

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE CARTAGENA
Escuela Técnica Superior de Ingeniería Industrial



**DISEÑO DE LA SECCIÓN DE
PURIFICACIÓN DE UNA PLANTA
DE PRODUCCIÓN DE MTBE
(METIL-TERCBUTIL-ETER) DE
120000 TN/AÑO**

Titulación: ITI especialidad Química Industrial
Intensificación: Procesos Químicos
Alumno: Francisco García Mendoza
Director: Luis Javier Lozano Blanco

Cartagena, 24 de Septiembre de 2008



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza



Índice

1. Memoria descriptiva

1.1. Objetivo	Pag 5
1.2. Justificación	Pag 5
1.3. Estudio de mercado	Pag 6
1.4. Titular de la industria	Pag 9
1.5. Localización	Pag 9
1.6. Proceso industrial	Pag 10

2. Cálculos justificativos

2.1. Cálculo de la columna de destilación (T-100)	Pag 13
2.2. Diseño del condensador (E-101)	Pag 22
2.3. Diseño del rehervidor (E-102)	Pag 36
2.4. Diseño del intercambiador (E-103)	Pag 48
2.5. Diseño de la columna de extracción (T-101)	Pag 58
2.6. Diseño mecánico de recipientes a presión	Pag 68
2.7. Hojas de especificaciones técnicas	Pag 74

3. Diagramas y planos

3.1. Diagrama de bloques del proceso	Pag 81
3.2. Diagrama de tuberías e instrumentos	Pag 82

4. Presupuesto

4.1. Coste de los equipos	Pag 84
4.2. Coste de la columna de destilación	Pag 87
4.3. Coste de los intercambiadores de calor	Pag 88
4.4. Coste de la columna de extracción	Pag 89
4.5. Coste total de la planta	Pag 90

Anexos:

1. Estimación de propiedades. Modelo termodinámico	Pag 91
2. Coeficientes de actividad. Método UNIFAC	Pag 107
3. Cálculos justificativos	Pag 115
4. Hidráulica de platos	Pag 126
5. Tablas de las constantes de propiedades	Pag 145
6. Tablas del método UNIFAC	Pag 159



DOCUMENTO 1

MEMORIA DESCRIPTIVA



1.1. Objetivo

En el presente documento se pretende 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 mediante la reacción siguiente entre el isobuteno y el metanol:

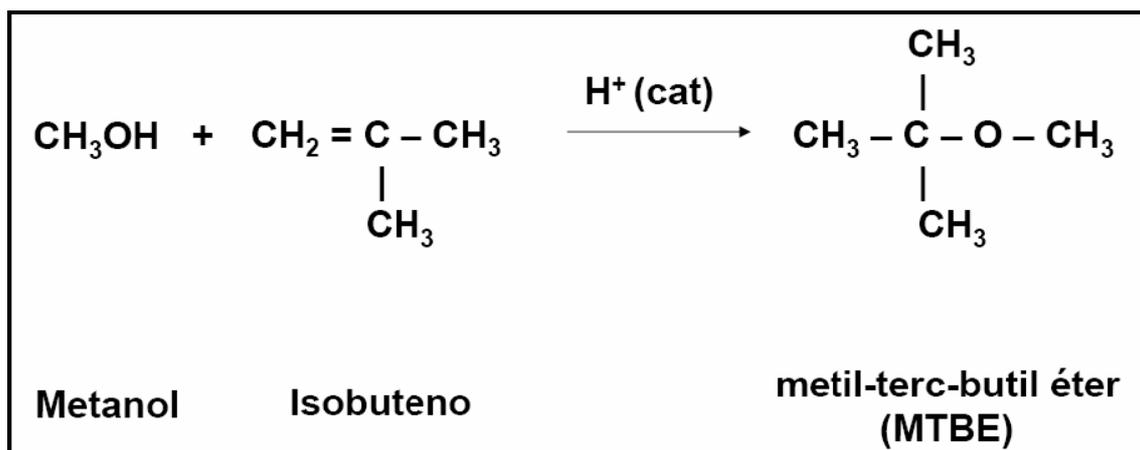


Figura 1.1 Reacción general de obtención del MTBE

1.2. Justificación

El MTBE o metil tert-butil éter es un compuesto líquido volátil, inflamable, incoloro, de baja viscosidad, con olor similar al del aguarrás, soluble en agua y de fórmula $\text{C}_5\text{H}_{12}\text{O}$.

Se fabrica combinando sustancias químicas como isobuteno y metanol. Producido en grandes cantidades (más de 200000 barriles al día en Estados Unidos en 1999) se usa casi exclusivamente como aditivo para lograr una mejor combustión de la gasolina sin plomo.

Pertenece a un grupo de productos químicos conocidos comúnmente como oxigenados, es decir, contiene oxígeno dentro de la cadena de átomos de hidrógeno y carbono, que permite una combustión más completa del carburante, incrementa el índice de octano de las gasolinas, y reduce las emisiones de CO e hidrocarburos no quemados. El MTBE también contribuye a reducir las emisiones de compuestos orgánicos reactivos y la proporción de contaminantes aromáticos, sulfuros, olefinas y bencenos, en la fabricación de gasolinas.

El MTBE se utiliza en química orgánica como disolvente barato con características comparables al éter dietílico, pero con un punto de ebullición más alto y una solubilidad en agua más baja. También se utiliza en medicina para disolver los cálculos biliares.

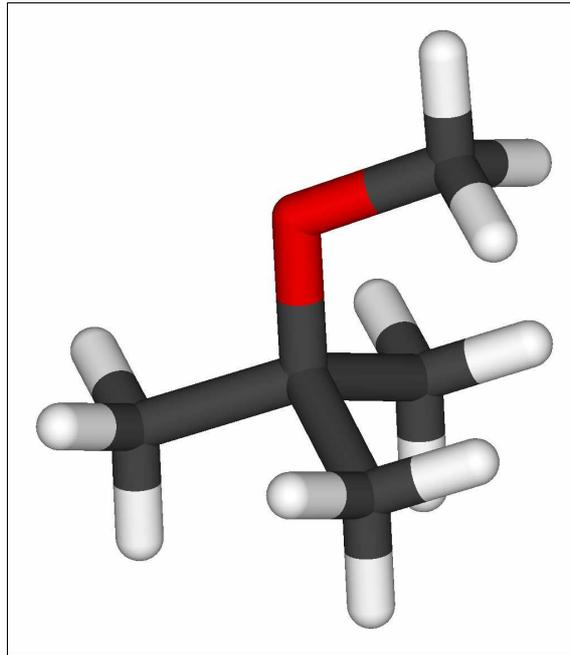


Figura 1.2. Estructura molecular del MTBE

Algunas propiedades del MTBE tomadas, salvo que se indique lo contrario, en condiciones normales (0 °C y 1 atm) son:

Densidad	0,74 g/cm ³	Solubilidad en agua	42 g/l a 20°C
Masa Molecular	88,15 u	Pto. de inflamabilidad	-28°C (c.c.)
Punto de fusión	-108,6°C	Límite de explosión	1,65 - 8,4 Vol%
Punto de ebullición	55,3°C	T^a de autoignición	460°C

Tabla 1.3. Propiedades del MTBE

1.3. Estudio de Mercado

La producción mundial de MTBE comenzó en Europa en 1973 y en USA en 1979. El consumo de éste creció durante los primeros años de la década de los 80, como consecuencia de la demanda de octano que resulta de la iniciativa de retirar paulatinamente el plomo de las gasolinas, la cual se ajusta a la **Ley del Aire Limpio** (Clean, Air Act, CAA) de 1970 en Estados Unidos, y posteriormente a la creciente demanda de gasolina premium.

El **programa de Gasolina Oxigenada**, el cual entró en vigor en noviembre de 1992, estimuló un crecimiento en la producción del MTBE desde 83.000 barriles por día en 1990 hasta 161.000 barriles por día en 1994.

El **programa de Gasolina Reformulada** iniciado en enero de 1995, supuso un empuje aún más fuerte para las mezclas oxigenadas. La demanda de MTBE en Estados Unidos llegó a los 266,000 barriles por día en 1997.



Uso	Toneladas	Porcentaje
Aditivo de las gasolinas	2.278.000	98,5
Producción de isobutileno	29.000	1,2
Disolvente	6.000	0,3
Total	2.313.000	100

Tabla 1.4. Volumen de MTBE consumido en Estados Unidos en 1997.

Como puede observarse, el principal uso del MTBE es como aditivo/componente de las gasolinas, de forma que el MTBE supone el oxigenante más común de las gasolinas sin plomo.

Cabe mencionar que frente al MTBE otros oxigenantes son el ETBE (etil tert-butil éter), de las que existen varias plantas operando en Francia y España (DeWitt & Company Inc); el TAME (tert-amil metil eter) y el nexTAME, que suelen ser usados solos o en combinación con el MTBE.

De acuerdo con la directiva 98/70/ECC, la concentración máxima permitida de MTBE es del 15% en volumen para gasolinas de automoción. La concentración de oxigenantes media europea es de alrededor de un 2,5% en peso, pero esta concentración varía sensiblemente de país en país.

Como ya se ha dicho, el MTBE ha sido añadido a las mezclas de gasolinas desde la segunda mitad de los años 70, inicialmente a bajos niveles (2-5% w/w) para aumentar el octanaje. Más recientemente, el MTBE ha sido añadido a niveles superiores (11-15% vol) para promover una combustión más eficiente de las gasolinas.

En la tabla siguiente se muestran los porcentajes de MTBE usados en las gasolinas en distintos países en el año 1997.

País	Consumo de gasolinas, 1000 toneladas	Consumo de MTBE en las gasolinas, 1000 toneladas	Porcentaje de MTBE
Alemania	29996	350	1,2 %
Austria	2094	60	2,9 %
Bélgica	2535	100	3,9 %
Dinamarca	1975	4	0,2 %
España	9100	340	3,7 %
Finlandia	1882	160	8,5 %
Francia	13067	200	1,5 %
Grecia	3056		
Irlanda	1173		
Italia	17149	500	2,9 %
Luxemburgo	542		
Países Bajos	4145	100	2,4 %
Portugal	1931	50	2,6 %
Suecia	4126	60	1,5 %
Reino Unido	22288	140	0,6 %
Unión Europea	115059	2130	1,9 %

Tabla 1.5. MTBE usado en las gasolinas en 1997



La primera planta de producción mundial de MTBE se construyó en Rabenna (Italia) por la empresa ENI (hoy día ENIChem), teniendo lugar su puesta en marcha en septiembre de 1973. Repsol-YPF, por su parte, produce MTBE en La Coruña (40000 Tn/año), Puertollano (60000 Tn/año) y Tarragona (120000 Tn/año).

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

Figura 1.6. Producción de MTBE en Europa

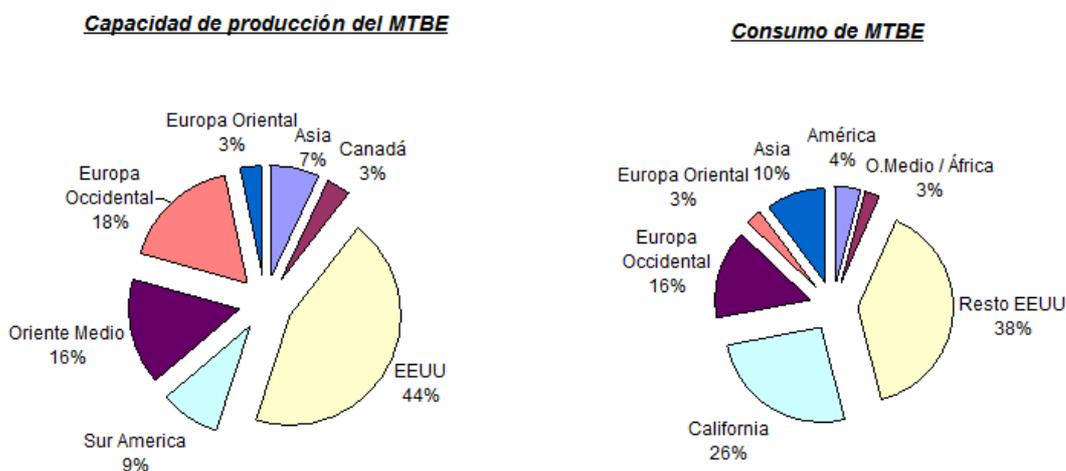


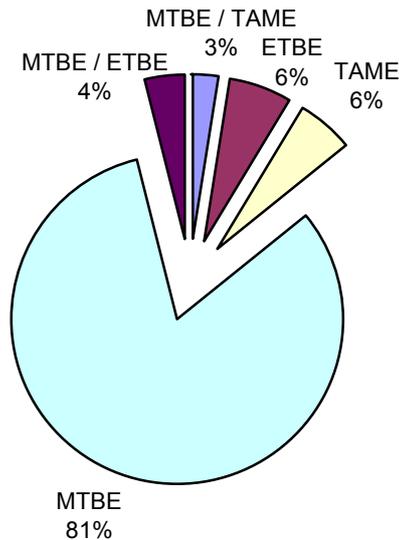
Figura 1.7. Capacidad de producción y consumo de MTBE según la zona



Los datos a los que se refieren los dos gráficos anteriores datan de 1998.

Por otra parte, atendiendo no solo a la producción de MTBE sino también al resto de oxigenantes, los datos configuran el siguiente gráfico en Europa en el año 2000:

Figura 1.8. Producción de oxigenantes en Europa



1.4. 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).

1.5. Localización

La planta proyectada forma parte del proyecto de ampliación que REPSOL-YPF lleva a cabo en el Valle de Escombreras (Cartagena), Ctra. Alumbres-Escombreras, Km.10 del Valle de Escombreras s/n. C.P: 30350. Cartagena (Murcia).

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 en cuanto se disponga del permiso correspondiente.

1.6. Proceso Industrial

Dicho proceso toma como corriente de alimentación el efluente correspondiente a la sección de reacción de la planta, acondicionada a 70 °C y 6,5 atm de presión, con una composición como la indicada en la tabla:

Componente	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

Figura 1.9. Composición de la corriente de alimentación

Como ya se ha dicho, se requiere la producción de 120000 Tn/año de MTBE al 99% de riqueza en peso, para lo cual se cuenta para dicha sección de purificación del siguiente diagrama de flujo:

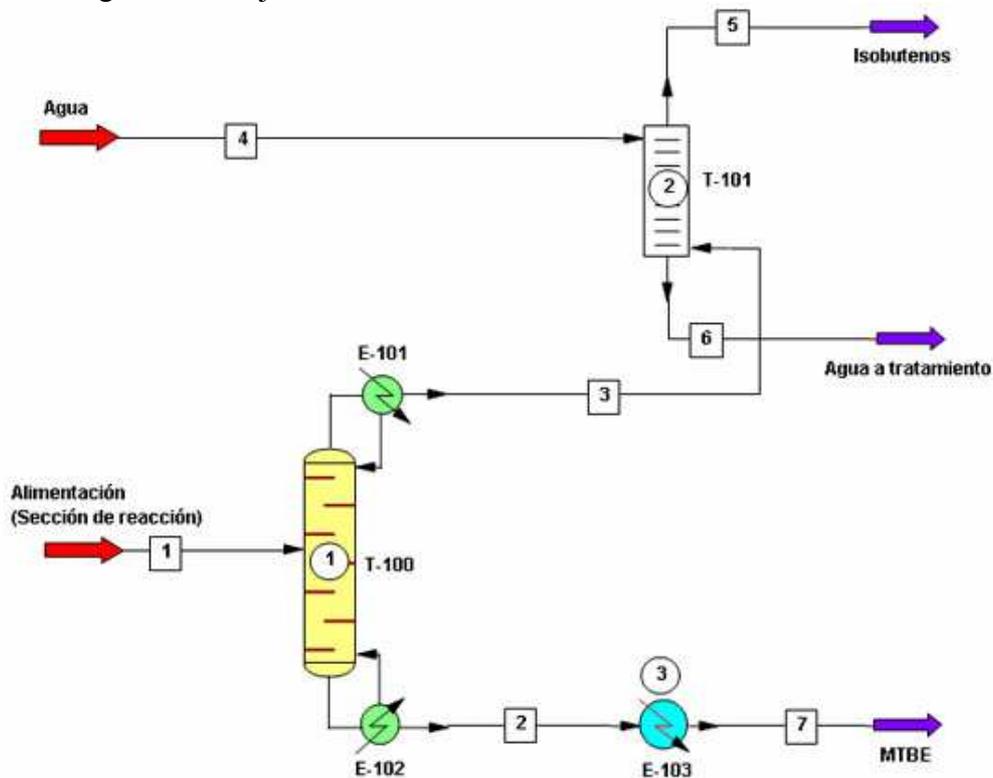


Figura 1.10. Diagrama de flujo de la sección de purificación de una planta de MTBE



Éste consta de:

⇒ Columna de Destilación (T-100)

Su objetivo es el de separar el MTBE producto por el fondo, de la corriente residual por la cabeza. La temperatura del fondo es la temperatura a la cual el MTBE, prácticamente puro, condensa a la presión de trabajo de la columna.

⇒ Columna de Extracción (T-101)

Utiliza agua para purificar la corriente de isobutenos procedente de la cabeza de la columna de destilación.

⇒ Intercambiador de Calor (E-103)

Con el que el MTBE que sale por el fondo de la columna de destilación se enfría y reduce su presión.

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

En el condensador, el contenido de la cabeza de la columna de destilación es condensado desde el vapor saturado a líquido saturado a la presión de 6,5 atm.

En función de la relación de reflujo con la que se trabaje, parte del condensado se transforma en la corriente 3, o bien se vuelve a introducir a la columna como reflujo, enriqueciendo así la composición en los platos superiores de la columna.

Por otra parte, en el rehervidor se devuelve cierto porcentaje del producto de fondo a la torre de destilación, convirtiéndolo desde líquido saturado a vapor saturado. La temperatura de dicho líquido recirculado es la temperatura de burbuja del MTBE a la presión de la columna.



DOCUMENTO 2

CÁLCULOS JUSTIFICATIVOS



2.1. Cálculo de la columna de destilación (T-100)

2.1.1. Balance de materia

Para el diseño de la columna de destilación se parte de las composiciones de cada uno de los componentes, temperaturas, presiones y caudales molares de las corrientes 1, 2 y 3, que quedan reflejados en la siguiente tabla:

Corriente N°	1	2	3
Descripción	<i>Alimentación mezcla isobutenos MTBE</i>	<i>Fondos T-100</i>	<i>Destilado T-100</i>
Temperatura (°C)	70	127,1	48,3
Presión (atm)	6,5	6,7	6,5
Fracción de vapor	0,53	0,00	0,00
Entalpía (MJ/h)	-63218,9	-47676,8	-20976,9
Caudal, kmol/h	614	163,6	450,4

Composición	Fracción molar		
Propileno	0,0427	0,000	0,0582
Propano	0,0081	0,000	0,0110
i-Butano	0,0044	0,000	0,0060
i-Buteno	0,0133	0,000	0,0181
1-Buteno	0,3437	0,0001	0,4686
1,3-Butadieno	0,0674	0,0000	0,0919
n-Butano	0,1621	0,0001	0,2210
trans-2-buteno	0,0337	0,0000	0,0459
cis-2-buteno	0,0281	0,0001	0,0383
n-pentano	0,0006	0,0022	0,0000
Metanol	0,0319	0,0073	0,0408
Agua	0,0001	0,0003	0,0000
MTBE	0,2639	0,9900	0,0001

Tabla 2.1. Corrientes de entrada y salida de la columna de destilación.

A partir de estos datos se lleva a cabo un balance de materia entre la alimentación, y ambas salidas (el destilado y el fondo), mediante el método FUG (Fenske-Underwood-Gilliland), dado que se trata de la destilación de una mezcla multicomponente.

Este método se fundamenta en el método iterativo representado en la figura 2.2 de más abajo, debiendo tener en cuenta que el componente clave ligero es el metanol, mientras que el clave pesado es el MTBE.

A partir de la composición de la corriente 1 así como de su caudal molar, pueden calcularse los kmoles de cada uno de los componentes en la alimentación, que servirán para determinar los kmoles en el destilado y fondo.

Como en todos los casos ENTRADA = SALIDA, y dado que podemos considerar sin cometer un error muy grande que por el fondo prácticamente sólo sale MTBE y metanol, los kmoles en la alimentación serán los mismos que los del destilado, excepto en estos dos componentes en los que:

$$Kmoles_{destilado} = Kmoles_{alimentación} - Kmoles_{fondo}$$

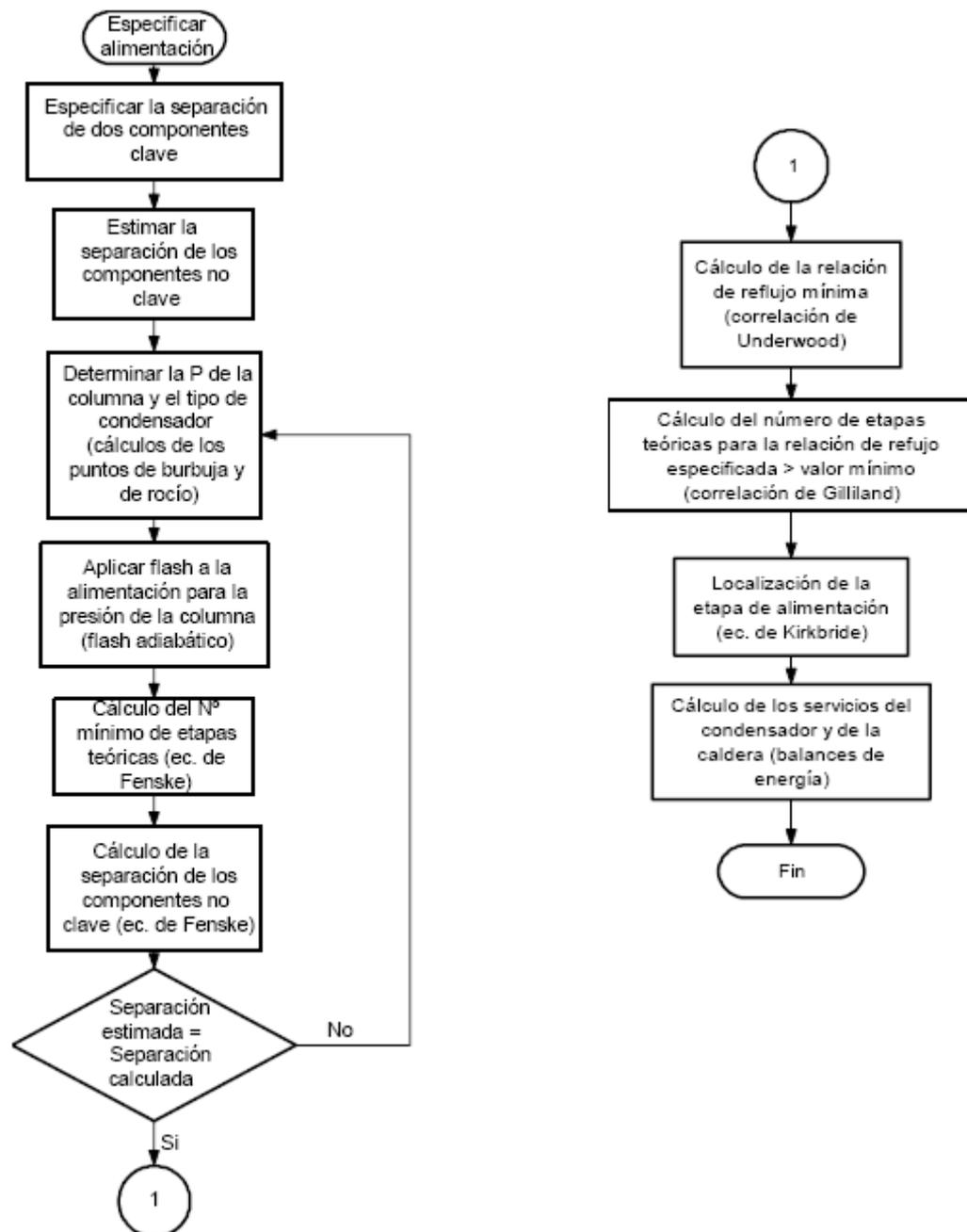


Figura 2.2. Proceso iterativo del método FUG

En dicho proceso, el cálculo de los puntos de burbuja y rocío se lleva a cabo, a su vez, con otro proceso iterativo, con la estructura de la figura siguiente.

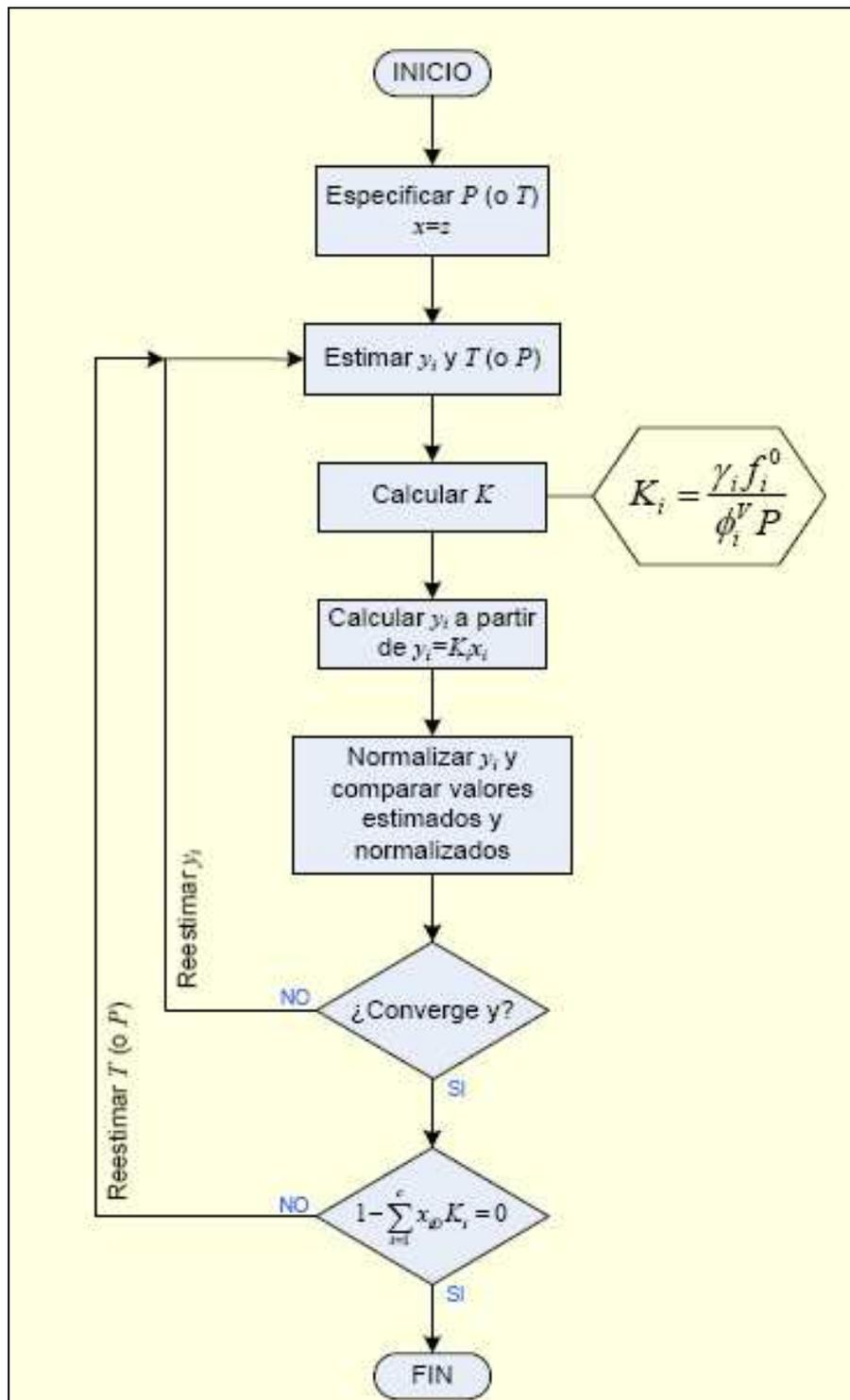


Figura 2.3. Cálculo del punto de burbuja.

Para el cálculo de x_i , la iteración es exactamente igual, teniendo en cuenta que:

$$x_i = \frac{y_i}{k_i}$$



El balance de materia queda tal y como se muestra en las figuras 2.4 y 2.5:

Alimentación

	x_F	kmoles
Propileno	0,0427	26,2178
Propano	0,0081	4,973396316
i-Butano	0,0044	2,7016
i-Buteno	0,0133	8,1662
1-Buteno	0,3437	211,0318
1,3-Butadieno	0,0674	41,38361228
n-Butano	0,1621	99,5294
trans-2-buteno	0,0337	20,6918
cis-2-buteno	0,0281	17,2534
n-pentano	0,0006	0,3684
Metanol	0,0319	19,5866
Agua	0,0001	0,0614
MTBE	0,2639	162,0346
∑ =	1,0000	614,0

Caudal molar = 614,0 kmol/h

Tabla 2.4. Balance de materia en la entrada

En los cálculos correspondientes al destilado y al fondo, deben usarse las constantes de Antoine de cada uno de los componentes, las cuales se obtienen de las tablas del anexo 5, con las que calcularemos la presión de vapor mediante la ecuación de Antoine:

$$P_{vap} = 10^{(A-B/(T+C))}$$

Una vez obtenida, se define la constante de equilibrio, K_i , mediante el cociente:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i \cdot f_i}{\phi_i^V \cdot P}$$

donde:

- γ_i es el coeficiente de actividad, (ver anexo 2)
- f_i es la fugacidad, que en nuestro caso es igual a la presión de vapor del sistema (mmHg)
- ϕ_i^V es el coeficiente de fugacidad, que consideramos 1.
- P es la presión total a la que opera la columna (mmHg)

y con esto, las volatilidades relativas (α_{ij}) para destilado y fondo son el cociente entre las constantes de equilibrio del componente clave ligero y el clave pesado:

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



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

Cabeza

T	P	P(mmHg)
53,37438	6,50000	4940

	y	kmoles	A	B	C	Coef. Actividad	Pvapor	K	x
Metanol	0,04080107	18,39232	8,07290	1574,99000	238,87000	12,74342681	482,62407	1,244996858	0,03277203
MTBE	0,00015662	0,0706	5,896	709	179,9	1,117016614	718,88699	0,162552372	0,00096349
propileno	0,05816092	26,2178	6,82	785,00	247,00	0,99636	16076,61702	3,24253921	0,01793684
propano	0,01103286	4,973396316	6,80	803,81	246,99	1,05046	13423,43675	2,854420588	0,00386518
i-butano	0,00599316	2,7016	6,91	946,35	246,68	1,06594	5708,88999	1,231849443	0,00486517
i-buteno	0,0181157	8,1662	6,84	923,20	240,00	1,02085	4948,88756	1,022682928	0,01771389
1-buteno	0,46814776	211,0318	6,84	926,10	240,00	1,01256	4854,92590	0,995123012	0,4704421
1,3-butadieno	0,09180439	41,38361228	6,85	930,55	238,85	1,13685	4631,04632	1,065745605	0,086141
n-butano	0,22079357	99,5294	6,81	935,86	238,73	1,06597	4028,14634	0,869206456	0,25401741
trans-2-buteno	0,04590218	20,6918	6,87	960,80	240,00	1,00995	3931,18699	0,803703833	0,0571133
cis-2-buteno	0,03827452	17,2534	6,87	960,10	237,00	1,00995	3654,59109	0,747155725	0,05122696
n-pentano	0,00081725	0,3684	6,88	1075,78	233,21	1,03786	1325,73288	0,278528195	0,00293417
$\Sigma =$	1	450,7803286							

$$\Sigma = 1$$

Fondo

T	P	P(mmHg)
142,30821	6,7	5092

	x	kmoles	A	B	C	Coef. Actividad	Pvapor	K	y
MTBE	0,9927	161,964	5,896	708,69	179,9	1,000046231	4971,89099	0,976457353	0,96932921
Metanol	0,0073	1,19428	8,07240	1574,99000	238,87000	2,50305	8719,68207	4,286283886	0,03128987
$\Sigma =$	1	163,15828							

$$\Sigma = 1$$

Tabla 2.5. Balances de materia en el fondo y la cabeza de la columna



En ambos casos, se tantean las temperaturas, de modo que la suma de las fracciones molares en el punto de rocío y punto de burbuja, correspondientes a la última columna de las tablas anteriores, sean igual a 1.

Con todo esto, las volatilidades relativas en cabeza y fondo, así como la volatilidad promedio (media geométrica de las dos anteriores), son las indicadas:

$$\begin{aligned}\alpha_{ij} \text{ destilado} &= 7,6591 \\ \alpha_{ij} \text{ fondo} &= 4,3896 \\ \alpha_{ij} \text{ promedio} &= 5,7983\end{aligned}$$

2.1.2. Número mínimo de etapas. Ecuación de Fenske

Para obtener el número mínimo de etapas teóricas se utiliza la ecuación de Fenske, a partir de los resultados obtenidos en el balance de materia:

$$N_{\min} = \frac{\log \left[\left(\frac{y_{LK}}{x_{LK}} \right) \cdot \left(\frac{x_{HK}}{y_{HK}} \right) \right]}{\log(\alpha_{ij \text{ promedio}})}$$

donde y_{LK} , x_{LK} , y_{HK} y x_{HK} son las composiciones en el destilado y fondo del componente más volátil, el clave ligero (LK, “light key”) y del menos volátil, el clave pesado (HK, “heavy key”).

$$N_{\min} = 5,96$$

Cabe mencionar que dentro de estas 6 etapas mínimas se incluye la caldera, no así el condensador.

2.1.3. Relación de reflujo mínima. Correlación de Underwood

Underwood (1948) derivó ecuaciones para estimar la relación de reflujo mínimo para destilación de múltiples componentes. Este método resuelve una ecuación que relaciona la composición de la alimentación, la condición térmica de la misma, y la volatilidad relativa a la temperatura promedio de la columna para un factor q ; este factor es sustituido en una segunda ecuación la cual relaciona el reflujo mínimo a la volatilidad relativa y la composición del destilado.

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



El método consta de los siguientes pasos:

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

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

donde

α_i = volatilidad relativa del componente i con respecto a algún componente de referencia, usualmente el clave pesado.

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

2. Reemplazar θ en la siguiente ecuación para calcular $(L/D)_{min} = R_{min}$.

$$R_{min} + 1 = \sum \frac{\alpha_i y_i}{\alpha_i - \theta}$$

donde R_{min} = relación mínima de reflujo.

y_i = concentración del componente i en la cabeza a reflujo mínimo.

Los cálculos llevados a cabo resultan:

$$\theta = 1,565421495$$

	α_i	x_F	y	$\alpha_i \cdot x_{iF} / (\alpha_i - \theta)$	$\alpha_i \cdot x_{iD} / (\alpha_i - \theta)$
Metanol	7,65905072	0,0319	0,040801071	0,040094943	0,051282652
MTBE	1	0,2639	0,000156617	-0,46673146	-0,000276992
Propileno	19,9476586	0,0427	0,058160923	0,046336309	0,063113876
Propano	17,5600058	0,0081	0,01103286	0,008892756	0,012112668
i-butano	7,57816961	0,0044	0,005993163	0,005545542	0,007553486
i-buteno	6,29140577	0,0133	0,018115697	0,017705454	0,024116289
1-buteno	6,12186092	0,3437	0,468147758	0,461782414	0,628985748
1,3-butadieno	6,55632148	0,0674	0,091804388	0,088540384	0,120599308
n-butano	5,34723946	0,1621	0,220793574	0,229198635	0,312187452
trans-2-buteno	4,94427627	0,0337	0,04590218	0,049313191	0,067168635
cis-2-buteno	4,59640003	0,0281	0,038274518	0,042612918	0,058042311
n-pentano	1,71346743	0,0006	0,00081725	0,006944334	0,009458756

$$q = 0,47$$

$$1 - q = 0,53$$

$$1 + R_{min} = 1,35434419$$

$$\Sigma = 0,53 \quad 1,354344188$$

$$R_{min} = 0,3543$$

Tabla 2.6. Cálculo de la relación de reflujo mínima mediante la correlación de Underwood

2.1.4. Número de etapas. Correlación de Gilliland

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

Una vez fijada la relación de reflujo se procede a estimar el número de platos necesarios; para ello se emplea una correlación empírica, la correlación de Gilliland que se ajusta bastante a la realidad.

Dicha correlación permite establecer una nube de puntos representando en el eje de ordenadas $(N - N_{\min}) / (N + 1)$ frente a $(R - R_{\min}) / (R + 1)$ en abscisas. Así, conocidos N_{\min} y R_{\min} , con la correlación de Gilliland, para un valor de R especificado se puede calcular N (o lo contrario).

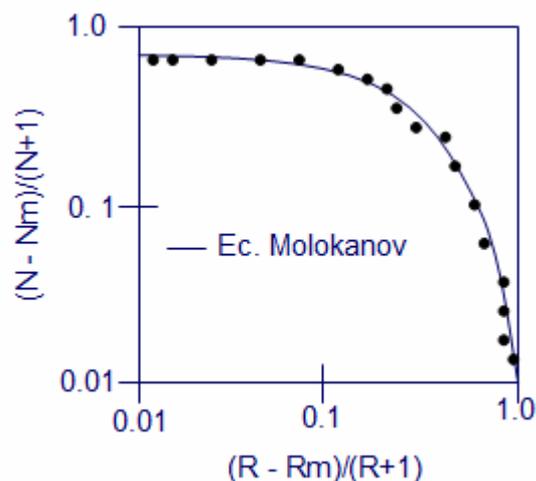


Figura 2.7. Representación de $(N - N_{\min}) / (N + 1)$ vs $(R - R_{\min}) / (R + 1)$. Ecuación de Molokanov.

Por otra parte, la ecuación de Molokanov permite una solución analítica mediante las siguientes ecuaciones:

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

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

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

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

R	H	G
0,460647444	0,07277818	0,582203639

$$N = 15,659$$



2.1.5. Etapa de alimentación. Correlación de Kirkbride

C.G. Kirkbride (1944) desarrolló una ecuación para estimar la razón del número de platos arriba y abajo de la alimentación, lo cual permite determinar en forma aproximada el plato en el que se debe introducir la alimentación.

La ecuación propuesta es:

$$\frac{N_F}{N - N_F} = \left[\frac{Bx_{HK,F} \left(\frac{x_{LK}}{y_{HK}} \right)^2}{Dx_{LK,F}} \right]^{0,206}$$

donde N_F es el plato de alimentación y $x_{HK,F}$ y $x_{LK,F}$ las composiciones de los componentes clave pesado y clave ligero en la alimentación, respectivamente.

La ecuación anterior se obtiene cuando se supone que la relación entre el número de pisos por encima y por debajo del piso de alimentación es la misma que la determinada por la aplicación de la ecuación de Fenske a ambos sectores por separado.

$$N_F / (N - N_F) = 6,10283143$$

$$N_F = 13,454$$

2.1.6. Hidráulica de platos

A continuación se resumen brevemente los resultados obtenidos para la hidráulica de platos de la columna, cuyos cálculos se desglosan detalladamente en el anexo correspondiente. Así, la configuración elegida ha sido:

Parámetro	Símbolo	Valor elegido
Espaciado entre platos	ts	24"
Espesor del plato	td	0,078"
Diámetro de las perforaciones	dh	1"
Altura del rebosadero	hw	2"
Número de pasos	Np	1
Factor de inundación	Ff	0,82
Factor de goteo	Wf	0,6
Factor de espuma	Sf	1

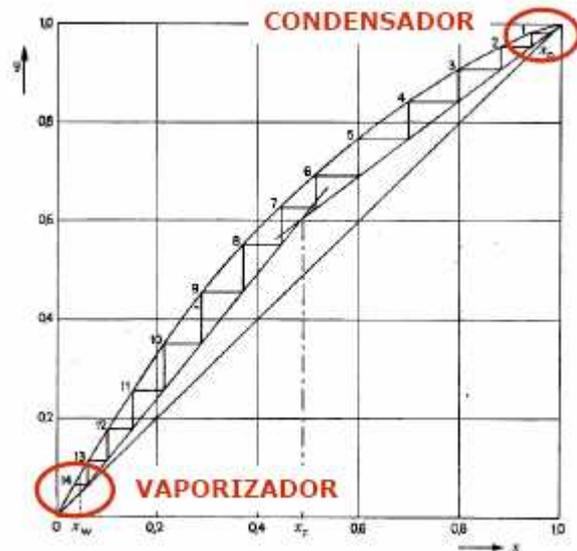
Tabla 2.8. Datos finales de la configuración en la hidráulica de platos

2.2. Diseño 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.



En nuestro caso particular, se lleva a cabo la condensación del vapor procedente de la parte superior de la columna de destilación, para dar lugar a un líquido con las características requeridas en el balance de materia (corriente 3 de la página 13 de este documento).

Se ha considerado que las composiciones de la corriente de entrada al condensador se corresponden con las del plato 1 de la columna de destilación, si bien, puede ser que CHEMCAD considere este plato 1 como el propio condensador:

Unit type : SCDS Unit name: Eqp # 1			
Stage #	74.78 C	6.50 atm	
	V Mole frac	L Mole frac	Y/X
Propylene	0.04976	0.00964	5.16140
Propane	0.00944	0.00204	4.63669
I-Butane	0.00513	0.00239	2.14483
I-Butene	0.01549	0.00842	1.83977
1,3-Butadiene	0.07848	0.04243	1.84986
N-Butane	0.18868	0.11741	1.60705
Trans-2-Butene	0.03921	0.02671	1.46760
Cis-2-Butene	0.03267	0.02410	1.35526
N-Pentane	0.00067	0.00112	0.59811
Methanol	0.03688	0.03602	1.02384
Water	0.00009	0.00024	0.38991
MTBE	0.14332	0.50609	0.28320
1-Butene	0.40018	0.22338	1.79142
Total kmol/s	0.1463	0.0688	

Figura 2.9. Composición de la corriente en el plato superior de la columna (CHEMCAD)

Una vez determinada la corriente de entrada y los requerimientos de la corriente de salida del condensador, **el proceso general de diseño** de un condensador se representa en la siguiente figura.

