

2009

**UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA
ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA
INDUSTRIAL**



**DISEÑO DE LA SECCIÓN DE PURIFICACIÓN DE UNA
PLANTA DE PRODUCCIÓN DE MTBE**

Titulación: I.T.I. Química Industrial

Alumno/a: M^a Rosario Marín López

Director/ a/ s: Mercedes Alacid Cárceles

Cartagena 15 de Febrero de 2009

ÍNDICE

1. Memoria descriptiva	
1.1 Antecedentes.....	6
1.1.1 MTBE.....	6
1.1.2 Efectos del MTBE en la salud.....	7
1.1.3 Situación actual del uso de MTBE en las gasolinas..	10
1.2 Objetivo del proyecto.....	13
1.3 Titular de la industria.....	13
1.4 Clase y número de la industria según C.N.A.E.....	13
1.5 Localización.....	13
1.6 Proceso industrial.....	14
2- Cálculos justificativos	
2.1 Cálculos de la columna de destilación T-100.....	17
2.1.1 Diseño de la columna.....	17
2.1.2 Hidráulica de platos.....	28
2.1.3 Diseño mecánico de la columna.....	44
2.1.3.1 Parte descriptiva.....	44
2.2 Cálculo del condensador E-101.....	49
2.2.1 Cálculo de la carga térmica.....	51
2.2.2 Tipo de condensador.....	53
2.2.3 Configuración geométrica.....	56
2.2.4 Coeficiente global de transmisión de calor.....	59
2.2.5 Evaluación del diseño.....	66

2.3 Cálculo del vaporizador E-102.....	69
2.3.1 Estimación del área requerida.....	71
2.3.2 Tipo de vaporizador.....	72
2.3.3 Configuración geométrica.....	75
2.3.4 Cálculo del calor disponible.....	77
2.3.5 Evaluación del diseño.....	79
2.4 Cálculo del intercambiador de calor E-103.....	81
2.4.1 Cálculo del área estimada.....	82
2.4.2 Tipo de intercambiador.....	84
2.4.3 Configuración geométrica.....	88
2.4.4 Cálculo del coeficiente de transmisión.....	90
2.4.5 Cálculo de las pérdidas de presión.....	91
2.4.6 Cálculo del área requerida.....	92
2.4.7 Evaluación del diseño.....	92
2.5 Cálculo de la columna de extracción T-101.....	93
2.5.1 Diseño básico.....	93
2.5.2 Diseño mecánico.....	94
2.5.3 Parte descriptiva de la columna.....	97
3. Presupuestos	
3.1 Presupuestos parciales con precios unitarios.....	99
3.1.1 Coste de la columna de destilación T-100.....	101
3.1.2 Coste de la columna de extracción T-101.....	102
3.1.3 Coste del condensador E-101.....	103
3.1.4 Coste del vaporizador E-102.....	104

3.1.5 Coste del intercambiador de calor E-103.....	105
3.2 Presupuesto total de la planta.....	106
4. Planos	
4.1 Diagrama de bloques.....	108
4.2 Diagrama P&I.....	109
5. Anexos	
Anexo I. Balance de materia.....	111
Anexo II. Método UNIFAC.....	113
Anexo III. Tablas del método UNIFAC.....	127
Anexo IV. Estimación de propiedades.....	135
Anexo V. Tablas de estimación de propiedades.....	151
Anexo VI. Cálculos justificativos de los intercambiadores.....	164
Anexo VII. Tablas necesarias para la presupuesto.....	169

1-MEMORIA DESCRIPTIVA

1.1 ANTECEDENTES

1.1.1 MTBE

MTBE (Metil Terc Butil Eter) es un componente químico que proviene de la reacción química de metanol y del isobuteno. Pertenece a un grupo de compuestos químicos comúnmente conocidos como "oxigenantes" debido a que aumentan el oxígeno contenido en las gasolinas. Los oxigenantes favorecen la combustión de la gasolina en el motor de los automóviles y reducen los gases emitidos. El MTBE es volátil, inflamable y en forma líquida es incoloro; se disuelve fácilmente en el agua puede formar mezclas explosivas con el aire. Es muy soluble en otros éteres y en alcohol. Es inestable en solución ácida.

El MTBE es capaz de transportarse del suelo y del agua rápidamente, contaminando las fuentes subterráneas de abastecimiento. Es resistente a la biodegradación. Por su gran afinidad con el agua origina grandes plumas de recorrido haciendo que los derrames de productos petroleros con MTBE sean más difíciles y costosos de remediar.

Resumen de las propiedades del MTBE

Propiedad	Cantidad
Peso molecular g/mol	88.2
Punto de ebullición °C	55.2
Punto de congelación °C	-109
Densidad g/l (20°C)	0.74
Presión vapor (mmHg a 20 °C)	240
Numero de octano	110
Solubilidad de MTBE (g/100g agua)	4.8
Solubilidad en el agua en mezclas con gasolina (g/100g agua)	0.55
Punto de olor (ppm)	0.053
Punto de sabor en el agua (µg/l)	20 -40

Tabla 1.1. Propiedades del MTBE

1.1.2 EFECTOS DEL MTBE EN LA SALUD

Muchas organizaciones ambientalistas e industriales han evaluado los efectos del Metil Terc Butil Eter en la salud del hombre y en la contaminación del ambiente, tal como la Environment Protection Agency (US EPA), el International Programme on Chemical Safety (IPCS). A continuación se analizan los resultados de los organismos indicados sobre la contaminación del MTBE.

A. Environment Protection Agency (US EPA)

Los efectos en la salud del cuerpo humano del Metil Terc Butil Eter según informes del EPA (Environmental Protection Agency) son (US EPA, 1993a):

Efectos de los farmacocinéticos en animales experimentales

La Absorción: El MTBE se absorbe rápidamente después de la ingestión oral o la inhalación. La biodisponibilidad que sigue a la exposición dérmica se reporta en un 39% o menos en exposiciones orales.

La Distribución: El MTBE se distribuye rápidamente con la sangre en todas las partes del cuerpo, incluso el cerebro. Los niveles máximos ocurren a los 15 minutos de la inyección, y se informa que los niveles más altos en el tejido aparecen en el hígado y en los riñones.

El Metabolismo: Los principales metabolizadores del MTBE son el alcohol terc butílico y el formaldehído. El formaldehído probablemente se metaboliza aún más, hasta formar el ácido fórmico y dióxido del carbono, con la posible formación de metanol también.

La Excreción: El MTBE se excreta rápidamente después de una exposición oral o inhalación. A raíz de una exposición oral, el MTBE se elimina principalmente en exhalaciones de aire (46-69%), con cantidades más pequeñas excretadas en la orina (11-36%).

Después de una inhalación la mayor parte del MTBE y metabolitos se excretan en la orina (53-72%) con cantidades más pequeñas en exhalaciones de aire (17-22%).

Efectos medioambientales: Aunque, el objetivo de agregar MTBE a la gasolina es para mejorar la calidad del aire al reforzar la combustión, reduciendo emisiones de monóxido del carbono y benceno, las emisiones de otros contaminantes, como el formaldehído pueden aumentar (U.S. EPA 1993c). El potencial del MTBE de formación de ozono se estima más bajo que la mayoría de otros componentes no-metanos del aire urbano, incluso los alquenos, aldehídos, aromáticos del no-tolueno, y el etano (U.S. EPA 1993a). El MTBE es una sustancia carbono orgánico volátil (VOC). Como un VOC, el MTBE reacciona con las emisiones de NOx y en presencia de la luz del sol contribuye a la formación de ozono o lo que algunos llaman el smog fotoquímico.

B. International Programme On Chemical Safety (IPCS) en los Estados Unidos de Norte América

Según el IPCS los efectos del MTBE sobre la salud del ser humano y sobre el ambiente se manifiestan como se indican a continuación:

Fuentes de exposición humana y ambiental: No se conoce la presencia natural de MTBE en el medio ambiente. En varios países se ha producido en volúmenes crecientes a finales de los años 70. El MTBE figura actualmente entre los 50 productos químicos de mayor volumen de producción. Sólo en 1996 en U.S.A se produjo unas 11 millones de toneladas, previéndose un constante aumento del uso de MTBE.

Un 25% de la gasolina en los EE.UU está mezclada con MTBE. El MTBE se utiliza casi exclusivamente para el refuerzo de los octanos y para aumentar el contenido de la gasolina en oxígeno, se ha añadido a la gasolina en concentraciones de hasta el 17% en volumen.

Transporte, distribución y transformación en el

medioambiente: Tras su eliminación, el MTBE permanece en gran parte en el aire, sólo pequeñas cantidades penetrarán en el suelo y en el agua. En la atmósfera, el MTBE puede ser lavado por la lluvia, pero en pequeñas cantidades. La transformación del MTBE en la atmósfera por radicales hidroxilos produce varios productos, entre los que figuran el formato terciario butílico (TBF) estable y el 2-metoxi-2metilpropanol que se supone que son muy reactivos con los radicales hidroxilos, dando CO₂, formaldehído, acetona y agua. En presencia de agua, el MTBE se disuelve en forma significativa. La proporción que pasa a la biota y el sedimento es escasa. La biodegradabilidad en ensayos convencionales es limitada y por lo general, es lenta en el medio ambiente. El MTBE del suelo es transportado al aire por volatilización, al agua superficial por escurrimiento y al agua subterránea como resultado de la lixiviación. El MTBE puede persistir en el agua subterránea.

Efectos en el ser humano: Los residentes de zonas donde se usan los combustibles oxigenados (no necesariamente MTBE), se han quejado de trastornos agudos de la salud, como dolor de cabeza, irritación de los ojos y la nariz, tos, náuseas, mareos y desorientación. Los estudios epidemiológicos de poblaciones humanas expuestas en condiciones profesionales o no profesionales, así como los estudios experimentales de voluntarios expuestos en condiciones controladas, no han podido identificar la fuente exacta de esos trastornos.

Aunque los resultados son variados, los estudios efectuados en comunidad de Alaska, New Jersey, Connecticut y Wisconsin (EE.UU.) no han proporcionado indicios, o éstos han sido limitados, de la asociación entre la exposición al MTBE y la prevalencia de trastornos de la salud. En estudios experimentales controlados en voluntarios humanos expuestos en cámaras de inhalación al MTBE en concentraciones de 5,0 mg/m³ (1,4 p.p.m) a 270 mg/m³ (75 p.p.m) no se han encontrado efectos manifiestos en términos de presencia subjetiva de síntomas o de indicadores objetivos de irritación u otros efectos en concentraciones de hasta 180 mg/m³ (50 p.p.m) durante dos horas.

Partiendo de esos datos parece improbable que el MTBE por sí solo produzca efectos agudos adversos en la salud en la población general en las condiciones corrientes de exposición por inhalación. Sin embargo, los posibles efectos de las mezclas de gasolina - MTBE y el modo de exposición de la mayor parte de las personas al MTBE en asociación con el empleo de combustibles oxigenados, no se han examinado experimentalmente ni por métodos epidemiológicos prospectivos. Por otra parte, no se ha investigado, por ejemplo, la función de factores tales como la percepción del MTBE, debido en parte a su olor distintivo.

Evaluación de los riesgos para la salud humana y efectos en el medio ambiente: Sobre la base de observación colectiva, parece improbable que el MTBE por sí solo induzca efectos agudos adversos en la salud de la población general en las condiciones corrientes de exposición. En estudios en animales, el MTBE es "moderadamente" tóxico en forma aguda y produce irritación cutánea y ocular moderada, pero no sensibilización.

El MTBE no es genotóxico, pero ha producido tumores en roedores, principalmente con concentraciones altas, que también inducen otros efectos adversos. Esos datos se consideran en la actualidad insuficientes para la evaluación del riesgo cancerígeno en seres humanos. No parece que las concentraciones de MTBE en el agua ambiental sean tóxicas para los organismos acuáticos, excepto en caso de escapes.

Aunque no hay datos sobre la toxicidad terrestre del MTBE, parece que no es preocupante ya que las concentraciones en el aire ambiental son bajas y la semivida del MTBE es relativamente breve.

1.1.3 SITUACION ACTUAL DEL USO DE MTBE EN LAS GASOLINAS

MTBE en los Estados Unidos de Norte América:

El MTBE estaba siendo utilizado en USA desde 1979, época en que la EPA dispuso la no utilización de plomo en la formulación de gasolinas. El MTBE fue usado para la reducción de Monóxido de carbono y de ozono de los automóviles.

Desde entonces se está utilizando el MTBE y el etanol. En 1990, el congreso de los Estados Unidos promulgó el Acta de Aire Limpio para la utilización de ciertos aditivos oxigenantes en ciertas áreas del país. La EPA no posee requerimientos de ciertos aditivos oxigenantes.

El Acta de Aire Limpio subió de 2.0 por ciento a 2.7 por ciento de oxígeno en los combustibles. La utilización de MTBE en Estados Unidos de Norte América está siendo dejada de lado debido a los problemas ambientales que se generaron en algunas zonas del país. Los casos más sonados se refieren a la contaminación de fuentes de abastecimiento de agua en Estados Unidos son el Lago Santa Mónica y el Lago Tahoe (US EPA 2000).

MTBE en la Unión Europea: Actualmente, en la Unión Europea se está dejando el uso del plomo como oxigenante para las gasolinas. En su lugar se está utilizando otro tipo de sustitutos tales como MTBE, etanol, metanol, alcohol terc butílico, isobutanol (Environment European Agency, 2000). Las ordenanzas legislativas europeas están reduciendo las emisiones de los vehículos. La demanda de gasolina en Europa Oriental tiene una tendencia negativa. El incremento en el consumo de diesel para coches ha tenido un impacto adverso hacia las gasolinas. Existen incentivos sobre los impuestos que soportan el diesel sobre la gasolina. Los grados de gasolinas varían en cantidades dependiendo de cada país. En el este de Europa la gasolina plomada contiene 27 % de la composición de las gasolinas. Escandinavia y Alemania no usan plomo en sus gasolinas. En Europa, la calidad de la gasolina varía de país en país. El MTBE demandado en el este de Europa ha sufrido represiones en los últimos años. Altos precios de venta y mejoras de procesamiento para la refinería de Europa para incrementar el octanaje de combustibles ha suprimido el uso de MTBE en EU. El consumo de MTBE es bajo en UK, Francia, Suecia y Noruega. Alemania y los países Bajos son consumidores moderados, Italia y España son grandes consumidores. Finlandia es el más grande consumidor de MTBE en toda Europa, fue el primero en adoptar las medidas de RFG (Refomulation Gasolines).

El programa europeo de Auto/Oil desarrollo un conjunto de conclusiones que el parlamento europeo incluyó en sus directivas para la calidad del combustible. (Hydrocarbon Processing, Enero 1999). En muchas partes de Europa se disponen a producir gasolinas con MTBE para aumentar el octanaje de las gasolinas y disminuir las emisiones desde los automóviles. El consumo de MTBE en Europa se incrementará en los próximos años.

MTBE en Brasil: En Brasil el único oxigenante utilizado es el etanol. Se comercializa comúnmente la gasolina con 20 por ciento de alcohol anhidro. También se comercializa la gasolina activada la cual contiene 20 por ciento de alcohol anhidro aditivada con un detergente dispersante y la gasolina premium la cual tiene un octanaje superior a las dos anteriormente mencionadas (Instituto Brasileiro de Petróleo - IBP, 2000). La utilización de etanol en Brasil surgió como respuesta a la crisis de petróleo, y como una primera solución al problema de aumento de los precios internacionales del azúcar. Relacionado al tema del uso de etanol como combustible está la reducción de las emisiones de dióxido de carbono asociado con el cambio climático global. Por tanto, en Brasil se adoptó la no utilización de MTBE ni otro tipo de oxigenante desde la década de los 70's.

MTBE en México: En México se comercializan tres tipos de gasolinas automotrices, Nova, PEMEX Magna y PEMEX Premium. En el mayor octanaje en las gasolinas PEMEX Magna y PEMEX Premium la combustión se efectúa sin causar detonación en los motores de los automóviles, ocasionando un desgaste prematuro, principalmente en los de alta compresión. Estas gasolinas contienen como aditivo MTBE. Actualmente, se evalúa en México la posibilidad de utilizar etanol en la formulación de gasolinas (PEMEX, 2000).

MTBE en Venezuela: En Venezuela; como en el resto de Sudamérica, se adoptó el uso de MTBE en la formulación de las gasolinas en años recientes.

Desde 1998, se comercializa gasolinas ecológicas o gasolinas sin plomo en Venezuela. En el Estado Carabobo existen gran cantidad de estaciones de servicio que suministran la gasolina ecológica. Muchos de los vehículos del parque automotor cuentan con tecnología de motores para la utilización de este tipo de gasolina. El gobierno prevé un aumento del consumo de gasolina ecológica en el Estado Carabobo, debido al incremento de estaciones de servicio que surten de este tipo de combustible.

1.2 OBJETIVO DEL PROYECTO

El objetivo es llevar a cabo el diseño de la sección de purificación de una planta de producción de 120000 Tn/año de MTBE con un 99% de pureza.

Para obtener MTBE tiene lugar la siguiente reacción;



1.3 TITULAR DE LA INDUSTRIA

Dicho proyecto se lleva a cabo a petición de la multinacional REPSOL-YPF Lubricantes y Especialidades S.A. con sede en C/Castellana, 278. C.P: 28.096 MADRID (ESPAÑA).

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 LOCALIZACIÓN

La planta se encuentra ubicada en el polígono industrial del Valle de Escombreras (Cartagena), Ctra. Alumbres-Escombreras, Km.10 del Valle de Escombreras s/n. C.P: 30350. Cartagena (Murcia). España.

La parcela donde se instalará la planta ocupará en torno a 14.000 m² de superficie útil, con características idóneas para dicha instalación, en la que se llevarán a cabo las obras de acondicionamiento del terreno.

1.6 PROCESO INDUSTRIAL

En el proceso industrial de la planta se utiliza una corriente de alimentación con una temperatura de 70 °C, una presión de 6,5 atm, una entalpia -63218,9 (MJ/h), con un caudal de 614 (kmol/h) y una fracción de vapor de 0,53. La composición es la siguiente:

Composición	Fracción molar
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
Agua	0,0001
MTBE	0,2639

Tabla 1.2 Composición de la corriente de alimentación

Para obtener una producción de 120000 Tn/año de MTBE con un 99% de pureza la planta consta de los siguientes equipos;

- Columna de Destilación (T-100)
- Columna de Extracción (T-101)
- Intercambiador (E-103)

- Condensador (E-101)
- Rehervidor (E-102)

El diagrama de flujo del proyecto es el siguiente;

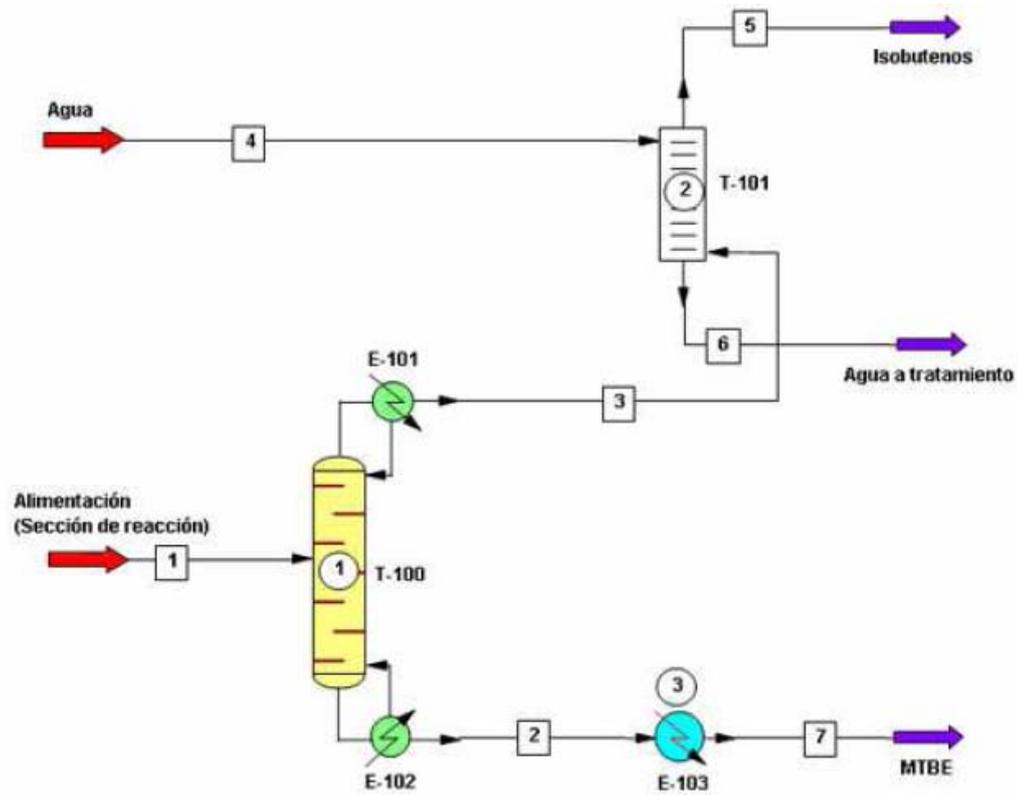


Fig.1.1 Diagrama de flujo de la planta

2- CALCULOS JUSTIFICATIVOS

2.1 CALCULO DE LA COLUMNA DE DESTILACION T-100

2.1.1 DISEÑO DE LA COLUMNA

Para realizar el balance de materia de la columna de destilación tenemos en cuenta la corriente de la alimentación de la columna (1). La información completa del balance de materia se recoge en el Anexo I. Los datos de la alimentación de la columna (1) son los siguientes;

Corriente	1
Descripción	Alimentación mezcla isobutenos MTBE
Temperatura(°C)	70
Presión (atm)	6,5
Fracción de vapor	0,53
Entalpia (MJ/h)	-63218,9
Caudal kmol/h	614

Composición	Fracción molar
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
Agua	0.0001
MTBE	0.2639

Tabla 2.1. Composición de la alimentación

Se realiza un balance de materia para determinar la composición de las corrientes del fondo y de la cabeza. Para ello, hay que tener en cuenta que es una corriente de alimentación de 614 kmol/h y que se pretende obtener 120000 toneladas al año de MTBE al 99%.

Se obtiene la siguiente tabla;

Componentes	Fondo		Cabeza	
	Fracción molar	Kmol /h	Fracción molar	Kmol /h
propano			0,011042185	4,9734
1,3-butadieno			0,091881883	41,3836
isobutano			0,005998224	2,7016
butano			0,220980018	99,5294
1-buteno			0,468543073	211,032
cis-2-buteno			0,038306838	17,2534
trans-2-buteno			0,045940941	20,6918
isobuteno			0,018130995	8,1662
pentano			0,00081794	0,3684
propileno			0,058210036	26,2178
MTBE	0,99	161.964	0,00015675	0,0706
metanol	0,01	1.636	0,039854796	17,9506

Tabla 2.2 Composición de la corriente de cabeza y de fondo de la columna.

Se obtiene un caudal de fondo de 163,6 kmol/h y un caudal de cabeza de 450,4 kmol/h.

Para el cálculo del número mínimo de etapas utilizamos el método de Fenske.

Método de Fenske

Se aplica para una separación especificada entre los componentes clave de una mezcla multicomponente. Con ello se obtiene el número mínimo de etapas de equilibrio, que corresponde a la condición de reflujo total.

La siguiente ecuación refleja los enriquecimientos relativos para cada par de componentes i, j a través de una columna de N etapas teóricas de equilibrio.

$$\prod_{k=1}^{N_{\text{rean}}} \alpha_K = \left(\frac{x_{i,N+1}}{x_{i,1}} \right) \cdot \left(\frac{x_{j,1}}{x_{j,N+1}} \right)$$

Donde;

$$\alpha_K = K_{i,k} / K_{j,k}$$

α_K es la volatilidad relativa entre los componentes clave i, j ; donde i es el clave ligero y j es el clave pesado. En la composición se considera clave pesado al MTBE y al resto clave ligero.

Si la volatilidad relativa se puede considerar como constante, entonces la ecuación anterior se puede expresar de la forma:

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

Donde;

N = Fondo de la columna de destilación

$N+1$ = Cabeza de la columna de destilación

K = es la constante de equilibrio entre la fase líquida y gas

$$K_i = P_i^0 \cdot \gamma_i / P_T$$

P_T = la presión total

P_i^0 = la presión parcial de vapor del componente i

γ_i = coeficiente de actividad del componente i

La presión parcial de vapor se calcula con la ecuación de Antoine;

$$P_i^0 = e^{A - (B/T+C)}$$

A , B y C son coeficientes de Antoine y se recogen en la siguiente tabla;

Nombre	Antoine		
	A	B	C
propano	6,804	803,81	246,99
1,3-butadieno	6,85	930,55	238,85
isobutano	6,9105	946,35	246,68
butano	6,809	935,86	238,73
1-buteno	6,8429	926,1	240
cis-2-buteno	6,8693	960,1	237
trans-2-buteno	6,8695	960,8	240
isobuteno	6,8413	923,2	240
pentano	6,8763	1075,8	233,21
propileno	6,8196	785	247
MTBE	5,896	708,69	179,9
metanol	8,0724	1575	238,87

Tabla 2.3. Constantes de Antoine.

Para el cálculo de K que es la constante de equilibrio hay que calcular primero el coeficiente de actividad. Utilizamos el método UNIFAC para el cálculo del coeficiente de actividad explicado en el Anexo II.

Se obtiene la siguiente tabla;

Componentes	Coeficiente de Actividad	
	Cabeza	Fondo
propileno	0,83192732	
propano	0,86056655	
i-butano	0,82740635	
i-buteno	0,80787695	
1-buteno	0,80123402	
1,3-butadieno	0,91525267	
n-butano	0,82737478	
trans-2-buteno	0,79928296	
cis-2-buteno	0,79928296	
n-pentano	0,7632241	
metanol	11,0445597	2,4919
MTBE	0,8048864	0,9918

Tabla 2.4. Coeficiente de actividad en la cabeza y en el fondo

Lo siguiente que hay que calcular es la presión de vapor para ello utilizamos la ecuación de Antoine y los coeficientes de la tabla-

Presión de vapor(atm)		
Componentes	Cabeza	Fondo
propileno	19,3418	
propano	6,809107	
i-butano	8,361326	
i-buteno	5,926968	
1-buteno	7,128396	
1,3-butadieno	5,400251	
n-butano	5,795852	
trans-2-buteno	7,263864	
cis-2-buteno	1,993407	
n-pentano	23,11544	
metanol	1,082911	6,53322383
MTBE	0,765436	11,4489416

Tabla 2.5. Presión de vapor en la cabeza y en el fondo

A partir de los datos anteriores podemos obtener la siguiente tabla;

Nombre	Cabeza			Fondo		
	K	α	X	K	α	Y
propano	2,56075	19,1	0,0282			
1,3-butadieno	0,95877	7,15	0,0880			
isobutano	1,06434	7,94	0,0063			
butano	0,75446	5,63	0,1667			
1-buteno	0,87869	6,55	0,4117			
cis-2-buteno	0,66405	4,95	0,0254			
trans-2-buteno	0,71269	5,31	0,0327			
isobuteno	0,90281	6,73	0,0163			
pentano	0,23406	1,75	0,0001			
propileno	2,95851	22,1	0,1722			
MTBE	0,13409	1	2,1E-05	0,96708	1	0,957410
metanol	1,3006	9,7	0,0518	4,25817	0,2	0,042581

Tabla 2.6. Cálculos de la cabeza y del fondo

Se realiza el cálculo de α_{ij} utilizando la siguiente formula;

$$\alpha_{ij} = \sqrt{(\alpha_{\text{cabeza}} \cdot \alpha_{\text{fondo}})} = 6,53$$

$$\alpha_{\text{cabeza}} = 9,69$$

$$\alpha_{\text{fondo}} = 4,40$$

Una vez hechos estos cálculos, ya se puede obtener el número mínimo de etapas con la ecuación de Fenske.

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

$$N_{min} = 5,6 \approx 6$$

El número mínimo de etapas son seis.

Método de Underwood

El reflujo mínimo se basa en las especificaciones dadas para el grado de separación entre los componentes clave. Hay que tener en cuenta que esta condición de reflujo mínimo en la práctica es imposible, debido a que correspondería a una columna con un número infinito de etapas de equilibrio, sin embargo representa una condición límite muy útil para el cálculo de la columna.

Los pasos son los siguientes;

1. Encontrar el valor de Θ iterando la siguiente ecuación;

$$\sum (\alpha_i \cdot x_{i,F}) / (\alpha_i - \Theta) = 1 - q$$

Donde

α_i = volatilidad relativa del componente i respecto al clave pesado.

$x_{i,F}$ = concentración del componente i en la alimentación y q depende de la condición de la alimentación.

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

$$R_m + 1 = \sum (\alpha_i \cdot x_{i,D}) / (\alpha_i - \Theta)$$

Donde

R_m = relación mínima de reflujo

$x_{i,D}$ = concentración del componente i en el destilado del reflujo mínimo

La condición de alimentación es $1-q=0,53$, el parámetro $\Theta=1,58831$ y se obtiene una relación de reflujo mínimo $R_{min}=0,32886$. Los cálculos se recogen en la siguiente tabla;

Composición	α	X_F	X_D	$(\alpha_i * x_{i,F}) / (\alpha_i - \theta)$	$(\alpha_i * x_{i,D}) / (\alpha_i - \theta)$
propano	19,09650726	0,0081	0,011042185	0,008834815	0,012043909
1,3-butadieno	7,149963565	0,0674	0,091881883	0,086648208	0,118121669
isobutano	7,937188359	0,0044	0,005998224	0,005500753	0,007498807
butano	5,626315143	0,1621	0,220980018	0,225860308	0,307900153
1-buteno	6,552754043	0,3437	0,468543073	0,45366215	0,61844707
cis-2-buteno	4,952074604	0,0281	0,038306838	0,041368289	0,056394604
Trans-2-buteno	5,314843898	0,0337	0,045940941	0,04806346	0,065521679
isobuteno	6,732642608	0,0133	0,018130995	0,017406359	0,023728918
pentano	1,745503356	0,0006	0,00081794	0,006662395	0,009082395
propileno	22,06277671	0,0427	0,058210036	0,046012453	0,06272568
MTBE	1	0,2639	0,00015675	-0,44857505	-0,00026644
metanol	9,699065484	0,0319	0,039854796	0,038146889	0,04765945
			Σ	0,529591	1,328857891

Tabla 2.7. Cálculos del reflujo mínimo

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.

$$R = 1,3 \cdot R_{\min} = 0,42751526$$

En la correlación se utilizan las siguientes ecuaciones;

$$H = (R - R_{\min}) / R + 1$$

$$G = 1 - e^{[(1+54.4H)(H-1)/(11+117.2H)H^{0.5}]}$$

$$G = (N - N_{\min}) / N + 1$$

Despejando N de la última ecuación se obtiene 15 etapas de equilibrio reales de la columna de destilación.

