	2,2
$C_{BM}$	<b>9800,76 \$</b>
$I_1$ (1996)	381,7
$I_2$ (2007)	528,2
<b>Coste final</b>	<b>13562,38 \$</b>

Tabla 3.5. Cálculo del coste de la columna de extracción.

### 3.2. PRESUPUESTO TOTAL

Para estimar el coste final de la planta, habrá que sumar el coste individual de todos los equipos. En nuestro caso, se sumarán los costes de las dos columnas y de los tres intercambiadores de calor. Al tratarse de una ampliación relativamente pequeña de una planta ya existente, el coste se estima mediante la siguiente expresión:

$$C_{planta} = 1,18 \sum_{i=1}^n C_{eq,i}$$

El coste obtenido de esta forma es: **1.364.903,98 \$**.



## 4. PLANOS

### 4.1. SITUACIÓN GEOGRÁFICA

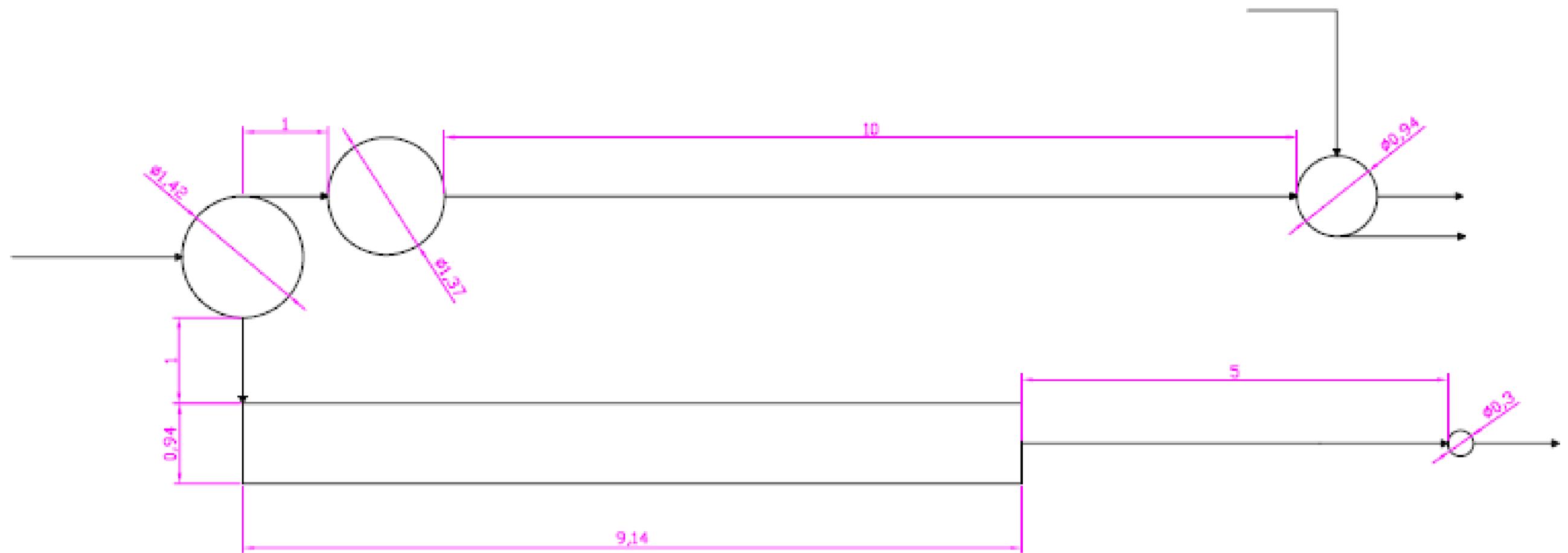


Situación de la industria

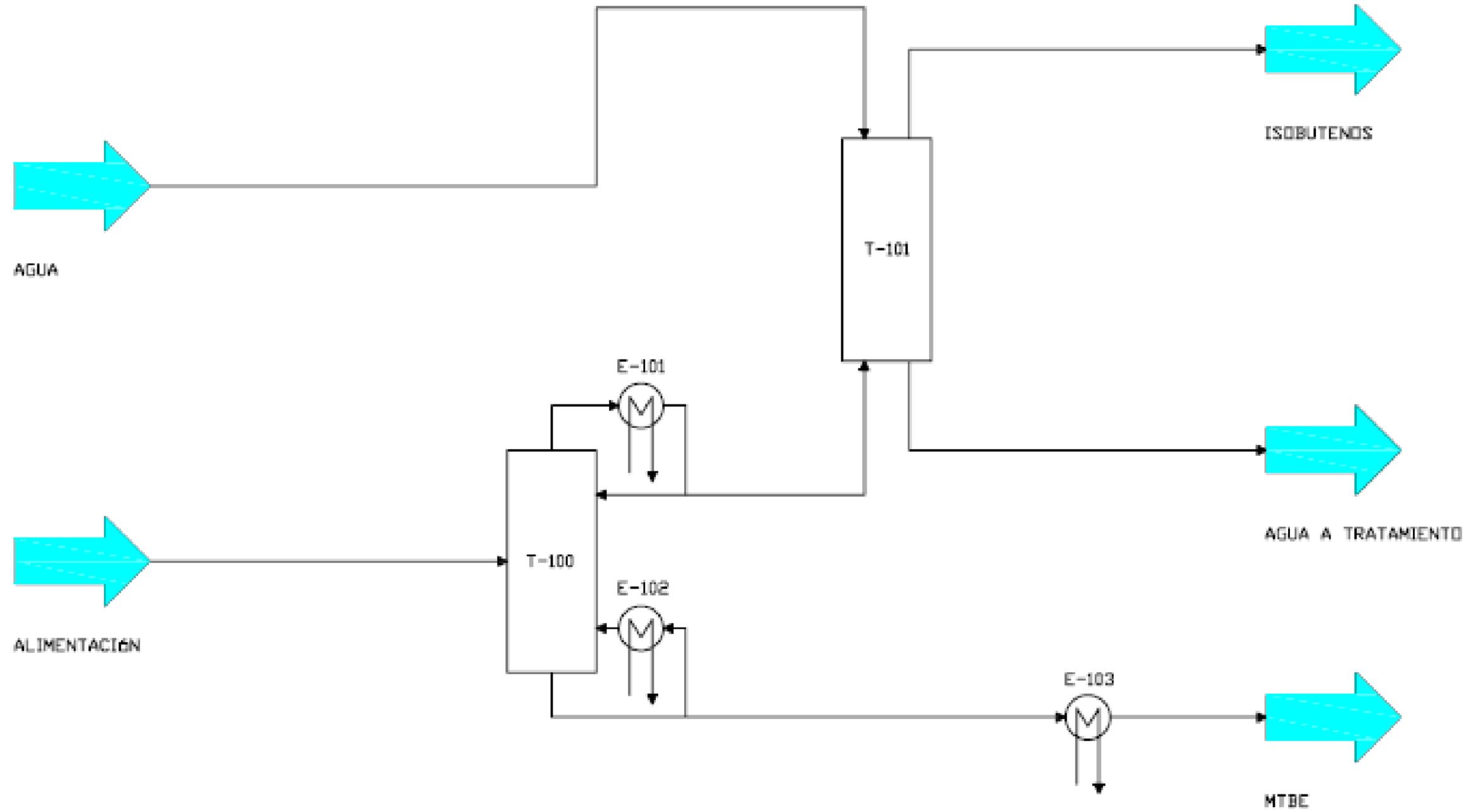
## 4.2. EMPLAZAMIENTO



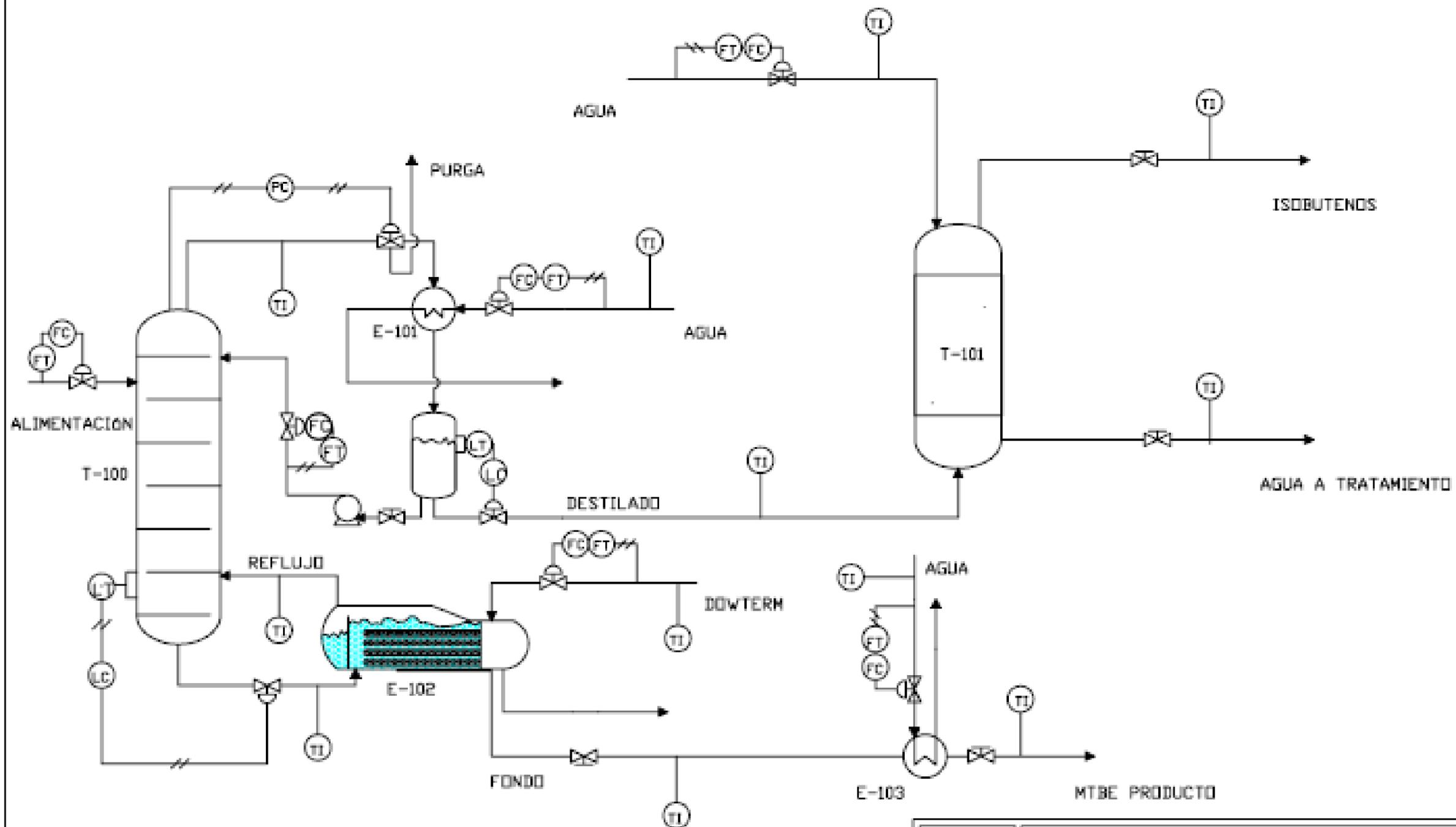
Situación de la industria



	Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE	PLANO N°		
		3		
ESCALA	Distribución en planta			
1:50				
SUSTITUYE AL PLANO	-----	SUSTITUIDO POR	-----	Tula Espinosa Rodríguez  Firma
FECHA	20/07/08	NÚM. DE HOJAS	5	



	Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE		PLANO N°
			4
ESCALA	Diagrama del proceso industrial		
-----			
SUSTITUYE AL PLANO	-----	SUSTITUIDO POR	-----
FECHA	20/07/08	HOJAS	5
			Tula Espinoza Rodríguez firma



	Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE	PLANO N°		
		5		
ESCALA	Plano P&I			
----				
SUSTITUYE AL PLANO	----	SUSTITUIDO POR	-----	Tula Espinosa Rodríguez firma
FECHA	20/07/08	NÚMERO	5	



## Anexo I: Balance de Materia

El balance de materia total en la planta calculado con el programa de simulación Chemcad se refleja en la tabla 5.1. En este anexo se incluyen las composiciones de todas las corrientes, además de algunas propiedades. Este balance de materia se realiza para una producción de 120000 toneladas al año de MTBE, contabilizando un 90% uptime y 330 días de operación.

Corriente No.	1	2	3	4	5	6	7
Descripción	Alim.	Fondo T-100	Destilado T-100	Alim. Agua	Isobutenos	Agua a trat.	MTBE producto
Fración de vapor	0,53	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Temperatura, °C	70,00	127,10	48,30	40,00	44,90	48,30	30,00
Temperatura, K	343,2	400,3	321,5	313,2	318,1	321,5	303,2
Presión, atm	6,5	6,7	6,5	6,5	6,5	6,7	6,5
Entalpía (MJ/h)	-63218,9	-47676,8	-20976,9	-92483,9	-20174,5	-93286,3	-50953,9
Caudal molar, kmol/h	614,00	163,60	450,40	325,00	442,80	332,60	163,60
Composición	%						
Propileno	4,27	0,00	5,82	0,00	5,88	0,05	0,00
Propano	0,81	0,00	1,10	0,00	1,12	0,01	0,00
i-Butano	0,44	0,00	0,60	0,00	0,61	0,00	0,00
i-Buteno	1,33	0,00	1,81	0,00	1,84	0,01	0,00
l-Buteno	34,37	0,01	46,86	0,00	47,55	0,15	0,01
1,3-Butadieno	6,74	0,00	9,19	0,00	9,32	0,04	0,00
n-Butano	16,21	0,01	22,10	0,00	22,43	0,06	0,01
trans-2-buteno	3,37	0,00	4,59	0,00	4,66	0,01	0,00
cis-2-buteno	2,81	0,01	3,83	0,00	3,88	0,01	0,01
n-pentano	0,06	0,22	0,00	0,00	0,00	0,00	0,22
Metanol	3,19	0,73	4,08	0,00	0,00	5,53	0,73
Agua	0,01	0,03	0,00	100,00	2,69	94,13	0,03
MTBE	26,39	99,00	0,01	0,00	0,01	0,00	99,00
Composición	Xi						
Propileno	0,0427	0,0000	0,0582	0,0000	0,0588	0,0005	0,0000
Propano	0,0081	0,0000	0,0110	0,0000	0,0112	0,0001	0,0000
i-Butano	0,0044	0,0000	0,0060	0,0000	0,0061	0,0000	0,0000
i-Buteno	0,0133	0,0000	0,0181	0,0000	0,0184	0,0001	0,0000
l-Buteno	0,3437	0,0001	0,4686	0,0000	0,4755	0,0015	0,0001
1,3-Butadieno	0,0674	0,0000	0,0919	0,0000	0,0932	0,0004	0,0000
n-Butano	0,1621	0,0001	0,2210	0,0000	0,2243	0,0006	0,0001
trans-2-buteno	0,0337	0,0000	0,0459	0,0000	0,0466	0,0001	0,0000
cis-2-buteno	0,0281	0,0001	0,0383	0,0000	0,0388	0,0001	0,0001
n-pentano	0,0006	0,0022	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0022
Metanol	0,0319	0,0073	0,0408	0,0000	0,0000	0,0553	0,0073
Agua	0,0001	0,0003	0,0000	1,0000	0,0269	0,9413	0,0003
MTBE	0,2639	0,9900	0,0001	0,0000	0,0001	0,0000	0,9900

Tabla 5.1. Balance de materia

## Anexo II: Método UNIFAC

Para el cálculo de los coeficientes de actividad necesarios en el método de cálculo FUG de la columna de destilación se ha recurrido al método UNIFAC.

Ciertas ecuaciones de estado son capaces también de representar la fase líquida pero, por lo general, las desviaciones de la composición de un líquido respecto del estado ideal se caracterizan mejor a través del concepto de actividad que se utiliza para sustituir a la fracción molar en mezclas líquidas multicomponente que se desvían mucho de la idealidad. La relación es:

$$a_i = \gamma_i^L x_i$$

donde “ $\gamma_i^L$ ” es el coeficiente de actividad.

Para una disolución ideal el coeficiente de actividad vale 1 y, entonces,  $a_i = x_i$ . Para soluciones no ideales, se formulan modelos que incluyen parámetros de interacción binaria (BIP's).

Cuando no se dispone de los parámetros de interacción binaria pueden estimarse los coeficientes de actividad mediante el método UNIFAC (UNIversal Functional-group Activity Coefficients).

El método UNIFAC considera el coeficiente de actividad formado por dos contribuciones: una debida a diferencias de forma y tamaño (combinatorial) y otra debida a interacciones entre grupos funcionales (residual).

El esquema general a seguir es el de la Fig. 5.1. A continuación se irá explicando cada uno de los pasos aplicados al fondo y a la cabeza de la columna de destilación.

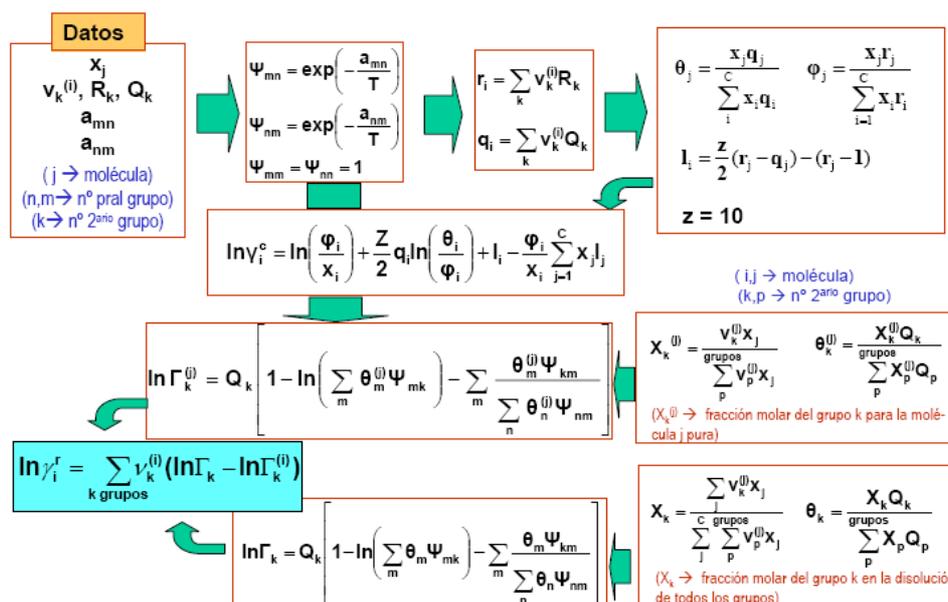


Fig. 5.1. Esquema general método UNIFAC.

**DATOS DE LAS CORRIENTES****Cabeza**

Por la parte superior de la columna tenemos una corriente cuya composición se refleja en la tabla 5.2 y cuya temperatura es 326,4 K y presión 6,5 atm.

Componente	$x_j$
Propileno	0,05820
Propano	0,01100
i-butano	0,00600
i-buteno	0,01810
1-buteno	0,46860
1,3-butadieno	0,09190
n-butano	0,22100
trans-2-buteno	0,03830
cis-2-buteno	0,04590
n-pentano	0,00001
metanol	0,04080
MTBE	0,00010

Tabla 5.2. Composición del destilado.

**Fondo**

Por la parte inferior de la columna tenemos una corriente cuya composición se refleja en la tabla 5.3 y cuya temperatura y presión es 415,3 K y 6,7 atm respectivamente.

Componente	$x_j$
metanol	0,01
MTBE	0,99

Tabla 5.3. Composición del fondo.

## IDENTIFICACIÓN DE LOS GRUPOS

En la nomenclatura de UNIFAC cada grupo se identifica por un número principal y un número secundario (ver tablas adjuntas al final del anexo).

Para los compuestos que aparecen en la columna los grupos se dan en la tabla 5.4:

Grupo	Nº primario	Nº secundario	R <sub>j</sub>	Q <sub>j</sub>
CH <sub>3</sub>	1	1	0,9011	0,8480
CH <sub>2</sub> =CH	2	5	1,3454	1,1760
CH <sub>2</sub>	1	2	0,6744	0,5400
CH	1	3	0,4469	0,2280
CH <sub>2</sub> =C	2	5	1,1173	0,9880
CH=CH	2	6	1,1167	0,8670
C	1	4	0,2195	0,0000
CH <sub>3</sub> O	13	24	1,1450	1,0880
CH <sub>3</sub> OH	6	15	1,4311	1,4320
H <sub>2</sub> O	7	16	0,9200	1,4000

Tabla 5.4. Grupos.

Además, en la tabla 5.4 también se reflejan el volumen relativo R y el área relativa Q.

## MATRIZ DE OCURRENCIAS “v”

Es la matriz formada por un número de filas igual al número de especies moleculares y un número de columnas igual al número de grupos diferentes existentes en la mezcla.

### Cabeza

	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> =CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	-CH=CH-	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
Propileno	1	1	0	0	0	0	0	0	0
Propano	2	0	1	0	0	0	0	0	0
i-butano	3	0	0	1	0	0	0	0	0
i-buteno	2	0	0	0	1	0	0	0	0
1-buteno	1	1	1	0	0	0	0	0	0
1,3-butadieno	0	2	0	0	0	0	0	0	0
n-butano	2	0	2	0	0	0	0	0	0
trans-2-buteno	2	0	0	0	0	1	0	0	0
cis-2-buteno	2	0	0	0	0	1	0	0	0
n-pentano	2	0	3	0	0	0	0	0	0
metanol	0	0	0	0	0	0	0	0	1
MTBE	3	0	0	0	0	0	1	1	0

Tabla 5.5. Matriz de ocurrencias en la cabeza.

**Fondo**

	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> =CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	-CH=CH-	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
metanol	0	0	0	0	0	0	0	0	1
MTBE	3	0	0	0	0	0	1	1	0

Tabla 5.6. Matriz de ocurrencias para el fondo.

**MATRIZ DE INTERACCIONES “a”**

La matriz de interacciones (tabla 5.7) es una matriz cuadrada que se construye a partir de la tabla de interacciones entre grupos (adjunta al final). Los elementos de la diagonal son 0 y las interacciones entre grupos con el mismo número principal también. Además, la matriz no es simétrica respecto de la diagonal.

	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> -CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	-CH=CH-	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
CH <sub>3</sub>	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2
CH <sub>2</sub> =CH-	-35,36	0	-35,36	-35,36	0	0	-35,36	214,5	787,5
CH <sub>2</sub> =CH-	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2
CH	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2
CH <sub>2</sub> =CH-	-35,36	0	-35,36	-35,36	0	0	-35,36	214,5	787,5
-CH=CH-	-35,36	0	-35,36	-35,36	0	0	-35,36	214,5	787,5
C	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2
CH <sub>3</sub> O	83,36	26,51	83,36	83,36	26,51	26,51	83,36	0	238,4
CH <sub>3</sub> -OH	16,51	-12,52	16,51	16,51	-12,52	-12,52	16,51	-128,6	0

Tabla 5.7. Matriz de interacciones.