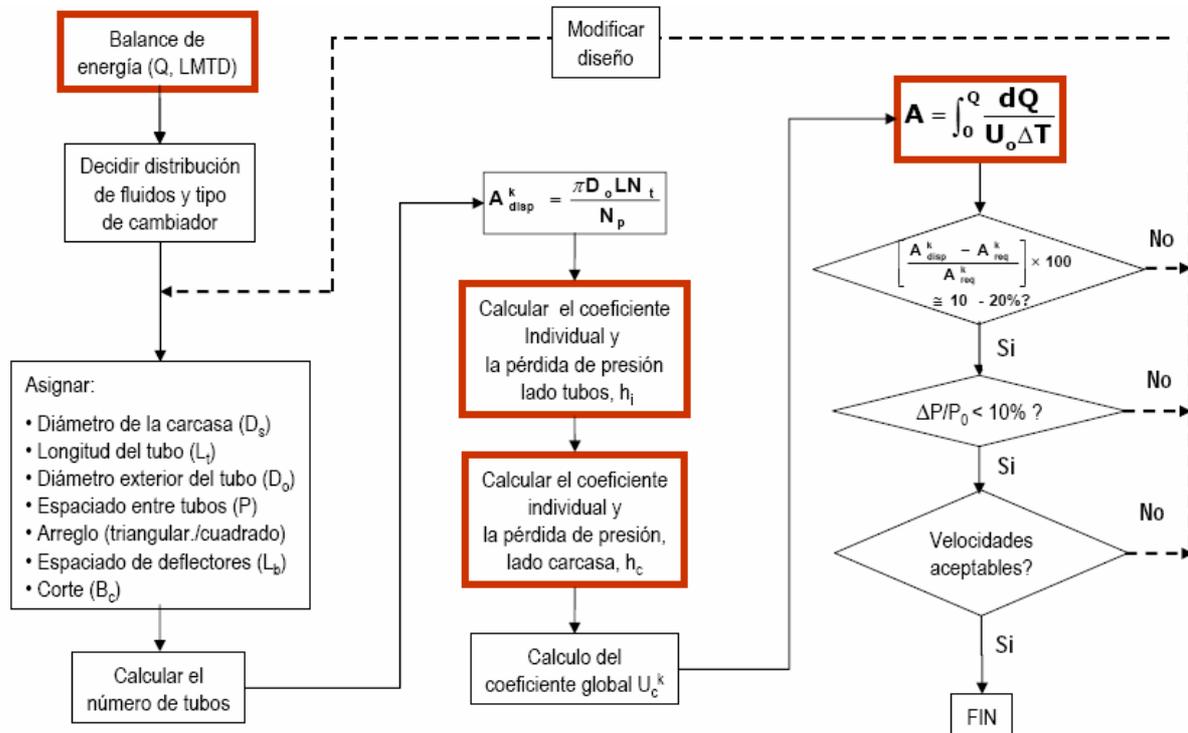


Figura 2.10. Proceso general de diseño de un condensador

2.2.1. Balace de Energía

Dado que el vapor condensante es un vapor multicomponente, para hacer el balance de energía debe calcularse la curva de condensación, para lo cual se ha dividido el rango de condensación en intervalos de 5 °C, resolviendo para cada uno de estos intervalos el siguiente sistema de ecuaciones:

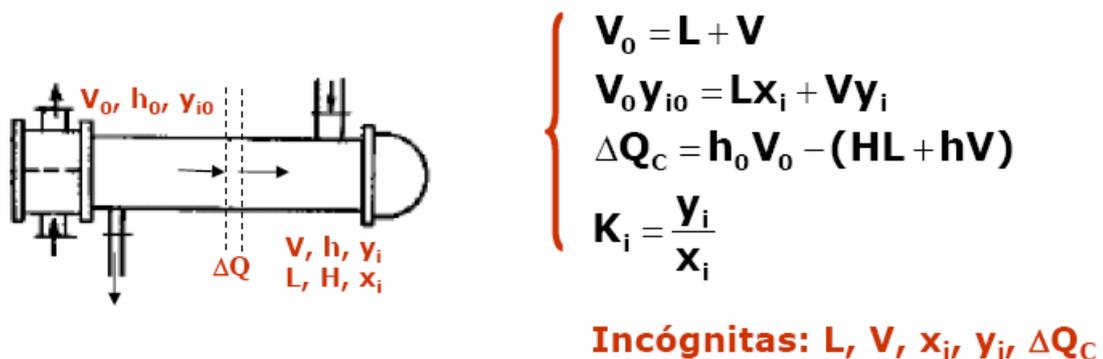


Figura 2.11. Ecuaciones a resolver en el balance de energía.

V_0 = caudal másico de entrada del vapor en el instante inicial (kg/s).

L = caudal másico de líquido condensado (kg/s).



V = caudal másico de vapor aún sin condensar (kg/s).

H_0 = entalpía de los líquidos (MJ/s)

h_0 = entalpía de los gases (MJ/s)

T_v (°C)	V (kg/s)	L (kg/s)	$\Psi=V/V+L$ (kg/kg)	H (MJ/s)	h (MJ/s)	ΔQ_c (MW)	$Q(\text{acum})$ (MW)
74,78	8,6488	0,0000	1	0,000	-8,906	0,000	0,000
69,78	7,3957	1,2531	0,8551125	-2,894	-6,568	0,556	0,556
64,78	6,2625	1,1332	0,7240912	-2,310	-4,692	0,434	0,990
59,78	5,0936	1,1689	0,58894228	-1,967	-3,168	0,443	1,433
54,78	3,5086	1,5851	0,40567327	-1,979	-1,772	0,583	2,016
49,78	1,2941	2,2145	0,14962931	-2,051	-0,522	0,800	2,816
44,78	0,4371	0,8571	0,05053426	-0,698	-0,139	0,314	3,131

$$\sum = Q_c = 3,131 \text{ MW}$$

Tabla 2.12. Balance de energía en el condensador. Las entalpías son las dadas por CHEMCAD

Para cada temperatura, el flash isotérmico de CHEMCAD da las fracciones molares de líquido y de vapor, así como las entalpías de éstos. No obstante, en el anexo 1 se indica cómo calcular las entalpías para líquidos y gases dadas las composiciones.

Como puede observarse en la siguiente tabla, los valores de las entalpías obtenidos por CHEMCAD, indicados en el anterior balance, son muy parecidos a los obtenidos mediante cálculos.

H (calc.) (MW)	h (calc.) (MW)
0,00000	-8,98629
-2,50174	-6,51824
-1,93622	-4,61205
-1,55892	-3,07582
-1,38988	-1,69278
-1,19010	-0,48934
-0,35892	-0,12776

Tabla 2.13. Entalpías obtenidas mediante cálculos (Anexo 1).

En cuanto al cálculo de la LMTD, se ha llevado a cabo con un contacto en paralelo entre el fluido refrigerante (agua) y el vapor a condensar:

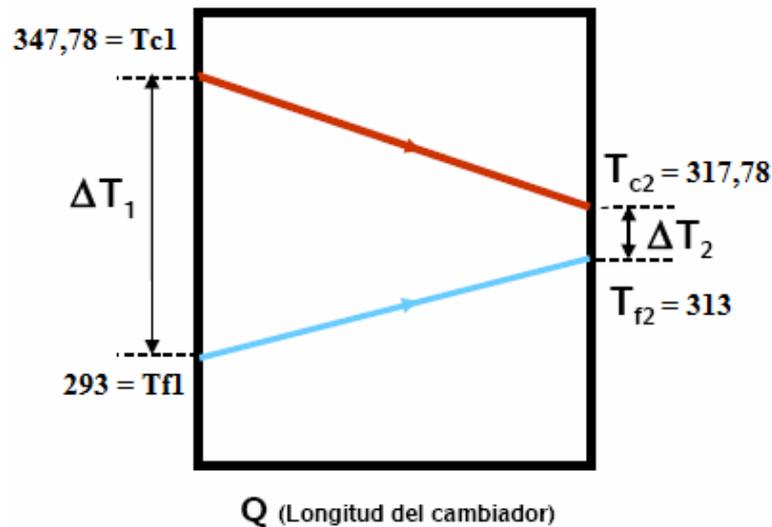


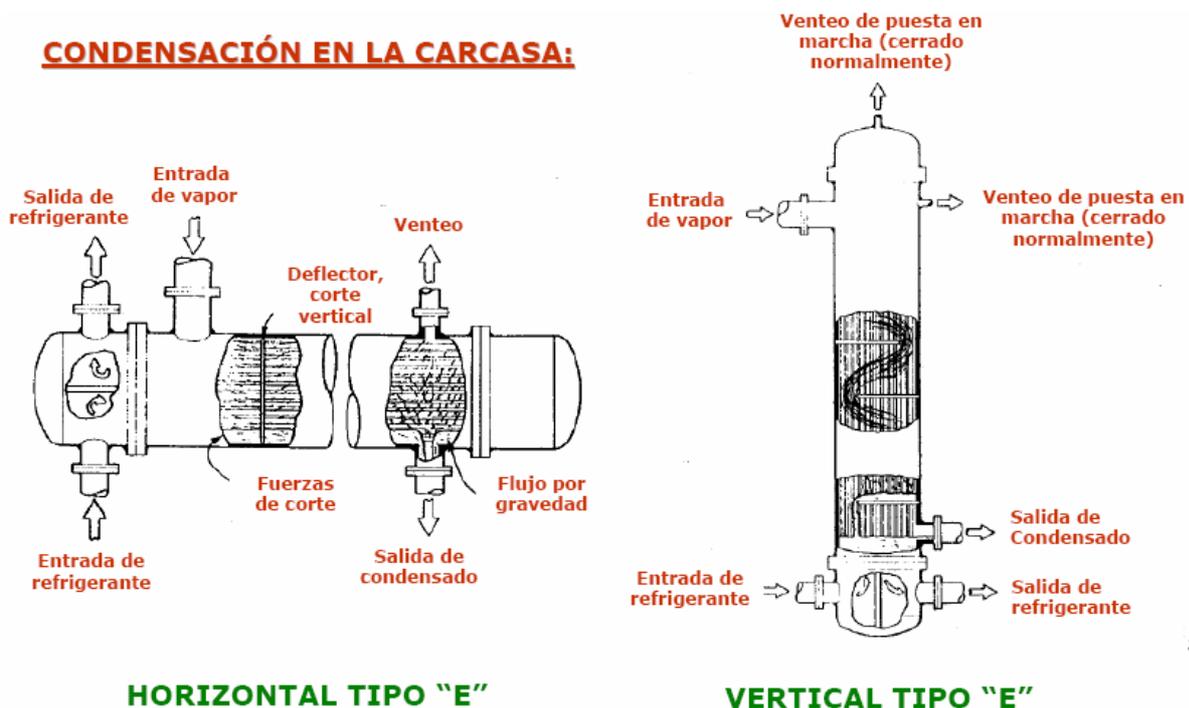
Figura 2.14. Contacto en paralelo. Las temperaturas van indicadas en kelvin

$$LMTD = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln \frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}} = \frac{(347,78 - 293) - (317,78 - 313)}{\ln \frac{(347,78 - 293)}{(317,78 - 313)}} = 20,5^\circ C$$

2.2.2. Distribución de fluidos y tipo de condensador

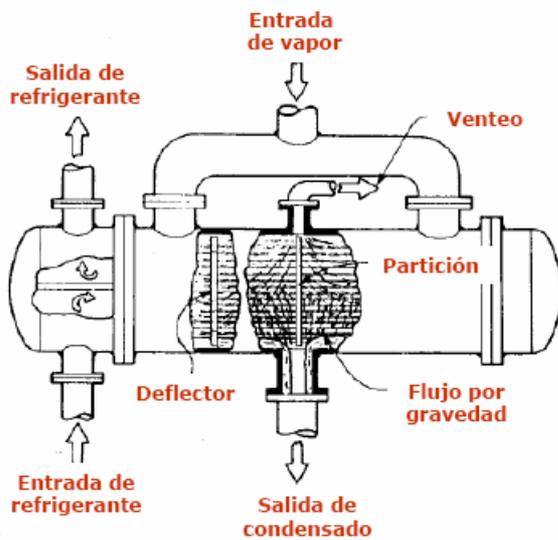
En función de dónde se lleve a cabo la condensación del vapor, si en la carcasa o en los tubos, y de la posición del condensador, horizontal o vertical, podemos distinguir distintos tipos de condensadores:

CONDENSACIÓN EN LA CARCASA:

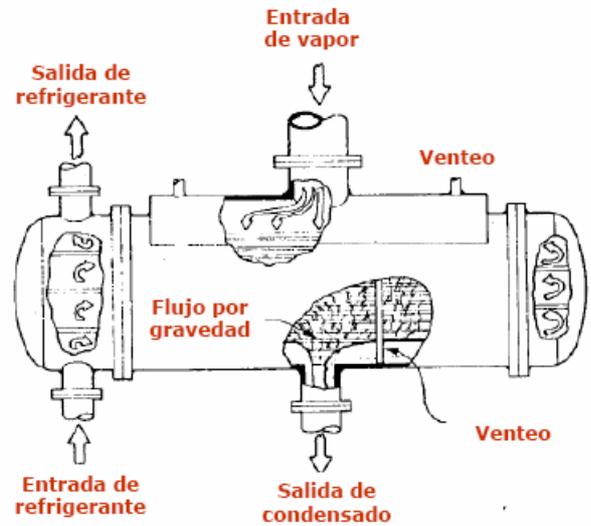


HORIZONTAL TIPO "E"

VERTICAL TIPO "E"



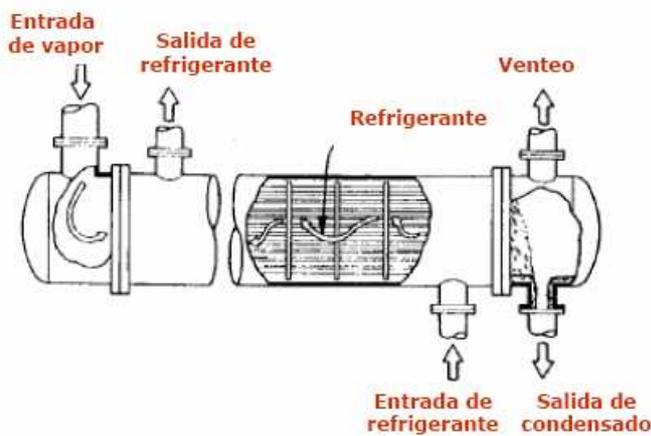
HORIZONTAL DE FLUJO DIVIDIDO (TIPO "J")



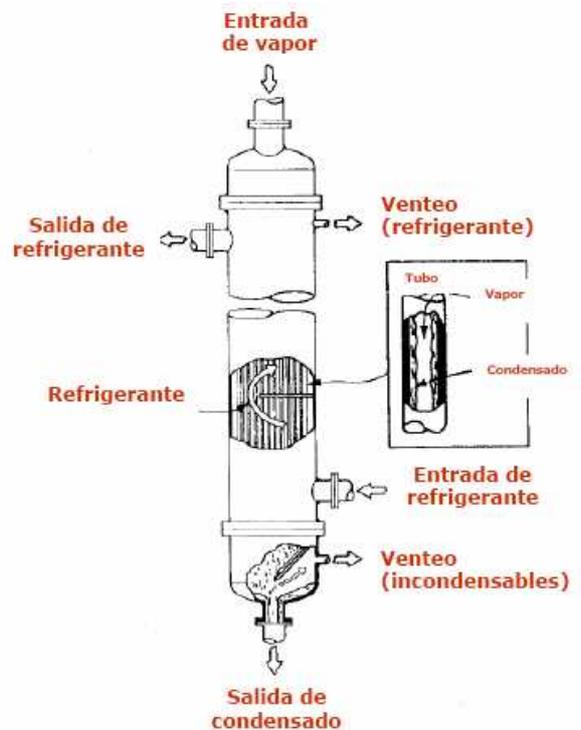
HORIZONTAL DE FLUJO CRUZADO (TIPO "X")

Figura 2.15. Tipos de condensadores con condensación en la carcasa

CONDENSACIÓN EN LOS TUBOS:



HORIZONTAL TIPO "E"



VERTICAL TIPO "E"

Figura 2.16. Tipos de condensadores con condensación en los tubos



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 condensado y/o gases inertes	La orientación horizontal facilita la limpieza mecánica
	Horizontal tipo J	Como el tipo E pero más apto cuando hay limitaciones en ΔP en 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 está en ebullición (p.ej: vapor) o si se necesita subenfriamiento	Algo más caro por la necesidad de un soporte estructural más complejo	Operación más estable por un mejor drenaje y venteo que el horizontal	La limpieza mecánica se hace más compleja requiriendo casi siempre limpieza mecánica
Condensación en tubos	Horizontal tipo E	Preferible si la condensación tiene lugar en régimen de fuerzas de corte (alto caudal)	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. Más flexible en cuanto a regímenes de flujo	Algo más caro por la necesidad de un soporte estructural más complejo	Operación más estable	La limpieza mecánica se hace más compleja requiriendo casi siempre limpieza química

Tabla 2.17. Características de los distintos tipos de condensador

	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

Figura 2.18. Criterios de selección para los distintos tipos de condensador

En nuestro caso, dado que se trabaja con un coeficiente global de transmisión del calor no muy alto y un refrigerante limpio, sin presencia de incondensables ni necesidad de subenfriamiento, se ha escogido un condensador vertical tipo E, con condensación en los tubos.

Conocidos los datos del área disponible, LMTD y Q antes mencionados, se calcula el área disponible, con la cual se podrá determinar posteriormente el número de tubos del condensador.



$$A_{disponible} = \frac{Q}{U \cdot LMTD} = \frac{3,131 \cdot 10^6 W}{500 W/m^2 \cdot ^\circ C \cdot 20,5^\circ C} = 305,44 m^2$$

y el número de tubos es función del anterior área mediante la siguiente expresión, debiendo tomarse los valores tabulados en los anexos, siempre por exceso:

$$A_{disponible} = \frac{\pi D_0 L N_t}{N_p}$$

En la siguiente tabla se resumen todos datos necesarios para el diseño, así como los parámetros escogidos.

Parámetro/Variable	Valor
Tipo condensador	Vertical tipo E, con condensación en los tubos
Material	Acero al carbono
Q	3,131 MW
Coefficiente global de transmisión del calor, U	500 W/m ² ·°C
LMTD	20,5 °C
Área disponible	305,44 m ²
Número de tubos (N _t)	1421
Diámetro de la carcasa (D _s)	45" = 1,143 m
Longitud del tubo (L _t)	24 ft = 7,3152 m
Diámetro exterior del tubo (D ₀)	3/4" = 0,01905 m
Espaciado entre tubos (P)	0,0238125 m
Arreglo	Cuadrado 90°
Espaciado entre deflectores	1,143 m
Corte deflectores	0,28575
Espesor del tubo (x _w)	14 BWG = 0,00211 m

Tabla 2.19. Variables del diseño del condensador

El valor tomado para el coeficiente global de transmisión del calor, U, el diámetro de la carcasa (D_s) y el resto de variables de diseño han sido sacadas de las tablas del anexo 3.

2.2.3. Coeficiente individual de transmisión de calor, lado tubos (h_i)

En la condensación, el calor transferido desde el vapor al condensado se descompone en dos contribuciones, una debido al calor desprendido por el cambio de fase (calor latente), y otra debido al aumento/descenso de la temperatura del fluido (calor sensible). De este modo:

$$\left(\begin{array}{c} \text{calor transferido} \\ \text{vapor} \rightarrow \text{condensado} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{calor} \\ \text{sensible} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{calor} \\ \text{latente} \end{array} \right)$$

En términos matemáticos, el anterior balance puede reescribirse con la siguiente expresión:

$$dQ = h_{sV}(T_v - T_c) + \lambda_{vap}k_{AG}(P_{AV} - P_{AC}) + h_{CF}(T_C - T_W)$$

El cálculo de h_{sV} se realiza por los métodos habituales para transmisión de calor en fase simple pero h_{CF} requiere correlaciones especiales pues su valor depende de si la condensación es en el interior o en el exterior de los tubos y de si la orientación es vertical u horizontal.

Por otra parte, en función de las condiciones existentes a cada una de las temperaturas que se dan en el condensador, determinados intervalos operarán bajo el dominio de la fuerza de corte, o bien bajo el de la fuerza gravitatoria.

En el interior de dichos tubos verticales, la distribución de estas fuerzas es la siguiente:

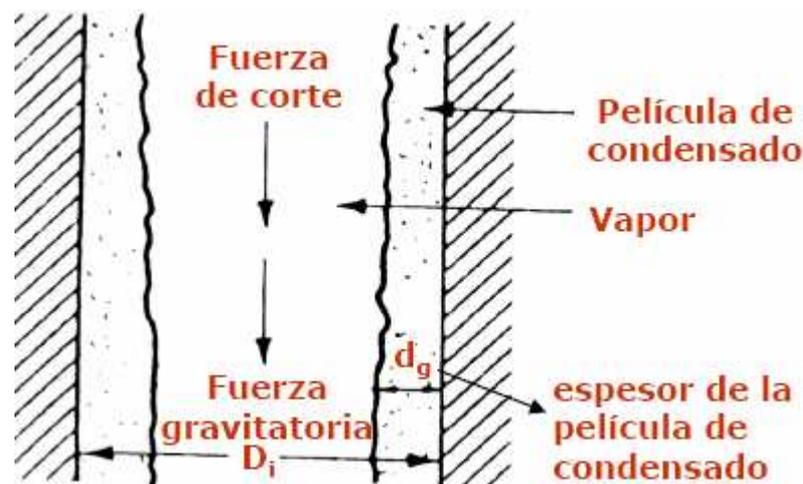


Figura 2.20. Distribución de fuerzas en el interior de tubos verticales

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



$$C_{gt} = \frac{D_i g \rho_v (\rho_L - \rho_v)^{(1-y)/y}}{G_t}$$

siendo:

D_i = diámetro interior de los tubos.

g = constante de aceleración de la gravedad, 9,81 m/s².

ρ_v = densidad del vapor.

ρ_L = densidad del líquido.

y = fracción de vapor.

G_t = caudal másico por unidad de área (kg/m²·s)

Si $C_{gt} < 0,3 \rightarrow$ régimen de corte

Si $C_{gt} > 0,7 \rightarrow$ régimen gravitatorio

Para $0,3 < C_{gt} < 0,7$, h_{cf} queda definido directamente por las ecuaciones:

$$h_{cf} = \eta (h_{cf})_{grav} + (1 - \eta) (h_{cf})_{corte} \quad \eta = 2,5 C_{gt} - 0,75$$

- DOMINIO DE LA FUERZA DE CORTE

$$Nu_c = \frac{h_{cf} D_i}{k_L} = 0.022 Re_G^{0.8} Pr_L^{0.4} F_{tp}$$

$$F_{tp} = \left[1 + \frac{C_{sh}}{\chi} + \frac{1}{\chi^2} \right]^{0.5}$$

$$C_{sh} = 2.75 \left[1 + \frac{2}{\chi^{0.5}} \right] \left[1 - \frac{\rho_v}{\rho_L} \right]^{1.5}$$

$$\chi = \left(\frac{1-y}{y} \right)^{0.9} \left(\frac{\rho_v}{\rho_L} \right)^{0.5} \left(\frac{\mu_L}{\mu_v} \right)^{0.1}$$

(χ = parámetro de Lockhart-Martinelli)



- **DOMINIO DE LA FUERZA GRAVITATORIA**

$$\text{Nu}_C = \frac{h_{cf} d_g}{k_L} = 1.47 \text{Re}_G^{-1/3}$$

$$\text{Re}_G = \frac{4W_t(1-y)}{\pi D_i \mu_L N_t}$$

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

Los resultados obtenidos para cada uno de los intervalos de temperatura se muestran en la tabla siguiente:

T (K)	C _{gt}	Conclusión	h _{cf}	h _{sv}
347,78	0,0000	reg de corte	0,0000	0,0000
342,78	0,4223	valor medio	1735,2118	1052,7949
337,78	0,6270	valor medio	3700,6597	1055,3299
332,78	0,8384	reg grav	3931,8076	1055,3215
327,78	1,1969	reg grav	3446,3167	1051,7078
322,78	2,3224	reg grav	3064,0900	1045,3981
317,78	4,1711	reg grav	2992,5699	1039,6058

Tabla 2.21. Valores de C_{gt}, h_{cf} y h_{sv} para cada intervalo de temperatura.

h_{sv} se ha calculado con la ecuación de Sieder-Tate:

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

$$\text{Pr} = \text{número de Prandtl} \rightarrow \text{Pr} = \frac{\mu \cdot Cp}{k}$$

A partir de aquí:

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



donde Φ_d es el factor de difusión, que se calcula con el método de Ward y Bell, que en nuestro caso consta de:

Interior de tubos. Vertical:

- dominio gravitacional: $\phi_d = 0,90 \cdot \phi_{d0}^{0,9}$

- dominio de fuerzas de corte: $\phi_d = 1,20 \cdot \phi_{d0}$

Exterior de tubos. Horizontal y vertical: $\phi_d = 0,658 \cdot \phi_{d0}$

$$\phi_{d0} = \frac{\lambda_{vap}}{yCp_v} \left(\frac{\Delta y}{\Delta T_v} \right) + \frac{Cp_L}{Cp_v} \left(\frac{1-y}{y} \right)$$

2.2.4. Coeficiente individual de transmisión de calor, lado carcasa (h_o)

En el caso de la carcasa, el fluido refrigerante es el agua, que se introduce a 20°C y sale a 40°C. Con esta imposición, se lleva a cabo una iteración para determinar qué caudal de líquido es capaz de absorber del vapor todo el calor necesario para que se lleve a cabo la condensación, teniendo en cuenta que para cada intervalo de temperatura:

$$\Delta Q = m_{Ref} \cdot Cp_{Ref} \cdot \Delta T_{Ref}$$

$$(Q_{n+1} - Q_n) = m_{Ref} \cdot Cp_{Ref} \cdot (T_{Ref_{n+1}} - T_{Ref_n})$$

$$T_{Ref_{n+1}} = T_{Ref_n} + \frac{(Q_{n+1} - Q_n)}{m_{Ref} \cdot Cp_{Ref}}$$

Con esto se estima necesario un caudal másico de 37,42 kg/s de agua, llevándose a cabo los cálculos con los valores medios de las propiedades a 20 °C y a 40 °C.

Para calcular el coeficiente individual de transferencia de calor en la carcasa son necesarias las siguientes ecuaciones:

$$\frac{h_c D_e}{k} = 0,36 Re_c^{0,55} Pr^{0,3} \left(\frac{\mu}{\mu_w} \right)^{0,14}$$

$$Re_c = \text{número de Reynolds en la carcasa} \rightarrow Re_c = \frac{u_c \rho D_e}{\mu} = \frac{G_c D_e}{\mu} = \frac{W_c D_e}{A_s \mu}$$

$$D_e = \text{diámetro equivalente de la carcasa} \rightarrow D_e (m) = \frac{4 \cdot P^2 - \pi \cdot D_{ot}^2}{\pi \cdot D_{ot}}$$

$$A_s = \text{sección transversal de flujo} \rightarrow A_s (m^2) = \frac{D_e \cdot C_t \cdot L_c}{P}$$

2.2.5. Coeficiente global de transmisión de calor (U)

Una vez ya se han obtenido ambos coeficientes individuales de transferencia de calor, la ecuación para la obtención del coeficiente global es la siguiente:

$$U_0 = \frac{1}{\frac{1}{h_i} \frac{D_{ot}}{D_{it}} + R_i \frac{D_{ot}}{D_{it}} + \frac{x_w}{k_m} \frac{D_{ot}}{D_{mt}} + R_0 + \frac{1}{h_o}}$$

R_i y R_0 son las resistencias de ensuciamiento dentro y fuera del tubo, cuyos valores dependen del tipo de fluido que circule; en este caso se tiene un gas oil ligero en el interior de los tubos y agua tratada por fuera (ver anexo).

x_w = espesor de la pared del tubo.

k_m = conductividad térmica de la pared; como el material usado es acero al carbono, $k_m = 57,1 \text{ kcal/m} \cdot \text{h} \cdot \text{k} = 66,3 \text{ J/m} \cdot \text{s} \cdot \text{k}$.

D_{mt} = media logarítmica de los diámetros exterior e interior del tubo.

$$D_{mt} = \frac{D_{ot} - D_{it}}{\ln \frac{D_{ot}}{D_{it}}}$$

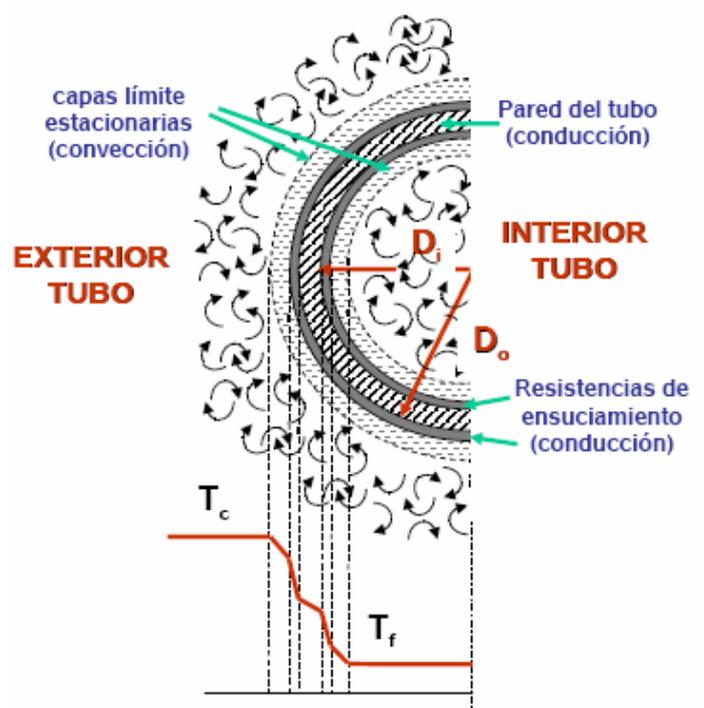


Figura 2.22. Fenómenos ocurridos en el interior y exterior del tubo

2.2.6. Cálculo del área requerida

Como en nuestro caso el vapor a condensar 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 con un método numérico apropiado (en este caso se utilizará el método de trapecios).

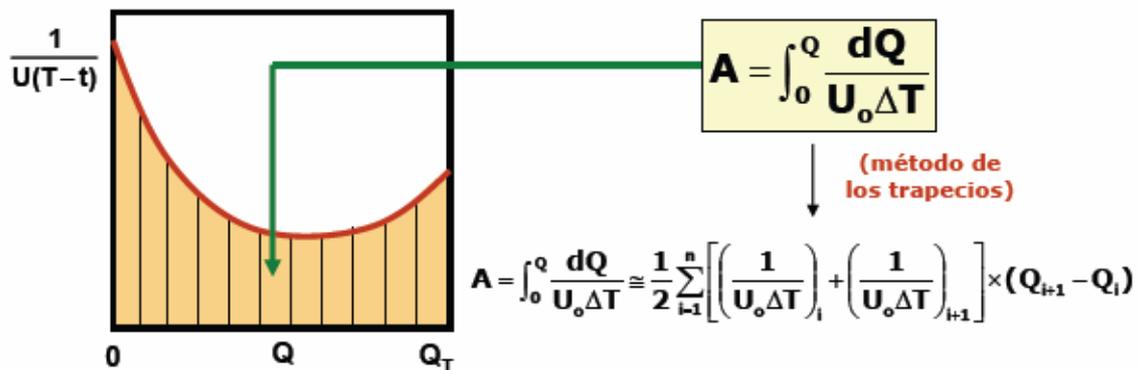


Figura 2.23. Método de los trapecios para el cálculo del área requerida.

Utilizando este método para cada uno de los intervalos de temperatura queda la siguiente tabla:

Q(MW)	T _v (k)	T _{Ref} (k)	h _i (W/m ² °C)	φd	U _o (W/m ² °C)	1/(U _o ·ΔT)	Areas
0,0000	347,78	293,00	0,0000	0,0000	0,0000	-	-
0,5562	342,78	296,55	1424,0415	5,5085	412,7592	5,241E-05	29,1495
0,9899	337,78	299,32	2617,6793	6,2232	497,1678	5,230E-05	45,4111
1,4331	332,78	302,15	2941,5180	4,2800	510,8901	6,391E-05	51,5125
2,0161	327,78	305,88	2991,6963	7,0566	512,8090	8,904E-05	89,1651
2,8164	322,78	310,99	2958,1069	18,3924	511,5301	1,658E-04	203,9776
3,1309	317,78	313,00	2919,3064	23,3590	510,0243	4,102E-04	181,1473

$$\Sigma = A_{req} = 300,1815 \text{ m}^2$$

Tabla 2.24. Cálculo del área requerida

2.2.7. Evaluación del diseño

Tal y como se indica más arriba en el proceso general de diseño del condensador, el que las variables de diseño estimadas sean o no correctas para unos determinados requerimientos depende de que el sobredimensionamiento, las caídas de presión en la carcasa y los tubos, así como las velocidades de los fluidos, sean correctas:

El sobredimensionamiento se obtiene mediante la relación entre el área disponible y la requerida:

$$S = \left[\frac{A_{disponible} - A_{requerida}}{A_{requerida}} \right] \cdot 100$$

Pérdida de presión en el lado de los tubos: Esta pérdida de presión total es el resultado que se deriva de una pérdida de presión en los tubos y de una pérdida de presión en los retornos.

La expresión para obtener la pérdida de presión en los tubos es:



$$\Delta P_{tubos} = f \cdot \frac{n \cdot L \cdot \rho \cdot u_t^2}{2 \cdot D_{it}}$$

siendo f , un factor de fricción que puede obtenerse a partir de varias ecuaciones en función del tipo de tubo y de las condiciones del flujo. En nuestro caso se ha utilizado la ecuación de Chen:

$$f = \left[-4 \log \left\{ \frac{(\varepsilon/D)}{3,7065} - \frac{5,0452}{Re} \log \left| \frac{(\varepsilon/D)^{1,1098}}{2,8257} + \frac{5,8506}{Re^{0,8981}} \right| \right\} \right]^{-0,5}$$

y u_t es la velocidad en los tubos: $u_t = \frac{G_t}{\rho}$.

Pasamos a hallar la pérdida de presión en los retornos mediante:

$$\Delta P_{retornos} = 1,8 \cdot \frac{n \cdot \rho \cdot u_t^2}{2}$$

Por último, la pérdida de presión total es el resultado de la suma de las dos expresiones anteriores:

$$\Delta P_{total} = \Delta P_{tubos} + \Delta P_{retornos}$$

Por otro lado, la pérdida de presión en la carcasa se obtiene mediante la siguiente ecuación:

$$\Delta P_{carcasa} = f \cdot \frac{\rho \cdot u_t^2 \cdot D_s}{2 \cdot D_e} (N + 1)$$

En este caso, el coeficiente de fricción, f , se ha estimado a partir de Re_t mediante el gráfico de Moody adjunto en los anexos.

En ambos casos se debe calcular la pérdida de presión relativa, tanto en el lado de los tubos como en el de la carcasa, como el cociente entre la pérdida de presión absoluta, y la presión inicial: $\frac{\Delta P}{P_0} \cdot 100$ (%).

Estos cálculos dan como resultado los valores expuestos en la siguiente tabla:

Sobredimensionamiento	1,750411 %
Pérdida de presión en los tubos (ΔP_{tubos})	29821,495 Pa



<i>Pérdida de presión relativa, tubos</i> <i>($\Delta P_{tubos} / P_0$)</i>	4,5279 %
<i>Pérdida de presión en la carcasa</i> <i>($\Delta P_{carcasa}$)</i>	35811,055 Pa
<i>Pérdida de presión relativa, carcasa</i> <i>($\Delta P_{carcasa} / P_0$)</i>	5,4373 %
<i>Velocidad en los tubos (u_t)</i>	2,725 m/s
<i>Velocidad en la carcasa (u_s)</i>	1,364 m/s

Tabla 2.25. Evaluación del diseño del condensador.

Los anteriores valores se encuentran dentro de los límites que configuran un diseño correcto, por lo que los parámetros impuestos son aceptables y el condensador diseñado es válido.

2.3. Diseño del rehervidor (E-102)

En el caso del rehervidor, el diseño es muy parecido al del condensador, teniendo en cuenta que esta vez el fluido entrante es líquido que sale como vapor, sin que se produzca una disminución de la temperatura, sino solamente un cambio de fase. Es por ello por lo que en esta ocasión únicamente se debe tener en cuenta el calor latente de vaporización y no el calor sensible.

El mecanismo de transferencia de calor desde una superficie sumergida hacia la masa de un líquido depende de la diferencia de temperatura entre la superficie caliente y el líquido, y consta de cuatro estados o regímenes:

1. Convección natural: A valores de $\Delta T_b < 10$ °C, cuando el líquido está por debajo de su punto de ebullición, el calor es transferido por convección natural, así, sobre la superficie caliente ocurre una lenta ebullición formándose burbujas de vapor las cuales ascienden a la superficie. El calor se transmite por convección natural hacia la superficie libre del líquido donde se libera formando vapor.
2. Ebullición nucleada: 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 en este régimen.
3. Régimen intermedio: caracterizado por la formación ocasional de una película de vapor que aísla térmicamente la superficie del seno del líquido. Transmisión de calor inestable. Debe evitarse este régimen.

4. Ebullición en película. A grandes valores de ΔT_b se forma una película de vapor prácticamente estática entre la superficie del tubo y el seno del líquido.

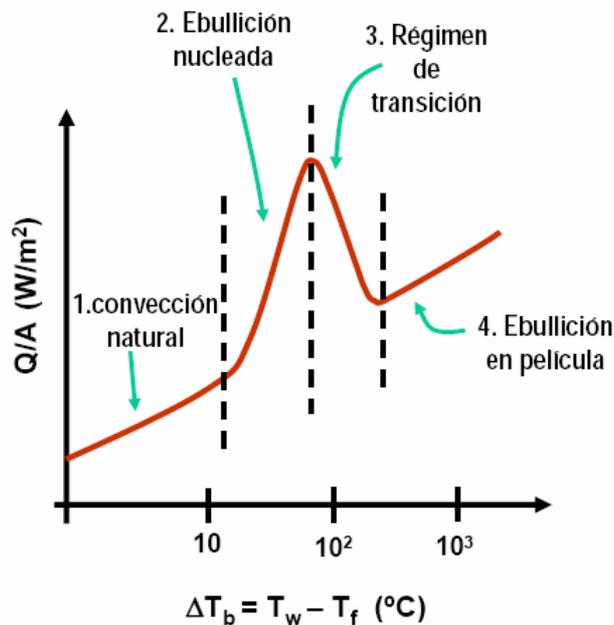


Figura 2.26. Distintos regímenes en la vaporización de un fluido.

Al igual que para el caso del condensador donde la corriente de entrada se correspondía con la que se encontraba en el plato superior de la columna de destilación, en el caso del rehervidor, dado que el calderín se cuenta como una etapa más, la corriente de entrada será la del penúltimo plato, siendo:

Stage #	15	123.83 C	6.69 atm	
		V Mole frac	L Mole frac	Y/X
Propylene		0.00074	0.00006	11.37936
Propane		0.00017	0.00002	10.12343
I-Butane		0.00039	0.00007	5.40103
I-Butene		0.00159	0.00034	4.68131
1,3-Butadiene		0.00809	0.00173	4.67499
N-Butane		0.02456	0.00580	4.23779
Trans-2-Butene		0.00610	0.00155	3.93630
Cis-2-Butene		0.00603	0.00166	3.62738
N-Pentane		0.00060	0.00031	1.89281
Methanol		0.01352	0.00483	2.80064
Water		0.00026	0.00019	1.36633
MTBE		0.89399	0.97367	0.91817
1-Butene		0.04397	0.00977	4.50208
Total kmol/s		0.1340	0.1671	

Figura 2.27. Composición de la corriente en el penúltimo plato de la columna (CHEMCAD)

En este caso el método de diseño es el que se esquematiza en la figura:

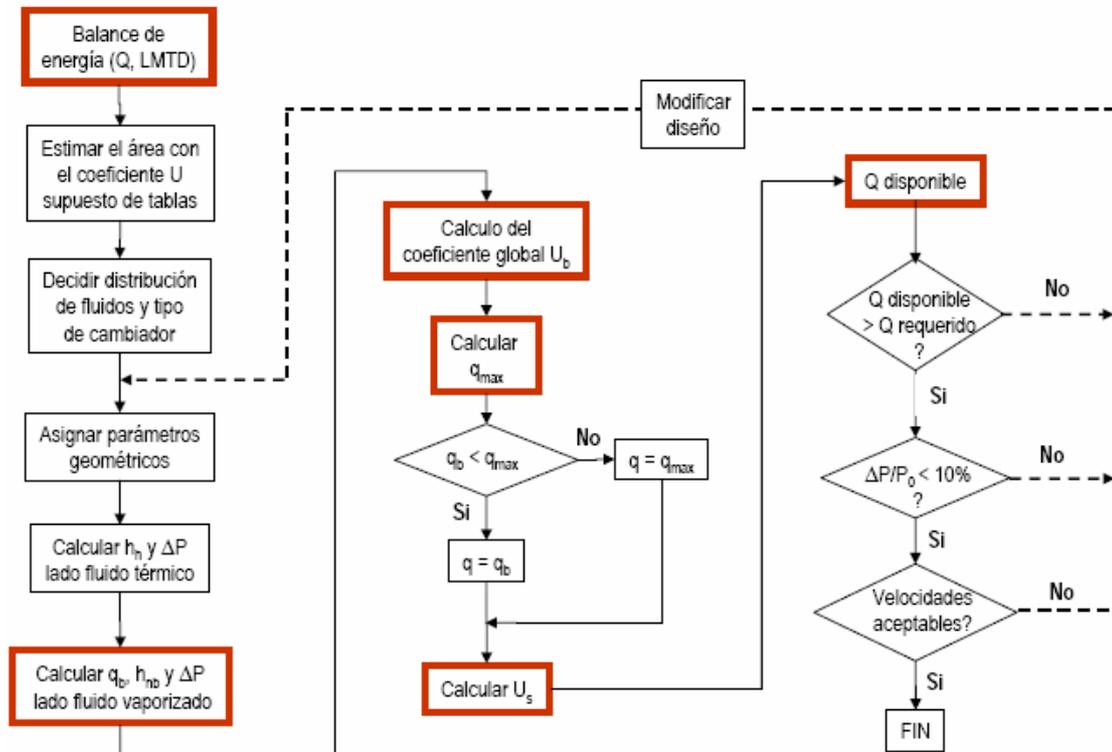


Figura 2.28. Proceso general de diseño para un vaporizador.

2.3.1. Balace de Energía

A fin de simplificar los cálculos, y dado que las fracciones molares del resto de los componentes son muy pequeñas en comparación con la del MTBE, puede considerarse que la corriente del líquido que entra al rehervidor está constituida únicamente por MTBE.

Con esto, al ser un líquido puro, el balance de energía se simplifica en gran medida. El calor que habrá que aportar al líquido para que éste se vaporice es:

$$Q_{requerido} = \lambda_{vap} \cdot V = 2,29 \cdot 10^7 \text{ J/Kmol} \cdot 0,1671 \text{ Kmol/s} = 3,83 \cdot 10^6 \text{ W}$$

Dado que en este caso el fluido térmico debe encontrarse por encima de 123,83 °C, temperatura a la cual el agua no puede operar por encontrarse en estado gaseoso, se usa como fluido térmico el aceite Dowterm A, que se introducirá a 170 °C y deberá salir a 150 °C. Como el MTBE, al encontrarse saturado, no aumenta de temperatura sino que sólo cambia de fase, la LMTD será:

$$LMTD = \frac{(170 - 123,83) - (150 - 123,83)}{\ln \frac{(170 - 123,83)}{(150 - 123,83)}} = 35,23 \text{ °C}$$

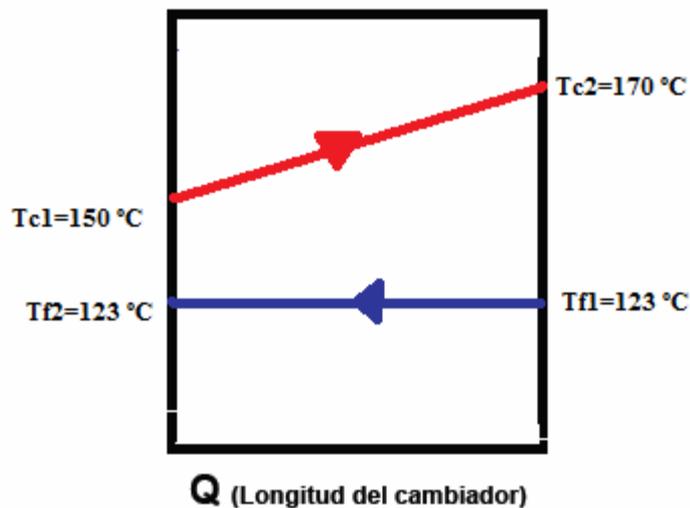
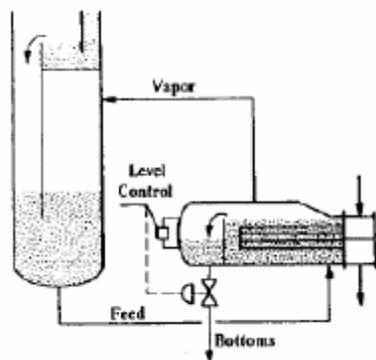


Figura 2.29. LMTD para el rehervidor (contacto en contracorriente)

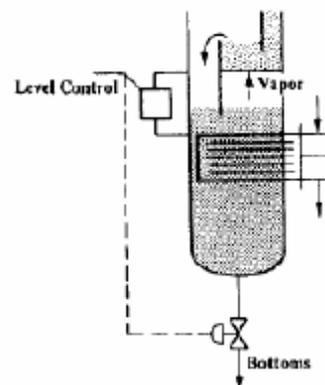
2.3.2. Distribución de fluidos y tipo de vaporizador

Otra vez distinguiremos entre distintos tipos de vaporizadores, en función de las características de los fluidos:

VAPORIZADORES TIPOS



VAPORIZADOR DE MARMITA
("TIPO KETTLE")



VAPORIZADOR INTERNO

Figura 2.30-a) Tipos de vaporizadores

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.