Correlación 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;

NR= es el número de platos de la sección de enriquecimiento

NS= es el número de platos de la sección de agotamiento.

B= caudal del fondo

D= caudal de destilado

El plato óptimo que se obtiene es el plato 3.

Correlación de O'Connell

Se utiliza para estimar la eficiencia real de los platos ya que teóricamente suponemos una eficiencia del 100%, lo cual en la práctica no se puede llevar a cabo.

Eduljee (1958) ha expresado la correlación de O'Connell de la siguiente forma;

$$E_0 = 51 - 32,5 \cdot \log(\mu \cdot \alpha)$$

Donde:

μ = Viscosidad molar promedio del líquido, Pa.s

α = Volatilidad relativa promedio del clave ligero

Los cálculos de μ se encuentran en el Anexo IV donde se recogen las propiedades. La eficiencia es la siguiente;

$$\mu = 1.3 \times 10^{-4} \text{ Pa.s}$$

$$\alpha = 6.53$$

$$E_0 = 73\%$$

El número de platos reales se obtiene de la siguiente manera;

$$N_{\text{real}} = (15-1)/0.73 = 19.17$$

Por lo tanto, se obtiene 20 etapas reales.

2.1.2 HIDRÁULICA DE PLATOS

Se determinan los parámetros que resultan imprescindibles en el diseño de la columna, algunos de ellos son el diámetro, altura, tipo de columna, pérdida de carga y condiciones de inundación.

Tipo de columna

Se ha seleccionado una columna de platos estas son más usadas en comparación con las torres de relleno. Las columnas de platos permiten reducir la dispersión axial y se consigue un mayor contacto en cada etapa.

Las columnas para extracción presentan los mismos problemas que en destilación: inundación, arrastre y, en menor medida, goteo.

No obstante se ha elegido la columna de platos porque es mucho más efectiva que la de relleno cuando se opera con elevados volúmenes de líquido.

Para el diseño hidráulico de la columna de platos que se ha elegido se realiza los siguientes pasos;

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

Calcular los flujos máximos y mínimos de vapor y líquido

Los valores que se obtienen son los siguiente;

Cabeza;

$$L=12300(\text{kg/h})$$

$$V=38500 (\text{kg/h})$$

Fondo;

$$L' = 43900 (\text{kg/h})$$

$$V' = 32000 (\text{kg/h})$$

Estimar las propiedades físicas del sistema.

Las propiedades físicas del destilado y del fondo se recogen detalladamente en el Anexo II.

Seleccionar un supuesto espaciado de platos.

Se ha escogido un espaciado de 24 pulgadas, es decir, 0.6 metros.

Estimar el diámetro de la columna, basado en condiciones de inundación.

La velocidad de inundación se calcula mediante la ecuación de Souders-Brown:

$$u_{nf} = C_{sb} S_f \left(\frac{\rho_L - \rho_G}{\rho_G} \right)^{0.5}$$

Donde:

u_{nf} = velocidad lineal de inundación del gas, ft/s

ρ_L = densidad de líquido, lb/ft³

ρ_G = densidad de gas , lb/ft³

S_f = factor de espuma

C_{sb} = parámetro de capacidad.

C_{sb} se obtiene mediante la siguiente grafica;

$$\rho_L=591.5 (\text{Kg/m}^3)$$

$$\rho_v = 15.7 \text{ (Kg/m}^3\text{)}$$

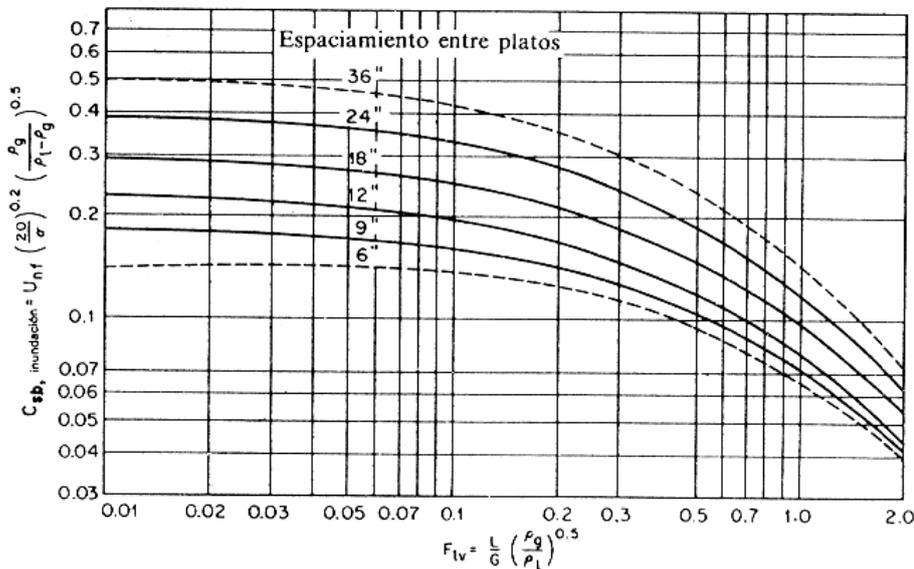


Fig.2.1. Determinación de C_{sb}

F_{IV} se obtiene con la siguiente formula;

$$F_{IV} = L/G \cdot (\rho_G / \rho_L)^{0.5}$$

Donde;

L= flujo de masa del liquido Kg/s

V= flujo de masa del vapor Kg/s

El resultado es $F_{IV}=0.05$

Con la grafica se obtiene;

$$C_{sb}=0.35$$

La velocidad de inundación es la siguiente;

$$u_{nf} = 2.11 \text{ ft/s} = 0.64 \text{ m/s}$$

A continuación, se realiza el cálculo del diámetro según las condiciones de inundación obtenidas.

Hay que calcular el área neta, que como primera suposición se estima de un 12% del área total.

Para calcular el área total hay que calcular el flujo volumétrico;

$$F_V = V/\rho_V = 0.68 \text{ m}^3/\text{s}$$

Para las velocidades de inundación del vapor hemos de considerar que muchos ingenieros emplean velocidades de vapor en el rango del 80 al 85 por ciento, según Coulson y Richardson, para hacer segura la operación de la columna. Por lo tanto, la velocidad de inundación es la siguiente;

$$u = 0.85 \cdot u_{nf} = 0.544 \text{ m/s}$$

El área total de la columna es;

$$A_T = F_V / u = 1.25 \text{ m}^2$$

El área del bajante la suponemos el 12% del área total, con lo que el área efectiva de la columna será el 88% del área total:

$$A_{\text{efect}} = 0,88 \cdot A_T = 1,1 \text{ m}^2$$

El diámetro se obtiene de la siguiente ecuación;

$$A = \Pi \cdot D^2 / 4$$

$$D = 1.18 \text{ m}$$

Decidir el modelo de flujo de líquido.

Para elegir el modelo de flujo del líquido en la columna se utiliza la siguiente grafica. A partir de ella se escoge el tipo de plato; reverso, paso simple o paso múltiple.

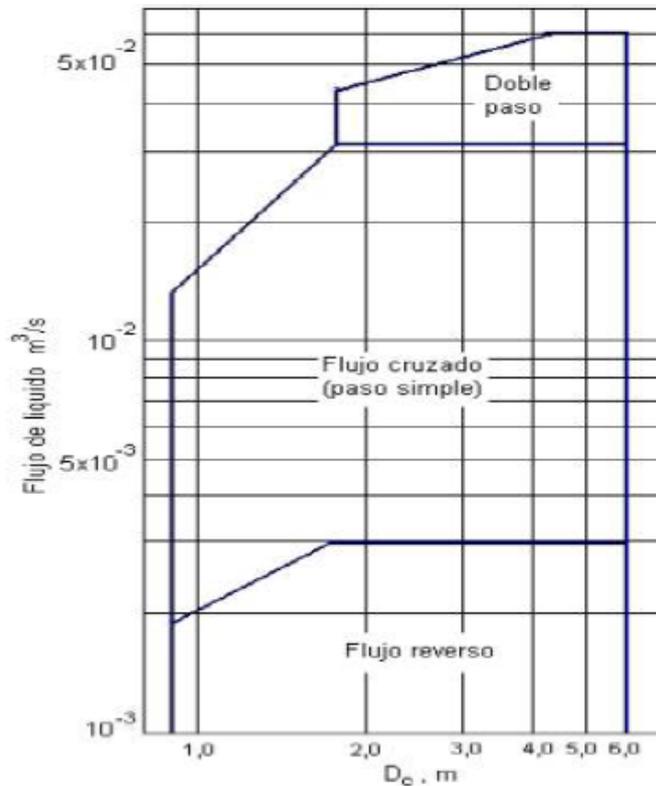


Fig.2.2. Selección de modelo de flujo de líquido

Primero hay que calcular el flujo máximo de líquido:

$$F_{LM} = L/\rho_L = 6 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}$$

$$D = 1.18 \text{ m}$$

Por lo tanto, el modelo es flujo cruzado, es decir, paso simple.

Hacer una distribución estimada de plato: área del bajante, área activa, área de las perforaciones, tamaño de las perforaciones, altura del vertedero.

Se ha calculado el diámetro de la columna $D = 1.18$ m y el área de la columna $= 1,1 \text{ m}^2$. A partir de estos datos podemos obtener;

Área del bajante;

$$A_b = 0,12 \cdot A_c = 0,132 \text{ m}^2$$

Área activa;

$$A_a = A_c - 2 \cdot A_b = 0.836 \text{ m}^2$$

Área neta;

$$A_n = A_c - A_b = 0.968 \text{ m}^2$$

Área de las perforaciones;

$$A_{pe} = 0.10 \cdot A_a = 0.0836 \text{ m}^2$$

Se suele utilizar una altura de vertedero entre 40mm o 50mm, se toma una altura de vertedero de 50mm.

La longitud del vertedero normalmente será entre 0,6 a 0,85 del diámetro de la columna. Se usa 0,77 pues es el equivalente a un área de bajante del 12 por ciento.

$$L_v = 0.77 \cdot D = 0.91 \text{ m}$$

El diámetro de las perforaciones suele tener un tamaño común de 5mm.

El espesor del plato que utilizamos es de 5mm.

Verificar la relación de goteo

El goteo se produce por un exceso de líquido acumulado en el plato. Para ello hay que estudiar la velocidad del vapor en el punto de inundación que es el mínimo para una operación estable. La velocidad de vapor mínima esta dada por;

$$u_h = \frac{[K_2 - 0,9(25,4 - d_h)]}{(\delta_v)^{1/2}}$$

Donde;

u_h = velocidad de vapor mínima a través de las perforaciones

d_h = Diámetro de la perforación

K_2 = Es una constante que depende de la altura de liquido sobre el plato.

K_2 se obtiene a partir de la siguiente grafica;

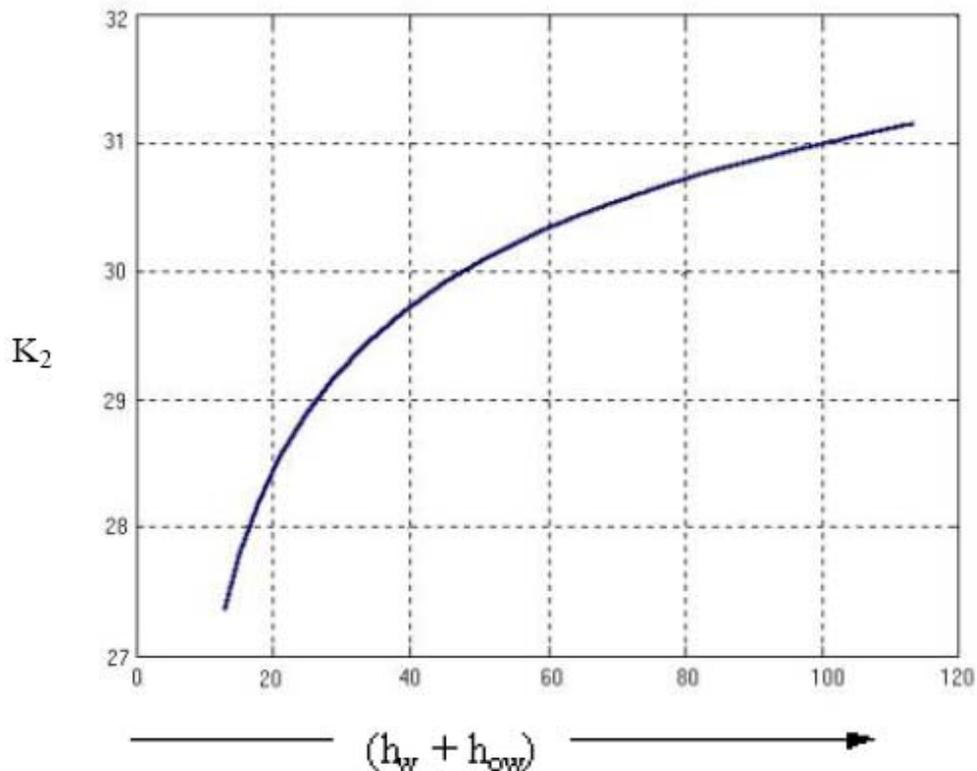


Fig.2.3. Correlación para el punto de inundación.

Donde:

h_w = Es la altura del vertedero que es igual a la altura de líquido en el plato (mm)

h_{ow} = Referido al rebose del vertedero. Se calcula con la siguiente ecuación;

$$h_{ow} = 750 \cdot \left(\frac{L_{liq}}{\rho_L \cdot l_w} \right)$$

Donde;

L_{liq} = Flujo de líquido (kg/s)

l_w = Altura del vertedero, (mm de agua).

Como necesitamos h_{ow} mínimo lo obtenemos de la siguiente forma;

$$L_{liq}(\max) = L' / 3600 = 12.19 \text{ kg/s}$$

$$L_{liq}(\min)=0.7 \cdot L_{liq}(\max)=8.53 \text{ kg/s}$$

$$h_{ow} \text{ m\u00ednimo} = 41 \text{ mm}$$

Por ultimo obtenemos la ecuaci\u00f3n;

$$h_w + h_{ow} = 91 \text{ mm}$$

Obtenemos un $K_2=30.7$ y $u_h= 2.71 \text{ m/s}$

La velocidad m\u00ednima de vapor actual se obtiene con la siguiente formula;

$$\text{Velocidad m\u00ednima de vapor actual} =fv/A_{pe}$$

Se obtiene una velocidad m\u00ednima de vapor actual por encima de 2.71 m/s luego se realiza en condiciones favorables.

Verificar la ca\u00edda de presi\u00f3n del plato

El c\u00e1lculo de la ca\u00edda de presi\u00f3n total, se corresponde con la expresi\u00f3n:

$$\Delta Pt = 9,81 \times 10^{-3} ht \cdot \rho L \text{ (pa)}$$

Lo usual es expresar las ca\u00eddas de presi\u00f3n en mm de l\u00edquido. Por lo tanto, ht es la ca\u00edda de presi\u00f3n total y se obtiene de la siguiente manera;

$$ht = hd + (hw + how) + hr$$

Donde;

ht = ca\u00edda de presi\u00f3n total

hd = flujo de vapor a trav\u00e9s del plato seco

hr =ca\u00eddas residuales

La ca\u00edda de presi\u00f3n a trav\u00e9s del plato seco puede estimarse usando la siguiente expresi\u00f3n;

$$h_d = 51 \left[\frac{u_h}{C_0} \right]^2 \frac{\rho_V}{\rho_L}$$

Donde:

U_h =Velocidad a través de las perforaciones (m/s)

C_0 =Coeficiente de orificio. Es función del espesor del plato, diámetro de las perforaciones, y la relación de área de perforación a área perforada.

C_0 puede obtenerse de la siguiente grafica;

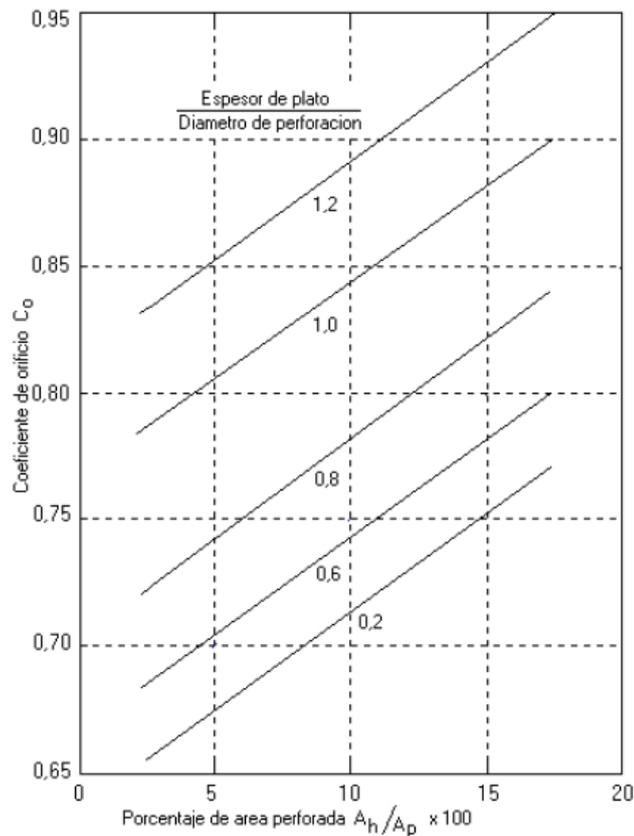


Fig.2.4. Coeficiente de orificio.

Para calcular C_0 hay que obtener la siguiente relación;

$$A_h/A_p \cdot 100 = (0.0836/1.1) \cdot 100 = 7.6$$

$$\text{Espesor plato/Diámetro Perforación} = 1$$

$$C_o=0,84$$

Con todos estos datos y los datos anteriores podemos calcular h_d

$$h_d = 119\text{mm}$$

Para calcular la caída de presión total nos falta por calcular un termino h_r que es la columna residual. Se calcula con la siguiente ecuación;

$$h_r = \frac{1,25 \cdot 10^3}{\delta_L}$$

Se puede calcular directamente y obtenemos $h_r = 21.1\text{mm}$

$$h_t = h_d + (h_w + h_{ow}) + h_r$$

$$h_t=231,11\text{mm}$$

Verificar el bajante

El flujo en el bajante se obtiene con la siguiente expresión;

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

Donde:

h_t =Caída de presión total en el plato

h_{dc} = Pérdida de columna en el bajante, mm

Para el cálculo de la pérdida de columna en el bajante se obtiene con la siguiente ecuación;

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

Donde:

L =Flujo de liquido en el bajante,kg/s.

$$L=12,19 \text{ kg/s}$$

A_m = puede ser A_d o A_{ap} se tomara la de área mas pequeña.

A_d = Área del bajante (m^2)

A_{ap} = Área libre (m^2).

El cálculo del área libre se obtiene de la siguiente manera;

$$A_{ap} = h_{ap} \cdot l_w$$

Donde;

h_{ap} = altura del borde del delantal sobre el plato, suele valer entre 5 y 10 mm por debajo de la altura del vertedero.

h_{ap} = altura del vertedero – 10 = 40 mm

l_w = longitud del vertedero.

De modo que $A_{ap} = 0,0364 m^2$

Se utiliza como A_m el área libre, ya que es el área más pequeña de las dos.

Por lo tanto, se obtiene;

$h_{dc} = 51 \text{ mm}$.

La obtención de la altura de flujo en el bajante es:

$h_b = 373 \text{ mm}$

Recalcular el porcentaje de inundación basado en el diámetro de columna elegido.

Se utiliza la siguiente expresión;

$$\% \text{inundación} = V_n / V_m = 86\%$$

Verificar el tiempo de residencia

El tiempo de residencia en la bajante se calcula con la siguiente expresión;

$$t_r = \frac{A_d h_{bc} \delta_L}{L_{wd}}$$

Donde:

A_d =Área del bajante (m²)

h_{bc} = Altura de flujo bajante (m)

ρ_l = Densidad de la corriente líquida (kg/m³)

L_{wd} = Líq_mín Caudal mínimo de liquido (kg/s)

Se obtiene; $t_r = 3,41$ s

Verificar el arrastre

El arrastre se puede determinar a partir de la correlación siguiente;

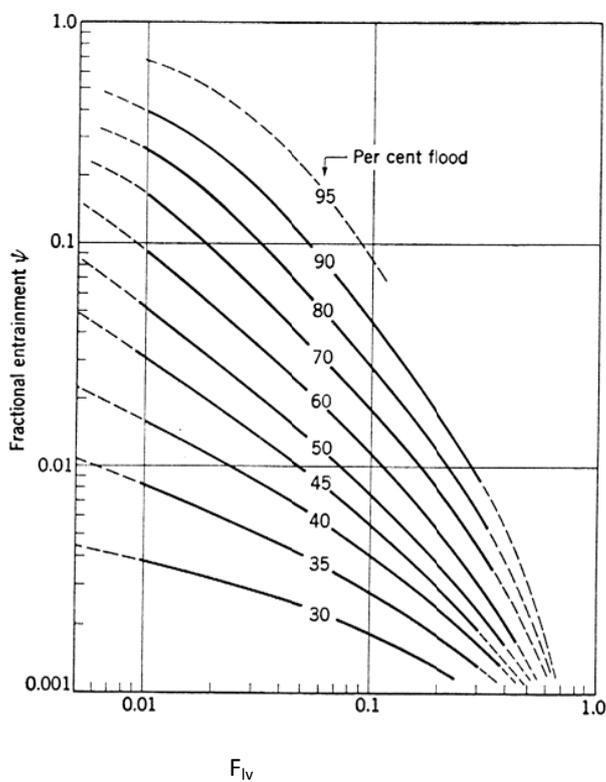


Fig.2.5. Correlación de Fair

Se tiene que;

$$F_{IV}=0.05 \quad \% \text{inundación} = 86$$

Por lo que se puede obtener Ψ que es el arrastre fraccional;

$$\Psi=0.03$$

Como es una aproximación el límite superior de Ψ se puede considerar que vale 0,1. Como el valor que se obtiene es menor que 0.1 el arrastre es satisfactorio.

Optimizar el diseño

Angulo del área perforada y no perforada;

El área disponible para perforación se reducirá por la obstrucción causada por las partes estructurales (como los soportes, anillos y vigas) y por el uso de zonas libres. Para el cálculo del área no perforada se obtiene a partir de la geometría del plato.

El ancho de la zona perforada se obtiene con la siguiente grafica;

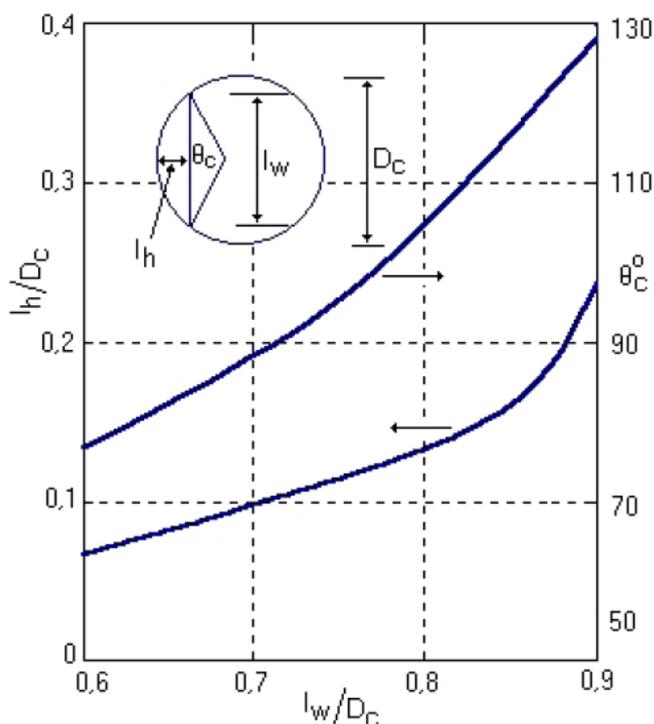


Fig.2.6. Relaciones entre el ancho de la cinta, la longitud de la cinta y el ángulo.

De esta grafica ya se ha calculado los siguientes términos:

$$lw = 0.91\text{m}$$

$$Dc = 1.18\text{ m}$$

Utilizando la siguiente formula se puede obtener el ancho de la zona perforada;

$$lh = \frac{Dc}{2} - \sqrt{\left(\frac{Dc}{2}\right)^2 - \left(\frac{lw}{2}\right)^2}$$

$$lh = 0.21\text{m}$$

El ángulo de las perforaciones se obtiene con la siguiente formula;

$$\text{Angulo de las perforaciones} = 2 \cdot \arcsen(lw / Dc) = 100.92^\circ$$

Por lo tanto, el área no perforada tiene un ángulo de;

$$180^\circ - 100.92^\circ = 79.08^\circ$$

La longitud media entre las perforaciones se obtiene de la siguiente manera;

$$Lm = \frac{(Dc - l_h) \cdot (\theta_{np}^\circ) \cdot \pi}{180}$$

$$Lm = 1.33\text{m}$$

La fórmula del área no perforada es la siguiente;

$$A(\text{no perforada}) = lm \cdot lh = 0.28\text{m}^2$$

El área de las zonas libres se obtiene de la siguiente manera;

$$A(\text{zonas libres}) = 2 \cdot lh \cdot (lw - 2lh) = 0.20\text{m}^2$$

El área que queda libre para las perforaciones es el siguiente;

$$A(\text{disponible para las perforaciones}) = A(\text{activa}) - (A(\text{no perforada}) + A(\text{zonas libres})) = 0.356\text{ m}^2$$

Numero de perforaciones;

Para calcular el número de perforaciones utilizamos la siguiente expresión;

$N_p = A(\text{perforaciones}) / \text{Área de una perforación} = 4265$ perforaciones

Área de una perforación $= \pi \cdot D^2 (\text{perf}) / 4 = 1.96 \cdot 10^{-5} \text{m}^2$

El diámetro de perforación es de 5mm.

Altura total de la columna;

La altura total de la columna se obtiene con 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)

T= la altura de la parte superior, aproximadamente de 0,5 a 1 m (2 a 3 pies).

La altura neta tiene la siguiente expresión;

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

Donde

N=es el número de etapas teóricas

Eo= la eficiencia global de la columna

l= el espaciado entre platos

Los resultados son los siguientes;

$Z=11.5\text{m}$

$S=1,8\text{ m}$ y $T= 0,7\text{ m}$.

Por tanto, la altura total de la columna es de 14m.

2.1.3 DISEÑO MECANICO DE LA COLUMNA

Con la denominación de recipientes a presión se encuadra a los aparatos constituidos por una envolvente, normalmente metálica, capaz de contener un fluido, líquido o gaseoso, cuyas condiciones de temperatura y presión son distintas a las del medio ambiente.

En toda planta industrial existen recipientes a presión que desarrollan diversas funciones, tales como:

Reactores: en ellos se producen transformaciones químicas, en condiciones de temperatura y presión normalmente severas.

Torres: en ellas se producen transformaciones físicas, tales como separación de componentes ligeros y pesados, absorción, arrastre con vapor...

Recipientes: en ellos pueden producirse transformaciones físicas (separación de líquido-vapor, separación de dos líquidos no miscibles con diferentes densidades) o simplemente realizan la misión de acumulación de fluido.

La forma más común de los recipientes a presión es la cilíndrica, por su más fácil construcción y requerir menores espesores que otras formas geométricas para resistir una misma presión, salvo la forma esférica, cuyo uso se reduce a grandes esferas de almacenamiento, dada su mayor complejidad en la construcción.

2.1.3.1 PARTE DESCRIPTIVA

Todo recipiente a presión está formado por la envolvente, dispositivos de sujeción o apoyo del propio equipo, conexiones por las que entran y salen los fluidos, elementos en el interior y accesorios en el exterior del recipiente. A continuación se procede a describir brevemente cada una de estas partes, mostrando la diversidad de posibilidades en cada una de ellas:

-ENVOLVENTES

Es una envoltura metálica que forma propiamente el recipiente. Los aparatos cilíndricos son los más utilizados, y en ellos la envoltura está formada, básicamente, por dos elementos: la parte cilíndrica o cubierta (carcasa) y los fondos o cabezales. Si la cubierta está constituida por varios cilindros de diversos diámetros, la unión entre ellos se realiza generalmente por figuras troncocónicas que realizan la transición.

a) Cubierta

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.

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 utiliza chapa.

Las cubiertas pueden ser además simples o estar compuestas de un metal y un revestimiento interno o externo, de diversa naturaleza y función:

Vitrificadas: Se usan para el contacto con atmósferas corrosivas reduciendo el coste respecto de si todo el recipiente se hubiera construido de un metal resistente a la corrosión. Las bocas y accesorios internos no deben vitrificarse.

Refractarios: Permiten reducir costes cuando la temperatura excede la del uso de los metales comunes. Los refractarios pueden usarse cuando el espesor necesario del metal es superior a 6 pulgadas. Se refrigeran externamente bien con aire o con camisas de agua. El material ha de seleccionarse con cuidado.

b) Cabezales

Los cabezales o fondos son las tapas que cierran la carcasa. Normalmente son bombeados, existiendo una gran diversidad de tipos entre ellos, y como excepción existen los fondos cónicos y planos, de muy reducida utilización.

Todos estos fondos se realizan a partir de chapa, a la que mediante estampación se le da la forma deseada, salvo el caso de fondos cónicos y planos.

Los tipos más usuales son:

- Semiesféricos
- Elípticos
- Policéntricos
- Cónicos
- Planos

En nuestro caso se utiliza cabezales semiesféricos;

Son los formados por media esfera soldada a la cubierta. Su radio medio es igual al radio medio de la cubierta. El espesor requerido para resistir la presión es inferior al requerido en la cubierta cilíndrica, y como dato aproximado se puede adoptar que el espesor del cabezal es la mitad del espesor de la cubierta. La construcción de este tipo de fondos es más costosa que el resto de los fondos bombeados, por lo que se restringe a casos específicos de grandes espesores o materiales especiales, aunque resultan los más económicos para altas presiones, pudiendo construirse de hasta 12 ft (3.6m)

Es posible construir cabezales de tipo semiesférico mayores de 12 ft mediante soldadura de elementos de cabezales elípticos, pero esta opción incrementa el coste.

Cada tobera de entrada o salida del reactor también incrementa su coste, no solo por el precio de la misma sino porque es necesario reforzar las paredes del recipiente en las proximidades de la misma.