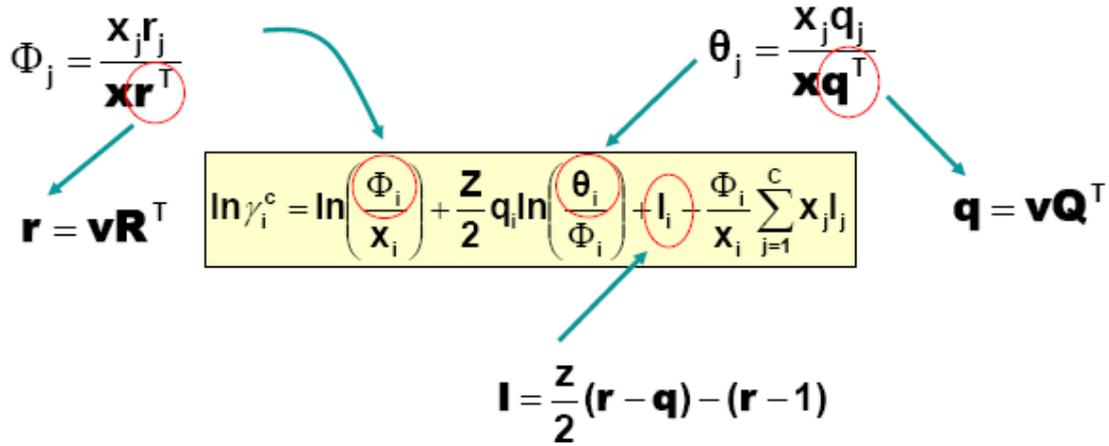
**NOTACIÓN MATRICIAL**

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{11}, \Psi_{12}, \dots, \Psi_{1k} \\ \vdots \\ \Psi_{k1}, \Psi_{k2}, \dots, \Psi_{kk} \end{pmatrix} \quad \Psi_{kj} = \exp\left(-\frac{a_{kj}}{T}\right)$$

	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> -CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	-CH=CH-	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
CH <sub>3</sub>	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
CH <sub>2</sub> =CH-	1,1144	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	0,5183	0,0896
CH <sub>2</sub> =CH-	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
CH	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
CH <sub>2</sub> =CH-	1,1144	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	0,5183	0,0896
-CH=CH-	1,1144	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	0,5183	0,0896
C	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
CH <sub>3</sub> O	0,7746	0,9220	0,7746	0,7746	0,9220	0,9220	0,7746	1,0000	0,4817
CH <sub>3</sub> -OH	0,9507	1,0391	0,9507	0,9507	1,0391	1,0391	0,9507	1,4829	1,0000

Tabla 5.8. Cálculo de  $\psi_{mn}$ .

Parte combinatorial



• Cabeza

	$x_j$	$r_j$	$q_j$	$l_j$	$x_j \cdot q_j$	$x_j \cdot r_j$	$x_j \cdot l_j$	$\Phi_i$	$\theta_j$	$\ln \gamma_i(c)$
Propileno	0,0582	2,2465	2,0240	-0,1340	0,1178	0,1307	-0,0078	0,0469	0,0459	-0,0238
Propano	0,0110	2,4766	2,2360	-0,2736	0,0246	0,0272	-0,0030	0,0098	0,0096	-0,0064
i-butano	0,0060	3,1502	2,7720	-0,2592	0,0166	0,0189	-0,0016	0,0066	0,0066	-0,0051
i-buteno	0,0181	2,9195	2,6840	-0,7420	0,0486	0,0528	-0,0134	0,0193	0,0186	0,0106
1-buteno	0,4686	2,9209	2,5640	-0,1364	1,2015	1,3687	-0,0639	0,4780	0,4808	0,0000
1,3-butadieno	0,0919	2,6908	2,3520	0,0032	0,2161	0,2473	0,0003	0,0860	0,0869	-0,0009
n-butano	0,2210	3,1510	2,7760	-0,2760	0,6135	0,6964	-0,0610	0,2441	0,2446	-0,0052
trans-2-buteno	0,0383	2,9189	2,5630	-0,1394	0,0982	0,1118	-0,0053	0,0391	0,0393	0,0000
cis-2-buteno	0,0459	2,9189	2,5630	-0,1394	0,1176	0,1340	-0,0064	0,0468	0,0471	0,0000
n-pentano	0,0000	3,8254	3,3160	-0,2784	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	-0,0454
metanol	0,0408	1,4311	1,4320	-0,4356	0,0584	0,0584	-0,0178	0,0232	0,0205	-0,1366
MTBE	0,0001	4,0678	3,6320	-0,8888	0,0004	0,0004	-0,0001	0,0001	0,0001	-0,0708

$\sum x_j \cdot q_j$	2,5134
$\sum x_j \cdot r_j$	2,8467
$\sum x_j \cdot l_j$	-0,1800

Tabla 5.9. Cálculo de la parte combinatorial en la cabeza.

• Fondo

	$x_j$	$r_j$	$q_j$	$l_j$	$x_j \cdot q_j$	$x_j \cdot r_j$	$x_j \cdot l_j$	$\Phi_i$	$\theta_j$	$\ln \gamma_i(c)$
metanol	0,01	1,4311	1,4320	-0,4356	0,0105	0,0104	-0,0032	0,0029	0,0026	-0,3489
MTBE	0,99	4,0678	3,6320	-0,8888	3,6055	4,0381	-0,8823	0,9971	0,9974	0,0000

$\sum x_j \cdot q_j$	3,6159
$\sum x_j \cdot r_j$	4,0486
$\sum x_j \cdot l_j$	-0,8855

Tabla 5.10. Cálculo de la parte combinatorial en el fondo.

**Parte residual**

La parte residual es algo más compleja.

$$\Theta = \begin{pmatrix} \theta_1^{(1)}, \theta_2^{(1)}, \dots, \theta_k^{(1)} \\ \vdots \\ \theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}, \dots, \theta_k^{(j)} \end{pmatrix}$$

$$\theta_k^{(j)} = \frac{X_k^{(j)} Q_k}{\sum_k X_k^{(j)} Q_k} = \frac{X_k^{(j)} Q_k}{X Q^T}$$

$$X_k^{(j)} = \frac{v_k^{(j)}}{\sum_k v_k^{(j)}}$$

• **Cabeza**

	X <sub>j</sub>									ΣX <sub>j</sub> .Q <sub>j</sub>
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH	
Propileno	0,50	0,50	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,0120
Propano	0,67	0,00	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,7453
i-butano	0,75	0,00	0,00	0,25	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,6930
i-buteno	0,67	0,00	0,00	0,00	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,8947
1-buteno	0,33	0,33	0,33	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,8547
1,3-butadieno	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,1760
n-butano	0,50	0,00	0,50	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,6940
trans-2-buteno	0,67	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33	0,00	0,00	0,00	0,8543
cis-2-buteno	0,67	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33	0,00	0,00	0,00	0,8543
n-pentano	0,40	0,00	0,60	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,6632
metanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00	1,4320
MTBE	0,60	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,20	0,00	0,7264
<b>Mezcla</b>	<b>0,4052</b>	<b>0,2372</b>	<b>0,3077</b>	<b>0,0020</b>	<b>0,0060</b>	<b>0,0281</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0136</b>	<b>0,8391</b>

Tabla 5.11. Cálculo de X en la cabeza.

	θ <sub>j</sub>								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
Propileno	0,4190	0,5810	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Propano	0,7585	0,0000	0,2415	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
i-butano	0,9177	0,0000	0,0000	0,0823	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
i-buteno	0,6319	0,0000	0,0000	0,0000	0,3681	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1-buteno	0,3307	0,4587	0,2106	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1,3-butadieno	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
n-butano	0,6110	0,0000	0,3890	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
trans-2-buteno	0,6617	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3383	0,0000	0,0000	0,0000
cis-2-buteno	0,6617	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3383	0,0000	0,0000	0,0000
n-pentano	0,5115	0,0000	0,4885	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
metanol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
MTBE	0,7004	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,2996	0,0000
<b>Mezcla</b>	<b>0,4095</b>	<b>0,3325</b>	<b>0,1980</b>	<b>0,0005</b>	<b>0,0071</b>	<b>0,0290</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0232</b>

Tabla 5.12. Cálculo de θ<sub>j</sub>.

$$\theta\psi = \begin{pmatrix} (\theta_1^{(1)}\Psi_{11} + \theta_2^{(1)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(1)}\Psi_{k1}) \dots \\ \vdots \\ (\theta_1^{(j)}\Psi_{11} + \theta_2^{(j)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(j)}\Psi_{k1}) \dots \end{pmatrix} \Rightarrow \sum_k \theta_k^{(j)}\Psi_{kj}$$

$$\left(\frac{\theta_j}{\theta\psi}\right)\psi^T = \begin{pmatrix} \frac{\theta_1^{(1)}\Psi_{11}}{(\theta_1^{(1)}\Psi_{11} + \theta_2^{(1)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(1)}\Psi_{k1})} + \dots + \frac{\theta_k^{(1)}\Psi_{1k}}{(\theta_1^{(1)}\Psi_{11} + \theta_2^{(1)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(1)}\Psi_{k1})} \dots \\ \vdots \\ \frac{\theta_1^{(j)}\Psi_{11}}{(\theta_1^{(j)}\Psi_{11} + \theta_2^{(j)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(j)}\Psi_{k1})} + \dots + \frac{\theta_k^{(j)}\Psi_{1k}}{(\theta_1^{(j)}\Psi_{11} + \theta_2^{(j)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(j)}\Psi_{k1})} \dots \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \sum_m \frac{\theta_m^{(j)}\Psi_{jm}}{\sum_n \theta_n^{(j)}\Psi_{jn}}$$

	$\sum \theta_m \psi_{mk}$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
Propileno	1,0665	0,9029	1,0665	1,0665	0,9029	0,9029	1,0665	0,4950	0,1015
Propano	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
i-butano	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
i-buteno	1,0421	0,8536	1,0421	1,0421	0,8536	0,8536	1,0421	0,4832	0,1076
l-buteno	1,0525	0,8746	1,0525	1,0525	0,8746	0,8746	1,0525	0,4882	0,1050
1,3-butadieno	1,1144	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	0,5183	0,0896
n-butano	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
trans-2-buteno	1,0387	0,8467	1,0387	1,0387	0,8467	0,8467	1,0387	0,4815	0,1084
cis-2-buteno	1,0387	0,8467	1,0387	1,0387	0,8467	0,8467	1,0387	0,4815	0,1084
n-pentano	1,0000	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	0,4627	0,1181
metanol	0,9507	1,0391	0,9507	0,9507	1,0391	1,0391	0,9507	1,4829	1,0000
MTBE	0,9325	0,8143	0,9325	0,9325	0,8143	0,8143	0,9325	0,6237	0,2270
<b>Mezcla</b>	<b>1,0410</b>	<b>0,8600</b>	<b>1,0410</b>	<b>1,0410</b>	<b>0,8600</b>	<b>0,8600</b>	<b>1,0410</b>	<b>0,5070</b>	<b>0,1281</b>

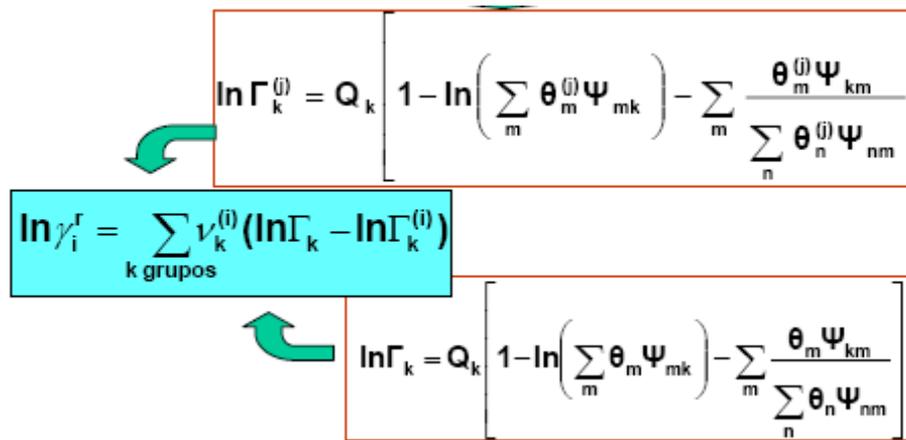
Tabla 5.13. Cálculo de  $\sum \theta_m \psi_{mk}$ .

	$\theta_m / \sum \theta_m \psi_{mk}$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
Propileno	0,3929	0,6435	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Propano	0,7585	0,0000	0,2415	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
i-butano	0,9177	0,0000	0,0000	0,0823	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
i-buteno	0,6064	0,0000	0,0000	0,0000	0,4312	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
l-buteno	0,3142	0,5244	0,2001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1,3-butadieno	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
n-butano	0,6110	0,0000	0,3890	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
trans-2-buteno	0,6371	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3995	0,0000	0,0000	0,0000
cis-2-buteno	0,6371	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3995	0,0000	0,0000	0,0000
n-pentano	0,5115	0,0000	0,4885	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
metanol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
MTBE	0,7512	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,4803	0,0000
<b>Mezcla</b>	<b>0,3934</b>	<b>0,3866</b>	<b>0,1902</b>	<b>0,0005</b>	<b>0,0083</b>	<b>0,0338</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0001</b>	<b>0,1815</b>

Tabla 5.14. Cálculos.

	$\Sigma(\theta_m \Psi_{km} / \Sigma \theta_m \Psi_{mk})$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
Propileno	0,8873	1,0813	0,8873	0,8873	1,0813	1,0813	0,8873	0,8976	1,0421
Propano	1,0000	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	0,7746	0,9507
i-butano	1,0000	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	0,7746	0,9507
i-buteno	0,9377	1,1070	0,9377	0,9377	1,1070	1,1070	0,9377	0,8673	1,0245
1-buteno	0,9173	1,0976	0,9173	0,9173	1,0976	1,0976	0,9173	0,8819	1,0339
1,3-butadieno	0,7683	1,0000	0,7683	0,7683	1,0000	1,0000	0,7683	0,9220	1,0391
n-butano	1,0000	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	0,7746	0,9507
trans-2-buteno	0,9440	1,1095	0,9440	0,9440	1,1095	1,1095	0,9440	0,8618	1,0208
cis-2-buteno	0,9440	1,1095	0,9440	0,9440	1,1095	1,1095	0,9440	0,8618	1,0208
n-pentano	1,0000	1,1144	1,0000	1,0000	1,1144	1,1144	1,0000	0,7746	0,9507
metanol	0,1181	0,0896	0,1181	0,1181	0,0896	0,0896	0,1181	0,4817	1,0000
MTBE	0,9734	1,0861	0,9734	0,9734	1,0861	1,0861	0,9734	1,0622	1,4264
<b>Mezcla</b>	<b>0,9349</b>	<b>1,0959</b>	<b>0,9349</b>	<b>0,9349</b>	<b>1,0959</b>	<b>1,0959</b>	<b>0,9349</b>	<b>0,9352</b>	<b>1,1823</b>

Tabla 5.15. Cálculos.



	$\ln \Gamma_j$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
Propileno	0,0410	0,0245	0,0261	0,0110	0,0206	0,0180	0,0000	0,8765	3,2154
Propano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1296
i-butano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1296
i-buteno	0,0179	0,0603	0,0114	0,0048	0,0507	0,0445	0,0000	0,9357	3,1573
1-buteno	0,0268	0,0428	0,0170	0,0072	0,0359	0,0315	0,0000	0,9085	3,1787
1,3-butadieno	0,1046	0,0000	0,0666	0,0281	0,0000	0,0000	0,0000	0,7999	3,3992
n-butano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1296
trans-2-buteno	0,0153	0,0670	0,0097	0,0041	0,0563	0,0494	0,0000	0,9454	3,1514
cis-2-buteno	0,0153	0,0670	0,0097	0,0041	0,0563	0,0494	0,0000	0,9454	3,1514
n-pentano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1296
metanol	0,7907	1,0256	0,5035	0,2126	0,8616	0,7561	0,0000	0,1352	0,0000
MTBE	0,0818	0,1403	0,0521	0,0220	0,1179	0,1034	0,0000	0,4460	1,5127
<b>Mezcla</b>	<b>0,0211</b>	<b>0,0646</b>	<b>0,0134</b>	<b>0,0057</b>	<b>0,0542</b>	<b>0,0476</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,8096</b>	<b>2,6816</b>

Tabla 5.16. Cálculos.

	$\ln\Gamma_k - \ln\Gamma_{ki}$									$\ln\gamma_i(r)$
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH	
Propileno	-0,0199	0,0401	-0,0127	-0,0054	0,0337	0,0296	0,0000	-0,0669	-0,5338	0,0202
Propano	0,0211	-0,1108	0,0134	0,0057	-0,0931	-0,0817	0,0000	-0,2740	-0,4481	0,0557
i-butano	0,0211	-0,1108	0,0134	0,0057	-0,0931	-0,0817	0,0000	-0,2740	-0,4481	0,0690
i-buteno	0,0032	0,0042	0,0021	0,0009	0,0035	0,0031	0,0000	-0,1262	-0,4757	0,0100
1-buteno	-0,0057	0,0218	-0,0036	-0,0015	0,0183	0,0161	0,0000	-0,0989	-0,4971	0,0125
1,3-butadieno	-0,0835	0,0646	-0,0532	-0,0224	0,0542	0,0476	0,0000	0,0097	-0,7176	0,1291
n-butano	0,0211	-0,1108	0,0134	0,0057	-0,0931	-0,0817	0,0000	-0,2740	-0,4481	0,0691
trans-2-buteno	0,0058	-0,0024	0,0037	0,0016	-0,0020	-0,0018	0,0000	-0,1358	-0,4698	0,0099
cis-2-buteno	0,0058	-0,0024	0,0037	0,0016	-0,0020	-0,0018	0,0000	-0,1358	-0,4698	0,0099
n-pentano	0,0211	-0,1108	0,0134	0,0057	-0,0931	-0,0817	0,0000	-0,2740	-0,4481	0,0825
metanol	-0,7696	-0,9610	-0,4901	-0,2069	-0,8074	-0,7085	0,0000	0,6744	2,6816	2,6816
MTBE	-0,0607	-0,0757	-0,0387	-0,0163	-0,0636	-0,0558	0,0000	0,3636	1,1689	0,1814

Tabla 5.17. Cálculos.

	$\ln\gamma_i(c)$	$\ln\gamma_i(r)$	$\ln\gamma_i$	$\gamma_i$
Propileno	-0,0238	0,0202	-0,0036	0,9964
Propano	-0,0064	0,0557	0,0492	1,0505
i-butano	-0,0051	0,0690	0,0639	1,0659
i-buteno	0,0106	0,0100	0,0206	1,0208
1-buteno	0,0000	0,0125	0,0125	1,0126
1,3-butadieno	-0,0009	0,1291	0,1283	1,1368
n-butano	-0,0052	0,0691	0,0639	1,0660
trans-2-buteno	0,0000	0,0099	0,0099	1,0099
cis-2-buteno	0,0000	0,0099	0,0099	1,0099
n-pentano	-0,0454	0,0825	0,0372	1,0379
metanol	-0,1366	2,6816	2,5450	12,7432
MTBE	-0,0708	0,1814	0,1107	1,1170

Tabla 5.18. Cálculo del coeficiente de actividad en la cabeza.

• Fondo

	$X_i$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
metanol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00
MTBE	0,60	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,20	0,20	0,00
<b>Mezcla</b>	<b>0,5991</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,1997</b>	<b>0,1997</b>	<b>0,0015</b>

Tabla 5.19. Cálculos.

	$\theta_j$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
metanol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
MTBE	0,7004	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,2996	0,0000
<b>MEZCLA</b>	<b>0,6984</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,2987</b>	<b>0,0029</b>

Tabla 5.20. Cálculos.

	$\Sigma\theta_m \cdot \psi_{mk}$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
metanol	0,9610	1,0306	0,9610	0,9610	1,0306	1,0306	0,9610	1,3630	1,0000
MTBE	0,9455	0,8504	0,9455	0,9455	0,8504	0,8504	0,9455	0,6818	0,2994
MEZCLA	<b>0,9456</b>	<b>0,8509</b>	<b>0,9456</b>	<b>0,9456</b>	<b>0,8509</b>	<b>0,8509</b>	<b>0,9456</b>	<b>0,6838</b>	<b>0,3014</b>

Tabla 5.21. Cálculos.

	$\theta_m / \Sigma\theta_m \cdot \psi_{mk}$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
metanol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
MTBE	0,7408	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,4394	0,0000
MEZCLA	<b>0,7386</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,4368</b>	<b>0,0096</b>

Tabla 5.22. Cálculos.

	$\Sigma(\theta_m \cdot \psi_{km} / \Sigma\theta_m \cdot \psi_{mk})$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
metanol	0,1866	0,1501	0,1866	0,1866	0,1501	0,1501	0,1866	0,5632	1,0000
MTBE	0,9806	1,0688	0,9806	0,9806	1,0688	1,0688	0,9806	1,0454	1,3108
MEZCLA	<b>0,9788</b>	<b>1,0663</b>	<b>0,9788</b>	<b>0,9788</b>	<b>1,0663</b>	<b>1,0663</b>	<b>0,9788</b>	<b>1,0465</b>	<b>1,3148</b>

Tabla 5.23. Cálculos.

	$\ln\Gamma_i$								
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH
metanol	0,7235	0,9640	0,4607	0,1945	0,8099	0,7107	0,0000	0,1383	0,0000
MTBE	0,0640	0,1097	0,0407	0,0172	0,0921	0,0809	0,0000	0,3673	1,2819
MEZCLA	<b>0,0654</b>	<b>0,1118</b>	<b>0,0417</b>	<b>0,0176</b>	<b>0,0939</b>	<b>0,0824</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,3630</b>	<b>1,2665</b>

Tabla 5.24. Cálculos.

	$\ln\Gamma_k - \ln\Gamma_{kj}$									$\ln\gamma_i(r)$
	CH <sub>3</sub>	CH <sub>2</sub> CH-	CH <sub>2</sub>	CH	CH <sub>2</sub> =C-	CH=CH	C	CH <sub>3</sub> O	CH <sub>3</sub> -OH	
metanol	-0,6581	-0,8522	-0,4190	-0,1769	-0,7160	-0,6283	0,0000	0,2247	1,2665	1,2665
MTBE	0,0015	0,0022	0,0009	0,0004	0,0018	0,0016	0,0000	-0,0043	-0,0155	0,0001

Tabla 5.25. Cálculos.

	$\ln\gamma_i(c)$	$\ln\gamma_i(r)$	$\ln\gamma_i$	$\gamma_i$
metanol	-0,3489	1,2665	0,9176	2,5033
MTBE	0,0000	0,0001	0,0000	1,0000

Tabla 5.26. Cálculo de los coeficientes de actividad en el fondo.