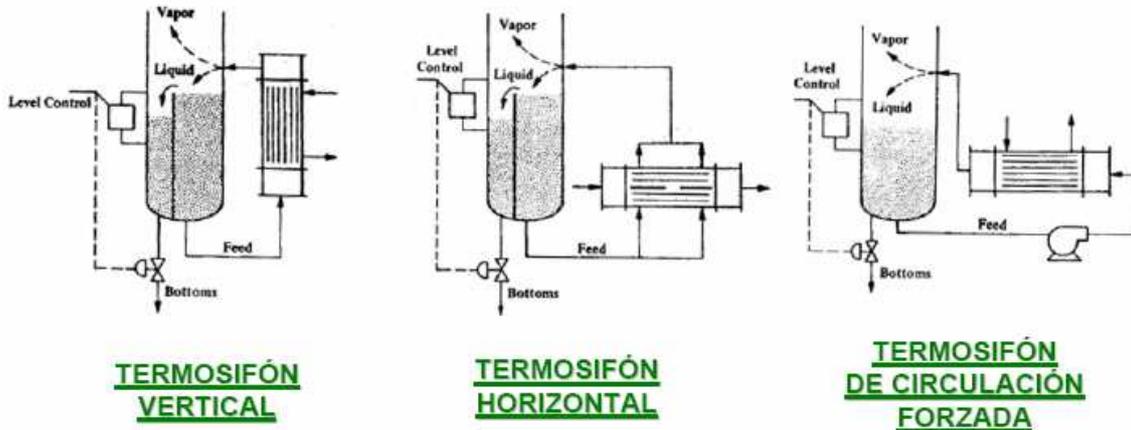


Figura 2.30-b) Tipos de vaporizadores (termosifones)

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 resumen, además, ciertas características de tipo técnico que hacen recomendable uno u otro vaporizador:

Tipo	Transmisión del calor	Coste	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. Insensible a grandes cambios en los caudales y condiciones de proceso	Tiene mayor tendencia al ensuciamiento. No recomendables para servicios sucios
Interno	La limitación en longitud impuesta por el diámetro de la columna limita los flujos obtenibles. Ineficiente para grandes DT. Pueden ponerse dos en paralelo	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 para 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 de 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 de la operación depende del delicado 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 posición vertical. Flujos térmico similares	Más caros que los verticales pues la configuración habitual son las carcasa tipo G, H ó J que requieren una instalación de tuberías y una superestructura más compleja	Menos sensibles a las fluctuaciones en velocidad y cambios de procesos que los verticales, siendo similares 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	Coefficientes 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 2.31. Características técnicas de cada tipo de vaporizador.

Con todo lo dicho, y siguiendo el diagrama siguiente:

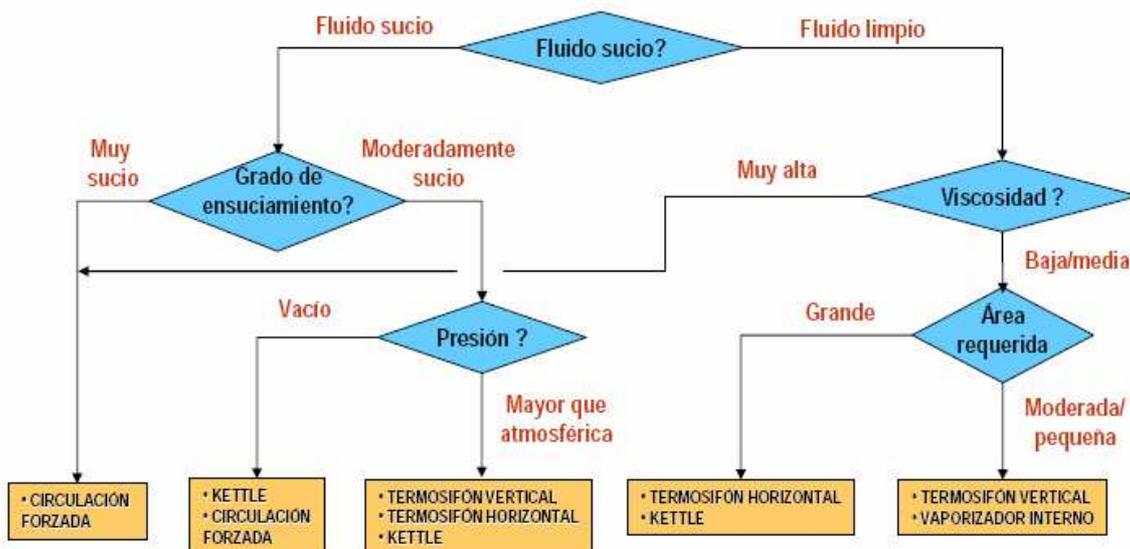


Figura 2.32. Vaporizadores. Criterios de selección.



se escoge finalmente para el diseño un termosifón vertical (vaporización en los tubos) al ser el MTBE un fluido moderadamente sucio y con presión mayor que la atmosférica.

Se puede también determinar el área requerida para el rehervidor, dado que, como ya se ha dicho anteriormente:

$$Q = U \cdot A_{requerida} \cdot LMTD \rightarrow A_{requerida} = \frac{Q}{U \cdot LMTD} = \frac{3,83 \cdot 10^6}{350 \cdot 35,23} = 310,62 \text{ m}^2$$

A continuación se resumen todos aquellos datos requeridos para el diseño:

<i>Parámetro/Variable</i>	<i>Valor</i>
Tipo vaporizador	Termosifón vertical con vaporización en los tubos
Material	Acero al carbono
Q	3,83 MW
Coefficiente global de transmisión del calor, U	350 W/m ² ·°C
LMTD	35,23 °C
Área requerida	310,62 m ²
Número de tubos (N _t)	645
Diámetro de la carcasa (D _s)	35 pulgadas = 0,889 m
Longitud del tubo (L _t)	30 ft = 9,144 m
Diámetro exterior del tubo (D ₀)	1 pulgada = 0,0254 m
Espaciado entre tubos (P)	0,03175 m
Arreglo	Triangular (30°)
Espaciado entre deflectores	0,40005 m
Corte deflectores	0,22225 m
Espesor del tubo (x _w)	14 BWG = 0,00211 m

Tabla 2.33. Variables de diseño del rehervidor

2.3.3. Coeficiente individual de transmisión de calor en los tubos (h_{nb})

Dado que en los vaporizadores se opera en régimen de ebullición nucleada, la mayoría de los diseñadores utilizan para el cálculo del coeficiente de transmisión de calor, la ecuación de Mostinski (1963):



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

$h_{nb,ref}$ = coeficiente de transmisión en ebullición nucleada, a una presión reducida de referencia ($Pr = 0.029$), (W/m^2).

h_{nc} = coeficiente de transmisión de calor por convección natural, (W/m^2).

$$h_{nb,ref} = A^* q_b^{0.7} F_p$$

$$(Nu)_{nc} = \frac{h_{nc} d_0}{k} = 0,53 [Gr \cdot Pr]^{1/4}$$

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

$$Gr = \frac{d_0^3 \rho^2 g \beta \Delta T}{\mu^2} \quad \text{N}^\circ \text{ Grashoff}$$

$$q_b = (A^* F_p)^{3,33} \Delta T^{3,33}$$

$$Pr = \frac{\mu \cdot Cp}{k} \quad \text{N}^\circ \text{ Prandtl}$$

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

P_c = presión crítica (kPa)

d_0 = diámetro exterior de los tubos, (m)

β = coef. de expansión térmica: $0,00274 \text{ K}^{-1}$

$\Delta T = T_w - T_f, (K)$

- **Determinación del coeficiente de expansión térmica (β)**

Como inciso, se indica cómo se ha determinado el coeficiente de expansión térmica para dicho fluido.

El coeficiente de expansión térmica, se mide experimentalmente comparando el valor del volumen total de un cuerpo antes y después de cierto cambio de temperatura y viene dado por la siguiente ecuación matemática:

$$\beta = \frac{1}{V(T)} \frac{\Delta V(T)}{\Delta T} = \frac{d \ln V(T)}{dT}$$

Así pues, se ha conseguido obtener la anterior expresión analítica mediante la representación gráfica de $\ln(1/\rho_L)$ vs T, obteniendo de este modo una recta de ecuación $\ln(1/\rho_L) = 9 \cdot 10^{-6} \cdot T^2 - 0,0044 \cdot T - 6,0074$, la cual tras derivar:

$$\frac{d \ln \left(\frac{1}{\rho_L} \right)}{dT} = 18 \cdot 10^{-6} T - 0,0044$$

permite directamente sustituir el valor de la temperatura a la que se trabaja, en este caso 123,83 K, obteniendo así un valor para $\beta = 0,00274294$.

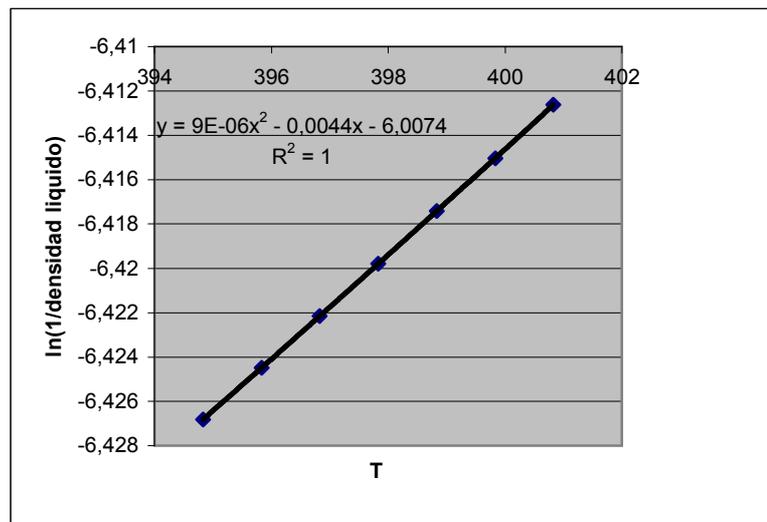


Figura 2.34. Obtención de β . Representación de $\ln(1/\rho_L)$ vs T.

Dicho esto, se continúa con la explicación del cálculo del coeficiente individual de transmisión de calor en el lado de los tubos.

Obtención de q_b

$A = 18,10$

$F_p = 0,98937$

$P_c \text{ (kPa)} = 3430$

$P_{rel} = 0,02900$

$q_b \text{ (W)} = 6,535E+10$

Como puede apreciarse, el cálculo de h_{nb} es un proceso iterativo, ya que requiere el conocimiento de $\Delta T = T_w - T_f$ para el cual hace falta T_w que a su vez solo puede obtenerse con un balance en la interfase de la pared del tubo, que a su vez requiere el conocimiento de h_{nb} , hasta cumplir la siguiente igualdad:

$$h_i (T_{mi} - T_w) = h_{nb} (T_w - T_{m0})$$

$h_{nb, supuesta}$	$T_w \text{ (°C)}$	$T_f \text{ (°C)}$	ΔT	$(h_{nb})_{calc}$	$(h_{nb})_{supuesto} - (h_{nb})_{calc}$
6,66E+08	123,8	25,0	98,83002	6,66E+08	0,000

Una vez calculado h_{nb} para un solo tubo, se debe calcular h_{nb} para todo el haz de tubos, mediante:

$$(h_{nb})_{haz} = 0,714 h_{nb} \left(\frac{P_T - d_0}{0,305} \right)^\alpha \left(\frac{1}{N_{rv}} \right)^\beta$$



$$\left. \begin{aligned} \alpha &= 0,86 \cdot 10^{-5} \left(\frac{\pi d_0 U_1 \Delta T}{\lambda_{\text{vap}} (P_T - d_0)} \right) \\ \beta &= -0,24 \left[1,75 + \ln \left(\frac{1}{N_{rv}} \right) \right] \end{aligned} \right\} N_{rv} = \frac{D_s}{2P_T \cos(\theta/2)} \text{ (arreglo triangular)}$$

h_{nb} = coeficiente de transmisión de calor para un solo tubo, (W/m²·K).

U_1 = coeficiente global de transmisión de calor para un solo tubo, (W/m²·K).

P_T = espaciado entre tubos, (m).

θ = ángulo del arreglo (30°).

λ_{vap} = entalpía de vaporización, (J/Kg).

$$(h_{nb})_{\text{haz}} = 2,62941E+08 \text{ W/m}^2 \cdot \text{k}$$

$$\alpha = 2,00307E-05$$

$$\beta = 0,221694135$$

$$N_{rv} = 14,49386653$$

$$\theta = 30 \text{ grados} = 0,52359878 \text{ rad}$$

2.3.4. Coeficiente individual de transmisión de calor en la carcasa (h_h)

Para determinar el coeficiente individual de transferencia del calor en el lado del fluido térmico (carcasa), se utiliza la misma ecuación que para el caso del condensador, utilizando para el aceite térmico los valores medios de las propiedades a las temperaturas de entrada y de salida del rehervidor.

Por otra parte, el caudal de aceite requerido es también calculado como antes.

$$m = \left(\frac{Q}{C_p \cdot \Delta T} \right) = \frac{3,83 \cdot 10^6}{1962,03 \cdot (20)} = 97,601 \text{ kg/s}$$

Valores medios de las propiedades del Dowterm A

$$\rho(\text{kg/m}^3) = 945,1864$$

$$C_p(\text{J/kg} \cdot \text{K}) = 1962,02835$$

$$\mu(\text{kg/m} \cdot \text{s}) = 0,000537$$

$$K(\text{W/m} \cdot \text{k}) = 0,1163$$

$$\lambda_{\text{atente vap}}(\text{J/kmol}) = 5,661E+07$$

$$Re = 9,938E+04$$

$$Pr = 9,059$$

Comentar que para la determinación de Re ha sido necesario estimar el diámetro equivalente de la carcasa y la sección transversal de flujo, y dado que en este caso se utiliza arreglo triangular y no cuadrado como en el caso del condensador, las fórmulas difieren ligeramente:

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

$$A_s(m^2) = \frac{D_e \cdot C_t \cdot L_c}{144 \cdot P}$$

$$h_h = 2,517 \cdot 10^3 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$$



2.3.5. Coeficiente global de transmisión de calor (U_b)

Una vez calculados los coeficientes individuales de transmisión del calor, tanto para el lado de la carcasa como para el lado de los tubos, se calcula el coeficiente global de transmisión del calor, U_b , utilizando la misma fórmula que en el caso del condensador:

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

$H_{nb,haz}$ = coeficiente del lado del fluido vaporizado, ($W/m^2 \cdot K$).

h_h = coeficiente de lado del fluido térmico, ($W/m^2 \cdot K$).

R_p = resistencia de combinada de la pared y de ensuciamiento, ($m^2 \cdot K/W$).

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

Las resistencias de ensuciamiento, tanto interior como exterior se han sacado otra vez de la tabla adjunta en el anexo correspondiente, tratándose en este caso de un gas oil pesado por los tubos y un aceite vegetal fuera de ellos.

Resistencias de ensuciamiento
$R_i = 0,0007 \text{ m}^2 \cdot ^\circ\text{C} / \text{W}$
$R_0 = 0,0007 \text{ m}^2 \cdot ^\circ\text{C} / \text{W}$

$U_b = 487,63 \text{ W/m}^2 \cdot \text{k}$

2.3.6. Cálculo de q_{max}

En la ebullición nuclear, a medida que la temperatura se eleva, aumenta la velocidad de transferencia de calor hasta que el flujo de calor alcanza un valor crítico. En este punto, la velocidad de generación de vapor es tal que se presentan espontáneamente partes secas sobre la superficie, y la velocidad de transferencia disminuye rápidamente. A altas diferencias de temperatura, la velocidad del vapor es tal que la superficie es cubierta con vapor y el mecanismo de transferencia es por conducción a través de la película del vapor. La conducción llevada a altas diferencias de temperatura se convierte en radiación.

El máximo flujo de calor que puede alcanzarse con ebullición nuclear, es conocido como “flujo crítico de calor”.

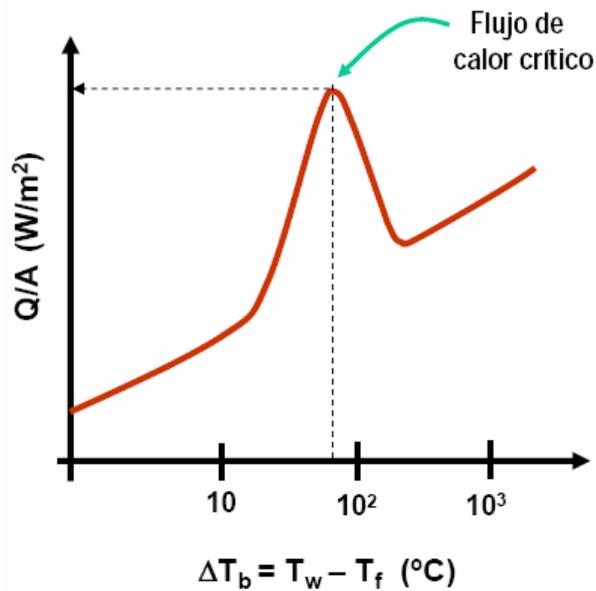


Figura 2.35. Flujo de calor crítico.

Este flujo de calor crítico puede calcularse mediante la ecuación de Lienhard y Dhir (1973):

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

q_{\max} = flujo de calor crítico, un tubo, (W/m²)

ρ_V = densidad del vapor, (kg/m³)

ρ_L = densidad del líquido, (kg/m³)

λ_{vap} = entalpía de vaporización de la mezcla, (J/kg)

g = aceleración de la gravedad (m/s²)

σ = tensión superficial (N/m)

En nuestro caso:

$$q_{\max} = 4,12239 \cdot 10^5 \text{ W/m}^2$$

Como $q_{\max} < q_b \rightarrow q = q_{\max}$

Entonces:

$$Q_{\text{disponible}} = q \cdot A = 4,12239 \cdot 10^5 \text{ W/m}^2 \cdot 310,62 \text{ m}^2$$

$$Q_{\text{disponible}} = 1,28048 \cdot 10^8 \text{ W}$$

$$Q_{\text{requerido}} = 3,83 \cdot 10^6 \text{ W}$$



En el presente caso, dado que el fluido a vaporizar no está subenfriado, y por tanto no se produce disminución de temperatura, sino sólo cambio de fase, no es necesario el cálculo de U_s (ver Figura 2.28), dado que dicho proceso iterativo se utilizaría para contabilizar el calor sensible.

2.3.7. Evaluación del diseño

En comparación con el condensador, la evaluación del diseño utiliza, como puede observarse en el diagrama del proceso, las mismas variables para determinar el correcto funcionamiento o no del vaporizador, a diferencia del sobredimensionamiento:

<i>Pérdida de presión lado fluido vaporizado (ΔP_{tubos})</i>	47,143 Pa
<i>Pérdida de presión relativa, fluido vaporizado ($\Delta P_{tubos} / P_0$)</i>	0,00694 %
<i>Pérdida de presión lado fluido térmico ($\Delta P_{carcasa}$)</i>	1105,123 Pa
<i>Pérdida de presión relativa, fluido térmico ($\Delta P_{carcasa} / P_0$)</i>	0,1628 %
<i>Velocidad en los tubos (u_t)</i>	0,105 m/s
<i>Velocidad en la carcasa (u_s)</i>	3,127 m/s

Tabla 2.36. Evaluación del diseño del condensador.

Todos estos valores son aceptables con los requerimientos del diseño, y el vaporizador descrito es adecuado.

2.4. Diseño del intercambiador (E-103)

Dicho intercambiador de calor es utilizado para reducir la temperatura y la presión de la corriente de fondo de la columna de destilación.

La composición de la corriente entrante será, por tanto, la del líquido que salga del rehervidor, pudiéndose otra vez aproximar ésta a MTBE puro:

Corriente N°	2	7
Descripción	Fondos T-100	MTBE producto
Temperatura (°C)	127,1	30
Presión (atm)	6,7	6,5
Fracción de vapor	0,00	0,00
Entalpía (MJ/h)	-47676,8	-50953,9
Caudal, kmol/h	163,6	163,6

Propileno	0,000	0,000
Propano	0,000	0,000
i-Butano	0,000	0,000
i-Buteno	0,000	0,000
1-Buteno	0,0001	0,0001
1,3-Butadieno	0,0000	0,0000
n-Butano	0,0001	0,0001
trans-2-buteno	0,0000	0,0000
cis-2-buteno	0,0001	0,0001
n-pentano	0,0022	0,0022
Metanol	0,0073	0,0073
Agua	0,0003	0,0003
MTBE	0,9900	0,9900

Tabla 2.37. Corrientes de entrada (2) y salida (7) del vaporizador.

Caudal MTBE = 163,6 kmol/h = 0,04544444 kmol/s = 3,984731139 kg/s

Las corrientes indicadas anteriormente forman parte del balance de materia suministrado en la bibliografía.

El proceso general de diseño esta vez será:

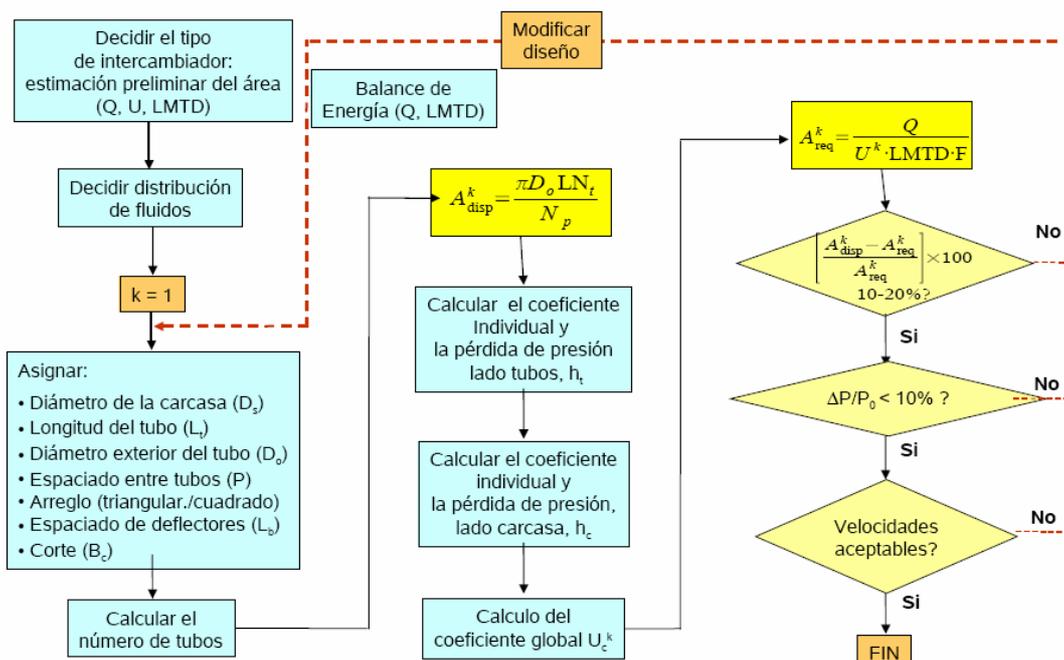


Figura 2.38. Proceso general de diseño del intercambiador E-103.



2.4.1. Balance de Energía

Como en todos los casos anteriores, el balance de energía se lleva a cabo en función del caudal de fluido entrante, el incremento de temperatura que sufre éste, y su capacidad calorífica, siempre usando para las propiedades valores medios en cuanto a su temperatura de entrada y de salida.

$$Q = -913162,431 \text{ W}$$

El signo negativo indica que se produce una pérdida de calor, puesto que el MTBE se enfría en su recorrido a través del intercambiador.

Dicho calor es aportado a la masa de agua de refrigeración, cuyo caudal será, mediante cálculos similares a los del condensador y rehervidor:

$$\text{Caudal agua} = 10,9142994 \text{ kg/s}$$

Las propiedades usadas para el MTBE, así como para el agua de refrigeración son las siguientes:

Corriente nº	2	5	valor medio
T(°C)	127,1	30	
P(atm)	6,7	6,5	
$\rho(\text{kg/m}^3)$	610,4261	729,9609	670,1935
Cp(J/kmol k)	225697,236	188186,159	206941,697
μ (Pa·s)	0,0001414	0,0003186	0,00023
K (W/m·K)	0,0944	0,1263	0,11035

Tabla 2.39. Propiedades usadas para el MTBE (CHEMCAD)

Agua (refrigeración)	entrada	salida	valor medio
T(°C)	20	40	
P(atm)	6,5	6,5	
$\rho(\text{kg/m}^3)$	997,8443	991,9615	994,9029
Cp(J/kg k)	4190,5932	4176,0678	4183,3305
μ (Pa·s)	0,001034	0,0006785	0,00085625
K (W/m·K)	0,599	0,6257	0,61235

Tabla 2.40. Propiedades usadas para el agua de refrigeración (CHEMCAD)

El contacto entre ambos fluidos se lleva a cabo en contracorriente:

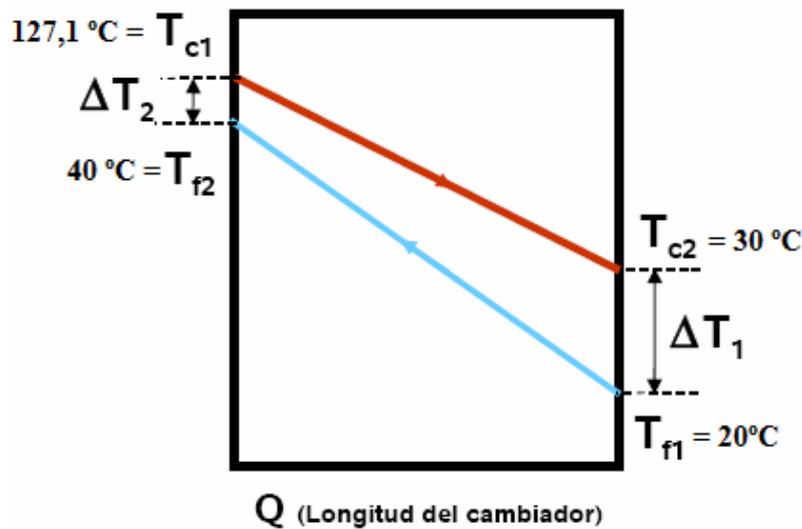


Figura 2.41. Contacto en contracorriente entre el MTBE y el agua.

$$LMTD = 35,62069985 \text{ } ^\circ\text{C}$$

2.4.2. Distribución de fluidos y tipo de intercambiador

Se considera, para llevar a cabo el diseño, que el MTBE circule por los tubos (por ser un fluido sucio) y el agua por la carcasa de un intercambiador de carcasa y tubos, con un coeficiente global, U , comprendido en el rango $200\text{-}900 \text{ W/m}^2\cdot^\circ\text{C}$ (ver tabla en los anexos, agua/compuesto orgánico).

$$U_{\text{supuesta}} = 700 \text{ W/m}^2\cdot^\circ\text{C}$$

Por tanto, en base a los cálculos realizados, se tiene un área preliminar de:

$$A_{\text{disponible}} = \frac{|Q|}{U \cdot LMTD} = 36,6224 \text{ m}^2.$$

y teniendo en cuenta el siguiente esquema:

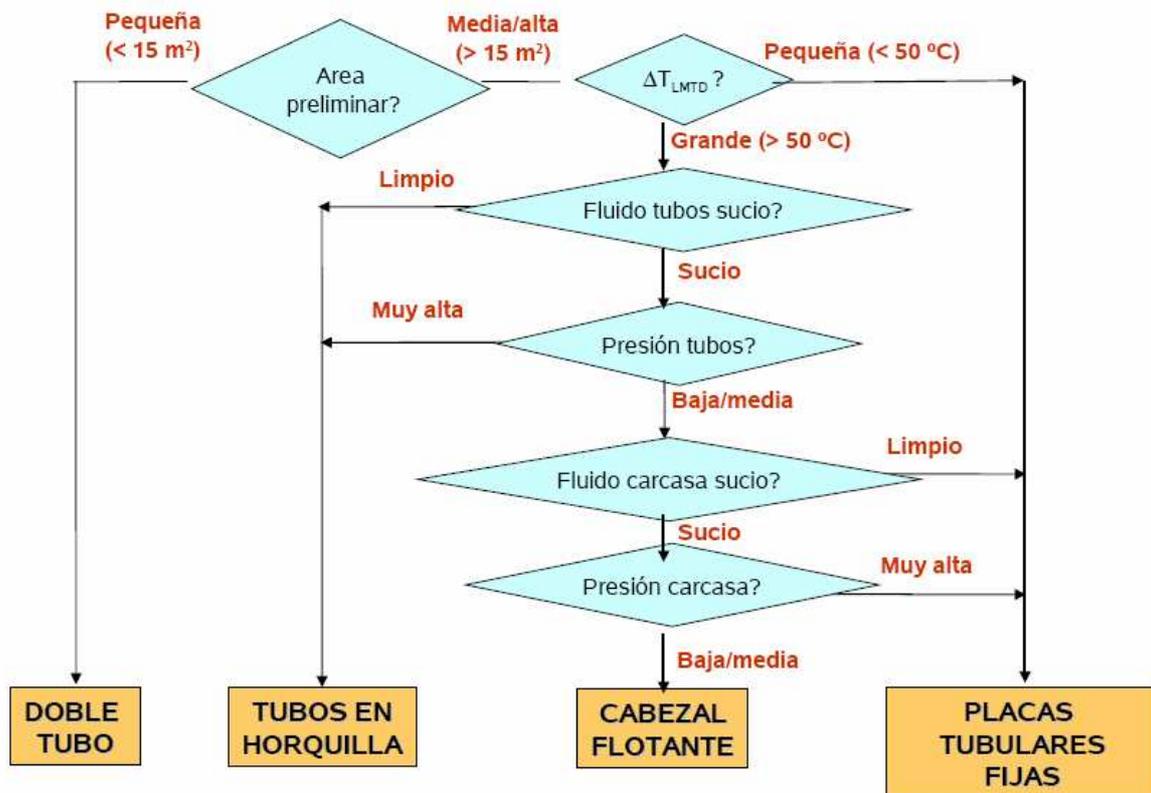


Figura 2.42. Esquema para la elección del tipo de intercambiador.

dato que el área preliminar es mayor que 15 m^2 y la LMTD menor que $50 \text{ }^\circ\text{C}$, se escoge un intercambiador de placas tubulares fijas.

Es necesario indicar también el tipo de cabezal estacionario, carcasa y cabezal de retorno, mediante la clasificación TEMA:

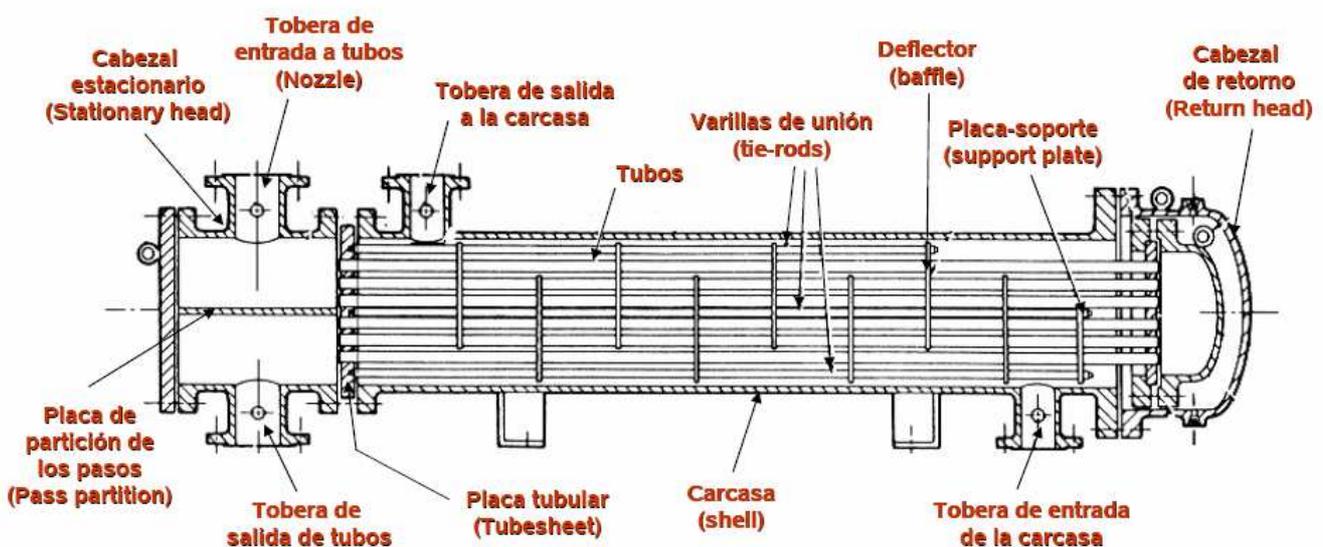
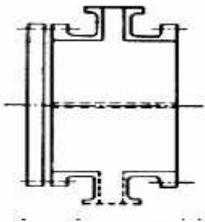


Figura 2.43. Partes de un intercambiador de calor.

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

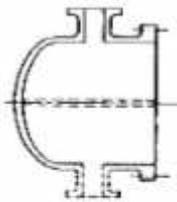
Por ejemplo, un intercambiador tipo BEM tiene un cabezal estacionario tipo B, una carcasa tipo E y un cabezal de retorno tipo M.

- TIPOS DE CABEZALES DE RETORNO



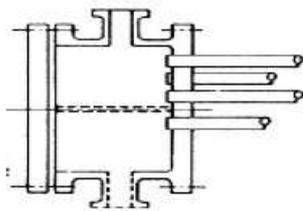
Tipo A
(carrete)

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.



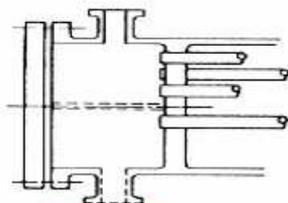
Tipo B
(bonete)

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.



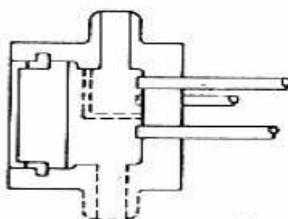
Tipo C

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



Tipo N

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



Tipo D

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).

- TIPOS DE CARCASAS

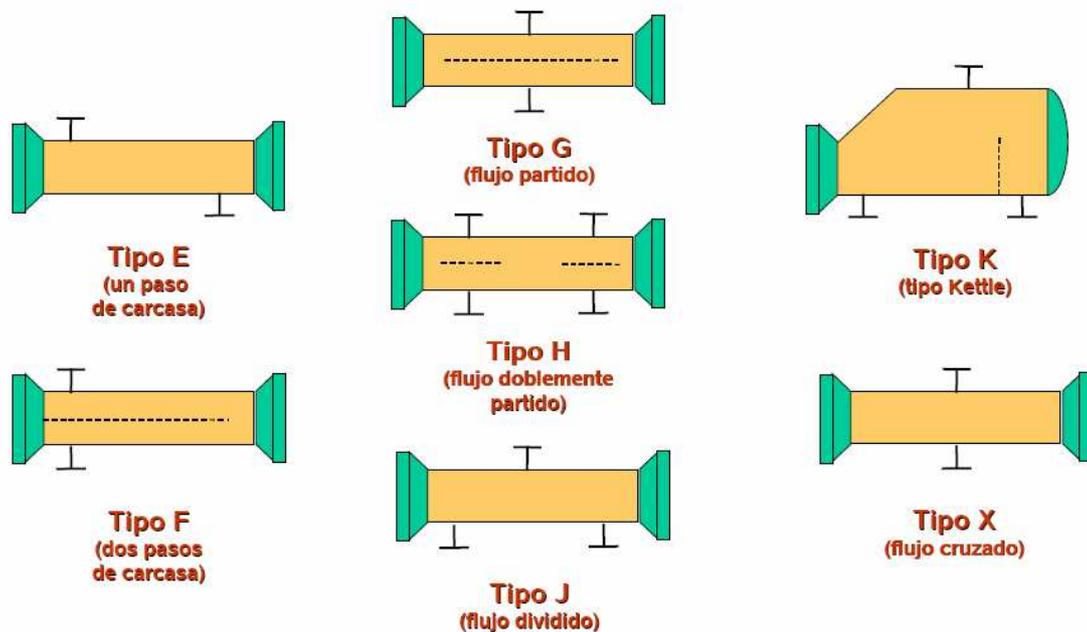


Figura 2.44. Tipos de carcasas en los intercambiadores de calor.

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.

- TIPOS DE CABEZALES DE RETORNO



Figura 2.45. Tipos de cabezales de retorno para intercambiadores de placas tubulares fijas.

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.

Una vez comentados estos tipos de intercambiadores, en la siguiente tabla se resumen la configuración inicial:

<i>Parámetro/Variable</i>	<i>Valor</i>
Distribución de los fluidos	MTBE por tubos y agua por la carcasa
Tipo intercambiador	Intercambiador de placas tubulares fijas, AEL
Material	Acero inoxidable
Q	-913162,431 W
Coefficiente global de transmisión del calor, U	700 W/m ² ·°C



LMTD	35,627 °C
Área disponible	36,6225 m ²
Número de tubos (N _t)	136
Diámetro de la carcasa (D _s)	13,25 pulgadas = 0,33655 m
Longitud del tubo (L _t)	16 ft = 4,8768 m
Diámetro exterior del tubo (D ₀)	0,75 pulgadas = 0,01905 m
Espaciado entre tubos (P)	0,0238125 m
Arreglo	Triangular (30°)
Tipo de deflectores	De varillas
Espaciado entre deflectores	0,1514475 m
Número de deflectores	31,20126 ≈ 31
Corte deflectores	0,0841375 m
Espesor del tubo (x _w)	14 BWG = 0,00211 m

Tabla 2.46. Consideraciones tomadas para el intercambiador (E-103).

2.4.3. Coeficiente individual de transmisión del calor (h_t), y pérdida de presión (ΔP), lado tubos

Otra vez, para se recurre a la ecuación de Sieder-Tate para obtener h_t:

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

y para la caída de presión en los tubos:

$$\Delta P_{\text{tubos}} = f \cdot \frac{n \cdot L \cdot \rho \cdot u_t^2}{2 \cdot D_{it}}$$

$$\text{Re}_t = 1,4874\text{E}+06 > 8000 \rightarrow \text{Régimen Turbulento}$$

$$\text{Pr} = 4,919095798$$

$$h_t = 23926,36539 \text{ W/m}^2 \cdot \text{k}$$

$$\Delta P_{\text{tubos}} = 1,43421\text{E}+04 \text{ Pa}$$

$$f = 0,010064$$

$$u_t = 0,253097421 \text{ m/s}$$



En este caso, el coeficiente de fricción f también se ha obtenido mediante la ecuación de Chen:

$$f = \left[-4 \log \left\{ \frac{\left(\frac{\varepsilon}{D}\right)}{3,7065} - \frac{5,0452}{\text{Re}} \log \left| \frac{\left(\frac{\varepsilon}{D}\right)^{1,1098}}{2,8257} + \frac{5,8506}{\text{Re}^{0,8981}} \right| \right\} \right]^{-0,5}$$

2.4.4. Coeficiente individual de transmisión del calor (h_c), y pérdida de presión (ΔP), lado carcasa

Utilizando también las expresiones explicadas en el condensador y el rehervidor:

$$\begin{aligned} D_e &= 0,013542943 \text{ m} & \text{Re}_c &= 13068,638 \\ A_s &= 0,013209245 \text{ m}^2 & \text{Pr} &= 5,84956 \end{aligned}$$

$$h_0 = 5077,53321 \text{ W/m}^2 \cdot \text{k}$$

$$\begin{aligned} \Delta P_{\text{carcasa}} &= 7,25624\text{E}\cdot 10^3 \text{ Pa} \\ f &= 0,2845 \\ u_s &= 0,830495297 \text{ m/s} \end{aligned}$$

El factor de fricción aquí ha sido obtenido con la gráfica de Moody adjunta en los anexos.

2.4.5. Coeficiente global de transmisión del calor (U) y área requerida

Las resistencias de ensuciamiento utilizadas esta vez, el coeficiente global de transmisión del calor, y el área requerida son:

Gas-oil ligero	→	$R_i = 0,00045$
Agua tratada	→	$R_o = 0,00035$

$$U = 775,2095845 \text{ J / m}^2 \cdot \text{s} \cdot \text{K}$$

$$A_{\text{req}} = 33,06941056 \text{ m}^2$$

2.4.6. Evaluación del diseño

Como en el condensador y en el vaporizador, los resultados del diseño deben validarse mediante ciertos límites en el sobredimensionamiento, las caídas de presión relativas y las velocidades de los fluidos, tanto en los tubos como en la carcasa.

Sobredimens =	10,74422636	%
$\Delta P_{\text{tubos}}/P_o =$	2,112620136	%
$\Delta P_{\text{carcasa}}/P_o =$	1,101746935	%
$u_t =$	0,253097421	m/s
$u_s =$	0,830495297	m/s

Tabla 2.47. Evaluación del diseño del intercambiador E-103

Y como puede observarse en la figura 2.38, los anteriores resultados son aceptables y damos por buena la configuración inicial.

2.5. Diseño de la columna de extracción (T-101)

2.5.1. Determinación del número de etapas

Primeramente se ha simulado con CHEMCAD dicho proceso, utilizando para ello el equipo Liquid/Liquid Extractor (EXTR), en el que se han introducido las corrientes especificadas en el diagrama de flujo, de modo que se ha tanteado el número de etapas necesarias, así como los platos en los que se alimentan dichas corrientes, con el fin de obtener unas corrientes de salida lo más parecidas a las especificadas en el balance de materia:

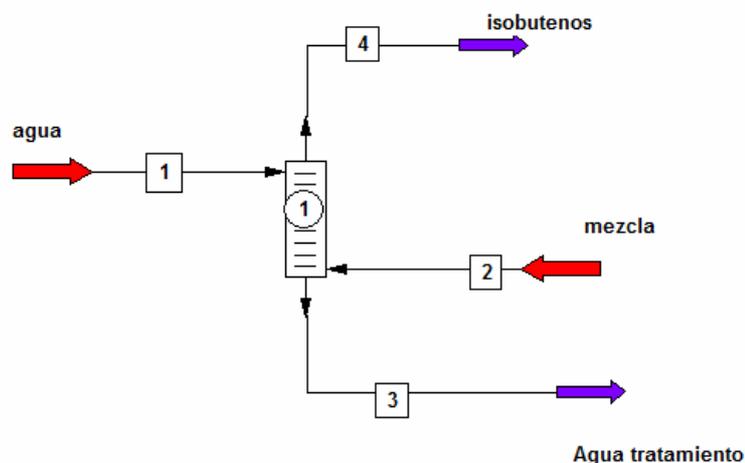


Figura 2.48. Diagrama de flujo de la columna de extracción



Corriente N°	1	2	3	4
Descripción	<i>Alimentación Agua</i>	<i>Mezcla (Destilado T-100)</i>	<i>Agua a tratamiento</i>	<i>Mezcla isobutenos</i>
Temperatura (°C)	40,0	48,3	48,3	44,9
Presión (atm)	6,5	6,5	6,7	6,5
Fracción de vapor	0,00	0,00	0,00	0,00
Entalpía (MJ/h)	-92483,9	-20976,9	-93286,3	-20174,5
Caudal, kmol/h	325,0	450,4	332,6	442,8

Composiciones	Fracción molar			
Propileno	0,000	0,0582	0,0005	0,0588
Propano	0,000	0,0110	0,0001	0,0112
i-Butano	0,000	0,0060	0,0000	0,0061
i-Buteno	0,000	0,0181	0,0001	0,0184
1-Buteno	0,000	0,4686	0,0015	0,4755
1,3-Butadieno	0,000	0,0919	0,0004	0,0932
n-Butano	0,000	0,2210	0,0006	0,2243
trans-2-buteno	0,000	0,0459	0,0001	0,0466
cis-2-buteno	0,000	0,0383	0,0001	0,0388
n-pentano	0,000	0,0000	0,0000	0,000
Metanol	0,000	0,0408	0,0553	0,000
Agua	1,000	0,0000	0,9413	0,0269
MTBE	0,000	0,0001	0,0000	0,0001

Tabla 2.49. Composiciones de cada una de las corrientes de la columna de extracción

Se han introducido las corrientes de alimentación 1 y 2, y se han supuesto 20 etapas, con la alimentación de la corriente 1 en el plato número 1 de la columna, y la alimentación de la corriente 2 en el plato número 4 de ésta.