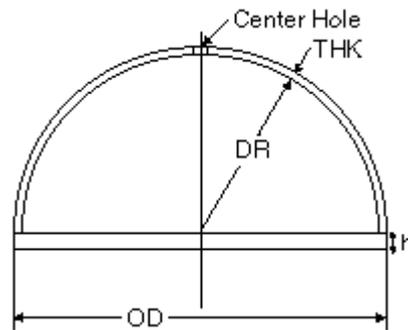


Fig.2.7.Cabezal semiesférico

-DISPOSITIVOS DE SUJECION O APOYO

Los dispositivos de sujeción son los siguientes;

Patas: Con este tipo de dispositivo de sujeción el recipiente se apoya en 3 o 4 patas soldadas a la cubierta. Cada pata está fijada al suelo por un perno de anclaje que resiste las cargas de tracción.

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 y 600 mm, según el tamaño y el número requerido. En todo caso, el número de pernos deberá ser múltiplo de 4.

Al diseñar los faldones debe tener en cuenta que ha de incluirse un acceso a su interior (dimensiones mínimas de 600 mm de diámetro) y unas ventilaciones para evitar la acumulación de gases en su parte interna.

Ménsulas: Es el tipo de apoyo utilizado en recipientes verticales que deben soportarse en estructuras portantes, cuando las dimensiones y cargas no son muy grandes. El número de ménsulas utilizadas son 2, 4, 8 y raramente mayor, pero si así fuera necesario, su número deberá ser múltiplo de 4.

Al igual que las patas, pueden ser soldadas directamente a la cubierta o a una placa de refuerzo soldada al recipiente.

La disposición de la columna es vertical y se utiliza como apoyo el faldón cilíndrico.

-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 utilizado en el diseño 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.

-ACCESORIOS EXTERNOS

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

-Soportes de instalación del aislamiento: Cuando la temperatura del fluido interior es superior a 60° C, 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 la soportación 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 en la instalación la retirada de dichos elementos.

2.2 CALCULO 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.

El diseño óptimo de condensadores y vaporizadores es muy crítico pues constituyen una parte muy importante de los costes energéticos del proceso

En ambos casos, tanto el condensador como el vaporizador se diseñan de forma similar a cualquier intercambiador de calor, presentando en ambos casos ciertas particularidades.

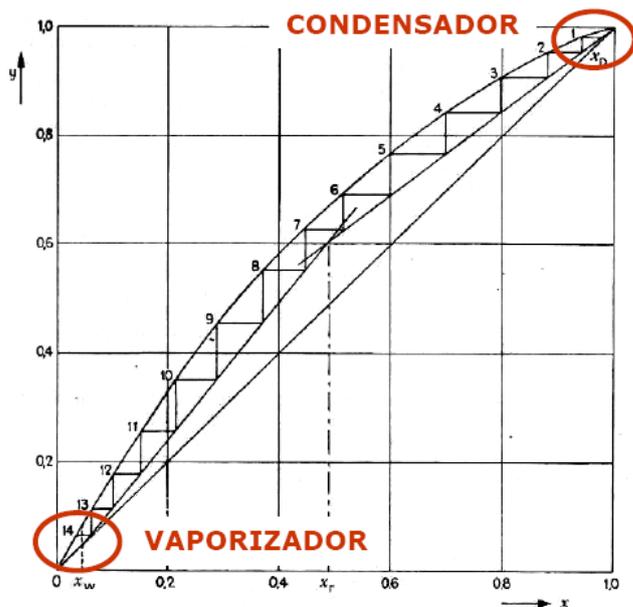


Fig.2.8. Etapa del condensador y del vaporizador

El esquema general que se va a seguir para el condensador es el siguiente;

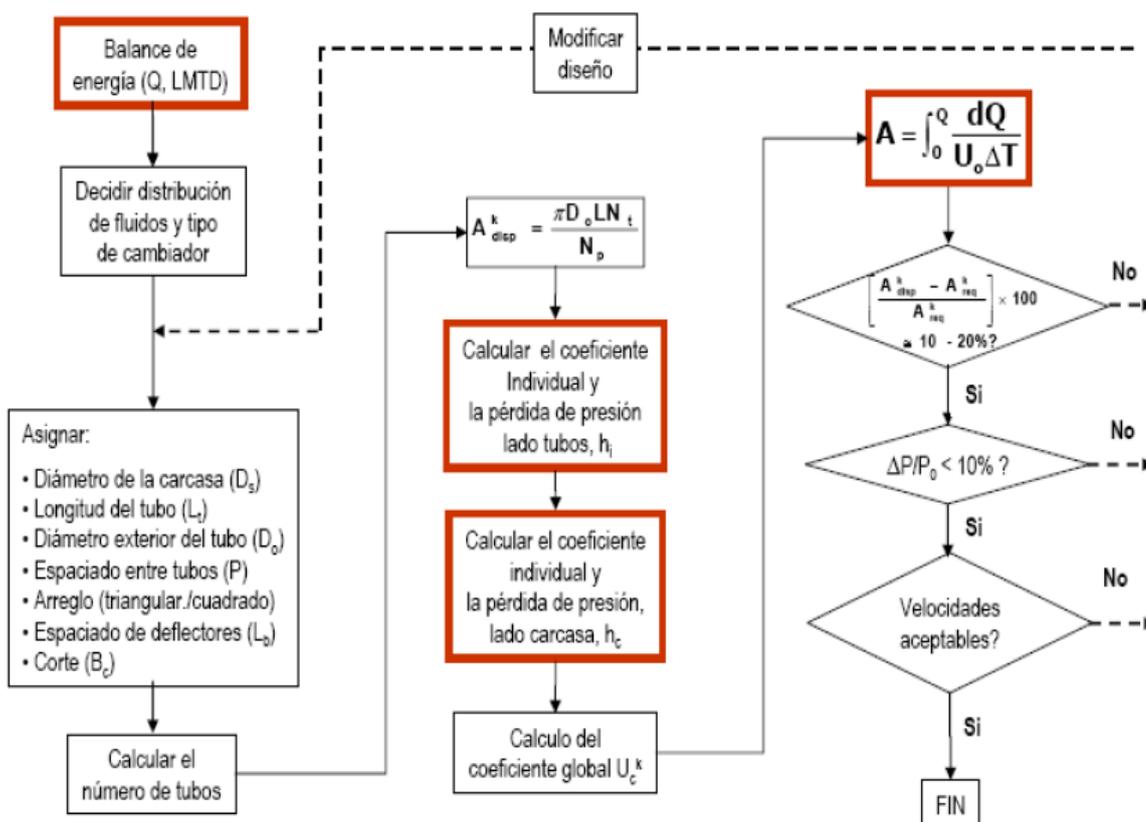


Fig.2.9. Proceso general de diseño de un condensador.

2.2.1 CALCULO DE LA CARGA TERMICA

Calculo del coeficiente de transmisión de calor

A partir de la siguiente tabla se estima el coeficiente global de transmisión de calor;

Fluidos		U (w/m ² •°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

Tabla2.8. Coeficiente de U

Utilizamos un coeficiente global de transmisión de calor de U de 220 w/m² •°C ya que se trata un compuesto orgánico con agua.

Calculo de LMTD

Para el cálculo de LMTD utilizamos la siguiente formula;

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

Los datos son los siguientes;

	Te(k)	Ts(k)
AGUA	293	313
VAPOR	333,1	322,5

Tabla.2.9. Calculo de la LMTD

Se obtiene un LMTD de 24,5.

Utilizando el programa de Chemcad se divide el rango de condensación en 11 etapas, los resultados que obtenemos son los siguientes;

T(°C)	V(kg/s)	L (kg/s)	$\psi = \frac{V}{V+L}$	Qacum(MW)
60,1	10,67	0,00	1	0,00
58	9,62	1,05	0,90	0,40
56,6	8,56	2,12	0,81	0,79
55,5	7,46	3,23	0,70	1,2
54,7	6,30	4,30	0,60	1,6
54	5,29	5,37	0,52	2,0
53,3	4,22	6,46	0,40	2,3
52,6	3,15	7,54	0,31	2,7
51,8	2,07	8,6	0,20	3,1
50,8	1,03	9,66	0,09	3,5
49,5	0,00	10,68	0,00	3,9

Tabla.2.10. Calculo del calor por etapas.

La cantidad de calor necesaria para la condensación es la siguiente;

$$Q = 3,9 \text{ MW}$$

A partir de este dato se puede calcular el área estimada;

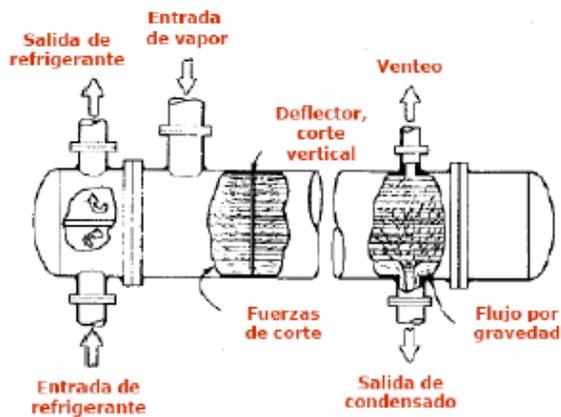
$$Q = U \cdot A \cdot \text{LMTD}$$

$$A = 723,56 \text{ m}^2$$

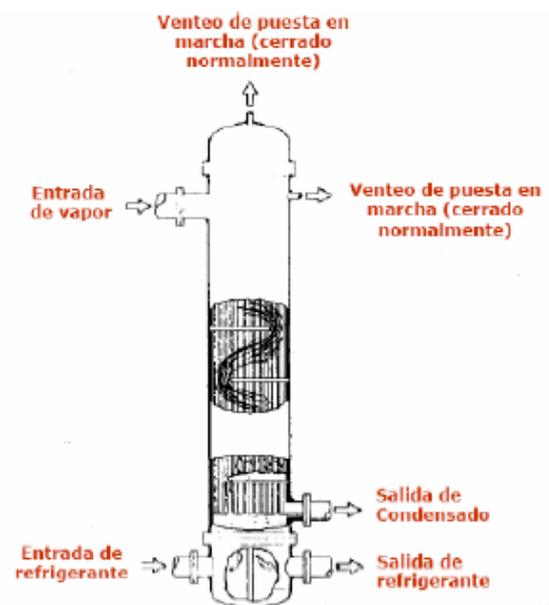
2.2.2 TIPO DE CONDENSADOR

La condensación del vapor se puede llevar a cabo en la carcasa o en los tubos y también puede ser horizontal o vertical. Los tipos de condensadores son los siguientes;

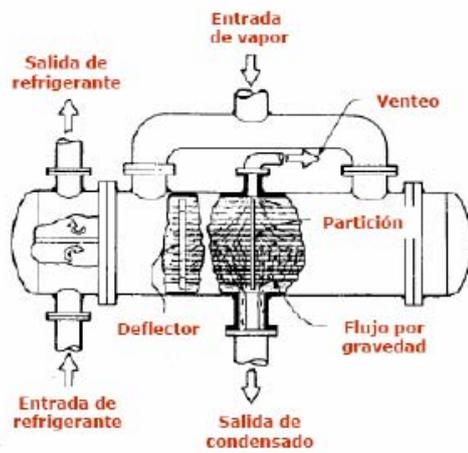
CONDENSACIÓN EN LA CARCASA:



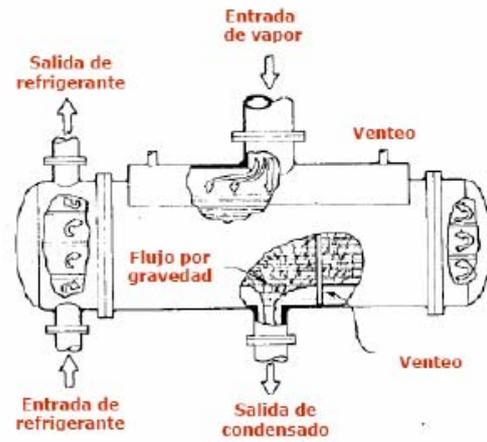
HORIZONTAL TIPO "E"



VERTICAL TIPO "E"

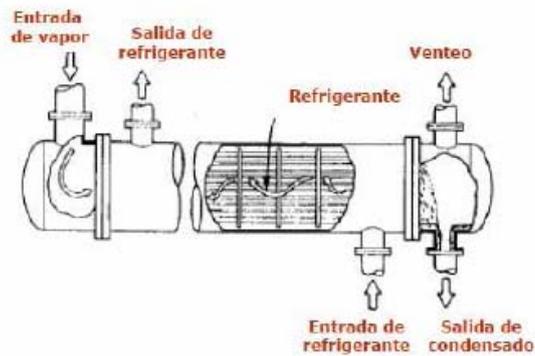


HORIZONTAL DE FLUJO DIVIDIDO (TIPO "J")

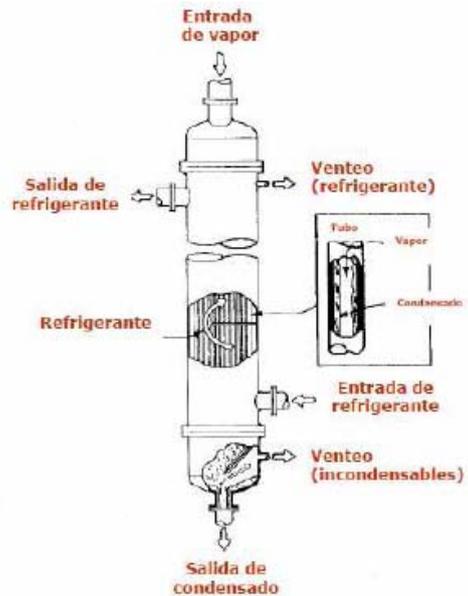


HORIZONTAL DE FLUJO CRUZADO (TIPO "X")

CONDENSACIÓN EN LOS TUBOS:



HORIZONTAL TIPO "E"



VERTICAL TIPO "E"

Fig.2.10. Tipos de condensadores.

Las características de los distintos condensadores son las siguientes;

Configuración		Transmisión del calor	Coste	Operación	Mantenimiento
Condensación en carcasa	Horizontal Tipo E	Buena transmisión del calor especialmente si se ajusta el espaciado entre deflectores.	Construcción simple, por tanto de bajo coste.	La operación puede ser poco estable por acumulación de condensados y/o gases inertes	La orientación horizontal facilita la limpieza mecánica.
	Horizontal Tipo J	Como el tipo E pero mas apto cuando hay limitaciones en Δp de la carcasa.			
	Horizontal Tipo X	Mejor que el J para limitaciones en Δp pero el J es mejor en transferencia de calor.			
	Vertical Tipo E	Preferible si el fluido refrigerante esta en ebullición o si se necesita subenfriamiento.	Algo más caro por la necesidad de un soporte estructural más complejo.		
Condensación en tubos	Horizontal Tipo E	Preferible si la condensación tiene lugar en régimen de fuerzas de corte.	Construcción simple, por tanto de bajo coste.	A bajos caudales la operación es inestable y fluctuante.	Mejor limpieza mecánica.
	Vertical Tipo E	Preferible si se necesita subenfriamiento. Mas flexible en cuanto a regimenes de flujo.	Algo más caro por la necesidad de un soporte estructural más complejo.	Operación mas estable.	La limpieza mecánica se hace mas compleja requiriendo casi siempre limpieza química.

Tabla.2.11. Características de los condensadores.

Los criterios de selección del condensador son los siguientes;

	Condensación en carcasa		Condensación en tubos	
	Orientación horizontal	Orientación vertical	Orientación horizontal	Orientación vertical
Mayor coeficiente U	bueno	regular	bueno	regular
Refrigerante sucio	bueno	bueno	regular	regular
Hay incondensables	regular	bueno	regular	bueno
Subenfriamiento necesario	regular	bueno	regular	bueno

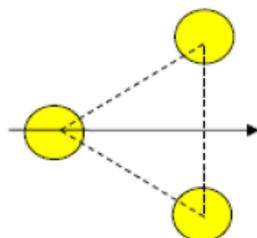
Tabla.2.12. Criterios de selección del condensador.

Se utiliza un condensador vertical tipo E y con condensación en los tubos debido a que no tenemos un coeficiente global de transmisión de calor muy alto y el refrigerante no es sucio.

2.2.3 CONFIGURACION GEOMETRICA

Diseño de la carcasa

El arreglo escogido para el condensador es el triangular ya que se usa como fluido refrigerante el agua y no presenta problemas de limpieza. Además el arreglo triangular permite la colocación de mayores números de tubos que la cuadrada. El ángulo del arreglo triangular es de 30° .



**Triangular
(30°)**

Fig.2.11. Arreglo triangular de 30° .

Para el espaciado de tubos de un arreglo triangular utilizamos la siguiente expresión;

$$P=1,25 \cdot D_{ot}$$

El valor de espaciado es de 0,024 m.

El número de pasos que se utiliza para el condensador es de uno.

El diámetro de la carcasa se obtiene con las tablas del Anexo VI y teniendo en cuenta el número de tubos que tiene el condensador. Por lo tanto, el diámetro de la carcasa es de 54 pulgadas, es decir, 1.37 metros.

Diseño de los tubos

El diámetro exterior del tubo es de $D_{to} = 3/4$ pulgadas, es decir, 19,05 mm.

Para obtener el número de tubos del condensador se puede utilizar la siguiente expresión;

$$A_{est} = (\pi \cdot D_{to} \cdot L_t \cdot N_t) / N_p$$

Donde;

D_{to} = diámetro exterior del tubo

N_t = número de tubos

N_p = número de pasos

L_t = longitud del tubo

La longitud del tubo que utilizamos es de 16 pies, es decir, 4.9 metros.

Obtenemos un valor de 2462 pero este valor no es el que vamos a utilizar como número de tubos. Se utiliza un valor superior a este que se encuentre en las tablas del Anexo VI. Por lo tanto, el número de tubos es de 2861.

El espesor de tubo que se utiliza es $X_w = 20\text{BWG}$, es decir, 0.9mm.

Con los datos que tenemos se puede calcular el diámetro interior del tubo utilizando la siguiente ecuación;

$$D_{ti} = D_{to} - 2 \cdot X_w$$

El diámetro interior del tubo es $D_{ti} = 17.3 \text{ mm}$.

Por último, la distancia entre tubos se obtiene con la siguiente ecuación;

$$C = P - D_{to}$$

Cuyo valor es de 0.0048 m

Diseño de deflectores

El espacio entre deflectores se obtiene con una ecuación que supone un porcentaje del diámetro de la carcasa;

$$L_b = 0.45 \cdot D_c$$

$$L_b = 0.62 \text{ m}$$

El corte de los deflectores se obtiene con una ecuación similar a la anterior;

$$B_c = 0.25 \cdot D_c$$

$$B_c = 0.34 \text{ m}$$

A partir de la siguiente ecuación se puede obtener el número de deflectores;

$$N_b = L_t / L_b - 1$$

Como ya hemos calculado todos los datos necesarios se obtiene un número de deflectores de $N_b = 7$.

2.2.4 COEFICIENTE GLOBAL DE TRANSMISION DE CALOR

Para el cálculo del coeficiente global de transmisión se utiliza la siguiente ecuación;

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

Los términos que nos faltan se calculan de la siguiente forma;

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

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

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

Donde;

Re = es el número de Reynolds

Pr = es el número de Prandtl

R_i es la resistencia de ensuciamiento por el lado de los tubos y R_0 es la resistencia de ensuciamiento por el lado de la carcasa. Para obtener su valor se utiliza la siguiente tabla;

Los valores que se utiliza es $R_i = 0.00045 \text{ m}^2 \cdot \text{°C/W}$ (gasoil ligero) y $R_0 = 0.00035 \text{ m}^2 \cdot \text{°C/W}$ (agua de refrigeración).

Fluido	R (m ² ·°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.2.12. Resistencias de ensuciamiento.

Antes de continuar hay que saber el tipo de régimen en el que se encuentra.

Tipo de régimen

El régimen puede ser por fuerzas gravitatorias o por fuerzas de corte. Para saber en que régimen se encuentra se utiliza la siguiente expresión;

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

Donde;

$$G_t (\text{kg} / \text{m}^2 \cdot \text{s}) = \frac{V (\text{kg} / \text{s})}{A_t (\text{m}^2) \cdot N_t}$$

-si $C_{gt} < 0.3$ el régimen es de corte

- si $C_{gt} > 0.7$ el régimen es gravitatorio

Las diferencias que hay entre un régimen u otro se muestran en la siguiente figura;

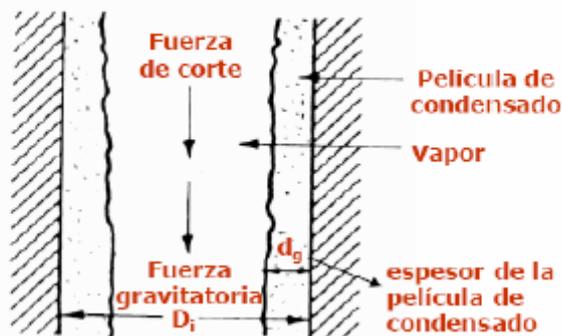


Fig.2.13. Tipos de regimenes.

Se obtiene al principio el régimen de corte y luego se vuelve en régimen gravitacional, siendo el que domina el régimen gravitacional.

A continuación se calcula $h_{sv, hcf}$ y el factor de difusión.

Calculo de h_{cf}

El termino h_{cf} se obtiene de distinta forma según en el régimen que se trate. Para el régimen de corte se utiliza la siguiente ecuación;

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

F_{tp} se obtiene de la siguiente manera;

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

El resto de los términos se calculan con las siguientes expresiones;

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

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

Para régimen gravitatorio;

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

El resto de los términos se calculan con las siguientes expresiones;

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

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

Donde

W_t = es el caudal másico total en kg/h.

D_g = es el espesor de la película de condensado.

Calculo de h_{sv}

El cálculo de h_{sv} depende del tipo de régimen, en este caso estamos en régimen laminar.

Si es régimen laminar se utiliza la siguiente ecuación;

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

Donde

$$Gz = Re Pr \left(\frac{D_{it}}{L} \right)$$

L= es la longitud de tubos

K=es la conductividad térmica

Si es régimen turbulento se utiliza la siguiente ecuación;

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

Factor de difusión

El factor de difusión también va depende de si estamos en régimen de fuerzas de corte o fuerza gravitacional. El factor de difusión es φ_d ;

-si es dominio gravitacional $\rightarrow \varphi_d = 0.9 \cdot \varphi_{d0}^{0.9}$

-si es dominio de fuerzas de corte $\rightarrow \varphi_d = 1.2 \cdot \varphi_{d0}$

Donde;

$$\varphi_{d0} = \frac{\lambda_{vap}}{\psi C_{pV}} \left(\frac{\Delta \psi}{\Delta T_V} \right) + \frac{C_{pL}}{C_{pV}} \left(\frac{1 - \psi}{\psi} \right)$$

Los resultados que se obtienen son los siguientes;

T(°C)	h_{sv}	h_{cf}	φ_d	U_0
60,1	0.00	0.00	0.00	0.00
58	14.4	1428.1	14.2	142.2
56,6	18.2	1127	24.4	219.1
55,5	18.7	980.5	36	255.6
54,7	20.2	888.5	58.3	297.8
54	21.7	824	80.1	317
53,3	23.4	774	99.9	326.1
52,6	25.2	735.6	132.1	333.2
51,8	73.6	704.8	178	355.4
50,8	80.7	680.1	127.2	344
49,5	85.6	349.2	0.00	58

Tabla.2.13. Cálculo del factor de difusión, h_{sv} y h_{cf} .

Estimación del área requerida

Para el cálculo del área requerida como el vapor es multicomponente el uso de la LMTD no es válido. En este caso hay que integrar la ecuación con los valores locales de U y un método numérico apropiado. En nuestro caso utilizaremos el método de trapecios.

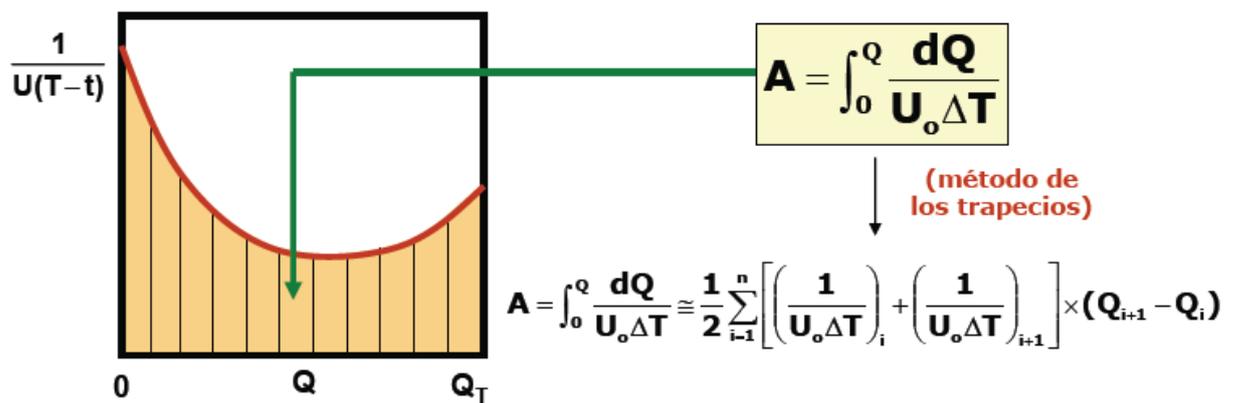


Fig.2.14. Método de los trapecios.

Los resultados son los siguientes;

T(°C)	h_{sv}	h_{cf}	φ_d	U_0	Área
60,1	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
58	14.4	1428.1	14.2	142.2	137
56,6	18.2	1127	24.4	219.1	224
55,5	18.7	980.5	36	255.6	163
54,7	20.2	888.5	58.3	297.8	129
54	21.7	824	80.1	317	109
53,3	23.4	774	99.9	326.1	99
52,6	25.2	735.6	132.1	333.2	92
51,8	73.6	704.8	178	355.4	84
50,8	80.7	680.1	127.2	344	79
49,5	85.6	349.2	0.00	58	268

Tabla.2.14. Cálculo del área requerida.

El área requerida es de 690 m²

2.2.5 EVALUACION DEL DISEÑO

Cálculo del sobredimensionado

El sobredimensionado da información acerca de la desviación de un modelo óptimo. La expresión que se utiliza es la siguiente;

$$S = \frac{A_{\text{disponible}} - A_{\text{requerida}}}{A_{\text{requerida}}} \cdot 100$$

El área disponible se obtiene de la siguiente forma;

$$A_{\text{disp.}} = \pi \cdot D_{\text{to}} \cdot L_{\text{t}} \cdot N_{\text{td}} = 836.7 \text{ m}^2$$

Se obtiene un sobredimensionado de 21%. Para que el diseño sea bueno tiene que estar aproximadamente entre un rango del 10 al 20 %.

Perdida de carga

Para el cálculo de la pérdida de carga en el lado de los tubos hay que tener en cuenta la pérdida de presión en los tubos y la pérdida de presión en los retornos. Por lo tanto, la pérdida de presión total es la siguiente;

$$\Delta P_{\text{tubos}} = \Delta P_{\text{t}} + \Delta P_{\text{r}}$$

La pérdida de presión en los tubos se calcula de la siguiente manera;

$$\Delta P_{\text{t}} (\text{Pa}) = f \cdot \frac{n \cdot L_{\text{t}}}{D_{\text{t}}} \cdot \frac{\delta \cdot u_{\text{t}}^2}{2}$$

Donde

n = es el número de pasos en los tubos

D_{t} = es el diámetro interior de los tubos

L_{t} = es la longitud de los tubos

f = es el factor de fricción

u_t = es la velocidad del fluido en los tubos

Para obtener la pérdida de presión de los tubos hay que calcular previamente los siguientes términos.

- factor de fricción;

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

- velocidad del fluido en los tubos

$$u_t = \frac{G_t}{\rho} = \frac{W_t}{A_t \cdot \rho} = \frac{F_t \cdot M_m}{A_t \cdot \rho}$$

Se utiliza un valor de $\varepsilon = 0.046\text{mm}$, como resultado;

$\Delta P_{\text{tubos}} = 0.8 \text{ Pa}$.

Para obtener la pérdida de presión en los retornos realizamos los siguientes cálculos;

$$\Delta P_r (\text{Pa}) = Kn \cdot \frac{\delta \cdot u_t^2}{2}$$

$Kn = 1.8$

$\Delta P_{\text{retornos}} = 0.4 \text{ Pa}$.

Por lo tanto, la pérdida de carga en los tubos es de 1.2 Pa.

A continuación se calcula la pérdida de presión en el lado de la carcasa.

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

Donde

N= numero de cruces entre deflectores. $N = L_t / L_{bc}$

u_t = velocidad de flujo en la carcasa

El factor de fricción lo se puede calcular de forma grafica;

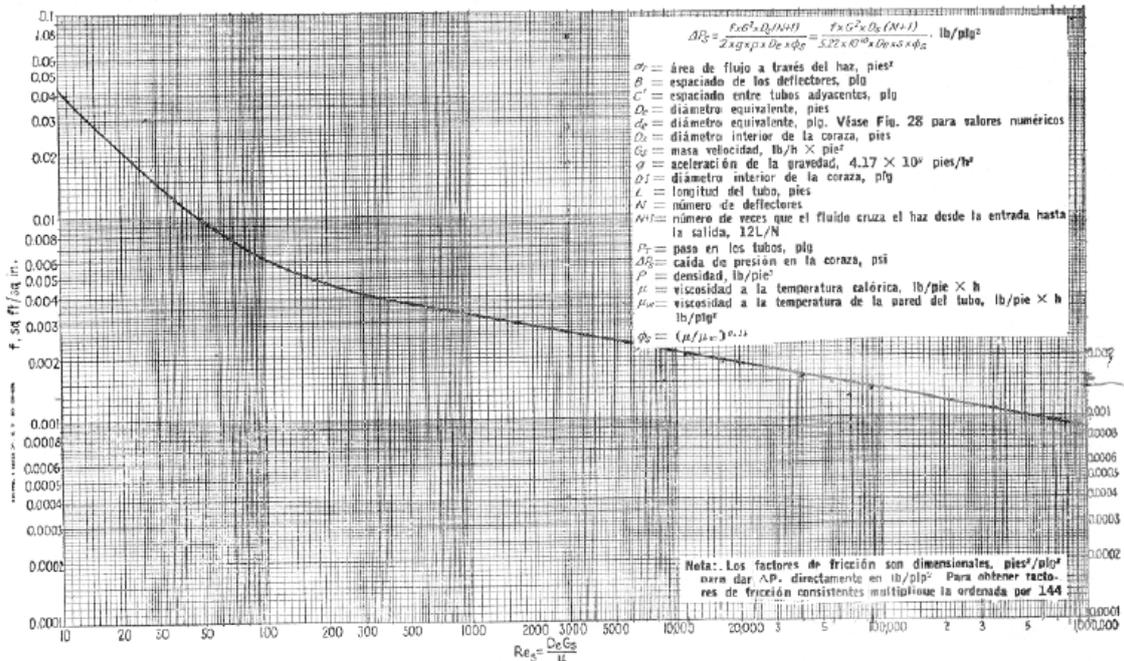


FIG. 29. Factores de fricción lado de la coraza, para haces de tubos con deflectores segmentados 25%

Fig.2.15. Determinación del factor de fricción.