**TABLAS DEL MÉTODO UNIFAC**

Datos de números primarios y secundarios de los grupos, además de Q y R

**TABLE 8-23** UNIFAC Group Specifications and Sample Group Assignments (Hansen, et al., 1991)

Group numbers		Name	Volume R	Surface Area Q	Sample Assignments = (Number of Occurrences) × (Secondary Group Number)
Main	Secondary				
1	1	CH <sub>3</sub>	0.9011	0.848	Hexane = (2)(1) + (4)(2) 2-Methylpropane = (3)(1) + (1)(3) Neopentane = (4)(1) + (1)(4) 2,2,4-Trimethylpentane = (5)(1) + (1)(2) + (1)(3) + (1)(4)
	2	CH <sub>2</sub>	0.6744	0.540	
	3	CH	0.4469	0.228	
	4	C	0.2195	0.000	
2	5	CH <sub>2</sub> =CH	1.3454	1.176	3-Methyl-1-hexene = (2)(1) + (2)(2) + (1)(3) + (1)(5) Hexene-2 = (2)(1) + (2)(2) + (1)(6) 2-Methyl-1-butene = (2)(1) + (1)(2) + (1)(7) 2-Methyl-2-butene = (3)(1) + (1)(8) 2,3-Dimethylbutene = (4)(1) + (1)(70)
	6	CH=CH	1.1167	0.867	
	7	CH <sub>2</sub> =C	1.1173	0.988	
	8	CH=C	0.8886	0.676	
3	9	ACH	0.5313	0.400	Benzene = (6)(9) Styrene = (1)(5) + (5)(9) + (1)(10)
	10	AC	0.3652	0.120	
4	11	ACCH <sub>3</sub>	1.2663	0.968	Toluene = (5)(9) + (1)(11) Ethylbenzene = (1)(1) + (5)(9) + (1)(12) Cumene = (2)(1) + (5)(9) + (1)(13)
	12	ACCH <sub>2</sub>	1.0396	0.660	
	13	ACCH	0.8121	0.348	
5	14	OH	1.0000	1.200	Ethanol = (1)(1) + (1)(2) + (1)(14)
6	15	CH <sub>2</sub> OH	1.4311	1.432	Methanol = (1)(15)
7	16	H <sub>2</sub> O	0.9200	1.400	Water = (1)(16)
8	17	ACOH	0.8952	0.680	Phenol = (5)(9) + (1)(17)
9	18	CH <sub>2</sub> CO	1.6724	1.488	Methylethylketone = (1)(1) + (1)(2) + (1)(18) Ethylphenylketone = (1)(1) + (1)(19) + (5)(9) + (1)(10)
	19	CH <sub>3</sub> CO	1.4457	1.180	
10	20	CHO	0.9980	0.948	Hexanal = (1)(1) + (4)(2) + (1)(20)
11	21	CH <sub>3</sub> COO	1.9031	1.728	Butyl acetate = (1)(1) + (3)(2) + (1)(21) Methyl propionate = (2)(1) + (1)(22)
	22	CH <sub>2</sub> COO	1.6764	1.420	
12	23	HCOO	1.2420	1.188	Ethyl formate = (1)(1) + (1)(2) + (1)(23)
13	24	CH <sub>2</sub> O	1.1450	1.088	Dimethyl ether = (1)(1) + (1)(24) Diethyl ether = (2)(1) + (1)(2) + (1)(25) Diisopropyl ether = (4)(1) + (1)(3) + (1)(26) Tetrahydrofuran = (3)(2) + (1)(27)
	25	CH <sub>3</sub> O	0.9183	0.780	
	26	CHO	0.6908	0.468	
	27	THF	0.9183	1.100	
14	28	CH <sub>3</sub> NH <sub>2</sub>	1.5959	1.544	Methylamine = (1)(28) Ethylamine = (1)(1) + (1)(29) Isopropylamine = (2)(1) + (1)(30)
	29	CH <sub>2</sub> NH <sub>2</sub>	1.3692	1.236	
	30	CHNH <sub>2</sub>	1.1417	0.924	
15	31	CH <sub>3</sub> NH	1.4337	1.244	Dimethyl amine = (1)(1) + (1)(31) Diethylamine = (2)(1) + (1)(2) + (1)(32) Diisopropylamine = (4)(1) + (1)(3) + (1)(33)
	32	CH <sub>2</sub> NH	1.2070	0.936	
	33	CHNH	0.9795	0.624	
16	34	CH <sub>3</sub> N	1.1865	0.940	Trimethylamine = (2)(1) + (1)(34) Triethylamine = (3)(1) + (2)(2) + (1)(35)
	35	CH <sub>2</sub> N	0.9597	0.632	
17	36	ACNH <sub>2</sub>	1.0600	0.816	Aniline = (5)(9) + (1)(36)
18	37	C <sub>4</sub> H <sub>5</sub> N	2.9993	2.113	Pyridine = (1)(37) 2-Methylpyridine = (1)(1) + (1)(38) 2,3-Dimethylpyridine = (2)(1) + (1)(39)
	38	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub> N	2.8332	1.833	
	39	C <sub>2</sub> H <sub>3</sub> N	2.6670	1.553	
19	40	CH <sub>3</sub> CN	1.8701	1.724	Acetonitrile = (1)(40) Propionitrile = (1)(1) + (1)(41)
	41	CH <sub>2</sub> CN	1.6434	1.416	
20	42	COOH	1.3013	1.224	Acetic Acid = (1)(1) + (1)(42) Formic Acid = (1)(43)
	43	HCOOH	1.5280	1.532	
21	44	CH <sub>2</sub> Cl	1.4654	1.264	1-Chlorobutane = (1)(1) + (2)(2) + (1)(44) 2-Chloropropane = (2)(1) + (1)(45) 2-Chloro-2-methylpropane = (3)(1) + (1)(46)
	45	CHCl	1.2380	0.952	
	46	CCl	1.0060	0.724	
22	47	CH <sub>2</sub> Cl <sub>2</sub>	2.2564	1.988	Dichloromethane = (1)(47) 1,1-Dichloroethane = (1)(1) + (1)(48) 2,2-Dichloropropane = (2)(1) + (1)(49)
	48	CHCl <sub>2</sub>	2.0606	1.684	
	49	CCl <sub>2</sub>	1.8016	1.448	
23	50	CHCl <sub>3</sub>	2.8700	2.410	Chloroform = (1)(50) 1,1,1-Trichloroethane = (1)(1) + (1)(51)
	51	CCl <sub>3</sub>	2.6401	2.184	

TABLE 8-23 UNIFAC Group Specifications and Sample Group Assignments (Hansen, et al., 1991) (Continued)

Group numbers		Name	Volume <i>R</i>	Surface Area <i>Q</i>	Sample Assignments = (Number of Occurrences) × (Secondary Group Number)
Main	Secondary				
24	52	CCl <sub>4</sub>	3.3900	2.910	Tetrachloromethane = (1)(52)
25	53	ACCl	1.1562	0.844	Chlorobenzene = (5)(9) + (1)(53)
26	54	CH <sub>3</sub> NO <sub>2</sub>	2.0086	1.868	Nitromethane = (1)(54)
	55	CH <sub>2</sub> NO <sub>2</sub>	1.7818	1.560	Nitroethane = (1)(1) + (1)(55)
	56	CHNO <sub>2</sub>	1.5544	1.248	2-Nitropropane = (2)(1) + (1)(56)
27	57	ACNO <sub>2</sub>	1.4199	1.104	Nitrobenzene = (5)(9) + (1)(57)
28	58	CS <sub>2</sub>	2.5070	1.650	Carbon disulfide = (1)(58)
29	59	CH <sub>3</sub> SH	1.8770	1.676	Methanethiol = (1)(59)
	60	CH <sub>2</sub> SH	1.6510	1.368	Ethanethiol = (1)(1) + (1)(60)
30	61	Furfural	3.1680	2.481	Furfural = (1)(61)
31	62	DOH	2.4088	2.248	1,2-Ethanediol = (1)(62)
32	63	I	1.2640	0.992	Iodoethane = (1)(1) + (1)(2) + (1)(63)
33	64	Br	0.9492	0.832	Bromoethane = (1)(1) + (1)(2) + (1)(64)
34	65	CH=C	1.2929	1.088	1-Hexyne = (1)(1) + (3)(2) + (1)(65)
	66	C=C	1.0613	0.784	2-Hexyne = (2)(1) + (2)(2) + (1)(66)
35	67	DMSO	2.8266	2.472	Dimethylsulfoxide = (1)(67)
36	68	Acrylonitrile	2.3144	2.052	Acrylonitrile = (1)(68)
37	69	Cl-(C=C)	0.7910	0.724	Trichloroethylene = (1)(8) + (3)(69)
38	71	ACF	0.6948	0.524	Fluorobenzene = (5)(9) + (1)(71)
39	72	DMF	3.0856	2.736	<i>N,N</i> -Dimethylformamide = (1)(72)
	73	HCON(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	2.6322	2.120	<i>N,N</i> -Diethylformamide = (2)(1) + (1)(73)
40	74	CF <sub>3</sub>	1.4060	1.380	Perfluoroethane = (2)(74)
	75	CF <sub>2</sub>	1.0105	0.920	
	76	CF	0.6150	0.460	Perfluoromethylcyclohexane = (1)(74) + (5)(75) + (1)(76)
41	77	COO	1.3800	1.200	Butyrate = (2)(1) + (3)(2) + (1)(77)
42	78	SiH <sub>4</sub>	1.6035	1.263	Methylsilane = (1)(1) + (1)(78)
	79	SiH <sub>3</sub>	1.4443	1.006	Diethylsilane = (2)(1) + (2)(2) + (1)(79)
	80	SiH <sub>2</sub>	1.2851	0.749	Trimethylsilane = (3)(1) + (1)(80)
	81	SiH	1.0470	0.410	Tetramethylsilane = (4)(1) + (1)(81)
43	82	SiH <sub>2</sub> O	1.4838	1.062	
	83	SiHO	1.3030	0.764	
	84	SiO	1.1044	0.466	Hexamethyldisiloxane = (6)(1) + (1)(81) + (1)(84)
44	85	NMP	3.9810	3.200	<i>N</i> -Methylpyrrolidone = (1)(85)
45	86	CCl <sub>3</sub> F	3.0356	2.644	Trichlorofluoromethane = (1)(86)
	87	CCl <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	2.2287	1.916	Tetrachloro-1,2-difluoroethane = (2)(87)
	88	HCCL <sub>2</sub> F	2.4060	2.116	Dichlorofluoromethane = (1)(88)
	89	HCCIF	1.6493	1.416	2-Chloro-2-fluoroethane = (1)(1) + (1)(89)
	90	CClF <sub>2</sub>	1.8174	1.648	2-Chloro-2,2-difluoroethane = (1)(1) + (1)(90)
	91	HCCIF <sub>2</sub>	1.9670	1.828	Chlorodifluoromethane = (1)(91)
	92	CClF <sub>3</sub>	2.1721	2.100	Chlorotrifluoromethane = (1)(92)
46	93	CCl <sub>2</sub> F <sub>2</sub>	2.6243	2.376	Dichlorodifluoroethane = (1)(93)
	94	CONH <sub>2</sub>	1.4515	1.248	Acetamide = (1)(1) + (1)(94)
	95	CONHCH <sub>3</sub>	2.1905	1.796	<i>N</i> -Methylacetamide = (1)(1) + (1)(95)
	96	CONHCH <sub>2</sub>	1.9637	1.488	<i>N</i> -Ethylacetamide = (2)(1) + (1)(96)
	97	CON(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	2.8589	2.428	<i>N,N</i> -Dimethylacetamide = (1)(1) + (1)(97)
	98	CONCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	2.6322	2.120	<i>N,N</i> -Methylethylacetamide = (2)(1) + (1)(98)
	99	CON(CH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub>	2.4054	1.812	<i>N,N</i> -Diethylacetamide = (3)(1) + (1)(99)
47	100	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> O <sub>2</sub>	2.1226	1.904	2-Ethoxyethanol = (1)(1) + (1)(2) + (1)(100)
	101	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub> O <sub>2</sub>	1.8952	1.592	2-Ethoxy-1-propanol = (2)(1) + (1)(2) + (1)(101)
48	102	CH <sub>3</sub> S	1.6130	1.368	Dimethylsulfide = (1)(1) + (1)(102)
	103	CH <sub>2</sub> S	1.3863	1.060	Diethylsulfide = (2)(1) + (1)(2) + (1)(103)
	104	CHS	1.1589	0.748	Diisopropylsulfide = (4)(1) + (1)(3) + (1)(104)
49	105	MORPH	3.4740	2.796	Morpholine = (1)(105)
50	106	C <sub>6</sub> H <sub>4</sub> S	2.8569	2.140	Thiophene = (1)(106)
	107	C <sub>6</sub> H <sub>3</sub> S	2.6908	1.860	2-Methylthiophene = (1)(1) + (1)(107)
	108	C <sub>6</sub> H <sub>2</sub> S	2.5247	1.580	2,3-Dimethylthiophene = (2)(1) + (1)(108)

Datos de la matriz de iteraciones entre grupos:

TABLE 8-24 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters,  $a_{mn}$ , in Kelvins

(números principales)

Main group	n = 1	2	3	4	5	6	7	8	9
n = 1	0.0	86.02	61.13	76.50	986.5	697.2	1318	1333	476.4
2	-35.36	0.0	38.81	74.15	524.1	787.6	-270.6	526.1	182.6
3	-11.12	3.446	0.0	167.0	636.1	637.4	903.8	1329	25.77
4	-69.70	-113.6	-146.8	0.0	803.2	603.3	5695	884.9	-52.10
5	156.4	457.0	89.60	25.82	0.0	-137.1	353.5	-259.7	84.00
6	16.51	-12.52	-50.00	-44.50	249.1	0.0	-181.0	-101.7	23.39
7	300.0	496.1	362.3	377.6	-229.1	289.6	0.0	324.5	-195.4
8	275.8	217.5	24.34	244.2	-451.6	-265.2	-601.8	0.0	-356.1
9	26.76	42.92	140.1	365.8	164.5	108.7	472.5	-133.1	0.0
10	505.7	56.30	23.39	106.0	529.0	-340.2	480.8	-155.6	128.0
11	114.8	132.1	85.84	-170.0	245.4	249.6	200.8	-36.72	372.2
12	329.3	110.4	18.12	428.0	139.4	227.8	NA	NA	385.4
13	83.36	26.51	52.13	65.69	237.7	238.4	-314.7	-178.5	191.1
14	-30.48	1.163	-44.85	296.4	-242.8	-481.7	-330.4	NA	NA
15	65.33	-28.70	-22.31	223.0	-150.0	-370.3	-448.2	NA	394.6
16	-83.98	-25.38	-223.9	109.9	28.60	-406.8	-598.8	NA	225.3
17	1139	2000	247.5	762.8	-17.40	-118.1	-341.6	-253.1	-450.3
18	-101.6	-47.63	31.87	49.80	-132.3	-378.2	-332.9	-341.6	29.10
19	24.82	-40.62	-22.97	-138.4	185.4	162.6	242.8	NA	-287.5
20	315.3	1264	62.32	89.86	-151.0	339.8	-66.17	-11.00	-297.8
21	91.46	40.25	4.680	122.9	562.2	529.0	698.2	NA	286.3
22	34.01	-23.50	121.3	140.8	527.6	669.9	708.7	NA	82.86
23	36.70	51.06	288.5	69.90	742.1	649.1	826.8	NA	552.1
24	-78.45	160.9	-4.700	134.7	856.3	709.6	1201	10000	372.0
25	106.8	70.32	-97.27	402.5	325.7	612.8	-274.5	622.3	518.4
26	-32.69	-1.996	10.38	-97.05	261.6	252.6	417.9	NA	-142.6
27	5541	NA	1824	-127.8	561.6	NA	360.7	NA	-101.5
28	-52.65	16.62	21.50	40.68	609.8	914.2	1081	1421	303.7
29	-7.481	NA	28.41	19.56	461.6	448.6	NA	NA	160.6
30	-25.31	82.64	157.3	128.8	521.6	NA	23.48	NA	317.5

Main group	n = 1	2	3	4	5	6	7	8	9
m = 31	139.9	NA	221.4	150.6	267.6	240.8	-137.4	838.4	135.4
32	128.0	NA	58.68	26.41	501.3	431.3	NA	NA	138.0
33	-31.52	174.6	-154.2	1112	524.9	494.7	NA	NA	-142.6
34	-72.88	41.38	NA	NA	68.95	NA	NA	NA	443.6
35	50.49	64.07	-2.504	-143.2	-25.87	695.0	-240.0	NA	110.4
36	-165.9	573.0	-123.6	397.4	389.3	218.8	386.6	NA	NA
37	47.41	124.2	395.8	419.1	738.9	528.0	NA	NA	-40.90
38	-5.132	-131.7	-237.2	-157.3	649.7	645.9	NA	NA	NA
39	-31.95	249.0	-133.9	-240.2	64.16	172.2	-287.1	NA	97.04
40	147.3	62.40	140.6	NA	NA	NA	NA	NA	NA
41	529.0	1397	317.6	615.8	88.63	171.0	284.4	-167.3	123.4
42	-34.26	NA	787.9	NA	191.3	NA	180.2	NA	992.4
43	110.2	NA	234.4	NA	NA	NA	NA	NA	NA
44	13.89	-16.11	-23.88	6.214	796.9	NA	832.2	-234.7	NA
45	30.74	NA	167.9	NA	794.4	762.7	NA	NA	NA
46	27.97	9.755	NA	NA	394.8	NA	-509.3	NA	NA
47	-11.92	132.4	-86.88	-19.45	517.5	NA	-205.7	NA	156.4
48	39.93	543.6	NA	NA	NA	420.0	NA	NA	NA
49	-23.61	161.1	142.9	274.1	-61.20	-89.24	-384.3	NA	NA
50	-8.479	NA	23.93	2.845	682.5	597.8	NA	810.5	278.8

TABLE 8-24 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters,  $a_{mn}$ , in Kelvins (Continued)

Main group	n = 10	11	12	13	14	15	16	17	18
m = 1	677.0	232.1	507.0	251.5	391.5	255.7	206.6	920.7	287.8
2	448.8	37.85	333.5	214.5	240.9	163.9	61.11	749.3	280.5
3	347.3	5.994	287.1	32.14	161.7	122.8	90.49	648.2	-4.449
4	586.8	5688	197.8	213.1	19.02	-49.29	23.50	664.2	52.80
5	-203.6	101.1	267.8	28.06	8.642	42.70	-323.0	-52.39	170.0
6	306.4	-10.72	179.7	-128.6	359.3	-20.98	53.90	489.7	580.5
7	-116.0	72.87	NA	540.5	48.89	168.0	304.0	243.2	459.0
8	-271.1	-449.4	NA	-162.9	NA	NA	NA	119.9	-305.5
9	-37.36	-213.7	-190.4	-103.6	NA	-174.2	-169.0	6201	7.341
10	0.0	-110.3	766.0	304.1	NA	NA	NA	NA	NA
11	185.1	0.0	-241.8	-235.7	NA	-73.50	-196.7	475.5	NA
12	-236.5	1167	0.0	-234.0	NA	NA	NA	NA	-233.4
13	-7.838	461.3	457.3	0.0	-78.36	251.5	5422	NA	213.2
14	NA	NA	NA	222.1	0.0	-107.2	-41.11	-200.7	NA
15	NA	136.0	NA	-56.08	127.4	0.0	-189.2	NA	NA
16	NA	2889	NA	-194.1	38.89	865.9	0.0	NA	NA
17	NA	-294.8	NA	NA	-15.07	NA	NA	0.0	89.70
18	NA	NA	554.4	-156.1	NA	NA	NA	117.4	0.0
19	NA	-266.6	99.37	38.81	-157.3	-108.5	NA	777.4	134.3
20	-165.5	-256.3	193.9	-338.5	NA	NA	NA	493.8	-313.5
21	-47.51	35.38	NA	225.4	131.2	NA	NA	429.7	NA
22	190.6	-133.0	NA	-197.7	NA	NA	-141.4	140.8	587.3
23	242.8	176.5	235.6	-20.93	NA	NA	-293.7	NA	18.98
24	NA	129.5	351.9	113.9	261.1	91.13	316.9	898.2	368.5
25	NA	-171.1	383.3	-25.15	108.5	102.2	2951	334.9	NA
26	NA	129.3	NA	-94.49	NA	NA	NA	NA	NA
27	NA	134.9	2475						
28	NA	243.8	NA	112.4	NA	NA	NA	NA	NA
29	NA	NA	201.5	63.71	106.7	NA	NA	NA	NA
30	NA	-146.3	NA	-87.31	NA	NA	NA	NA	NA

Main group	n = 10	11	12	13	14	15	16	17	18
n = 31	NA	152.0	NA	9.207	NA	NA	NA	192.3	NA
32	245.9	21.92	NA	476.6	NA	NA	NA	NA	NA
33	NA	24.37	NA	736.4	NA	NA	NA	NA	-42.71
34	NA								
35	NA	41.57	NA	-93.51	NA	NA	-257.2	NA	NA
36	354.0	175.5	NA						
37	183.8	611.3	134.5	-217.9	NA	NA	NA	NA	281.6
38	NA	NA	NA	167.3	NA	-198.8	116.5	NA	159.8
39	13.89	-82.12	-116.7	-155.2	49.70	NA	-185.2	343.7	NA
40	NA								
41	577.5	-234.9	145.4	-247.8	NA	284.5	NA	-22.10	NA
42	NA	NA	NA	448.5	961.8	1464	NA	NA	NA
43	NA	NA	NA	NA	-125.2	1604	NA	NA	NA
44	NA								
45	NA								
46	NA								
47	NA	-3.444	NA						
48	NA								
49	NA								
50	NA	221.4							

TABLE 8-24 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters,  $a_{mn}$ , in Kelvins (Continued)