La presión en cabeza es de 6,5 atm y la caída de presión es de 0,2 atm, obteniéndose unos resultados similares a los requeridos:

FLOW SUMMARIES

Stream No.	1	2	3	4
Stream Name				
Temp C	40.0000	48.3000	48.1554	44.9200
Pres atm	6.5000	6.5000	6.7000	6.5000
Enth MJ/h	-92484.	-20976.	-93289.	-20171.
Vapor mole fraction	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Total kmol/h	325.0000	450.4000	332.5789	442.8211
Component mole fractions				
Propylene	0.000000	0.058206	0.000541	0.058796
Propane	0.000000	0.011001	0.000082	0.011128
I-Butane	0.000000	0.006001	0.000015	0.006092
I-Butene	0.000000	0.018102	0.000064	0.018364
1-Butene	0.000000	0.468647	0.001465	0.475567
1,3-Butadiene	0.000000	0.091909	0.000357	0.093214
N-Butane	0.000000	0.221022	0.000556	0.224388
Trans-2-Butene	0.000000	0.045905	0.000149	0.046578
Cis-2-Butene	0.000000	0.038304	0.000124	0.038866
N-Pentane	0.000000	0.000000	0.000000	0.000000
Methanol	0.000000	0.040804	0.055216	0.000033
Water	1.000000	0.000000	0.941430	0.026874
MTBE	0.000000	0.000100	0.000001	0.000101

Figura 2.50. Resultados obtenidos con CHEMCAD para la columna de extracción



Dado que estos resultados son los esperados, aceptamos los anteriores parámetros y procedemos al diseño de la columna en sí.

2.5.2. Elección del tipo de columna

Habida cuenta de la gran variedad de aplicaciones que posee la extracción líquido-líquido, sería de esperar una gran variedad de equipos para su realización; sin embargo, la mayor parte de éstos, así como los procedimientos de diseño de los mismos, son similares a los utilizados en absorción y destilación:

A partir de las especificaciones del proceso y de los datos termodinámicos se calcula el número de etapas necesarias, para posteriormente obtener la altura de la torre para un proceso de extracción continua en contracorriente a partir de valores experimentales de la HETP o datos de transferencia de materia, que son característicos para un particular tipo de equipo.

Así pues, equipos que podrían ser utilizados para este proceso, así como sus respectivas ventajas e inconvenientes son los tabulados en la siguiente tabla:

Clase de equipo	Ventajas	Inconvenientes
Mezcladores-sedimentadores	<ul style="list-style-type: none"> -Buen contacto -Opera con amplias relaciones de flujo -Baja pérdida de carga -Elevada eficiencia -Disponibilidad de muchas etapas -Cambio de escala fiable 	<ul style="list-style-type: none"> -Gran retención -Elevados costes energéticos -Inversión elevada -Gran espacio de suelo -Puede requerirse bombeo entre las fases
Contactores continuos con flujo en contracorriente (sin impulsión mecánica)	<ul style="list-style-type: none"> -Bajo coste inicial -Bajo coste de operación -Construcción sencilla 	<ul style="list-style-type: none"> -Capacidad limitada para pequeñas diferencias de densidad -Alta pérdida de carga -A veces baja eficiencia -Dificultad de cambio de escala
Contactores continuos con flujo en contracorriente (agitación mecánica)	<ul style="list-style-type: none"> -Buena dispersión -Coste razonable -Posibilidad de muchas etapas -Cambio de escala relativamente fácil 	<ul style="list-style-type: none"> -Capacidad limitada para pequeñas diferencias de densidad -No puede operar con sistemas emulsificantes -No puede operar con elevadas relaciones de flujo
Extractores centrífugos	<ul style="list-style-type: none"> -Opera con pequeñas diferencias de densidad entre las fases -Bajo volumen de retención -Corto tiempo de retención -Necesidad de poco espacio -Baja carga de disolvente 	<ul style="list-style-type: none"> -Elevado coste inicial -Elevado coste de mantenimiento -Número limitado de etapas en una sola unidad

Tabla 2.51. Ventajas e inconvenientes en el uso de quipos para contacto líquido-líquido.

Puesto que las velocidades de transferencia de materia para el contacto líquido-líquido aumentan grandemente cuando hay agitación mecánica, en nuestro diseño utilizaremos este tipo de contactores, algo que, además, soluciona el problema de que en situaciones en las que las diferencias de densidad entre las dos fases líquidas son bajas, las fuerzas de gravedad resultan insuficientes para una adecuada dispersión de las fases y creación de turbulencia. La utilización de agitadores rotatorios accionados por un eje que se extiende axialmente a lo largo de la columna, propicia la aparición de zonas de mezcla que alternan con zonas de sedimentación en la columna.

Existen diferentes tipos de columnas que obedecen a este principio de funcionamiento, de entre las cuales escogeremos el contactor de disco rotativo (RDC), que supone el equipo de mayor aplicación para la extracción líquido-líquido.

La columna RDC consiste en una columna cilíndrica vertical en cuyo estátor se encuentran instalados varios anillos, estando estos anillos deliberadamente fijados, de forma que la columna está compuesta por varios compartimentos. En la mitad de dichos compartimentos se hayan instalados los platos rotatorios, pegados a un eje común, cuyo giro determina el tamaño de las gotas y el cual es movido mediante un motor eléctrico. Los diámetros de los discos del rotor son menores que el diámetro de la abertura del estátor, facilitando así la construcción y mantenimiento, tal y como se ilustra a continuación:

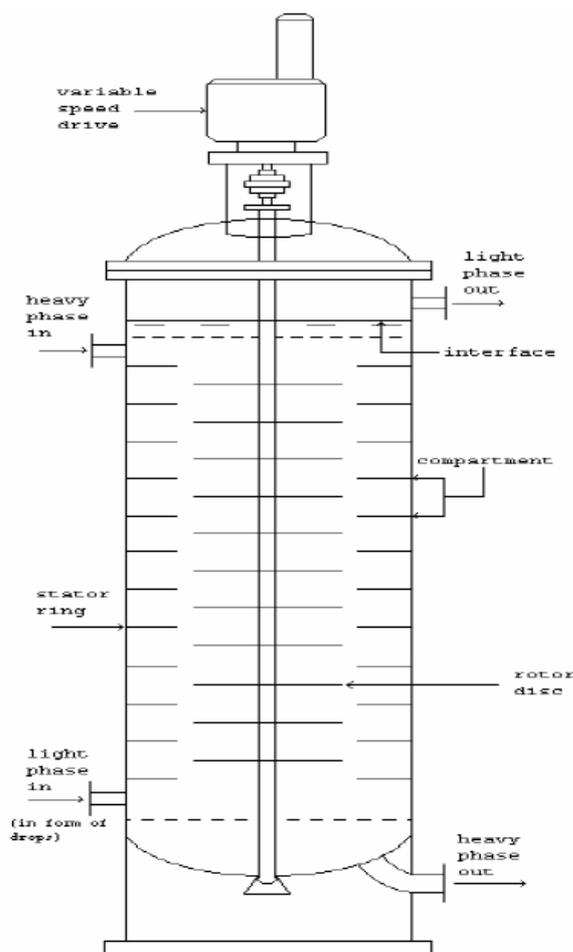


Figura 2.52. Diagrama esquemático de una columna RDC.

2.5.3. Cálculos hidrodinámicos

Debido al mayor número de variables importantes, la estimación de determinados parámetros para los equipos de contacto líquido-líquido puede resultar mucho más compleja e incierta que en el caso de contactores vapor-líquido. Estas variables comprenden las velocidades individuales de flujo de las fases, la diferencia de densidad entre las dos fases, la tensión interfacial, la dirección de la transferencia de materia, la viscosidad y la densidad de la fase continua, la velocidad de rotación y de vibración, y la geometría del compartimento.

No obstante, a continuación se utilizarán modelos simplificados presentes en el libro “Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química”, de Henley y Seader, que permiten la obtención de resultados aceptables de un modo más sencillo.

- **DIÁMETRO DE LA COLUMNA**

El perfil de velocidades para las gotas de líquido de la fase continua y de la fase dispersa que se da en el interior de una columna de extracción toma la forma:

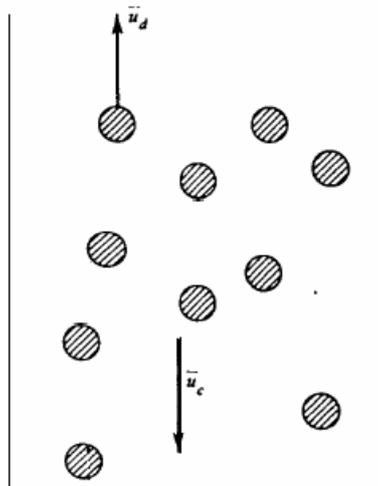


Figura 2.53. Flujos en contracorriente de fases líquidas en una columna

donde u_d y u_c son las velocidades medias reales de las fases continua y dispersa con relación a la pared de la columna y que se calcula a partir de:

$$\bar{u}_d = \frac{U_d}{\phi_d} \quad \text{y} \quad \bar{u}_c = \frac{U_c}{1 - \phi_d}$$

U_d y U_c = velocidades superficiales medias de cada una de las fases.

Φ_d = retención volumétrica fraccional media de la fase dispersa (gotas).

Lógicamente la velocidad media de ascenso de la gota con relación a la fase continua es la suma de las dos ecuaciones anteriores:

$$\bar{u}_r = \frac{U_d}{\phi_d} + \frac{U_c}{1 - \phi_d} = u_0(1 - \phi_d)$$

u_0 es la velocidad de ascenso para una sola gota, constante obtenida a partir de datos experimentales por Gayler, Roberts y Pratt. La ecuación de más arriba es cúbica en Φ_d , con una solución típica para $U_c/u_0 = 0.1$, tal como se muestra en la figura 2.54 de más abajo. Thornton indica que cuando U_c , está fijada, un aumento de U_d da lugar a un aumento de la retención Φ_d hasta que se alcanza el punto de inundación, para el cual $(\partial U_c / \partial \phi_d) = 0$.

Por otra parte, se tiene que para valores dados de la geometría de la columna y de la velocidad de giro del rotor, los datos experimentales de Logsdail para un RDC a escala de laboratorio indican que el grupo adimensional $u_0 \mu_c \rho_c / \sigma \Delta \rho$ es aproximadamente constante, siendo σ la tensión interfacial.

Asimismo, los datos de Reman y Olney y de Strand, Olney y Ackerman para columnas comerciales RDC con diámetros comprendidos entre 8 in. y 42 in., bien diseñadas y manejadas eficazmente, indican que este grupo adimensional tiene un valor de aproximadamente 0,01 para sistemas en los que interviene agua como fase continua o como fase dispersa. Este valor resulta adecuado para el cálculo preliminar del diámetro de columnas RDC, cuando la suma de las velocidades superficiales reales de las fases se toma como un 50% de la suma estimada para las condiciones de inundación.

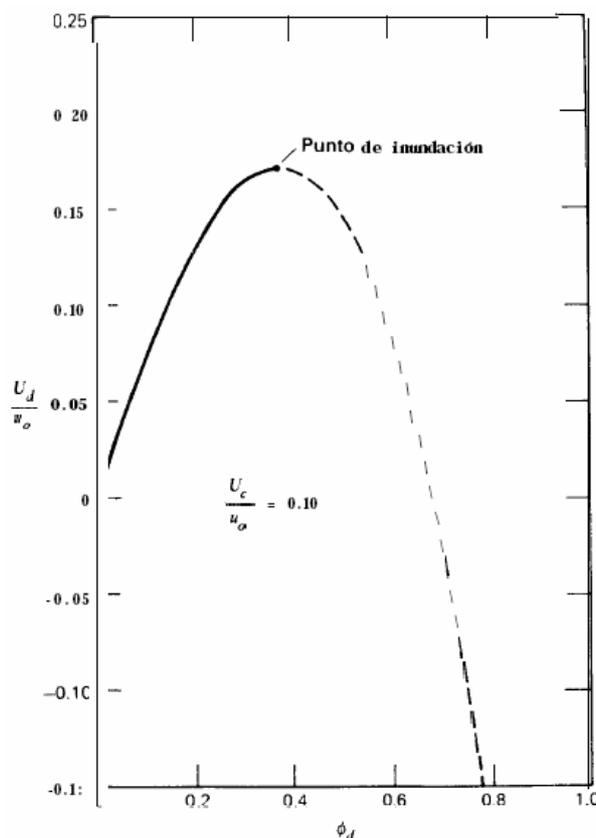


Figura 2.54. Curva típica de retención en una columna de extracción líquido-líquido.

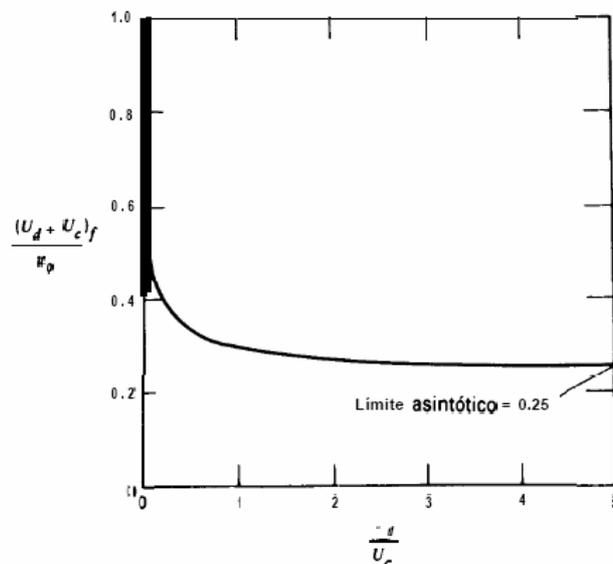


Figura 2.55. Efecto de la relación del flujo de las fases sobre la capacidad total de columnas de extracción líquido-líquido.

Aplicando los anteriores cálculos y diagramas a nuestro caso particular, se calculará el diámetro del RDC requerido para llevar a cabo la extracción del soluto retenido en la corriente de proceso, utilizando como disolvente agua a 40 °C y 6,5 atm de presión.

Los datos requeridos para el cálculo son:

PROPIEDADES AGUA A 40°C Y 6,5 ATM

$$Q_{\text{agua}} = 325 \text{ kmol/h} = 12907,79 \text{ lb/h}$$

$$\mu = 0,0006785 \text{ Pa}\cdot\text{s} = 0,6785 \text{ cp} = 1,417 \cdot 10^{-05} \text{ lbf}\cdot\text{sec}/\text{ft}^2 = 0,68399 \text{ csk}$$

$$\rho = 991,9615 \text{ kg}/\text{m}^3 = 0,9919 \text{ g}/\text{cm}^3$$

$$\sigma = 0,0695 \text{ N}/\text{m} = 0,0048 \text{ lbf}/\text{ft} = 69,4969 \text{ dina}/\text{cm}$$

$$M_{\text{molecular}} = 18,015$$

PROPIEDADES CORRIENTE DE PROCESO A 48,3°C Y 6,5 ATM

$$Q_{\text{destilado}} = 450,4 \text{ kmol/h} = 53953,416 \text{ lb/h}$$

$$\mu = 0,0001235 \text{ Pa}\cdot\text{s} = 0,1235 \text{ cp}$$

$$\rho = 554,66 \text{ kg}/\text{m}^3 = 0,55466 \text{ g}/\text{cm}^3$$

$$\sigma = 0,0092 \text{ N}/\text{m} = 9,1776 \text{ dina}/\text{cm}$$

$$M_{\text{molecular}} = 54,45$$

$$\frac{U_d}{U_c} = \left(\frac{53953,416}{12907,79} \right) \left(\frac{991,9615}{554,66} \right) = 7,475$$

A partir de la figura 2.55, $(U_d + U_c)/u_0 = 0,25$, al encontrarnos en la asíntota. Suponiendo, como ya se ha dicho,



$$\frac{u_0 \mu_c \rho_c}{\sigma \Delta \rho} = 0,01$$

se tiene que:

$$u_0 = \frac{0,01 \cdot 0,0048 \cdot (0,9919 - 0,5547)}{1,417 \cdot 10^{-5} \cdot 0,9919} = 1,493 \text{ ft/s}$$

$$(U_d + U_c) = 0,25 \cdot 1,493 = 0,3733 \text{ ft/s}$$

$$(U_d + U_c)_{50\% \text{ inundación}} = \frac{0,3733}{2} \cdot 3600 = 672,001 \text{ ft/h}$$

$$\text{ft}^3/\text{h}_{\text{total}} = \left(\frac{12907,79 \text{ lb/h}}{0,9919 \text{ g/cm}^3} + \frac{53953,416 \text{ lb/h}}{0,55466 \text{ g/cm}^3} \right) \left(\frac{1 \text{ ft}}{30,48 \text{ cm}} \right)^3 \left(453,59 \text{ g/lb} \right) = 1767,393 \text{ ft}^3/\text{h}$$

$$\text{Área de la sección transversal de la columna} = A = \frac{1767,393}{672,001} = 2,63 \text{ ft}^2$$

$$\text{Diámetro de la columna} = D_C = \sqrt{\frac{4 \cdot A}{\pi}} = \sqrt{\frac{4 \cdot 2,63}{\pi}} = 1,83 \text{ ft} \approx 2 \text{ ft} = 0,6096 \text{ m}$$

- EFICACIA

A pesar de su compartimentación, las columnas de extracción líquido-líquido mecánicamente asistidas, tales como el RDC y la columna de placas vibratorias (RPC), operan más próximamente como contactores diferenciales que como contactores por etapas. Por consiguiente, para tales columnas es más frecuente considerar la eficacia de etapas en términos de la HETP (altura equivalente a una etapa teórica) o como alguna función de los parámetros de transferencia de materia tal como la HTU (altura de una unidad de transferencia).

Aunque desde un punto de vista teórico no es tan correcta como la HTU, se prefiere utilizar la HETP debido a que se puede aplicar directamente para determinar la altura de la columna a partir del número de etapas de equilibrio. Dichos valores de HETP pueden obtenerse realizando experimentos a escala de laboratorio con los sistemas afectados. El cambio de escala de estos valores para columnas de tamaño comercial se realiza suponiendo que la HETP varía de forma inversamente proporcional al diámetro de la columna D_T , elevado a una potencia que puede estar comprendida entre 0,2 y 0,4, dependiendo del sistema.

En nuestro diseño se utilizará la correlación aproximada de la Fig. 2.56, cuyos datos puntuales corresponden esencialmente a los valores mínimos de la HETP obtenidos para unidades RDC y RPC tomando arbitrariamente el exponente un tercio para el diámetro de la columna.

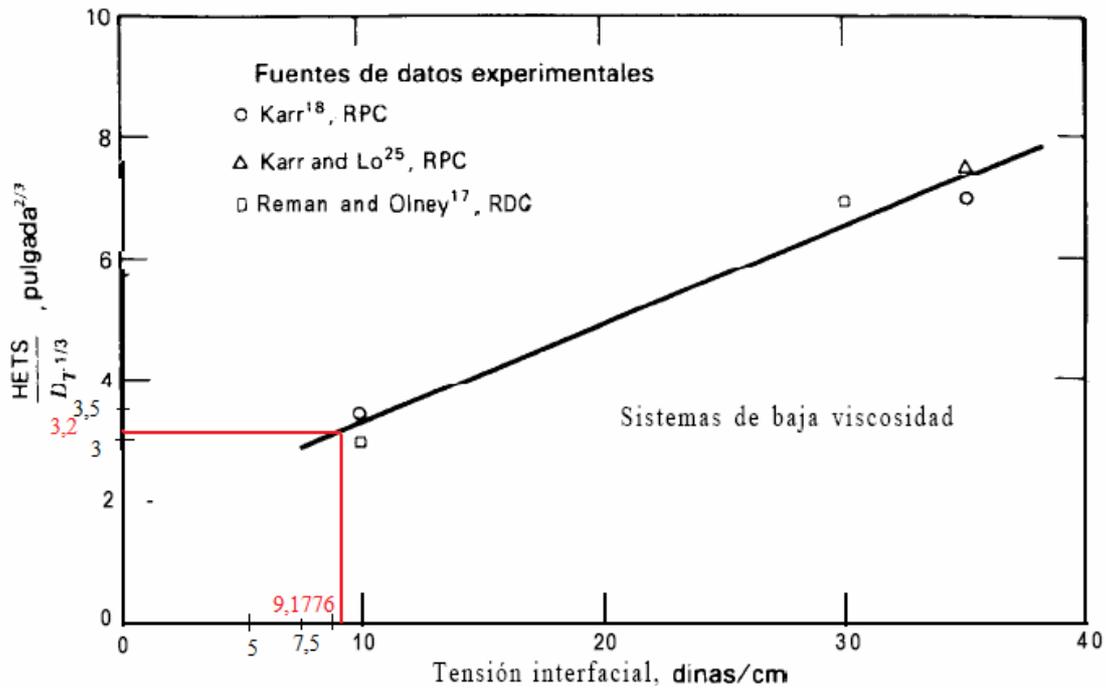


Figura 2.56. Efecto de la tensión interfacial sobre la HETP para unidades RDC y RPC.

$$HETP/D^{1/3} = 3,2$$

Para $D_C = 2$ ft

$$HETP = 3,2[(2)(12)]^{1/3} = 9,2304 \text{ pulgadas}$$

- ALTURA DE LA COLUMNA

A partir de la HETP calculada y el número de platos teóricos obtenidos en la simulación (20), puede estimarse la altura de la columna, ya que:

$$HETP = \frac{h}{N_{etapas}} \Rightarrow h = HETP \cdot N_{etapas} = 9,2304 \cdot 20 = 184,61 \text{ pulgadas} = 4,689 \text{ m}$$

- OTROS PARÁMETROS

Por otra parte, se tiene que en el diseño de las columnas RDC, el diámetro del rotor (R), el diámetro del estátor (S), así como la altura de los compartimentos (H), tienen valores standard con respecto al diámetro de la columna; según “The ChemSep Book”, de Kooijman y Taylor:

$$R = 0,6 \cdot D_c = 0,6 \cdot 0,6096 = 0,36576 \text{ m}$$

$$S = 0,7 \cdot D_c = 0,7 \cdot 0,6096 = 0,42672 \text{ m}$$

$$H = 0,1 \cdot D_c = 0,1 \cdot 0,6096 = 0,06096 \text{ m}$$



Dados estos diámetros standard, la velocidad de rotación requerida para los caudales tratados se obtiene mediante:

$$N = \left(\frac{P_i \left(\frac{0,1}{0,6^5} \right)}{D_c^2} \right)^{0,33}$$

donde:

P_i es la potencia requerida por disco (W/m^3), que se calcula: $P_i = \frac{\pi \cdot e}{4C_p}$

$C_p = 0,03$ para $Re > 10^5$. Este valor de Reynolds es el valor al que normalmente operan las columnas RDC, calculándose mediante $Re_d = \rho_d \cdot N \cdot R^2 / \mu_d$.

El resto de las ecuaciones necesarias para determinar N son las siguientes:

$$e = \left(\frac{0,25 \cdot \left(\frac{\sigma}{\rho_c} \right)^{0,6}}{d_p} \right)^{2,5} \quad d_p = 0,5d_{p,max} \quad d_{p,max} = \frac{\sigma}{\rho_c u_m^2}$$

$d_{p,max}$ es el máximo diámetro estable de gota, tomándose finalmente d_p como la mitad de éste. El valor de u_m necesario para su cálculo se estima a partir de la tensión superficial y las densidades de las fases continua (agua) y discontinua (líquido ascendente).

$$u_m = 0,9 \frac{(g\Delta\rho)^{5/21} \sigma^{6/21}}{\rho_c^{10/21} \rho_d^{1/21}}$$

Dadas las anteriores ecuaciones, los resultados de éstas se resumen a continuación:

RESULTADOS OBTENIDOS

$$Re_d = 4,544E \cdot 10^5$$

$$u_m = 0,0478 \text{ m/s}$$

$$d_{p,max} = 4,0528 \text{ mm}$$

$$d_p = 2,0264 \text{ mm}$$

$$e = 0,0048$$

$$P_i = 0,1250$$

$$N = 0,7563 \text{ rad/s}$$



2.6. Diseño mecánico de recipientes a presión

El cálculo mecánico de un recipiente consiste, básicamente, en la determinación de los espesores de las diferentes partes que lo forman, tomando como datos de partida: la forma del equipo, sus dimensiones, el material utilizado, las condiciones de presión temperatura, las cargas debidas al viento y terremoto, peso específico del fluido y la reglamentación, norma o código que debe cumplir el diseño del recipiente.

Para ello se tomará el código americano ASME, que en su sección VIII, divisiones 1 y 2, indica los métodos de cálculo, así como los requisitos mínimos exigidos a los materiales, detalles constructivos y pruebas que deben satisfacer los equipos a presión. Aún solapándose los campos de aplicación de ambas divisiones, en la práctica la división 1 se utiliza para el diseño y construcción de equipos sometidos a vacío, baja, media y alta presión; la división 2 se reserva a los equipos de alta y muy alta presión.

Una vez definida qué normativa se aplicará, queda determinar qué elementos pueden considerarse como recipientes a presión, encuadrándose bajo esta denominación todos aquellos 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, consistiendo en nuestro caso en la columna de destilación y los intercambiadores de calor (en este grupo se encuentran el condensador y el rehervidor).

2.6.1. Aspectos generales de los recipientes a presión

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. En este proyecto, para cada equipo se determinará únicamente el tipo de envolvente, tanto cubierta como cabezales, más apropiados.

2.6.1.1 Envolvente

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.

- CUBIERTA

Las cubiertas pueden ser 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.

- CABEZALES

Los cabezales o fondos son las tapas que cierran la carcasa.

En todos los fondos se realiza la transición de una figura bombeada a una cilíndrica, que es la cubierta; esta línea de transición, denominada justamente línea de tangencia, está sometida a grandes tensiones axiales que se traducen en fuertes tensiones locales, siendo éste el punto más débil del recipiente.

A continuación se comentan los dos tipos más utilizados:

a) Semiesféricos

Semiesférico: Este tipo de cabezales son los más económicos para altas presiones, pudiendo construirse de hasta 3,6 m.

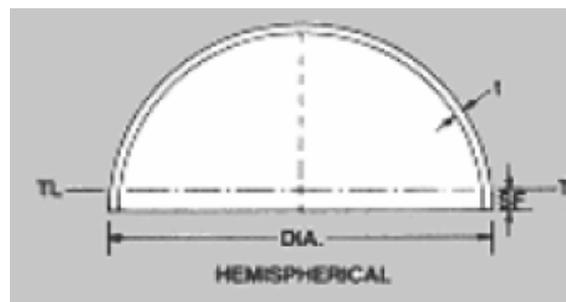


Figura 2.57. Cabezal de tipo semiesférico

b) Elípticos

Elíptico: Los cabezales semiesféricos mayores de 3,6 m, se construyen mediante soldadura de cabezales elípticos, pero esta opción incrementa el coste.

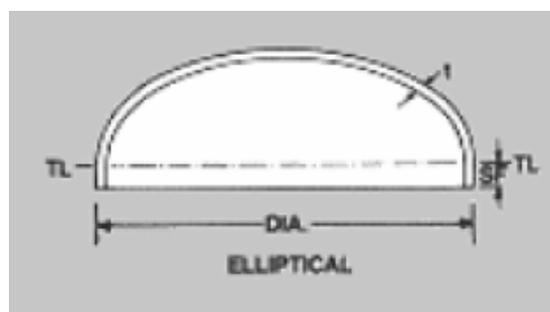


Figura 2.58. Cabezal de tipo elíptico



2.6.2. Datos requeridos para la determinación del espesor (t)

Para calcular el espesor, t (pulgadas), se necesitan conocer las siguientes variables:

- *El material del que está construido:* la elección del material debe atender a dos factores: la resistencia a los esfuerzos y la resistencia a la corrosión.

En cuanto a la resistencia a los esfuerzos, ésta depende de la naturaleza del material y de la temperatura de operación:

T, (°C)	Tipo de material
< 440	acero al carbono
450 - 540	aceros con Mo
540 - 650	aceros Cr-Mo
650 - 820	aceros austeníticos

Figura 2.59. Materiales óptimos dependiendo de la temperatura de operación

Por encima de 820°C deben considerarse recipientes de pared refrigerada o construcción del recipiente en multicapa.

- *La presión interna máxima permisible ($P_{m\acute{a}x}$):* se define como la más baja de las presiones que producirán el esfuerzo máximo permisible sobre cada una de las partes del recipiente. Para su determinación se establece la siguiente relación:

$$P_{max} = 1,25 \cdot (P_{dise\tilde{n}o})$$

- *La presión de diseño, ($P_{dise\tilde{n}o}$, psi):* es la presión utilizada en su diseño, con el fin de determinar el espesor mínimo permisible o las características físicas de sus diversas partes.
- *El radio del recipiente, R (pulg).*
- *La eficiencia de la junta:* (E = 1 soldadura doble radiografiada, E = 0,85 inspeccionada visualmente, E = 0,7 no radiografiada).
- *El parámetro S:* según la norma ASME, indica valores de los esfuerzos máximos admisibles para cada material en función de la temperatura de trabajo.

Código ASTM	Aplicación	Tensión permisible (Código ASME, Sección VIII) en $Kpsi/in^2$, T en °C												
		-30	340	375	400	425	450	480	510	540	560	600	625	650
A-285	Servicio común, baja T	13,7	13,7	13,2	12	10,2	8,3	6,5	-	-	-	-	-	-
A-515	Servicio común, media y alta T	17,5	17,5	16,8	14,7	12	9,2	6,5	4,5	2,5	-	-	-	-
A-387	Resistencia al H_2 y H_2S	13,7	13,7	13,7	13,7	13,7	13,6	13	11	7,5	5	2,8	1,5	1
A-302	Alta resistencia para altas presiones	20	20	20	20	19,1	16,8	13,2	10	6,2	-	-	-	-
A-533		20	20	20	20	19,1	16,8	13,2	10	6,2	-	-	-	-
304	Revestimientos internos y servicios de alta corrosión	18,7	11,2	11	10,8	10,5	10,3	10,1	9,9	9,7	9,5	8,8	7,7	6
316		18,7	11,5	11,3	11,1	11	10,9	10,8	10,7	10,6	10,5	10,3	9,3	7,4
321		18,7	11,1	10,9	10,8	10,7	10,6	10,6	10,5	10,4	9,2	6,9	5	3,6

Figura 2.60. Esfuerzos máximos admisibles dependiendo de las temperaturas de trabajo.



2.6.3. Columna de destilación

La columna de destilación estará fabricada en acero inoxidable 304, siendo sus características representadas en la siguiente tabla:

DATOS	
Material	304
Presión de operación (P_{op} , atm)	6,7
Presión máxima, P_{max} (atm)	8,375
Presión máxima, P_{max} (psi)	123,078
Radio, R (m)	0,762
Radio, R (pulg)	30
Eficiencia de la junta, E	0,85
Esfuerzo máx admisible, S (psi/plg ²)	15207,266

El esfuerzo máximo admisible anterior se ha conseguido interpolando entre las temperaturas inferior (-30 °C) y superior (340 °C) a la temperatura de trabajo. La temperatura de trabajo empleada ha sido la del fondo de la columna (142,31 °C), dado que es mayor que la de la cabeza, y una mayor temperatura supone una situación más desfavorable, puesto que admite un menor esfuerzo máximo admisible.

Obtención de S (kpsi/in²)

T (°C)	-30	340
S (kpsi/in ²)	18,7	11,2

T _{trabajo} (°C) =	142,31
S (kpsi/in ²) =	15,207266

Del mismo modo, se ha considerado para la presión de operación (P_{op}), la presión del fondo, al ser mayor que la de la cabeza, dando así un valor de presión máxima (P_{max}) superior.

Cubierta cilíndrica	
$0,356 \cdot R(m)$	0,2713
$0,665 \cdot S \cdot E$	8595,8866
Espesor, t (pulg)	0,2873
Espesor, t (m)	0,0073

Cabezal semiesférico	
$0,5 \cdot R(m)$	0,3810
$0,385 \cdot S \cdot E$	4976,5659
Espesor t (pulg)	0,1430
Espesor t (m)	0,0036
Espesor t (mm)	3,6312

Las ecuaciones usadas anteriormente son las siguientes:

Cubierta (cilíndrica)

$$t = \frac{PR}{SE - 0.6P} \quad t \leq 0.356R$$

$$P \leq 0.665SE$$

Cabezal (semiesférico)

$$t = \frac{PR}{2SE - 0.2P} \quad t \leq 0.5R$$

$$P \leq 0.385SE$$

2.6.4. Condensador

En cuanto a los elementos y la geometría, los intercambiadores de calor son similares a cualquier otro recipiente a presión, pero en lugar de llamar cubierta al recubrimiento del recipiente, en este caso lo llamaremos carcasa.

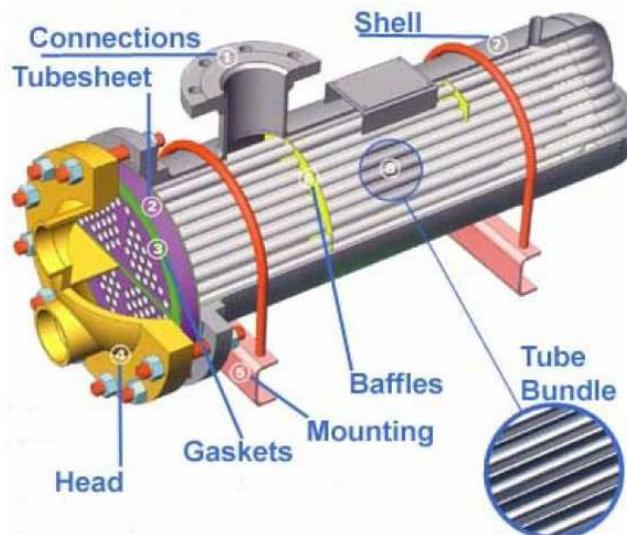


Figura 2.61. Partes de un intercambiador de calor

Se repetirán los mismos cálculos para las condiciones del condensador:

Obtención de S (kpsi/in²)

T (°C)	-30	340
S (kpsi/in ²)	17,5	17,5

T_{trabajo} (°C) = 74,78

S (kpsi/in²) = 17,5

Otra vez se ha utilizado la temperatura más alta de un fluido en el condensador, siendo ésta la temperatura de entrada de los gases al mismo (74,78 °C). Los datos que sabemos sobre dicho condensador, teniendo en cuenta que posee un diámetro de la carcasa (Ds) de 45 pulgadas y está hecho de acero al carbono A-515, son los siguientes:



DATOS	
Material	A-515
Presión de operación (P_{op})	6,5
Presión máxima, P_{max} (atm)	8,125
Presión máxima, P_{max} (psi)	119,404537
Radio, R (m)	0,5715
Radio, R (pulg)	22,5
Eficiencia de la junta, E	0,85
Esfuerzo máx admisible, S (psi/plg ²)	17500

y otra vez los cálculos para la cubierta cilíndrica y el cabezal semiesférico utilizan las mismas ecuaciones

Cubierta cilíndrica	
$0,356 \cdot R$ (m)	0,2035
$0,665 \cdot S \cdot E$	9891,8750
Espesor t (pulg)	0,1815
Espesor t (m)	0,0046

Cabezal semiesférico	
$0,5 \cdot R$ (m)	0,2858
$0,385 \cdot S \cdot E$	5726,8750
Espesor t (pulg)	0,0904
Espesor t (m)	0,0023
Espesor t (mm)	2,2956

2.6.5. Vaporizador

En el caso del vaporizador, el diámetro de la carcasa es de 35 pulgadas y el material de fabricación es también acero al carbono A-515. Para la determinación de la temperatura y la presión de trabajo se han utilizado las mismas consideraciones que antes:

Obtención de S (kpsi/in²)

T (°C)	-30	340
S (kpsi/in ²)	17,5	17,5

T_{trabajo} (°C) = 170
S (kpsi/in²) = 17,5

DATOS	
Material	A-515
Presión de operación (P_{op})	6,7
Presión máxima, P_{max} (atm)	8,375
Presión máxima, P_{max} (psi)	123,078523
Radio, R (m)	0,4445
Radio, R (pulg)	17,5
Eficiencia de la junta, E	0,85
Esfuerzo máx admisible, S (psi/plg ²)	17500



Cubierta cilíndrica	
0,356*R(m)	0,1582
0,665*S*E	9891,8750
Espesor, t (pulg)	0,1455
Espesor, t (m)	0,0037

Cabezal semiesférico	
0,5*R(m)	0,2223
0,385*S*E	5726,8750
Espesor t (pulg)	0,0725
Espesor t (m)	0,0018
Espesor t (mm)	1,8405

2.6.6. Intercambiador de calor

Con $D_s = 13,25$ pulgadas y hecho de acero inoxidable 304, se ha tomado la temperatura y presión de la corriente de entrada de MTBE prácticamente puro, como las condiciones de trabajo.

Obtención de S (kpsi/in²)

T (°C)	-30	340
S (kpsi/in ²)	18,7	11,2

$$T_{\text{trabajo}} (\text{°C}) = 127,1$$

$$S (\text{kpsi/in}^2) = 15,515$$

DATOS	
Material	304
Presión de operación (P_{op})	6,7
Presión máxima, P_{max} (atm)	8,375
Presión máxima, P_{max} (psi)	123,078523
Radio, R (m)	0,168275
Radio, R (pulg)	6,625
Eficiencia de la junta, E	0,85
Esfuerzo máx admisible, S (psi/plg ²)	15515,5405

Cubierta cilíndrica	
0,356*R(m)	0,0599
0,665*S*E	8770,1593
Espesor, t (pulg)	0,0622
Espesor, t (m)	0,0016

Cabezal semiesférico	
0,5*R(m)	0,0841
0,385*S*E	5077,4606
Espesor t (pulg)	0,0309
Espesor t (m)	0,0008
Espesor t (mm)	0,7859

2.7. Hojas de especificaciones técnicas

A continuación se muestran las hojas de especificaciones técnicas para cada uno de los equipos diseñados con anterioridad.