También se puede obtener a partir de los datos de la siguiente tabla;

Numero de Reynolds	Factor de fricción
10-100	5.76-0.864
100-1000	0.864-0.4752
1000-10000	0.4752-0.288
10000-100000	0.288-0.1872
100000-1000000	0.187-0.1296

En este caso el coeficiente de fricción esta entre 0.47-0.28, interpolando obtenemos un valor de fricción aproximado de 0.34.

Como resultado se obtiene una perdida de presión en la carcasa de 716 Pa.

Como conclusión, se obtienen unas perdidas de presión aceptables.

2.3 CALCULO DEL VAPORIZADOR E-102

El diseño del vaporizador es muy parecido al del condensador .El vaporizador va a tener cuatro tipo de regímenes como se puede observar en la siguiente imagen;

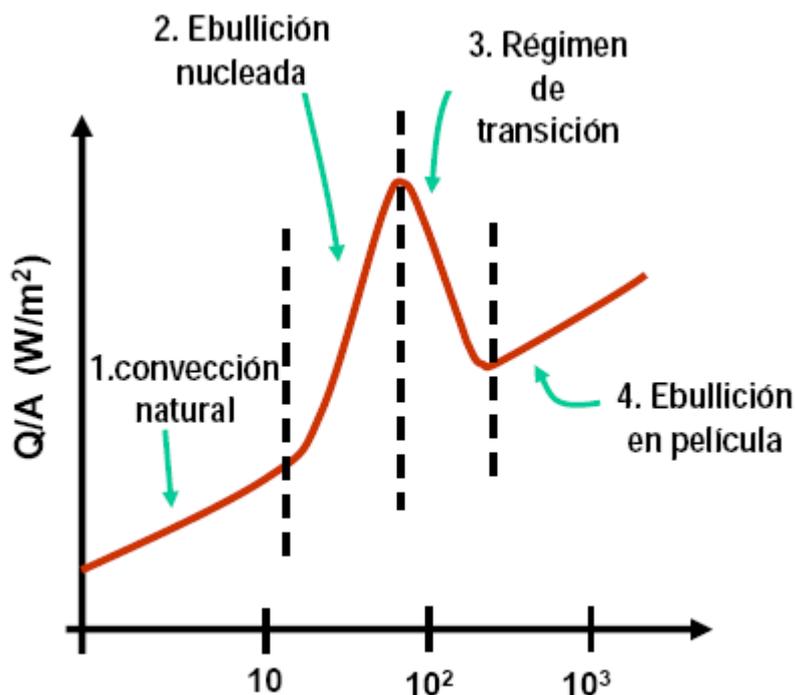


Fig.2.16. Regimenes de un vaporizador.

Los tipos de regímenes son los siguientes;

1. A valores de $\Delta T_b < 10^\circ C$ el calor se transmite por convección natural hacia la superficie libre del liquido 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 les rodea hasta que la fuerza de empuje los eleva a la superficie en forma de burbujas. Los vaporizadores se diseñan para operar 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 ΔT_b se forma una película de vapor prácticamente estática entre la superficie del tubo y el seno del líquido.

Para llevar a cabo el diseño del vaporizador se utiliza el siguiente esquema;

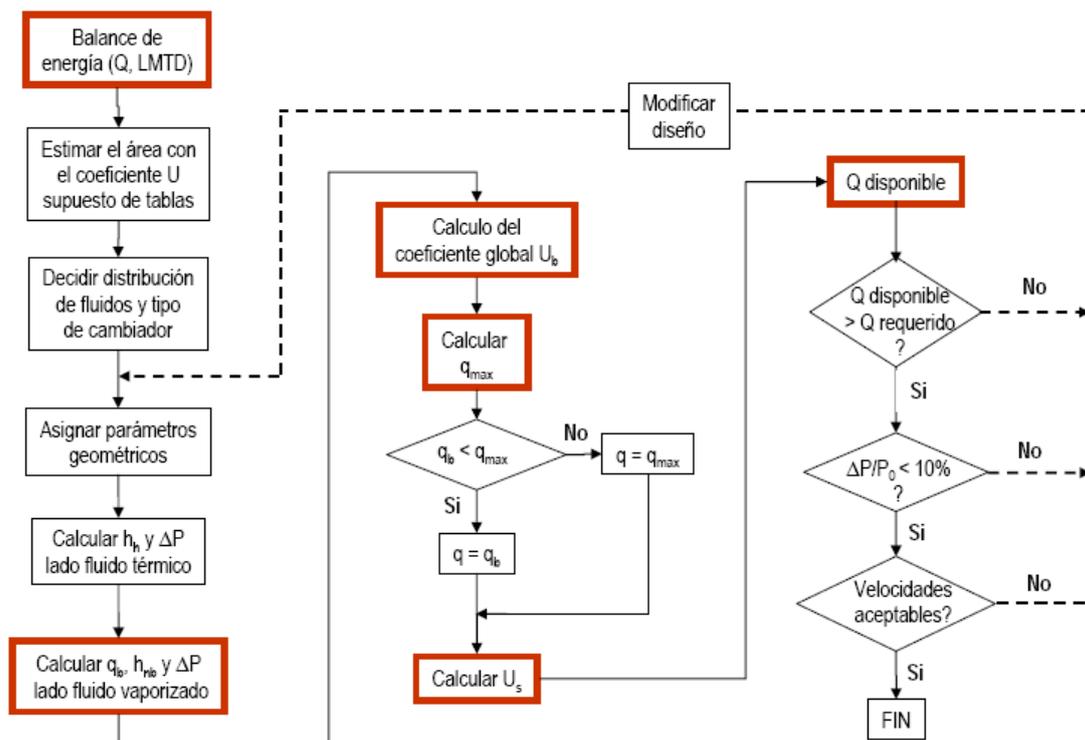


Fig.2.17. Esquema del diseño del vaporizador.

2.3.1 ESTIMACION DEL AREA REQUERIDA

Cálculo del calor

Como el líquido a vaporizar tiene un 99% de MTBE se utiliza la siguiente ecuación;

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

Donde

Q = es el calor global

λ_{vap} = es el calor latente de vaporización.

V= es el caudal que se introduce en la columna.

$$Q = 2,27 \cdot 10^6 \text{ W}$$

Estimación del coeficiente global de transmisión de calor

Se utiliza un aceite térmico el Dowtherm por lo tanto el valor de U puede tomar un valor entre 50 y 350 ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$). Estos valores se encuentran en la siguiente tabla;

Fluido vaporizado	Medio calefactor	U ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot ^\circ\text{C}$)	
		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.2.18. Coeficiente U.

El valor de U que utilizamos es de 160 ($\text{W}/\text{m}^2 \cdot \text{K}$).

Cálculo de la LMTD

Para el cálculo de LMTD utilizamos la siguiente formula;

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

En este caso el sentido de la corriente del proceso y el fluido térmico es a contracorriente. Como fluido térmico se utiliza un aceite térmico el Dowterm que tiene una temperatura de entrada de 170°C y una temperatura de salida de 150°C. La corriente del proceso tiene una temperatura de 124°C. Se obtiene un valor de LMTD de 35.05 °C.

Estimación preliminar del área

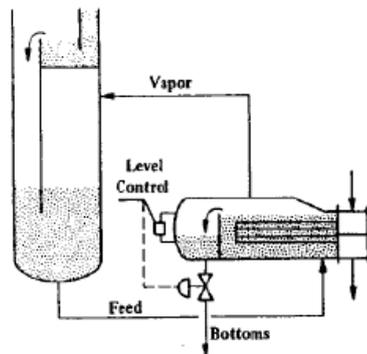
Como en casos anteriores la formula del área preliminar o estimada que se utiliza es;

$$Q = U \cdot A \cdot LMTD$$

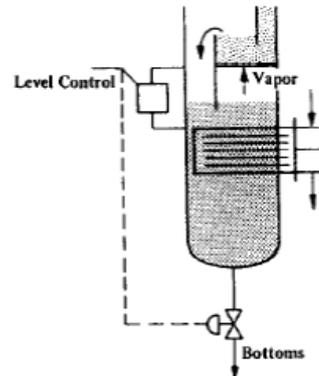
El área preliminar es de 405 m².

2.3.2 TIPO DE VAPORIZADOR

Los distintos tipos de vaporizadores son los siguientes;



VAPORIZADOR DE MARMITA
("TIPO KETTLE")



VAPORIZADOR INTERNO

Fig.2.19. Vaporizador Kettle y vaporizador interno.

En estos equipos la vaporización tiene lugar en el exterior del haz de tubos. El fluido calefactor circula por el interior de los tubos.

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. El vaporizador interno no tiene carcasa y la longitud del haz de tubos está limitada por el diámetro de la columna.

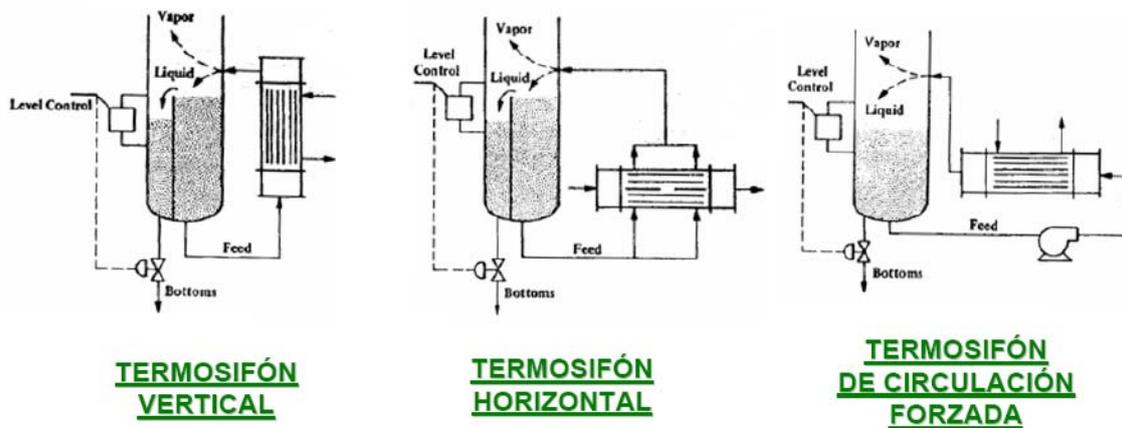


Fig.2.20. Termosifón vertical , horizontal y de circulación forzada.

Los termosifones son unidades en las que el fluido a vaporizar circula a alta velocidad por un intercambiador convencional. Pueden ser de circulación natural (por gravedad) o de circulación forzada con la ayuda de una bomba en el circuito. La posición horizontal es para vaporización en la carcasa y la vertical para vaporización en los tubos.

En la siguiente tabla se recoge información de los distintos vaporizadores;

	Transmisión de calor	Costes del equipo y de la instalación	Operación	Mantenimiento
Kettle	Altos flujos de transmisión de calor	Intermedio. el aumento de coste por la mayor carcasa se compensa por el menor coste en tuberías.	Muy estable. Inestable a grandes cambios en los caudales y condiciones del proceso	Tiene mayor tendencia al ensuciamiento. No recomendables para servicios sucios.
Interno	La limitación en la longitud impuesta por el diámetro de la columna limita los flujos obtenibles. Ineficientes para grandes DT.	Son los más baratos, especialmente si se requieren áreas moderadas. La brida de conexión del haz a la columna puede encarecer un poco.	Muy estable igual que el Kettle	Ligeramente menos sucios que los Kettle pero requieren parar y drenar la columna para la limpieza.
Termosifón vertical	El área está limitada por restricciones estructurales de longitud y diámetro de la carcasa.	Son los más baratos entre los termosifones y los segundos después de los internos, a pesar de requerir tuberías cortas de diámetro grande y faldón estructural más largo para la columna.	La estabilidad depende del equilibrio de presión entre el flujo bifásico de los tubos y la carga hidrostática del líquido de la columna. No recomendables para amplias fluctuaciones en el proceso.	Debido al movimiento del fluido la velocidad del ensuciamiento es menor que en los Kettle y en los internos. El ensuciamiento de los tubos es más sencillo de limpiar.
Termosifón horizontal	Se puede disponer de más área que en la disposición vertical. Flujos térmicos similares.	Más caros que los verticales pues la configuración habitual son las carcasas tipo G, H o J que requieren una instalación de tuberías y una superestructura más compleja.	Menos sensibles a las fluctuaciones en velocidad y cambios del proceso que los verticales, siendo similar a los Kettle e internos.	Velocidades de ensuciamiento lentas pero al ser la vaporización en la carcasa son más difíciles de limpiar que los verticales.
Termosifón de circulación forzada	Coefficiente de transmisión de calor muy elevados aunque no compensan los altos costes de bombeo en fluidos de viscosidad ordinaria.	Los costes de bombeo son muy altos y solo se compensan en el caso de fluidos muy viscosos o por la posibilidad de usar diámetros más pequeños cuando no hay espacio y la unidad está lejos de la columna	Estable si la fracción vaporizada es pequeña.	Muy apropiado para servicios muy viscosos y sucios donde el ahorro en mantenimiento compensa los altos costes de bombeo.

Tabla.2.15. Características de los vaporizadores.

Utilizando la tabla anterior y el siguiente esquema se elige el vaporizador más adecuado;

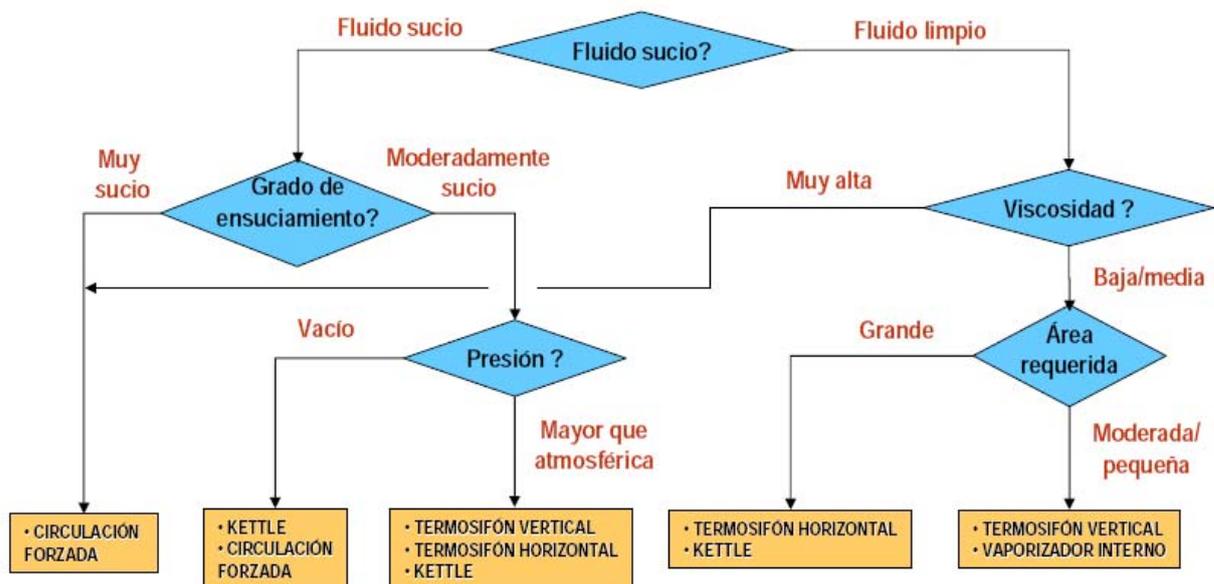


Fig.2.21. Selección del tipo de vaporizador.

Se utiliza un vaporizador Kettle ya que el MTBE se considera prácticamente puro además no es un fluido sucio ni muy viscoso. Este tipo de vaporizador es muy estable, la vaporización sucede en el exterior del haz de tubos mientras que el fluido térmico circula por el interior de los tubos.

2.3.3 CONFIGURACION GEOMETRICA

Diseño de los tubos

Se utiliza un diámetro exterior de 3/4", es decir, 19,05 mm. El espesor del tubo que se ha seleccionado es de 14 BWG, es decir, 2 mm. Con estos datos podemos calcular el diámetro interior del tubo con la siguiente formula;

$$D_{ti} = D_{to} - 2 \cdot X_w$$

Se obtiene un diámetro interno de 15mm.

Con respecto a la longitud de los tubos se ha asignado una longitud de 30 pies, es decir, 9,14m.

Para calcular el número de tubos se utiliza la siguiente ecuación;

$$A = \frac{\pi \times D_{to} \times L_t \times N_t}{N_p}$$

N_p es el número de pasos, en este caso tenemos 2 pasos. Por lo tanto se obtiene 1333 números de tubos. Al igual que el condensador se utiliza las tablas del Anexo VI para el número de tubos que se utiliza. En este caso se tiene 1390 tubos.

Diseño de la carcasa

El diámetro de la carcasa es de 39 pulgadas, es decir, 0.99m. El arreglo que se elige es el arreglo triangular, por lo tanto, el cálculo del espaciado entre tubos es el siguiente;

$$P = 1.25 \cdot D_{to}$$

$$P = 23.81 \text{ mm.}$$

Con estos datos se puede obtener la distancia entre tubos;

$$C = P - D_{to}$$

$$C = 4.76 \text{ mm.}$$

Diseño de los deflectores

Elegimos los deflectores segmentados, el espaciado entre los deflectores supone un 45% del diámetro de la carcasa;

$$L_b = 0.45 \cdot D_c$$

$$L_b = 0.44 \text{ m.}$$

El valor del corte del deflector es de un 25% del diámetro de la carcasa. Para obtener el número de deflectores se utiliza la siguiente ecuación;

$$N_b = L_t / L_b - 1$$

$$N_b = 19.77 \text{ m}$$

Cálculo del área real

Una vez obtenidos todos los datos ya se puede calcular el área real;

$$A = \frac{\pi \times D_{to} \times L_t \times N_t}{N_p}$$

Se obtiene un área de 380 m².

2.3.4 CALCULO DEL CALOR DISPONIBLE

Para el cálculo del calor disponible se utiliza la siguiente ecuación;

$$Q_{disp} = q_b \cdot A_{disp}$$

Cálculo de h_{nb}

Para obtener el coeficiente de transmisión de calor en ebullición nucleada hay que calcular dos términos que lo componen, como lo son el coeficiente de ebullición nucleada a una presión reducida de referencia ($h_{nb, ref}$) y el coeficiente por convección natural para el MTBE (h_{nc}):

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

-Cálculo de $h_{nb, ref}$;

La ecuación que se utiliza es la siguiente;

$$h_{nb, ref} = A^* q_b^{0,7} F_p$$

Donde

-A* es un termino que se calcula con la siguiente ecuación;

$$A^* = 0,0658 P_c^{0,69}$$

P_c es la presión crítica

$-F_p$ es el factor de corrección de presión y se define en la siguiente ecuación;

$$F_p = 1,8P_r^{0,17} + 4P_r^{1,2} + 10P_r^{10}$$

P_r es la presión reducida de referencia.

$-q_b$ es el calor y se obtiene con la siguiente ecuación;

$$q_b = [A^* F_p]^{3,33} \Delta T^{3,33}$$

Sabiendo que;

$$\Delta T = T_w - T_f$$

T_w es la temperatura de la pared

T_f es la temperatura del fluido

- Cálculo de h_{nc} ;

La ecuación que se utiliza es la siguiente;

$$Nu_{nc} = \frac{h_{nc} D_{ot}}{k} = 0,53 [Gr Pr]^{1/4}$$

Donde

Gr es el número de Grashoff que se calcula de la siguiente forma;

$$Gr = \frac{D_{ot} \rho^2 g \beta \Delta T}{\mu^2}$$

Pr es el numero de Prandtl se calcula de la siguiente forma;

$$Pr = \frac{\mu C_p}{k}$$

β es el coeficiente de expansión térmica y su valor se obtiene de la siguiente ecuación;

$$\beta = \frac{1}{Vol(T)} \times \frac{\Delta Vol(T)}{\Delta T}$$

Una aproximación a la ecuación es la siguiente;

$$\beta = \frac{d \ln\left(\frac{1}{\rho_L}\right)}{dT}$$

Para obtener el valor de β se hace una representación grafica de $\ln(1/\rho_L)$ frente a T. Se va a obtener una ecuación que hay que derivarla respecto de T. Sustituyendo el valor de T por 124°C, es decir, 397 K se obtiene un valor de $\beta = 0.0087$.

Los resultados finales son;

$$q_b = 6583$$

$$h_{nb} = 1530$$

Cálculo del calor disponible

Con los datos que se han obtenido se puede calcular el calor disponible;

$$Q_{disp} = q_b \cdot A_{disp} = 6583 \cdot 380 = 2.5 \text{ MW}$$

2.3.5 EVALUACION DEL DISEÑO

Cálculo del sobredimensionado

Para que el sobredimensionado sea aceptable tiene que estar entre un 10-20%.

$$S = (Q_{disp} - Q_{req}) / Q_{req} = 0.101 = 10.1\%$$

Por lo tanto, se obtiene un sobredimensionado aceptable

Cálculo de la pérdida de carga en el lado de los tubos

Se utiliza la siguiente ecuación;

$$\Delta P_T = \Delta P_t + \Delta P_r$$

Donde

ΔP_t = es la caída de presión en los tramos rectos.

ΔP_r = es la caída de presión en los cabezales de retorno.

-Cálculo de ΔP_t ;

$$\Delta P_t (Pa) = f \cdot \frac{n \cdot L_t}{D_t} \cdot \frac{\delta \cdot u_t^2}{2}$$

Donde

n = número de pasos en los tubos

D_t = diámetro interior de los tubos

L_t = longitud de los tubos

f = factor de fricción

u_t = velocidad del fluido en los tubos

- Cálculo de ΔP_r

$$\Delta P_r (Pa) = K_n \cdot \frac{\delta \cdot u_t^2}{2}$$

Donde

$K_n = 1.8$

La pérdida de carga se calcula de la misma manera que en el condensador. Por lo tanto, se obtiene una pérdida de carga en el lado de los tubos de 65720 Pa.

Cálculo de la pérdida de carga en el lado de la carcasa

La ecuación que se utiliza es la misma que para el condensador;

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

Por lo tanto, la pérdida de carga en el lado de la carcasa es de 0.025 Pa.

2.4 CALCULO DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR E-103

Este intercambiador se utiliza para reducir la temperatura de la corriente de fondo de la columna de destilación.

Los datos de la corriente se recogen en la siguiente tabla;

Corriente no	2	7
Descripción	Fondos T-100	MTBE Prod.
Temperatura (°C)	127.1	30
Presión (atm)	6.7	6.5
Fracción de vapor	0	0
Entalpia (MJ/h)	-47676.8	-50953.9
Caudal (kmol/h)	163.6	163.6

Tabla.2.16. Composiciones de la corriente 2 y 3.

La composición es básicamente MTBE puro, se tiene una composición de 0.99 de MTBE y 0.01 de metanol.

2.4.1 CALCULO DEL AREA ESTIMADA

Como medio de refrigeración se utiliza agua a una temperatura media de 30°C.

Estimación del calor

Para el cálculo del calor o carga térmica necesaria para el enfriamiento se utiliza la siguiente ecuación;

$$Q = F \cdot C_p (T_2 - T_1) = 1006085.5 \text{ W}$$

Donde

F=es el caudal de la corriente del proceso en kmol/s

C_p= es la capacidad calorífica en J/kmolK

Caudal del agua de refrigeración

Sabiendo que el calor intercambiado es el mismo, se puede calcular el caudal de refrigeración;

$$Q = F \cdot C_p (T_2 - T_1)$$

$$F = 0.23 \text{ kmol/s}$$

Coefficiente de transmisión de calor U

En el intercambiador se ponen en contacto el fluido de agua y el MTBE que es un compuesto orgánico. Por lo tanto, el valor de U que se puede escoger está entre 200 y 900. Se utiliza un valor de 200 (w/m² · °C).

Para ello se utiliza la siguiente tabla;

Fluidos		U (w/m ² °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

Tabla.2.17. Coeficiente U.

Calculo de la LMTD

Se utiliza la siguiente ecuación;

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

Las temperaturas del MTBE son;

$$T_e = 127.1^\circ\text{C} = 400,1\text{K}$$

$$T_s = 30^\circ\text{C} = 303\text{K}$$

Las temperaturas del agua son;

$$T_e = 20^\circ\text{C} = 293\text{K}$$

$$T_s = 40^\circ\text{C} = 313\text{K}$$

$$\text{LMTD} = 35,69$$

Área estimada

Para estimar el área se utiliza la siguiente expresión;

$$Q = U \cdot A \cdot \text{LMTD}$$

$$A = 140,9\text{m}^2$$

2.4.2 TIPO DE INTERCAMBIADOR

Se ha seleccionado un intercambiador de placas tubulares fijas. En el siguiente cuadro se muestran sus ventajas e inconvenientes;

Ventajas	Inconvenientes
<ul style="list-style-type: none"> - Bajo coste. - Los tubos pueden limpiarse mecánicamente pero la carcasa solo químicamente. - Minimiza las fugas en el fluido del lado de la carcasa. 	<ul style="list-style-type: none"> - Limitado a fluidos limpios por la carcasa. - Incapaz de absorber el stress térmico de grandes diferencias de temperatura. Limitado a pequeños saltos térmicos.

Tabla.2.18. Ventajas e inconvenientes del intercambiador de placas tubulares fijas.

La TEMA ("Tubular Exchanger Manufacturers Association") ha establecido un código de tres letras que describen como con cada uno de los tres componentes principales de un intercambiador.

Tipos de cabezales estacionarios

El tipo A -o tipo carrete-, es la configuración estándar para fluidos sucios en el lado de los tubos pues permite limpieza los tubos con facilidad tan solo con desmontar la tapa, no siendo necesario desmontar las conexiones a proceso.

El tipo B -o tipo bonete-, es la configuración estándar para fluidos limpios en el lado de los tubos pues la limpieza es algo mas complicada al tener que desembridar la unión a la carcasa y también las toberas de conexión a proceso. Sin embargo resulta mejor que la A para presiones elevadas.

El tipo C tiene la placa tubular soldada al cabezal pero esta embridado a la carcasa. Tiene las ventajas del A aunque es un poco más incómodo para mantenimiento. Se utiliza para fluidos peligrosos en el lado de los tubos y que requieren limpieza frecuente en la carcasa.

El tipo N tiene la placa tubular soldada tanto al cabezal como a la carcasa, no existiendo por tanto acceso a la carcasa. Se utiliza para fluidos peligrosos en el lado de la carcasa

El tipo D es un cabezal soldado a la placa tubular especial que se utiliza únicamente para fluidos a presión elevada (más de 150 bares).

Los tipos de cabezales estacionarios se representan a continuación;

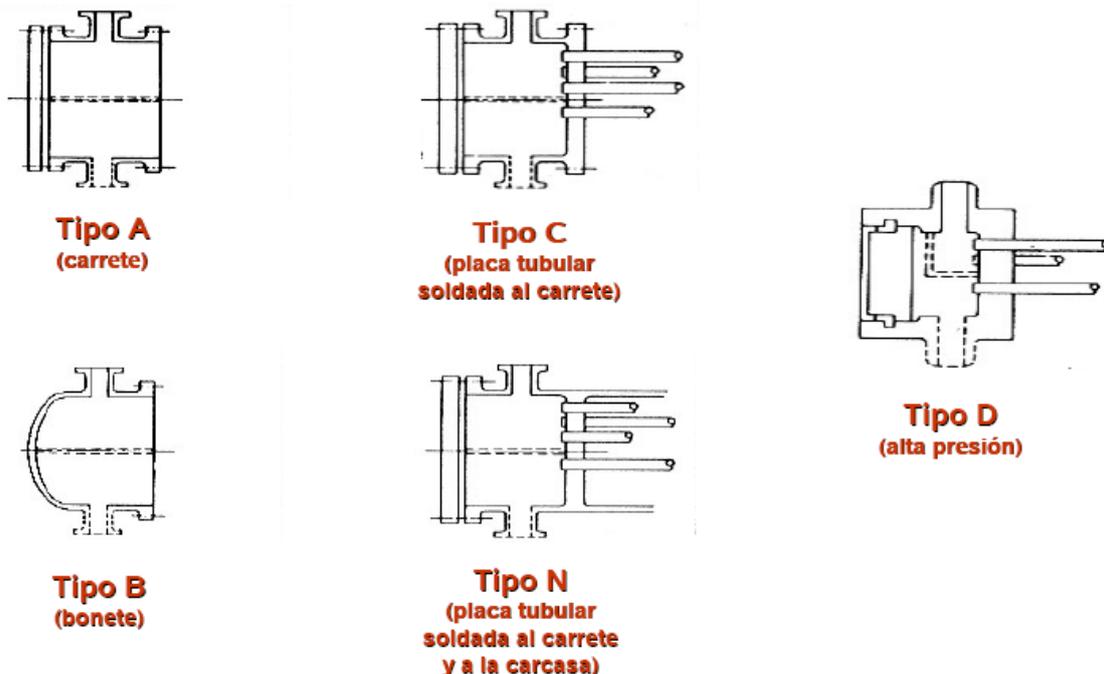


Fig.2.22. Tipos de cabezales estacionarios.

Tipos de carcasas

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

La carcasa tipo F tiene un deflector longitudinal que divide la carcasa en dos pasos. La carcasa tipo F se usa en situaciones con cruce de temperatura o en casos con caudales muy bajos en el lado de la carcasa (al reducir la sección transversal aumenta la velocidad, y por tanto la velocidad de transmisión de calor)

La carcasa tipo G es una carcasa de flujo partido. Se usa habitualmente en evaporadores de tipo termosifón horizontal. Tiene solamente una placa central sin deflectores. Una carcasa tipo G no puede usarse en cambiadores de más de 3 m de longitud de tubo (longitud máxima de tubo sin soportar)

La carcasa tipo H se usa cuando se quiere solventar las limitaciones de longitud de tubo en las carcasas tipo G. En realidad es la combinación de dos carcasas tipo G en serie. La ventaja de las carcasas G y H es que la pérdida de presión en la carcasa es mucho menor que en una carcasa tipo E.

La carcasa tipo J se denomina de flujo dividido, también usada para minimizar las pérdidas de presión. En ésta el fluido entra por el centro y se divide en dos mitades, -una que sale por la derecha y otra que sale por la izquierda-, que abandonan el cambiador separadamente. Después se combinan en una sola corriente (configuración J1-2).

Alternativamente, la corriente de entrada puede dividirse en dos mitades que entran por los dos extremos, fluyen hacia el centro y abandonan el equipo como una sola corriente (configuración J2-1).

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.