Main group	n = 19	20	21	22	23	24	25	26	27
n = 1	597.0	663.5	35.93	53.76	24.90	104.3	11.44	661.5	543.0
2	336.9	318.9	-36.87	58.55	-13.99	-109.7	100.1	357.5	NA
3	212.5	537.4	-18.81	-144.4	-231.9	3.000	187.0	168.0	194.9
4	6096	872.3	-114.1	-111.0	-80.25	-141.3	-211.0	3629	4448
5	6.712	199.0	75.62	65.28	-98.12	143.1	123.5	256.5	157.1
6	53.28	-202.0	-38.32	-102.5	-139.4	-44.76	-28.25	75.14	NA
7	112.6	-14.09	325.4	370.4	353.7	497.5	133.9	220.6	399.5
8	NA	408.9	NA	NA	NA	1827	6915	NA	NA
9	481.7	669.4	-191.7	-130.3	-354.6	-39.20	-119.8	137.5	548.5
10	NA	497.5	751.9	67.52	-483.7	NA	NA	NA	NA
11	494.6	660.2	-34.74	108.9	-209.7	54.57	442.4	-81.13	NA
12	-47.25	-268.1	NA	NA	-126.2	179.7	24.28	NA	NA
13	-18.51	664.6	301.1	137.8	-154.3	47.67	134.8	95.18	NA
14	358.9	NA	-82.92	NA	NA	-99.81	30.05	NA	NA
15	147.1	NA	NA	NA	NA	71.23	-18.93	NA	NA
16	NA	NA	NA	-73.85	-352.9	-262.0	-181.9	NA	NA
17	-281.6	-396.0	287.0	-111.0	NA	882.0	617.5	NA	-139.3
18	-169.7	-153.7	NA	-351.6	-114.7	-205.3	NA	NA	2845
19	0.0	NA	4.933	-152.7	-15.62	-54.86	-4.624	-0.5150	NA
20	NA	0.0	13.41	-44.70	39.63	183.4	-79.08	NA	NA
21	54.32	519.1	0.0	108.3	249.6	62.42	153.0	32.73	86.20
22	258.6	543.3	-84.53	0.0	0.0	56.33	223.1	108.9	NA
23	74.04	504.2	-157.1	0.0	0.0	-30.10	192.1	NA	NA
24	492.0	631	11.80	17.97	51.90	0.0	-75.97	490.9	534.7
25	363.5	993.4	-129.7	-8.309	-0.2266	248.4	0.0	132.7	2213
26	0.2830	NA	113.0	-9.639	NA	-34.68	132.9	0.0	533.2
27	NA	NA	1971	NA	NA	514.6	-123.1	-85.12	0.0
28	335.7	NA	-73.09	NA	-26.06	-60.71	NA	277.8	NA
29	161.0	NA	-27.94	NA	NA	NA	NA	NA	NA
30	NA	570.6	NA	NA	48.48	-133.2	NA	NA	NA

Main group	n = 19	20	21	22	23	24	25	26	27
m = 31	169.6	NA	NA	NA	NA	NA	NA	481.3	NA
32	NA	616.6	NA	-40.82	21.76	48.49	NA	64.28	2448
33	136.9	5256	-262.3	-174.5	NA	77.55	-185.3	125.3	4288
34	329.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	174.4	NA
35	NA	-180.2	NA	-215.0	-343.6	-58.43	NA	NA	NA
36	-42.31	NA	NA	NA	NA	-85.15	NA	NA	NA
37	335.2	898.2	383.2	301.9	-149.8	-134.2	NA	379.4	NA
38	NA	NA	NA	NA	NA	-124.6	NA	NA	NA
39	150.6	-97.77	NA	NA	NA	-186.7	NA	223.6	NA
40	NA	NA	NA						
41	-61.6	1179	182.2	305.4	-193.0	335.7	956.1	NA	NA
42	NA	NA	NA						
43	NA	NA	NA	NA	NA	70.81	NA	NA	NA
44	NA	NA	NA	NA	-196.2	NA	161.5	NA	NA
45	NA	844	NA						
46	NA	-70.25	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
47	119.2	NA	NA	-194.7	NA	3.163	7.082	NA	NA
48	NA	NA	NA	NA	-363.1	-11.30	NA	NA	NA
49	NA	NA	NA						
50	NA	NA	NA	NA	NA	-79.34	NA	176.3	NA

ABLE 8-24 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters,  $a_{mn}$ , in Kelvins (Continued)

Main group	n = 28	29	30	31	32	33	34	35	36
n = 1	153.6	184.4	354.6	3025	335.8	479.5	298.9	526.5	689.0
2	76.30	NA	262.9	NA	NA	183.8	31.14	179.0	-52.87
3	52.07	-10.43	-64.69	210.7	113.3	261.3	NA	169.9	383.9
4	-9.451	393.6	48.49	4975	259.0	210.0	NA	4284	-119.2
5	488.9	147.5	-120.5	-318.9	313.5	202.1	727.8	-202.1	74.27
6	-31.09	17.50	NA	-119.2	212.1	106.3	NA	-399.3	-5.224
7	887.1	NA	188.0	12.72	NA	NA	NA	NA	160.8
8	8484	NA	NA	-687.1	NA	NA	NA	NA	NA
9	216.1	-46.28	-163.7	71.46	53.59	245.2	-246.6	-44.58	NA
10	NA	NA	NA	NA	117.0	NA	NA	NA	-339.2
11	183.0	NA	202.3	-101.7	148.3	18.88	NA	52.08	-28.61
12	NA	103.9	NA						
13	140.9	-8.538	170.1	-20.11	-149.5	-202.3	NA	128.8	NA
14	NA	-70.14	NA						
15	NA	243.1	NA						
16	NA								
17	NA	NA	NA	0.1004	NA	NA	NA	NA	NA
18	NA	NA	NA	NA	NA	-60.78	NA	NA	NA
19	230.9	0.4604	NA	177.5	NA	-62.17	-203.0	NA	81.57
20	NA	NA	-208.9	NA	228.4	-95.00	NA	-463.6	NA
21	450.1	59.02	NA	NA	NA	344.4	NA	NA	NA
22	NA	NA	NA	NA	177.6	315.9	NA	215.0	NA
23	116.6	NA	-64.38	NA	86.40	NA	NA	337.7	369.5
24	132.2	NA	546.7	NA	247.8	146.6	NA	NA	NA
25	NA	NA	NA	NA	NA	593.4	NA	NA	NA
26	320.2	NA	NA	139.8	304.3	10.17	-27.70	NA	NA
27	NA	NA	NA	NA	2990	-124.0	NA	NA	NA
28	0.0	NA	NA	NA	292.7	NA	NA	NA	NA
29	NA	0.0	NA	NA	NA	NA	NA	31.66	NA
30	NA	NA	0.0	NA	NA	NA	NA	NA	NA

Main group	n = 28	29	30	31	32	33	34	35	36
m = 31	NA	NA	NA	0.0	NA	NA	NA	-417.2	NA
32	-27.45	NA	NA	NA	0.0	NA	NA	NA	NA
33	NA	NA	NA	NA	NA	0.0	NA	32.90	NA
34	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.0	NA	NA
35	NA	85.70	NA	535.8	NA	-111.2	NA	0.0	NA
36	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.0
37	167.9	NA	NA	NA	NA	NA	631.5	NA	837.2
38	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
39	NA	-71.00	NA	-191.7	NA	NA	6.699	136.6	5.150
40	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
41	885.5	NA	-64.28	-264.3	288.1	627.7	NA	-29.34	-53.91
42	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
43	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
44	NA	-274.1	NA	262.0	NA	NA	NA	NA	NA
45	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
46	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
47	NA	NA	NA	515.8	NA	NA	NA	NA	NA
48	NA	6.971	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
49	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
50	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA

TABLE 8-24 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters,  $\sigma_{mn}$ , in Kelvins (Continued)

Main group	n = 37	38	39	40	41	42	43	44	45
m = 1	-4.189	125.8	485.3	-2.859	387.1	-450.4	252.7	220.3	-5.869
2	-66.46	359.3	-70.45	449.4	48.33	NA	NA	86.46	NA
3	-259.1	389.3	245.6	22.67	103.5	-432.3	238.9	30.04	-88.11
4	-282.5	101.4	5629	NA	69.26	NA	NA	46.38	NA
5	225.8	44.78	-143.9	NA	190.3	-817.7	NA	-504.2	72.96
6	33.47	-48.25	-172.4	NA	165.7	NA	NA	NA	-52.1
7	NA	NA	319.0	NA	-197.5	-363.8	NA	-452.2	NA
8	NA	NA	NA	NA	-494.2	NA	NA	-659.0	NA
9	-34.57	NA	-61.70	NA	-18.80	-588.9	NA	NA	NA
10	172.4	NA	-268.8	NA	-275.5	NA	NA	NA	NA
11	-275.2	NA	85.33	NA	560.2	NA	NA	NA	NA
12	11.40	NA	308.9	NA	-122.3	NA	NA	NA	NA
13	240.20	-274.0	254.8	NA	417.0	1338	NA	NA	NA
14	NA	NA	-164.0	NA	NA	-664.4	275.9	NA	NA
15	NA	570.9	NA	NA	-38.77	448.1	-1327	NA	NA
16	NA	-196.3	22.05	NA	NA	NA	NA	NA	NA
17	NA	NA	-334.4	NA	-89.42	NA	NA	NA	NA
18	160.7	-158.8	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
19	-55.77	NA	-151.5	NA	120.3	NA	NA	NA	NA
20	-11.16	NA	-228.0	NA	-337.0	NA	NA	NA	NA
21	-168.2	NA	NA	NA	63.67	NA	NA	NA	NA
22	-91.80	NA	NA	NA	-96.87	NA	NA	NA	NA
23	111.2	NA	NA	NA	255.8	NA	NA	-35.68	NA
24	1187.1	215.2	498.6	NA	256.5	NA	233.1	NA	NA
25	NA	NA	NA	NA	-71.18	NA	NA	-209.7	NA
26	10.76	NA	-223.1	NA	248.4	NA	NA	NA	-218.9
27	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
28	-47.37	NA	NA	NA	469.8	NA	NA	NA	NA
29	NA	NA	78.92	NA	NA	NA	NA	1004	NA
30	NA	NA	NA	NA	43.37	NA	NA	NA	NA

Main group	n = 37	38	39	40	41	42	43	44	45
n = 31	NA	NA	302.2	NA	347.8	NA	NA	-262	NA
32	NA	NA	NA	NA	68.55	NA	NA	NA	NA
33	NA	NA	NA	NA	-195.1	NA	NA	NA	NA
34	2073	NA	-119.8	NA	NA	NA	NA	NA	NA
35	NA	NA	-97.71	NA	153.7	NA	NA	NA	NA
36	-208.8	NA	-8.804	NA	423.4	NA	NA	NA	NA
37	0.0	NA	255.0	NA	730.8	NA	NA	26.35	NA
38	NA	0.0	NA	-117.2	NA	NA	NA	NA	NA
39	137.7	NA	0.0	-5.579	72.31	NA	NA	NA	NA
40	NA	185.6	55.80	0.0	NA	NA	NA	NA	111.8
41	-198.0	NA	-28.65	NA	0.0	NA	NA	NA	NA
42	NA	NA	NA	NA	NA	0.0	-2166	NA	NA
43	NA	NA	NA	NA	NA	745.3	0.0	NA	NA
44	-66.31	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.0	NA
45	NA	NA	NA	-32.17	NA	NA	NA	NA	0.0
46	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
47	NA	NA	NA	NA	101.2	NA	NA	NA	NA
48	148.9	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
49	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
50	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA

**TABLE 8-24** UNIFAC Group-Group Interaction Parameters,  $a_{mn}$ , in Kelvins (Continued)

Main group	n = 46	47	48	49	50
m = 1	390.9	553.3	187.0	216.1	92.99
2	200.2	268.1	-617.0	62.56	NA
3	NA	333.3	NA	-59.58	-39.16
4	NA	421.9	NA	-203.6	184.9
5	-382.7	-248.3	NA	104.7	57.65
6	NA	NA	37.63	-59.40	-46.01
7	835.6	139.6	NA	407.9	NA
8	NA	NA	NA	NA	1005
9	NA	37.54	NA	NA	-162.6
10	NA	NA	NA	NA	NA
11	NA	151.8	NA	NA	NA
12	NA	NA	NA	NA	NA
13	NA	NA	NA	NA	NA
14	NA	NA	NA	NA	NA
15	NA	NA	NA	NA	NA
16	NA	NA	NA	NA	NA
17	NA	NA	NA	NA	NA
18	NA	NA	NA	NA	-136.6
19	NA	16.23	NA	NA	NA
20	-322.3	NA	NA	NA	NA
21	NA	NA	NA	NA	NA
22	NA	361.1	NA	NA	NA
23	NA	NA	565.9	NA	NA
24	NA	423.1	63.95	NA	108.5
25	NA	434.1	NA	NA	NA
26	NA	NA	NA	NA	-4.565
27	NA	NA	NA	NA	NA
28	NA	NA	NA	NA	NA
29	NA	NA	-18.27	NA	NA
30	NA	NA	NA	NA	NA

Main group	n = 46	47	48	49	50
m = 31	NA	-353.5	NA	NA	NA
32	NA	NA	NA	NA	NA
33	NA	NA	NA	NA	NA
34	NA	NA	NA	NA	NA
35	NA	NA	NA	NA	NA
36	NA	NA	NA	NA	NA
37	NA	NA	2429	NA	NA
38	NA	NA	NA	NA	NA
39	NA	NA	NA	NA	NA
40	NA	122.4	NA	NA	NA
41	NA	NA	NA	NA	NA
42	NA	NA	NA	NA	NA
43	NA	NA	NA	NA	NA
44	NA	NA	NA	NA	NA
45	NA	NA	NA	NA	NA
46	0.0	0.0	NA	NA	NA
47	NA	NA	0.0	NA	NA
48	NA	NA	NA	NA	NA
49	NA	NA	NA	0.0	NA
50	NA	NA	NA	NA	0.0

## Anexo III: Constantes de Antoine

La expresión dada por Antoine que relaciona la presión de vapor de una sustancia con la temperatura a la que se encuentra es la siguiente:

$$P_v = e^{\left(\frac{A-B}{C+T}\right)}$$

donde la presión está en mmHg y la temperatura en °C.

Las constantes  $A$ ,  $B$  y  $C$  son las constantes de Antoine y vienen recogidas en la tabla 5.27 para los compuestos que se está utilizando.

Componente	$A$	$B$	$C$
Propileno	6,8196	785	247
Propano	6,80398	803,81	246,99
i-Butano	6,91048	946,35	246,68
i-Buteno	6,84134	923,2	240
1-Buteno	6,8429	926,1	240
1,3-Butadieno	6,84999	930,546	238,854
n-Butano	6,80896	935,86	238,73
trans-2-buteno	6,86952	960,8	240
cis-2-buteno	6,86926	960,1	237
n-pentano	6,87632	1075,78	233,205
Metanol	8,0724	1574,99	238,87
MTBE	5,896	708,69	179,9

Tabla 5.27. Constantes de Antoine.

## Anexo IV: Cálculo de propiedades

A la hora de calcular la columna de destilación y los intercambiadores de calor se han necesitado una serie de propiedades cuya forma de cálculo viene detallada a continuación.

Para dicho cálculo se ha recurrido a las siguientes fuentes:

- The properties of gases and liquids. Mc. Graw Hill 2000.
- Principio de correspondencia (CSP).
- Method two and three parameters. Poling Prausnitz O'Connell.
- Physical and Thermophysical Properties of Pure Chemicals. T.E. Daubert. R.P. Dannert.

### DENSIDAD

La primera propiedad necesaria en el cálculo de todos los equipos es la densidad. Hay que diferenciar entre el cálculo para los líquidos y para los gases.

La densidad se define como la cantidad de materia que cabe en una unidad de volumen.

La densidad de los gases disminuye con la temperatura y aumenta con la presión. En los líquidos se observa la misma tendencia aunque el efecto de la presión es mucho menor (se observa solo a presiones muy elevadas).

Para un gas ideal:

$$PV = nRT = \frac{m}{M_m} RT \rightarrow \rho_m^G = \frac{m}{V} = \frac{PM_m}{RT}$$

A mayores presiones ( $Pr > 0.05$ ), las desviaciones del modelo de gas ideal son apreciables y se cuantifican mediante el factor de compresibilidad ( $Z$ ). El factor de compresibilidad se determina mediante una ecuación de estado (EdE).

$$\rho_m^G = \frac{PM_m}{ZRT}$$

El factor de compresibilidad se estima gráficamente y depende de la presión reducida ( $Pr$ ) y la temperatura reducida ( $Tr$ ).

Todos los gases, comparados a la misma presión y temperatura reducidas ( $Pr=P/P_c$ ;  $Tr=T/T_c$ ) tienen aproximadamente el mismo factor de compresibilidad (fluidos simples). Para fluidos normales se precisa la introducción de un tercer parámetro, el factor acéntrico ( $\omega$ ). Dicho parámetro aparece en las tablas adjuntas al final del anexo.

El cálculo de  $Z$  es una contribución de  $Z^0$  y  $Z^1$  (determinados gráficamente) mediante la expresión:

$$Z = Z^0 + \omega Z^1$$

Gráfica para la determinación de  $Z^0$  (Fig. 5.2):

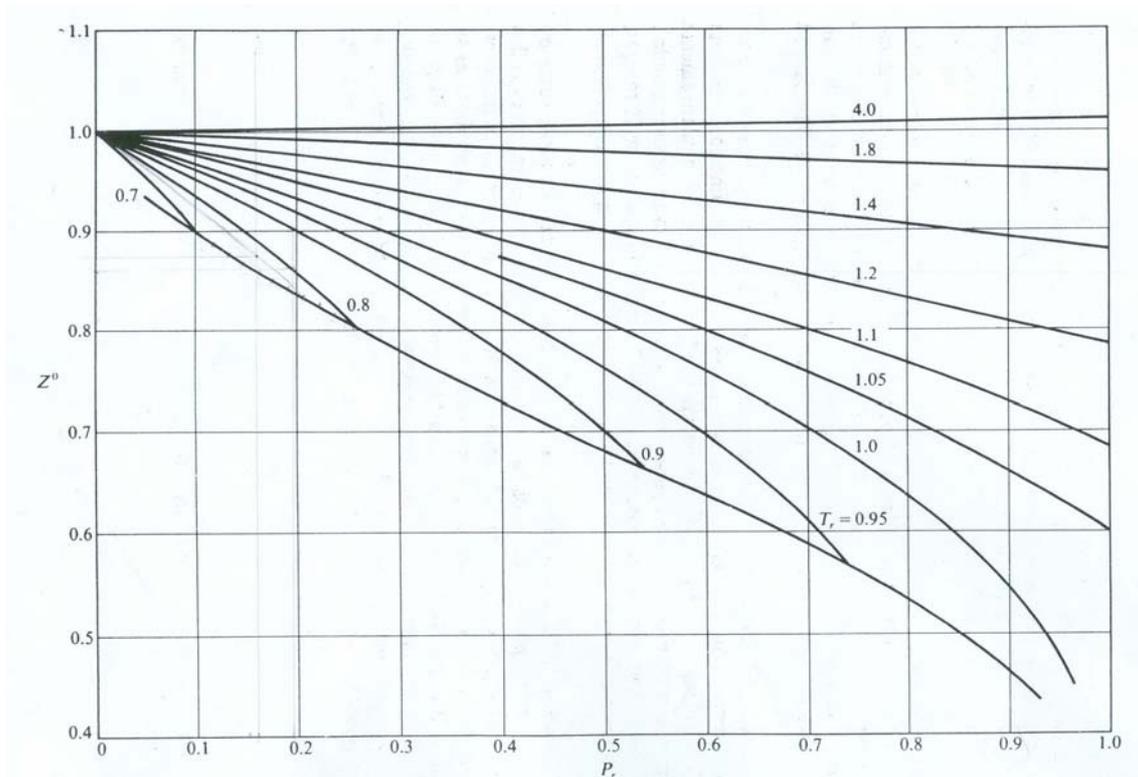


Fig 5.2. Correlación generalizada para  $Z^0$  si  $Pr < 1$  (Basado en los datos de B.I. Lee y M.G. Kesler, AIChE J., 21:510-527,1975)

Gráfica para la determinación de  $Z'$  (Fig. 5.3):

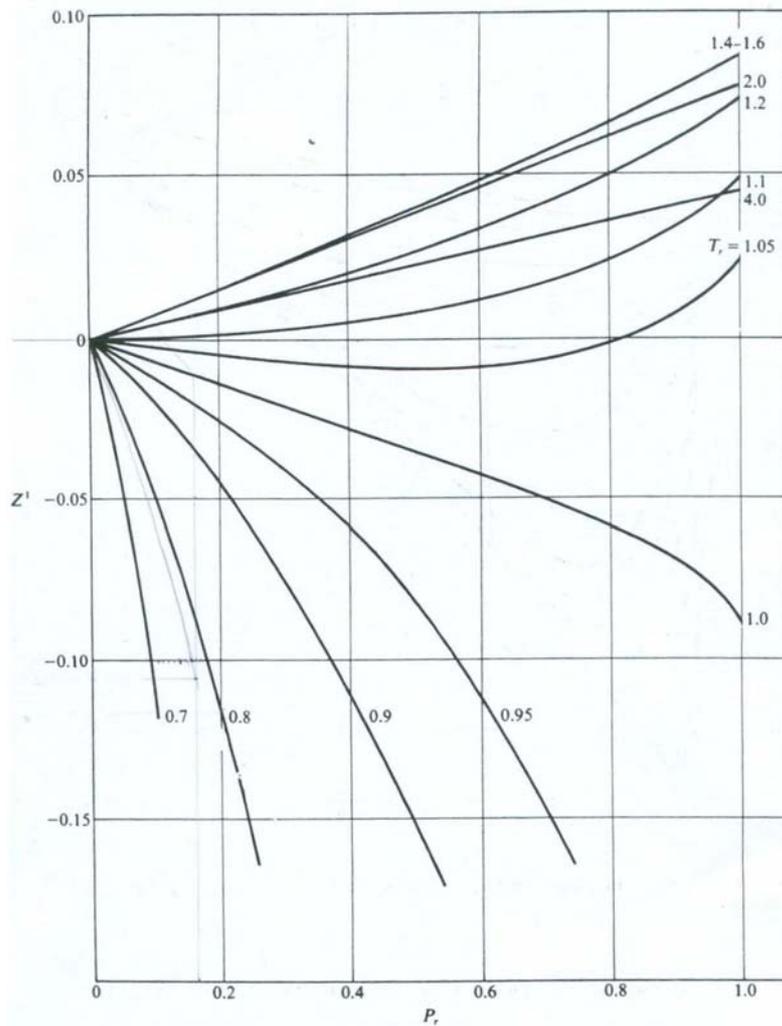


Fig.5.3. Correlación generalizada para  $Z'$  si  $Pr < 1$  (Basado en los datos de B.I. Lee y M.G. Kesler)

A modo de ejemplo, se refleja en las tablas 5.28 y 5.29 el cálculo de la densidad en el destilado:

DATOS	
T (K)	326,4
P (atm)	6,5

	$M_m$ kg/kmol	$X_D$	$T_c$ K	$V_c$ m <sup>3</sup> /kmol	$Z_c$	$W_c$	$x.W_c$	$x.M_m$	$x.T_c$	$x.V_c$	$x.Z_c$
Propileno	42,0810	0,0582	364,7600	0,1810	0,2750	0,1424	0,0083	2,4475	21,2148	0,0105	0,0160
Propano	44,0960	0,0110	369,8200	0,2029	0,2800	0,1518	0,0017	0,4865	4,0802	0,0022	0,0031
i-butano	58,1230	0,0060	408,1400	0,2627	0,2820	0,1770	0,0011	0,3483	2,4460	0,0016	0,0017
i-buteno	56,1070	0,0181	417,9000	0,2389	0,2750	0,1893	0,0034	1,0164	7,5705	0,0043	0,0050
1-buteno	56,1070	0,4681	419,5900	0,2399	0,2760	0,1867	0,0874	26,2664	196,4301	0,1123	0,1292
1,3-butadieno	54,0920	0,0918	425,3700	0,2208	0,2700	0,1932	0,0177	4,9659	39,0508	0,0203	0,0248
n-butano	58,1230	0,2208	425,1800	0,2549	0,2740	0,1993	0,0440	12,8332	93,8770	0,0563	0,0605
trans-2-buteno	56,1070	0,0459	428,6300	0,2382	0,2740	0,2182	0,0100	2,5754	19,6751	0,0109	0,0126
cis-2-buteno	56,1070	0,0383	435,5800	0,2340	0,2720	0,9203	0,0352	2,1475	16,6716	0,0090	0,0104
n-pentano	72,1500	0,0008	469,6500	0,3123	0,2690	0,2486	0,0002	0,0590	0,3838	0,0003	0,0002
metanol	32,0420	0,0408	512,5800	0,1178	0,2240	0,5656	0,0231	1,3073	20,9138	0,0048	0,0091
MTBE	88,1500	0,0002	497,1000	0,3290	0,2730	0,2674	0,0000	0,0138	0,0779	0,0001	0,0000
							$W_{c_m}$	$M_m$	$T_{c_m}$	$V_{c_m}$	$Z_{c_m}$
							$\Sigma =$ 0,2322	54,4672	422,3917	0,2325	0,2726

Tabla 5.28. Cálculo de las condiciones críticas.