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

		HOJA DE ESPECIFICACIONES:				Item N°		
		COLUMNA DE DESTILACIÓN				T-100		
CLIENTE: REPSOL-YPF Lubricantes y Especialidades S.A.				SOLICITUD N° : 001				
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)				FECHA: 24/09/2008				
SERVICIO DE LA UNIDAD:								
CONDICIONES DE OPERACIÓN								
			ALIMENTACIÓN	DESTILADO	FONDO			
Caudal total		kmol/h	614	450,4	163,6			
Fracción de vapor		(-)	0,53	0	0			
Temperatura de la corriente		°C	70	48,3	127,1			
Presión		atm	6,5	6,5	6,7			
Peso Molecular		kg/kmol	63,31	54,45	87,67			
Densidad		kg/m ³	47,27	554,66	610,43			
Capacidad calorífica		J/kmol·K	99510,26	133137,17	225697,22			
Viscosidad		Pa·s	9,381·10 ⁻⁶	0,0001235	0,0001414			
Conductividad térmica		W/m·K	0,0216	0,0996	0,0944			
CARACTERÍSTICAS TÉCNICAS								
ENVOLVENTE					PLATOS SOPORTE			
Carcasa			Fondos			Unidades		16
Diámetro interno	m	1,524	Tipo	Semiesférico		Tipo		De válvulas
Área sección transversal	m ²	1,824	Radio cúpula	m	0,762	Diámetro perforaciones	Pulg.	1
Altura de la carcasa	m	9,7536	Espesor	pulg.	0,1430	Altura rebosadero	Pulg.	2
Espesor	pulg.	0,2873				Longitud rebosadero	M	0,4941
						Espaciado entre platos	Pulg.	24
						Espesor	Pulg.	0,078
						N° pasos	1	
MATERIALES								
Envolvente	Acero inoxidable 304			Platos soporte		Acero inoxidable 304		
CONSTRUCCIÓN								
Presión de diseño	atm		Inspección taller					
Presión de prueba	atm		Radiografía					
Temperatura de diseño	°C		Prueba hidrostática					
NOTAS								
Departamento de Química Ambiental		N° Rev	Fecha	Revisado por	Comprobado	Aprobado		



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

		HOJA DE ESPECIFICACIONES:				Item N°
		CONDENSADOR				E-101
CLIENTE: REPSOL-YPF Lubricantes y Especialidades S.A.			SOLICITUD N° : 002			
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)			FECHA: 24/09/2008			
SERVICIO DE LA UNIDAD:						
CONDICIONES DE OPERACIÓN						
		TUBOS		CARCASA		
Fluido circundante	(-)	C. DE PROCESO		AGUA		
Caudal total	kmol/h	526,68		7484,37		
Gas	kmol/h	526,68				
Líquido	kmol/h			7484,37		
Temperatura de entrada	°C	74,78		20		
Temperatura de salida	°C	44,78		40		
Presión de operación	atm	6,5		6,5		
Peso Molecular	kg/kmol	59,239		18		
Densidad	kg/m ³	14,774		994,903		
Capacidad calorífica	J/kmol·K	99097,99		75299,87		
Viscosidad	Pa·s	9,1983·10 ⁻⁶		0,00085625		
Conductividad térmica	W/m·K	0,01971		0,61235		
DATOS DE DISEÑO						
Calor intercambiado	MW	3,313	Coef. de transmisión	W/m ² ·K	500	
LMTD	°C	20,5	Área de intercambio	m ²	305,436	
Número de pasos	(-)	1		1		
Velocidad	m/s	2,726		1,364		
Caida de presión	atm	0,2943		0,3534		
Clase TEMA		AEL				
Tubos		Carcasa				
Número	(-)	1421	Diámetro interior	pulg.	45	
Diámetro exterior	pulg.	0,75	Espesor	pulg.	0,1815	
BWG	pulg.	0,0831	Tipo de deflector	(-)	Segmentado	
Longitud	pies	24	Espaciado	pulg.	45	
Pitch (espaciado)	pulg.	0,9375	Corte	%	25	
MATERIALES						
Cabezales	Acero al carbono A-515		Deflectores	Acero al carbono A-515		
Carcasa	Acero al carbono A-515		Toberas			
Tubos	Acero al carbono A-515		Aislamiento			
CONSTRUCCIÓN						
Presión de diseño	atm		Inspección taller			
Presión de prueba	atm		Radiografía			
Temperatura de diseño	°C		Prueba hidrostática			
NOTAS						
La orientación de los tubos es horizontal (condensación en los tubos) y el arreglo es cuadrado						
Departamento de Química Ambiental	N° Rev	Fecha	Revisado por	Comprobado	Aprobado	



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

		HOJA DE ESPECIFICACIONES:				Item N°	
		REHERVIDOR				E-102	
CLIENTE: REPSOL-YPF Lubricantes y Especialidades S.A.				SOLICITUD N° : 003			
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)				FECHA: 24/09/2008			
SERVICIO DE LA UNIDAD:							
CONDICIONES DE OPERACIÓN							
		TUBOS			CARCASA		
Fluido circundante	(-)	C. DE PROCESO			DOWTHERM A		
Caudal total	kmol/h	601,56			2116,655		
Gas	kmol/h						
Líquido	kmol/h	601,56			2116,655		
Temperatura de entrada	°C	123,83			170		
Temperatura de salida	°C	123,83			150		
Presión de operación	atm	6,7			6,7		
Peso Molecular	kg/kmol	88,15			166		
Densidad	kg/m ³	615,3257			945,1864		
Capacidad calorífica	J/kmol·K	225172,22			325696,71		
Viscosidad	Pa·s	0,0001441			0,000537		
Conductividad térmica	W/m·K	0,0954			0,1163		
DATOS DE DISEÑO							
Calor intercambiado	MW	3,83	Coef. de transmisión	W/m ² ·K	487,63		
LMTD	°C	35,229	Área de intercambio	m ²	310,617		
Número de pasos	(-)	1			1		
Velocidad	m/s	0,1053			3,1269		
Caida de presión	atm	0,000465			0,01091		
MATERIALES							
Clase TEMA		AEL					
Tubos		Carcasa					
Número	(-)	645	Diámetro interior	pulg.	35		
Diámetro exterior	pulg.	1	Espesor	pulg.	0,1455		
BWG	pulg.	0,00831	Tipo de deflector	(-)	De varillas		
Longitud	pies	30	Espaciado	pulg.	15,75		
Pitch (espaciado)	pulg.	1,25	Corte	%	25		
CONSTRUCCIÓN							
Presión de diseño	atm				Inspección taller		
Presión de prueba	atm				Radiografía		
Temperatura de diseño	°C				Prueba hidrostática		
NOTAS							
El equipo requerido es un termosifón vertical (vaporización en los tubos) y el arreglo es triangular							
Departamento de Química Ambiental	N° Rev	Fecha	Revisado por	Comprobado	Aprobado		



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

	HOJA DE ESPECIFICACIONES:		Item N°		
	INTERCAMBIADOR DE CALOR		E-103		
CLIENTE: REPSOL-YPF Lubricantes y Especialidades S.A.			SOLICITUD N° : 004		
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)			FECHA: 24/09/2008		
SERVICIO DE LA UNIDAD:					
CONDICIONES DE OPERACIÓN					
		TUBOS		CARCASA	
Fluido circundante	(-)	C. DE PROCESO		AGUA	
Caudal total	kmol/h	163,6		2182,86	
Gas	kmol/h				
Líquido	kmol/h	163,6		2116,655	
Temperatura de entrada	°C	127,1		20	
Temperatura de salida	°C	30		40	
Presión de operación	atm	6,7		6,7	
Peso Molecular	kg/kmol	87,68		18	
Densidad	kg/m ³	670,1935		994,903	
Capacidad calorífica	J/kmol·K	206941,697		75299,95	
Viscosidad	Pa·s	0,00023		0,00085625	
Conductividad térmica	W/m·K	0,11035		0,61235	
DATOS DE DISEÑO					
Calor intercambiado	MW	0,9132	Coef. de transmisión	W/m ² ·K	700
LMTD	°C	35,621	Área de intercambio	m ²	36,62
Número de pasos	(-)	1		1	
Velocidad	m/s	0,2531		0,8305	
Caída de presión	atm	0,14154		0,07161	
MATERIALES					
Clase TEMA		AEL			
Tubos		Carcasa			
Número	(-)	136	Diámetro interior	pulg.	13,25
Diámetro exterior	pulg.	0,75	Espesor	pulg.	0,0622
BWG	pulg.	0,0831	Tipo de deflector	(-)	De varillas
Longitud	pies	16	Espaciado	pulg.	5,9625
Pitch (espaciado)	pulg.	0,9375	Corte	%	25
CONSTRUCCIÓN					
Presión de diseño	atm			Inspección taller	
Presión de prueba	atm			Radiografía	
Temperatura de diseño	°C			Prueba hidrostática	
NOTAS					
El arreglo es triangular					
NOTAS					
El arreglo es triangular					
Departamento de Química Ambiental	N° Rev	Fecha	Revisado por	Comprobado	Aprobado



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

	HOJA DE ESPECIFICACIONES:				Item N°	
	COLUMNA DE EXTRACCIÓN				T-101	
CLIENTE: REPSOL-YPF Lubricantes y Especialidades S.A.				SOLICITUD N° : 005		
PLANTA: Valle de Escombreras (Cartagena)				FECHA: 24/09/2008		
SERVICIO DE LA UNIDAD:						
CONDICIONES DE OPERACIÓN						
		ALIMENTACIÓN (FASE DISCONTÍNUA)		DISOLVENTE (FASE CONTÍNUA)		
Fluido circundante	(-)	C. DE PROCESO		AGUA		
Caudal total	kmol/h	325		450,4		
Líquido	kmol/h	325		450,4		
Temperatura	°C	48,3		40		
Presión de operación	atm	6,5		6,5		
Peso Molecular	kg/kmol	54,45		18,015		
Densidad	kg/m ³	554,66		991,9615		
Viscosidad	Pa·s	0,0001235		0,0006785		
Tensión superficial	N/m	0,0092		0,0695		
CARACTERÍSTICAS TÉCNICAS						
Tipo de columna	Contactor de discos rotatorios (RDC)					
Diámetro de la columna	m	0,6096	Altura de la columna	m	4,689	
Nº etapas teórica	(-)	20	HETP	pulgadas	9,23	
Altura de los compartimentos	m	0,06096	Velocidad de ascenso de una gota (u_0)	m/s	0,4552	
Diámetro del rotor	m	0,36576	Diámetro máximo estable de gota	m	0,004053	
Diámetro del estátor	m	0,42672	Diámetro de gota usado	m	0,002026	
MATERIALES						
CONSTRUCCIÓN						
Presión de diseño	atm		Inspección taller			
Presión de prueba	atm		Radiografía			
Temperatura de diseño	°C		Prueba hidrostática			
NOTAS						
Departamento de Química Ambiental	Nº Rev	Fecha	Revisado por	Comprobado	Aprobado	



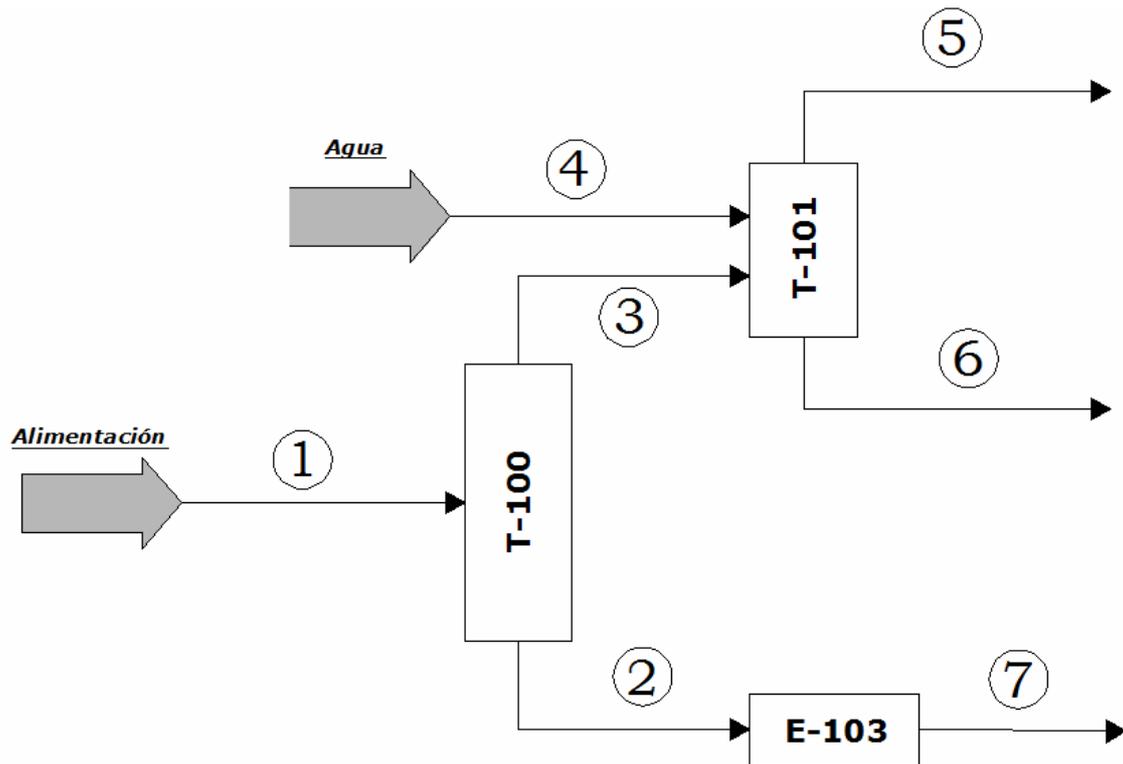
DOCUMENTO 3

PLANOS



3.1. Diagrama de bloques del proceso

El diagrama de bloques del proceso llevado a cabo es el siguiente, indicándose también las corrientes de proceso. El diagrama de flujo que esquematiza se encuentra en la memoria descriptiva.

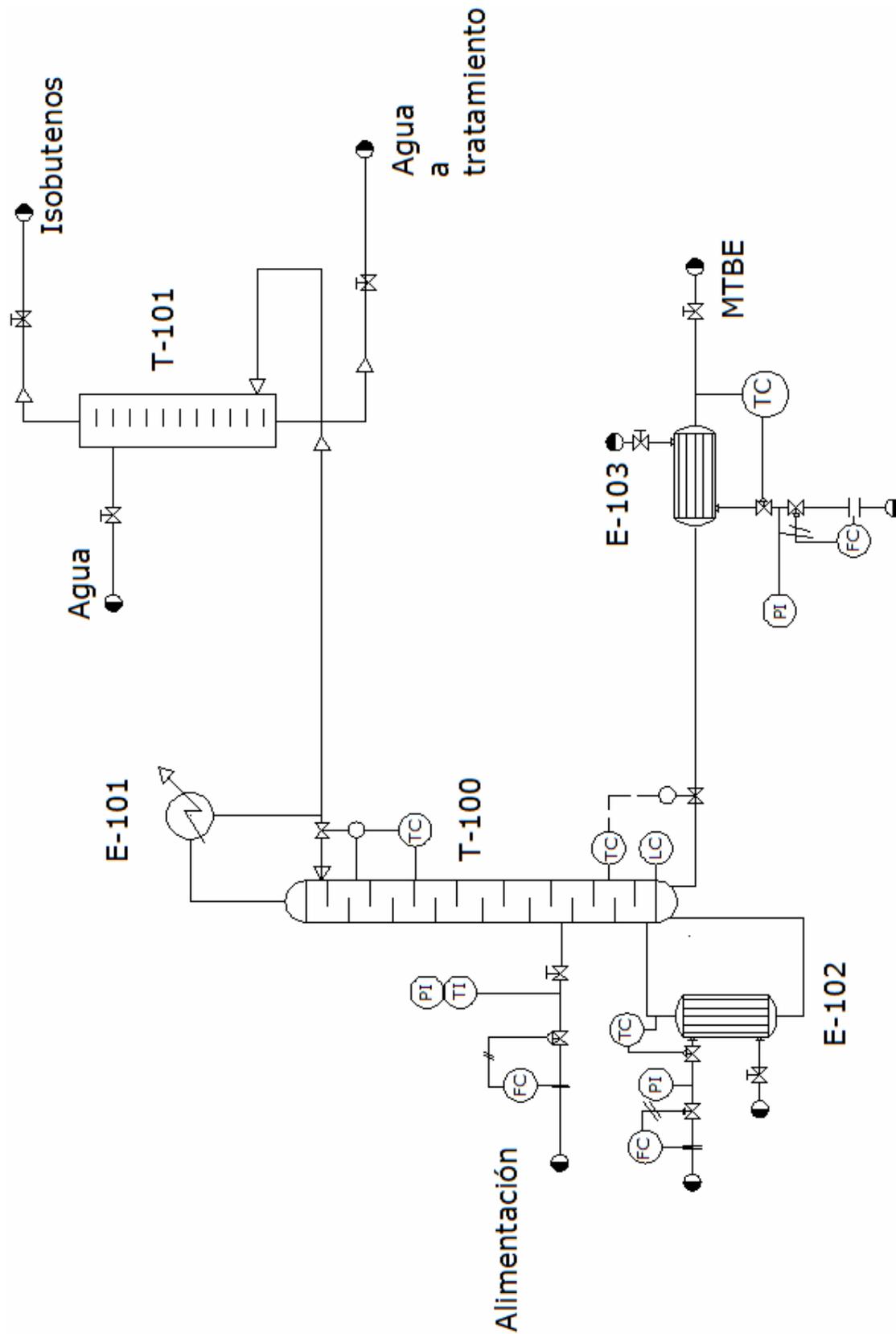


Equipos:

T-101	E-101	E-102	E-103	T-101
Columna de destilación	Condensador	Rehervidor	Intercambiador de calor	Columna de extracción

El condensador y el rehervidor forman parte de la columna de destilación, por lo que no aparecen en el diagrama de bloques.

3.2. Diagrama de tuberías e instrumentos





DOCUMENTO 4

PRESUPUESTO



4.1. Coste de los equipos

Para poder conocer el presupuesto que requerimos para realizar este proyecto, se calculará el coste individual de cada uno de los equipos por separado.

El cálculo del coste de un equipo comprende el cálculo de un coste básico, al que luego se le aplican unos factores de corrección (por material y por presión) y un factor de actualización al año de compra.

4.1.1. Coste base del equipo

El cálculo del coste base (C_p) se realiza teniendo en cuenta que el material de construcción es acero al carbono y que opera a presión atmosférica. Se obtiene mediante correlaciones que son función de una propiedad clave del aparato:

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

K_1 , K_2 y K_3 : Son constantes que dependen del equipo, obtenidas de la bibliografía (“Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes”, autor: R. Turton) y cuyos valores son:

	k_1	k_2	k_3
Carcasa torre destilación	3,4974	0,4485	0,1074
Platos torre destilación	3,3322	0,4838	0,3434
Condensador	4,3247	-0,303	0,1634
Rehervidor	4,3247	-0,303	0,1634
Intercambiador de calor	4,3247	-0,303	0,1634
Carcasa col. de extracción	3,4974	0,4485	0,1074

Tabla 4.1. Valores de K_1 , K_2 y K_3 usados para cada equipo

A: Parámetro clave del equipo. En las columnas de destilación y extracción será el *volumen de la carcasa* y en los intercambiadores el *área de intercambio*.

4.1.2. Factor de corrección por material

La corrección del coste base por efecto del diferente material utilizado en el equipo real (F_M), se obtiene a partir de una figura observando el libro de R. Turton citado anteriormente.



4.1.3. Factor de corrección por presión

La corrección del coste base por efecto de la diferente presión de trabajo (F_p) se obtiene mediante la siguiente fórmula:

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

C_1 , C_2 y C_3 : Son constantes que dependen del equipo obtenidas de la bibliografía, mientras que P se expresa como presión relativa (barg).

Las constantes usadas en los cálculos posteriores son las siguientes:

	C_1	C_2	C_3
Carcasa torre destilación	-	-	-
Platos torre destilación	-	-	-
Condensador	0,03881	-0,11272	0,08183
Rehervidor	0,03881	-0,11272	0,08183
Intercambiador de calor	0,03881	-0,11272	0,08183
Carcasa col.de extracción	-	-	-

Tabla 4.2. Valores de C_1 , C_2 y C_3 usados para cada equipo

Para algunos equipos concretos esta expresión puede tomar otra forma alternativa.

4.1.4. Cálculo del coste de referencia

Se calcula utilizando la siguiente expresión:

$$C_{eq}^0 = C_p (B_1 + B_2 F_M F_P)$$

donde B_1 y B_2 son, para cada caso:

	B_1	B_2
Carcasa torre destilación	2,25	1,82
Platos torre destilación	-	-
Condensador	1,63	1,66
Rehervidor	1,63	1,66
Intercambiador de calor	1,63	1,66
Carcasa col. de extracción	2,25	1,82

Tabla 4.3. Valores de B_1 y B_2 usados para cada equipo



4.1.5. Cálculo del factor de actualización

Cuando el coste base está referenciado a un año distinto del cual queremos calcularlo, hay que obtener un factor de actualización para tener en cuenta el efecto de la inflación.

Existen varios índices de coste para los equipos en la industria química:

1. Índice de Coste de Equipos de Marshall & Swift
2. Índice de Coste de Plantas de Ingeniería Química (CEPCI)

En nuestro caso se utilizará este último, el cual, en función del año toma los valores tabulados a continuación:

Año	CEPCI	Año	CEPCI
1980	261.2	1994	368.1
1981	297	1995	381.1
1982	314	1996	381.7
1983	316.9	1997	386.5
1984	322.7	1998	389.5
1985	325.3	1999	390.6
1986	318.4	2000	394.1
1987	323.8	2001	394.3
1988	342.5	2002	395.6
1989	355.4	2003	402.0
1990	357.6	2004	444.2
1991	361.3	2005	468.2
1992	358.2	2006	499.6
1993	359.2	Sept 07	528.2

Tabla 4.4. Variación del índice CEPCI

4.1.6. Cálculo del coste definitivo del equipo

Las constantes que utilizamos en dicho proyecto se encuentran referidas al año 2001, por lo que, para tener en cuenta el efecto de la inflación en el coste del equipo, usaremos la siguiente expresión:

$$\frac{C_2}{C_1} = \frac{I_2}{I_1}$$



Siendo C_2 e I_2 respectivamente el coste y el índice de coste para el equipo que se pretende estimar en el momento actual, y C_1 e I_1 el coste y el índice de coste respectivamente del equipo del que tenemos la información referida a años anteriores.

4.2. Coste de la columna de destilación

Para calcular el precio de la columna de destilación hay que dividir la columna en dos partes: la primera es la carcasa, y la segunda los platos que están en el interior, calculando los costes de ambos por separado.

4.2.1. Carcasa

El procedimiento para calcular este precio es simplemente aplicar las ecuaciones y constantes antes mencionadas. En primer lugar hay que calcular el volumen del tanque o carcasa (que es el de un cilindro), para lo que será necesario utilizar la altura de la carcasa, dato que se encuentra en el anexo correspondiente a los cálculos hidrodinámicos bajo el nombre de altura neta (Z).

$$Z = 9,7536 \text{ m}$$
$$D_t = 5 \text{ ft} = 1,524 \text{ m}$$

$$V = \frac{\pi \cdot 1,524^2}{4} \cdot 9,7536 = 17,792 \text{ m}^3$$

teniendo en cuenta que este volumen es el parámetro A necesario para obtener el coste base del equipo:

$$\log C_p = 4,226 \rightarrow C_p = 16826,689 \text{ \$}$$

Para la determinación del factor de corrección por material se han consultado las tablas de la bibliografía suministrada, y teniendo en cuenta que el material es acero inoxidable (SS), se escoge $F_{MSS} = 3,1$.

Por otro lado, el factor de corrección por presión, (F_p) se estima en función del espesor de la cubierta, de tal manera que en nuestro caso se considera $F_p = 1$.

Sustituyendo en las ecuaciones correspondientes, con las constantes indicadas:

$$C_{eq}^0 = 132796,226 \text{ \$}$$

Dicho esto, teniendo en cuenta los índices CEPCI de los años 2001 y 2007, el coste definitivo de la carcasa es $C_2 = 132796,226 \cdot \frac{528,2}{394,3} = 177892,383 \text{ \$}$.



4.2.2. Platos

Para saber el coste de los platos de la torre primero tengo que saber el área de un plato, que ya fue calculada en el Anexo 4 como $A_t = 15,927 \text{ ft}^2 = 1,479 \text{ m}^2$. Además, en el caso del factor de corrección por material, se ha utilizado $F_M = 1,83$ (platos de válvulas de acero inoxidable, SS).

Con todo, también hay que tener en cuenta que para los platos el factor de presión toma la forma:

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

donde N es el número de platos, en nuestro caso 14, dado que a los 16 que se obtienen en el diseño se le han descontado el vaporizador y el condensador. Por último, el coste de cada equipo se ha calculado mediante:

$$C_{BM} = C_p N F_M F_q$$

Resultados

$$\log C_p = 3,424$$

$$C_p = 2657,469$$

$$\log F_q = 0,118$$

$$F_q = 1,314$$

$$C_{BM} (\$) = 89440,653$$

$$C_{eq} (\$) = 119813,728$$

El coste total de la columna de destilación es por tanto:

$$C_{columna \text{ dest}} = C_{carcasa} + C_{platos} = 297706,111 \$$$

4.3. Coste de los intercambiadores de calor

Los costes del condensador, rehervidor e intercambiador de calor se han realizado de forma similar, utilizándose las ecuaciones y constantes mencionadas con anterioridad, y teniendo en cuenta que en el caso de los intercambiadores de calor, el parámetro A representa las áreas disponibles calculadas en los cálculos justificativos.



Los resultados obtenidos para cada uno de los tres equipos se tabulan a continuación, indicando asimismo el material del que están hechos, pues F_M depende de él.

Resultados del condensador

A (m²)	305,436
P (barg)	5,573
F_M	1 (CS)
log C_p	4,581
C_p	38083,435
log F_p	0,00026133
F_p	1,00060191
C_{eq}⁰ (\$)	125332,554

C_{eq} (\$) = 167894,129

Resultados del rehervidor

A (m²)	310,617
P (barg)	5,776
F_M	1 (CS)
log C_p	4,584
C_p	38411,680
log F_p	0,00042657
F_p	1,00098271
C_{eq}⁰ (\$)	126437,087

C_{eq} (\$) = 169373,750

Resultados del intercambiador

A (m²)	36,622
P (barg)	5,776
F_M	2,73 (SS)
log C_p	4,250
C_p	17801,129
log F_p	0,00042657
F_p	1,00098271
C_{eq}⁰ (\$)	109766,275

C_{eq} (\$) = 147041,711

4.4. Coste de la columna de extracción

Al igual que en el caso de la columna de destilación, y dado que no se dispone de datos referidos a columnas agitadas mecánicamente, el coste de esta columna se calculará a partir de los costes por separado de la carcasa y del motor eléctrico que propicia la agitación:

4.4.1. Carcasa

Se calculará exactamente igual que para la columna de destilación, siendo el parámetro A el volumen de dicho recipiente:

Resultados de la carcasa de la columna de extracción

V (m³)	1.36856019
P (barg)	5,573
F_M (CS)	1
log C_p	3,56050855



C_p	3635,03459
F_p	1
$C_{eq} (\$)$	14794,59

$C_{eq} (\$) = 19818,67$

4.4.2. Motor eléctrico

Para el cálculo del coste del motor eléctrico los datos de las tablas van estimados en función de un determinado caudal de fluido, el líquido descendente en nuestro caso, siendo dichos valores únicamente válidos para un rango entre 1 y 100 m³/s, valores superiores a nuestro caso. No obstante, se ha usado el programa CAPCOST.

Fans / Blowers	Type	Fluid Flowrate (cubic meters/s)	# Spares	MOC	Pressure Rise Across Fan (barg)	Equipment Cost	Bare Module Cost
F-101	Axial Tube	0.001	1	Carbon Steel	0.16	\$ 2.927	\$ 12.831

Por tanto, el coste de la columna de extracción será la suma de ambos, es decir:

$$12831 + 19818,67 = 32549,68 \$$$

4.5. Coste total de la planta

En base a los resultados obtenidos con anterioridad, a continuación se resumen los costes de cada uno de los equipos y se determina el coste total de la planta:

	Coste individual del equipo (\$)	
	Dólares (\$)	Euros (€)
Columna de destilación	297706,111	201971,58
Rehervidor	169373,75	114907,56
Condensador	167894,13	113903,75
Intercambiador de calor	147041,71	99756,93
Columna de extracción	32549,68	22082,55
Coste total de la planta	814565,381	552622,38

Se ha estimado para el anterior cálculo el precio del dólar a fecha de 22 de septiembre de 2008, siendo la equivalencia de 1 € = 1,474 \$.



ANEXO 1

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES. MODELO TERMODINÁMICO



1.0. Introducción general

Para llevar a cabo el diseño de cada uno de los equipos han sido necesarias diversas propiedades de los fluidos, las cuales, aunque en la mayoría de los casos se han obtenido con CHEMCAD, puesto que la precisión de sus valores es mayor, también se han obtenido mediante cálculos.

En este anexo se comentan las ecuaciones y métodos con los cuales se han calculado dichas propiedades, y se comparan con los resultados obtenidos con CHEMCAD en cada caso.

Las propiedades requeridas en el diseño de cada equipo son:

Propiedad	Reactor	Destilación	Absorción	Extracción	Intercambio de calor	Compresión
Densidad	Si	Si	Si	Si	Si	Si
Capacidad calorífica	Si	Si	No	No	Si	Si
Viscosidad	Si	Si	Si	Si	Si	No
Conductividad	Si	Si	No	No	Si	No
Difusividad	Si	No	Si	Si	No	No
Tensión superficial	No	Si	No	Si	No	No
Coefficiente de fugacidad	Si (*)	Si (*)	Si (*)	Si (*)	No	No
Coefficiente de actividad	Si (*)	Si (*)	Si (*)	Si (*)	No	No
Entalpía	Si	Si	No	No	Si	Si

(*) Depende de las condiciones de operación. Al menos se requiere una estimación puntual para comprobar la desviación de la idealidad

La mayoría de estas propiedades son función de la temperatura, pudiéndose calcular mediante ecuaciones:

Propiedades que son función de la temperatura

- Densidad
- Capacidad calorífica
- Presión de vapor
- Entalpía de vaporización
- Viscosidad
- Conductividad térmica
- Tensión superficial
- Constante de Henry

Número	Fórmula
100	$Y = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$
101	$Y = \text{EXP}(A + B/T + C \ln T + DT^E)$
102	$Y = A \cdot (T^B) / (1 + (C/T) + (D/T^2))$
103	$Y = A + B \cdot \text{EXP}(-C / (T^D))$
104	$Y = A + (B/T) + (C/T^3) + (D/T^8) + (E/T^9)$
105	$Y = A / \{ B \wedge [(1 + (1 - (T / C)^D)] \}$
106	$Y = A \cdot (1 - T_r) \wedge (B + CT_r + DT_r^2 + ET_r^3)$
107	$Y = A + B[(C/T) / \sinh(C/T)]^2 + D[(E/T) / \cosh(E/T)]^2$



Propiedad	Fase	Método recomendado
Densidad	Gases	Ecuación de estado
	Líquidos	Ec. 105 + Amagat
Capacidad calorífica	Gases	Ec. 100 ó 107 + media ponderada
	Líquidos	Ec. 100 + media ponderada
Viscosidad	Gases	Wilke (baja presión) y Lucas (alta y baja presión)
	Líquidos	Ec. 102 + media logarítmica ponderada
Conductividad térmica	Gases	Wassiljieva (baja presión) y Stiel-Thodos (alta presión)
	Líquidos	Ec. 100 + media ponderada
Difusividad	Gases	Fuller-Schetter-Giddings + Blanc (mezcla)
	Líquidos	Wilke-Chang + Perkins-Geankoplis (mezcla)
Tensión superficial		Ec. 106 + media ponderada (líquido-gas) Ec de Jufu (líquido-líquido)

1.1. Capacidad calorífica y entalpía

- Gases

La capacidad calorífica de los gases ideales suele venir tabulada en forma de polinomios del tipo 100:

$$\frac{Cp_i^G}{R} = A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3 + E_i T^4$$

Así expresada, los coeficientes A, B, C, D y E son adimensionales, pero en algunas fuentes pueden tener dimensiones (J/mol·K o cal/mol·K), es decir vienen multiplicados por R. En nuestro caso, dichos coeficientes se obtienen de las tablas que se encuentran en el anexo 5.

Para la capacidad calorífica de mezclas multicomponente, el efecto de la composición puede estimarse mediante una sencilla media ponderada con la fracción molar:

$$Cp_m^G = \sum_{i=1}^n y_i Cp_i^G$$

No obstante, en nuestro caso se utiliza para el cálculo de la capacidad calorífica una función trigonométrica hiperbólica (ecuación 107):

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

Dado que se ha escogido esta última ecuación, el cálculo de la entalpía de reacción debe llevarse a cabo integrando la expresión anterior, por lo que, para la ecuación 107:

$$h = \int Cp_i dT = A_i T + B_i C_i \coth(C_i/T) - D_i E_i \tanh(E_i/T)$$



Para el cálculo de las entalpías a una determinada temperatura, debe tenerse en cuenta que éstas se toman como una variación respecto del valor que se obtiene a una temperatura de referencia, 298 K, por lo que a los valores anteriormente obtenidos habrá que sumarles la entalpía estándar de formación de la mezcla, que a su vez es el producto de las entalpías estándar de formación de cada elemento, por su fracción molar, es decir:

$$h_{(T=T)} = h_{mezcla}^{\circ} + \int_{T=298}^T C_{p_i} dT =$$

$$= \sum y_i h_{elemento}^{\circ} + A_i(T - 298) + B_i C_i [\coth(C_i/T) - \coth(C_i/298)] - D_i E_i [\tanh(E_i/T) - \coth(C_i/298)]$$

Las composiciones, capacidades caloríficas y entalpías para la mezcla en cada uno de los intervalos de temperatura usados en el condensador son:

Composiciones

$y_i (T)$							
347,78	342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78	

Metanol	0,03688	0,03671	0,03641	0,03626	0,03706	0,03863	0,03598
MTBE	0,14332	0,10367	0,06930	0,03987	0,01602	0,00342	0,00060
propileno	0,04976	0,05518	0,06155	0,07042	0,08919	0,15366	0,26327
propano	0,00944	0,01043	0,01159	0,01317	0,01644	0,02705	0,04400
i-butano	0,00513	0,00545	0,00577	0,00609	0,00649	0,00693	0,00686
i-buteno	0,01549	0,01627	0,01697	0,01756	0,01798	0,01741	0,01541
1-buteno	0,40018	0,41956	0,43625	0,44990	0,45726	0,43524	0,37796
1,3-butadieno	0,07848	0,08252	0,08614	0,08941	0,09217	0,09065	0,08141
n-butano	0,18868	0,19584	0,20098	0,20315	0,19804	0,17180	0,13503
trans-2-buteno	0,03921	0,04035	0,04098	0,04082	0,03872	0,03168	0,02328
cis-2-buteno	0,03267	0,03334	0,03352	0,03291	0,03036	0,02344	0,01617
n-pentano	0,00067	0,00060	0,00051	0,00039	0,00023	0,00008	0,00002

Capacidades caloríficas

	$C_{p_i} (T)$						
	347,78	342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78
Metanol	4,75E+04	4,71E+04	4,67E+04	4,64E+04	4,60E+04	4,56E+04	4,53E+04
MTBE	1,45E+05	1,43E+05	1,41E+05	1,39E+05	1,38E+05	1,36E+05	1,34E+05
propileno	7,28E+04	7,20E+04	7,12E+04	7,05E+04	6,97E+04	6,89E+04	6,81E+04
propano	8,46E+04	8,36E+04	8,26E+04	8,16E+04	8,06E+04	7,96E+04	7,86E+04
i-butano	1,11E+05	1,09E+05	1,08E+05	1,07E+05	1,05E+05	1,04E+05	1,02E+05
i-buteno	9,97E+04	9,86E+04	9,76E+04	9,65E+04	9,54E+04	9,43E+04	9,32E+04
1-buteno	9,69E+04	9,57E+04	9,46E+04	9,34E+04	9,23E+04	9,11E+04	9,00E+04
1,3-butadieno	9,22E+04	9,11E+04	9,00E+04	8,89E+04	8,77E+04	8,66E+04	8,54E+04
n-butano	1,12E+05	1,10E+05	1,09E+05	1,08E+05	1,06E+05	1,05E+05	1,04E+05
trans-2-buteno	9,78E+04	9,68E+04	9,57E+04	9,47E+04	9,37E+04	9,27E+04	9,17E+04
cis-2-buteno	8,96E+04	8,84E+04	8,73E+04	8,62E+04	8,51E+04	8,41E+04	8,30E+04
n-pentano	1,36E+05	1,35E+05	1,33E+05	1,31E+05	1,30E+05	1,28E+05	1,26E+05

$\sum y_i \cdot C_{p_i}$	1,03E+05	9,98E+04	9,69E+04	9,42E+04	9,14E+04	8,78E+04	8,37E+04
--------------------------	----------	----------	----------	----------	----------	----------	----------



Entalpías de formación (J/kmol)

Componente	H ^o f (J/Kmol)	$\sum y_i H^{of}(T)$						
		347,78	342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78
Metanol	-2,01E+08	-7,40E+06	-7,37E+06	-7,31E+06	-7,28E+06	-7,44E+06	-7,75E+06	-7,22E+06
MTBE	-2,93E+08	-4,20E+07	-3,04E+07	-2,03E+07	-1,17E+07	-4,69E+06	-1,00E+06	-1,74E+05
propileno	1,97E+07	9,81E+05	1,09E+06	1,21E+06	1,39E+06	1,76E+06	3,03E+06	5,19E+06
propano	-1,05E+08	-9,88E+05	-1,09E+06	-1,21E+06	-1,38E+06	-1,72E+06	-2,83E+06	-4,61E+06
i-butano	-1,34E+08	-6,88E+05	-7,32E+05	-7,74E+05	-8,17E+05	-8,71E+05	-9,29E+05	-9,20E+05
i-buteno	-1,69E+07	-2,62E+05	-2,75E+05	-2,87E+05	-2,97E+05	-3,04E+05	-2,94E+05	-2,60E+05
1-buteno	-5,40E+05	-2,16E+05	-2,27E+05	-2,36E+05	-2,43E+05	-2,47E+05	-2,35E+05	-2,04E+05
1,3-butadieno	1,10E+08	8,65E+06	9,09E+06	9,49E+06	9,85E+06	1,02E+07	9,99E+06	8,97E+06
n-butano	-1,26E+08	-2,37E+07	-2,46E+07	-2,53E+07	-2,55E+07	-2,49E+07	-2,16E+07	-1,70E+07
trans-2-buteno	-1,12E+07	-4,38E+05	-4,51E+05	-4,58E+05	-4,56E+05	-4,33E+05	-3,54E+05	-2,60E+05
cis-2-buteno	-6,99E+06	-2,28E+05	-2,33E+05	-2,34E+05	-2,30E+05	-2,12E+05	-1,64E+05	-1,13E+05
n-pentano	-1,47E+08	-9,83E+04	-8,78E+04	-7,45E+04	-5,72E+04	-3,38E+04	-1,19E+04	-3,55E+03
		-6,64E+07	-5,53E+07	-4,54E+07	-3,67E+07	-2,89E+07	-2,21E+07	-1,66E+07

h (entalpías)

	h(T)						
	347,78	342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78

Metanol	2,27E+06	2,04E+06	1,80E+06	1,57E+06	1,34E+06	1,11E+06	8,82E+05
MTBE	6,78E+06	6,06E+06	5,35E+06	4,65E+06	3,95E+06	3,27E+06	2,59E+06
propileno	3,43E+06	3,07E+06	2,71E+06	2,36E+06	2,01E+06	1,66E+06	1,32E+06
propano	3,96E+06	3,54E+06	3,13E+06	2,72E+06	2,31E+06	1,91E+06	1,51E+06
i-butano	5,16E+06	4,61E+06	4,07E+06	3,53E+06	3,00E+06	2,48E+06	1,96E+06
i-buteno	4,70E+06	4,20E+06	3,71E+06	3,23E+06	2,75E+06	2,27E+06	1,80E+06
1-buteno	4,54E+06	4,06E+06	3,58E+06	3,11E+06	2,65E+06	2,19E+06	1,74E+06
1,3-butadieno	4,31E+06	3,85E+06	3,40E+06	2,95E+06	2,51E+06	2,07E+06	1,64E+06
n-butano	5,23E+06	4,67E+06	4,12E+06	3,58E+06	3,05E+06	2,52E+06	2,00E+06
trans-2-buteno	4,62E+06	4,13E+06	3,65E+06	3,17E+06	2,70E+06	2,24E+06	1,77E+06
cis-2-buteno	4,19E+06	3,74E+06	3,30E+06	2,87E+06	2,44E+06	2,02E+06	1,60E+06
n-pentano	6,37E+06	5,69E+06	5,03E+06	4,36E+06	3,71E+06	3,07E+06	2,43E+06
$\sum y_i \cdot h_i$ (J/Kmol)	4,826E+06	4,233E+06	3,673E+06	3,139E+06	2,624E+06	2,109E+06	1,615E+06
$h^o_{formación} + \sum y_i \cdot h_i$ (MW)	-8,9863	-6,5182	-4,6120	-3,0758	-1,6928	-0,4893	-0,1278



- Líquidos

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 en forma de polinomios del tipo 100:

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

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

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

Otra vez se determinan las propiedades para el caso del condensador:

<u>Composiciones</u>	<u>x_i (T)</u>						
	347,78	342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78
Metanol	0	0,03807	0,03863	0,03712	0,03437	0,03611	0,04006
MTBE	0	0,42091	0,32321	0,21220	0,09625	0,02373	0,00494
propileno	0	0,01178	0,01454	0,01848	0,02604	0,04977	0,09470
propano	0	0,00249	0,00307	0,00390	0,00544	0,00995	0,01793
i-butano	0	0,00287	0,00346	0,00419	0,00514	0,00623	0,00696
i-buteno	0	0,01000	0,01186	0,01408	0,01657	0,01833	0,01848
1-buteno	0	0,26452	0,31296	0,36994	0,43251	0,47072	0,46606
1,3-butadieno	0	0,05022	0,05939	0,07026	0,08286	0,09310	0,09562
n-butano	0	0,13856	0,16301	0,19043	0,21524	0,21408	0,19157
trans-2-buteno	0	0,03124	0,03632	0,04173	0,04579	0,04303	0,03620
cis-2-buteno	0	0,02797	0,03220	0,03648	0,03895	0,03459	0,02735
n-pentano	0	0,00117	0,00118	0,00108	0,00077	0,00032	0,00011

<u>Capacidades caloríficas</u>	<u>Cp_i (T)</u>					
	342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78
Metanol	9,22E+04	9,07E+04	8,94E+04	8,80E+04	8,67E+04	8,55E+04
MTBE	2,03E+05	2,01E+05	1,99E+05	1,98E+05	1,96E+05	1,94E+05
propileno	1,14E+05	1,13E+05	1,11E+05	1,10E+05	1,09E+05	1,08E+05
propano	1,51E+05	1,46E+05	2,54E+05	1,37E+05	1,33E+05	1,30E+05
i-butano	1,63E+05	1,59E+05	3,33E+05	1,54E+05	1,51E+05	1,49E+05
i-buteno	1,47E+05	1,44E+05	2,23E+05	1,40E+05	1,38E+05	1,37E+05
1-buteno	1,36E+05	1,36E+05	1,35E+05	1,34E+05	1,33E+05	1,32E+05
1,3-butadieno	1,39E+05	1,37E+05	1,35E+05	1,33E+05	1,31E+05	1,30E+05



n-butano	1,59E+05	1,56E+05	2,65E+05	1,52E+05	1,50E+05	1,48E+05
trans-2-buteno	1,38E+05	1,37E+05	1,36E+05	1,34E+05	1,33E+05	1,32E+05
cis-2-buteno	1,48E+05	1,45E+05	2,02E+05	1,40E+05	1,38E+05	1,35E+05
n-pentano	1,87E+05	1,84E+05	1,82E+05	1,80E+05	1,77E+05	1,75E+05

Cp_{mezcla} (J/kmol K)	1,66E+05	1,59E+05	1,76E+05	1,42E+05	1,35E+05	1,31E+05
---------------------------------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------	-----------------

H (entalpías)

H (T)						
342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78	

Metanol	3,87E+06	3,41E+06	2,96E+06	2,51E+06	2,08E+06	1,65E+06
MTBE	8,74E+06	7,73E+06	6,72E+06	5,73E+06	4,75E+06	3,77E+06
propileno	4,85E+06	4,28E+06	3,72E+06	3,17E+06	2,62E+06	2,08E+06
propano	5,94E+06	5,20E+06	4,48E+06	3,78E+06	3,10E+06	2,45E+06
i-butano	6,74E+06	5,94E+06	5,15E+06	4,38E+06	3,61E+06	2,87E+06
i-buteno	6,17E+06	5,45E+06	4,73E+06	4,02E+06	3,33E+06	2,64E+06
1-buteno	5,92E+06	5,24E+06	4,56E+06	3,89E+06	3,23E+06	2,57E+06
1,3-butadieno	5,86E+06	5,17E+06	4,49E+06	3,82E+06	3,16E+06	2,50E+06
n-butano	6,69E+06	5,90E+06	5,13E+06	4,36E+06	3,61E+06	2,86E+06
trans-2-buteno	5,95E+06	5,26E+06	4,58E+06	3,90E+06	3,23E+06	2,57E+06
cis-2-buteno	6,14E+06	5,41E+06	4,69E+06	3,98E+06	3,29E+06	2,60E+06
n-pentano	7,91E+06	6,98E+06	6,07E+06	5,16E+06	4,27E+06	3,39E+06

$\sum x_i \cdot H_i$ (J/Kmol)	7,13E+06	6,07E+06	5,06E+06	4,11E+06	3,27E+06	2,54E+06
H ^o _{formación} + $\sum x_i \cdot H_i$ (MW)	-2,5017	-1,9362	-1,5589	-1,3899	-1,1901	-0,3589

1.2. Densidad

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

$$\rho = \frac{m}{V} \text{ (kg/m}^3 \text{ en el SI)}$$

Gases 10⁻⁵ a 10⁻³ g/cm³
 p.ej. Aire ρ = 0.00118 g/cm³ @ 25°C, 1 atm.

Líquidos 0.6 a 1.6 g/cm³
 p.ej. Agua ρ = 1.0000 g/cm³ @ 4°C, 1 atm.

Sólidos 0.5 a 20 g/cm³
 p.ej. Tierra = 5.5 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).

- Gases

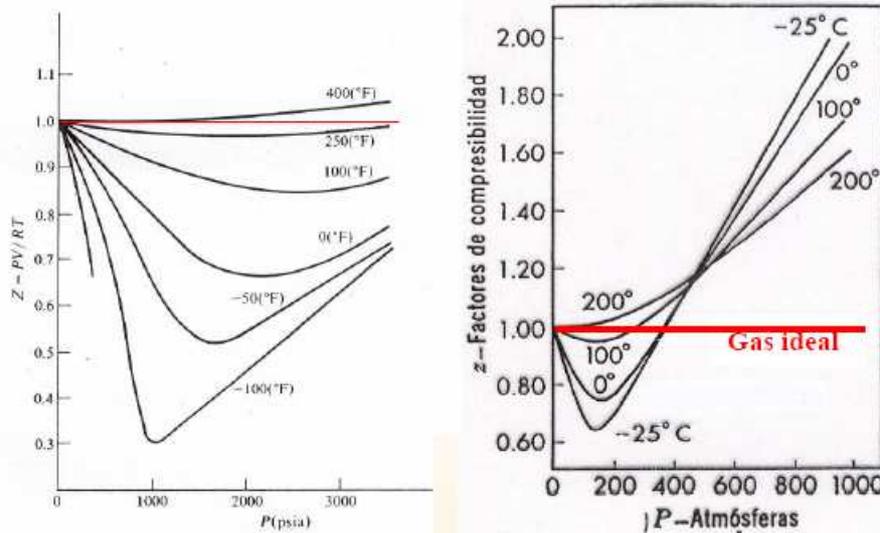
Para un gas ideal:

$$PV = nRT = \frac{m}{M_m} RT \Rightarrow \rho_m^G = \frac{m}{V} = \frac{PM_m}{RT}$$

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

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

Dicho factor de compresibilidad mide el grado de separación del comportamiento ideal de un gas, y puede determinarse mediante las curvas de compresibilidad, es decir, representaciones de Z frente a la presión para distintas temperaturas.



Curvas de compresibilidad para el metano

El factor de compresibilidad también puede hallarse analíticamente mediante ecuaciones de estado (EdE), ecuaciones del virial o, como en nuestro caso, a partir del Principio de los Estados Correspondientes, por el cual todos los gases, comparados a la misma presión y temperatura reducidas ($P_r = P/P_c$; $T_r = T/T_c$) tienen aproximadamente el mismo factor de compresibilidad.

$$Z = Z^0 + \omega_{cm} \cdot Z^1$$

donde ω_{cm} es el factor acéntrico de la mezcla gaseosa.