La carcasa tipo X es una carcasa de flujo cruzado puro. El fluido entra por la parte superior, atraviesa los tubos y sale por la parte inferior. La pérdida de presión es extremadamente baja lo cual hace de esta carcasa una configuración adecuada para enfriar o condensar vapores a baja presión, particularmente a vacío.

Los tipos de carcasas se representan a continuación;

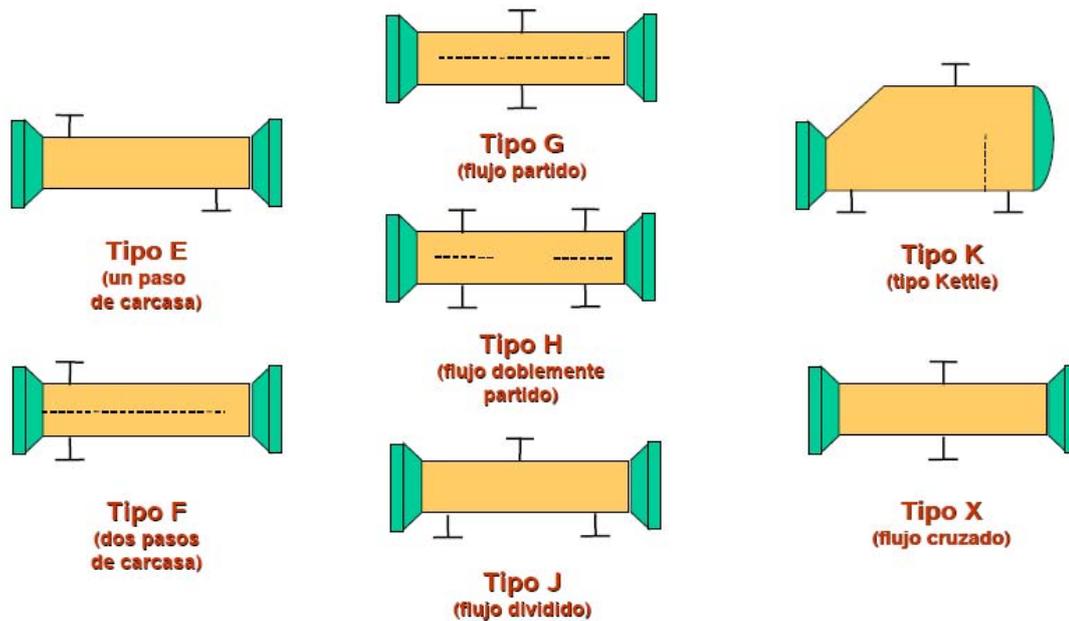


Fig.2.23. Tipos de carcasas.

Tipos de cabezales de retorno



Fig.2.24. Tipos de cabezales de retorno.

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:

1) está limitado a fluidos limpios por la carcasa (no puede limpiarse mecánicamente).

2) al estar fijo no tiene libertad para dilatar quedando limitado a pequeños saltos térmicos.

El TEMA que se ha elegido es el AEL, es decir, cabezal tipo A, carcasa tipo E y cabezal de retorno L. El fluido de MTBE va a ir por los tubos y el fluido de agua por la carcasa. El material que se utiliza es acero inoxidable.

2.4.3 CONFIGURACION GEOMETRICA

Diseño de tubos

Se ha seleccionado un espesor de tubos de 20 BWG, es decir, 0,9mm. Por otro lado, el diámetro exterior de los tubos es de 3/8", es decir, 9,5mm.

El diámetro interior se calcula de la siguiente forma;

$$D_{ti} = D_{to} - 2 \cdot X_w$$

Se obtiene un diámetro interior de 7,7mm.

La longitud de los tubos es de 30 pies, es decir, 9,1m.

Con todos estos datos se puede calcular el número de tubos;

$$N_t = \frac{A_{est}}{\pi \cdot D_{ot} \cdot L_t}$$

$$N_t = 503$$

Con los datos obtenidos se puede calcular el área disponible;

$$A_{est} = (\pi \cdot D_{to} \cdot L_t \cdot N_t) / N_p$$

$$A_{disp} = 137 \text{m}^2$$

Diseño de la carcasa

En el libro del Perry no hay ninguna tabla con el diámetro que se ha utilizado, por lo tanto, para calcular el diámetro de la carcasa se utiliza la siguiente correlación;

$$N_t = K_1 (D_b / D_{to})^\alpha$$

$$D_b = D_{to} (N_t / K_1)^{1/\alpha}$$

$$D_c = 0.018 + D_b$$

El intercambiador tiene un arreglo triangular y va a tener un solo paso. Debido a esto se tiene que $K_1 = 0.319$ y $\alpha = 2.142$.

Los resultados son;

$$D_b = 0.28 \text{m}$$

$$D_c = 0.3 \text{m}$$

Por lo tanto, el diámetro de la carcasa es de 0.3m.

El espaciado de tubos en la carcasa se obtiene;

$$P = 1.25 \cdot D_{to} = 0.012 \text{m}$$

La distancia entre tubos se obtiene;

$$C = P - D_{to} = 0.025 \text{m}.$$

Diseño de los deflectores

El espaciado entre deflectores se calcula de la siguiente manera;

$$L_b = 0.45 \cdot D_c$$

$$L_b = 0.135 \text{m}$$

El número de deflectores es el siguiente;

$$N_b = (L_t/L_b) - 1$$

$$N_b = 66$$

Por lo tanto, se tiene un espaciado de 0.135 metros y 66 deflectores.

2.4.4 CALCULO DEL COEFICIENTE DE TRANSMISION

Cálculo en el lado de los tubos

El cálculo del coeficiente de transmisión de calor h_i depende del tipo de régimen en el que se encuentre el diseño. Puede ser régimen laminar, de transición o turbulentos;

- Régimen laminar ($Re < 2000$):

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

Donde

$$Gz = Re Pr \left(\frac{D_{it}}{L} \right)$$

El cociente de viscosidades se aproxima a 1 y “k” es la conductividad térmica.

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

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

- Régimen turbulento ($Re > 8000$):

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

En este caso se encuentra en régimen de transición, se obtiene un $h_i = 385 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$

Cálculo en el lado de la carcasa

Para el cálculo del coeficiente de transmisión de calor h_o se utiliza la siguiente ecuación;

$$\frac{h_o D_e}{k} = 0,36 \text{Re}_c^{0,55} \text{Pr}^{0,3}$$

$h_o = 3189.2 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$

2.4.5 CALCULO DE LAS PERDIDAS DE PRESION

Cálculo en el lado de los tubos

Se utiliza la siguiente ecuación;

$$\Delta P_T = \Delta P_t + \Delta P_r$$

Donde

ΔP_t = es la caída de presión en los tramos rectos.

ΔP_r = es la caída de presión en los cabezales de retorno.

-Cálculo de ΔP_t ;

$$\Delta P_t (Pa) = f \cdot \frac{n \cdot L_t}{D_t} \cdot \frac{\delta \cdot u_t^2}{2}$$

- Cálculo de ΔP_r

$$\Delta P_r (Pa) = Kn \cdot \frac{\delta \cdot u_t^2}{2}$$

Donde

$Kn = 1.8$

Por lo tanto, la pérdida de presión en el lado de los tubos es de 0.0029 atm .

Cálculo en el lado de la carcasa

La ecuación que se utiliza es la siguiente;

$$\Delta P_C = f \cdot \frac{\delta \cdot u_c^2 \cdot D_C}{2 \cdot D_e} \cdot (N + 1)$$

Se obtiene una presión de 0.025 atm.

2.4.6 CALCULO DEL AREA REQUERIDA

Para calcular el área requerida primero se tiene que calcular el coeficiente global de transmisión de calor.

$$U_o = \frac{1}{\frac{1}{h_i} \frac{D_{ot}}{D_{it}} + R_i \frac{D_{ot}}{D_{it}} + \frac{x_w}{k_w} \frac{D_{ot}}{D_{it}} + R_o + \frac{1}{h_o}}$$

El coeficiente global de transmisión de calor tiene un valor de 228 W/m²·K

Por lo tanto, el área requerida es de 123.6 m².

2.4.7 EVALUACION DEL DISEÑO

Sobredimensionado

$$S = (A_{disp} - A_{req}) / A_{req}$$

El sobredimensionado es de 10.84%, por lo tanto, el diseño es valido.

Perdida de presión relativa

La pérdida de presión relativa en la carcasa y en los tubos se calcula de la siguiente manera;

$$\frac{\Delta P_t}{P_o} \times 100$$

$$\frac{\Delta P_c}{P_o} \times 100$$

La pérdida de presión relativa en los tubos es de 0.0044% y en la carcasa es de 0.38%. Las pérdidas de presión relativas son pequeñas, por lo tanto, son despreciables.

2.5 CALCULO DE LA COLUMNA DE EXTRACCION T-101

2.5.1 DISEÑO BÁSICO

El objetivo básico de la columna de extracción es el de recuperar la mayor parte de metanol de la corriente que sale del condensador.

Por lo tanto, en la columna se tiene dos corrientes de entrada: la corriente de agua (4) y la corriente de salida del condensador (3). Se obtendrá una corriente de agua a tratamiento (6) y otra corriente de isobutenos (5).

Los datos de las corrientes se encuentran en el Anexo I. Las corrientes de entrada son las siguientes;

Corriente no	3	4
Descripción	Destilado T-100	Alimentación agua
Temperatura (°C)	48.3	40
Presión (atm)	6.5	6.5
Fracción de vapor	0	0
Entalpia (MJ/h)	-20976.9	-92483.9
Caudal (kmol/h)	450.4	325

Composición	Fracción molar	
Propileno	0.0582	0.0
Propano	0.0110	0.0
i-Butano	0.0060	0.0
i-Buteno	0.0181	0.0
1-Buteno	0.4686	0.0
1,3-Butadieno	0.0919	0.0
n-Butano	0.2210	0.0
trans-2-buteno	0.0459	0.0
cis-2-buteno	0.0383	0.0
n-pentano	0.0	0.0
Metanol	0.0408	0.0
Agua	0.0	1
MTBE	0.0001	0.0

Tabla.2.19. Composición, temperatura, presión, fracción de vapor, entalpía y caudal de las corrientes de entrada.

Utilizando el programa de simulación Chemcad se obtiene cinco etapas de equilibrio. Las composiciones que se obtienen son similares a las del Anexo I, las variaciones son pequeñas.

2.5.2 DISEÑO MECANICO

Tipo de columna

Se utiliza una columna de relleno. Se usa como relleno el anillo Pall;



Fig.2.25. Anillo Pall

El anillo Pall, es un cilindro con paredes ranuradas y lenguas o costillas internas, siendo el diámetro y la altura del anillo iguales. Los anillos son fabricados en Polipropileno (PP) y una gran variedad de metales (AISI 304, AISI 304 L, AISI 316, AISI 316 L, SAE 1010, Aluminio, Cobre, etc.); y están disponibles en las siguientes medidas standard: Plásticos 5/8", 1", 1½", 2" y 3" ; Metálicos 1", 1½", 2" y 3½".

Los anillos Pall tienen la forma aproximada de los anillos Raschig, excepto que las paredes han sido abiertas y se han adicionado superficies interiores y deflectores. Estos cambios eliminan los defectos que en los anillos Raschig impiden performances satisfactorias, en el relleno de columnas de gran diámetro.

Cuando los anillos Raschig son vaciados al azar dentro de una columna, la mayoría de ellos se ubicará de tal manera que sus ejes geométricos estarán a diferentes ángulos respecto del eje de la torre. Las corrientes de los fluidos en la cama de relleno, son desviadas por las paredes sólidas de los anillos, y el flujo líquido -o gaseoso- debe entonces correr alrededor de los anillos. Esto significa que:

- a) La superficie interior de los anillos es en su mayor parte ineficaz para transferencia de masa.
- b) La canalización del líquido y gas resulta en áreas desperdiciadas, que están secas ó parcialmente mojadas (áreas en donde el contacto entre fases no puede ocurrir).

El diseño de pared abierta del Anillo Pall, mantiene la distribución inicial y permite a ambas áreas, interior y exterior del anillo, ser activas en el proceso de contacto.

Además, el llenado de la torre es realizado rápidamente por vaciado en seco. Puesto que no hay peligro de roturas, no deben tomarse precauciones especiales.

Los anillos que se utilizan tienen aproximadamente un tamaño de 1.5 pulgadas, es decir, 38mm y un peso de 72 kg/m³.

Por otro lado, el material de la carcasa es de acero inoxidable.

El diámetro de la columna se elige en función de la siguiente tabla:

Diámetro de la columna	Tamaño de relleno a usar
$D < 0.3\text{m}$	Menor de 25mm
$0.3 < D < 0.9\text{ m}$	25 a 38 mm
$D > 0.9$	50 a 75 mm

Tabla.2.20. Selección del diámetro de la columna.

En este caso tenemos un tamaño de relleno de 38 mm, por lo tanto, se usa un diámetro de columna de 0.9m.

Determinación de la HETP

La altura equivalente a una etapa de equilibrio, se denomina altura equivalente de un plato teórico (HETP), es la altura de empaque que dará la misma separación que una etapa de equilibrio. Eckert demostró que en destilación la HETP para un tipo y tamaño dado de empaque es esencialmente constante, e independiente de las propiedades físicas del sistema; siempre y cuando se prevea y mantenga una buena distribución de líquido, y la caída de presión sea menor a 17 mm de agua por metro de altura de empaque.

La siguiente tabla se usa para hacer una estimación de la HETP:

Tamaño de los anillos	HETP
25 mm	0.4-0.5
38 mm	0.5-0.75
50 mm	0.75-1.0

Tabla.2.21. Selección de la HETP.

La HETP de la columna es de 0.5m.

Altura total de la columna

La altura total de la columna se calcula con la siguiente ecuación;

$$H = Z + S + T$$

Donde

H = es la altura total de la columna

Z = es la altura neta

T = es la altura de la zona superior

S = es la altura base

La altura neta (Z) es;

$$Z = (N/E_0) \cdot \text{HETP}$$

Donde

N = es el numero de etapas teóricas.

E_0 = es la eficiencia de la columna. En estos tipos de columna la eficiencia es de un 80%.

Se obtiene una altura neta de 3.125 metros.

La altura base es aproximadamente de 1.8 m y la altura de la zona superior aproximadamente de 0.5m.

Por lo tanto, la altura total de la columna es de 5.42 metros.

2.5.3 PARTE DESCRIPTIVA DE LA COLUMNA

Todo recipiente a presión está formado por la envolvente, dispositivos de sujeción o apoyo del propio equipo, conexiones por las que entran y salen los fluidos, elementos en el interior y accesorios en el exterior del recipiente.

-ENVOLVENTES

Es una envoltura metálica que forma propiamente el recipiente. Los aparatos cilíndricos son los más utilizados, y en ellos la envolvente está formada, básicamente, por dos elementos: la parte cilíndrica o cubierta (carcasa) y los fondos o cabezales.

Si la cubierta está constituida por varios cilindros de diversos diámetros, la unión entre ellos se realiza generalmente por figuras troncocónicas que realizan la transición.

a) Cubierta

La cubierta está formada por una serie de virolas soldadas unas con otras. 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.

b) Cabezales

Los cabezales o fondos son las tapas que cierran la carcasa. Se utilizan los cabezales elípticos. 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.

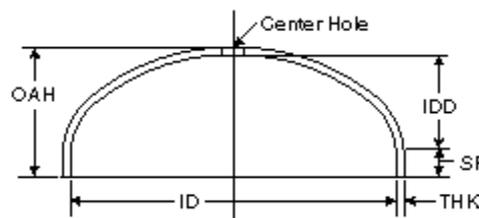


Fig.2.26. Cabezal elíptico.

-DISPOSITIVOS DE SUJECION O APOYO

Los dispositivos de sujeción son los siguientes;

- Patas
- Faldón cilíndrico o cónico
- Ménsulas

En la columna se utiliza como dispositivo de sujeción el faldón cilíndrico.

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.

3- PRESUPUESTO

3.1 PRESUPUESTOS PARCIALES CON PRECIOS UNITARIOS

Coste básico

Se calculan los equipos considerando acero al carbono y presión atmosférica. A continuación, hay que corregir estos valores con los factores de corrección de material y presión.

El coste básico se calcula con la siguiente ecuación;

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

Donde K_1 , K_2 , K_3 son constantes del equipo y A va a depender del tipo de columna y de si se trata de un intercambiador.

Estos datos se encuentran en el Anexo VII.

Factor de corrección del material (F_m)

Su valor va a variar según el material utilizado, la información se recoge en las tablas del Anexo VII.

Factor de corrección de presión (F_p)

La ecuación que se utiliza es la siguiente;

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

Donde C_1 , C_2 , C_3 son constantes del equipo y P es la presión del equipo. Estos datos se encuentran en el Anexo VII.

Factor de corrección (F_{BM})

La ecuación que se utiliza es la siguiente;

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

B_1 y B_2 son también constantes que se recogen en el Anexo VII.

Coste del equipo (C_{BM})

Utilizando las ecuaciones anteriores se puede calcular el coste de cada equipo de la siguiente manera;

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

Factor de actualización

Hay que actualizar el precio ya que los datos de las tablas son del año 1996 y hay que tener en cuenta la inflación, se va a realizar respecto del año 2007. Se utiliza el índice CEPCI para la actualización.

La expresión que se utiliza es la siguiente;

$$C_{EQ}/C_{BM} = I_2 / I_1$$

3.1.1 COSTE DE LA COLUMNA DE DESTILACIÓN T-100

Las ecuaciones que se utilizan son las siguientes;

$$C_p^0 = 235 + 19,8D + 75,07D^2$$

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

Donde

N= es el número de platos

F_q= es un factor basado en el número de platos de la columna.

Los resultados se recogen en la siguiente tabla;

Diámetro de la columna(m)	1,18
C_p⁰	362,88
N	20
F_{BM}	2
F_q	1
C_{BM}	14515,2 \$
I₁(1996)	381,7
I₂(2007)	528,2
Coste total de la columna	20086,26 \$

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

3.1.2 COSTE DE LA COLUMNA DE EXTRACCION T-101

El cálculo es parecido al de la columna de destilación pero al tratarse de una columna de relleno se usa otras tablas estas se encuentran en el Anexo VII. El valor de F_{BM} se obtiene de una tabla. La ecuación que se utiliza es la siguiente;

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

Los datos son los siguientes;

K₁	2.92
K₂	0.99
K₃	0.00
H	5.42
Cp⁰	4561.03
F_{BM}	2.2
C_{BM}	10034.26
I₁(1996)	381,7
I₂(2007)	528,2
<i>Coste total de la columna</i>	<i>13885.41 \$</i>

Tabla.3.2 Cálculo del coste de la columna de extracción.

3.1.3 COSTE DEL CONDENSADOR E-101

En el condensador se utiliza las ecuaciones anteriores no se necesita ecuaciones específicas como para la columna de destilación.

Los resultados se recogen en la siguiente tabla;

K_1	3.214
K_2	0.269
K_3	0.08
A	838.99
C_p^0	29342.06
C_1	0.00
C_2	0.00
C_3	0.00
P	5.56
F_p	1
B_1	1.8
B_2	1.5
F_m	3
F_{BM}	6.3
C_{BM}	301736.3 \$
$I_1(1996)$	381,7
$I_2(2007)$	528,2
<i>Coste total del condensador</i>	<i>417542.69 \$</i>

Tabla.3.3 Cálculo del coste del condensador.

3.1.4 COSTE DEL VAPORIZADOR E-102

Se utilizan las ecuaciones generales. Se obtiene los siguientes datos:

K_1	3.564
K_2	0.191
K_3	0.111
A	380
Cp^0	62230.029
C_1	0.00
C_2	0.00
C_3	0.00
P	5.77
F_p	1
B_1	1.8
B_2	1.5
F_m	3
F_{BM}	6.3
C_{BM}	392049.18 \$
$I_1(1996)$	381,7
$I_2(2007)$	528,2
<i>Coste total del rehervidor</i>	<i>542517.66 \$</i>

Tabla.3.4 Cálculo del coste del vaporizador.

3.1.5 COSTE DEL INTERCAMBIADOR DE CALOR E-103

Al igual que en el resto de intercambiadores se utiliza las ecuaciones generales. Los datos son los siguientes;

K_1	3.214
K_2	0.269
K_3	0.08
A	137
C_p^0	14242.42
C_1	0.00
C_2	0.00
C_3	0.00
P	5.77
F_p	1
B_1	1.8
B_2	1.5
F_m	3
F_{BM}	6.3
C_{BM}	89727.24 \$
$I_1(1996)$	381,7
$I_2(2007)$	528,2
<i>Coste total del intercambiador</i>	<i>124164.56 \$</i>

Tabla.3.5 Cálculo del coste del intercambiador de calor.

3.2 PRESUPUESTO TOTAL DE LA PLANTA

El coste de las columnas y de los intercambiadores se refleja a continuación;

Equipo	Precio
Columna de destilación (T-100)	20086,26 \$
Columna de extracción (T-101)	13885.41 \$
Condensador (E-101)	417542.69 \$
Rehervidor (E-102)	542517.66 \$
Intercambiador de calor(E-103)	124164.56 \$

Tabla.3.6 Resumen de los costes de los equipos.

Para calcular el coste total de la planta se utiliza la siguiente ecuación;

$$C_T = 1.18 \cdot \sum C_{p_i}$$

Donde

C_{p_i} = es el coste estimado de cada equipo

El coste final de la planta es de 1319472 \$.

Para obtener su equivalencia en euros, el coste actual con fecha 5 de febrero de 2009 es;

$$1\$ = 0.78 \text{ euros}$$

Por lo tanto, el coste total de la planta es de 1029188.2 euros.

4- PLANOS

4.1 DIAGRAMA DE BLOQUES

En el diagrama de bloques se representa los equipos y las corrientes de la planta diseñada.

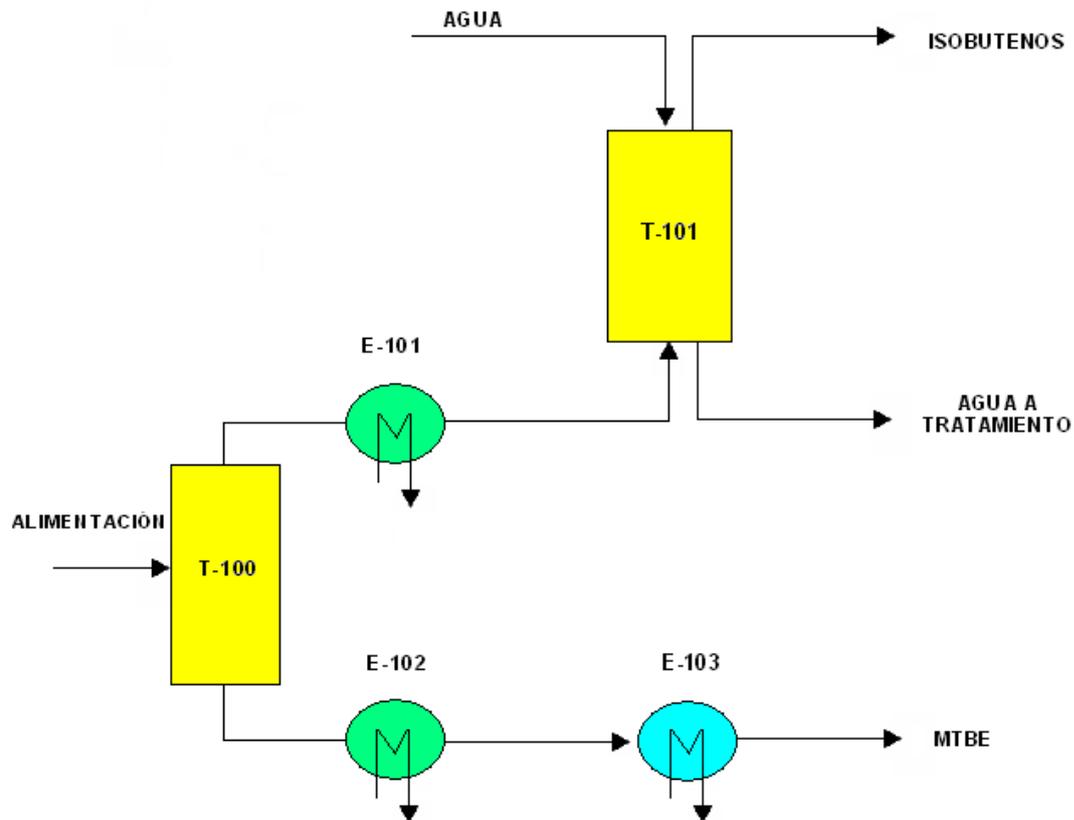


Fig.4.1. Diagrama de bloques de la planta.

Los equipos son:

T-100 → columna de destilación

T-101 → columna de extracción

E-101 → condensador

E-102 → rehervidor

E-103 → intercambiador de calor

4.2 DIAGRAMA P&I

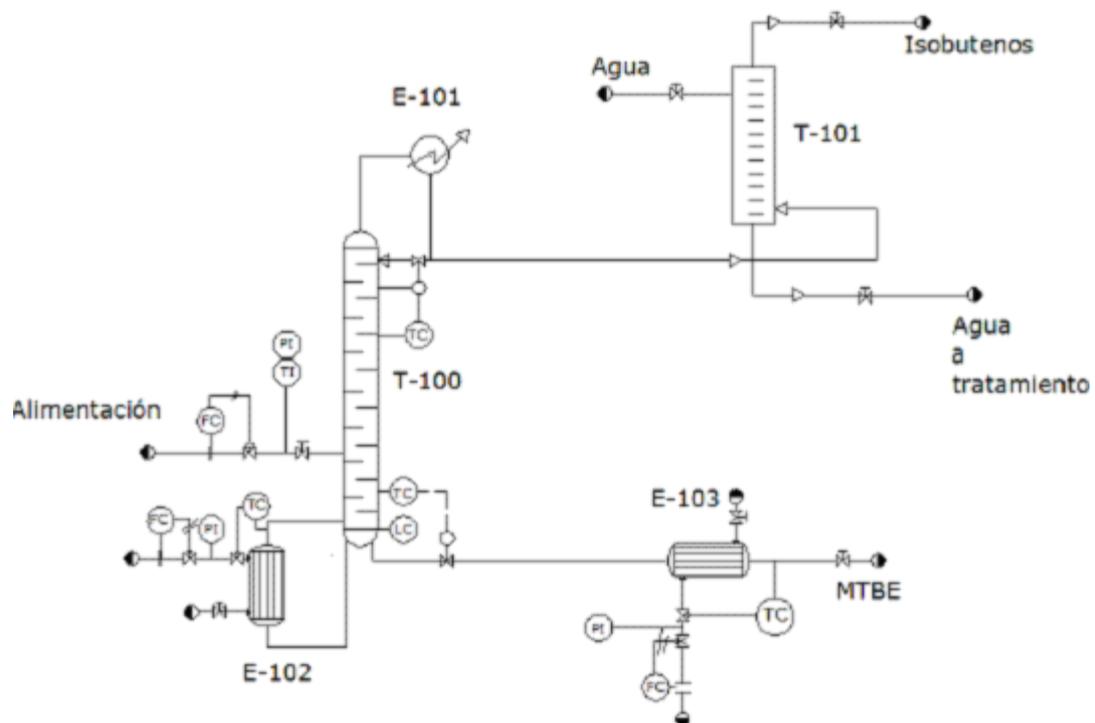


Fig.4.2. Diagrama P&I.

5- ANEXOS

ANEXO I. BALANCE DE MATERIA

Este balance de materia se realiza para una producción de 120000 toneladas al año de MTBE, con un 90% de uptime y 330 días de operación. Nos da información sobre la composición en cada una de las corrientes además de otros datos como temperatura, presión, fracción de vapor, entalpía y caudal.

Los datos se recogen en la siguiente tabla;

Corriente no	1	2	3	4	5	6	7
Descripción	Alimen.	Fondos T-100	Destilado T-100	Alim. agua	isobutenos	Agua tratar	MTBE Prod.
Temperatura (°C)	70	127.1	48.3	40	44.9	48.3	30
Presión (atm)	6.5	6.7	6.5	6.5	6.5	6.7	6.5
Fracción de vapor	0.53	0	0	0	0	0	0
Entalpía (MJ/h)	-63218	-47676.8	-20976.9	-92483.9	-20174.5	-93286.3	-50953.9
Caudal (kmol/h)	614	163.6	450.4	325	442.8	332.6	163.6

Composición	Fracción molar						
Propileno	0,0427	0.0	0.0582	0.0	0.0588	0.0005	0.0
Propano	0,0081	0.0	0.0110	0.0	0.0112	0.0001	0.0
i-Butano	0,0044	0.0	0.0060	0.0	0.0061	0.00	0.0
i-Buteno	0,0133	0.0	0.0181	0.0	0.0184	0.0001	0.0
1-Buteno	0,3437	0.0001	0.4686	0.0	0.4755	0.0015	0.0001
1,3-Butadieno	0,0674	0.0	0.0919	0.0	0.0932	0.0004	0.00
n-Butano	0,1621	0.0001	0.2210	0.0	0.2243	0.0006	0.0001
trans-2-buteno	0,0337	0.0	0.0459	0.0	0.0466	0.0001	0.00
cis-2-buteno	0,0281	0.0001	0.0383	0.0	0.0388	0.0001	0.0001
n-pentano	0,0006	0.0022	0.0	0.0	0.00	0.00	0.0022
Metanol	0,0319	0.0073	0.0408	0.0	0.00	0.0553	0.0073
Agua	0.0001	0.0003	0.0	1	0.0269	0.9413	0.0003
MTBE	0.2639	0.99	0.0001	0.0	0.0001	0.00	0.990

Tabla.5.1. Información de todas las corrientes del proceso.

ANEXO II. METODO 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;

γ_i^L = es el coeficiente de actividad

Para una disolución ideal el coeficiente de actividad $\gamma_i^L = 1$, y entonces $a_i = x_i$

En este caso se utiliza el método UNIFAC.