A partir de estos resultados se despeja la presión crítica media ( $P_{c_m}$ ) de la ecuación de estado.

A continuación se obtienen los siguientes datos:

	$Tr_m$	$Pr_m$	$Z^o$	$Z^1$	$W_{c_m}$	$Z$	$\rho$ kg/m <sup>3</sup>
MEZCLA	0,7727	0,1601	0,8750	-0,1061	0,2322	0,8504	<b>15,5562</b>

Tabla 5.29. Cálculo de la densidad del gas.

En el caso de los líquidos es diferente. En el intervalo  $0.25 < Tr_m < 1.00$  puede usarse el método de Hankinson-Brost-Thompson (1979). La densidad se calcula mediante una serie de expresiones que aparecen a continuación:

$$\rho_m^L = \frac{M_m}{V_{cm} V^{(0)} (1 - \omega_m V^{(\delta)})}$$

$$V_{cm} = 0,25 \left[ \sum_{i=1}^c x_i V_{ci} + 3 \left( \sum_{i=1}^c x_i V_{ci}^{2/3} \right) \left( \sum_{i=1}^c x_i V_{ci}^{1/3} \right) \right]$$

$$V^{(0)} = 1 + a(1 - Tr_m)^{1/3} + b(1 - Tr_m)^{2/3} + c(1 - Tr_m) + d(1 - Tr_m)^{4/3}$$

$$V^{(\delta)} = \frac{a + bTr_m + cTr_m^2 + dTr_m^3}{Tr_m - 1,00001}$$

$$Tc_m = \frac{\left[ \sum_{i=1}^c x_i (Tc_i V_{ci})^{1/2} \right]^2}{V_{cm}}$$

donde las constantes  $a$ ,  $b$ ,  $c$  y  $d$  vienen recogidas en la tabla 5.30:

	$V^{(0)}$	$V^{(\delta)}$
$a$	-1,52816	-0,29612
$b$	1,43907	0,38691
$c$	-0,81446	-0,04273
$d$	0,19045	-0,04806

Tabla 5.30. Constantes.

A modo de ejemplo se recoge el cálculo de la densidad en el fondo de la columna de destilación en las tablas 5.31 y 5.32.

DATOS	
T (K)	415,3
P (atm)	6,7

	$M_m$ kg/kmol	$X_D$	$T_c$ (K)	$V_c$ m <sup>3</sup> /kmol	$Z_c$	$W_c$	$x \cdot W_c$	$x \cdot p_m$	$x \cdot T_c$	$x \cdot V_c$
metanol	32,0420	0,01	512,6	0,1178	0,2240	0,5656	0,0041	0,2339	3,7	0,0009
MTBE	88,1500	0,99	497,1	0,3290	0,2730	0,2674	0,2654	87,5065	493,5	0,3266
						$\Sigma =$	$W_{cm}$ 0,2696	$M_m$ 87,7404	$T_{cm}$ 497,2	$V_{cm}$ 0,3275

Tabla 5.31. Cálculo de las condiciones críticas.

$V_{cm}$	0,3272
$T_{cm}$	496,9735
$Tr_m$	0,8356
$V^{(0)}$	0,4780
$V^{(\delta)}$	0,1867
<b>densidad (kg/m3)</b>	<b>590,7588</b>

Tabla 5.32. Cálculo de la densidad en el líquido.

### CAPACIDAD CALORÍFICA

La capacidad calorífica en los gases puede estimarse mediante la ecuación 107:

$$Cp_i^G = A_i + B_i \left[ \frac{(C_i/T)}{\sinh(C_i/T)} \right]^2 + D_i \left[ \frac{(E_i/T)}{\cosh(E_i/T)} \right]^2$$

Las constantes A, B, C, D y E vienen recogidas en las tablas adjuntas al final del anexo para cada sustancia y cada número de ecuación.

A modo de ejemplo se muestra el cálculo de la capacidad calorífica en el destilado en la tabla 5.33:

DATOS	
P (atm)	6,5
T (K)	326,4

	A	B	C	D	E	Cp	x	x.Cp
Propileno	4,13E+04	1,53E+05	1,35E+03	7,44E+04	5,78E+02	6,95E+04	0,0582	4,04E+03
Propano	4,40E+04	1,94E+05	1,37E+03	9,80E+04	5,83E+02	8,03E+04	0,0110	8,86E+02
i-butano	6,55E+04	2,48E+05	1,59E+03	1,58E+05	-7,07E+02	1,05E+05	0,0060	6,28E+02
i-buteno	7,09E+04	2,01E+05	1,76E+03	1,32E+05	-7,95E+02	9,51E+04	0,0181	1,72E+03
1-buteno	6,65E+04	2,06E+05	1,77E+03	1,41E+05	-7,97E+02	9,20E+04	0,4681	4,31E+04
1,3-butadieno	4,30E+04	1,73E+05	1,24E+03	1,09E+05	5,56E+02	8,74E+04	0,0918	8,02E+03
n-butano	7,13E+04	2,43E+05	1,63E+03	1,50E+05	-7,30E+02	1,06E+05	0,2208	2,34E+04
trans-2-buteno	1,72E+04	2,00E+05	1,80E+03	1,30E+05	-8,25E+02	3,86E+04	0,0459	1,77E+03
cis-2-buteno	6,34E+04	1,44E+05	8,52E+02	9,02E+04	2,45E+03	8,48E+04	0,0383	3,25E+03
n-pentano	8,81E+04	3,01E+05	1,65E+03	1,89E+05	-7,48E+02	1,29E+05	0,0008	1,06E+02
metanol	3,93E+04	8,89E+04	1,96E+03	5,56E+04	9,10E+02	4,59E+04	0,0408	1,87E+03
MTBE	9,93E+04	3,07E+05	1,74E+03	2,08E+05	-7,96E+02	1,37E+05	0,0002	2,15E+01
							<b>Cp<sub>m</sub></b> <b>J/kmol·K</b>	8,88E+04

Tabla 5.33. Cálculo de la capacidad calorífica del gas.

El cálculo de esta propiedad en los líquidos se realiza con la ecuación número 100:

$$Cp_i^L = A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3$$

$$Cp_m^L = \sum_{i=1}^n x_i Cp_i^L$$

A modo de ejemplo se muestra el cálculo de la capacidad calorífica en el vaporizador en la tabla 5.34:

DATOS	
P (atm)	6,7
T (°C)	125,055

	A	B	C	Cp	x	x.Cp
metanol	1,08E+05	-3,81E+02	9,79E-01	1,11E+05	0,0234	2,60E+03
MTBE	1,40E+05	-9,00E+00	5,63E-01	2,26E+05	0,9766	2,20E+05
					Cp(J/kmol.K)	2,23E+05

Tabla 5.34. Cálculo de la capacidad calorífica del líquido.

## VISCOSIDAD

La viscosidad es una medida de la resistencia que ofrece un fluido a fluir. La viscosidad se mide en el SI en kg/m·s (Pa·s).

En los gases aumenta con la presión y la temperatura. En los líquidos aumenta con la presión pero disminuye con la temperatura.

Para gases a baja presión, una correlación muy utilizada para estimar la viscosidad es la ecuación de Wilke (1950) para la cual se requieren las viscosidades de los componentes puros. Éstas suelen darse mediante ecuaciones del tipo 102:

$$\eta_i^G = \frac{A_i(T^{B_i})}{1 + \frac{C_i}{T} + \frac{D_i}{T^2}} \rightarrow \eta_m^G = \frac{\sum_{i=1}^c x_i \eta_i^G}{\sum_{j=1}^c x_j \varphi_{ij}}$$

$\varphi_{ij}$  es un parámetro de interacción binaria que se obtiene mediante:

$$\varphi_{ij} = \frac{[1 + (\eta_i / \eta_j)^{1/2} (M_j / M_i)^{1/4}]^2}{[8(1 + (M_i / M_j))]^{1/2}}$$

$$\varphi_{ii} = 1$$

A modo de ejemplo se incluye el cálculo de la viscosidad para el destilado (tabla 5.36). En primer lugar se ha calculado la matriz de interacciones (tabla 5.35):

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Propileno 1	1,000	1,048	1,251	1,183	1,215	1,136	1,256	1,226	1,211	1,446	0,823	1,531
Propano 2	0,955	1,000	1,194	1,129	1,160	1,085	1,198	1,169	1,155	1,379	0,786	1,461
i-butano 3	0,797	0,835	1,000	0,947	0,971	0,911	1,003	0,979	0,968	1,158	0,655	1,233
i-buteno 4	0,841	0,881	1,057	1,000	1,026	0,961	1,060	1,034	1,022	1,225	0,689	1,304
1-buteno 5	0,821	0,860	1,030	0,975	1,000	0,937	1,033	1,008	0,997	1,192	0,674	1,269
1,3-butadieno 6	0,875	0,917	1,101	1,041	1,069	1,000	1,105	1,078	1,065	1,277	0,717	1,358
n-butano 7	0,795	0,832	0,997	0,944	0,968	0,907	1,000	0,976	0,965	1,154	0,653	1,229
trans-2-buteno 8	0,814	0,853	1,021	0,967	0,992	0,930	1,025	1,000	0,989	1,182	0,669	1,258
cis-2-buteno 9	0,823	0,862	1,033	0,978	1,003	0,940	1,037	1,012	1,000	1,196	0,676	1,273
n-pentano 10	0,686	0,718	0,862	0,818	0,838	0,787	0,865	0,844	0,835	1,000	0,563	1,070
metanol 11	1,214	1,273	1,517	1,432	1,473	1,374	1,523	1,486	1,467	1,751	1,000	1,845
MTBE 12	0,632	0,662	0,799	0,757	0,775	0,728	0,801	0,781	0,773	0,930	0,516	1,000

Tabla 5.35. Matriz de interacciones.

	A	B	C	D	$\mu$	x	x. $\mu$	$M_m$	$\sum x.\phi_{ij}$	$x.\mu/\sum x.\phi_{ij}$
1	8,79E-06	2,32E-01	8,00E+02	1,20E+04	9,45E-06	0,0582	5,49E-07	42,081	1,187	4,629E-07
2	2,21E-06	3,82E-01	4,05E+02		9,02E-06	0,0110	9,95E-08	44,096	1,133	8,783E-08
3	1,78E-07	6,95E-01	2,50E+01	1,21E+04	8,31E-06	0,0060	4,98E-08	58,123	0,948	5,251E-08
4	7,68E-06	2,66E-01	9,82E+02		8,95E-06	0,0181	1,62E-07	56,107	1,002	1,618E-07
5	1,03E-06	4,90E-01	3,47E+02		8,50E-06	0,4681	3,98E-06	56,107	0,976	4,077E-06
6	7,01E-08	8,45E-01			9,35E-06	0,0918	8,58E-07	54,092	1,043	8,228E-07
7	1,03E-05	2,08E-01	1,01E+03	8,10E+03	8,25E-06	0,2208	1,82E-06	58,123	0,945	1,928E-06
8	1,05E-06	4,87E-01	3,59E+02		8,37E-06	0,0459	3,84E-07	56,107	0,969	3,965E-07
9	1,09E-06	4,79E-01	3,39E+02		8,56E-06	0,0383	3,28E-07	56,107	0,980	3,345E-07
10	6,82E-07	5,24E-01	2,74E+02		7,68E-06	0,0008	6,28E-09	72,15	0,818	7,678E-09
11	3,07E-07	6,97E-01	2,05E+02		1,06E-05	0,0408	4,33E-07	32,042	1,439	3,010E-07
12	6,19E-07	5,72E-01	3,52E+02		8,16E-06	0,0002	1,28E-09	88,15	0,757	1,690E-09
									<b>Viscosidad Pa·s</b>	8,63E-06

Tabla 5.36. Cálculo de la viscosidad del gas.

En el caso de los líquidos, la viscosidad de mezclas multicomponente es compleja pues pueden presentarse máximos y mínimos en función de la composición.

En general, no existen métodos que permitan una estimación sin la ayuda de parámetros de interacción binaria como los de Nissan-Grünberg (1949), Teja-Rice (1981) y Chevalier (1988). Estos son complejos de programar y tienen restricciones de manera que lo mejor es utilizar una media ponderal de las viscosidades individuales obtenidas mediante correlaciones del tipo 101:

$$\eta_i^L = e^{\left(A_i + \frac{B_i}{T} + C_i \ln T + D_i T^{E_i}\right)} \rightarrow \eta_m^L = e^{\sum_{i=1}^n x_i \ln \eta_i^L}$$

Como ejemplo, se adjunta el cálculo de la viscosidad en el vaporizador (tabla 5.37):

	A	B	C	μ	x	x.ln(μ)
metanol	-7,29E+00	1,07E+03	-6,66E-01	0,00018466	0,0234	-2,01E-01
MTBE	-7,32E+00	8,11E+02	-5,97E-01	0,00014309	0,9766	-8,64E+00
						-8,85E+00
					μ(Pa.s)	0,00014394

Tabla 5.37. Cálculo de la viscosidad en el líquido.

### CONDUCTIVIDAD TÉRMICA

La conductividad térmica es una medida de la resistencia que presentan los materiales a la transmisión del calor. La conductividad se mide en el SI en W/m·K.

Al igual que la viscosidad, la conductividad aumenta con la temperatura en gases pero disminuye en los líquidos. La presión afecta poco a la conductividad térmica.

Para gases a baja presión, una correlación muy utilizada es la ecuación de Wassiljewa (1904):

$$k_i^G = \frac{A_i(T_i^{B_i})}{1 + \frac{C_i}{T} + \frac{D_i}{T^2}} \rightarrow k_m^G = \frac{\sum_{i=1}^c x_i k_i^G}{\sum_{j=1}^c x_j A_{ij}}$$

De todas las formas propuestas para  $A_{ij}$  la de Mason-Saxena (1954) es la de mayor aceptación, según la cual el parámetro  $A_{ij} = \varphi_{ij}$ , el mismo utilizado en la estimación de la viscosidad por el método de Wilke.

Se muestra a continuación un ejemplo aplicado al destilado en las tablas 5.38 y 5.39:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Propileno 1	1,000	1,002	1,192	1,164	1,237	1,180	1,205	1,247	1,283	1,404	0,920	1,803
Propano 2	0,998	1,000	1,192	1,163	1,237	1,179	1,205	1,247	1,283	1,406	0,916	1,810
i-butano 3	0,832	0,836	1,000	0,976	1,034	0,987	1,011	1,043	1,071	1,182	0,758	1,516
i-buteno 4	0,854	0,857	1,025	1,000	1,060	1,012	1,036	1,069	1,098	1,211	0,778	1,554
1-buteno 5	0,808	0,812	0,968	0,945	1,000	0,955	0,978	1,008	1,035	1,140	0,737	1,455
1,3-butadieno 6	0,846	0,849	1,013	0,989	1,047	1,000	1,024	1,056	1,085	1,194	0,772	1,528
n-butano 7	0,824	0,828	0,989	0,965	1,023	0,976	1,000	1,031	1,059	1,168	0,750	1,497
trans-2-buteno 8	0,802	0,806	0,960	0,937	0,992	0,948	0,970	1,000	1,027	1,130	0,732	1,442
cis-2-buteno 9	0,783	0,787	0,936	0,914	0,967	0,924	0,946	0,974	1,000	1,100	0,714	1,400
n-pentano 10	0,703	0,707	0,847	0,826	0,873	0,834	0,856	0,880	0,902	1,000	0,636	1,276
metanol 11	1,077	1,077	1,270	1,242	1,320	1,260	1,285	1,332	1,370	1,487	1,000	1,901
MTBE 12	0,561	0,566	0,675	0,659	0,693	0,664	0,682	0,698	0,714	0,794	0,506	1,000

Tabla 5.38. Matriz de interacciones.

	A	B	C	D	k	x	x.k	M <sub>m</sub>	$\sum x.A_{ij}$	$x.\mu/\sum x.A_{ij}$
1	2,24E-05	1,29E+00	3,12E+02		2,03E-02	0,0582	1,18E-03	42,081	1,196	9,89E-04
2	6,15E-05	1,17E+00	4,98E+02		2,12E-02	0,0110	2,34E-04	44,096	1,196	1,96E-04
3	-4,99E-02	2,76E-01	-2,27E+03	-7,00E+05	1,96E-02	0,0060	1,18E-04	58,123	1,000	1,18E-04
4	-1,72E+04	8,12E-01	-3,10E+10		1,99E-02	0,0181	3,60E-04	56,107	1,025	3,51E-04
5	-2,28E+03	7,66E-01	-3,53E+09		1,77E-02	0,4681	8,30E-03	56,107	0,968	8,58E-03
6	-2,09E+04	9,59E-01	-9,38E+10		1,87E-02	0,0918	1,72E-03	54,092	1,013	1,70E-03
7	8,02E+02	8,60E-01	1,98E+09		1,92E-02	0,2208	4,24E-03	58,123	0,989	4,29E-03
8	7,86E-05	1,06E+00	1,46E+01	1,06E+05	1,74E-02	0,0459	8,01E-04	56,107	0,960	8,34E-04
9	6,77E-05	1,07E+00	-6,59E+01	1,29E+05	1,66E-02	0,0383	6,34E-04	56,107	0,936	6,77E-04
10	-2,66E+03	8,22E-01	-5,81E+09		1,75E-02	0,0008	1,43E-05	72,15	0,845	1,69E-05
11	-7,76E+00	1,03E+00	-7,44E+07	6,77E+09	1,81E-02	0,0408	7,40E-04	32,042	1,278	5,79E-04
12	-2,51E+01	1,16E+00	-7,95E+08	8,89E+10	1,33E-02	0,0002	2,08E-06	88,15	0,671	3,09E-06
									<b>k</b> <b>(W/m.K)</b>	1,83E-02

Tabla 5.39. Cálculo de la conductividad del gas.

En el caso de los líquidos, no existen métodos generales para mezclas multicomponente aunque sí numerosos métodos para mezclas binarias y mezclas que contienen agua. Es bastante razonable utilizar una media ponderal de las conductividades individuales obtenidas mediante correlaciones polinómicas del tipo 100. Las conductividades térmicas así calculadas son ligeramente superiores a las reales aunque las desviaciones a menudo son pequeñas (5%).

$$k_i^L = A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3$$

$$k_m^L = \sum_{i=1}^n x_i k_i^L$$

A continuación se da un ejemplo con el cálculo de dicha propiedad en el vaporizador en la tabla 5.40:

	A	B	k	x	x.k
metanol	2,84E-01	-2,81E-04	1,72E-01	0,0234	4,02E-03
MTBE	1,83E-01	-2,24E-04	9,42E-02	0,9766	9,20E-02
				k (W/m.K)	9,60E-02

Tabla 5.40. Cálculo de la conductividad térmica del líquido en el vaporizador.

### TENSIÓN SUPERFICIAL

En la superficie de separación de un líquido y un gas existen fuerzas desiguales actuando sobre las moléculas. Por ello la superficie está en tensión.

Se define la tensión superficial como la fuerza ejercida en el plano de la superficie por unidad de longitud (N/m).

La tensión superficial con interfase líquido-gas se puede correlacionar con la temperatura mediante expresiones del tipo 106:

$$\sigma_i^L = A_i (1 - Tr_i)^{(B_i + C_i Tr_i + D_i Tr_i^2 + E_i Tr_i^3)}$$

Aunque existen métodos para deducir  $\sigma_m$  a partir de datos termodinámicos, la media ponderal es suficiente para la mayoría de los sistemas:

$$\sigma_m = \sum_{j=1}^c x_j \sigma_j$$

Esta ecuación predice un comportamiento lineal entre las tensiones de los componentes puros. Cuando las diferencias entre los componentes puros son grandes (p.ej agua) puede haber desviaciones de la linealidad.

El cálculo de la tabla 5.41 corresponde al vaporizador, considerando la corriente como si fuese MTBE puro:

	A	B	$\sigma$ (N/m)
MTBE	5,94E-02	1,24E+00	8,02E-03

Tabla 5.41. Cálculo de la tensión superficial.

### CALOR DE VAPORIZACIÓN

Para calcular el calor de vaporización utilizamos la ecuación tipo 106 y las unidades son J/kmol.

$$\lambda_i^L = A_i(1 - Tr_i)^{(B_i + C_i Tr_i + D_i Tr_i^2 + E_i Tr_i^3)}$$

$$\lambda_m = \sum_{j=1}^c x_j \lambda_j$$

Se refleja el cálculo para el vaporizador en la tabla 5.42:

	A	B	C	D	$\lambda$	$x \cdot \lambda$
metanol	5,27E+07	3,77E-01			2,87E+07	6,71E+05
MTBE	4,49E+07	7,84E-01	-8,76E-01	5,18E-01	2,30E+07	2,24E+07
					$\lambda$ (J/kmol)	2,31E+07

Tabla 5.42. Cálculo del calor latente de vaporización.

En última instancia, se adjunta una tabla con las propiedades de la corriente que atraviesa cada intercambiador de calor (tablas 5.43, 5.44, 5.45, 5.46, 5.47 y 5.48).