Por otro lado, para todos los gases se tiene que $\lim_{p \rightarrow 0} (Z) = 1$

	PM (kg/kmol)	ω_c	$V_c(m^3/kmol)$	T_c	Z_c	T = 347,78 K				
						$y \cdot p_m$	$y \cdot \omega_c$	$y \cdot V_c$	$y \cdot T_c$	$y \cdot Z_c$
metanol	32,042	0,5656	0,1178	512,58	0,224	1,182	0,021	0,004	18,904	8,261E-03
MTBE	88,15	0,2674	0,329	497,1	0,273	12,634	0,038	0,047	71,244	3,913E-02
Propileno	42,081	0,1424	0,181	364,76	0,275	2,094	0,007	0,009	18,150	1,368E-02
Propano	44,096	0,1518	0,20288	369,82	0,28	0,416	0,001	0,002	3,491	2,643E-03
i-butano	58,123	0,177	0,2627	408,14	0,282	0,298	0,001	0,001	2,094	1,447E-03
i-buteno	56,107	0,1893	0,23888	417,9	0,275	0,869	0,003	0,004	6,473	4,260E-03
1-buteno	56,107	0,1867	0,23993	419,59	0,276	22,453	0,075	0,096	167,912	1,104E-01
1,3-butadieno	54,092	0,1932	0,22084	425,37	0,27	4,245	0,015	0,017	33,383	2,119E-02
n-butano	58,123	0,1993	0,2549	425,18	0,274	10,967	0,038	0,048	80,223	5,170E-02
trans-2-buteno	56,107	0,2182	0,23818	428,63	0,274	2,200	0,009	0,009	16,807	1,074E-02
cis-2-buteno	56,107	0,9203	0,23398	435,58	0,272	1,833	0,030	0,008	14,230	8,886E-03
n-pentano	72,15	0,2486	0,31234	469,65	0,269	0,048	0,000	0,000	0,315	1,802E-04
$\Sigma =$						59,239	0,238	0,246	433,226	0,273

ω_c , V_c , T_c y Z_c son el factor acéntrico, el volumen, la temperatura y el factor de compresibilidad críticos.

A partir de los resultados de la anterior tabla se calculan los resultados finales, donde T_{rm} , P_{rm} y ω_{cm} son, respectivamente, la temperatura reducida, la presión reducida y el factor acéntrico referidos todos a la mezcla:

P (atm)	6,5
T (K)	347,78
T_{rm}	0,803
P_{rm}	0,165
ω_{cm}	0,238
Z	0,850
Pm	39,345
$\rho_v = 15,889 \text{ kg/m}^3$	

$Z^0 = 0,875$
$Z^1 = -0,10606$

- Líquidos

La densidad de los líquidos es relativamente sencilla de medir por lo que para la mayoría de las sustancias puras se dispone de al menos un valor experimental a una temperatura de referencia.

Existen por ello constantes que se ajustan muy bien a la ecuaciones del tipo 105, aunque no obstante, en nuestro caso, se calcularán las densidades mediante el método de Hankinson-Brost-Thompson (1979) válida para el intervalo $0,25 < T_{rm} < 1$.



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

$$V_{cm} = 0,25 \left[\sum_{i=1}^C x_i V_{ci} + 3 \left(\sum_{i=1}^C x_i V_{ci}^{2/3} \right) \left(\sum_{i=1}^C x_i V_{ci}^{1/3} \right) \right] \quad T_{cm} = \frac{\left[\sum_{i=1}^C x_i (V_{ci} T_{ci})^{1/2} \right]^2}{V_{cm}}$$

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

$$V^{(\delta)} = \frac{a + bT_{rm} + cT_{rm}^2 + dT_{rm}^3}{Trm - 1,00001}$$

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

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

Los cálculos para la corriente de fondo de la columna de destilación son:

	x	T _c	ω _c	V _c (m ³ /kmol)	Z _c	x·p _m	x·ω _c	x·V _c	x·T _c	x·V _c ^(2/3)	x·V _c ^(1/3)	x·(V _c ·T _c) ^(1/2)
metanol	0,0073	512,58	0,5656	0,1178	0,224	0,234	0,004	0,001	3,742	0,002	0,004	0,057
MTBE	0,9927	497,1	0,2674	0,329	0,273	87,507	0,265	0,327	493,471	0,473	0,685	12,695
Σ =						87,740	0,270	0,327	497,213	0,475	0,689	12,752

$$T = 415,31 \text{ K}$$

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

$$V_{cm} = 0,3272$$

$$T_{cm} = 496,9735$$

$$T_{rm} = 0,8357$$

$$V^{(0)} = 0,4780$$

$$V^{(\delta)} = 0,1867$$

La ecuación de Hankinson-Brost-Thompson queda entonces:

$$\rho_m^L = \frac{M_m}{V_{cm} V^{(0)} (1 - \omega_m V^{(\delta)})} = \frac{87,740}{0,3272 \cdot 0,4780 (1 - 0,270 \cdot 0,1867)} = 590,7 \text{ kg/m}^3$$



1.3. Viscosidad

- Gases

Para los gases se ha utilizado la correlación de Wilke (1950), para la cual se requieren las viscosidades de los componentes puros. Estas suelen darse mediante ecuaciones del tipo 102:

$$\eta_i^G = \frac{A_i \cdot (T^{B_i})}{\left(1 + \frac{C_i}{T} + \frac{D_i}{T^2}\right)} \Rightarrow \eta_m^G = \frac{\sum_{i=1}^C y_i \eta_i^G}{\sum_{j=1}^C y_j \phi_{ij}}$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \phi_{ii} = 1 \\ \phi_{ij} = \frac{\left[1 + (\eta_i/\eta_j)^{1/2} (M_j/M_i)^{1/4}\right]^2}{\left\{8\left[1 + (M_i/M_j)\right]\right\}^{1/2}} \end{array} \right.$$

Viscosidades de elementos

	PM (kg/kmol)	η (T)										
		A	B	C	D	347,78	342,78	337,78	332,78	327,78	322,78	317,78
metanol	32,042	3,07E-07	6,97E-01	2,05E+02		1,136E-05	1,119E-05	1,101E-05	1,084E-05	1,066E-05	1,049E-05	1,031E-05
MTBE	88,15	6,19E-07	5,72E-01	3,52E+02		8,746E-06	8,610E-06	8,475E-06	8,339E-06	8,203E-06	8,066E-06	7,929E-06
Propileno	42,081	8,79E-06	2,32E-01	8,00E+02	1,20E+04	1,005E-05	9,910E-06	9,769E-06	9,628E-06	9,486E-06	9,344E-06	9,201E-06
Propano	44,096	2,21E-06	3,82E-01	4,05E+02		9,564E-06	9,437E-06	9,309E-06	9,181E-06	9,052E-06	8,923E-06	8,793E-06
i-butano	58,123	1,78E-07	6,95E-01	2,50E+01	1,21E+04	8,820E-06	8,703E-06	8,584E-06	8,464E-06	8,344E-06	8,223E-06	8,101E-06
i-buteno	56,107	7,68E-06	2,66E-01	9,82E+02		9,541E-06	9,403E-06	9,265E-06	9,126E-06	8,987E-06	8,847E-06	8,708E-06
1-buteno	56,107	1,03E-06	4,90E-01	3,47E+02		9,059E-06	8,930E-06	8,800E-06	8,670E-06	8,540E-06	8,409E-06	8,277E-06
1,3-butadieno	54,092	7,01E-08	8,45E-01			9,866E-06	9,746E-06	9,625E-06	9,505E-06	9,384E-06	9,263E-06	9,141E-06
n-butano	58,123	1,03E-05	2,08E-01	1,01E+03	8,10E+03	8,782E-06	8,659E-06	8,536E-06	8,412E-06	8,288E-06	8,163E-06	8,038E-06
trans-2-buteno	56,107	1,05E-06	4,87E-01	3,59E+02		8,918E-06	8,790E-06	8,662E-06	8,533E-06	8,404E-06	8,274E-06	8,144E-06
cis-2-buteno	56,107	1,09E-06	4,79E-01	3,39E+02		9,112E-06	8,985E-06	8,857E-06	8,728E-06	8,599E-06	8,469E-06	8,339E-06
n-pentano	72,15	6,82E-07	5,24E-01	2,74E+02		8,173E-06	8,059E-06	7,945E-06	7,831E-06	7,716E-06	7,601E-06	7,485E-06

Dadas las anteriores viscosidades de cada uno de los elementos de la mezcla, para cada temperatura las viscosidades de la mezcla se obtienen:

T=347,78	metanol	MTBE	Propileno	Propano	i-butano	i-buteno	1-buteno	1,3-butadieno	n-butano	trans-2-buteno	cis-2-buteno	n-pentano	$\sum y_i * \phi_{ij}$	$\frac{\eta_i y_i}{\sum y_i \phi_{ij}}$
metanol	1,00000	1,84429	1,21807	1,27943	1,52425	1,43482	1,47708	1,38498	1,52804	1,49026	1,47221	1,75798	1,4997E+00	2,79E-07
MTBE	0,51595	1,00000	0,63349	0,66458	0,80226	0,75884	0,77733	0,73279	0,80392	0,78309	0,77520	0,93359	7,9294E-01	1,58E-06
Propileno	0,82026	1,52489	1,00000	1,04955	1,25302	1,18179	1,21457	1,14128	1,25595	1,22479	1,21080	1,44648	1,2343E+00	4,05E-07
Propano	0,78244	1,45279	0,95316	1,00000	1,19339	1,12631	1,15701	1,08798	1,19614	1,16657	1,15347	1,37702	1,1759E+00	7,68E-08
i-butano	0,65224	1,22712	0,79621	0,83501	1,00000	0,94513	0,96952	0,91311	1,00219	0,97711	0,96671	1,15653	9,8660E-01	4,59E-08
i-buteno	0,68801	1,30068	0,84152	0,88312	1,05911	1,00000	1,02644	0,96568	1,06148	1,03467	1,02340	1,22645	1,0446E+00	1,41E-07
1-buteno	0,67248	1,26504	0,82116	0,86134	1,03153	0,97457	1,00000	0,94144	1,03381	1,00792	0,99707	1,19309	1,0175E+00	3,56E-06
1,3-butadieno	0,71227	1,34713	0,87161	0,91494	1,09744	1,03571	1,06345	1,00000	1,09993	1,07210	1,06026	1,27110	1,0821E+00	7,15E-07
n-butano	0,65101	1,22430	0,79460	0,83329	0,99782	0,94312	0,96743	0,91120	1,00000	0,97500	0,96463	1,15390	9,8446E-01	1,68E-06
trans-2-buteno	0,66788	1,25450	0,81512	0,85490	1,02337	0,96704	0,99217	0,93426	1,02562	1,00000	0,98928	1,18322	1,0095E+00	3,46E-07
cis-2-buteno	0,67421	1,26900	0,82342	0,86377	1,03460	0,97740	1,00294	0,94413	1,03689	1,01090	1,00000	1,19680	1,0205E+00	2,92E-07
n-pentano	0,56151	1,06592	0,68609	0,71920	0,86329	0,81695	0,83703	0,78944	0,86508	0,84328	0,83472	1,00000	8,5264E-01	6,42E-09

$\eta_m = 9,14E-06 \text{ Pa} \cdot \text{s}$



- **Líquidos**

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

En general, no existen métodos que permitan una estimación sin la ayuda de parámetros de interacción binaria como los de Nissan-Grünberg (1949), Teja-Rice (1981) y Chevalier (1988). Estos son complejos de programar y tienen restricciones de manera que lo mejor es utilizar una media ponderal de las viscosidades individuales obtenidas mediante correlaciones del tipo 101:

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

Las constantes A, B, C y D se han obtenido también de las tablas de propiedades del anexo correspondiente:

	CONSTANTES					FONDO T = 415,31 K		T = 342,78 K	
	A	B	C	D	E	η_i	$x_i * \ln \eta_i$	η_i	$x_i * \ln \eta_i$
metanol	-7,288	1065,300	-0,666			1,606E-04	-0,0637	3,141E-04	-0,3071
MTBE	-7,317	810,500	-0,597			1,282E-04	-8,8965	2,172E-04	-3,5502
Propileno	-44,830	1337,000	5,671			5,991E-04		3,987E-04	-0,0922
Propano	-15,765	618,230	0,864	-1,80E-13	5,00E+00	1,247E-05		5,711E-05	-0,0243
i-butano	-18,345	1020,300	1,098	-6,10E-27	1,00E+01	3,714E-05		1,120E-04	-0,0261
i-buteno	-48,766	1907,000	5,903	-9,20E-27	1,00E+01	4,589E-05		1,294E-04	-0,0895
1-buteno	-2,673	336,100	-1,286			6,662E-05		1,012E-04	-2,4332
1,3-butadieno	17,844	-310,200	-4,506			4,240E-05		8,595E-05	-0,4701
n-butano	0,750	218,700	-1,788	-4,00E-27	1,00E+01	4,046E-05		1,073E-04	-1,2663
trans-2-buteno	-10,175	664,920	-0,120			9,193E-05		1,320E-04	-0,2791
cis-2-buteno	-10,175	664,920	-0,119			9,196E-05		1,320E-04	-0,2498
n-pentano	-20,383	1050,400	1,487	-2,02E-27	1,00E+01	1,016E-04		1,697E-04	-0,0102
						$\sum x_i * \ln \eta_i = -8,9603$		$\sum x_i * \ln \eta_i = -8,7981$	
						$\eta_m (\text{Pa}\cdot\text{s}) = 1,284\text{E-}04$		$\eta_m (\text{Pa}\cdot\text{s}) = 1,510\text{E-}04$	



1.4. Conductividad térmica

La conductividad térmica es una medida de la resistencia que presentan los materiales a la transmisión del calor. La conductividad se mide en el SI en W/m·K.

Gases: 0.001 a 0.01 W/m·K
p.ej. aire $k = 0.02$ W/m·K @ 25°C

Líquidos: 0.1 a 0.6 W/m·K
p.ej. agua $k = 0.6$ W/m·K @ 20°C

Sólidos: 0.02 a 500 W/m·K
p.ej. $k = 0.05$ (vidrio) o 500 W/m·K (plata)

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.

- Gases

En este caso se ha utilizado para la determinación de la conductividad térmica de los gases a baja presión, la ecuación de Wassiljewa (1904):

$$k_i^G = \frac{A_i \cdot (T_i^{B_i})}{\left(1 + \frac{C_i}{T} + \frac{D_i}{T^2}\right)} \rightarrow k_m^G = \frac{\sum_{i=1}^C y_i \lambda_i^G}{\sum_{j=1}^C y_j A_{ij}}$$

Para cada una de las temperaturas a las que se ha calculado dicha propiedad se ha realizado una tabla como la siguiente:

					T = 347,78 K		
	A	B	C	D	k_i	$y_i \cdot k_i$	$k_i \cdot y_i / \sum (y_i \cdot \phi_{ij})$
metanol	-7,76E+00	1,03E+00	-7,44E+07	6,77E+09	2,01E-02	7,43E-04	4,95E-04
MTBE	-2,51E+01	1,16E+00	-7,95E+08	8,89E+10	1,47E-02	2,11E-03	2,67E-03
Propileno	2,24E-05	1,29E+00	3,12E+02		2,28E-02	1,13E-03	9,18E-04
Propano	6,15E-05	1,17E+00	4,98E+02		2,37E-02	2,24E-04	1,91E-04
i-butano	-4,99E-02	2,76E-01	-2,27E+03	-7,00E+05	2,21E-02	1,13E-04	1,15E-04
i-buteno	-1,72E+04	8,12E-01	-3,10E+10		2,23E-02	3,46E-04	3,31E-04
1-buteno	-2,28E+03	7,66E-01	-3,53E+09		1,98E-02	7,94E-03	7,80E-03
1,3-butadieno	-2,09E+04	9,59E-01	-9,38E+10		2,12E-02	1,67E-03	1,54E-03
n-butano	8,02E+02	8,60E-01	1,98E+09		2,16E-02	4,08E-03	4,14E-03
trans-2-buteno	7,86E-05	1,06E+00	1,46E+01	1,06E+05	1,98E-02	7,78E-04	7,70E-04
cis-2-buteno	6,77E-05	1,07E+00	-6,59E+01	1,29E+05	1,90E-02	6,20E-04	6,07E-04
n-pentano	-2,66E+03	8,22E-01	-5,81E+09		1,96E-02	1,31E-05	1,54E-05
						$k_m = 0,0196 \text{ Pa}\cdot\text{s}$	



- Líquidos

No existen métodos generales para mezclas multicomponente 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 del tipo 100:

$$k_i^L = A_i + B_i T + C_i T^2 + D_i T^3$$

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

Las conductividades térmicas así calculadas son ligeramente superiores a las reales aunque las desviaciones a menudo son pequeñas (5%).

Los resultados obtenidos, para tres temperaturas dadas en el condensador, se tabulan de la siguiente manera:

	A	B	C	T = 342,78 K		T = 337,78 K		T = 332,78 K	
				k_i	$x_i \cdot k_i$	k_i	$x_i \cdot k_i$	k_i	$x_i \cdot k_i$
metanol	2,84E-01	-2,81E-04		1,87E-01	7,13E-03	1,89E-01	7,29E-03	1,90E-01	7,06E-03
MTBE	1,83E-01	-2,24E-04		1,07E-01	4,48E-02	1,08E-01	3,48E-02	1,09E-01	2,31E-02
Propileno	2,26E-01	-4,19E-04		8,19E-02	9,65E-04	8,40E-02	1,22E-03	8,61E-02	1,59E-03
Propano	3,48E-01	-1,24E-03	1,25E-06	7,07E-02	1,76E-04	7,26E-02	2,23E-04	7,46E-02	2,91E-04
i-butano	1,99E-01	-3,36E-04		8,39E-02	2,41E-04	8,56E-02	2,96E-04	8,73E-02	3,65E-04
i-buteno	3,92E-01	-1,52E-03	1,83E-06	8,48E-02	8,47E-04	8,62E-02	1,02E-03	8,76E-02	1,23E-03
1-buteno	2,14E-01	-3,50E-04		9,35E-02	2,47E-02	9,52E-02	2,98E-02	9,70E-02	3,59E-02
1,3-butadieno	2,22E-01	-3,66E-04		9,67E-02	4,86E-03	9,85E-02	5,85E-03	1,00E-01	7,05E-03
n-butano	2,48E-01	-4,79E-04		8,35E-02	1,16E-02	8,59E-02	1,40E-02	8,83E-02	1,68E-02
trans-2-buteno	2,15E-01	-3,54E-04		9,40E-02	2,94E-03	9,58E-02	3,48E-03	9,76E-02	4,07E-03
cis-2-buteno	2,16E-01	-3,45E-04		9,79E-02	2,74E-03	9,96E-02	3,21E-03	1,01E-01	3,70E-03
n-pentano	2,54E-01	-5,76E-04	3,44E-07	9,67E-02	1,13E-04	9,84E-02	1,16E-04	1,00E-01	1,08E-04
				$k_m = 0,1011 \text{ Pa}\cdot\text{s}$		$k_m = 0,1013 \text{ Pa}\cdot\text{s}$		$k_m = 0,1012$	

1.5. Calor latente de vaporización

Para el cálculo del calor latente de vaporización, se han usado para cada componente de la mezcla, las constantes indicadas en las tablas de propiedades, las cuales se corresponden con la ecuación 106:

$$\lambda_{vap} = A \cdot (1 - T_r)^B (B + C T_r + D T_r^2 + E T_r^3)$$



A continuación se adjuntan los resultados para la corriente del condensador a $T=347,78$ K y $P=6,5$ atm. La temperatura reducida es $T_r = T/T_{cm} = \frac{347,78}{433,226} = 0,803$, y la composición de cada uno de los i , elementos se encuentra en el punto 1.1 de este anexo.

	A	B	C	D	$\lambda_{vap,i}$
metanol	5,27E+07	3,77E-01			2,86E+07
MTBE	4,49E+07	7,84E-01	-8,76E-01	5,18E-01	2,29E+07
Propileno	2,61E+07	3,25E-01	5,25E-02		1,44E+07
Propano	2,67E+07	3,86E-01	-8,60E-02	6,86E-02	1,49E+07
i-butano	3,19E+07	3,92E-01			1,69E+07
i-buteno	3,30E+07	3,89E-01			1,75E+07
1-buteno	3,34E+07	3,93E-01			1,76E+07
1,3-butadieno	3,56E+07	6,22E-01	-2,89E-01	5,20E-02	1,79E+07
n-butano	3,30E+07	3,77E-01			1,79E+07
trans-2-buteno	3,32E+07	3,64E-01			1,84E+07
cis-2-buteno	3,45E+07	3,83E-01			1,85E+07
n-pentano	3,99E+07	3,98E-01			2,09E+07
AGUA	5,21E+07	3,20E-01	-2,12E-01	2,58E-01	3,12E+07

$\lambda_{vap} \text{ (J/kmol)} = 1,87E+07$



ANEXO 2

COEFICIENTES DE ACTIVIDAD. MÉTODO UNIFAC



2.1. Sistemas no ideales. Actividad

En el caso de sistemas que se apartan del comportamiento ideal, las ecuaciones del equilibrio químico de los líquidos referidas a las fracciones molares dejan de ser válidas, por lo que, para conseguir que el tratamiento de dichos sistemas sea análogo al de los sistemas ideales, se define la actividad.

Éste, al igual que la fracción molar, es un parámetro adimensional con el que se relaciona mediante un parámetro denominado “*coeficiente de actividad*” (γ), de tal forma que cuando la fracción molar tienda a 1, el coeficiente de actividad igualmente tenderá a la unidad:

$$a_i = \gamma_i^L x_i$$

Para una disolución ideal el coeficiente de actividad $\gamma_i^L = 1$, y entonces la fracción molar se corresponde con la actividad: $a_i = x_i$.

Walas (1980) estudió comparativamente los diversos modelos de coeficientes de actividad por grupos funcionales encontrando que cada método se ajustaba mejor a un determinado grupo de moléculas. En general, es preferible usar modelos que utilicen parámetros de interacción binaria si estos están disponibles en la literatura. Si no se disponen, la mejor opción es el método UNIFAC:

Sistema	Mejor modelo
Orgánicos en solución acuosa	NRTL
Alcoholes y fenoles	Wilson
Alcoholes, cetonas y éteres	Margules
Hidrocarburos C4-C18	Wilson
Aromáticos	Margules

Dicho esto, de todos los modelos existentes para determinar los coeficientes de actividad de mezclas multicomponente, Margules, Van Laar, Wilson, NRTL, ASOG, UNIQUAC y UNIFAC, el que mejor se ajusta en nuestro caso es el último de ellos.

2.2. Método UNIFAC

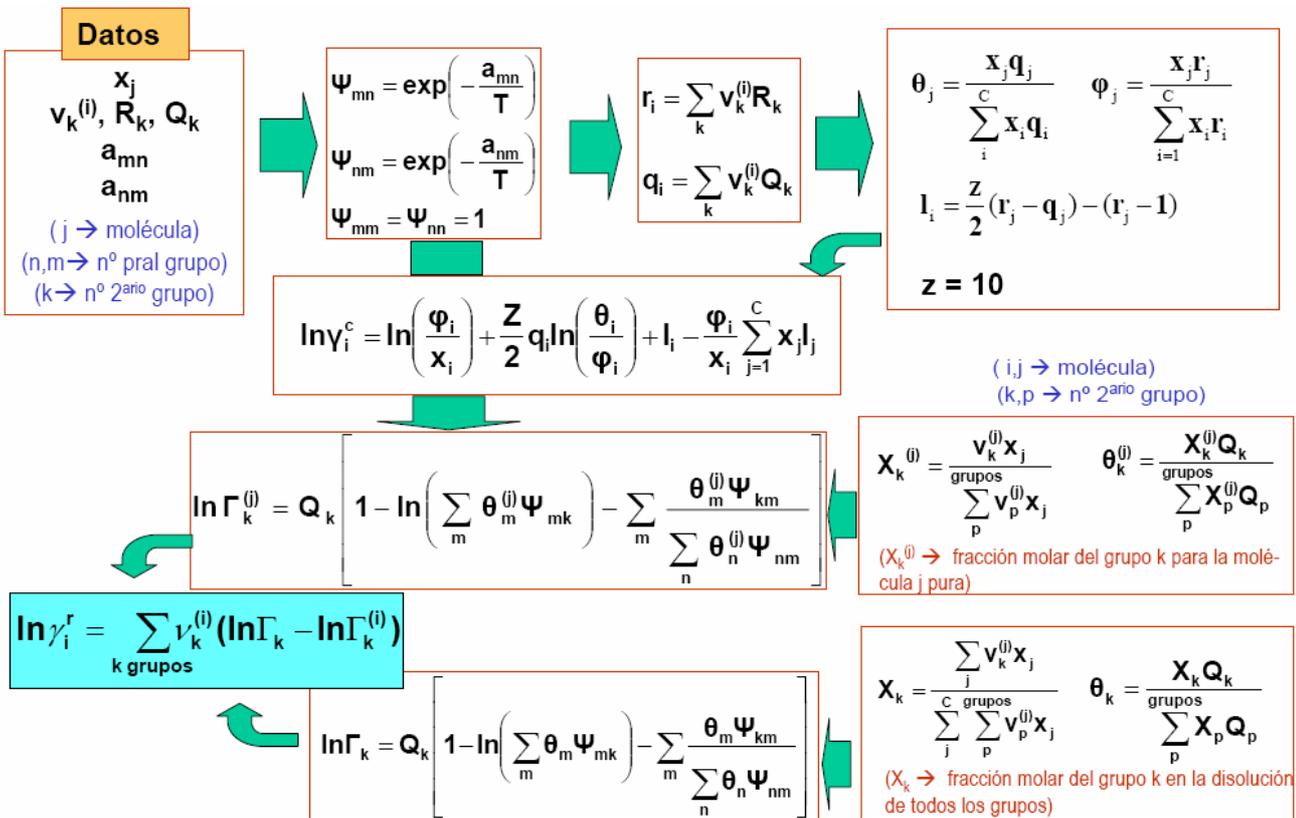
Como no disponemos de los parámetros de interacción binaria entre moléculas (que deberían obtenerse por regresión a partir de datos experimentales), utilizamos el método de UNIFAC (UNIversal Functional-group Activity Coefficients) para estimar los coeficientes de actividad.

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.



A continuación se explicará detalladamente el procedimiento general, ilustrándolo paso a paso con los cálculos realizados para la corriente 3 del diagrama de flujo, correspondiente al flujo de cabeza de la columna de destilación.

El procedimiento general es el indicado en la figura:

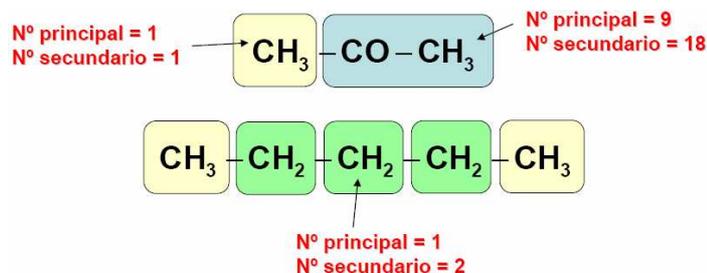


Dicha secuencia de cálculos se llevará a cabo en sucesivas etapas:

2.2.1. Identificación de los grupos

En la nomenclatura de UNIFAC cada grupo se identifica por un número principal y un número secundario (ver tablas).

Ejemplo: sistema acetona (1) – pentano (2).



En nuestro caso, los grupos presentes en la disolución presentan los siguientes números principales y secundarios, así como constantes R (volumen relativo) y Q (área superficial relativa):



Num. →	Principal	Secundario	R	Q
CH ₃	1	1	0,9011	0,848
CH ₂	1	2	0,6744	0,54
CH	1	3	0,4469	0,228
C	1	4	0,2195	0
CH ₂ =CH	2	5	1,3454	1,176
CH=CH	2	6	1,1167	0,867
CH ₂ =C	2	7	1,1173	0,988
CH ₃ OH	6	15	1,4311	1,432
H ₂ O	7	16	0,92	1,4
CH ₃ O	13	24	1,45	1,088

2.2.2. 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

En nuestro caso la matriz de ocurrencias queda como sigue:

	OCURENCIAS (Vi)										Σ Vi	Σ Xi · Vi
	CH ₃	CH ₂ =CH-	CH ₂	CH	CH ₂ =C-	-CH=CH-	C	CH ₃ O	CH ₃ -OH	H ₂ O		
Propileno	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0,116
Propano	2	0	1	0	0	0	0	0	0	0	3	0,033
i-butano	3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	4	0,024
i-buteno	2	0	0	0	1	0	0	0	0	0	3	0,054
1-buteno	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	3	1,406
1,3-butadieno	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0,184
n-butano	2	0	2	0	0	0	0	0	0	0	4	0,884
trans-2-buteno	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	3	0,115
cis-2-buteno	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	3	0,138
n-pentano	2	0	3	0	0	0	0	0	0	0	5	0,000
metanol	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0,041
agua	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0,000
MTBE	3	0	0	0	0	0	1	1	0	0	5	0,001

NºPrincipal	1	2	1	1	2	2	1	13	6	7	Σ = 2,995
NºSecundario	1	5	2	3	7	6	4	24	15	16	



2.2.3. Matriz de interacciones

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

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

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).

Dada la anterior matriz de ocurrencias, la matriz de interacciones toma la forma:

Matriz de interacciones										
	CH ₃	CH ₂ -CH-	CH ₂	CH	CH ₂ =C-	-CH=CH-	C	CH ₃ O	CH ₃ -OH	H ₂ O
CH ₃	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2	1318
CH ₂ =CH-	-35,36	0	-35,36	-35,36	0	0	-35,36	214,5	787,5	270,6
CH ₂ =CH-	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2	1318
CH	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2	1318
CH ₂ =CH-	-35,36	0	-35,36	-35,36	0	0	-35,36	214,5	787,5	270,6
-CH=CH-	-35,36	0	-35,36	-35,36	0	0	-35,36	214,5	787,5	270,6
C	0	86,02	0	0	86,02	86,02	0	251,5	697,2	1318
CH ₃ O	83,36	26,51	83,36	83,36	26,51	26,51	83,36	0	238,4	-314,7
CH ₃ -OH	16,51	-12,52	16,51	16,51	-12,52	-12,52	16,51	-128,6	0	-181
H ₂ O	300	496,1	300	300	496,1	496,1	300	540,5	289,6	0

2.2.4. Cálculo de la parte combinatorial

Para los cálculos posteriores se han llevado a cabo operaciones con matrices, debido a la mayor simplicidad que proporciona. Así, usando la notación matricial la parte combinatorial del coeficiente de actividad quedaría:

$$\Phi_j = \frac{\mathbf{x}_j \mathbf{r}_j}{\mathbf{x} \mathbf{r}^T}$$

$$\theta_j = \frac{\mathbf{x}_j \mathbf{q}_j}{\mathbf{x} \mathbf{q}^T}$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{v} \mathbf{R}^T$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{v} \mathbf{Q}^T$$

$$\ln \gamma_i^c = \ln \left(\frac{\Phi_i}{\mathbf{x}_i} \right) + \frac{\mathbf{z}}{2} \mathbf{q}_i \ln \left(\frac{\theta_i}{\Phi_i} \right) + l_i - \frac{\Phi_i}{\mathbf{x}_i} \sum_{j=1}^c \mathbf{x}_j l_j$$

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



	Parte combinatorial									$\ln \gamma_i^{(C)}$
	x_j	r_j	q_j	l_j	$x_j \cdot q_j$	$x_j \cdot r_j$	$x_j \cdot l_j$	θ_j	ϕ_j	
Propileno	0,05820	2,247	2,024	-0,134	0,118	0,131	-0,008	0,047	0,046	-0,024
Propano	0,01100	2,477	2,236	-0,274	0,025	0,027	-0,003	0,010	0,010	-0,006
i-butano	0,00600	3,150	2,772	-0,259	0,017	0,019	-0,002	0,007	0,007	-0,005
i-buteno	0,01810	2,920	2,684	-0,742	0,049	0,053	-0,013	0,019	0,019	0,011
1-buteno	0,46860	2,921	2,564	-0,136	1,201	1,369	-0,064	0,478	0,481	0,000
1,3-butadieno	0,09190	2,691	2,352	0,003	0,216	0,247	0,000	0,086	0,087	-0,001
n-butano	0,22100	3,151	2,776	-0,276	0,613	0,696	-0,061	0,244	0,245	-0,005
trans-2-buteno	0,03830	2,919	2,563	-0,139	0,098	0,112	-0,005	0,039	0,039	0,000
cis-2-buteno	0,04590	2,919	2,563	-0,139	0,118	0,134	-0,006	0,047	0,047	0,000
n-pentano	0,00001	3,825	3,316	-0,278	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	-0,045
metanol	0,04080	1,431	1,432	-0,436	0,058	0,058	-0,018	0,023	0,021	-0,137
agua	0,00001	0,920	1,400	-2,320	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,419
MTBE	0,00010	4,068	3,632	-0,889	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	-0,071

$\sum x_j \cdot q_j$	2,513
$\sum x_j \cdot r_j$	2,847
$\sum x_j \cdot l_j$	-0,180

2.2.5. Cálculo de la parte residual

La parte residual es algo más compleja. Por ejemplo, para un sistema donde hubiera solo dos grupos, tendríamos:

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

Para facilitar los complejos sumatorios se han definido convenientemente determinadas matrices:

$$\Theta = \begin{pmatrix} \theta_1^{(1)}, \theta_2^{(1)}, \dots, \theta_k^{(1)} \\ \vdots \\ \theta_1^{(j)}, \theta_2^{(j)}, \dots, \theta_k^{(j)} \end{pmatrix} \quad \theta_k^{(j)} = \frac{x_k^{(j)} Q_k}{\sum_k x_k^{(j)} Q_k} = \frac{x_k^{(j)} c_k}{\mathbf{XQ}^T} \quad \mathbf{X}_k^{(j)} = \frac{\mathbf{v}_k^{(j)}}{\sum_k \mathbf{v}_k^{(j)}}$$

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



Ψ_{mn}										
	CH ₃	CH ₂ -CH-	CH ₂	CH	CH ₂ =C-	-CH=CH-	C	CH ₃ O	CH ₃ -OH	H ₂ O
CH ₃	1,000	0,768	1,000	1,000	0,768	0,768	1,000	0,463	0,118	0,018
CH ₂ -CH-	1,114	1,000	1,114	1,114	1,000	1,000	1,114	0,518	0,090	0,436
CH ₂	1,000	0,768	1,000	1,000	0,768	0,768	1,000	0,463	0,118	0,018
CH	1,000	0,768	1,000	1,000	0,768	0,768	1,000	0,463	0,118	0,018
CH ₂ =C-	1,114	1,000	1,114	1,114	1,000	1,000	1,114	0,518	0,090	0,436
-CH=CH-	1,114	1,000	1,114	1,114	1,000	1,000	1,114	0,518	0,090	0,436
C	1,000	0,768	1,000	1,000	0,768	0,768	1,000	0,463	0,118	0,018
CH ₃ O	0,775	0,922	0,775	0,775	0,922	0,922	0,775	1,000	0,482	2,623
CH ₃ -OH	0,951	1,039	0,951	0,951	1,039	1,039	0,951	1,483	1,000	1,741
H ₂ O	0,399	0,219	0,399	0,399	0,219	0,219	0,399	0,191	0,412	1,000

θ_i										
	CH ₃	CH ₂ -CH-	CH ₂	CH	CH ₂ =C-	-CH=CH-	C	CH ₃ O	CH ₃ -OH	H ₂ O
Propileno	0,4190	0,5810	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Propano	0,7585	0,0000	0,2415	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
i-butano	0,9177	0,0000	0,0000	0,0823	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
i-buteno	0,6319	0,0000	0,0000	0,0000	0,3681	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1-buteno	0,3307	0,4587	0,2106	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1,3-butadieno	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
n-butano	0,6110	0,0000	0,3890	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
trans-2-buteno	0,6617	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3383	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
cis-2-buteno	0,6617	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3383	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
n-pentano	0,5115	0,0000	0,4885	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
metanol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000
agua	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
MTBE	0,7004	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,2996	0,0000	0,0000
Mezcla	0,4095	0,3325	0,1980	0,0005	0,0071	0,0290	0,0000	0,0000	0,0232	0,0000

Se omitirán, para mayor simplicidad, varias tablas que se han realizado para el cálculo final de los coeficientes de actividad, de modo se tabulan los resultados finales obtenidos:

$\ln \Gamma_k^{(i)}$ (Parte residual)											
	CH ₃	CH ₂ -CH-	CH ₂	CH	CH ₂ =C-	-CH=CH-	C	CH ₃ O	CH ₃ -OH	H ₂ O	$\ln \Gamma_k^{(i)}$
Propileno	0,0410	0,0245	0,0261	0,0110	0,0206	0,0180	0,0000	0,8765	3,2154	2,8643	0,0202
Propano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1297	6,4953	0,0557
i-butano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1297	6,4953	0,0690
i-buteno	0,0179	0,0603	0,0114	0,0048	0,0507	0,0445	0,0000	0,9358	3,1573	3,3954	0,0100
1-buteno	0,0268	0,0428	0,0170	0,0072	0,0359	0,0315	0,0000	0,9085	3,1787	3,1390	0,0125
1,3-butadieno	0,1046	0,0000	0,0666	0,0281	0,0000	0,0000	0,0000	0,7999	3,3992	2,2546	0,1291
n-butano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1297	6,4953	0,0691
trans-2-buteno	0,0153	0,0670	0,0097	0,0041	0,0563	0,0494	0,0000	0,9454	3,1514	3,4937	0,0099
cis-2-buteno	0,0153	0,0670	0,0097	0,0041	0,0563	0,0494	0,0000	0,9454	3,1514	3,4937	0,0099
n-pentano	0,0000	0,1754	0,0000	0,0000	0,1473	0,1293	0,0000	1,0836	3,1297	6,4953	0,0825
metanol	0,7907	1,0256	0,5035	0,2126	0,8616	0,7561	0,0000	0,1352	0,0000	0,0471	2,6816
agua	1,6125	2,4503	1,0268	0,4336	2,0586	1,8065	0,0000	0,0362	0,2092	0,0000	3,0082
MTBE	0,0818	0,1403	0,0521	0,0220	0,1179	0,1034	0,0000	0,4460	1,5127	1,1681	0,1814
Mezcla	0,0211	0,0646	0,0134	0,0057	0,0542	0,0476	0,0000	0,8096	2,6816	3,0082	



2.2.6. Cálculo de los coeficientes de actividad

Por último sumamos ambas partes, combinatorial y residual, obteniendo así los coeficientes de las distintas especies en la corriente del destilado:

	$\ln \gamma_i^{(C)}$	$\ln \Gamma_k^{(R)}$	$\ln \gamma_j$	γ_j
Propileno	-0,0238	0,0202	-0,0036	0,9964
Propano	-0,0064	0,0557	0,0492	1,0505
i-butano	-0,0051	0,0690	0,0639	1,0659
i-buteno	0,0106	0,0100	0,0206	1,0208
1-buteno	0,0000	0,0125	0,0125	1,0126
1,3-butadieno	-0,0009	0,1291	0,1283	1,1368
n-butano	-0,0052	0,0691	0,0639	1,0660
trans-2-buteno	0,0000	0,0099	0,0099	1,0099
cis-2-buteno	0,0000	0,0099	0,0099	1,0099
n-pentano	-0,0454	0,0825	0,0372	1,0379
metanol	-0,1366	2,6816	2,5450	12,7434
agua	0,4194	3,0082	3,4276	30,8039
MTBE	-0,0708	0,1814	0,1107	1,1170



ANEXO 3

CÁLCULOS JUSTIFICATIVOS



3.1. Tablas comunes al condensador, vaporizador e intercambiador

- *Coefficiente global de transmisión del calor*

CONDENSADOR E-101

Fluido condensante	Medio refrigerante	U (W/m ² ·°C)	
		Min	Máx
Vapor de agua a presión	Agua	2000	4250
Vapor de agua a vacío	Agua	1700	3500
Orgánicos a presión atmosférica	Agua	500	1250
Orgánicos a vacío	Salmuera	300	700
Orgánicos con muchos incondensables a presión atmosférica	Salmuera	125	500
Orgánicos con muchos incondensables a vacío	Salmuera	50	300
Hidrocarburos de bajo punto de ebullición a presión atmosférica	Agua	500	1250
Hidrocarburos de bajo punto de ebullición a vacío	Agua	50	200

REHERVIDOR E-102

Fluido vaporizado	Medio calefactor	U (W/m ² ·°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

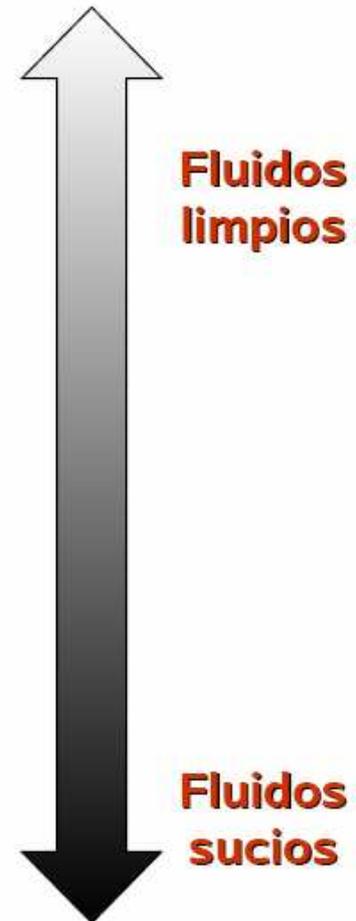
INTERCAMBIADOR E-103

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



- *Resistencias de ensuciamiento*

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



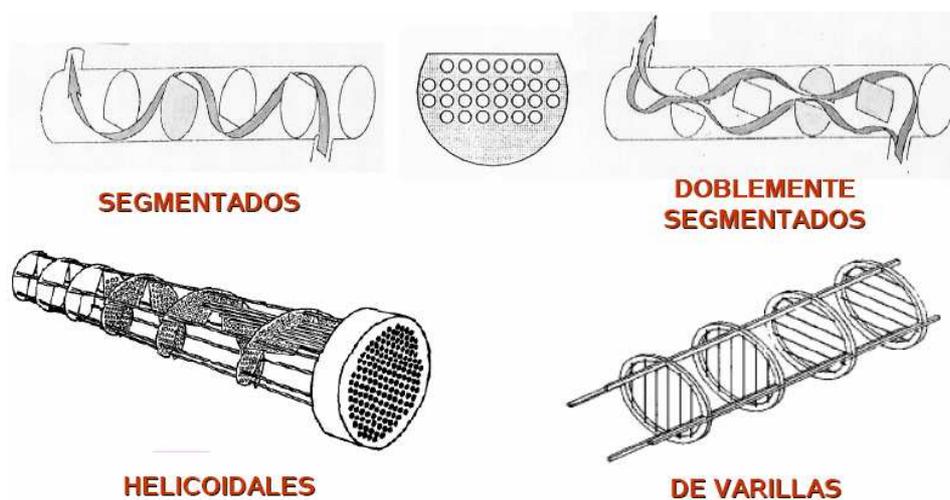
- *Propiedades de los materiales para los tubos*

Material	kw	Smáx
	(Kcal/m·h·K)	MPa
Acero al carbono	57,1	0,150
Acero inoxidable 304 (18% Cr, 8% Ni)	14,7	0,134
Acero inoxidable 316 (17% Cr, 12% Ni)	13,8	0,134
Aluminio	221,5	0,018
Cobre	392,5	0,040
Cuproniquel (90-10)	59,2	0,066
Cuproniquel (70-30)	26,7	0,088
Titanio	20,4	0,084

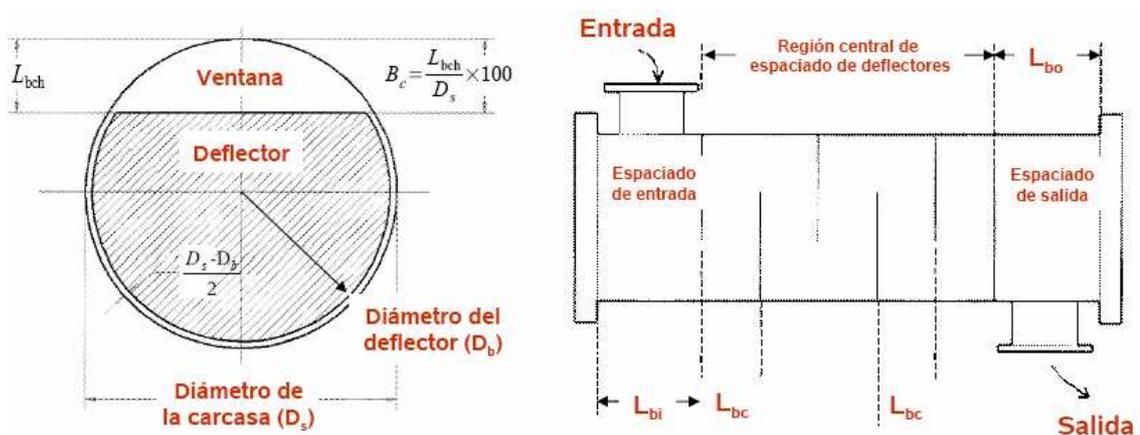
- **Configuración inicial del diseño. Recomendaciones**

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%

- **Elección de los deflectores**



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



Los dos parámetros fundamentales en relación con los deflectores son el corte del deflector (B_c) y el espaciado entre deflectores (L_b).