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 utiliza la misma parte combinatorial que el modelo UNIQUAC pero la parte residual la calcula mediante interacciones entre grupos funcionales en lugar de interacciones de entre las moléculas al completo:

$$\ln \gamma_i^r = \sum_{k \text{ grupos}} \nu_k^{(i)} (\ln \Gamma_k - \ln \Gamma_k^{(i)})$$

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_m \theta_m \psi_{mk} \right) - \sum_m \frac{\theta_m \psi_{km}}{\sum_n \theta_n \psi_{nm}} \right]$$

El esquema general del método UNIFAC es el siguiente;

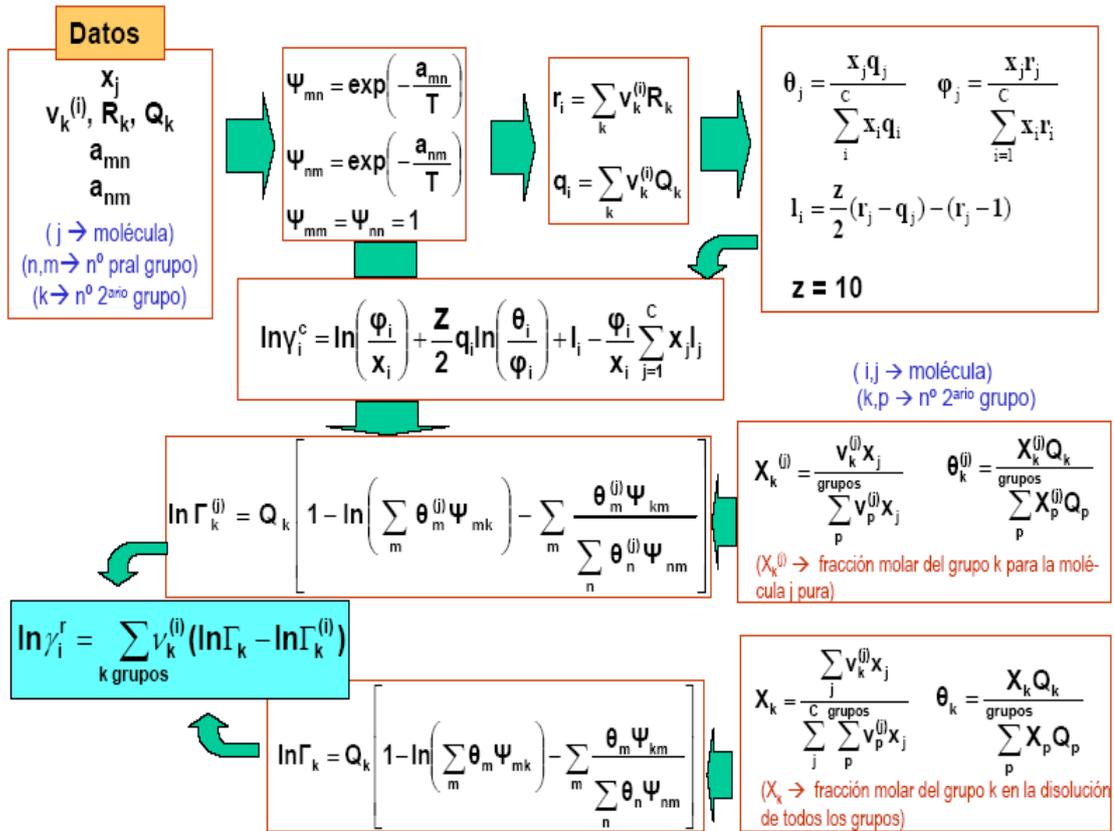


Fig .5.1. Esquema general del método UNIFAC

Los datos que utilizamos son las corrientes que obtenemos en el fondo y en la cabeza de la columna, estos datos son las corrientes 3 y 2 del Anexo I.

IDENTIFICACION DE GRUPOS

En la nomenclatura UNIFAC cada grupo se identifica con un número principal y un número secundario. Estas tablas se adjuntan en el Anexo III.

Los datos se recogen en la siguiente tabla junto con el volumen relativo (R) y el área relativa (Q);

Grupo	Num. principal	Num. secundario	R	Q
CH ₃	1	1	0.9011	0.8480
CH ₂ =CH	2	5	1.3454	1.1760
CH ₂	1	2	0.6744	0.5400
CH	1	3	0.4469	0.2280
C=CH ₂	2	5	1.1173	0.9880
CH=CH	2	6	1.1167	0.8670
C	1	4	0.2195	0.000
CH ₃ -O	13	24	1.1450	1.0880
CH ₃ -OH	6	15	1.4311	1.4320

Tabla 5.2 .Grupos del método UNIFAC

MATRIZ DE OCURRENCIAS

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.

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_{11}, V_{12}, \dots, V_{1k} \\ \vdots \\ V_{j1}, V_{j2}, \dots, V_{jk} \end{pmatrix}$$

k = número de grupos

j = número de especies

Fig.5.2. Matriz de ocurrencias.

La matriz de ocurrencias ya transpuesta es la siguiente;

Compuestos	CH ₂ =CH	CH ₃	CH ₂	CH	C=CH ₂	CH=CH	CH ₃ -OH	C	O-CH ₃
propileno	1	1	0	0	0	0	0	0	0
propano	0	2	1	0	0	0	0	0	0
i-butano	0	3	0	1	0	0	0	0	0
i-buteno	0	2	0	0	1	0	0	0	0
1-buteno	1	1	1	0	0	0	0	0	0
1,3-butadieno	2	0	0	0	0	0	0	0	0
n-butano	0	2	2	0	0	0	0	0	0
trans-2-buteno	0	2	0	0	0	1	0	0	0
cis-2-buteno	0	2	0	0	0	1	0	0	0
n-pentano	0	2	3	0	0	0	0	0	0
metanol	0	0	0	0	0	0	1	0	0
MTBE	0	3	0	0	0	0	0	1	1

Tabla.5.3. Matriz de ocurrencia transpuesta.

MATRIZ DE INTERACCIONES

La matriz de interacciones es una matriz cuadrada que se construye a partir de la tabla de interacciones entre grupos;

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_{11}, \mathbf{a}_{12}, \dots, \mathbf{a}_{1k} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_{k1}, \mathbf{a}_{k2}, \dots, \mathbf{a}_{kk} \end{pmatrix}$$

Fig.5.3. Matriz de interacciones.

Reglas;

- $a_{kk}=0$ (elementos de la diagonal)
- Las interacciones entre grupos con igual número principal son cero.
- $a_{jk} \neq a_{kj}$ (la matriz no es simétrica respecto a la diagonal)

Los resultados se recogen en la siguiente tabla;

	CH2=CH	CH3	CH2	CH	C=CH2	CH=CH	CH3-OH	C	O-CH3
CH2=CH	0	-35,36	-35,36	-35,36	0	0	787,6	-35,36	214,5
CH3	86,02	0	0	0	86,02	86,02	697,2	0	251,5
CH2	86,02	0	0	0	86,02	86,02	697,2	0	251,5
CH	86,02	0	0	0	86,02	86,02	697,2	0	251,5
C=CH2	0	-35,36	-35,36	-35,36	0	0	787,5	-35,36	214,5
CH=CH	0	-35,36	-35,36	-35,36	0	0	787,6	-35,36	214,5
CH3-OH	-12,52	16,51	16,51	16,51	-12,52	-12,52	0	16,51	-128,6
C	86,02	0	0	0	86,02	86,02	697,2	0	251,5
O-CH3	26,51	83,36	83,36	83,36	26,51	26,51	238,4	83,36	0

Tabla.5.4. Matriz de interacciones.

NOTACION MATRICIAL

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_{11}, \Psi_{12}, \dots, \Psi_{1k} \\ \vdots \\ \Psi_{k1}, \Psi_{k2}, \dots, \Psi_{kk} \end{pmatrix} \quad \Psi_{kj} = \exp\left(-\frac{a_{kj}}{T}\right)$$

Fig.5.4 Notación matricial.

Los resultados son los siguientes;

	CH2=CH	CH3	CH2	CH	C=CH2	CH=CH	CH3-OH	C	O-CH3
CH2=CH	1	1,11279	1,11279	1,11279	1	1	0,092513	1,11279	0,522937
CH3	0,771065	1	1	1	0,771065	0,771065	0,12158	1	0,46761
CH2	0,771065	1	1	1	0,771065	0,771065	0,12158	1	0,46761
CH	0,771065	1	1	1	0,771065	0,771065	0,12158	1	0,46761
C=CH2	1	1,11279	1,11279	1,11279	1	1	0,092541	1,11279	0,522937
CH=CH	1	1,11279	1,11279	1,11279	1	1	0,092513	1,11279	0,522937
CH3-OH	1,038565	0,951325	0,951325	0,951325	1,038565	1,038565	1	0,951325	1,475024
C	0,771065	1	1	1	0,771065	0,771065	0,12158	1	0,46761
O-CH3	0,923003	0,777289	0,777289	0,777289	0,923003	0,923003	0,486495	0,777289	1

Tabla.5.5. Cálculo de Ψ_{mn}

PARTE COMBINATORIAL

$$\Phi_j = \frac{x_j r_j}{\mathbf{x} \mathbf{r}^T} \quad \theta_j = \frac{x_j q_j}{\mathbf{x} \mathbf{q}^T}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{v} \mathbf{R}^T \quad \mathbf{q} = \mathbf{v} \mathbf{Q}^T$$

$$\ln \gamma_i^c = \ln \left(\frac{\Phi_i}{x_i} \right) + \frac{z}{2} q_i \ln \left(\frac{\theta_i}{\Phi_i} \right) + l_i - \frac{\Phi_i}{x_i} \sum_{j=1}^c x_j l_j$$

$$\mathbf{l} = \frac{z}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{q}) - (\mathbf{r} - 1)$$

Fig.5.5.Parte combinatorial.

Los resultados son los siguientes;

	x_j	r_j	q_j	l_j	$x_j \cdot r_j$	$x_j \cdot q_j$	$x_j \cdot l_j$	θ_j	ϕ_j	$\ln y_j(c)$
propileno	0,0582	2,2465	2,024	-0,134	0,13074	0,117796	-0,007799	0,0468193	0,0458799	-0,02466
propano	0,0110	2,4766	2,236	-0,2736	0,02724	0,02459	-0,00301	0,0097759	0,0095596	-0,007236
i-butano	0,0060	3,1502	2,772	-0,2592	0,01890	0,01663	-0,001555	0,0066105	0,0066326	-0,005892
i-buteno	0,0181	2,9195	2,684	-0,742	0,0528	0,048584	-0,01343	0,0193087	0,018543	0,0098269
1-buteno	0,4686	2,9209	2,564	-0,1364	1,36873	1,201490	-0,063917	0,4775424	0,4802996	-0,000811
1,3-butadieno	0,0919	2,6908	2,352	0,0032	0,24728	0,216148	0,0002941	0,0859102	0,0867741	-0,001686
n-butano	0,2210	3,151	2,776	-0,276	0,6963	0,61349	-0,060996	0,2438391	0,2443622	-0,005965
trans-2-buteno	0,0459	2,9189	2,563	-0,1394	0,13397	0,117641	-0,006398	0,0467577	0,0470138	-0,000815
cis-2-buteno	0,0383	2,9189	2,563	-0,1394	0,11179	0,098162	-0,005339	0,0390157	0,0392294	-0,000815
n-pentano	0,0008	3,8254	3,316	-0,2784	0,00306	0,002652	-0,000223	0,0010544	0,0010739	-0,046066
metanol	0,0408	1,4311	1,432	-0,4356	0,05838	0,058425	-0,017772	0,023222	0,0204891	-0,137482
MTBE	0,0001	4,0678	3,632	-0,8888	0,00040	0,000363	-8,89E-05	0,0001444	0,0001427	-0,071407
				Σ	2,84974	2,515986	-0,180234	1	1	

Tabla.5.6. Cálculo de la parte combinatorial.

PARTE RESIDUAL

$$\Theta = \begin{pmatrix} \theta_1^{(1)}, \theta_2^{(1)}, \dots, \theta_k^{(1)} \\ \vdots \\ \theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}, \dots, \theta_k^{(j)} \end{pmatrix}$$

$$\theta_k^{(j)} = \frac{X_k^{(j)} Q_k}{\sum_k X_k^{(j)} Q_k} = \frac{X_k^{(j)} Q_k}{XQ^T}$$

$$X_k^{(j)} = \frac{v_k^{(j)}}{\sum_k v_k^{(j)}}$$

Fig.5.6. Parte residual.

	XM								
	CH2=CH	CH3	CH2	CH	C=CH2	CH=CH	CH3-OH	C	O-CH3
propileno	0,5	0,5	0	0	0	0	0	0	0
propano	0	0,66	0,33	0	0	0	0	0	0
i-butano	0	0,75	0	0,25	0	0	0	0	0
i-buteno	0	0,66	0	0	0,33	0	0	0	0
1-buteno	0,33	0,33	0,33	0	0	0	0	0	0
1,3-butadieno	1	0	0	0	0	0	0	0	0
n-butano	0	0,5	0,5	0	0	0	0	0	0
trans-2-buteno	0	0,66	0	0	0	0,33	0	0	0
cis-2-buteno	0	0,66	0	0	0	0,33	0	0	0
n-pentano	0	0,4	0,6	0	0	0	0	0	0
metanol	0	0	0	0	0	0	1	0	0
MTBE	0	0,6	0	0	0	0	0	0,2	0,2
MEZCLA	0.24	0,45	0.31	0.002	0.006	0.02	0.01	0	0

Tabla.5.7. Cálculo de XM

	θM								
	CH2=CH	CH3	CH2	CH	C=CH2	CH=CH	CH3-OH	C	O-CH3
propileno	0,58	0,42	0	0	0	0	0	0	0
propano	0	0,75	0,24	0	0	0	0	0	0
i-butano	0	0,92	0	0,08	0	0	0	0	0
i-buteno	0	0,63	0	0	0,36	0	0	0	0
1-buteno	0,45	0,33	0,21	0	0	0	0	0	0
1,3-butadieno	1	0	0	0	0	0	0	0	0
n-butano	0	0,61	0,38	0	0	0	0	0	0
trans-2-buteno	0	0,66	0	0	0	0,33	0	0	0
cis-2-buteno	0	0,66	0	0	0	0,33	0	0	0
n-pentano	0	0,51	0,48	0	0	0	0	0	0
metanol	0	0	0	0	0	0	1	0	0
MTBE	0	0,70	0	0	0	0	0	0	0,30
MEZCLA	0,33	0,40	0,19	0	0	0,03	0,02	0	0

Tabla.5.8. Cálculo de θM

$$\theta\Psi = \begin{pmatrix} (\theta_1^{(1)}\Psi_{11} + \theta_2^{(1)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(1)}\Psi_{k1}) \dots \\ \vdots \\ (\theta_1^{(j)}\Psi_{11} + \theta_2^{(j)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(j)}\Psi_{k1}) \dots \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \sum_k \theta_k^{(j)}\Psi_{kj}$$

$$\left(\frac{\theta_j}{\theta\Psi} \right) \Psi^T = \begin{pmatrix} \frac{\theta_1^{(1)}\Psi_{11}}{(\theta_1^{(1)}\Psi_{11} + \theta_2^{(1)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(1)}\Psi_{k1})} + \dots + \frac{\theta_k^{(1)}\Psi_{1k}}{(\theta_1^{(1)}\Psi_{11} + \theta_2^{(1)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(1)}\Psi_{k1})} \dots \\ \vdots \\ \frac{\theta_1^{(j)}\Psi_{11}}{(\theta_1^{(j)}\Psi_{11} + \theta_2^{(j)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(j)}\Psi_{k1})} + \dots + \frac{\theta_k^{(j)}\Psi_{1k}}{(\theta_1^{(j)}\Psi_{11} + \theta_2^{(j)}\Psi_{21} + \dots + \theta_k^{(j)}\Psi_{k1})} \dots \end{pmatrix}$$

$$\quad \Rightarrow \quad \frac{\sum_m \theta_m^{(j)}\Psi_{km}}{\sum_n \theta_n^{(j)}\Psi_{nm}}$$

Fig.5.7. Esquema de cálculo de Σ (Ψmk*θm/Σθm*Ψmk)

	$\Sigma\theta\psi\mu_k$								
	CH ₂ =CH	CH ₃	CH ₂	CH	C=CH ₂	CH=CH	CH ₃ -OH	C	O-CH ₃
propileno	0,90	1,07	1,07	1,07	0,90	0,90	0,10	1,07	0,50
propano	0,77	1,00	1,00	1,00	0,77	0,77	0,12	1,00	0,47
i-butano	0,77	1,00	1,00	1,00	0,77	0,77	0,12	1,00	0,47
i-buteno	0,85	1,04	1,04	1,04	0,86	0,86	0,11	1,04	0,49
1-buteno	0,88	1,05	1,05	1,05	0,88	0,88	0,11	1,05	0,49
1,3-butadieno	1	1,11	1,11	1,11	1,00	1,00	0,09	1,11	0,52
n-butano	0,77	1,00	1,00	1,00	0,77	0,77	0,12	1,00	0,47
trans-2-buteno	0,85	1,04	1,04	1,04	0,85	0,85	0,11	1,04	0,49
cis-2-buteno	0,85	1,04	1,04	1,04	0,85	0,85	0,11	1,04	0,49
n-pentano	0,77	1,00	1,00	1,00	0,77	0,77	0,12	1,00	0,47
metanol	1,03	0,95	0,95	0,95	1,04	1,04	1,00	0,95	1,48
MTBE	0,82	0,93	0,93	0,93	0,82	0,82	0,23	0,93	0,63
MEZCLA	0,86	1,04	1,04	1,04	0,86	0,86	0,13	1,04	0,51

Tabla.5.9. Cálculo de $\Sigma\theta\psi\mu_k$

	$\theta_m/\sum\theta_m\Psi_{mk}$								
	CH ₂ =CH	CH ₃	CH ₂	CH	C=CH 2	CH=C H	CH ₃ - OH	C	O-CH ₃
propileno	0,64	0,39	0	0	0	0	0	0	0
propano	0	0,76	0,24	0	0	0	0	0	0
i-butano	0	0,92	0	0,08	0	0	0	0	0
i-buteno	0	0,60	0	0	0,43	0	0	0	0
1-buteno	0,52	0,31	0,20	0	0	0	0	0	0
1,3- butadieno	1	0	0	0	0	0	0	0	0
n-butano	0	0,61	0,38	0	0	0	0	0	0
trans-2- buteno	0	0,64	0	0	0	0,39	0	0	0
cis-2-buteno	0	0,64	0	0	0	0,39	0	0	0
n-pentano	0	0,51	0,48	0	0	0	0	0	0
metanol	0	0	0	0	0	0	1	0	0
MTBE	0	0,75	0	0	0	0	0	0	0,47
MEZCLA	0,38	0,39	0,19	0	0	0,03	0,18	0	0

Tabla.5.10. Cálculo de $\theta_m/\sum\theta_m\Psi_{mk}$

	$\Sigma(\Psi_{mk} \cdot \theta_m / \Sigma \theta_m \cdot \Psi_{mk})$								
	CH ₂ =CH	CH ₃	CH ₂	CH	C=CH 2	CH=C H	CH ₃ - OH	C	O-CH ₃
propileno	1,08	0,89	0,89	0,89	1,08	1,08	1,04	0,89	0,90
propano	1,11	1,00	1,00	1,00	1,11	1,11	0,95	1,00	0,78
i-butano	1,11	1,00	1,00	1,00	1,11	1,11	0,95	1,00	0,78
i-buteno	1,11	0,94	0,94	0,94	1,11	1,11	1,02	0,94	0,87
1-buteno	1,10	0,92	0,92	0,92	1,10	1,10	1,03	0,92	0,88
1,3- butadieno	1,00	0,77	0,77	0,77	1,00	1,00	1,04	0,77	0,92
n-butano	1,11	1,00	1,00	1,00	1,11	1,11	0,95	1,00	0,78
trans-2- buteno	1,11	0,94	0,94	0,94	1,11	1,11	1,02	0,94	0,86
cis-2-buteno	1,11	0,94	0,94	0,94	1,11	1,11	1,02	0,94	0,86
n-pentano	1,11	1,00	1,00	1,00	1,11	1,11	0,95	1,00	0,78
metanol	0,09	0,12	0,12	0,12	0,09	0,09	1,00	0,12	0,49
MTBE	1,08	0,97	0,97	0,97	1,08	1,08	1,42	0,97	1,06
MEZCLA	1,09	0,94	0,94	0,94	1,09	1,09	1,18	0,94	0,94

Tabla.5.11. Cálculo de $\Sigma (\Psi_{mk} \cdot \theta_m / \Sigma \theta_m \cdot \Psi_{mk})$

	lnΓk(i)								
	CH ₂ =CH	CH ₃	CH ₂	CH	C=CH 2	CH=C H	CH ₃ - OH	C	O-CH ₃
propileno	0,02	0,04	0,03	0,01	0,02	0,02	3,17	0	0,86
propano	0,17	0	0	0	0,15	0,13	3,09	0	1,07
i-butano	0,17	0	0	0	0,15	0,13	3,09	0	1,07
i-buteno	0,06	0,02	0,01	0,00	0,05	0,04	3,12	0	0,92
1-buteno	0,04	0,03	0,02	0,01	0,04	0,03	3,14	0	0,90
1,3- butadieno	0	0,10	0,07	0,03	0	0	3,35	0	0,79
n-butano	0,17	0	0	0	0,15	0,13	3,09	0	1,07
trans-2- buteno	0,07	0,02	0,01	0,00	0,06	0,05	3,11	0	0,93
cis-2-buteno	0,07	0,02	0,01	0,00	0,06	0,05	3,11	0	0,93
n-pentano	0,17	0	0	0	0,15	0,13	3,09	0	1,07
metanol	1,02	0,79	0,50	0,21	0,86	0,75	0	0	0,14
MTBE	0,14	0,08	0,05	0,02	0,12	0,10	1,50	0	0,44
MEZCLA	0,06	0,02	0,01	0,01	0,05	0,05	2,65	0	0,80

Tabla.5.12. Cálculo de lnΓk(i)

Los resultados finales que se obtienen son los siguientes;

	$\ln y_j(c)$	$\ln y_j(r)$	$\ln y_j$	γ_j
propileno	-0,20	0,02	-0,18	0,83
propano	-0,20	0,05	-0,15	0,86
i-butano	-0,26	0,07	-0,19	0,83
i-buteno	-0,22	0,01	-0,21	0,81
1-buteno	-0,23	0,01	-0,22	0,80
1,3-butadieno	-0,22	0,13	-0,09	0,92
n-butano	-0,26	0,07	-0,19	0,83
trans-2-buteno	-0,23	0,01	-0,22	0,80
cis-2-buteno	-0,23	0,01	-0,22	0,80
n-pentano	-0,35	0,08	-0,27	0,76
metanol	-0,25	2,65	2,40	11,05
MTBE	-0,40	0,18	-0,22	0,80

Tabla.5.13. Cálculo del coeficiente de actividad.

ANEXO III. TABLAS DEL MÉTODO UNIFAC

Tabla de los grupos (principal, secundario) de los componentes

TABLE B-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 ₃	0.9011	0.848	Hexane = (2)(1) + (4)(2)
	2	CH ₂	0.6744	0.540	2-Methylpropane = (3)(1) + (1)(3)
	3	CH	0.4469	0.228	Neopentane = (4)(1) + (1)(4)
	4	C	0.2195	0.000	2,2,4-Trimethylpentane = (5)(1) + (1)(2) + (1)(3) + (1)(4)
2	5	CH ₂ =CH	1.3454	1.176	3-Methyl-1-hexene = (2)(1) + (2)(2) + (1)(3) + (1)(5)
	6	CH=CH	1.1167	0.867	Hexene-2 = (2)(1) + (2)(2) + (1)(6)
	7	CH ₂ =C	1.1173	0.988	2-Methyl-1-butene = (2)(1) + (1)(2) + (1)(7)
	8	CH=C	0.8886	0.676	2-Methyl-2-butene = (3)(1) + (1)(8)
3	9	C=C	0.6605	0.485	2,3-Dimethylbutene = (4)(1) + (1)(70)
	10	AC	0.3652	0.120	Styrene = (1)(5) + (5)(9) + (1)(10)
4	11	ACCH ₃	1.2663	0.968	Toluene = (5)(9) + (1)(11)
	12	ACCH ₂	1.0396	0.660	Ethylbenzene = (1)(1) + (5)(9) + (1)(12)
	13	ACCH	0.8121	0.348	Cumene = (2)(1) + (5)(9) + (1)(13)
5	14	OH	1.0000	1.200	Ethanol = (1)(1) + (1)(2) + (1)(14)
6	15	CH ₂ OH	1.4311	1.432	Methanol = (1)(15)
7	16	H ₂ O	0.9200	1.400	Water = (1)(16)
8	17	ACOH	0.8952	0.680	Phenol = (5)(9) + (1)(17)
9	18	CH ₂ CO	1.6724	1.488	Methylethylketone = (1)(1) + (1)(2) + (1)(18)
	19	CH ₃ CO	1.4457	1.180	Ethylphenylketone = (1)(1) + (1)(19) + (5)(9) + (1)(10)
10	20	CHO	0.9980	0.948	Hexanal = (1)(1) + (4)(2) + (1)(20)
11	21	CH ₂ COO	1.9031	1.728	Butyl acetate = (1)(1) + (3)(2) + (1)(21)
	22	CH ₃ COO	1.6764	1.420	Methyl propionate = (2)(1) + (1)(22)
12	23	HCOO	1.2420	1.188	Ethyl formate = (1)(1) + (1)(2) + (1)(23)
13	24	CH ₂ O	1.1450	1.088	Dimethyl ether = (1)(1) + (1)(24)
	25	CH ₃ O	0.9183	0.780	Diethyl ether = (2)(1) + (1)(2) + (1)(25)
	26	CHO	0.6908	0.468	Diisopropyl ether = (4)(1) + (1)(3) + (1)(26)
	27	THF	0.9183	1.100	Tetrahydrofuran = (3)(2) + (1)(27)
14	28	CH ₂ NH ₂	1.5959	1.544	Methylamine = (1)(28)
	29	CH ₂ NH	1.3692	1.236	Ethylamine = (1)(1) + (1)(29)
	30	CHNH ₂	1.1417	0.924	Isopropylamine = (2)(1) + (1)(30)
15	31	CH ₂ NH	1.4337	1.244	Dimethyl amine = (1)(1) + (1)(31)
	32	CH ₃ NH	1.2070	0.936	Diethylamine = (2)(1) + (1)(2) + (1)(32)
	33	CHNH	0.9795	0.624	Diisopropylamine = (4)(1) + (1)(3) + (1)(33)
16	34	CH ₂ N	1.1865	0.940	Trimethylamine = (2)(1) + (1)(34)
	35	CH ₃ N	0.9597	0.632	Triethylamine = (3)(1) + (2)(2) + (1)(35)
17	36	ACNH ₂	1.0600	0.816	Aniline = (5)(9) + (1)(36)
18	37	C ₄ H ₅ N	2.9993	2.113	Pyridine = (1)(37)
	38	C ₃ H ₄ N	2.8332	1.833	2-Methylpyridine = (1)(1) + (1)(38)
	39	C ₂ H ₃ N	2.6670	1.553	2,3-Dimethylpyridine = (2)(1) + (1)(39)
19	40	CH ₂ CN	1.8701	1.724	Acetonitrile = (1)(40)
	41	CH ₃ CN	1.6434	1.416	Propionitrile = (1)(1) + (1)(41)
20	42	COOH	1.3013	1.224	Acetic Acid = (1)(1) + (1)(42)
	43	HCOOH	1.5280	1.532	Formic Acid = (1)(43)
21	44	CH ₂ Cl	1.4654	1.264	1-Chlorobutane = (1)(1) + (2)(2) + (1)(44)
	45	CHCl	1.2380	0.952	2-Chloropropane = (2)(1) + (1)(45)
	46	CCl	1.0060	0.724	2-Chloro-2-methylpropane = (3)(1) + (1)(46)
22	47	CH ₂ Cl ₂	2.2564	1.988	Dichloromethane = (1)(47)
	48	CHCl ₂	2.0606	1.684	1,1-Dichloroethane = (1)(1) + (1)(48)
	49	CCl ₂	1.8016	1.448	2,2-Dichloropropane = (2)(1) + (1)(49)
23	50	CHCl ₃	2.8700	2.410	Chloroform = (1)(50)
	51	CCl ₃	2.6401	2.184	1,1,1-Trichloroethane = (1)(1) + (1)(51)

TABLE B-23 UNIFAC Group Specifications and Sample Group Assignments (Hansen, et al., 1991) (Continued)

Group numbers		Name	Volume R	Surface Area Q	Sample Assignments = (Number of Occurrences) × (Secondary Group Number)
Main	Secondary				
24	52	CCl ₄	3.3900	2.910	Tetrachloromethane = (1)(52)
25	53	ACCl	1.1562	0.844	Chlorobenzene = (5)(9) + (1)(53)
26	54	CH ₃ NO ₂	2.0086	1.868	Nitromethane = (1)(54)
	55	CH ₂ NO ₂	1.7818	1.560	Nitroethane = (1)(1) + (1)(55)
	56	CHNO ₂	1.5544	1.248	2-Nitropropane = (2)(1) + (1)(56)
27	57	ACNO ₂	1.4199	1.104	Nitrobenzene = (5)(9) + (1)(57)
28	58	CS ₂	2.5070	1.650	Carbon disulfide = (1)(58)
29	59	CH ₃ SH	1.8770	1.676	Methanethiol = (1)(59)
	60	CH ₂ 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	N,N-Dimethylformamide = (1)(72)
	73	HCON(CH ₂) ₂	2.6322	2.120	N,N-Diethylformamide = (2)(1) + (1)(73)
40	74	CF ₃	1.4060	1.380	Perfluoroethane = (2)(74)
	75	CF ₂	1.0105	0.920	Perfluoromethylcyclohexane = (1)(74) + (5)(75) + (1)(76)
	76	CF	0.6150	0.460	
41	77	COO	1.3600	1.200	Butyrate = (2)(1) + (5)(77) + (1)(77)
42	78	SiH ₃	1.6035	1.263	Methylsilane = (1)(1) + (1)(78)
	79	SiH ₂	1.4443	1.006	Diethylsilane = (2)(1) + (2)(2) + (1)(79)
	80	SiH	1.2851	0.749	Trimethylsilane = (3)(1) + (1)(80)
	81	Si	1.0470	0.410	Tetramethylsilane = (4)(1) + (1)(81)
43	82	SiH ₂ O	1.4838	1.062	Hexamethyldisiloxane = (6)(1) + (1)(81) + (1)(84)
	83	SiHO	1.3030	0.764	
	84	SiO	1.1044	0.466	
44	85	NMP	3.9810	3.200	N-Methylpyrrolidone = (1)(85)
45	86	CCl ₂ F	3.0356	2.644	Trichlorofluoromethane = (1)(86)
	87	CClF ₂	2.2287	1.916	Tetrachloro-1,2-difluoroethane = (2)(87)
	88	HCCL ₂ F	2.4060	2.116	Dichlorofluoromethane = (1)(88)
	89	HCCIF	1.6493	1.416	2-Chloro-2-fluoroethane = (1)(1) + (1)(89)
	90	CClF ₂	1.8174	1.648	2-Chloro-2,2-difluoroethane = (1)(1) + (1)(90)
	91	HCCIF ₂	1.9670	1.828	Chlorodifluoromethane = (1)(91)
	92	CClF ₂	2.1721	2.100	Chlorotrifluoromethane = (1)(92)
	93	CCl ₂ F ₂	2.6243	2.376	Dichlorodifluoroethane = (1)(93)
	46	94	CONH ₂	1.4515	1.248
95		CONHCH ₃	2.1905	1.796	N-Methylacetamide = (1)(1) + (1)(95)
96		CONHCH ₂	1.9637	1.488	N-Ethylacetamide = (2)(1) + (1)(96)
97		CON(CH ₂) ₂	2.8589	2.478	N,N-Dimethylacetamide = (1)(1) + (1)(97)
98		CONCH ₂ CH ₃	2.6322	2.120	N,N-Methylethylacetamide = (2)(1) + (1)(98)
99		CON(CH ₂) ₂	2.4054	1.812	N,N-Diethylacetamide = (3)(1) + (1)(99)
47	100	C ₂ H ₅ O ₂	2.1226	1.904	2-Ethoxyethanol = (1)(1) + (1)(2) + (1)(100)
	101	C ₂ H ₅ O ₂	1.8952	1.592	2-Ethoxy-1-propanol = (2)(1) + (1)(2) + (1)(101)
48	102	CH ₂ S	1.6130	1.368	Dimethylsulfide = (1)(1) + (1)(102)
	103	CH ₃ 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 ₂ H ₄ S	2.8569	2.140	Thiophene = (1)(106)
	107	C ₂ H ₃ S	2.6908	1.800	2-Methylthiophene = (1)(1) + (1)(107)
	108	C ₂ H ₂ 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

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	1913	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, α_{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
m = 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 B-24 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters, σ_{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

TABLE 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	-139.0	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								
16	NA	243.1	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	363.7	NA
24	132.2	NA	546.7	NA	247.8	146.6	NA	337.7	369.5
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, σ_{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	5679	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 IV. ESTIMACION DE PROPIEDADES

DENSIDAD

La densidad se define como la cantidad de materia que cabe en una unidad de volumen

$$\rho = m/v$$

Una aproximación es la siguiente;

Gases 10^{-5} a 10^{-3} g/cm³

Líquidos 0.6 a 1.6 g/cm³

Sólidos 0.5 a 20 g/cm³

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).