### CONDENSADOR

Corriente de proceso:

Tv	$\rho_L$	$\rho_V$	k	$C_{pL}$	$C_{pV}$	$\lambda$	$\mu_L$	$\mu_G$	Pm
333,1	0,00	15,61	0,0000	0,00	92199,30	0	8,79E-06	0,00E+00	0
331	580,93	15,59	0,1016	146704,62	91111,24	20438493,52	8,75E-06	1,37E-04	60,13
329,6	575,46	15,57	0,1016	144215,46	90392,71	20160028,58	8,72E-06	1,35E-04	59,02
328,5	571,03	15,55	0,1015	142257,96	89823,50	19937739,95	8,69E-06	1,33E-04	58,14
327,7	567,83	15,54	0,1015	140846,25	89403,25	19779064,59	8,68E-06	1,32E-04	57,51
327	565,13	15,53	0,1016	139632,73	89025,74	19647146,22	8,66E-06	1,31E-04	56,97
326,3	562,66	15,51	0,1017	138459,77	88631,53	19527773,69	8,65E-06	1,31E-04	56,46
325,6	560,59	15,48	0,1018	137355,44	88210,60	19429132,18	8,64E-06	1,30E-04	55,99
324,8	559,03	15,44	0,1022	136225,82	87679,69	19356882,79	8,64E-06	1,30E-04	55,53
323,8	558,40	15,38	0,1028	135056,15	86940,48	19328748,21	8,63E-06	1,32E-04	55,09
322,5	565,72	0,00	0,1041	135963,57	0,00	19600723,14	0,00E+00	1,39E-04	55,77

Tabla 5.43. Propiedades de la corriente de proceso (unidades del SI).

Agua ( $T_m = 30\text{ °C}$ ):

Propiedad	Valor	Unidades
$\rho_L$	992,89	kg/m <sup>3</sup>
$C_p$	7,53E+04	J/kmol.K
$\mu$	0,0008311	Pa.s
$k$	6,13E-01	W/m.K
$M_m$	18	kg/kmol

Tabla 5.44. Propiedades del agua.

### VAPORIZADOR

Corriente de proceso ( $T_m = 125,05\text{ °C}$ ):

Propiedad	Valor	Unidades
$\rho_G$	21,44	kg/m <sup>3</sup>
$\rho_L$	618,46	kg/m <sup>3</sup>
$C_p$	2,23E+05	J/kmol.K
$\mu$	0,00014394	Pa.s
$k$	9,60E-02	W/m.K
$\lambda$	2,31E+07	J/kmol
$\sigma$	8,02E-03	N/m
$M_m$	86,84	kg/kmol

Tabla 5.45. Propiedades de la corriente de proceso.

Dowterm ( $T_m = 160\text{ °C}$ ):

Propiedad	A	B	C	D	Valor	Unidades
$\rho$	0,538831	0,265125	770,15	0,306928	5,69419299	kg/m <sup>3</sup>
$C_p$	143437	372,894	0,111497		325804,563	J/kmol.K
$\mu$	-18,3854	2177,41	0,957261		0,0005285	Pa.s
$k$	0,185573	-0,00015999			0,1162982	W/m.K
$M_m$					166	kg/kmol

Tabla 5.46. Propiedades del Dowterm.

**INTERCAMBIADOR DE CALOR**

Corriente de proceso ( $T_m = 77,82 \text{ }^\circ\text{C}$ ):

Propiedad	Valor	Unidades
$\rho$	681,53	$\text{kg/m}^3$
$M_m$	87,58892	$\text{kg/kmol}$
$\mu$	0,000203669	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$k$	0,105526668	$\text{W/m}\cdot\text{K}$
$C_p$	205134,878	$\text{J/kmol}\cdot\text{K}$

Tabla 5.47. Propiedades de la corriente de proceso.

Agua ( $T_m = 30 \text{ }^\circ\text{C}$ ):

Propiedad	Valor	Unidades
$\rho$	992,89	$\text{kg/m}^3$
$M_m$	18	$\text{kg/kmol}$
$\mu$	0,0008311	$\text{Pa}\cdot\text{s}$
$k$	0,61288204	$\text{W/m}\cdot\text{K}$
$C_p$	75316,7097	$\text{J/kmol}\cdot\text{K}$

Tabla 5.48. Propiedades del agua.

TABLAS DE ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES

Agua

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: WATER IUPAC NAME: WATER Synonyms: DIHYDROGEN OXIDE STEAM Chemical Abstracts Number: 7732-18-5 Structural Formula: HOH						H2O WATER
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	18.015			1	
Critical Temperature	K	647.13		XE1	2909 2729 1886	
Critical Pressure	Pa	2.2055E+07		XE1	2909 2984 2729	
Critical Volume	m**3/kmol	0.05595		XE1	2909 1886 2984	
Crit Compress Factor		0.229		D	PS	
Melting Point	K	273.15		XE1	424 3 48	
Triple Pt Temperature	K	273.16		XE1	424 48	
Triple Pt Pressure	Pa	6.1130E+02		XE2	424 1319 48	
Normal Boiling Point	K	373.15		XE1	2909 424 2729	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.018069		XE1	2909 424 3	
IG Heat of Formation	J/kmol	-2.4182E+08		XE1	47 1314 1124	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-2.2859E+08		XE1	47 48 1124	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	1.8872E+05		XE1Z	9 1314 1124	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	6.0017E+06		XE1Z	424 48	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	0.0	1		PS	
Acentric Factor		0.3449		D	PS 43 11	22
Radius of Gyration	m	6.1500E-11		D 3	11 12	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	4.7813E+04		D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	6.1709E-30		XE2Z	25 1518	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.01237		D 3	72 389	
van der Waals Area	m**2/kmol	2.2600E+08	2	D 4	1092	
Refractive Index		1.3325		XE1P	43 8	
Flash Point	K		3			
Flammability Limits	vol %		3			
Autoignition Temp	K		3			

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Product of combustion.  
2. Estimated by method of Vera, et al.  
3. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: WATER						H2O WATER		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	2	5.3030E+01	-7.8409E-03			
Min( 23.15, 5.1202E+01)								
Max( 273.15, 5.0888E+01)								
Liquid Density	1	105	1	5.4590E+00	3.0542E-01	6.4713E+02	8.1000E-02	
Min( 273.16, 5.5583E+01)								
Max( 333.15, 5.4703E+01)								
Vapor Pressure	2	101	1	7.3649E+01	-7.2582E-03	-7.3037E+00	4.1653E-06	2.0000E+00
Min( 273.16, 6.1056E+02)								
Max( 647.13, 2.1940E+07)								
Heat of Vaporization		106	2	5.2053E+07	3.1990E-01	-2.1200E-01	2.5795E-01	
Min( 273.16, 4.4733E+07)								
Max( 647.13, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-2.6249E+02	1.4052E+02			
Min( 3.15, 1.8015E+02)								
Max( 273.15, 3.8121E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	2	2.7637E+05	-2.0901E+03	8.1250E+00	-1.4116E-02	9.3701E-06
Min( 273.15, 7.6151E+04)								
Max( 533.15, 8.9394E+04)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	3.3359E+04	2.6798E+04	2.6093E+03	8.8880E+03	1.1676E+03
Min( 100.00, 3.3359E+04)								
Max( 1500.00, 4.7105E+04)								
Second Virial Coefficient		104	6	-2.3040E-02	2.6860E+01	-2.8170E+07	3.3408E+20	-1.3837E+23
Min( 323.64, -1.5475E+00)								
Max( 3236.40, -1.5572E-02)								
Liquid Viscosity		101	3	-5.1964E+01	3.6706E+03	5.7331E+00	-5.3495E-29	1.0000E+01
Min( 273.15, 1.7237E-03)								
Max( 643.15, 5.3696E-05)								
Vapor Viscosity		102	2	2.6986E-06	4.9800E-01	1.2577E+03	-1.9570E+04	
Min( 373.15, 1.2179E-05)								
Max( 1073.10, 4.0452E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	2	-4.2670E-01	5.6903E-03	-8.0065E-06	1.8150E-09	
Min( 273.15, 5.6722E-01)								
Max( 633.15, 4.2715E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	2	6.9770E-05	1.1243E+00	8.4490E+02	-1.4885E+05	
Min( 373.15, 2.4760E-02)								
Max( 1073.10, 1.0750E-01)								
Surface Tension		106	2	1.8548E-01	2.7170E+00	-3.5540E+00	2.0470E+00	
Min( 273.16, 7.7919E-02)								
Max( 647.13, 0.0000E+00)								

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. For the temperature range 333.15 to 403.15 K use the coefficients: A = 4.9669E+00, B = 2.7788E-01, C = 6.4713E+02, D = 1.9740E-01  
For the temperature range 403.15 - 647.13 K use A = 4.3910E+00, B = 2.4870E-01, C = 6.4713E+02, D = 2.5340E-01.  
2. For sublimation pressures in the temperature range of 149.3 K to 273.16 K use the coefficients: A = 7.5726E+01, B = -7.3035E+03, C = -7.7816E+00, D = 2.6034E-15, E = 6.0000E+00.

Propileno

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1-PROPENE IUPAC NAME: PROPYLENE Synonyms: METHYLETHENE PROPENE						C3H6 PROPYLENE
Chemical Abstracts Number: 115-07-1						Structural Formula: CH2CHCH3
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	42.081			1	
Critical Temperature	K	364.76		XE2P	43 47 2366	
Critical Pressure	Pa	4.6126E+06	43 49	XE2P	43 47 2366	
Critical Volume	m**3/kmol	0.18100	21	XE4P	43 47 2366	
Crit Compress Factor		0.275		D	43 47	
Melting Point	K	87.90	1	XE2P	43 47 2366	
Triple Pt Temperature	K	87.90		XE2	43 2366	
Triple Pt Pressure	Pa	9.1812E-04		P 8	PS 2366	
Normal Boiling Point	K	225.43		XE2P	43 47 2366	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.068802	2	X 1 P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	1.9710E+07		XE4	1269 47 1512	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	6.2140E+07		XE3	1269 3067 1512	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.6660E+05		XE4	1269 31 1512	
IG Heat of Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.0029E+06		XE2	47 1269	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-1.9257E+09		XE3	1269 47 1831	
Acentric Factor		0.1424		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	2.2540E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.3152E+04	3	D	635	
Dipole Moment	C*m	1.2208E-30		XE2Z	25	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.03408		D 2	72	
van der Waals Area	m**2/kmol	5.0600E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.0009		XE1	2987 53	
Flash Point	K	165.37		XUO	1571 2331	
Flammability Limits	vol %	2.0 TO 11.0		XUO	1571 1978	2331
Autoignition Temp	K	728.15		XUO	1978 1647 2331	1571

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. At equilibrium with vapor (triple point).  
2. Determined at the normal boiling point.  
3. For the hypothetical liquid at 298 K and 101325 Pa.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: 1-PROPENE						C3H6 PROPYLENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available ( 87.90, 2.1300E+01)	1	100	6	2.1300E+01				
Liquid Density Min( 87.90, 1.8159E+01) Max( 364.76, 5.5402E+00)		105	2	1.5245E+00	2.7517E-01	3.6476E+02	3.0246E-01	
Vapor Pressure Min( 87.90, 9.1812E-04) Max( 364.76, 4.5888E+06)		101	4	6.1396E+01	-3.4704E+03	-6.4800E+00	1.2660E-05	2.0000E+00
Heat of Vaporization Min( 87.90, 2.3767E+07) Max( 364.76, 0.0000E+00)	2	106	4	2.6087E+07	3.2510E-01	5.2500E-02		
Solid Heat Capacity Min( 13.00, 4.3220E+03) Max( 87.00, 6.8182E+04)		100	3	6.2120E+03	-1.0510E+03	8.8050E+01	-1.5260E+00	8.5850E-03
Liquid Heat Capacity Min( 87.90, 9.1034E+04) Max( 298.15, 1.0304E+05)	3	100	4	1.0580E+05	-2.3435E+02	7.5500E-01		
Ideal Gas Heat Capacity Min( 90.00, 4.1332E+04) Max(1500.00, 1.6799E+05)		107	2	4.1300E+04	1.5250E+05	1.3520E+03	7.4400E+04	5.7800E+02
Second Virial Coefficient Min( 182.50, -1.0999E+00) Max(1825.00, 5.1522E-02)		104	3	1.0010E-01	-8.7450E+01	-4.0140E+06	1.9460E+17	-4.9100E+19
Liquid Viscosity Min( 90.00, 1.1608E-02) Max( 220.00, 2.8430E-04)		101	5	-4.4830E+01	1.3370E+03	5.6710E+00		
Vapor Viscosity Min( 193.00, 5.4509E-06) Max(1000.00, 2.4090E-05)		102	5	8.7900E-06	2.3200E-01	8.0000E+02	1.2000E+04	
Liq Thermal Conductivity Min( 87.90, 1.8867E-01) Max( 340.49, 8.2835E-02)	4	100	4	2.2550E-01	-4.1900E-04			
Vap Thermal Conductivity Min( 250.00, 1.2537E-02) Max(1000.00, 1.2897E-01)		102	4	2.2390E-05	1.2928E+00	3.1214E+02		
Surface Tension Min( 87.90, 3.8344E-02) Max( 364.76, 0.0000E+00)		106	3	5.3467E-02	1.2058E+00			

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.  
2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.  
3. For the range 300 K to 340 K use the coefficients: A = 1.8564E+06, B = -1.1633E+04, C = 1.9286E+01.  
4. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

Propano

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: PROPANE IUPAC NAME: PROPANE Synonyms: n-PROPANE Chemical Abstracts Number: 74-98-6						C3H8 PROPANE
DIMETHYLMETHANE Structural Formula: CH3CH2CH3						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	44.096			1	
Critical Temperature	K	369.82		XE2P	43 47 1631	
Critical Pressure	Pa	4.2492E+06		XE2P	43 47 1631	
Critical Volume	m**3/kmol	0.20288		XE4P	43 47 1631	
Crit Compress Factor		0.280		D	43	
Melting Point	K	85.46	1	XE2P	43 47 2729	
Triple Pt Temperature	K	85.44		XU2	456 1377 1631	
Triple Pt Pressure	Pa	2.0744E-04		P 8	PS	
Normal Boiling Point	K	231.11		XE2P	43 47 1631	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.075642	2	X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.0468E+08		XE3	1486 47 400	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-2.4400E+07		XE3	1486 2419 2987	31 47
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.7020E+05		XE3	1486 2419 2987	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.5238E+06		XE2	47 1377	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.0431E+09		XE3V	1486 47 400	
Acentric Factor		0.1518		D	PS 43 11	
Radius of Gyration	m	2.4310E-10		D 3	1112 11 12	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.3091E+04	3	D	635	
Dipole Moment	C*m	0.0			169	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.03757		D 2	72	
van der Waals Area	m**2/kmol	5.5900E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.2861	4	XE1	2987	
Flash Point	K		5			
Flammability Limits	vol %	2.1 TO 9.5		XUO	1647	
Autoignition Temp	K	723.15		XUO	1647	

Issue Date: JULY 1981

Revision Date: AUG. 1987

- NOTES: 1. At equilibrium with vapor (triple point).  
 2. Determined at the normal boiling point from the liquid density correlation.  
 3. For the hypothetical liquid at 298 K and 101325 Pa.  
 4. At saturation pressure.  
 5. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS

Chemical Abstracts Name: PROPANE						C3H8 PROPANE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	2	1.8861E+01	-2.0332E-02			
Min( 23.15, 1.8390E+01)								
Max( 85.44, 1.7124E+01)								
Liquid Density		105	2	1.3937E+00	2.7744E-01	3.6982E+02	2.8700E-01	
Min( 85.44, 1.6496E+01)								
Max( 369.82, 5.0234E+00)								
Vapor Pressure		101	3	5.4276E+01	-3.3680E+03	-5.2610E+00	8.6000E-06	2.0000E+00
Min( 85.44, 2.0744E-04)								
Max( 369.82, 4.1420E+06)								
Heat of Vaporization	1	106	3	2.6720E+07	3.8550E-01	-8.6000E-02	6.8600E-02	
Min( 85.44, 2.4250E+07)								
Max( 369.82, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-1.1230E+04	1.0590E+03	-3.6000E+00		
Min( 30.00, 1.7300E+04)								
Max( 84.00, 5.2324E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	3	1.2220E+05	-9.9430E+02	9.0810E+00	-3.3549E-02	4.7384E-05
Min( 85.44, 8.5138E+04)								
Max( 350.00, 1.5926E+05)								
*Ideal Gas Heat Capacity		107	3	4.4000E+04	1.9380E+05	1.3690E+03	9.8000E+04	5.8300E+02
Min( 100.00, 4.4115E+04)								
Max( 1500.00, 2.0467E+05)								
Second Virial Coefficient		104	3	1.1250E-01	-1.0000E+02	-4.3140E+06	-1.8000E+16	-1.6500E+19
Min( 184.91, -1.1891E+00)								
Max( 1849.10, 5.7737E-02)								
Liquid Viscosity		101	4	-1.5765E+01	6.1823E+02	8.6390E-01	-1.8000E-13	5.0000E+00
Min( 85.44, 9.2095E-03)								
Max( 369.82, 3.6065E-05)								
Vapor Viscosity		102	3	2.2090E-06	3.8240E-01	4.0500E+02		
Min( 193.15, 5.3383E-06)								
Max( 750.00, 1.8034E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	3	3.4810E-01	-1.2365E-03	1.2464E-06		
Min( 85.44, 2.5155E-01)								
Max( 369.82, 6.1284E-02)								
Vap Thermal Conductivity		102	5	6.1500E-05	1.1696E+00	4.9760E+02		
Min( 232.70, 1.1491E-02)								
Max( 773.15, 8.9370E-02)								
Surface Tension	2	106	4	4.9624E-02	1.1920E+00			
Min( 85.44, 3.6282E-02)								
Max( 369.82, 0.0000E+00)								

Issue Date: JULY 1981

Revision Date: AUG. 1987

- NOTES: 1. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.  
 2. Data predicted by Sugden's method used in regression.

Isobutano

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: PROPANE, 2-METHYL-						C4H10
IUPAC NAME: ISOBUTANE						ISOBUTANE
Synonyms: i-BUTANE						
Chemical Abstracts Number: 75-28-5						
Structural Formula: CH3CH(CH3)CH3						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	58.123			1	
Critical Temperature	K	408.14		XE2P	43 47 31	
Critical Pressure	Pa	3.6480E+06		XE2P	43 47 31	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.26270		XE4P	43 31 47	
Crit Compress Factor		0.282		D	43	
Melting Point	K	113.54		XE2P	43 2987 47	
Triple Pt Temperature	K	113.54	1	P 2	PS 2368	
Triple Pt Pressure	Pa	1.4232E-02		P 3P	PS	
Normal Boiling Point	K	261.43		XE2P	43 47 31	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.097704	2	X 1P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.3418E+08		XE3	1486 545 47	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-2.0760E+07		XE4	1486 2987 545	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.9539E+05		XE4	1486 545 31	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	4.5396E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.6490E+09		XE3	1486 47 400	
Acentric Factor		0.1770		D	PS 43 11	
Radius of Gyration	m	2.9480E-10		D 3	1112 12 11	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	1.4027E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	4.4031E-31		XE5Z	25 169	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.04779		D 2	72	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	6.9300E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3514	3	XE1	53	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 8.4		XU0	256 1647	
Autoignition Temp	K	733.15		XU0	1647 256	

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated to be equal to the melting point temperature.  
2. Determined at the normal boiling point.  
3. Determined at 248 K.  
4. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: PROPANE, 2-METHYL-						C4H10		
						ISOBUTANE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (113.54, 1.4700E+01)	1	100	6	1.4700E+01				
Liquid Density Min(113.54, 1.2575E+01) Max(408.14, 3.8334E+00)		105	2	1.0463E+00	2.7294E-01	4.0814E+02	2.7301E-01	
Vapor Pressure Min(113.54, 1.4216E-02) Max(408.14, 3.6346E+06)		101	3	7.6858E+01	-4.4974E+03	-8.8060E+00	1.3240E-05	2.0000E+00
Heat of Vaporization Min(113.54, 2.8115E+07) Max(408.14, 0.0000E+00)	2	106	3	3.1944E+07	3.9170E-01			
Solid Heat Capacity Min(77.00, 5.1280E+04) Max(107.00, 7.4254E+04)		100	2	-1.5660E+05	7.1841E+03	-8.7142E+01	3.7537E-01	
Liquid Heat Capacity Min(113.54, 1.0039E+05) Max(390.00, 2.1244E+05)		100	4	2.2870E+05	-2.8505E+03	2.1722E+01	-6.6330E-02	7.4614E-05
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 7.2181E+04) Max(1500.00, 2.6656E+05)		107	2	6.5490E+04	2.4776E+05	1.5870E+03	1.5750E+05	-7.0699E+02
Second Virial Coefficient Min(204.07, -1.7707E+00) Max(2040.65, 8.2339E-02)		104	3	1.4580E-01	-1.2733E+02	-9.0460E+06	-6.5400E+17	-6.5300E+18
Liquid Viscosity Min(190.00, 7.3533E-04) Max(400.00, 5.2408E-05)		101	6	-1.8345E+01	1.0203E+03	1.0978E+00	-6.1000E-27	1.0000E+01
Vapor Viscosity Min(150.00, 3.3816E-06) Max(1000.00, 2.0758E-05)		102	5	1.7750E-07	6.9460E-01	2.5000E+01	1.2100E+04	
Liq Thermal Conductivity Min(113.54, 1.6101E-01) Max(253.54, 1.1392E-01)	3	100	5	1.9920E-01	-3.3636E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(261.43, 1.2901E-02) Max(673.15, 7.6611E-02)		102	4	-4.9900E-02	2.7550E-01	-2.2700E+03	-7.0000E+05	
Surface Tension Min(113.54, 3.4455E-02) Max(408.14, 0.0000E+00)		106	3	5.2165E-02	1.2723E+00			

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.  
2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.  
3. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

Isobuteno

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1-PROPENE, 2-METHYL- IUPAC NAME: ISOBUTENE Synonyms: ISOBUTYLENE 2-METHYLPROPENE Chemical Abstracts Number: 115-11-7 Structural Formula: CH <sub>2</sub> C(CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>						C4H8 ISOBUTENE
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	56.107			1	
Critical Temperature	K	417.90		XE2P	43 47	
Critical Pressure	Pa	3.9990E+06		XE2P	43 47	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.23888		XE4P	43 47	
Crit Compress Factor		0.275		D	43	
Melting Point	K	132.81		XE2P	43 47	
Triple Pt Temperature	K	132.81	1	P 2	PS	
Triple Pt Pressure	Pa	6.5451E-01		P 4P	PS	
Normal Boiling Point	K	266.25		XE2P	43 47	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.089424	2	X 1P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.6803E+07		XE3	47 398 400	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	5.8074E+07		XE4	47 3067 398	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.9359E+05		XE4	47 3067 398	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	5.9312E+06		XE2	47 398	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.5240E+09		XE4	47 400 398	
Acentric Factor		0.1893		D	PS 11 43	
Radius of Gyration	m	2.8750E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	1.4955E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	1.6678E-30		XE2Z	25	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.04429		D 3	390	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	6.7100E+08		D 3	390	
Refractive Index		1.3926	3	XUO	398	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 8.8		XUO	256 398	
Autoignition Temp	K	738.15		XUO	256	

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated to be equal to the melting point temperature.  
2. Determined at the normal boiling point.  
3. Determined at 248 K.  
4. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: 1-PROPENE, 2-METHYL- IUPAC NAME: ISOBUTENE						C4H8 ISOBUTENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (132.81, 1.5900E+01)	1	100	6	1.5900E+01				
Liquid Density Min(132.81, 1.3553E+01) Max(417.90, 4.1317E+00)		105	3	1.1015E+00	2.6660E-01	4.1790E+02	2.7964E-01	
Vapor Pressure Min(132.81, 6.5437E-01) Max(417.90, 3.9663E+06)		101	3	9.5222E+01	-4.8570E+03	-1.2567E+01	1.7800E-02	1.0000E+00
Heat of Vaporization Min(132.81, 2.8395E+07) Max(417.90, 0.0000E+00)	2	106	3	3.2950E+07	3.8900E-01			
Solid Heat Capacity Min(80.00, 5.3010E+04) Max(130.00, 7.8197E+04)		100	3	3.4263E+04	6.8540E+01	2.0724E+00		
Liquid Heat Capacity Min(133.00, 1.0674E+05) Max(380.00, 1.6989E+05)		100	3	1.7934E+05	-1.4666E+03	1.0323E+01	-3.0081E-02	3.3946E-05
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 7.3879E+04) Max(1500.00, 2.2869E+05)		107	2	7.0930E+04	2.0104E+05	1.7624E+03	1.3215E+05	-7.9482E+02
Second Virial Coefficient Min(208.95, -1.9302E+00) Max(2089.45, 8.2372E-02)		104	4	1.3110E-01	-9.9210E+01	-1.1371E+07	-1.5410E+18	6.3800E+19
Liquid Viscosity Min(240.00, 2.0887E-04) Max(350.00, 1.2442E-04)		101	5	-4.8766E+01	1.9070E+03	5.9030E+00	-9.2000E-27	1.0000E+01
Vapor Viscosity Min(175.00, 4.5955E-06) Max(1000.00, 2.4388E-05)		102	5	7.6750E-06	2.6640E-01	9.8200E+02		
Liq Thermal Conductivity Min(192.20, 1.6668E-01) Max(395.20, 7.5725E-02)		100	4	3.9180E-01	-1.5230E-03	1.8300E-06		
Vap Thermal Conductivity Min(250.00, 1.2269E-02) Max(850.00, 1.1274E-01)		102	5	-1.7165E+04	8.1240E-01	-3.1035E+10		
Surface Tension Min(132.81, 3.4434E-02) Max(417.90, 0.0000E+00)		106	3	5.5440E-02	1.2453E+00			

Issue Date: JULY 1981  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.  
2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.