El corte del deflector se expresa como un porcentaje respecto del diámetro de la carcasa.

- **Evaluación del diseño. Modificación de la configuración inicial**

	Efecto del aumento en							
	Diámetro de la carcasa (*)	Longitud de los tubos	Diámetro exterior del tubo (**)	Espaciado entre tubos (solo)	Espesor del tubo (BWG)	Numero de pasos	Espaciado entre deflectores (solo)	Corte de los deflectores (***)
Sobredimensionado	↑	↑	↓	↓	↓	↓	↓	
($\Delta P/P_0$), tubos	↓	↑	↓	↑	↑	↑	NA	
($\Delta P/P_0$), carcasa	↓	↑	↓	↓	NA	NA	↓	
Velocidad, tubos	↓	NA	↓	↑	↑	↑	NA	
Velocidad, carcasa	↓	NA	NA	↓	NA	NA	↓	

↑ = aumenta
↓ = disminuye
NA = no afecta

(*) Cuando se varía el diámetro de la carcasa se modifica indirectamente el espaciado entre deflectores, pues este se expresa como un porcentaje de aquel

(**) Cuando se varía 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



- **Determinación del coeficiente de fricción (f)**

1) **LADO TUBOS**

El coeficiente de fricción en los tubos se ha correlacionado tradicionalmente con el número de Reynolds y con la rugosidad del material del tubo (ϵ):

	Ecuación	Régimen	Tubos
Poiseuille	$f = \frac{64}{Re}$	$Re < 2000$	Lisos y rugosos
Blasius	$f = \frac{0.316}{Re^{0.25}}$	$2000 < Re < 10^5$	Lisos
Karman-Prandtl	$\frac{1}{\sqrt{f}} = 2 \log(Re \sqrt{f}) - 0.8$	$2000 < Re < 10^5$	Lisos
Colebrook-White	$\frac{1}{\sqrt{f}} = -2 \log \left[\frac{\epsilon/D}{3.7065} + \frac{2.51}{Re \sqrt{f}} \right]$	$2000 < Re < 10^4$	Rugosos
Karman-Prandtl	$\frac{1}{\sqrt{f}} = 2 \log \left[\frac{D}{2\epsilon} + 1.74 \right]$	$10^4 < Re < 10^5$	Rugosos
Chen	$\frac{1}{\sqrt{f}} = -4 \log \left\{ \frac{\epsilon/D}{3.7065} - \frac{5.0452}{Re} \log \left[\frac{\epsilon/D}{2.8257} + \frac{5.8506}{Re^{0.8981}} \right] \right\}$	$2000 < Re < 10^5$	Rugosos

2) **LADO CARCASA**

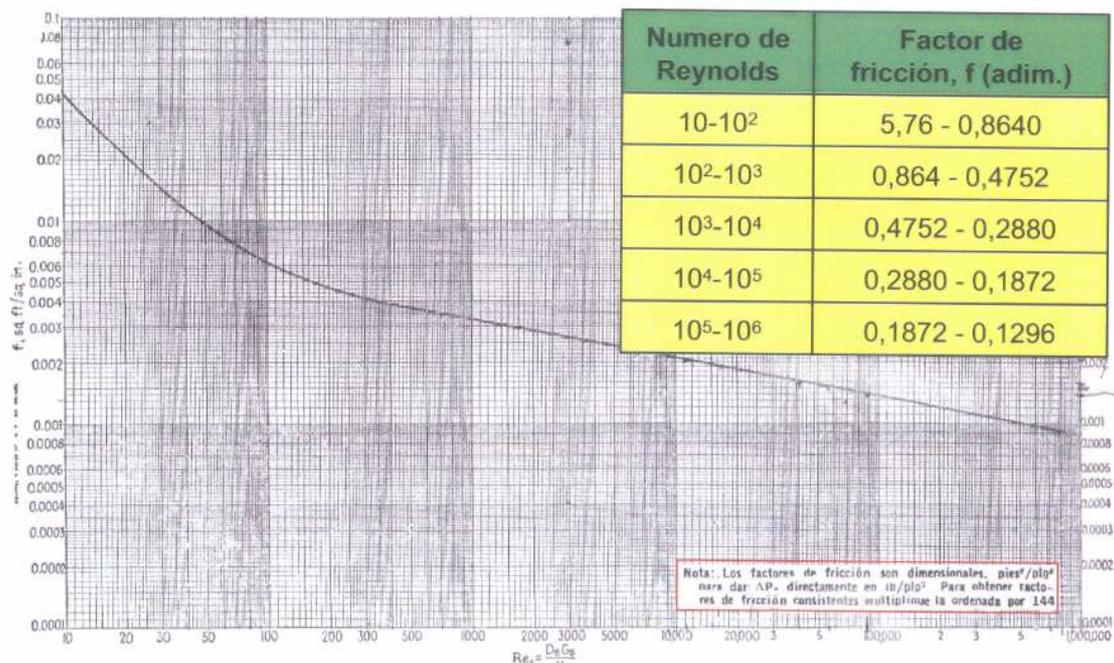


FIG. 29. Factores de fricción lado de la carcasa, para haces de tubos con deflectores segmentados 25%



- Determinación del diámetro de la carcasa (D_c) en función del número de tubos (N_t)

En verde se señala el diámetro de la carcasa usado para el condensador, en rojo el del vaporizador, y en azul el del intercambiador de calor.

C. Tubos de 1/2 de pulg de diámetro exterior con un paso cuadrado de 1 pulg.

Diámetro interno del casco en pulg	T.E.M.A. P o S				T.E.M.A. U		
	Número de pasos						
	1	2	4	6	2	4	6
8	24	26	16	12	24	24	12
10	32	48	44	24	32	44	32
12	80	78	66	56	72	72	70
13 1/4	104	90	70	80	90	92	90
15 1/4	136	128	125	114	126	132	120
17 1/4	184	174	154	160	170	178	160
19 1/4	222	220	204	198	204	224	224
21 1/4	280	272	262	260	264	280	274
23 1/4	345	330	310	308	348	338	328
25	398	390	386	344	408	382	378
27	472	456	432	424	480	468	460
29	554	532	510	498	562	548	530
31	637	624	598	578	648	630	620
33	730	712	682	668	748	728	718
35	828	812	780	760	848	820	810
37	937	918	882	872	958	932	918
39	1048	1028	986	972	1068	1044	1020
42	1224	1206	1170	1140	1244	1224	1210
45	1421	1394	1350	1306	1408	1408	1388
48	1629	1598	1548	1536	1640	1628	1602
54	2086	2048	2010	1962	2108	2064	2060
60	2585	2532	2512	2476	2614	2584	2558

D. Tubos de 1/2 de pulg de diámetro exterior con paso triangular de 1 pulg

Diámetro interno del casco en pulg	T.E.M.A. L o M				T.E.M.A. P o S				T.E.M.A. U		
	Número de pasos										
	1	2	4	6	1	2	4	6	2	4	6
8	42	40	26	24	31	26	16	12	32	24	24
10	73	66	52	44	56	48	42	40	52	48	40
12	109	102	88	80	88	78	62	68	84	76	74
13 1/4	136	128	112	102	121	106	94	88	110	100	98
15 1/4	183	172	146	148	159	148	132	132	152	140	136
17 1/4	247	228	208	192	208	198	182	180	206	188	182
19 1/4	295	282	258	248	258	250	228	220	266	248	234
21 1/4	361	346	318	320	320	314	290	276	330	316	296
23 1/4	438	416	382	372	400	384	352	336	400	384	356
25	507	486	448	440	450	442	400	392	472	440	424
27	592	574	536	516	543	530	488	468	554	528	502
29	692	668	632	604	645	618	574	556	648	616	588
31	796	774	732	708	741	716	666	648	744	716	688
33	909	886	836	812	843	826	760	740	852	816	788
35	1021	1002	942	920	950	930	878	856	974	932	908
37	1155	1124	1058	1032	1070	1052	992	968	1092	1056	1008
39	1277	1254	1194	1164	1209	1184	1122	1096	1224	1180	1146
42	1503	1460	1404	1372	1409	1378	1314	1296	1434	1388	1350
45	1726	1690	1622	1588	1635	1608	1536	1504	1652	1604	1560
48	1964	1936	1870	1828	1887	1842	1768	1740	1894	1844	1794
54	2519	2466	2380	2352	2389	2366	2270	2244	2426	2368	2326
60	3095	3058	2954	2928	2981	2940	2832	2800	3006	2944	2884
66	3769	3722	3618	3576							
72	4502	4448	4324	4280							
78	5309	5252	5126	5068							
84	6162	6108	5964	5900							
90	7103	7040	6898	6800							
96	8093	8026	7848	7796							
108	10280	10206	9992	9940							
120	12731	12648	12450	12336							



E. Tubos de 1 pulg de diámetro exterior con un paso cuadrado de 1/4 de pulg

Diámetro interior del casco, en pulg	T.E.M.A. P o S				T.E.M.A. L		
	Número de pasos				Número de pasos		
	1	2	4	6	2	4	6
8	17	12	8	1	14	5	6
10	30	30	16	18	30	24	12
12	52	48	42	24	44	40	32
13 1/4	61	56	52	50	60	48	44
15 1/4	85	78	62	64	80	72	74
17 1/4	108	108	104	96	104	100	100
19 1/4	144	136	130	114	132	132	120
21 1/4	173	166	154	156	172	168	148
23 1/4	217	208	194	192	212	204	198
25	252	240	230	212	244	240	230
27	296	280	270	260	290	284	274
29	345	336	310	314	340	336	328
31	402	390	366	368	400	384	372
33	461	452	432	420	456	444	440
35	520	514	494	484	518	504	502
37	588	572	562	548	584	576	566
39	661	640	624	620	664	644	640
42	776	756	738	724	764	748	750
45	900	882	862	844	902	880	862
48	1029	1016	984	972	1028	1008	1004
54	1310	1296	1268	1256	1320	1296	1284
60	1641	1624	1598	1576	1634	1616	1614

F. Tubos de 1 pulg de diámetro exterior con un paso triangular de 1/4 de pulg

Diámetro interior 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	27	26	8	12	18	14	8	12	14	12	6
10	42	40	34	24	33	28	16	18	28	24	24
12	64	66	52	44	51	48	42	44	52	40	40
13 1/4	81	74	62	56	73	68	52	44	64	56	52
15 1/4	106	106	88	92	93	90	78	76	90	80	78
17 1/4	147	134	124	114	126	122	112	102	122	112	102
19 1/4	183	176	150	152	159	152	132	136	152	140	136
21 1/4	226	220	204	186	202	192	182	172	196	180	176
23 1/4	268	262	236	228	249	238	216	212	242	224	216
25	316	302	274	272	291	278	250	240	286	264	246
27	375	360	336	324	345	330	298	288	340	320	300
29	430	416	390	380	400	388	356	348	400	380	352
31	495	482	452	448	459	450	414	400	456	436	414
33	579	554	520	504	526	514	484	464	526	504	486
35	645	622	586	576	596	584	548	536	596	572	548
37	729	712	662	648	672	668	626	608	668	636	614
39	808	792	744	732	756	736	704	692	748	728	700
42	947	918	874	868	890	878	834	808	890	856	830
45	1095	1068	1022	1000	1035	1008	966	948	1028	992	972
48	1241	1220	1176	1148	1181	1162	1118	1092	1180	1136	1100
54	1577	1572	1510	1480	1520	1492	1436	1416	1508	1468	1442
60	1964	1940	1882	1832	1884	1858	1800	1764	1886	1840	1794
66	2390	2362	2282	2260							
72	2861	2828	2746	2708							
78	3368	3324	3236	3216							
84	3920	3882	3784	3736							
90	4499	4456	4370	4328							
96	5144	5104	4986	4936							
108	6546	6494	6360	6300							
120	8117	8038	7870	7812							



G. Tubos de 1/2 de pulg de diámetro exterior, con un paso cuadrado de 1/16 de pulg

Diámetro interior del casco, en pulg	T.E.M.A. P o S				T.E.M.A. U		
	Número de pasos				Número de pasos		
	1	2	4	6	2	4	6
8	12	12	4	0	4	4	6
10	21	12	8	12	12	8	12
12	29	28	16	18	26	20	12
13 1/4	38	34	34	24	36	28	15
15 1/4	52	48	44	48	44	44	32
17 1/4	70	66	56	50	60	60	56
19 1/4	85	84	70	80	82	76	79
21 1/4	108	108	100	96	100	100	100
23 1/4	136	128	128	114	128	120	120
25	154	154	142	136	154	148	130
27	184	180	158	172	176	172	160
29	217	212	204	198	212	204	198
31	252	248	234	236	242	240	234
33	289	276	270	264	280	280	274
35	329	316	310	304	324	312	308
37	372	368	354	340	358	352	350
39	420	402	402	392	408	400	392
42	485	476	468	464	480	476	464
45	565	554	546	544	558	548	550
48	653	636	628	620	644	628	632
54	837	820	812	804	824	808	808
60	1036	1028	1012	1008	1028	1016	1008

H. Tubos de 1/2 de pulg de diámetro exterior con un paso triangular de 1/16 de pulg

Diámetro interior 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	15	10	8	12	13	10	4	0	6	4	6
10	27	22	16	12	18	20	8	12	14	12	12
12	38	36	26	24	33	26	26	15	28	20	18
13 1/4	55	44	42	40	38	44	34	24	34	28	30
15 1/4	86	64	52	50	57	58	48	44	52	48	40
17 1/4	88	82	78	68	81	72	62	68	72	68	64
19 1/4	117	106	98	96	100	94	86	80	90	84	78
21 1/4	136	134	124	108	126	120	116	102	118	112	102
23 1/4	170	164	146	148	159	146	132	132	148	132	120
25	198	188	166	168	183	172	150	145	172	160	152
27	237	228	208	192	208	206	190	180	200	188	180
29	268	266	242	236	249	238	224	220	242	228	216
31	312	304	284	276	291	282	262	256	282	264	250
33	357	346	322	324	333	326	298	296	326	308	292
35	417	398	372	364	372	368	344	336	362	344	336
37	446	446	422	408	425	412	394	384	416	396	384
39	506	490	472	464	478	468	442	432	472	444	428
42	592	584	552	544	558	546	520	512	554	524	510
45	680	676	646	632	646	634	606	596	636	624	592
48	788	774	736	732	748	732	704	696	736	708	692
54	1003	980	952	928	962	952	912	892	946	916	890
60	1237	1228	1188	1152	1194	1182	1144	1116	1176	1148	1116
66	1520	1496	1448	1424							
72	1814	1786	1736	1724							
78	2141	2116	2068	2044							
84	2507	2470	2392	2372							
90	2861	2840	2764	2744							
96	3275	3246	3158	3156							
106	4172	4136	4046	4020							
120	5164	5128	5038	5000							

3.2. Anexos al condensador

En la siguiente tabla se adjuntan las composiciones del líquido y del vapor en cada uno de los intervalos de condensación, composiciones que han sido necesarias para la simulación con CHEMCAD.

- Composiciones en cada intervalo de condensación.

		$T = 74,78\text{ °C}$			$T = 69,78\text{ °C}$			$T = 64,78\text{ °C}$		
		MM _{vapor} = 59,239			MM _{vapor} = 57,891			MM _{vapor} = 56,697		
		MM _{liquido} = 0,000			MM _{liquido} = 68,674			MM _{liquido} = 65,519		
Mmolecular	Componente	y _{io}	y _i	x _i	y _{io}	y _i	x _i	y _{io}	y _i	x _i
32,042	Metanol	0,03688	0,03688	0,00000	0,03688	0,03671	0,03807	0,03671	0,03641	0,03863
88,15	MTBE	0,14332	0,14332	0,00000	0,14332	0,10367	0,42091	0,10367	0,06930	0,32321
42,081	propileno	0,04976	0,04976	0,00000	0,04976	0,05518	0,01178	0,05518	0,06155	0,01454
44,096	propano	0,00944	0,00944	0,00000	0,00944	0,01043	0,00249	0,01043	0,01159	0,00307
58,123	i-butano	0,00513	0,00513	0,00000	0,00513	0,00545	0,00287	0,00545	0,00577	0,00346
56,107	i-buteno	0,01549	0,01549	0,00000	0,01549	0,01627	0,01000	0,01627	0,01697	0,01186
56,107	1-buteno	0,40018	0,40018	0,00000	0,40018	0,41956	0,26452	0,41956	0,43625	0,31296
54,092	1,3-butadieno	0,07848	0,07848	0,00000	0,07848	0,08252	0,05022	0,08252	0,08614	0,05939
58,123	n-butano	0,18868	0,18868	0,00000	0,18868	0,19584	0,13856	0,19584	0,20098	0,16301
56,107	trans-2-buteno	0,03921	0,03921	0,00000	0,03921	0,04035	0,03124	0,04035	0,04098	0,03632
56,107	cis-2-buteno	0,03267	0,03267	0,00000	0,03267	0,03334	0,02797	0,03334	0,03352	0,03220
72,15	n-pentano	0,00067	0,00067	0,00000	0,00067	5,985E-04	1,171E-03	0,00060	5,080E-04	1,176E-03
18	agua	0,00009	0,00009	0,00000	0,00009	7,392E-05	2,026E-04	0,00007	5,957E-05	1,656E-04

$T = 59,78\text{ °C}$			$T = 54,78\text{ °C}$			$T = 49,78\text{ °C}$			$T = 44,78\text{ °C}$		
MM _{vapor} = 55,611			MM _{vapor} = 54,508			MM _{vapor} = 52,985			MM _{vapor} = 51,161		
MM _{liquido} = 61,968			MM _{liquido} = 58,219			MM _{liquido} = 55,440			MM _{liquido} = 53,966		
y _{io}	y _i	x _i	y _{io}	y _i	x _i	y _{io}	y _i	x _i	y _{io}	y _i	x _i
0,03641	0,03626	0,03712	0,03626	0,03706	0,03437	0,03706	0,03863	0,03611	0,03863	0,03598	0,04006
0,06930	0,03987	0,21220	0,03987	0,01602	0,09625	0,01602	0,00342	0,02373	0,00342	0,00060	0,00494
0,06155	0,07042	0,01848	0,07042	0,08919	0,02604	0,08919	0,15366	0,04977	0,15366	0,26327	0,09470
0,01159	0,01317	0,00390	0,01317	0,01644	0,00544	0,01644	0,02705	0,00995	0,02705	0,04400	0,01793
0,00577	0,00609	0,00419	0,00609	0,00649	0,00514	0,00649	0,00693	0,00623	0,00693	0,00686	0,00696
0,01697	0,01756	0,01408	0,01756	0,01798	0,01657	0,01798	0,01741	0,01833	0,01741	0,01541	0,01848
0,43625	0,44990	0,36994	0,44990	0,45726	0,43251	0,45726	0,43524	0,47072	0,43524	0,37796	0,46606
0,08614	0,08941	0,07026	0,08941	0,09217	0,08286	0,09217	0,09065	0,09310	0,09065	0,08141	0,09562
0,20098	0,20315	0,19043	0,20315	0,19804	0,21524	0,19804	0,17180	0,21408	0,17180	0,13503	0,19157
0,04098	0,04082	0,04173	0,04082	0,03872	0,04579	0,03872	0,03168	0,04303	0,03168	0,02328	0,03620
0,03352	0,03291	0,03648	0,03291	0,03036	0,03895	0,03036	0,02344	0,03459	0,02344	0,01617	0,02735
0,00051	3,900E-04	1,081E-03	3,900E-04	2,303E-04	7,678E-04	2,303E-04	8,129E-05	3,214E-04	8,129E-05	2,417E-05	1,120E-04
0,00006	4,692E-05	1,210E-04	4,692E-05	3,526E-05	7,451E-05	3,526E-05	2,240E-05	4,312E-05	2,240E-05	1,206E-05	2,797E-05



- Régimen de trabajo y cálculo del área requerida

T (K)	μ_G (Pa·s)	μ_L	ρ_v (kg/m ³)	ρ_L (Kg/m ³)	y	K_L	k_G	C_{p_v} (J/kg K)	C_{p_L} (J/kg k)	C_{gt}	Conclusión
347,78	9,58E-06	0	13,1114	0	1	0,00E+00	2,12E-02	1,74E+03	0,00E+00	0	reg de corte
342,78	9,38E-06	0,0001469	15,2702	603,4694	0,855112501	0,1017	2,04E-02	1,73E+03	2,42E+03	0,422347851	valor medio
337,78	9,27E-06	0,0001421	15,2105	593,8765	0,724091203	0,1013	2,00E-02	1,71E+03	2,42E+03	0,626980087	valor medio
332,78	9,16E-06	0,0001356	15,1831	581,0343	0,588942281	0,1005	1,96E-02	1,70E+03	2,43E+03	0,838355592	reg grav
327,78	9,06E-06	0,0001282	15,1419	566,0748	0,405673273	0,0995	1,92E-02	1,68E+03	2,44E+03	1,196866898	reg grav
322,78	8,99E-06	0,000124	14,9247	557,4459	0,149629313	0,0996	1,89E-02	1,66E+03	2,44E+03	2,322409739	reg grav
317,78	8,95E-06	0,0001233	14,5742	556,6591	0,050534259	0,1008	1,87E-02	1,64E+03	2,43E+03	4,171138375	reg grav

CÁLCULO DEL ÁREA REQUERIDA

Q(MW)	Tv	hsv	Hcf	λ_{vap} (J/kg)	λ_{vap} (J/kmol)	Φ_{d0}	Φ_d	Uo	h_i	t_R	$1/(U_o \cdot \Delta T)$	Areas
0,000	347,78	0	0	-	2,25E+07	0	0	0	0	293	-	
0,556	342,78	1052,7949	1735,2118	3,21E+05	2,21E+07	6,54280968	5,5085	412,7592	1424,0415	296,5528598	5,241E-05	29,1495
0,990	337,78	1055,3299	3700,6597	3,28E+05	2,15E+07	7,475918649	6,2232	497,1678	2617,6793	299,323121	5,230E-05	45,4111
1,433	332,78	1055,3215	3931,8076	3,35E+05	2,08E+07	10,06666498	4,2800	510,8901	2941,5180	302,1545201	6,391E-05	51,5125
2,016	327,78	1051,7078	3446,3167	3,43E+05	1,99E+07	20,56396583	7,0566	512,8090	2991,6963	305,8784332	8,904E-05	89,1651
2,816	322,78	1045,3981	3064,0900	3,51E+05	1,95E+07	80,80824517	18,3924	511,5301	2958,1069	310,9909173	1,658E-04	203,9776
3,131	317,78	1039,6058	2992,5699	3,58E+05	1,93E+07	113,7010747	23,3590	510,0243	2919,3064	312,9998457	4,102E-04	181,1473

$\Sigma = A_{req} = 300,1815 \text{ m}^2$



ANEXO 4

HIDRÁULICA DE PLATOS



Para llevar a cabo dichos cálculos se han utilizado la media de las corrientes de vapor y de líquido correspondientes a la parte superior e inferior de la columna de destilación, obteniendo como consecuencia los siguientes valores:

$$L = 0,11795 \text{ kmol/s}$$

$$V = 0,14015 \text{ kmol/s}$$

A lo largo del diseño será necesario conocer el valor de estos caudales en distintas unidades, por lo que a continuación se tabulan los resultados:

Unidad	CAUDAL	
	Líquido	Gas
kmol/h	424,62	504,54
kmol/s	0,118	0,140
kg/s	10,285	11,836
m ³ /s	0,017	0,663
gpm	266,842	10508,052
ft ³ /s	0,594	23,408

De igual modo que con los caudales, las densidades, así como cualquier otra propiedad que fuera necesaria, serán calculadas también tomando como válido la media de sus respectivos valores en la cabeza y el fondo de la torre., obteniendo los siguientes resultados para líquido y vapor:

$$\rho_L = 611,004 \text{ kg/m}^3 = 38,145 \text{ lb/ft}^3$$

$$\rho_V = 17,855 \text{ kg/m}^3 = 1,114 \text{ lb/ft}^3$$

Una vez definidas los flujos de interés, se han de estimar una serie de consideraciones en el diseño, a partir de las cuales se determinará su valía en función de ciertos criterios.

Los valores recomendados para el diseño hidrodinámico de la columna de destilación se encuentran en la siguiente tabla:

Parámetro	Símbolo	Valor recomendado	Opciones
Espaciado entre platos	ts	24"	12" (mínimo práctico) - 48" (máximo)
Espesor del plato	td	0,078" (14 gage)	0,4 < td/dh < 0,7
Diámetro de las perforaciones	dh	3/8"	1/8" (mínimo) - 1" (máximo)
Altura del rebosadero	hw	2"	1/2" (mínimo) - 6" (máximo)
Número de pasos	Np	1	1 (mínimo) - 0,377*(AT) ^{0,5} (máximo)
Factor de inundación	Ff	0,82	0,65 (vacío) - 0,82 (máximo)
Factor de goteo	Wf	0,6	Para una flexibilidad T = 2
Factor de espuma	Sf	1 (normal)	0,85 (moderadamente espumante); 0,73 (espumante); 0,6 (muy espumante) ; 0,3 (espuma estable)

En nuestro caso se han escogido para el diseño los anteriores valores recomendados, excepto en el caso del diámetro de las perforaciones, dh, que se estimado más conveniente utilizar 1" en lugar de 3/8".

A partir de aquí se llevará a cabo una serie de cálculos que determinarán si los parámetros escogidos son válidos o no.

4.1. Calcular la velocidad de inundación

Se calcula mediante la ecuación de Souders-Brown:

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

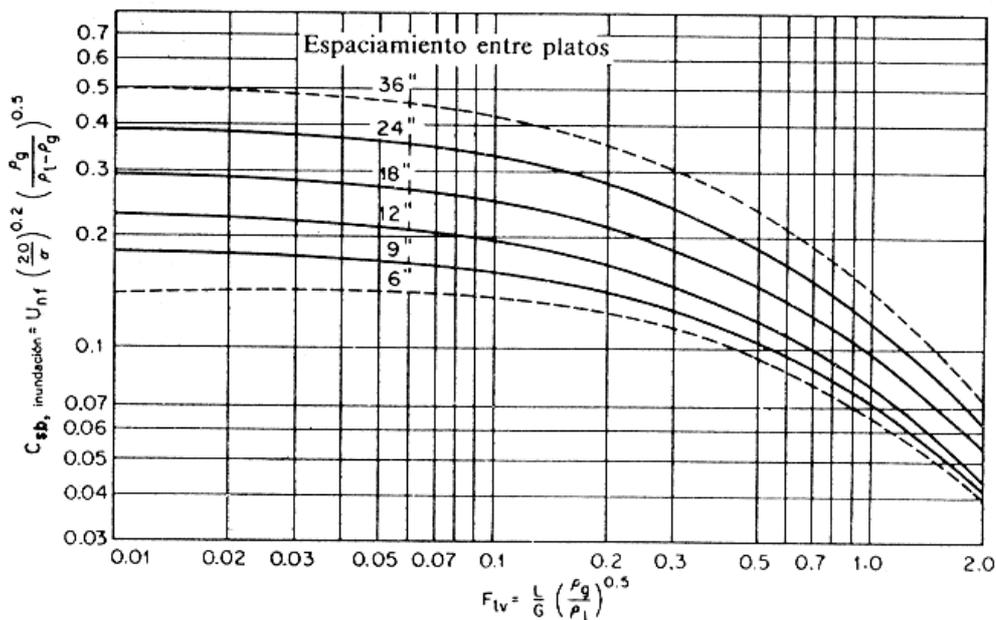
donde:

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

ρ_L, ρ_G = densidad de líquido y gas respectivamente, lb/ft³

S_f = factor de espuma, (adim)

C_{sb} = parámetro de capacidad. Se obtiene mediante la gráfica:



donde la abscisa es el parámetro de flujo F_{IV} donde:

L, G = caudales máxicos de líquido y gas respectivamente, kg/h

ρ_L, ρ_G = densidad de líquido y gas respectivamente, kg/m³.

Con nuestros valores, el valor de F_{IV} es de 0,14387026, y con este valor se obtiene en la gráfica un valor de $C_{sb} = 0,3$. Entonces con la anterior fórmula obtenemos:

$u_{nf} = 1,72907845 \text{ ft/s}$

4.2. Calcular la velocidad de líquido en el vertedero

Seleccionar el menor de los siguientes valores:

$$u_d = \min \begin{cases} 250 \cdot S_f \\ 7.5 \cdot S_f [t_s (\rho_L - \rho_V)]^{0.5} \\ 41 \cdot S_f \cdot (\rho_L - \rho_V)^{0.5} \end{cases}$$

u_d = velocidad del líquido en el vertedero (gpm/ft²)

S_f = factor de espuma, (adim)

t_s = espaciado entre platos, pulg

ρ_L, ρ_V = densidad de líquido y vapor, lb/ft³

En nuestro caso:

$$u_d = \min \begin{cases} 250 \cdot S_f \longrightarrow 250 \cdot 1 = 250 \\ 7.5 \cdot S_f [t_s (\rho_L - \rho_V)]^{0.5} \longrightarrow 7.5 \cdot 1 \cdot [24 \cdot (38,145 - 1,114)]^{0.5} = 223,59 \\ 41 \cdot S_f \cdot (\rho_L - \rho_V)^{0.5} \longrightarrow 41 \cdot 1 \cdot (38,145 - 1,114)^{0.5} = 249,49 \end{cases}$$

Por tanto, el menor valor es

$$u_d = 223,59 \text{ gpm/ft}^2$$

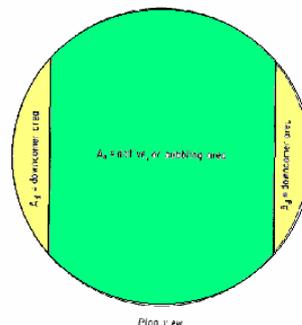
4.3. Distribución inicial de la geometría del plato ($N_p = 1$)

Los valores a estimar son el área total del plato (A_t), el área de vertederos (A_d , amarillo), y el área activa (A_a , verde), supuesto un plato de un solo paso:

$$A_t = \frac{V}{u_s}$$

$$A_d = \frac{L}{u_d F_f}$$

$$A_a = A_t - 2A_d$$



donde:

A_t = área total, ft². Área de la sección transversal total de la columna.

A_d = área de vertederos, ft². Área de un conjunto descentente (bajante).



A_a = área activa, ft^2 .

V = caudal volumétrico de gas, ft^3/s

L = caudal volumétrico de líquido, gpm

u_s = velocidad superficial del gas en condiciones de operación ($0.85 \times u_{FL}$), ft/s

u_d = velocidad de líquido en el vertedero, gpm/ft^2

F_f = factor de inundación, (adim.)

En nuestro caso, $u_s = 0,85 \cdot u_{FL} = 0,85 \cdot 1,72907845 = 1,46971668 \text{ ft/s}$.

Los resultados de las áreas son, por tanto:

$$A_t = 19,6349541 \text{ ft}^2$$

$$A_d = 1,45544033 \text{ ft}^2$$

$$A_a = 16,7240734 \text{ ft}^2$$

El resto de la geometría del plato se determina mediante las tablas adjuntas en donde se determina la anchura del vertedero (H) y la longitud del rebosadero (L_w) en función del cociente entre el área de vertederos y el área total del plato (A_d/A_t).

$$\frac{A_d}{A_t} = 0,07412$$

$$L/D = 0,3242 \rightarrow$$

$$L_w = 1,621 \text{ ft}$$

$$H/D = 0,027 \rightarrow$$

$$H = 0,135 \text{ ft}$$

Por último se determina la longitud de la trayectoria de flujo (F_{PL}), como la distancia libre entre vertederos, esto es:

$$F_{PL} = D_t - 2H$$

El diámetro de la torre se obtiene a partir del área total, mediante:

$$D_t = \left(\frac{4A_t}{\pi} \right)^{0.5}$$

Los valores obtenidos para los dos anteriores fórmulas son:

$$D_t = 4,50320 \approx 5 \text{ ft}$$

$$F_{pl} = 4,73 \text{ ft}$$

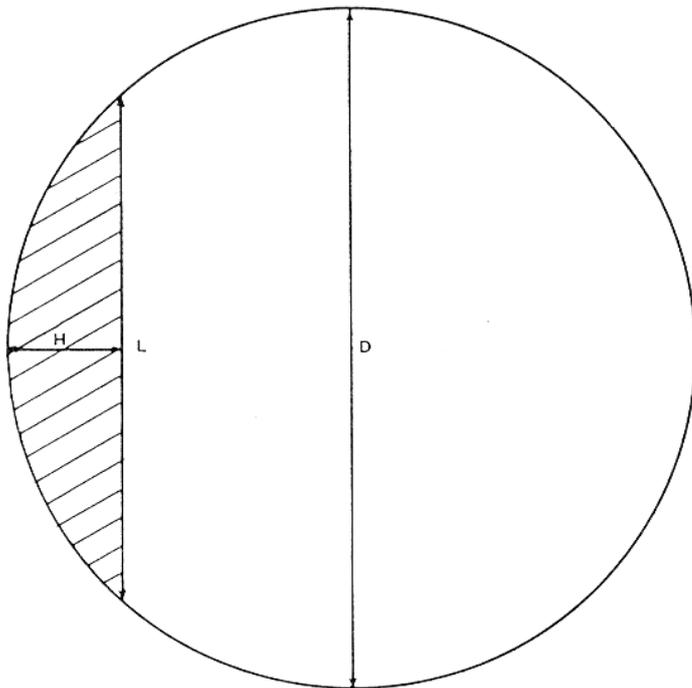


TABLE 4
SEGMENTAL FUNCTIONS

D = TOWER DIAMETER
H = CHORD HEIGHT
L = CHORD LENGTH
A_D = CHORD AREA
A_T = TOWER AREA

H/D FROM .0 TO .1			H/D FROM .1 TO .2			H/D FROM .2 TO .3			H/D FROM .3 TO .4			H/D FROM .4 TO .5		
H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T
.0000	.0000	.0000	.0200	.2800	.0048	.0400	.3919	.0134	.0600	.4750	.0245	.0800	.5426	.0375
.0005	.0447	.0000	.0205	.2834	.0050	.0405	.3943	.0137	.0605	.4768	.0248	.0805	.5441	.0378
.0010	.0632	.0001	.0210	.2868	.0051	.0410	.3966	.0139	.0610	.4787	.0251	.0810	.5457	.0382
.0015	.0774	.0001	.0215	.2901	.0053	.0415	.3989	.0142	.0615	.4805	.0254	.0815	.5472	.0385
.0020	.0894	.0002	.0220	.2934	.0055	.0420	.4012	.0144	.0620	.4823	.0257	.0820	.5487	.0389
.0025	.0999	.0002	.0225	.2966	.0057	.0425	.4035	.0147	.0625	.4841	.0260	.0825	.5502	.0392
.0030	.1094	.0003	.0230	.2998	.0059	.0430	.4057	.0149	.0630	.4859	.0263	.0830	.5518	.0396
.0035	.1181	.0004	.0235	.3030	.0061	.0435	.4080	.0152	.0635	.4877	.0266	.0835	.5533	.0399
.0040	.1262	.0004	.0240	.3061	.0063	.0440	.4102	.0155	.0640	.4895	.0270	.0840	.5548	.0403
.0045	.1339	.0005	.0245	.3092	.0065	.0445	.4124	.0157	.0645	.4913	.0273	.0845	.5563	.0406
.0050	.1411	.0006	.0250	.3122	.0067	.0450	.4146	.0160	.0650	.4931	.0276	.0850	.5578	.0410
.0055	.1479	.0007	.0255	.3153	.0069	.0455	.4168	.0162	.0655	.4948	.0279	.0855	.5592	.0413
.0060	.1545	.0008	.0260	.3183	.0071	.0460	.4190	.0165	.0660	.4966	.0282	.0860	.5607	.0417
.0065	.1607	.0009	.0265	.3212	.0073	.0465	.4211	.0168	.0665	.4983	.0285	.0865	.5622	.0421
.0070	.1667	.0010	.0270	.3242	.0075	.0470	.4233	.0171	.0670	.5000	.0288	.0870	.5637	.0424
.0075	.1726	.0011	.0275	.3271	.0077	.0475	.4254	.0173	.0675	.5018	.0292	.0875	.5651	.0428
.0080	.1782	.0012	.0280	.3299	.0079	.0480	.4275	.0176	.0680	.5035	.0295	.0880	.5666	.0431
.0085	.1836	.0013	.0285	.3328	.0081	.0485	.4296	.0179	.0685	.5052	.0298	.0885	.5680	.0435
.0090	.1889	.0014	.0290	.3356	.0083	.0490	.4317	.0181	.0690	.5069	.0301	.0890	.5695	.0439
.0095	.1940	.0016	.0295	.3384	.0085	.0495	.4338	.0184	.0695	.5086	.0304	.0895	.5709	.0442
.0100	.1990	.0017	.0300	.3412	.0087	.0500	.4359	.0187	.0700	.5103	.0308	.0900	.5724	.0446
.0105	.2039	.0018	.0305	.3439	.0090	.0505	.4379	.0190	.0705	.5120	.0311	.0905	.5738	.0449
.0110	.2086	.0020	.0310	.3466	.0092	.0510	.4400	.0193	.0710	.5136	.0314	.0910	.5752	.0453
.0115	.2132	.0021	.0315	.3493	.0094	.0515	.4420	.0195	.0715	.5153	.0318	.0915	.5766	.0457
.0120	.2178	.0022	.0320	.3520	.0096	.0520	.4441	.0198	.0720	.5170	.0321	.0920	.5781	.0460
.0125	.2222	.0024	.0325	.3546	.0098	.0525	.4461	.0201	.0725	.5186	.0324	.0925	.5795	.0464
.0130	.2265	.0025	.0330	.3573	.0101	.0530	.4481	.0204	.0730	.5203	.0327	.0930	.5809	.0468
.0135	.2308	.0027	.0335	.3599	.0103	.0535	.4501	.0207	.0735	.5219	.0331	.0935	.5823	.0472
.0140	.2350	.0028	.0340	.3625	.0105	.0540	.4520	.0210	.0740	.5235	.0334	.0940	.5837	.0475
.0145	.2391	.0030	.0345	.3650	.0108	.0545	.4540	.0212	.0745	.5252	.0337	.0945	.5850	.0479
.0150	.2431	.0031	.0350	.3676	.0110	.0550	.4560	.0215	.0750	.5268	.0341	.0950	.5864	.0483
.0155	.2471	.0033	.0355	.3701	.0112	.0555	.4579	.0218	.0755	.5284	.0344	.0955	.5878	.0486
.0160	.2510	.0034	.0360	.3726	.0115	.0560	.4598	.0221	.0760	.5300	.0347	.0960	.5892	.0490
.0165	.2548	.0036	.0365	.3751	.0117	.0565	.4618	.0224	.0765	.5316	.0351	.0965	.5906	.0494
.0170	.2585	.0037	.0370	.3775	.0119	.0570	.4637	.0227	.0770	.5332	.0354	.0970	.5919	.0498
.0175	.2622	.0039	.0375	.3800	.0122	.0575	.4656	.0230	.0775	.5348	.0358	.0975	.5933	.0501
.0180	.2659	.0041	.0380	.3824	.0124	.0580	.4675	.0233	.0780	.5363	.0361	.0980	.5946	.0505
.0185	.2695	.0042	.0385	.3848	.0127	.0585	.4694	.0236	.0785	.5379	.0364	.0985	.5960	.0509
.0190	.2730	.0044	.0390	.3872	.0129	.0590	.4712	.0239	.0790	.5395	.0368	.0990	.5973	.0513
.0195	.2765	.0046	.0395	.3896	.0132	.0595	.4731	.0242	.0795	.5410	.0371	.0995	.5987	.0517