Densidad de los gases

Para un gas ideal se utiliza la siguiente ecuación;

$$\rho_m^G = \frac{m}{V} = \frac{PM_m}{RT}$$

A mayores presiones ($P_r > 0.05$), las desviaciones del modelo de gas ideal son apreciables y se cuantifican mediante el factor de compresibilidad (Z).

$$\rho_m^G = \frac{PM_m}{ZRT}$$

La Z se obtiene;

$$Z = Z^0 + w \cdot Z^1$$

Los datos que se necesitan se encuentran en unas tablas recogidas en el Anexo V. Se utiliza una temperatura de 330,86 k y una presión de 6,7 atm.

Los datos que obtenemos son los siguientes;

	Mm (kg/kmol)	Xd	Tc(K)	Pc	Vc(m ³ / kmol)	Zc	Wc
propano	44,096	0,011	369,820	41,930	0,203	0,280	0,152
1,3-butadieno	54,092	0,092	425,370	42,730	0,221	0,270	0,193
isobutano	58,123	0,006	408,140	36,000	0,263	0,282	0,177
butano	58,123	0,221	425,180	37,470	0,255	0,274	0,199
1-buteno	56,107	0,469	419,590	39,670	0,240	0,276	0,187
cis-2-buteno	56,107	0,038	435,580	41,510	0,234	0,272	0,203
trans-2-buteno	56,107	0,046	428,630	40,490	0,238	0,274	0,218
isobuteno	56,107	0,018	417,900	39,470	0,239	0,275	0,189
pentano	72,150	0,001	469,650	33,250	0,312	0,269	0,249
propileno	42,081	0,058	364,760	45,500	0,181	0,275	0,142
MTBE	88,150	0,000	497,100	33,850	0,329	0,273	0,267
metanol	32,042	0,040	512,580	79,900	0,118	0,224	0,566

Tabla.5.14. Cálculo de las condiciones críticas.

	X*Wc	X*Mm	X*Tc	X*Vc	X*Zc	X*Pc	X*Mm
propano	0,002	0,487	4,084	0,002	0,003	0,463	0,487
1,3-butadieno	0,018	4,970	39,084	0,020	0,025	3,926	4,970
isobutano	0,001	0,349	2,448	0,002	0,002	0,216	0,349
butano	0,044	12,844	93,956	0,056	0,061	8,280	12,844
1-buteno	0,087	26,289	196,596	0,112	0,129	18,587	26,289
cis-2-buteno	0,008	2,149	16,686	0,009	0,010	1,590	2,149
trans-2-buteno	0,010	2,578	19,692	0,011	0,013	1,860	2,578
isobuteno	0,003	1,017	7,577	0,004	0,005	0,716	1,017
pentano	0,000	0,059	0,384	0,000	0,000	0,027	0,059
propileno	0,008	2,450	21,233	0,011	0,016	2,649	2,450
MTBE	0,000	0,014	0,078	0,000	0,000	0,005	0,014
metanol	0,023	1,277	20,429	0,005	0,009	3,184	1,277

Tabla.5.15. Cálculo de las condiciones críticas.

Los resultados son los siguientes;

Trm	Prm	Z	Z0	Z1	Mm(media)	ρ
0,784	0,157	0,845	0,870	-0,090	54,482	15,7066

Tabla.5.16. Cálculo de la densidad del gas.

Densidad de los líquidos

Para el cálculo de la densidad de los líquidos se utiliza el método Hankinson-Brost-Thompson (1979). Las expresiones son;

$$V_{cm} = 0.25 \left[\sum_{i=1}^C x_i V_{ci} + 3 \left(\sum_{i=1}^C x_i V_{ci}^{2/3} \right) \left(\sum_{i=1}^C x_i V_{ci}^{1/3} \right) \right]$$

$$V^{(0)} = 1 + a(1 - T_{rm})^{1/3} + b(1 - T_{rm})^{2/3} + c(1 - T_{rm}) + d(1 - T_{rm})^{4/3}$$

$$V^{(\delta)} = \frac{a + bT_{rm} + cT_{rm}^2 + dT_{rm}^3}{T_{rm} - 1.00001}$$

$$\omega_m = \sum_{i=1}^C x_i \omega_i$$

$$T_{cm} = \frac{\left[\sum_{i=1}^C x_i (V_{ci} T_{ci})^{1/2} \right]^2}{V_{cm}}$$

$$\rho_m^L = \frac{M_m}{V_{cm} V^{(0)} (1 - \omega_m V^{(\delta)})}$$

Las constantes que se utilizan son las siguientes;

	V(0)	V(δ)
a	- 1,52816	-0,29612
b	1,43907	0,38691
c	-0,81446	-0,04273
d	0,19045	-0,04806

Tabla.5.17. Constantes

La temperatura que se usa es de 415,22 k y una presión de 6,7 atm. Los resultados son los siguientes;

	Mm (kg/kmol)	Xd	Tc(K)	Vc (m3/kmol)	Zc	Wc	X*Wc	X*Tc	X*Vc	X*Mm	X*Vc ^{2/3}	X*Vc ^{1/3}
MTBE	32,04	0,01	512,60	0,12	0,22	0,57	0,01	5,13	0,00	0,32	0,00	0,00
metanol	88,15	0,99	497,10	0,33	0,27	0,27	0,26	492,13	0,33	87,27	0,47	0,68

Tabla.5.18. Cálculo de las condiciones críticas.

V(δ)	0,18678514
V(0)	0,477619428
Trm	0,835030716
Tcm	497,255
Vcm	0,326536906
ρ (kg/m ³)	591,4819189

Tabla.5.19. Cálculo de la densidad del líquido.

CAPACIDAD CALORIFICA

Capacidad calorífica de los gases

Se utiliza una temperatura de 330,86 k y una presión de 6,7 atm .La ecuación que se utiliza es la siguiente;

$$C_{P_i}^G = A_i + B_i \left[\frac{(C_i/T)}{\sinh(C_i/T)} \right]^2 + D_i \left[\frac{(E_i/T)}{\cosh(E_i/T)} \right]^2$$

Los datos que se necesitan, es decir, las constantes A, B, C, D y E se recogen en las tablas del Anexo V. La temperatura que se utiliza es 321,3 k y una presión de 6.5 atm.

Los resultados que obtenemos son los siguientes;

	X	A	B	C	D	E	Cp	X*Cp
propano	0	44000	193800	1369	98000	583	79311	876
1,3-butadieno	0	43029	173110	1239	109222	556	86249	7925
isobutano	0	65490	247760	1587	157500	-707	103248	619
butano	0	71300	243000	1630	150000	-730	104517	23096
1-buteno	0	66500	206000	1770	141000	-797	90884	42583
cis-2-buteno	0	63400	144000	852	90200	2450	83754	3208
trans-2-buteno	0	17200	200000	1800	130000	-825	37482	1722
isobuteno	0	70900	201000	1760	132000	-725	100167	1816
pentano	0	88100	301000	1650	189000	-748	127410	104
propileno	0	41300	152500	1352	74400	578	68676	3998
MTBE	0	99300	307000	1740	208000	-796	135506	21
metanol	0	39300	88900	1960	55600	910	45509	1814
							Cpm (J/Kmol•K)	87782

Tabla5.20. Cálculo de la capacidad calorífica del gas.

Capacidad calorífica de los líquidos

La ecuación que utilizamos es la siguiente;

Los efectos de la presión y de la temperatura sobre la capacidad calorífica de los líquidos no son muy grandes. En general, la influencia de la presión puede ignorarse, mientras que la de la temperatura suele venir de la siguiente forma;

$$Cp_i^L = A_i + B_iT + C_iT^2 + D_iT^3$$

Para la capacidad calorífica de mezclas multicomponentes en fase líquida, se suele utilizar una media ponderada de las capacidades caloríficas individuales con la fracción molar de cada componente en la mezcla:

$$Cp_m^L = \sum_{i=1}^n x_i Cp_i^L$$

La temperatura que se utiliza es 415.22 y una presión de 6.57atm. Los resultados se recoge en la siguiente tabla;

	X	A	B	C	Cp	X*Cp
MTBE	0,957410485	1,40E+05	-9,00E+00	5,63E-01	2,33E+05	2,23E+05
metanol	0,042581724	1,08E+05	-3,81E+02	9,79E-01	1,19E+05	5,05E+03
					Cpm (J/Kmol•K)	2,28E+05

Tabla.5.21. 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) aunque en la práctica se utilizan otras unidades como el Poise y su submúltiplo el centipoise (cP).

$$1 \text{ Pa}\cdot\text{s} = 10 \text{ P} = 1000 \text{ cP}$$

Gases 0.01 a 0.1 cP

Líquidos 0.1 a 100 cP (líquidos ordinarios)

En los gases aumenta con la presión y la temperatura. En los líquidos aumenta con la presión pero disminuye con la temperatura.

Viscosidad de los gases

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. La ecuación es la siguiente;

$$\eta_i^G = \frac{A_i(T^{B_i})}{1 + \frac{C_i}{T} + \frac{D_i}{T^2}} \rightarrow \eta_m^G = \frac{\sum_{i=1}^c x_i \eta_i^G}{\sum_{j=1}^c x_j \phi_{ij}}$$

ϕ_{ij} es un parámetro de interacción binaria que se obtiene mediante;

$$\phi_{ij} = \frac{[1 + (\eta_i / \eta_j)^{1/2} (M_j / M_i)^{1/4}]^2}{[8(1 + (M_i / M_j))]^{1/2}}$$

$$\phi_{ii} = 1$$

Se utiliza una temperatura de 330,86 k y una presión de 6,7 atm. La información se recoge en la siguiente tabla;

	A	B	C	D	μ	x	$x^*\mu$	Mm	$\Sigma x^*\phi_{ij}$	$x^*\mu/\Sigma x^*\phi_{ij}$
propano	2,21E-06	3,82E-01	4,05E+02		9,11E-06	1,10E-02	1,01E-07	4,41E+01	1,51E-01	6,68E-07
1,3-butadieno	7,01E-08	8,45E-01			9,44E-06	9,19E-02	8,67E-07	5,41E+01	1,16E+00	7,51E-07
isobutano	1,78E-07	6,95E-01	2,50E+01	1,21E+04	8,46E-06	6,00E-03	5,08E-08	5,81E+01	6,89E-02	7,37E-07
butano	1,03E-05	2,08E-01	1,01E+03	8,10E+03	8,34E-06	2,21E-01	1,84E-06	5,81E+01	2,52E+00	7,32E-07
1-buteno	1,03E-06	4,90E-01	3,47E+02		8,63E-06	4,69E-01	4,04E-06	5,61E+01	5,53E+00	7,31E-07
cis-2-buteno	1,09E-06	4,79E-01	3,39E+02		8,67E-06	3,83E-02	3,32E-07	5,61E+01	4,53E-01	7,33E-07
trans-2-buteno	1,05E-06	4,87E-01	3,59E+02		8,49E-06	4,59E-02	3,90E-07	5,61E+01	5,38E-01	7,26E-07
isobuteno	7,68E-06	2,66E-01	9,82E+02		9,06E-06	1,81E-02	1,64E-07	5,61E+01	2,19E-01	7,49E-07
pentano	6,82E-07	5,24E-01	2,74E+02		7,80E-06	8,18E-04	6,38E-09	7,22E+01	8,09E-03	7,89E-07
propileno	8,79E-06	2,32E-01	8,00E+02	1,20E+04	9,57E-06	5,82E-02	5,57E-07	4,21E+01	8,34E-01	6,68E-07
MTBE	6,19E-07	5,72E-01	3,52E+02		8,28E-06	1,57E-04	1,30E-09	8,82E+01	1,44E-03	9,05E-07
metanol	3,07E-07	6,97E-01	2,05E+02		1,08E-05	3,99E-02	4,31E-07	3,20E+01	6,94E-01	6,21E-07

Tabla.5.22.Cálculo de la viscosidad de los gases.

Se obtiene una viscosidad de $8,81E-06 \text{ Pa}\cdot\text{s}$

La matriz de interacciones que se ha utilizado es la siguiente;

	propano	1,3-butadieno	isobutano	butano	1-buteno	cis-2-buteno	trans-2-buteno	isobuteno	pentano	propileno	MTBE	metanol
propano	1,0	1,1	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,1	1,4	1,0	1,5	0,8
1,3-butadieno	0,9	1,0	1,1	1,1	1,1	1,1	1,1	1,0	1,3	0,9	1,4	0,7
isobutano	0,8	0,9	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	0,9	1,2	0,8	1,2	0,7
butano	0,8	0,9	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	0,9	1,2	0,8	1,2	0,7
1-buteno	0,9	0,9	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,2	0,8	1,3	0,7
cis-2-buteno	0,9	0,9	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,2	0,8	1,3	0,7
trans-2-buteno	0,9	0,9	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,2	0,8	1,3	0,7
isobuteno	0,9	1,0	1,1	1,1	1,0	1,0	1,0	1,0	1,2	0,8	1,3	0,7
pentano	0,7	0,8	0,9	0,9	0,8	0,8	0,8	0,8	1,0	0,7	1,1	0,6
propileno	1,0	1,1	1,2	1,3	1,2	1,2	1,2	1,2	1,4	1,0	1,5	0,8
MTBE	0,7	0,7	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8	0,9	0,6	1,0	0,5
metanol	1,3	1,4	1,5	1,5	1,5	1,5	1,5	1,4	1,8	1,2	1,8	1,0

Tabla.5.23. Matriz de interacciones.

Viscosidad de los líquidos

La viscosidad de mezclas multicomponentes es compleja pues pueden presentarse máximos y mínimos en función de la composición.

En general, no existen en general 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 la siguiente correlación;

$$\eta_i^L = e^{\left(A_i + \frac{B_i}{T} + C_i \ln T + D_i T^{E_i} \right)} \rightarrow \eta_m^L = e^{\sum_{i=1}^n x_i \ln \eta_i^L}$$

Se utiliza una temperatura de 415,22 k y una presión de 6,7 atm .El cálculo de la viscosidad en el vaporizador es el siguiente;

	A	B	C	μ	x	xln(μ)
MTBE	-7,31000	810,00000	-0,59600	0,00013	0,95741	-8,57114
metanol	-7,28800	1065,00000	-0,66570	0,00016	0,04258	-0,37202
						-8,94315
					μ(Pa*s)	0,00013

Tabla.5.24. Cálculo de la viscosidad de los líquidos.

CONDUCTIVIDAD TERMICA

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.

Gases 0.001 a 0.01 W/m·K

Líquidos 0.1 a 0.6 W/m·K

Sólidos 0.02 a 500 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.

Conductividad térmica de los gases

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 $A_{ij} = \Phi_{ij}$, el mismo utilizado en la estimación de la viscosidad por el método del Wilke.

Se utiliza una temperatura de 330,86 K y una presión de 6,7 atm.

La matriz de interacción es la siguiente;

	propano	1,3-butadieno	isobutano	butano	1-buteno	cis-2-buteno	trans-2-buteno	isobuteno	pentano	propileno	MTBE	metanol
propano	1,00	1,18	1,19	1,21	1,24	1,29	1,25	1,16	1,41	1,01	1,84	0,92
1,3-butadieno	0,85	1,00	1,01	1,02	1,05	1,09	1,06	0,99	1,20	0,85	1,55	0,77
isobutano	0,84	0,99	1,00	1,01	1,04	1,08	1,04	0,98	1,19	0,84	1,54	0,76
butano	0,83	0,98	0,99	1,00	1,02	1,06	1,03	0,96	1,17	0,83	1,52	0,75
1-buteno	0,81	0,96	0,97	0,98	1,00	1,04	1,01	0,94	1,14	0,81	1,48	0,74
cis-2-buteno	0,78	0,92	0,93	0,94	0,96	1,00	0,97	0,91	1,10	0,79	1,42	0,71
trans-2-buteno	0,81	0,95	0,96	0,97	0,99	1,03	1,00	0,94	1,13	0,81	1,47	0,73
isobuteno	0,86	1,01	1,02	1,04	1,06	1,10	1,07	1,00	1,21	0,86	1,58	0,78
pentano	0,71	0,83	0,84	0,85	0,87	0,90	0,88	0,82	1,00	0,71	1,29	0,63
propileno	0,99	1,17	1,18	1,20	1,23	1,28	1,24	1,15	1,39	1,00	1,82	0,91
MTBE	0,56	0,66	0,67	0,67	0,68	0,71	0,69	0,65	0,78	0,56	1,00	0,50
metanol	1,08	1,26	1,27	1,29	1,32	1,38	1,33	1,24	1,49	1,09	1,94	1,00

Tabla.5.25. Matriz de interacciones.

Los datos se recogen en la siguiente tabla;

	A	B	C	D	k	x	x*k	Mm	$\Sigma x \cdot A_{ij}$	$x \cdot k / \Sigma x \cdot A_{ij}$
propano	6,15E-05	1,17E+00	4,98E+02		2,1779E-02	0,0110421	2,4049E-04	44,096	0,16219453	1,4827E-03
1,3-butadieno	-2,09E+04	9,59E-01	-9,38E+10		1,9229E-02	0,0918818	1,7668E-03	54,092	1,14311065	1,5456E-03
isobutano	-4,99E-02	2,76E-01	-2,27E+03	-7,00E+05	2,0194E-02	0,0059982	1,2113E-04	58,123	0,0737938	1,6414E-03
butano	8,02E+02	8,60E-01	1,98E+09		1,9682E-02	0,2209800	4,3493E-03	58,123	2,68328245	1,6209E-03
1-buteno	-2,28E+03	7,66E-01	-3,53E+09		1,8192E-02	0,4685430	8,5235E-03	56,107	5,56570055	1,5314E-03
cis-2-buteno	6,67E-05	1,07E+00	-6,95E+01	1,29E+05	1,6829E-02	0,0383068	6,4467E-04	56,107	0,43781008	1,4725E-03
trans-2-buteno	7,68E-05	1,06E+00	1,46E+01	1,06E+05	1,7885E-02	0,0459409	8,2164E-04	56,107	0,54110179	1,5185E-03
isobuteno	-1,72E+04	8,12E-01	-3,10E+10		2,0407E-02	0,0181309	3,7000E-04	56,107	0,2283176	1,6206E-03
pentano	-2,66E+03	8,22E-01	-5,81E+09		1,7845E-02	0,000817	1,4596E-05	72,15	0,00846675	1,7239E-03
propileno	2,24E-05	1,29E+00	3,12E+02		2,0518E-02	0,0582100	1,1944E-03	42,081	0,84709358	1,4099E-03
MTBE	-2,51E+01	1,16E+00	-7,95E+08	8,89E+10	1,3209E-02	0,000156	2,0706E-06	88,15	0,00127396	1,6253E-03
metanol	-7,76E+00	1,03E+00	-7,44E+07	6,67E+09	1,8640E-02	0,0398547	7,4288E-04	32,042	0,62536442	1,1879E-03

Tabla.5.26. Cálculo de la conductividad térmica de los gases.

Como resultado se obtiene;

$$k(\text{W/m}^*\text{K}) = 1,83\text{E-}02$$

Conductividad térmica de los líquidos

No existen métodos generales para mezclas multicomponentes aunque si 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;

$$k_i^L = A_i + B_iT + C_iT^2 + D_iT^3$$

$$k_m^L = \sum_{i=1}^n x_i k_i^L$$

Las conductividades térmicas así calculadas son ligeramente superiores a las reales aunque las desviaciones a menudo son pequeñas (5%). La temperatura que se usa es de 415,22 K y una presión de 6,7 atm.

Los resultados son los siguientes;

	A	B	k	x	x*k
MTBE	1,832E-01	-2,237E-04	9,03E-02	0,95741	8,65E-02
metanol	2,84E-01	-2,81E-04	1,67E-01	0,042582	7,11E-03

Tabla 5.27. Cálculo de la conductividad térmica de los líquidos.

Se obtiene como resultado final el siguiente;

$$k (\text{W/mK}) = 9,36\text{E-}02$$

TENSION 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.

La tensión superficial de la interfase gas-liquido se puede correlacionar con la temperatura mediante la siguiente expresión;

$$\sigma_i^L = A_i(1 - Tr_i)^{(B_i + C_i Tr_i + D_i Tr_i^2 + E_i Tr_i^3)}$$

Aunque existen métodos para deducir σ_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.

Los cálculos del vaporizador se recogen en la siguiente tabla;

	A	B	σ (N/m)
MTBE	5,935E-02	1,239E+00	8,916E-03

Tabla.5.28. Cálculo de la tensión superficial.

CALOR DE VAPORIZACION

Para calcular el calor de vaporización se utiliza la siguiente ecuación;

$$\lambda_i^L = A_i(1 - Tr_i)^{(B_i + C_i Tr_i + D_i Tr_i^2 + E_i Tr_i^3)}$$

$$\lambda_m = \sum_{j=1}^c x_j \lambda_j$$

Los cálculos son los siguientes;

	A	B	C	D	λ	x	$x*\lambda$
MTBE	4,49E+07	7,84E-01	-8,76E-01	5,18E-01	2,38E+07	0,95741	2,28E+07
metanol	5,27E+07	3,77E-01	0,00E+00	0	2,96E+07	0,04258	1,26E+06

Tabla.5.29. Cálculo del calor de vaporización.

El resultado es el siguiente;

$$\lambda(\text{J/Kmol})= 2,40\text{E}+07$$

Los datos que se ha utilizado para el cálculo de las propiedades se recogen en las tablas del Anexo V.

ANEXO V. TABLAS DE ESTIMACION DE PROPIEDADES

Propileno

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1-PROPENE						C3H6
IUPAC NAME: PROPYLENE						PROPYLENE
Synonyms: METHYLETHENE PROPENE						
METHYLETHYLENE						
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		XE2P	43 47 2366	
Critical Volume	m**3/kmol	0.18100		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 B	PS 2366	
Normal Boiling Point	K	225.43		XE2P	43 47 2366	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.068802	2	X 1P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	1.9710E+07		XE4	1269 47 1512	
IG Gihns of Formation	J/kmol	6.2140E+07		XE3	1269 3067 1512	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.6660E+05		XE4	1269 31 1512	
Heat Fuson at Melt Pt	J/kmol	3.0029E+06		XE2	47 1269	
Stand Net Heat of Comp	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		XU0	1571 2331	
Flammability Limits	vol %	2.0 TO 11.0		XU0	1571 1978	2331
Autoignition Temp	K	728.15		XU0	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		
Property						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, 4.5889E+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 Pachalyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

Propano

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: PROPANE						C3H8
IUPAC NAME: PROPANE						PROPANE
Synonyms: n-PROPANE						
DIMETHYLMETHANE						
Chemical Abstracts Number: 74-98-6						
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 B	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	31 47
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-2.4400E+07		XE3	1486 2419 2987	
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		XU0	1647	
Autoignition Temp	K	723.15		XU0	1647	
Issue Date: JULY 1987						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.						

Chemical Abstracts Name: PROPANE						C3H8		
						PROPANE		
Property	NTE	EQN	O	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, 0.0200E+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(184.01, -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, 3.6066E-06)								
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 1987						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**3/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	P5 2368	
Triple Pt Pressure	Pa	1.4232E 02		P 3P	P5	
Normal Boiling Point	K	261.43		XE2P	43 47 31	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.097704	2	X 1P	P5	
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	P5 43 11	
Radius of Gyration	m	2.9480E-10		D 3	1112 12 11	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.4027E+04	2	D 3	P5	
Dipole Moment	C*m	4.4031E-31		XE5Z	25 169	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.04779		D 2	72	
van der Waals Area	m**2/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		XUO	256 1647	
Autoignition Temp	K	733.15		XUO	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		
IUPAC NAME: ISOBUTANE						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, 7.6656E+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 Pachalyappan (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 ₂ C(CH ₃) ₂						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 ³ /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	P5	
Triple Pt Pressure	Pa	6.5451E+01		P 4P	P5	
Normal Boiling Point	K	266.25		XE2P	43 47	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.089424	2	X 1P	P5	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.6903E+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	P5 11 43	
Radius of Gyration	m	2.8750E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m ³) ^{0.5}	1.4955E+04	2	D 3	P5	
Dipole Moment	C*m	1.6678E-30		XE22	25	
van der Waals Volume	m ³ /kmol	0.04429		D 3	390	
van der Waals Area	m ² /kmol	6.7100E+08		D 3	390	
Refractive Index		1.3926	3	XU0	398	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 8.8		XU0	256 398	
Autoignition Temp	K	738.15		XU0	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, 2.0867E-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 ₂ CHCH ₂ CH ₃						C ₄ H ₈ 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 ³ /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	P5	
Triple Pt Pressure	Pa	3.5593E-07		P 9	P5	
Normal Boiling Point	K	266.90		XE2P	43	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.089621	3	X 2P	P5	
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		XE22	400 47 1269	
Acentric Factor		0.1867		D	P5 43	
Radius of Gyration	m	2.7620E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m ³) ^{0.5}	1.5022E+04	3	D 3	P5	
Dipole Moment	C*m	1.1341E-30	4	XE0	25	
van der Waals Volume	m ³ /kmol	0.04431		D 2	72	
van der Waals Area	m ² /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		XUD	256	
Autoignition Temp	K	657.04		XUD	256	

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

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 IUPAC NAME: 1-BUTENE Synonyms: alpha-BUTENE alpha-BUTYLENE ETHYLETHYLENE Chemical Abstracts Number: 106-98-9 Structural Formula: CH ₂ CHCH ₂ CH ₃						C ₄ H ₈ 1-BUTENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (87.80, 1.6700E+01)	1	100	6	1.6700E+01				
Liquid Density Min(87.80, 1.4267E+01) Max(419.59, 4.1393E+00)		105	2	1.1023E+00	2.6630E-01	4.1959E+02	2.8530E-01	
Vapor Pressure Min(87.80, 3.5593E-07) Max(419.59, 3.9211E+06)		101	3	6.7780E+01	-4.4290E+03	-7.2064E+00	8.4000E-06	2.0000E+00
Heat of Vaporization Min(87.80, 3.0440E+07) Max(419.59, 0.0000E+00)	2	106	3	3.3380E+07	3.9270E-01			
Solid Heat Capacity Min(10.00, 1.2442E+03) Max(87.82, 6.2578E+04)		100	3	1.5877E+03	-5.7789E+02	6.4207E+01	-1.0392E+00	5.3867E-03
Liquid Heat Capacity Min(87.80, 1.0966E+05) Max(300.00, 1.2819E+05)		100	3	1.4020E+05	-5.5487E+02	2.6242E+00	-3.0270E-03	
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 6.9582E+04) Max(1500.00, 2.2866E+05)		107	2	6.6500E+04	2.0567E+05	1.7713E+03	1.4075E+05	-7.9732E+02
Second Virial Coefficient Min(209.80, -1.8102E+00) Max(2098.00, 7.7826E-02)		104	3	1.5305E-01	-1.1353E+02	-1.0255E+07	-2.0580E+18	2.0160E+20
Liquid Viscosity Min(160.00, 8.2630E-04) Max(270.00, 1.7916E-04)		101	5	-2.6725E+00	3.3610E+02	-1.2860E+00		
Vapor Viscosity Min(175.00, 4.3340E-06) Max(800.00, 1.8984E-05)		102	5	1.0319E-06	4.8960E-01	3.4737E+02		
Liq Thermal Conductivity Min(104.90, 1.7679E-01) Max(264.90, 1.2076E-01)	3	100	5	2.1353E-01	-3.5020E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(225.00, 9.1934E-03) Max(800.00, 8.6329E-02)		102	5	-2.2790E+03	7.6560E-01	-3.5260E+09		
Surface Tension Min(87.80, 4.1914E-02) Max(419.59, 0.0000E+00)		106	3	5.6000E-02	1.2341E+00			

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

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 Pachalyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