1-buteno

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1-BUTENE						
IUPAC NAME: 1-BUTENE						
Synonyms: alpha-BUTENE						
alpha-BUTYLENE						
ETHYLETHYLENE						
Chemical Abstracts Number: 106-98-9      Structural Formula: CH <sub>2</sub> CHCH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>						
C4H8 1-BUTENE						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	56.107			1	
Critical Temperature	K	419.59		XE2P	43 2419	
Critical Pressure	Pa	4.0196E+06		XE3P	43 2419	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.23993		XE4P	43 2419	
Crit Compress Factor		0.276		D	43	
Melting Point	K	87.80	1	XE2P	43	
Triple Pt Temperature	K	87.80	2	P 2	PS	
Triple Pt Pressure	Pa	3.5593E-07		P 9	PS	
Normal Boiling Point	K	266.90		XE2P	43	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.089621	3	X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-5.4000E+05		XE3	1269 1831	47 31 3067
IG Gibbs of Formation	J/kmol	7.0240E+07		XE4	1269 1831	3067 47 31
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.0783E+05		XE4	1269 1831	3067 47 31
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.8484E+06		XE2	47 1269 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.5412E+09		XE2Z	400 47 1269	
Acentric Factor		0.1867		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	2.7620E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	1.5022E+04	3	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	1.1341E-30	4	XE0	25	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.04431		D 2	72	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	6.4100E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.0012		XE1	2987	
Flash Point	K		5			
Flammability Limits	vol %	1.6 TO 9.3		XU0	256	
Autoignition Temp	K	657.04		XU0	256	

Revision Date: AUG. 1987

Issue Date: JULY 1981

NOTES: 1. At saturation pressure.  
2. Estimated to be equal to the melting point temperature.  
3. Determined at the normal boiling point.  
4. Ambiguity because of possibility of different conformations or spatial isomers.  
5. Property inappropriate for this substance.

EQUATION      COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: 1-BUTENE								
C4H8 1-BUTENE								
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density	1	100	6	1.6700E+01				
Only one value available ( 87.80, 1.6700E+01)								
Liquid Density		105	2	1.1023E+00	2.6630E-01	4.1959E+02	2.8530E-01	
Min( 87.80, 1.4267E+01)								
Max( 419.59, 4.1393E+00)								
Vapor Pressure		101	3	6.7780E+01	-4.4290E+03	-7.2064E+00	8.4000E-06	2.0000E+00
Min( 87.80, 3.5593E-07)								
Max( 419.59, 3.9211E+06)								
Heat of Vaporization	2	106	3	3.3380E+07	3.9270E-01			
Min( 87.80, 3.0440E+07)								
Max( 419.59, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	1.5877E+03	-5.7789E+02	6.4207E+01	-1.0392E+00	5.3867E-03
Min( 10.00, 1.2442E+03)								
Max( 87.82, 6.2578E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	3	1.4020E+05	-5.5487E+02	2.6242E+00	-3.0270E-03	
Min( 87.80, 1.0966E+05)								
Max( 300.00, 1.2819E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	6.6500E+04	2.0567E+05	1.7713E+03	1.4075E+05	-7.9732E+02
Min( 200.00, 6.9582E+04)								
Max(1500.00, 2.2866E+05)								
Second Virial Coefficient		104	3	1.3305E-01	-1.1353E+02	-1.0255E+07	-2.0550E+18	2.0150E+20
Min( 209.80, -1.8102E+00)								
Max(2098.00, 7.7826E-02)								
Liquid Viscosity		101	5	-2.6725E+00	3.3610E+02	-1.2860E+00		
Min( 160.00, 8.2630E-04)								
Max( 270.00, 1.7916E-04)								
Vapor Viscosity		102	5	1.0319E-06	4.8960E-01	3.4737E+02		
Min( 175.00, 4.3340E-06)								
Max( 800.00, 1.8984E-05)								
Liq Thermal Conductivity	3	100	5	2.1353E-01	-3.5020E-04			
Min( 104.90, 1.7679E-01)								
Max( 264.90, 1.2076E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	5	-2.2790E+03	7.6560E-01	-3.5260E+09		
Min( 225.00, 9.1934E-03)								
Max( 800.00, 8.6329E-02)								
Surface Tension		106	3	5.6000E-02	1.2341E+00			
Min( 87.80, 4.1914E-02)								
Max( 419.59, 0.0000E+00)								

Revision Date: AUG. 1987

Issue Date: JULY 1981

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density correlation equation at the triple point.  
2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.  
3. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

1,3-butadieno

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1,3-BUTADIENE IUPAC NAME: 1,3-BUTADIENE Synonyms: BIETHYLENE BUTADIENE alpha,gamma-BUTADIENE ERVTHRENE VINYLETHYLENE Chemical Abstracts Number: 106-99-0 Structural Formula: CH2CHCHCH2						C4H6 1,3-BUTADIENE
						BIVINYL BUTA-1,3-DIENE DIVINYL PYRROLYLENE
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	54.092	1		1	
Critical Temperature	K	425.37		XE2P	43 47	
Critical Pressure	Pa	4.3299E+06		XE2P	43 47	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.22084		XE4P	43 47	
Crit Compress Factor		0.270		D	43	
Melting Point	K	164.25		XE2P	43 47	
Triple Pt Temperature	K	164.25	2	P 2	PS	
Triple Pt Pressure	Pa	6.9049E+01		P 1P	PS	
Normal Boiling Point	K	268.74		XE2P	43 47	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.083114	3	X 3P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	1.1017E+08		XE3	47 31 2419	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	1.5067E+08		XE3	47 31 2419	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.7874E+05		XE3	47 31 2419	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	7.9845E+06		XU0	13	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.4097E+09		XE3	47	
Acentric Factor		0.1932		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	2.6020E-10		D 3	1112	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	1.5607E+04	3	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			25	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.04082		D 2	72	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	5.8800E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.4293	4	XU0	397	
Flash Point	K		5			
Flammability Limits	vol %	2.0 TO 11.5		XU0	256	
Autoignition Temp	K	702.04		XU0	256	

Issue Date: JULY 1981 Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Acutely toxic chemical identified by EPA. C & EN, p. 20, January 6, 1986.  
 2. Estimated to be equal to the melting point temperature.  
 3. Determined at the normal boiling point.  
 4. Determined at 248 K.  
 5. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: 1,3-BUTADIENE Property						C4H6 1,3-BUTADIENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (0.0, 1.7877E+01)	1	100	4	1.7877E+01				
Liquid Density Min(164.25, 1.4061E+01) Max(425.37, 4.5473E+00)		105	3	1.2381E+00	2.7227E-01	4.2537E+02	2.9074E-01	
Vapor Pressure Min(164.25, 6.9049E+01) Max(425.37, 4.3308E+06)		101	2	7.4102E+01	-4.5800E+03	-8.2922E+00	1.1820E-05	2.0000E+00
Heat of Vaporization Min(164.25, 2.7646E+07) Max(425.37, 0.0000E+00)	2	106	2	3.5600E+07	6.2200E-01	-2.8900E-01	5.2000E-02	
Solid Heat Capacity Min(15.00, 6.1024E+03) Max(162.00, 8.6898E+04)		100	3	-5.1000E+03	7.1000E+02	3.5000E+00	-7.4000E-02	2.9000E-04
Liquid Heat Capacity Min(165.00, 1.0333E+05) Max(350.00, 1.4148E+05)		100	2	1.2886E+05	-3.2310E+02	1.0150E+00	3.2000E-05	
Ideal Gas Heat Capacity Min(100.00, 4.3229E+04) Max(1500.00, 1.9472E+05)		107	3	4.3029E+04	1.7311E+05	1.2393E+03	1.0922E+05	5.5614E+02
Second Virial Coefficient Min(212.50, -1.4984E+00) Max(2125.00, 6.7486E-02)		104	4	1.2440E-01	-1.1890E+02	-9.2200E+06	4.0250E+18	-9.4580E+20
Liquid Viscosity Min(250.00, 2.5471E-04) Max(400.00, 4.8797E-05)		101	5	1.7844E+01	-3.1020E+02	-4.5058E+00		
Vapor Viscosity Min(250.00, 7.4635E-06) Max(650.00, 1.6739E-05)		102	4	7.0140E-08	8.4530E-01			
Liq Thermal Conductivity Min(164.25, 1.6213E-01) Max(268.74, 1.2384E-01)	3	100	5	2.2231E-01	-3.6640E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(250.00, 1.1115E-02) Max(850.00, 1.2225E-01)		102	5	-2.0890E+04	9.5930E-01	-9.3820E+10		
Surface Tension Min(164.25, 2.8555E-02) Max(425.37, 0.0000E+00)		106	5	4.7682E-02	1.0507E+00			

Issue Date: JULY 1981 Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Theoretical density calculated from crystallographic data.  
 2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.  
 3. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

n-butano

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: BUTANE				C4H10 n-BUTANE		
IUPAC NAME: BUTANE				METHYLETHYLMETHANE		
Synonyms: DIETHYL				Structural Formula: CH3(CH2)2CH3		
Chemical Abstracts Number: 106-97-8						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	58.123			1	
Critical Temperature	K	425.18		XE2P	43 47 1632	
Critical Pressure	Pa	3.7969E+06		XE4P	43 47 1632	
Critical Volume	m**3/kmol	0.25490		XE4	2419 43 47	
Crit Compress Factor		0.274		D	43	
Melting Point	K	134.86	1	P 2	PS 43 47	
Triple Pt Temperature	K	134.86		XE2	1632 456	456
Triple Pt Pressure	Pa	6.7358E-01		XE0	1632 PS 1762	
Normal Boiling Point	K	272.65		XE2P	43 47 1632	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.096553	2	X 2	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.2565E+08		XE3	1486 47 40	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-1.6560E+07		XE3	1486 545 31	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.0991E+05		XE3	1486 2419 2987	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	4.6610E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.6575E+09		XE3	1486 400 1830	
Acentric Factor		0.1993		D	PS 43	11
Radius of Gyration	m	2.8860E-10		D 3	1112 11 12	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.4453E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			169	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.04780		D 2	72	
van der Waals Area	m**2/kmol	6.9400E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3292	3	XE1	47 2987	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 8.5		XU0	1647 256	
Autoignition Temp	K	678.15		XU0	256 1647	

Issue Date: JULY 1981  
 Revision Date: AUG. 1987  
 NOTES: 1. Estimated to be equal to the triple point temperature.  
 2. Determined at the normal boiling point.  
 3. At saturation pressure.  
 4. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: BUTANE				C4H10 n-BUTANE				
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	2	1.5194E+01	-6.8446E-03			
Min( 23.15, 1.5036E+01)								
Max( 134.86, 1.4271E+01)								
Liquid Density		105	2	1.0698E+00	2.7240E-01	4.2518E+02	2.8630E-01	
Min( 134.86, 1.2602E+01)								
Max( 425.18, 3.9273E+00)								
Vapor Pressure		101	3	6.7164E+01	-4.3862E+03	-7.1805E+00	9.7145E-06	2.0000E+00
Min( 134.86, 6.7146E-01)								
Max( 425.18, 3.7753E+06)								
Heat of Vaporization		106	3	3.3013E+07	3.7680E-01			
Min( 134.86, 2.8592E+07)								
Max( 425.18, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-1.5900E+04	1.3570E+03	-7.6800E+00	2.3600E-02	
Min( 20.00, 8.3568E+03)								
Max( 108.00, 7.0806E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	3	2.9060E+05	-3.0036E+03	1.8266E+01	-4.7125E-02	4.7040E-05
Min( 134.86, 1.1772E+05)								
Max( 410.00, 2.1097E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	7.1340E+04	2.4300E+05	1.6300E+03	1.5033E+05	-7.3042E+02
Min( 200.00, 7.6733E+04)								
Max( 1500.00, 2.6602E+05)								
Second Virial Coefficient		104	3	1.4164E-01	-1.3566E+02	-1.0664E+07	-9.7300E+17	9.8400E+16
Min( 212.58, -1.8398E+00)								
Max( 2125.80, 7.6714E-02)								
Liquid Viscosity		101	4	7.5000E-01	2.1870E+02	-1.7882E+00	-4.0000E-27	1.0000E+01
Min( 180.00, 6.6138E-04)								
Max( 420.00, 3.6665E-05)								
Vapor Viscosity		102	5	1.0310E-05	2.0770E-01	1.0055E+03	8.1000E+03	
Min( 150.00, 3.6201E-06)								
Max( 1200.00, 2.4387E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	4	2.4760E-01	-4.7874E-04			
Min( 143.15, 1.7907E-01)								
Max( 273.15, 1.1683E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	4	8.0200E+02	8.5970E-01	1.9750E+09		
Min( 225.00, 9.6153E-03)								
Max( 675.00, 7.4176E-02)								
Surface Tension		106	3	5.2660E-02	1.2330E+00			
Min( 134.86, 3.2899E-02)								
Max( 425.18, 0.0000E+00)								

Issue Date: JULY 1981  
 Revision Date: AUG. 1987

trans-2-buteno

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (E)- IUPAC NAME: trans-2-BUTENE Synonyms: trans-1,2-DIMETHYLETHYLENE Chemical Abstracts Number: 624-64-6						C4H8 trans-2-BUTENE
Structural Formula: CH3CHCHCH3						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	56.107			1	
Critical Temperature	K	428.63		XE2P	43 47	
Critical Pressure	Pa	4.1024E+06		XE2P	43 47	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.23818		XE4P	43 47	
Crit Compress Factor		0.274		D	43	
Melting Point	K	167.62		XE2P	43 31 47	
Triple Pt Temperature	K	167.60	1	P 2	PS	
Triple Pt Pressure	Pa	7.2321E+01		P 2P	PS	
Normal Boiling Point	K	274.03		XE2P	43 47 31	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.089415	2	X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.1171E+07		XE3	47 31 400	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	6.2969E+07		XE4	47 3067 31	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.9648E+05		XE4	47 31 3067	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	9.7575E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.5287E+09		XE3	47 400 1831	
Acentric Factor		0.2182		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	2.7340E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	1.5188E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			25	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.04428		D 3	72	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	6.4000E+08		D 3	72	
Refractive Index		1.3932		XU0	456	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 9.7		XU0	256	
Autoignition Temp	K	597.04		XU0	256	

Issue Date: JAN. 1982

Revision Date: AUG. 1987

- NOTES: 1. Estimated to be equal to the melting point temperature.  
2. Determined at the normal boiling point.  
3. Determined at 248 K.  
4. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS

Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (E)-						C4H8 trans-2-BUTENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (167.60, 1.5300E+01)	1	100	6	1.5300E+01				
Liquid Density Min(167.60, 1.3085E+01) Max(428.63, 4.2293E+00)	2	105	3	1.1511E+00	2.7217E-01	4.2863E+02	2.8571E-01	
Vapor Pressure Min(167.60, 7.2321E+01) Max(428.63, 4.1029E+06)		101	2	1.0412E+02	-5.1712E+03	-1.4152E+01	2.0860E-02	1.0000E+00
Heat of Vaporization Min(167.60, 2.7716E+07) Max(428.63, 0.0000E+00)	3	106	3	3.3200E+07	3.6400E-01			
Solid Heat Capacity Min(14.56, 1.9324E+03) Max(160.40, 1.0202E+05)		100	4	-1.1910E+04	9.8100E+02	-1.8250E+00	-1.9350E-02	1.2597E-04
Liquid Heat Capacity Min(170.66, 1.1007E+05) Max(271.03, 1.2265E+05)		100	2	1.1276E+05	-1.0470E+02	5.2100E-01		
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 7.4340E+04) Max(1500.00, 2.2817E+05)		107	2	7.2018E+04	2.0046E+05	1.8017E+03	1.3044E+05	-8.2484E+02
Second Virial Coefficient Min(214.30, -1.7903E+00) Max(2143.05, 6.9819E-02)		104	4	1.3400E-01	-1.3530E+02	-1.0300E+07	-1.7400E+18	1.3800E+20
Liquid Viscosity Min(200.00, 5.6226E-04) Max(360.00, 1.1960E-04)		101	6	-1.0175E+01	6.6492E+02	-1.1950E-01		
Vapor Viscosity Min(274.00, 6.9855E-06) Max(650.00, 1.5827E-05)		102	3	1.0500E-06	4.8670E-01	3.5870E+02		
Liq Thermal Conductivity Min(167.60, 1.5610E-01) Max(267.60, 1.2068E-01)	4	100	5	2.1546E-01	-3.5420E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(285.22, 1.3107E-02) Max(1256.77, 1.3701E-01)		102	3	7.8576E-05	1.0565E+00	1.4630E+01	1.0592E+05	
Surface Tension Min(167.60, 3.3696E-02) Max(428.63, 0.0000E+00)		106	4	6.7640E-02	1.4050E+00			

Issue Date: JAN. 1982

Revision Date: AUG. 1987

- NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.  
2. Equation coefficients derived from modified Rackett equation. See ref 1108.  
3. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.  
4. Data predicted by method of Pachalyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

cis-2-buteno

PROPERTY CONSTANTS								
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (Z)-						C4H8		
IUPAC NAME: cis-2-BUTENE						cis-2-BUTENE		
Synonyms: DIMETHYLETHYLENE						cis-1,2-DIMETHYLETHYLENE		
PSEUDOBOBTYLENE								
Chemical Abstracts Number: 590-18-1		Structural Formula: CH3CHCH3						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)		
Molecular Weight	kg/kmol	56.107			1			
Critical Temperature	K	435.58		XE2P	43 47 31			
Critical Pressure	Pa	4.2058E+06		XE2P	43 47			
Critical Volume	m**3/kmol	0.23398		XE4P	43 47			
Crit Compress Factor		0.272		D	43			
Melting Point	K	134.26	1	P 1	PS 43 47			
Triple Pt Temperature	K	134.26		XE1	999			
Triple Pt Pressure	Pa	2.4703E-01		P 2P	PS			
Normal Boiling Point	K	276.87		XE2P	43 47 31			
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.087450	2	X 2P	PS			
IG Heat of Formation	J/kmol	-6.9873E+06		XE3	47 400 3067	31		
IG Gibbs of Formation	J/kmol	6.5856E+07		XE4	47 31 3067			
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.0083E+05		XE4	47 3067 31			
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	7.3095E+06		XE2	47 31			
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.5344E+09		XE1Y	400 47 1831			
Acentric Factor		0.2030		D	PS 43			
Radius of Gyration	m	2.8330E-10		D 3	1112 11			
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.5543E+04	2	D 3	PS			
Dipole Moment	C*m	1.0007E-30		XE7Z	25			
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.04428		D 3	72			
van der Waals Area	m**2/kmol	6.4000E+08		D 3	72			
Refractive Index		1.3842	3	XUD	456			
Flash Point	K		4					
Flammability Limits	vol %	1.6 TO 9.7		XUD	456			
Autoignition Temp	K	598.15		XUD	1566			
Issue Date: JAN. 1982				Revision Date: AUG. 1987				
NOTES: 1. Estimated to be equal to the triple point temperature.								
2. Determined at the normal boiling point.								
3. Determined at 248 K.								
4. Property inappropriate for this substance.								
EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (Z)-						C4H8		
						cis-2-BUTENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density	1	100	6	1.6290E+01				
Only one value available (134.26, 1.6290E+01)								
Liquid Density	2	105	3	1.1613E+00	2.7053E-01	4.3558E+02	2.8571E-01	
Min(134.26, 1.3924E+01)								
Max(435.58, 4.2927E+00)								
Vapor Pressure		101	2	7.7551E+01	-4.8480E+03	-8.7864E+00	1.1717E-05	2.0000E+00
Min(134.26, 2.4703E-01)								
Max(435.58, 4.2057E+06)								
Heat of Vaporization	3	106	2	3.4480E+07	3.8270E-01			
Min(134.26, 2.9945E+07)								
Max(435.58, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-1.6050E+04	1.1135E+03	-3.5000E-01	-5.3450E-02	2.5940E-04
Min(30.00, 1.5807E+04)								
Max(134.26, 8.2069E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	3	1.9756E+05	-1.3555E+03	7.8678E+00	-2.1278E-02	2.5200E-05
Min(134.26, 1.1409E+05)								
Max(366.48, 1.6475E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	6.3400E+04	1.4415E+05	8.5230E+02	9.0200E+04	2.4520E+03
Min(200.00, 6.5483E+04)								
Max(1500.00, 2.2702E+05)								
Second Virial Coefficient		104	4	1.2950E-01	-1.0336E+02	-1.2437E+07	-3.8370E+18	4.2650E+20
Min(217.77, -1.9208E+00)								
Max(2177.75, 8.0834E-02)								
Liquid Viscosity		101	6	-1.0175E+01	6.6492E+02	-1.1950E-01		
Min(200.00, 5.6226E-04)								
Max(340.00, 1.3424E-04)								
Vapor Viscosity		102	2	1.0899E-06	4.7910E-01	3.3865E+02		
Min(277.00, 7.2565E-06)								
Max(450.00, 1.1611E-05)								
Liq Thermal Conductivity	4	100	5	2.1597E-01	-3.4450E-04			
Min(134.26, 1.6972E-01)								
Max(274.26, 1.2149E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	3	6.7737E-05	1.0709E+00	-6.5881E+01	1.2939E+05	
Min(273.15, 1.1047E-02)								
Max(1273.15, 1.3926E-01)								
Surface Tension	5	106	4	5.8810E-02	1.2450E+00			
Min(134.26, 3.7171E-02)								
Max(435.58, 0.0000E+00)								
Issue Date: JAN. 1982				Revision Date: AUG. 1987				
NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.								
2. Equation coefficients derived from modified Rackett equation. See ref 110B.								
3. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.								
4. Data predicted by method of Pachayappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.								
5. Data predicted by Sugden's method used in regression.								

n-pentano

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: PENTANE						C5H12
IUPAC NAME: PENTANE						n-PENTANE
Synonyms: SKELLYSOLVE A						
Chemical Abstracts Number: 109-66-0						
Structural Formula: CH3(CH2)3CH3						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	72.150			1	
Critical Temperature	K	469.65		XE2P	43 47 1910	
Critical Pressure	Pa	3.3688E+06		XE3P	43 47 1910	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.31234		XU4	1910 47 43	
Crit Compress Factor		0.269		D	PS	
Melting Point	K	143.42		XE2P	43 47 2729	
Triple Pt Temperature	K	143.42	1	P 2	PS 2369	
Triple Pt Pressure	Pa	5.2953E-02		P 3P	PS	
Normal Boiling Point	K	309.22		XE2P	43 47 2369	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.116126		X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.4671E+08		XE3	1486 400 47	47 31
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-8.7700E+06		XE4	1486 2419 2987	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.4945E+05		XE4	1486 2419 2987	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	8.3931E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-3.2450E+09		XE3	1486 400 1830	
Acentric Factor		0.2486		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	3.3370E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	1.4439E+04		D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			169	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.05803		D 2	72	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	8.2900E+08		D 2	72	
Refractive Index	K	1.3547		XE1P	43 2987	
Flash Point	K	233.15		XU0	256	256
Flammability Limits	vol %	1.4 TO 7.8		XU0	1647	256
Autoignition Temp	K	533.15		XU0	1647	

Revision Date: AUG. 1987

Issue Date: JAN. 1982

NOTES: 1. Estimated to be equal to the melting point temperature.