1,3- butadieno

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1,3-BUTADIENE						C4H6
IUPAC NAME: 1,3-BUTADIENE						1,3-BUTADIENE
Synonyms: BIETHYLENE						BIVINYL
BUTADIENE						BUTA-1,3-DIENE
alpha,gamma-BUTADIENE						DIVINYL
ERYTHRENE						PYRROLVLENE
VINYLETHYLENE						
Chemical Abstracts Number: 106-99-0						Structural Formula: CH2CH=CH2
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**3/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**3/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**3)**.5	1.5607E+04	3	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			25	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.04082		D 2	72	
van der Waals Area	m**2/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						C4H6		
						1,3-BUTADIENE		
Property	NOTE	EQN	O	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density	1	100	4	1.7877E+01				
Only one value available (0.0, 1.7877E+01)								
Liquid Density		105	3	1.2381E+00	2.7227E-C1	4.2537E+02	2.9074E-01	
Min(164.25, 1.4061E+01)								
Max(425.37, 4.5473E+00)								
Vapor Pressure		101	2	7.4102E+01	-4.5800E+C3	-8.2922E+00	1.1820E-05	2.0000E+00
Min(164.25, 6.9049E+01)								
Max(425.37, 4.3308E+06)								
Heat of Vaporization	2	106	2	3.5600E+07	6.2200E-01	-2.8900E-01	5.2000E-02	
Min(164.25, 2.7646E+07)								
Max(425.37, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-5.1000E+03	7.1000E+02	3.5000E+00	-7.4000E-02	2.9000E-04
Min(15.00, 6.1024E+03)								
Max(162.00, 8.6858E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	2	1.2886E+05	-3.2310E+02	1.0150E+00	3.2000E-05	
Min(165.00, 1.0333E+05)								
Max(350.00, 1.4148E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	3	4.3029E+04	1.7311E+05	1.2393E+03	1.0922E+05	5.5614E+02
Min(100.00, 4.3229E+04)								
Max(1500.00, 1.9472E+05)								
Second Virial Coefficient		104	4	1.2440E-01	-1.1890E+02	-9.2200E+06	4.0250E+18	-9.4580E+20
Min(212.50, -1.4984E+00)								
Max(2125.00, 6.7486E-02)								
Liquid Viscosity		101	5	1.7844E+01	-3.1020E+02	-4.5058E+00		
Min(250.00, 2.5471E-04)								
Max(400.00, 4.8797E-05)								
Vapor Viscosity		102	4	7.0140E-08	8.4530E-01			
Min(250.00, 7.4635E-06)								
Max(650.00, 1.6730E-05)								
Liq Thermal Conductivity	3	100	5	2.2231E-01	-3.6640E-04			
Min(164.25, 1.6213E-01)								
Max(268.74, 1.2384E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	5	-2.0890E+04	9.5930E-01	-9.3820E+10		
Min(250.00, 1.1115E-02)								
Max(850.00, 1.2225E-01)								
Surface Tension		106	5	4.7682E-02	1.0507E+00			
Min(164.25, 2.8555E-02)								
Max(425.37, 0.0000E+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 Pachalyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.

n-butano

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: BUTANE IUPAC NAME: BUTANE Synonyms: DIETHYL Chemical Abstracts Number: 106-97-8 Structural Formula: CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃						C4H10 n-BUTANE
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	
Triple Pt Pressure	Pa	6.7358E-01		XE0	1632 PS 1762	456
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) ^{0.5}	1.4453E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0		D	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		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 Min(23.15, 1.5036E+01) Max(134.86, 1.4271E+01)		100	2	1.5194E+01	-6.8446E-03			
Liquid Density Min(134.86, 1.2602E+01) Max(425.18, 3.9273E+00)		105	2	1.0698E+00	2.7240E-01	4.2518E+02	2.8630E-01	
Vapor Pressure Min(134.86, 6.7146E-01) Max(425.18, 3.7753E+06)		101	3	6.7164E+01	-4.3862E+03	-7.1805E+00	9.7145E-06	2.0000E+00
Heat of Vaporization Min(134.86, 2.8592E+07) Max(425.18, 0.0000E+00)		106	3	3.3013E+07	3.7680E-01			
Solid Heat Capacity Min(20.00, 8.3568E+03) Max(108.00, 7.0806E+04)		100	3	-1.5900E+04	1.3570E+03	-7.6800E+00	2.3600E-02	
Liquid Heat Capacity Min(134.86, 1.1772E+05) Max(410.00, 2.1097E+05)		100	3	2.9060E+05	-3.0036E+03	1.8266E+01	-4.7125E-02	4.7040E-05
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 7.6733E+04) Max(1500.00, 2.6602E+05)		107	2	7.1340E+04	2.4300E+05	1.6300E+03	1.5033E+05	-7.3042E+02
Second Virial Coefficient Min(212.58, -1.8398E+00) Max(2125.80, 7.6714E-02)		104	3	1.4164E-01	-1.3566E+02	-1.0664E+07	-9.7300E+17	9.8400E+16
Liquid Viscosity Min(180.00, 6.6138E-04) Max(420.00, 3.6665E-05)		101	4	7.5000E-01	2.1870E+02	-1.7882E+00	-4.0000E-27	1.0000E+01
Vapor Viscosity Min(150.00, 3.6201E-06) Max(1200.00, 2.4387E-05)		102	5	1.0310E-05	2.0770E-01	1.0055E+03	8.1000E+03	
Liq Thermal Conductivity Min(143.15, 1.7907E-01) Max(273.15, 1.1683E-01)		100	4	2.4760E-01	-4.7874E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(225.00, 9.6153E-03) Max(675.00, 7.4176E-02)		102	4	8.0200E+02	8.5970E-01	1.9750E+09		
Surface Tension Min(134.86, 3.2899E-02) Max(425.18, 0.0000E+00)		106	3	5.2660E-02	1.2330E+00			

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

Trans-2-buteno

PROPERTY CONSTANTS

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (E)-						C4H8
IUPAC NAME: trans-2-BUTENE						trans-2-BUTENE
Synonyms: trans-1,2-DIMETHYLETHYLENE						
Chemical Abstracts Number: 624-64-6						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	428.63		XE2P	43 47	
Critical Pressure	Pa	4.1024E+06		XE2P	43 47	
Critical Volume	m ³ /kmol	0.23818		AE4P	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 ³ /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 ³) ^{0.5}	1.5188E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			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		1.3932	3	XUD	456	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 9.7		XUD	256	
Autoignition Temp	K	597.04		XUD	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.

EQUATION COEFFICIENTS

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (E)-						C4H8		
Property						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						
PSEUDOBUTYLENE						
Chemical Abstracts Number: 590-18-1						
Structural Formula: CH3CH=CHCH3						
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		XE1V	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) ^{0.5}	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	XU0	456	
Flash Point	K		4	XU0	456	
Flammability Limits	vol %	1.6 TO 9.7		XU0	456	
Autoignition Temp	K	598.15		XU0	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
IUPAC NAME: cis-2-BUTENE						cis-2-BUTENE
Property	NTE	EQN	D	COEFFICIENTS		
				A	B	C
Solid Density Only one value available (134.26, 1.6290E+01)	1	100	6	1.6290E+01		
Liquid Density Min(134.26, 1.3924E+01) Max(435.58, 4.2927E+00)	2	105	3	1.1613E+00	2.7053E-01	4.3558E+02
Vapor Pressure Min(134.26, 2.4703E-01) Max(435.58, 4.2057E+06)		101	2	7.7551E+01	-4.8480E+03	-8.7864E+00
Heat of Vaporization Min(134.26, 2.9945E+07) Max(435.58, 0.0000E+00)	3	106	2	3.4480E+07	3.8270E-01	
Solid Heat Capacity Min(30.00, 1.5807E+04) Max(134.26, 8.2069E+04)		100	3	-1.6050E+04	1.1135E+03	-3.5000E-01
Liquid Heat Capacity Min(134.26, 1.1409E+05) Max(366.48, 1.6475E+05)		100	3	1.9756E+05	-1.3555E+03	7.8678E+00
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 6.5483E+04) Max(1500.00, 2.2702E+05)		107	2	6.3400E+04	1.4415E+05	8.5230E+02
Second Virial Coefficient Min(217.77, -1.9208E+00) Max(2177.75, 8.0834E-02)		104	4	1.2950E-01	-1.0336E+02	-1.2437E+07
Liquid Viscosity Min(200.00, 5.6226E-04) Max(340.00, 1.3424E-04)		101	6	-1.0175E+01	6.6492E+02	-1.1950E-01
Vapor Viscosity Min(277.00, 7.2565E-06) Max(450.00, 1.1611E-05)		102	2	1.0899E-06	4.7910E-01	3.3865E+02
Liq Thermal Conductivity Min(134.26, 1.6972E-01) Max(274.26, 1.2149E-01)	4	100	5	2.1597E-01	-3.4450E-04	
Vap Thermal Conductivity Min(273.15, 1.1047E-02) Max(1273.15, 1.3926E-01)		102	3	6.7737E-05	1.0709E+00	-6.5881E+01
Surface Tension Min(134.26, 3.7171E-02) Max(435.58, 0.0000E+00)	5	106	4	5.8810E-02	1.2450E+00	1.2939E+05

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.
5. Data predicted by Sugden's method used in regression.

n-pentano

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: PENTANE IUPAC NAME: PENTANE Synonyms: SKELLYSOLVE A Chemical Abstracts Number: 109-66-0 Structural Formula: CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃						CSH12 n-PENTANE
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 ³ /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 ³ /kmol	0.116126		X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.4671E+08		XE3	1486 400 47	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-8.7700E+06		XE4	1486 2419 2987	47 31
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 ³) ^{0.5}	1.4439E+04		D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			169	
van der Waals Volume	m ³ /kmol	0.05803		D 2	72	
van der Waals Area	m ² /kmol	8.2900E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3547		XE1P	43 2987	
Flash Point	K	233.15		XU0	256	
Flammability Limits	vol %	1.4 TO 7.8		XU0	1647	256
Autoignition Temp	K	533.15		XU0	1647	256

Issue Date: JAN. 1982 Revision Date: AUG. 1987
 NOTES: 1. Estimated to be equal to the melting point temperature.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: PENTANE IUPAC NAME: PENTANE Synonyms: SKELLYSOLVE A Chemical Abstracts Number: 109-66-0 Structural Formula: CH ₃ (CH ₂) ₃ CH ₃						CSH12 n-PENTANE		
Property	NOTE	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)								

Issue Date: JAN. 1982 Revision Date: AUG. 1987
 NOTES: 1. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.

MTBE

PROPERTY CONSTANTS

Chemical Abstracts Name: PROPANE, 2-METHOXY-2-METHYL-						C5H12O
IUPAC NAME: METHYL t-BUTYL ETHER						METHYL tert-BUTYL ETHER
Synonyms: MTBE						
Chemical Abstracts Number: 1634-04-4						Structural Formula: HCOC(CH3)3
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	86.150				
Critical Temperature	K	497.10		XU1	1035 2721	
Critical Pressure	Pa	3.4300E+06		XU2	1035 2721	
Critical Volume	m**3/kmol	0.32900	1	P 5	639 2721	
Crit Compress Factor		0.273		D	P5	
Melting Point	K	164.55		XE2P	3 1036 2721	
Triple Pt Temperature	K	164.55	2	P 2	P5 1193 2721	
Triple Pt Pressure	Pa	5.3646E-01		P 4	P5	
Normal Boiling Point	K	328.35		XE2	3 422 2721	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.119887		X 2P	P5	
1G Heat of Formation	J/kmol	-2.9288E+08		XE3	3 400 3	
1G Gibbs of Formation	J/kmol	-1.2544E+08		XE0	3 1	
1G Absolute Entropy	J/kmol*K	3.5296E+05		XE0	3 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		XE2V	400 2721	
Acentric Factor		0.2674		D	P5 2721	
Radius of Gyration	m	3.1790E-10		D 3	1112	
Solubility Parameter	{J/m**3)**.5	1.5117E+04		D 4	P5	
Dipole Moment	C*m	4.5400E-30	3	XE6	2721 169	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.06171		D 2	72	
van der Waals Area	m**2/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		
IUPAC NAME: METHYL t-BUTYL ETHER						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 Tsionopoulos 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.

Metanol

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: METHANOL						CH4O
IUPAC NAME: METHANOL						METHANOL
Synonyms: CARBINOL						COLONIAL SPIRIT
COLUMBIAN SPIRIT						HYDROXYMETHANE
METHYL ALCOHOL						METHYL HYDROXIDE
MONOHYDROXYMETHANE						WOOD ALCOHOL
WOOD NAPHTHA						WOOD SPIRIT
Chemical Abstracts Number: 67-56-1						Structural Formula: CH3OH
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 ³ /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	P5	
Normal Boiling Point	K	337.85		XE2	30 6 3	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.040702		X 2P	P5	
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 2065	20 382
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-6.3810E+08		XE2V	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 ³) ^{0.5}	2.9523E+04		D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	5.6706E-30		XE2Z	25	
van der Waals Volume	m ³ /kmol	0.02171		D 2	72	
van der Waals Area	m ² /kmol	3.5800E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3265		XE1	3 39 1492	
Flash Point	K	284.26		XU0	256	
Flammability Limits	vol %	7.3 TO 36.0		XU0	256	
Autoignition Temp	K	737.04		XU0	256	

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987
NOTES: 1. Acutely toxic chemical identified by EPA. C & EN, p. 20, January

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: METHANOL						CH4O		
						METHANOL		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	3	3.0585E+01				
Only one value available (163.15, 3.0585E+01)								
Liquid Density		105	2	2.3080E+00	2.7192E-01	5.1258E+02	2.3310E-01	
Min(175.47, 2.7652E+01)								
Max(512.58, 8.4878E+00)								
Vapor Pressure		101	2	1.0993E+02	-7.4713E+03	-1.3988E+01	1.5281E-02	1.0000E+00
Min(175.47, 1.0540E-01)								
Max(512.58, 8.1160E+06)								
Heat of Vaporization		106	3	5.2700E+07	3.7660E-01			
Min(175.47, 4.5006E+07)								
Max(512.58, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-1.2960E+04	9.5700E+02	-5.0020E+00	1.0490E-02	7.1000E-06
Min(30.00, 1.1537E+04)								
Max(151.00, 5.7304E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	2	1.0760E+05	-3.8060E+02	9.7900E-01		
Min(175.47, 7.0959E+04)								
Max(400.00, 1.1200E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	3.9314E+04	8.8850E+04	1.9630E+03	5.5550E+04	9.0960E+02
Min(100.00, 3.9314E+04)								
Max(1500.00, 1.0545E+05)								
Second Virial Coefficient		104	5	-6.4000E-01	6.2000E+02	-1.0710E+08	7.7160E+20	-2.1974E+23
Min(256.30, -9.1876E+00)								
Max(800.00, -7.1218E-02)								
Liquid Viscosity		101	5	-7.2880E+00	1.0653E+03	-6.6570E-01		
Min(230.00, 1.8802E-03)								
Max(375.00, 2.2650E-04)								
Vapor Viscosity		102	5	3.0663E-07	6.9655E-01	2.0500E+02		
Min(240.00, 7.5232E-06)								
Max(1000.00, 3.1281E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	3	2.8370E-01	-2.8100E-04			
Min(175.47, 2.3439E-01)								
Max(337.85, 1.8876E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	3	-7.7630E+00	1.0279E+00	-7.4360E+07	6.7700E+09	
Min(273.00, 1.3652E-02)								
Max(684.37, 6.7667E-02)								
*Surface Tension		1	100	2	5.6000E-02	-1.4583E-04	1.0800E-07	
Min(273.10, 2.4229E-02)								
Max(337.85, 1.9059E-02)								

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 unit-molar constant should be 1.2. (see ref. #1008).

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
ICE						
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	D	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			
Autolignition 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(233.15, 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(273.10, 0.1056E+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	6.1250E+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	3.3358E+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 = 1.8740E-01. For the temperature range 403.15 - 647.13 K use A = 4.3910E+00, B = 2.4870E-01, C = 6.4713E+02, D =

ANEXO VI. CALCULOS JUSTIFICATIVOS DE LOS INTERCAMBIADORES

En todos los intercambiadores el proceso general de diseño que se ha utilizado es el siguiente;

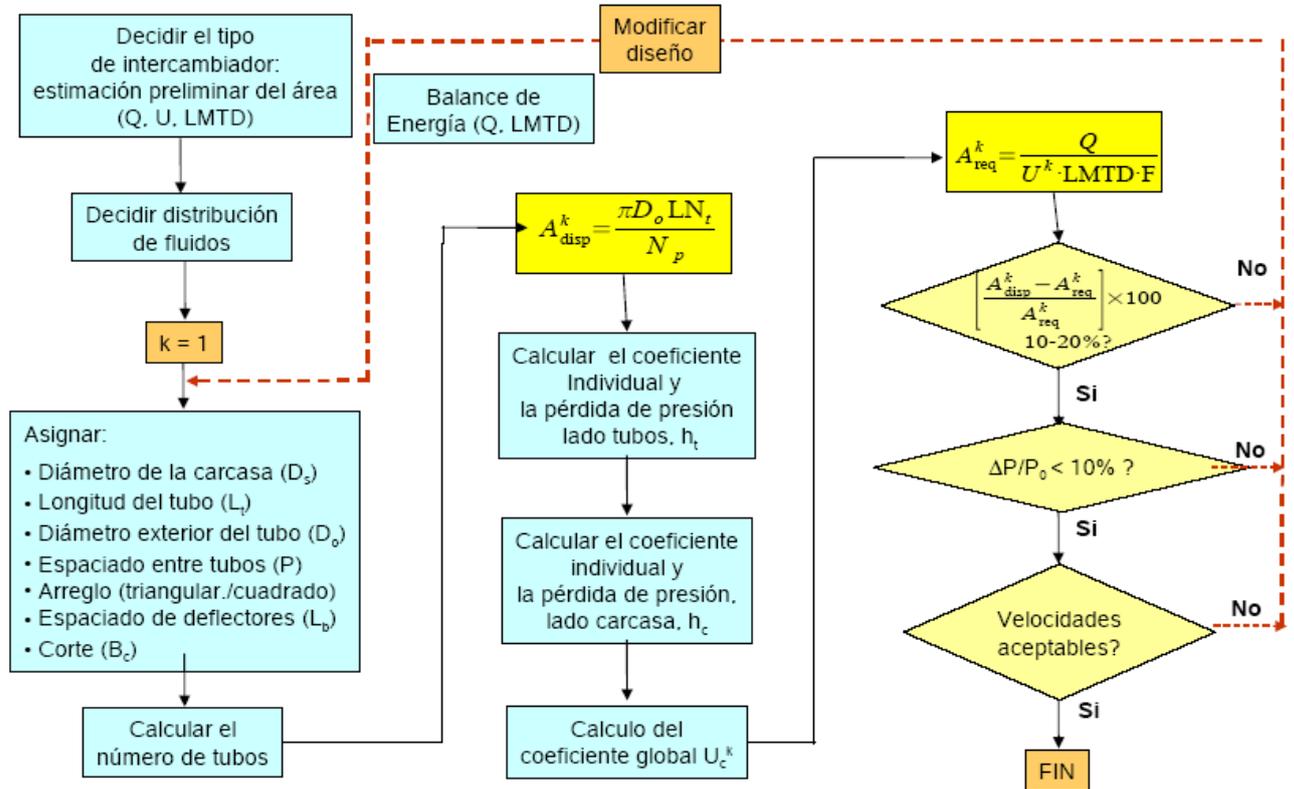


Fig.5.8. Esquema de diseño de un intercambiador.

Para comenzar el diseño es necesario partir de una configuración de partida que sea razonable. Para ello, los textos suelen recomendar una serie de valores para las dimensiones geométricas fundamentales:

Parámetro	Valor recomendado	Opciones
Diámetro del tubo	3/4 y 1"	3/8, 1/2, 5/8, 3/4, 1, 1-1/4 y 1-1/2
Espesor del tubo	14 BWG	12, 14 BWG
Longitud del tubo	16 y 20'	8, 10, 12, 16, 20, 24, 30'
Distancia entre tubos	1,25 x OD	arreglo triangular
	max (1,25 x OD ò OD + 6 mm)	arreglo cuadrado
Espaciado deflectores	0,45 x DS	entre máx(DS/5 ó 2") y DS
Corte deflectores	25%	entre 15% y 45%

Fig.5.9. Configuración de partida del intercambiador.

Para determinar el tipo de intercambiador se utiliza el siguiente esquema:

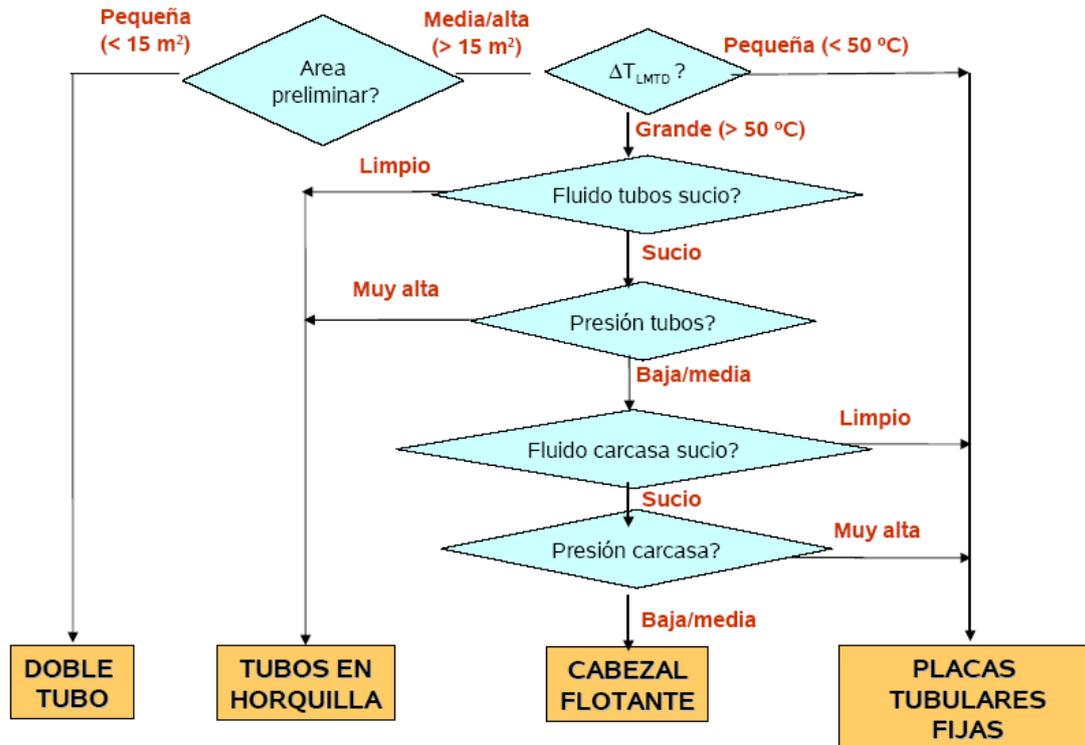


Fig.5.10. Esquema general de selección del tipo de intercambiador.

Para determinar la distribución de fluidos se utiliza la siguiente tabla:

Variable	Localización recomendada	Criterio
Fluido corrosivo	Tubos	Se necesitan menos componentes costosos en los tubos
Fluido sucio	Tubos	Mejor control de la velocidad y mantenimiento
Alta temperatura	Tubos	Se necesitan menos componentes costosos en los tubos
Alta presión	Tubos	Se necesitan menos componentes costosos en los tubos
Fluido viscoso	Carcasa	Mayores coeficientes de transferencia
Caudal grande	Tubos	Diseño mas económico

Fig.5.11. Distribución de fluidos.

La tendencia es: siempre que un fluido tenga una característica adversa (corrosión, alta temperatura, etc.) es mejor ponerlo en los tubos pues es más barato construir tubos resistentes a este material que construir una carcasa (mucho mayor).

En el intercambiador se conoce como arreglo la colocación de los tubos en la placa tubular. Pueden considerarse cuatro posibilidades que se reducen a dos tipos de distribución: triangular y cuadrada.

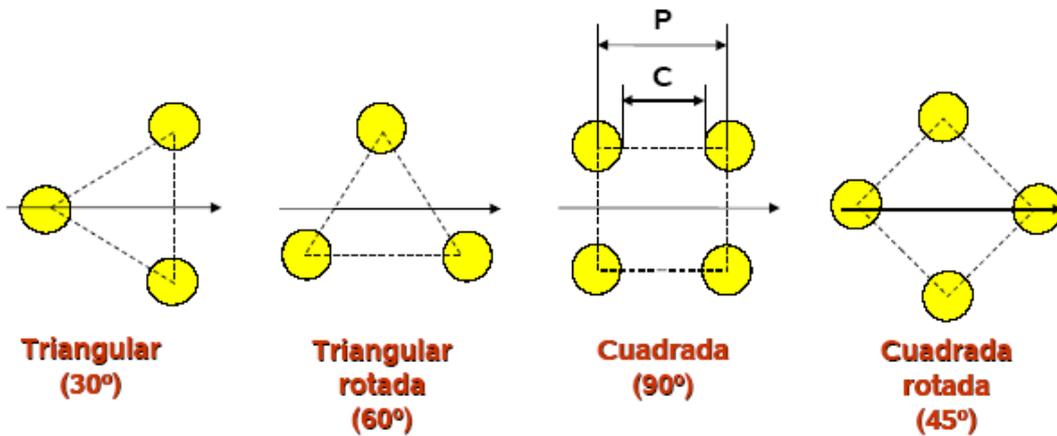


Fig. 5.12. Arreglos del intercambiador.

En los intercambiadores se ha utilizado el arreglo triangular de 30°C.

Los tipos de deflectores que hay son los siguientes;

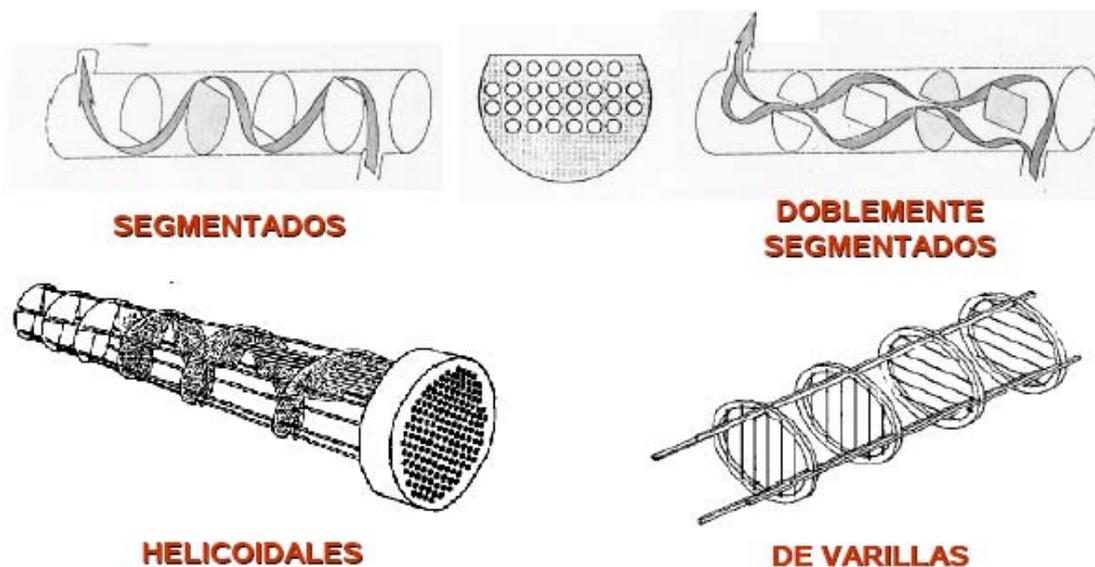


Fig.5.13. Tipos de deflectores.

Las características se recogen en la siguiente tabla:

Características	Deflectores segmentados	Helicoidales	De varillas
Buena pérdida de carga	No	Si	Si
Alto coeficiente de transmisión de calor	Si	Si	No
Bajo ensuciamiento	No	Si	Si
Facilidad de limpieza	Con arreglo cuadrado	Con arreglo cuadrado	Si
Alta eficiencia	No	No	Si
Bajas vibraciones	Con diseños especiales	Con doble hélice	SI

Fig.5.14. Características de los deflectores.

En los intercambiadores se han utilizado los deflectores segmentados.

Para la evaluación del diseño se utiliza la siguiente tabla;

	Efecto del aumento en							
	Diametro 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 (***)
Sobredimensionado	↑	↑	↓	↓	↓	↓	↓	
(Δ P/P0), tubos	↓	↑	↓	↑	↑	↑	NA	
(Δ P/P0), carcasa	↓	↑	↓	↓	NA	NA	↓	
Velocidad, tubos	↓	NA	↓	↑	↑	↑	NA	
Velocidad, carcasa	↓	NA	NA	↓	NA	NA	↓	

(*) 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.5.15. Evaluación del diseño.

Para determinar el diámetro de la carcasa en función del número de tubos, se utiliza la siguiente tabla;

Tubos de 1/4 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				Número de pasos				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	110	108
15 1/4	204	192	168	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	320	290	280	297	286	258	248	298	280	262
21 1/4	417	390	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	678	648	602	584	618	602	548	532	628	600	570
29	785	762	704	688	729	708	650	624	736	696	666
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	1346	1266	1244	1390	1336	1290
42	1703	1664	1578	1552	1611	1580	1498	1464	1632	1568	1524
45	1980	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	3478	3360	3300	3395	3346	3226	3190	3420	3340	3266
66	4292	4228	4098	4044							
72	5118	5044	4902	4868							
78	6034	5964	5796	5740							

ANEXO VII. TABLAS NECESARIAS PARA LA ELABORACION DEL PRESUPUESTO

Las tablas que se han utilizado para el cálculo de los costes de los equipos son las siguientes:

Columna de destilación

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

Number of Trays	F_q
1	3.0
4	2.5
7	2.0
10	1.5
>20	1.0

Columna de extracción

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

Intercambiadores

Exchanger Type	K_1	K_2	K_3	C_1	C_2	C_3	B_1	B_2	A_{min} (m ²)	A_{max} (m ²)	P_{max} (barg)
Double Pipe	3.0238	0.0603	0	6.4945 ¹	-6.6786	1.7442	0.74	1.21	0.2	10	300
Multiple Pipe	2.1138	0.9658	0	6.4945 ¹	-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 ²	0.05025	0.01474	1.80	1.50	4	900	140
Floating Head	3.4338	0.1445	0.10790	-0.06499 ²	0.05025	0.01474	1.80	1.50	10	900	140
Bayonet	3.5238	-0.1916	0.09474	-0.06499 ²	0.05025	0.01474	1.80	1.50	10	900	140
Kettle Reboiler	3.5638	0.1906	0.11070	-0.06499 ²	0.05025	0.01474	1.80	1.50	10	100	140
Scraped Wall	3.7438	0.9270	0	6.4945 ¹	-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 ³	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

¹ 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 $C_1 = C_2 = C_3 = 0$

² Pressure factors given are for when shell or both shell and tube are > 10 barg, when tubes only > 10 barg use $C_1 = -0.04139$, $C_2 = 0.04139$, $C_3 = 0$

³ 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 Tube—CS	CS Cu	Cu Cu	CS SS	SS SS	CS Ni	Ni Ni	CS Ti	Ti Ti	Ti Ti
Double Pipe	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00	12.00
Multiple Pipe	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00	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	12.00
Floating Head	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00	12.00
Bayonet	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00	12.00
Kettle Reboiler	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00	12.00
Scraped Wall	1.00	1.25	1.60	1.70	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00	12.00
Spiral Tube	1.00	1.25	1.60	2.30	3.00	2.80	3.80	7.20	12.00	12.00

Teflon Tube Exchanger		Flat and Spiral Plate		Air Cooler	
Shell Material	F_M	Material in Contact with Process Fluid	F_M	Tube Material	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	—	—