EQUATION COEFFICIENTS

Chemical Abstracts Name: PENTANE						C5H12		
						n-PENTANE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	4	1.3533E+01	-6.0608E-03			
Min( 23.15, 1.3393E+01)								
Max( 143.42, 1.2664E+01)								
Liquid Density		105	2	8.6360E-01	2.6923E-01	4.6965E+02	2.8215E-01	
Min( 143.42, 1.0481E+01)								
Max( 469.65, 3.2077E+00)								
Vapor Pressure		101	3	8.1624E+01	-5.5785E+03	-9.2354E+00	9.4522E-06	2.0000E+00
Min( 143.42, 5.2931E-02)								
Max( 469.65, 3.3178E+06)								
Heat of Vaporization	1	106	3	3.9850E+07	3.9790E-01			
Min( 143.42, 3.4472E+07)								
Max( 469.65, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-1.0050E+04	1.0103E+03	4.2700E+00	-1.0169E-01	4.2200E-04
Min( 12.29, 2.8324E+03)								
Max( 134.60, 9.3832E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	4	1.5016E+05	-1.1700E+02	1.4490E-01	1.4840E-03	
Min( 148.60, 1.4084E+05)								
Max( 302.87, 1.6924E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	8.8050E+04	3.0110E+05	1.6502E+03	1.8920E+05	-7.4760E+02
Min( 200.00, 9.4039E+04)								
Max( 1500.00, 3.2927E+05)								
Second Virial Coefficient		104	3	1.6860E-01	-1.7264E+02	-2.0155E+07	-6.5450E+18	4.6000E+20
Min( 234.80, -2.6201E+00)								
Max( 2348.00, 9.3517E-02)								
Liquid Viscosity		101	3	-2.0383E+01	1.0504E+03	1.4874E+00	-2.0167E-27	1.0000E+01
Min( 143.42, 3.4377E-03)								
Max( 469.65, 4.3235E-05)								
Vapor Viscosity		102	5	6.8210E-07	5.2360E-01	2.7367E+02		
Min( 302.50, 7.1274E-06)								
Max( 900.00, 1.8424E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	4	2.5370E-01	-5.7600E-04	3.4400E-07		
Min( 143.42, 1.7817E-01)								
Max( 469.65, 5.9058E-02)								
Vap Thermal Conductivity		102	4	-2.6640E+03	8.2220E-01	-5.8080E+09		
Min( 225.00, 8.8645E-03)								
Max( 480.00, 3.5259E-02)								
Surface Tension		106	3	5.2090E-02	1.2054E+00			
Min( 143.42, 3.3574E-02)								
Max( 469.65, 0.0000E+00)								

Revision Date: AUG. 1987

Issue Date: JAN. 1982

NOTES: 1. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.

Metanol

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: METHANOL IUPAC NAME: METHANOL Synonyms: CARBINOL COLUMBIAN SPIRIT METHYL ALCOHOL MONOHYDROXYMETHANE WOOD NAPHTHA COLONIAL SPIRIT HYDROXYMETHANE METHYL HYDROXIDE WOOD ALCOHOL WOOD SPIRIT Chemical Abstracts Number: 67-56-1 Structural Formula: CH3OH						CH4O METHANOL
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	32.042	1		1	
Critical Temperature	K	512.58		XE2	38 30 6	
Critical Pressure	Pa	8.0959E+06		XE3	38 30 6	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.11780		XE4	38 30 6	
Crit Compress Factor		0.224		D	3	
Melting Point	K	175.47		XE2	30 3 7	2 4
Triple Pt Temperature	K	175.47		XE2	30	
Triple Pt Pressure	Pa	1.0540E-01		P 3	PS	
Normal Boiling Point	K	337.85		XE2	30 6 3	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.040702		X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-2.0067E+08		XE2	1511 30 3	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-1.6242E+08		XE0	1511 30 3	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.3970E+05		XE0	1511 15 3	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.2049E+06		XE2	30 2865	29 382
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-6.3810E+08		XE2Y	400	
Acentric Factor		0.5656		D	PS 11 12	
Radius of Gyration	m	1.5520E-10		D 3	1112 11 12	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	2.9523E+04		D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	5.6706E-30		XE2Z	25	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.02171		D 2	72	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	3.5800E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3265		XE1	3 39 1492	
Flash Point	K	284.26		XUO	256	
Flammability Limits	vol %	7.3 TO 36.0		XUO	256	
Autoignition Temp	K	737.04		XUO	256	

Issue Date: JULY 1981  
 NOTES: 1. Acutely toxic chemical identified by EPA. C & EN, p. 20, January 6, 1986.  
 Revision Date: AUG. 1987

EQUATION COEFFICIENTS						
Chemical Abstracts Name: METHANOL Property						CH4O METHANOL
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS		
Solid Density Only one value available (163.15, 3.0585E+01)		100	3	A	B	C
Liquid Density Min(175.47, 2.7652E+01) Max(512.58, 8.4878E+00)		105	2			D
Vapor Pressure Min(175.47, 1.0540E-01) Max(512.58, 8.1160E+06)		101	2			E
Heat of Vaporization Min(175.47, 4.5006E+07) Max(512.58, 0.0000E+00)		106	3			
Solid Heat Capacity Min(30.00, 1.1537E+04) Max(151.00, 5.7304E+04)		100	3			
Liquid Heat Capacity Min(175.47, 7.0959E+04) Max(400.00, 1.1200E+05)		100	2			
Ideal Gas Heat Capacity Min(100.00, 3.9314E+04) Max(1500.00, 1.0545E+05)		107	2			
Second Virial Coefficient Min(256.30, -9.1876E+00) Max(800.00, -7.1218E-02)		104	5			
Liquid Viscosity Min(230.00, 1.8802E-03) Max(375.00, 2.2650E-04)		101	5			
Vapor Viscosity Min(240.00, 7.5232E-06) Max(1000.00, 3.1281E-05)		102	5			
Liq Thermal Conductivity Min(175.47, 2.3439E-01) Max(337.85, 1.8876E-01)		100	3			
Vap Thermal Conductivity Min(273.00, 1.3652E-02) Max(684.37, 6.7667E-02)		102	3			
*Surface Tension Min(273.10, 2.4229E-02) Max(337.85, 1.9059E-02)	1	100	2			

Issue Date: JULY 1981  
 Revision Date: AUG. 1987  
 NOTES: 1. Data regressed with equation 100 because regression with equation 106 produces B coefficient less than 1.0 while theoretical universal constant should be 1.2. (see ref. #1008).

MTBE

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: PROPANE, 2-METHOXY-2-METHYL-					C5H12O	
IUPAC NAME: METHYL t-BUTYL ETHER					METHYL tert-BUTYL ETHER	
Synonyms: MTBE					METHYL t-BUTYL ETHER	
Chemical Abstracts Number: 1634-04-4					Structural Formula: H3COC(CH3)3	
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	88.150			1	
Critical Temperature	K	497.10		XU1	1035 2721	
Critical Pressure	Pa	3.4300E+06		XU2	1035 2721	
Critical Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.32900	1	P 5	639 2721	
Crit Compress Factor		0.273		D	PS	
Melting Point	K	164.55		XE2P	3 1036 2721	
Triple Pt Temperature	K	164.55	2	P 2	PS 1193 2721	
Triple Pt Pressure	Pa	5.3646E-01		P 4	PS	
Normal Boiling Point	K	328.35		XE2	3 422 2721	
Liq Molar Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.119887		X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-2.9288E+08		XE3	31 400 3	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-1.2544E+08		XE0	31	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.5296E+05		XE0	31 1193 2498	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	7.6000E+06		XU0	1193 2721	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-3.0999E+09		XE2Y	400 2721	
Acentric Factor		0.2674		D	PS 2721	
Radius of Gyration	m	3.1790E-10		D 3	1112	
Solubility Parameter	(J/m <sup>3</sup> ) <sup>0.5</sup>	1.5117E+04		D 4	PS	
Dipole Moment	C*m	4.5400E-30	3	XE6	2721 169	
van der Waals Volume	m <sup>3</sup> /kmol	0.06171		D 2	72	
van der Waals Area	m <sup>2</sup> /kmol	9.0800E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3663		XE1	3	
Flash Point	K	245.37		XU0	1101	
Flammability Limits	vol %	2.0 TO 15.1		XU0	1101	
Autoignition Temp	K		4			

Issue Date: JAN. 1982  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by the method of Fedors.  
2. Estimated to be equal to the melting point temperature.  
3. Determined in benzene at 298 K.  
4. No experimental values or satisfactory prediction method available.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: PROPANE, 2-METHOXY-2-METHYL-					C5H12O			
Property					METHYL tert-BUTYL ETHER			
PROPERTY	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density	1	100	6	1.1400E+01				
Only one value available (164.55, 1.1400E+01)								
Liquid Density		105	2	8.2157E-01	2.7032E-01	4.9710E+02	2.8290E-01	
Min(164.55, 9.7682E+00)								
Max(497.10, 3.0392E+00)								
Vapor Pressure	2	101	3	5.5874E+01	-5.1301E+03	-4.9617E+00	1.9765E-17	6.0000E+00
Min(164.55, 5.3646E-01)								
Max(497.10, 3.4230E+06)								
Heat of Vaporization	3	106	4	4.4910E+07	7.8420E-01	-8.7600E-01	5.1800E-01	
Min(164.55, 3.5987E+07)								
Max(497.10, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	4	-9.8000E+03	1.1890E+03	-1.8000E-01	-6.5900E-02	3.4630E-04
Min(10.00, 2.0096E+03)								
Max(164.55, 1.4125E+05)								
Liquid Heat Capacity		100	2	1.4012E+05	-9.0000E+00	5.6300E-01		
Min(164.55, 1.5388E+05)								
Max(328.35, 1.9786E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	9.9328E+04	3.0667E+05	1.7426E+03	2.0764E+05	-7.9558E+02
Min(200.00, 1.0394E+05)								
Max(1500.00, 3.4321E+05)								
Second Virial Coefficient	4	104	5	1.9706E-01	-2.0888E+02	-2.4428E+07	4.0528E+19	-1.2458E+22
Min(248.60, -2.8901E+00)								
Max(2478.60, 1.1118E-01)								
Liquid Viscosity		101	3	-7.3165E+00	8.1050E+02	-5.9662E-01		
Min(219.25, 1.0747E-03)								
Max(449.93, 1.0517E-04)								
Vapor Viscosity	5	102	5	6.1865E-07	5.7210E-01	3.5180E+02		
Min(300.00, 7.4407E-06)								
Max(1000.00, 2.3814E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	4	1.8320E-01	-2.2370E-04			
Min(299.48, 1.1621E-01)								
Max(460.87, 8.0103E-02)								
Vap Thermal Conductivity	6	102	5	-2.5118E+01	1.1646E+00	-7.9540E+08	8.8900E+10	
Min(273.00, 1.0033E-02)								
Max(1000.00, 1.1083E-01)								
Surface Tension	7	106	4	5.9353E-02	1.2385E+00			
Min(164.55, 3.6076E-02)								
Max(497.10, 0.0000E+00)								

Issue Date: JAN. 1982  
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.  
2. Data predicted by Riedel's method used in regression.  
3. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.  
4. Data predicted by method of Tsonopoulos used in regression.  
5. Data predicted by modified Chapman-Enskog method used in regression.  
6. Data predicted by method of Roy and Thodos used in regression.  
7. Data predicted by Sugden's method used in regression.

## Anexo V: Tabla del intercambiador de calor

Para el cálculo del condensador se ha recurrido al Manual del Ingeniero Químico (Perry y Chilton, Ed. Mc. Graw Hill) donde vienen recogidas una serie de tablas que relacionan el número de tubos y el diámetro de la carcasa. Se ha utilizado la siguiente:

CONSTRUCCIÓN DEL LADO DEL TUBO 11-15

Tabla 11-3. Número de orificios en el laminado de tubos\*

4. Tubos de 1/2 de pulg de diámetro externo, con cuadrado de 1/8 de pulg

Diámetro interno del casco, en pulg.	T.E.M.A. P o S				T.E.M.A. U		
	Número de pasos						
	1	2	4	6	2	4	6
8	55	48	34	24	52	40	32
10	88	78	62	56	90	80	74
12	140	138	112	100	140	128	108
13 1/4	178	172	146	136	180	164	148
15 1/4	245	232	208	192	246	232	216
17 1/4	320	308	274	260	330	312	292
19 1/4	405	392	352	336	420	388	368
21 1/4	502	484	442	424	510	488	460
23 1/4	610	584	536	508	626	596	562
25	700	676	618	600	728	692	644
27	843	812	742	716	856	816	780
29	970	942	868	840	998	958	920
31	1127	1096	1014	984	1148	1108	1060
33	1288	1250	1172	1148	1318	1268	1222
35	1479	1438	1330	1308	1492	1436	1388
37	1647	1604	1520	1480	1684	1620	1568
39	1840	1794	1700	1664	1882	1816	1754
42	2157	2112	2004	1968	2196	2136	2068
45	2511	2458	2326	2288	2530	2464	2402
48	2865	2808	2686	2656	2908	2832	2764
54	3656	3600	3462	3404	3712	3624	3556
60	4538	4472	4310	4256	4608	4508	4426

8. Tubos de 1/2 de pulg de diámetro exterior con paso triangular de 1/8 de pulg

Diámetro interno del casco, en pulg.	T.E.M.A. L o M			T.E.M.A. P o S			T.E.M.A. U				
	Número de pasos										
	1	2	4	6	1	2	4	6	2	4	6
8	64	48	34	24	34	32	16	18	32	24	24
10	85	72	52	50	60	62	52	44	64	52	52
12	122	114	94	96	109	98	78	68	98	88	78
13 1/4	151	142	124	112	126	120	106	100	126	116	108
15 1/4	204	192	166	168	183	168	146	136	180	160	148
17 1/4	264	254	228	220	237	228	202	192	238	224	204
19 1/4	332	326	290	280	297	286	258	248	298	280	262
21 1/4	417	396	364	348	372	356	324	316	370	352	334
23 1/4	495	478	430	420	450	430	392	376	456	428	408
25	579	554	512	488	518	498	456	444	534	500	474
27	676	648	602	584	618	602	548	532	628	600	570
29	785	762	704	688	729	708	650	624	736	696	668
31	909	878	814	792	843	812	744	732	846	812	780
33	1035	1002	944	920	962	934	868	840	978	928	904
35	1164	1132	1062	1036	1090	1064	990	972	1100	1060	1008
37	1304	1270	1200	1168	1233	1196	1132	1100	1238	1200	1152
39	1460	1422	1338	1320	1365	1348	1266	1244	1390	1336	1290
42	1703	1664	1578	1552	1611	1580	1498	1464	1632	1568	1524
45	1960	1918	1830	1800	1875	1834	1736	1708	1882	1820	1770
48	2242	2196	2106	2060	2132	2100	1998	1964	2152	2092	2044
54	2861	2804	2682	2660	2730	2684	2574	2538	2748	2680	2628
60	3527	3476	3360	3300	3395	3346	3225	3196	3420	3340	3286
66	4292	4228	4088	4044							
72	5116	5044	4902	4868							
78	6034	5964	5786	5740							
84	7005	6934	6766	6680							
90	8093	7998	7832	7708							
96	9203	9114	8896	8844							
108	11696	11618	11336	11268							
120	14459	14378	14080	13984							

\*Con la autorización de la Nooter Corp.

## Anexo VI: Tablas para el cálculo del coste básico de los equipos

Para el cálculo del coste de los diferentes equipos que constituyen el proceso se ha recurrido al libro “Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes” de R. Turton, en el cual vienen recogidas las siguientes tablas para la determinación de los coeficientes:

### Columna de destilación (columna de platos)

Number of Trays	$F_q$
1	3.0
4	2.5
7	2.0
10	1.5
>20	1.0

Material of Construction	$F_{BM}$	
	Trays	Demister Pad
CS	1.2	-
SS	2.0	1.2
Fluorocarbon	-	2.0
Ni-alloy	5.0	4.2

### Intercambiadores de calor

Exchanger Type	$K_1$	$K_2$	$K_3$	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$B_1$	$B_2$	$A_{min}$ (m <sup>2</sup> )	$A_{max}$ (m <sup>2</sup> )	$P_{max}$ (barg)
Double Pipe	3.0238	0.0603	0	6.4945 <sup>1</sup>	-6.6786	1.7442	0.74	1.21	0.2	10	300
Multiple Pipe	2.1138	0.9658	0	6.4945 <sup>1</sup>	-6.6786	1.7442	0.74	1.21	10	75	300
Fixed Tube Sheet or U-Tube	3.2138	0.2688	0.07961	-0.06499 <sup>2</sup>	0.05025	0.01474	1.80	1.50	4	900	140
Floating Head	3.4338	0.1445	0.10790	-0.06499 <sup>2</sup>	0.05025	0.01474	1.80	1.50	10	900	140
Bayonet	3.5238	0.1916	0.09474	-0.06499 <sup>2</sup>	0.05025	0.01474	1.80	1.50	10	900	140
Kettle Reboiler	3.5638	0.1906	0.11070	-0.06499 <sup>2</sup>	0.05025	0.01474	1.80	1.50	10	100	140
Scraped Wall	3.7438	0.9270	0	6.4945 <sup>1</sup>	-6.6786	1.7442	0.74	1.21	2	20	300
Teflon Tube	3.5738	0.4548	0	0	0	0	1.80	1.50	7	75	15
Air Cooler	3.6418	0.4053	0	-0.06154	0.0473	0	1.53	1.27	3.5	20,000	250
Spiral Tube	3.4088	0.6000	0.09944	-0.4045 <sup>3</sup>	0.1859	0	0.74	1.21	.1	45	400
Spiral Plate	3.6788	0.4412	0	0	0	0	1.53	1.27	2	200	19
Flat Plate	3.8528	0.4242	0	0	0	0	1.53	1.27	15	1,500	19

<sup>1</sup> Pressure factors given are for 100 < P < 300 barg, for 40 < P < 100 use  $C_1 = 0.6209$ ,  $C_2 = -0.9274$ ,  $C_3 = 0.3369$ , for P < 40  $C_1 = C_2 = C_3 = 0$

<sup>2</sup> Pressure factors given are for when shell or both shell and tube are > 10 barg, when tubes only >10 barg use  $C_1 = -0.04139$ ,  $C_2 = 0.04139$ ,  $C_3 = 0$

<sup>3</sup> Pressure factors given are for when shell or both shell and tube are > 10 barg, when tubes only >10 barg use  $C_1 = -0.21150$ ,  $C_2 = 0.09717$ ,  $C_3 = 0$

Exchanger Type	Material Factor, $F_M$								
	Shell—CS	CS	Cu	CS	SS	CS	Ni	CS	Ti
	Tube—CS	Cu	Cu	SS	SS	Ni	Ni	Ti	Ti
Double Pipe	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Multiple Pipe	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Fixed Tube Sheet or U-Tube	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Floating Head	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Bayonet	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Kettle Reboiler	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Scraped Wall	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Spiral Tube	1.00	1.25	1.60	2.30	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00
Teflon Tube Exchanger		Flat and Spiral Plate				Air Cooler			
Shell Material		Material in Contact with Process Fluid		Tube Material					
$F_M$		$F_M$		$F_M$					
CS	1.00	CS	1.00	CS	1.00				
Cu	1.20	Cu	1.20	Al	1.50				
SS	1.30	SS	2.30	SS	3.00				
Ni	1.40	Ni	2.80	—	—				
Ti	3.30	Ti	7.20	—	—				

**Columna de extracción (columna de relleno)**

Diameter (m)	$K_1$	$K_2$	$K_3$	$L_{min}$ (m)	$L_{max}$ (m)
0.3	2.1630	0.9656	0	1.2	16
0.5	2.5210	0.9764	0	1.5	20
1.0	3.0169	1.0000	0	2.5	30
1.5	3.2160	0.9847	0	3.0	41
2.0	3.3848	0.9808	0	4.0	45
2.5	3.6023	0.9682	0	5.0	50
3.0	3.7921	0.9697	0	6.0	50
4.0	3.9986	0.9833	0	7.0	50

Material of Construction	$F_{BM}$
CS	1.2
Polyethylene	1.0
Porcelain	1.0
304 SS	2.2
316 SS	4.2

$$C_{BM}^0 = C_p F_{BM}$$