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

H/D FROM .1 TO .2														
H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T
.1000	.6000	.0520	.1200	.6499	.0680	.1400	.6940	.0851	.1600	.7332	.1033	.1800	.7684	.1224
.1005	.6013	.0524	.1205	.6511	.0684	.1405	.6950	.0855	.1605	.7341	.1037	.1805	.7692	.1229
.1010	.6027	.0528	.1210	.6523	.0688	.1410	.6960	.0860	.1610	.7351	.1042	.1810	.7700	.1234
.1015	.6040	.0532	.1215	.6534	.0692	.1415	.6971	.0864	.1615	.7360	.1047	.1815	.7709	.1239
.1020	.6053	.0536	.1220	.6546	.0696	.1420	.6981	.0869	.1620	.7369	.1051	.1820	.7717	.1244
.1025	.6066	.0540	.1225	.6557	.0701	.1425	.6991	.0873	.1625	.7378	.1056	.1825	.7725	.1249
.1030	.6079	.0544	.1230	.6569	.0705	.1430	.7001	.0878	.1630	.7387	.1061	.1830	.7733	.1253
.1035	.6092	.0547	.1235	.6580	.0709	.1435	.7012	.0882	.1635	.7396	.1066	.1835	.7742	.1258
.1040	.6105	.0551	.1240	.6592	.0713	.1440	.7022	.0886	.1640	.7406	.1070	.1840	.7750	.1263
.1045	.6118	.0555	.1245	.6603	.0717	.1445	.7032	.0891	.1645	.7415	.1075	.1845	.7758	.1268
.1050	.6131	.0559	.1250	.6614	.0721	.1450	.7042	.0895	.1650	.7424	.1080	.1850	.7766	.1273
.1055	.6144	.0563	.1255	.6626	.0726	.1455	.7052	.0900	.1655	.7433	.1084	.1855	.7774	.1278
.1060	.6157	.0567	.1260	.6637	.0730	.1460	.7062	.0904	.1660	.7442	.1089	.1860	.7782	.1283
.1065	.6170	.0571	.1265	.6648	.0734	.1465	.7072	.0909	.1665	.7451	.1094	.1865	.7790	.1288
.1070	.6182	.0575	.1270	.6659	.0738	.1470	.7082	.0913	.1670	.7460	.1099	.1870	.7798	.1293
.1075	.6195	.0579	.1275	.6671	.0743	.1475	.7092	.0918	.1675	.7468	.1103	.1875	.7806	.1298
.1080	.6208	.0583	.1280	.6682	.0747	.1480	.7102	.0922	.1680	.7477	.1108	.1880	.7814	.1303
.1085	.6220	.0587	.1285	.6693	.0751	.1485	.7112	.0927	.1685	.7486	.1113	.1885	.7822	.1308
.1090	.6233	.0591	.1290	.6704	.0755	.1490	.7122	.0932	.1690	.7495	.1118	.1890	.7830	.1313
.1095	.6245	.0595	.1295	.6715	.0760	.1495	.7132	.0936	.1695	.7504	.1122	.1895	.7838	.1318
.1100	.6258	.0599	.1300	.6726	.0764	.1500	.7141	.0941	.1700	.7513	.1127	.1900	.7846	.1323
.1105	.6270	.0602	.1305	.6737	.0768	.1505	.7151	.0945	.1705	.7521	.1132	.1905	.7854	.1328
.1110	.6283	.0606	.1310	.6748	.0773	.1510	.7161	.0950	.1710	.7530	.1137	.1910	.7862	.1333
.1115	.6295	.0610	.1315	.6759	.0777	.1515	.7171	.0954	.1715	.7539	.1142	.1915	.7870	.1338
.1120	.6307	.0614	.1320	.6770	.0781	.1520	.7180	.0959	.1720	.7548	.1146	.1920	.7877	.1343
.1125	.6320	.0619	.1325	.6781	.0785	.1525	.7190	.0963	.1725	.7556	.1151	.1925	.7885	.1348
.1130	.6332	.0623	.1330	.6791	.0790	.1530	.7200	.0968	.1730	.7565	.1156	.1930	.7893	.1353
.1135	.6344	.0627	.1335	.6802	.0794	.1535	.7209	.0973	.1735	.7574	.1161	.1935	.7901	.1358
.1140	.6356	.0631	.1340	.6813	.0798	.1540	.7219	.0977	.1740	.7582	.1166	.1940	.7909	.1363
.1145	.6368	.0635	.1345	.6824	.0803	.1545	.7229	.0982	.1745	.7591	.1171	.1945	.7916	.1368
.1150	.6380	.0639	.1350	.6834	.0807	.1550	.7238	.0986	.1750	.7599	.1175	.1950	.7924	.1373
.1155	.6392	.0643	.1355	.6845	.0811	.1555	.7248	.0991	.1755	.7608	.1180	.1955	.7932	.1378
.1160	.6404	.0647	.1360	.6856	.0816	.1560	.7257	.0996	.1760	.7616	.1185	.1960	.7939	.1383
.1165	.6416	.0651	.1365	.6866	.0820	.1565	.7267	.1000	.1765	.7625	.1190	.1965	.7947	.1388
.1170	.6428	.0655	.1370	.6877	.0825	.1570	.7276	.1005	.1770	.7633	.1195	.1970	.7955	.1393
.1175	.6440	.0659	.1375	.6887	.0829	.1575	.7285	.1009	.1775	.7642	.1200	.1975	.7962	.1398
.1180	.6452	.0663	.1380	.6898	.0833	.1580	.7295	.1014	.1780	.7650	.1204	.1980	.7970	.1403
.1185	.6464	.0667	.1385	.6908	.0838	.1585	.7304	.1019	.1785	.7659	.1209	.1985	.7977	.1408
.1190	.6476	.0671	.1390	.6919	.0842	.1590	.7314	.1023	.1790	.7667	.1214	.1990	.7985	.1414
.1195	.6488	.0676	.1395	.6929	.0847	.1595	.7323	.1028	.1795	.7675	.1219	.1995	.7992	.1419
H/D FROM .2 TO .3														
H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T
.2000	.8000	.1424	.2200	.8285	.1631	.2400	.8542	.1845	.2600	.8773	.2066	.2800	.8980	.2292
.2005	.8007	.1429	.2205	.8292	.1636	.2405	.8548	.1851	.2605	.8778	.2072	.2805	.8985	.2298
.2010	.8015	.1434	.2210	.8298	.1642	.2410	.8554	.1856	.2610	.8784	.2077	.2810	.8990	.2304
.2015	.8022	.1439	.2215	.8305	.1647	.2415	.8560	.1862	.2615	.8789	.2083	.2815	.8995	.2309
.2020	.8030	.1444	.2220	.8312	.1652	.2420	.8566	.1867	.2620	.8794	.2088	.2820	.8999	.2315
.2025	.8037	.1449	.2225	.8319	.1658	.2425	.8572	.1873	.2625	.8800	.2094	.2825	.9004	.2321
.2030	.8045	.1454	.2230	.8325	.1663	.2430	.8578	.1878	.2630	.8805	.2100	.2830	.9009	.2326
.2035	.8052	.1460	.2235	.8332	.1668	.2435	.8584	.1884	.2635	.8811	.2105	.2835	.9014	.2332
.2040	.8059	.1465	.2240	.8338	.1674	.2440	.8590	.1889	.2640	.8816	.2111	.2840	.9019	.2338
.2045	.8067	.1470	.2245	.8345	.1679	.2445	.8596	.1895	.2645	.8821	.2116	.2845	.9024	.2344
.2050	.8074	.1475	.2250	.8352	.1684	.2450	.8602	.1900	.2650	.8827	.2122	.2850	.9028	.2349
.2055	.8081	.1480	.2255	.8358	.1689	.2455	.8608	.1906	.2655	.8832	.2128	.2855	.9033	.2355
.2060	.8089	.1485	.2260	.8365	.1695	.2460	.8614	.1911	.2660	.8837	.2133	.2860	.9038	.2361
.2065	.8096	.1490	.2265	.8371	.1700	.2465	.8619	.1917	.2665	.8843	.2139	.2865	.9043	.2367
.2070	.8103	.1496	.2270	.8378	.1705	.2470	.8625	.1922	.2670	.8848	.2145	.2870	.9047	.2372
.2075	.8110	.1501	.2275	.8384	.1711	.2475	.8631	.1927	.2675	.8853	.2150	.2875	.9052	.2378
.2080	.8118	.1506	.2280	.8391	.1716	.2480	.8637	.1933	.2680	.8858	.2156	.2880	.9057	.2384
.2085	.8125	.1511	.2285	.8397	.1721	.2485	.8643	.1938	.2685	.8864	.2161	.2885	.9061	.2390
.2090	.8132	.1516	.2290	.8404	.1727	.2490	.8649	.1944	.2690	.8869	.2167	.2890	.9066	.2395
.2095	.8139	.1521	.2295	.8410	.1732	.2495	.8654	.1949	.2695	.8874	.2173	.2895	.9071	.2401
.2100	.8146	.1527	.2300	.8417	.1738	.2500	.8660	.1955	.2700	.8879	.2178	.2900	.9075	.2407
.2105	.8153	.1532	.2305	.8423	.1743	.2505	.8666	.1961	.2705	.8884	.2184	.2905	.9080	.2413
.2110	.8160	.1537	.2310	.8429	.1748	.2510	.8672	.1966	.2710	.8890	.2190	.2910	.9084	.2419
.2115	.8167	.1542	.2315	.8436	.1754	.2515	.8678	.1972	.2715	.8895	.2195	.2915	.9089	.2424
.2120	.8174	.1547	.2320	.8442	.1759	.2520	.8683	.1977	.2720	.8900	.2201	.2920	.9094	.2430
.2125	.8182	.1553	.2325	.8449	.1764	.2525	.8689	.1983	.2725	.8905	.2207	.2925	.9098	.2436
.2130	.8189	.1558	.2330	.8455	.1770	.2530	.8695	.1988	.2730	.8910	.2212	.2930	.9103	.2442
.2135	.8196	.1563	.2335	.8461	.1775	.2535	.8700	.1994	.2735	.8915	.2218	.2935	.9107	.2448
.2140	.8203	.1568	.2340	.8467	.1781	.2540	.8706	.1999	.2740	.8920	.2224	.2940	.9112	.2453
.2145	.8210	.1573	.2345	.8474	.1786	.2545	.8712	.2005	.2745	.8925	.2229	.2945	.9116	.2459
.2150	.8216	.1579	.2350	.8480	.1791	.2550	.8717	.2010	.2750	.8930	.2235	.2950	.9121	.2465
.2155	.8223	.1584	.2355	.8486	.1797	.2555	.8723	.2016	.2755	.8935	.2241	.2955	.9125	.2471
.2160	.8230	.1589	.2360	.8492	.1802	.2560	.8728	.2021	.2760	.8940	.2246	.2960	.9130	.2477
.2165	.8237	.1594	.2365	.8499	.1808	.2565	.8734	.2027	.2765	.8945	.2252	.2965	.9134	.2482
.2170	.8244	.1600	.2370	.8505	.1813	.2570	.8740	.2033	.2770	.8950	.2258	.2970	.9139	.2488
.2175	.8251	.1605	.2375	.8511	.1818	.2575	.8745	.2038	.2775	.8955	.2264	.2975	.9143	.2494
.2180	.8258	.1610	.2380	.8517	.1824	.2580	.8751	.2044	.2780	.8960	.2269	.2980	.9148	.2500
.2185	.8265	.1615	.2385	.8523	.1829	.2585	.8756	.2049	.2785	.8965	.2275	.2985	.9152	.2506
.2190	.8271	.1621	.2390	.8529	.1835	.2590	.8762	.2055	.2790	.8970	.2281	.2990	.9156	.2511
.2195	.8278	.1626	.2395	.8536	.1840	.2595	.8767	.2060	.2795	.8975	.2286	.2995	.9161	.2517



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T
.3000	.9165	.2523	.3200	.9330	.2759	.3400	.9474	.2998	.3600	.9600	.3241	.3800	.9708	.3487	.3800	.9708	.3487
.3005	.9170	.2529	.3205	.9333	.2765	.3405	.9478	.3004	.3605	.9603	.3247	.3805	.9710	.3493	.3805	.9710	.3493
.3010	.9174	.2535	.3210	.9337	.2771	.3410	.9481	.3010	.3610	.9606	.3253	.3810	.9713	.3499	.3810	.9713	.3499
.3015	.9178	.2541	.3215	.9341	.2777	.3415	.9484	.3016	.3615	.9609	.3259	.3815	.9715	.3505	.3815	.9715	.3505
.3020	.9183	.2547	.3220	.9345	.2782	.3420	.9488	.3022	.3620	.9612	.3265	.3820	.9718	.3512	.3820	.9718	.3512
.3025	.9187	.2552	.3225	.9349	.2788	.3425	.9491	.3028	.3625	.9614	.3272	.3825	.9720	.3518	.3825	.9720	.3518
.3030	.9191	.2558	.3230	.9352	.2794	.3430	.9494	.3034	.3630	.9617	.3278	.3830	.9722	.3524	.3830	.9722	.3524
.3035	.9195	.2564	.3235	.9356	.2800	.3435	.9498	.3040	.3635	.9620	.3284	.3835	.9725	.3530	.3835	.9725	.3530
.3040	.9200	.2570	.3240	.9360	.2806	.3440	.9501	.3046	.3640	.9623	.3290	.3840	.9727	.3536	.3840	.9727	.3536
.3045	.9204	.2576	.3245	.9364	.2812	.3445	.9504	.3053	.3645	.9626	.3296	.3845	.9730	.3543	.3845	.9730	.3543
.3050	.9208	.2582	.3250	.9367	.2818	.3450	.9507	.3059	.3650	.9629	.3302	.3850	.9732	.3549	.3850	.9732	.3549
.3055	.9212	.2588	.3255	.9371	.2824	.3455	.9511	.3065	.3655	.9631	.3308	.3855	.9734	.3555	.3855	.9734	.3555
.3060	.9217	.2593	.3260	.9375	.2830	.3460	.9514	.3071	.3660	.9634	.3315	.3860	.9737	.3561	.3860	.9737	.3561
.3065	.9221	.2599	.3265	.9379	.2836	.3465	.9517	.3077	.3665	.9637	.3321	.3865	.9739	.3567	.3865	.9739	.3567
.3070	.9225	.2605	.3270	.9382	.2842	.3470	.9520	.3083	.3670	.9640	.3327	.3870	.9741	.3574	.3870	.9741	.3574
.3075	.9229	.2611	.3275	.9386	.2848	.3475	.9524	.3089	.3675	.9642	.3333	.3875	.9744	.3580	.3875	.9744	.3580
.3080	.9233	.2617	.3280	.9390	.2854	.3480	.9527	.3095	.3680	.9645	.3339	.3880	.9746	.3586	.3880	.9746	.3586
.3085	.9237	.2623	.3285	.9393	.2860	.3485	.9530	.3101	.3685	.9648	.3345	.3885	.9748	.3592	.3885	.9748	.3592
.3090	.9242	.2629	.3290	.9397	.2866	.3490	.9533	.3107	.3690	.9651	.3351	.3890	.9750	.3598	.3890	.9750	.3598
.3095	.9246	.2635	.3295	.9401	.2872	.3495	.9536	.3113	.3695	.9653	.3357	.3895	.9753	.3605	.3895	.9753	.3605
.3100	.9250	.2640	.3300	.9404	.2878	.3500	.9539	.3119	.3700	.9656	.3364	.3900	.9755	.3611	.3900	.9755	.3611
.3105	.9254	.2646	.3305	.9408	.2884	.3505	.9543	.3125	.3705	.9659	.3370	.3905	.9757	.3617	.3905	.9757	.3617
.3110	.9258	.2652	.3310	.9411	.2890	.3510	.9546	.3131	.3710	.9661	.3376	.3910	.9759	.3623	.3910	.9759	.3623
.3115	.9262	.2658	.3315	.9415	.2896	.3515	.9549	.3137	.3715	.9664	.3382	.3915	.9762	.3629	.3915	.9762	.3629
.3120	.9266	.2664	.3320	.9419	.2902	.3520	.9552	.3143	.3720	.9667	.3388	.3920	.9764	.3636	.3920	.9764	.3636
.3125	.9270	.2670	.3325	.9422	.2908	.3525	.9555	.3150	.3725	.9669	.3394	.3925	.9766	.3642	.3925	.9766	.3642
.3130	.9274	.2676	.3330	.9426	.2914	.3530	.9558	.3156	.3730	.9672	.3401	.3930	.9768	.3648	.3930	.9768	.3648
.3135	.9278	.2682	.3335	.9429	.2920	.3535	.9561	.3162	.3735	.9675	.3407	.3935	.9771	.3654	.3935	.9771	.3654
.3140	.9282	.2688	.3340	.9433	.2926	.3540	.9564	.3168	.3740	.9677	.3413	.3940	.9773	.3661	.3940	.9773	.3661
.3145	.9286	.2693	.3345	.9436	.2932	.3545	.9567	.3174	.3745	.9680	.3419	.3945	.9775	.3667	.3945	.9775	.3667
.3150	.9290	.2699	.3350	.9440	.2938	.3550	.9570	.3180	.3750	.9682	.3425	.3950	.9777	.3673	.3950	.9777	.3673
.3155	.9294	.2705	.3355	.9443	.2944	.3555	.9573	.3186	.3755	.9685	.3431	.3955	.9779	.3679	.3955	.9779	.3679
.3160	.9298	.2711	.3360	.9447	.2950	.3560	.9576	.3192	.3760	.9688	.3438	.3960	.9781	.3685	.3960	.9781	.3685
.3165	.9302	.2717	.3365	.9450	.2956	.3565	.9579	.3198	.3765	.9690	.3444	.3965	.9783	.3692	.3965	.9783	.3692
.3170	.9306	.2723	.3370	.9454	.2962	.3570	.9582	.3204	.3770	.9693	.3450	.3970	.9786	.3698	.3970	.9786	.3698
.3175	.9310	.2729	.3375	.9457	.2968	.3575	.9585	.3211	.3775	.9695	.3456	.3975	.9788	.3704	.3975	.9788	.3704
.3180	.9314	.2735	.3380	.9461	.2974	.3580	.9588	.3217	.3780	.9698	.3462	.3980	.9790	.3710	.3980	.9790	.3710
.3185	.9318	.2741	.3385	.9464	.2980	.3585	.9591	.3223	.3785	.9700	.3468	.3985	.9792	.3717	.3985	.9792	.3717
.3190	.9322	.2747	.3390	.9467	.2986	.3590	.9594	.3229	.3790	.9703	.3475	.3990	.9794	.3723	.3990	.9794	.3723
.3195	.9326	.2753	.3395	.9471	.2992	.3595	.9597	.3235	.3795	.9705	.3481	.3995	.9796	.3729	.3995	.9796	.3729
H/D FROM .4 TO .5																	
H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T	H/D	L/D	A _D /A _T
.4000	.9798	.3735	.4200	.9871	.3986	.4400	.9928	.4238	.4600	.9968	.4491	.4800	.9992	.4745	.4800	.9992	.4745
.4005	.9800	.3742	.4205	.9873	.3992	.4405	.9929	.4244	.4605	.9969	.4498	.4805	.9993	.4752	.4805	.9993	.4752
.4010	.9802	.3748	.4210	.9874	.3998	.4410	.9930	.4251	.4610	.9970	.4504	.4810	.9993	.4758	.4810	.9993	.4758
.4015	.9804	.3754	.4215	.9876	.4005	.4415	.9931	.4257	.4615	.9970	.4510	.4815	.9993	.4765	.4815	.9993	.4765
.4020	.9806	.3760	.4220	.9878	.4011	.4420	.9932	.4263	.4620	.9971	.4517	.4820	.9994	.4771	.4820	.9994	.4771
.4025	.9808	.3767	.4225	.9879	.4017	.4425	.9934	.4270	.4625	.9972	.4523	.4825	.9994	.4777	.4825	.9994	.4777
.4030	.9810	.3773	.4230	.9881	.4023	.4430	.9935	.4276	.4630	.9973	.4529	.4830	.9994	.4784	.4830	.9994	.4784
.4035	.9812	.3779	.4235	.9882	.4030	.4435	.9936	.4282	.4635	.9973	.4536	.4835	.9995	.4790	.4835	.9995	.4790
.4040	.9814	.3785	.4240	.9884	.4036	.4440	.9937	.4288	.4640	.9974	.4542	.4840	.9995	.4796	.4840	.9995	.4796
.4045	.9816	.3791	.4245	.9885	.4042	.4445	.9938	.4295	.4645	.9975	.4548	.4845	.9995	.4803	.4845	.9995	.4803
.4050	.9818	.3798	.4250	.9887	.4049	.4450	.9939	.4301	.4650	.9975	.4555	.4850	.9995	.4809	.4850	.9995	.4809
.4055	.9820	.3804	.4255	.9888	.4055	.4455	.9940	.4307	.4655	.9976	.4561	.4855	.9996	.4815	.4855	.9996	.4815
.4060	.9822	.3810	.4260	.9890	.4061	.4460	.9942	.4314	.4660	.9977	.4567	.4860	.9996	.4822	.4860	.9996	.4822
.4065	.9824	.3816	.4265	.9891	.4068	.4465	.9943	.4320	.4665	.9978	.4574	.4865	.9996	.4828	.4865	.9996	.4828
.4070	.9825	.3823	.4270	.9893	.4074	.4470	.9944	.4326	.4670	.9978	.4580	.4870	.9997	.4834	.4870	.9997	.4834
.4075	.9827	.3829	.4275	.9894	.4080	.4475	.9945	.4333	.4675	.9979	.4586	.4875	.9997	.4841	.4875	.9997	.4841
.4080	.9829	.3835	.4280	.9896	.4086	.4480	.9946	.4339	.4680	.9979	.4593	.4880	.9997	.4847	.4880	.9997	.4847
.4085	.9831	.3842	.4285	.9897	.4093	.4485	.9947	.4345	.4685	.9980	.4599	.4885	.9997	.4854	.4885	.9997	.4854
.4090	.9833	.3848	.4290	.9899	.4099	.4490	.9948	.4352	.4690	.9981	.4606	.4890	.9998	.4860	.4890	.9998	.4860
.4095	.9835	.3854	.4295	.9900	.4105	.4495	.9949	.4358	.4695	.9981	.4612	.4895	.9998	.4866	.4895	.9998	.4866
.4100	.9837	.3860	.4300	.9902	.4112	.4500	.9950	.4364	.4700	.9982	.4618	.4900	.9998	.4873	.4900	.9998	.4873
.4105	.9838	.3867	.4305	.9903	.4118	.4505	.9951	.4371	.4705	.9983	.4625	.4905	.9998	.4879	.4905	.9998	.4879
.4110	.9840	.3873	.4310	.9904	.4124	.4510	.9952	.4377	.4710	.9983	.4631	.4910	.9998	.4885	.4910	.9998	.4885
.4115	.9842	.3879	.4315	.9906	.4131	.4515	.9953	.4383	.4715	.9984	.4637	.4915	.9999	.4892	.4915	.9999	.4892
.4120	.9844	.3885	.4320	.9907	.4137	.4520	.9954	.4390	.4720	.9984	.4644	.4920	.9999	.4898	.4920	.9999	.4898
.4125	.9846	.3892	.4325	.9908	.4143	.4525	.9955	.4396	.4725	.9985	.4650	.4925	.9999	.4905	.4925	.9999	.4905
.4130	.9847	.3898	.4330	.9910	.4149	.4530	.9956	.4402	.4730	.9985	.4656	.4930	.9999	.4911	.4930	.9999	.4911
.4135	.9849	.3904	.4335	.9911	.4156	.4535	.9957	.4409	.4735	.9986	.4663	.4935	.9999	.4917	.4935	.9999	.4917
.4140	.9851	.3910	.4340	.9912	.4162	.4540	.9958	.4415	.4740	.9986	.4669	.4940	.9999	.4924	.4940	.9999	.4924
.4145	.9853	.3917	.4345	.9914	.4168	.4545	.9959	.4421	.4745	.9987	.4675	.4945	.9999	.4930	.4945	.9999	.4930
.4150	.9854	.3923	.4350	.9915	.4175	.4550	.9959	.4428	.4750	.9987	.4682						



4.4. Distribución de la geometría del plato para más de un paso ($N_p > 1$)

Cuando hay más de un paso, el área y la anchura de los vertederos se distribuye entre ellos en base a las ecuaciones:

$$A_{di} = F_{di} A_d$$

$$H_i = \frac{W_{fi} A_{di}}{12D_t}$$

donde los F_{di} y W_{fi} son los coeficientes de distribución indicados en la tabla adjunta.

NP	F _{di}				W _{fi}		
	i = 1	i = 2	i = 3	i = 4	i = 2	i = 3	i = 4
2	0,5	1	0	0	12	0	0
3	0,34	0	0,66	0	0	8,63	0
4	0,25	0,5	0,5	0	6	6,78	0
5	0,2	0	0,4	0,4	0	5,66	5,5

Para el vertedero lateral, las dimensiones se calculan como para NP =1, es decir con la tabla anterior.

Con estas distribuciones, se puede calcular la longitud de la trayectoria del flujo (F_{PL}) y la anchura de la trayectoria de flujo (W_{PL}) mediante:

$$F_{PL} = \frac{D_t - (2H_1 + H_2 + 2H_3 + 2H_4)}{N_p} \qquad W_{PL} = \frac{A_a}{F_{PL}}$$

En nuestro caso sólo hay un paso por lo que esta etapa no es necesaria.

4.5. Recalcular el área activa mediante iteración

Usar las ecuaciones suministradas por cada fabricante de platos. Por ejemplo, para los internos más comunes hoy día (platos de válvulas) la empresa Glitsch Inc., sugiere usar para sus válvulas tipo Ballast[®] la siguiente ecuación:

$$A_a = \frac{V \left(\frac{\rho_v}{\rho_L - \rho_v} \right)^{0.5} + \frac{LF_{PL}}{1083}}{C_{af} S_f F_f}$$



donde:

A_a = área activa, ft^2

L = caudal volumétrico de líquido, gpm

V = caudal volumétrico de gas, ft^3/s

ρ_L, ρ_V = densidad de líquido y vapor, lb/ft^3

F_{PL} = longitud de la trayectoria de flujo en el plato, ft

S_f = factor de espuma, (adim)

F_f = factor de inundación, (adim)

C_{af} = factor de capacidad, (adim). Se obtiene en función del espaciado entre platos mediante la menor de las tres correlaciones siguientes:

$$C_{af} = \min \left\{ \begin{array}{l} \frac{t_s^{0.65} \rho_V^{0.167}}{12} \\ 0.3174 + 0.04122(t_s - 12)^{0.483} - 10^{-6} \rho_V (245 + 661t_s) \\ 0.595 - 0.0596 \rho_V \end{array} \right.$$

En nuestro caso:

$$C_{af1} = 0,66962782$$

$$C_{af2} = 0,43632674$$

$$C_{af3} = 0,52856201$$

$$C_{af} = 0,43632674$$

$$A_{ac} = 14,608 \text{ ft}^2$$

4.6. Calcular la carga del rebosadero

Para platos de un solo paso, como es el caso de estudio, se calcula mediante,

$$W_L = \frac{L}{L_w} = \frac{266,84 \text{ gpm}}{1,621 \text{ ft}} = 164,615 \text{ gpm/ft}$$

W_L = carga hidráulica del plato por unidad de longitud de rebosadero, gpm/ft .

L = caudal de líquido en el plato, gpm .

L_w = longitud del rebosadero, ft .

4.7. Comprobar el porcentaje de arrastre

La fracción de líquido arrastrada se determina mediante la correlación:

$$\Psi = \exp\left[-(6.692 + 1.956F_f)(F_{lv})^{(-0.132+0.654F_f)}\right]$$

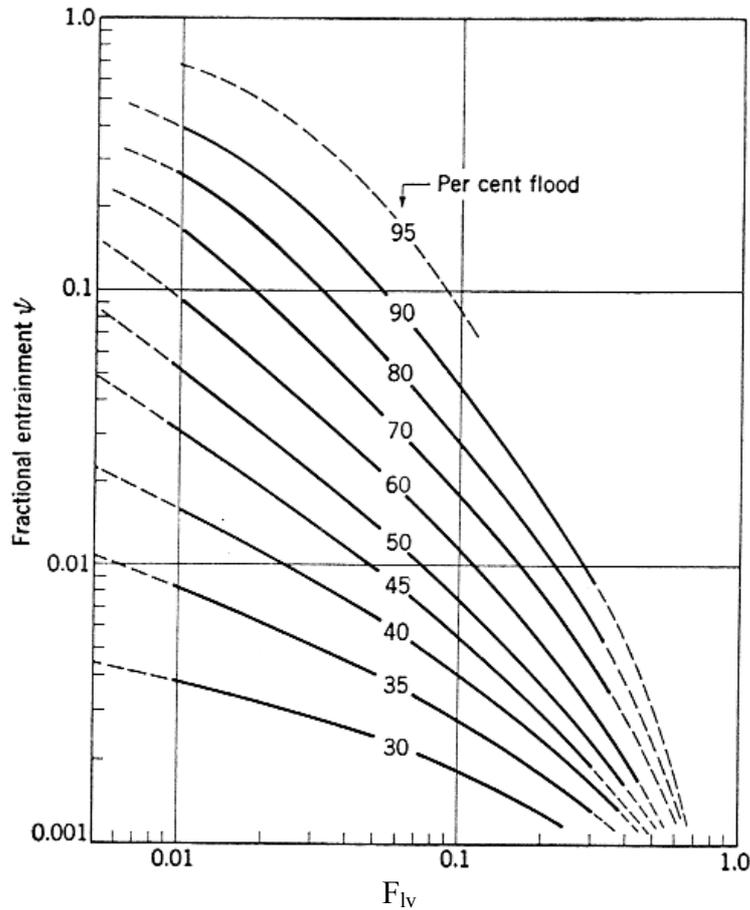
donde:

F_f = Factor de inundación, (adim)

F_{lv} = Parámetro de flujo calculado mediante:

$$F_{lv} = \frac{L}{448.8V} \left(\frac{\rho_V}{\rho_L}\right)^{0.5} = \frac{266,84 \text{ gpm}}{448,8 \cdot 23,408 \text{ ft}^3/\text{s}} \left(\frac{1,114 \text{ lb}/\text{ft}}{38,145 \text{ lb}/\text{ft}}\right)^{0.5} = 0,00434211$$

Alternativamente puede obtenerse de la gráfica:



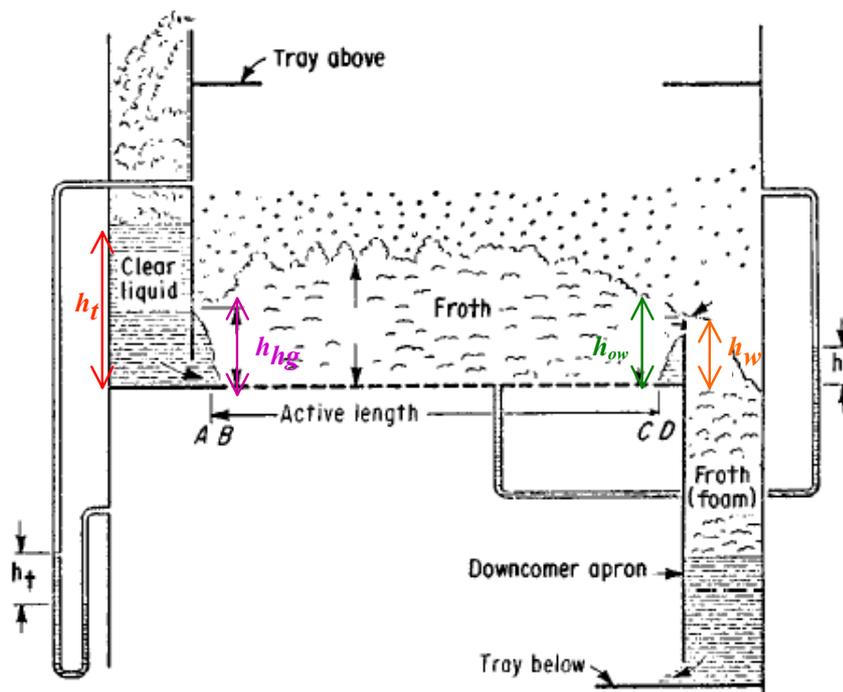
Una vez hallado F_{lv} , ya se puede hallar el porcentaje de arrastre:

$$\Psi = 0,39848002$$

4.8. Calcular la pérdida de presión en el plato

Es conocido que uno de los principales problemas de una columna es la posibilidad de inundación, por lo que se hace necesario dimensionar los bajantes de éstas para evitar una recirculación excesiva, algo que se traduce en una pérdida de presión.

En la figura siguiente se observan las alturas de líquido que se calcularán en adelante:



$$h_t = h_d + h_l$$

h_d = caída de presión a través de las perforaciones en plato seco, pulg.

h_l = presión hidrostática debida a la masa de líquido aireada sobre el plato, pulg.

- Para calcular la caída de presión en plato seco, utilícese la correlación de Leibson et al:

$$h_d = 0.186 \frac{\rho_V}{\rho_L} \left(\frac{V}{C_V A_h} \right)^2$$

V = caudal de gas, ft³/s

ρ_L, ρ_V = densidades de líquido y vapor, lb/ft³

A_h = área ocupada por las perforaciones, ft²

Se calcula mediante las siguientes expresiones:



$$A_h = 0.905 A_T \left(\frac{d_h}{P} \right)^2 \quad \text{disposición triangular}$$

$$A_h = 0.785 A_T \left(\frac{d_h}{P} \right)^2 \quad \text{disposición cuadrada}$$

donde P es la distancia entre centros de las perforaciones. Para la distribución triangular (la más habitual) se usan espaciados de 3, 3.5, 4, 4.5 y 6 pulgadas.

Particularmente, aquí se ha escogido una disposición triangular con una distancia entre centros de 3 pulgadas.

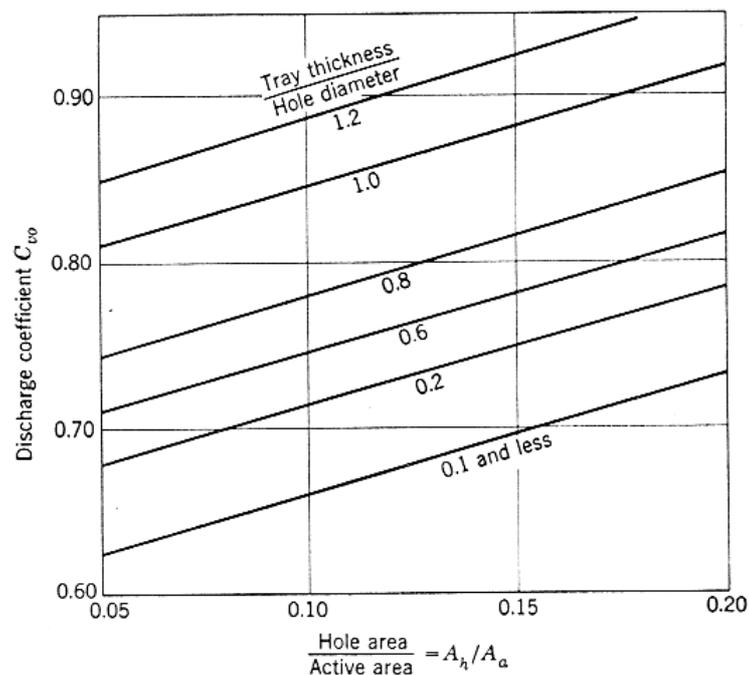
Por último, C_V es el coeficiente de descarga, que se obtiene a partir de la correlación:

$$C_V = \left[0.836 + 0.273 \left(\frac{t_d}{d_h} \right) \right] \left[0.674 + 0.717 \left(\frac{A_h}{A_a} \right) \right]$$

Teniendo en cuenta la configuración escogida al principio de este documento, los resultados obtenidos son los siguientes:

$$\begin{aligned} C_V &= 0,65038 \\ A_h &= 1,97441 \text{ ft}^2 \\ h_d &= 1,80621 \text{ pulgadas} \end{aligned}$$

Otra forma de calcularla sería a partir de la figura, si bien en este caso se ha preferido la solución analítica.





- Para calcular la presión hidrostática debida a la masa de líquido aireada utilícese la correlación de Fair:

$$h_t = \beta(h_w + h_{ow})$$

donde:

h_w = altura del rebosadero, pulg

h_{ow} = altura de la cresta sobre el rebosadero, pulg. Para calcularla, utilídense las ecuaciones para vertederos de Francis. Para un vertedero segmentado, la ecuación es:

$$h_{ow} = 0.48 \left(\frac{L}{L_w} \right)^{2/3}$$

donde:

L = caudal de líquido, gpm

L_w = longitud del rebosadero, pulg

Sustituyendo me da que la altura de la cresta sobre el rebosadero es de 4,806 pulgadas.

β = coeficiente de aireación que se obtiene a partir de la correlación:

$$\beta = 0.977 - 0.619F_s + 0.341F_s^2 - 0.0636F_s^3$$

donde F_s es un parámetro que es función del área activa:

$$F_s = \frac{V}{A_a} \rho_v^{0.5}$$

siendo:

V = caudal volumétrico, ft³/s

A_a = área activa, ft²

ρ_v = densidad del vapor, lb/ft³

Sustituyendo, $F_s = 1,47777976$ y con este dato puedo calcular β que es igual a 0,60168993.

Queda entonces

$$h_{ow} = 2,75064 \text{ pulgadas}$$

$$h_t = 2,85841 \text{ pulgadas}$$

$$h_t = 4,66 \text{ pulgadas}$$



Para pasar la caída de presión total de pulgadas de líquido a libras por pulgada cuadrada (psi), utilícese la siguiente fórmula de conversión:

$$\Delta P = \frac{h_t \rho_L}{1728} = \frac{4,66 \cdot 38,145}{1528} = 0,103 \text{ psi}$$

4.9. Calcular las pérdidas por goteo

Para determinar si nos encontramos en régimen de goteo, calcular la pérdida de carga debida a la formación de burbujas mediante:

$$h_\sigma = \frac{0,04\sigma}{\rho_L d_h} = \frac{0,04 \cdot 9,05 \text{ dinas/cm}}{38,145 \text{ lb/ft} \cdot 1"} = 0,00949 \text{ pulgadas}$$

h_σ = pérdida de carga debida a la formación de burbujas, pulg

σ_L = tensión superficial del líquido, dinas/cm

ρ_L = densidad del líquido, lb/ft³

d_h = diámetro de las perforaciones o agujeros, pulg

La ausencia de goteo se garantiza cuando se cumple el criterio:

$$h_d + h_\sigma < h_l$$

que en nuestro caso se cumple, ya que $h_d + h_\sigma = 1,806 + 0,00949 = 1,8157 < 2,8584$

4.10. Calcular la estabilidad de la columna

Para operación estable de la columna en estado estacionario se debe verificar el criterio:

$$h_{hg} < \frac{h_l}{2}$$

donde:

h_l = presión hidrostática debida a la masa de líquido aireada sobre el plato, pulg.

h_{hg} = gradiente hidráulico en el plato, pulg.

Para el cálculo del gradiente hidráulico (h_{hg}), utilícese la siguiente expresión:



$$h_{hg} = f \frac{u_L^2 F_{PL}}{12gR_h}$$

donde:

R_h = radio hidráulico, (ft) definido como el cociente entre la sección transversal y el perímetro mojado del plato:

$$R_h = \frac{h_f D_f}{2h_f + 12D_f}$$

siendo:

D_f = media entre el diámetro de la torre y la longitud del rebosadero, pulg
 h_f = altura real de la espuma sobre el plato, (pulg). Se calcula mediante:

$$h_f = \frac{h_l}{2\beta - 1}$$

F_{PL} = longitud de la trayectoria de flujo en el plato, ft

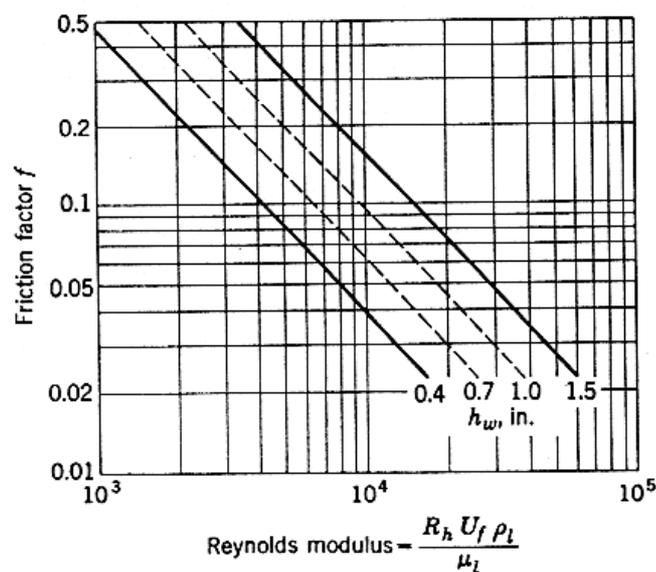
g = constante de gravitación universal, (32.2 ft/s²)

u_L = velocidad lineal de la masa de líquido aireada (ft/s). Se calcula mediante:

$$u_L = \frac{12L}{h_l D_f}$$

L = caudal volumétrico de líquido en el plato, (ft³/s)

f = factor de fricción de Fanning. Se obtiene en función del número de Reynolds y de la altura de rebosadero (h_w) a partir de la figura:





Todos los cálculos intermedios que han sido necesarios para determinar si la columna es o no estable, se resumen a continuación:

$$\begin{aligned}u_L &= 9,045 \text{ ft/s} \\ \text{Re} &= 3,24 \cdot 10^5 \\ f &= 0,01 \\ h_f &= 14,054 \text{ pulgadas} \\ D_f &= 39,726 \text{ pulgadas} \\ R_h &= 0,0921 \text{ ft}\end{aligned}$$

$$h_{hg} = 0,10867 \text{ pulgadas}$$

Dados estos valores, como $h_l/2 = 1,42921 > h_{hg}$, se cumple la anterior condición, con lo que, en estado estacionario, la columna sí es estable.

4.11. Calcular la estabilidad de la columna

La altura de líquido existente en estado estacionario en el vertedero se calcula mediante el siguiente equilibrio de presiones:

$$h_{dc} = h_t + h_w + h_{ow} + h_{hg} + h_{da}$$

h_{dc} = altura de líquido en el vertedero, pulg.

h_t = caída de presión total en el plato, pulg.

h_w = altura del rebosadero, pulg.

h_{ow} = altura de la cresta sobre el rebosadero, pulg.

h_{hg} = gradiente hidráulico en el plato, pulg.

h_{da} = caída de presión debida a la fricción bajo el vertedero, pulg.

Para el cálculo de la caída de presión debida a la fricción bajo el vertedero (h_{da}), utilícese la fórmula propuesta por Fair:

$$h_{da} = 0.558 \left(\frac{L}{448.8 A_{ud}} \right)$$

donde:

L = caudal líquido, gpm.

A_{ud} = área libre para el flujo de líquido bajo el vertedero, ft^2 . Se calcula como una fracción del área del vertedero. La práctica habitual es usar la siguiente aproximación:

$$A_{ud} = 0.42 A_d$$



Se tiene que $A_{ud} = 0,61128494 \text{ ft}^2$, por lo que $h_{da} = 0,54274$ pulgadas, y finalmente:

$$h_{dc} = 10,06667 \text{ pulgadas}$$

Para determinar si el vertedero diseñado es capaz de manejar el líquido se utiliza el criterio:

$$h_{dc} < \frac{t_s}{2}$$

Dicho criterio en nuestro caso es afirmativo, puesto que $10,06667 < 12$.

4.12. Calcular la cantidad de líquido retenida en el plato (“hold-up”)

Se requiere este cálculo para estimar el peso de líquido que soporta el plato que, junto con el peso del plato en si mismo y el de la envolvente, permite calcular el peso total de la columna, cálculos fundamentales para el soporte y la estructura de la misma (pandeo, efecto del viento, etc...).

$$M_L = \frac{(h_l A_a + h_{dc} A_d) \rho_L}{12} = \frac{(2,85841 \cdot 14,608 + 10,06667 \cdot 1,455) \cdot 38,145}{12} = 179,31 \text{ lb}$$

M_L = cantidad de líquido retenida en el plato, lb.

h_l = altura de líquido en el plato, pulg.

h_{dc} = altura de líquido en el vertedero, pulg.

A_a = área activa, ft.

A_d = área de vertederos.

ρ_L = densidad del líquido, lb/ft³.

4.13. Cálculo de la altura total de la columna de destilación

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

$$H = Z + S + T$$

donde H = altura total de la columna, m (pies).

Z = altura neta (ocupada por las etapas de contacto).

S = altura de la base, aproximadamente = 1,8 m (6 pies).

T = altura del tope, aproximadamente = 0,5 a 1 m (2 a 3 pies).



A su vez, la altura neta, Z de la columna esta dada por:

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

donde N = número de etapas teóricas

E_0 = eficiencia global de la columna.

l = espaciado entre platos.

Cuando se usa un rehervidor tipo termosifón (en este caso no se comporta como una etapa teórica) la ecuación anterior toma la forma:

$$Z = \left(\frac{N}{E_0} \right) \cdot l$$

En nuestro caso utilizaremos esta última ecuación, dado que utilizamos un termosifón vertical como rehervidor, quedando las ecuaciones descritas de la siguiente manera:

$E_0 = 1$
$N = 16$

$Z = 384$ pulgadas = $9,7536$ m
 $S = 1,8$ m
 $T = 1$ m

$H = 12,5536$ m



ANEXO 5

TABLAS DE LAS CONSTANTES DE PROPIEDADES



1. PROPILENO

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1-PROPENE						C3H6
IUPAC NAME: PROPYLENE						PROPYLENE
Synonyms: METHYLETHENE						METHYLETHYLENE
PROPENE						
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 Gibbs of Formation	J/kmol	6.2140E+07		XE3	1269 3067 1512	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.6660E+05		XE4	1269 31 1512	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.0029E+06		XE2	47 1269	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-1.9257E+09		XE3	1269 47 1831	
Acentric Factor		0.1424		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	2.2540E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.3152E+04	3	D	635	
Dipole Moment	C*m	1.2208E-30		XE2Z	25	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.03408		D 2	72	
van der Waals Area	m**2/kmol	5.0600E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.0009		XE1	2987 53	
Flash Point	K	165.37		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 PROPYLENE				
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS						
				A	B	C	D	E		
Solid Density Only one value available (87.90, 2.1300E+01)	1	100	6	2.1300E+01						
Liquid Density Min(87.90, 1.8159E+01) Max(364.76, 5.5402E+00)		105	2	1.5245E+00	2.7517E-01	3.6476E+02	3.0246E-01			
Vapor Pressure Min(87.90, 9.1812E-04) Max(364.76, 4.5888E+06)		101	4	6.1396E+01	-3.4704E+03	-6.4800E+00	1.2660E-05	2.0000E+00		
Heat of Vaporization Min(87.90, 2.3767E+07) Max(364.76, 0.0000E+00)	2	106	4	2.6087E+07	3.2510E-01	5.2500E-02				
Solid Heat Capacity Min(13.00, 4.3220E+03) Max(87.00, 6.8182E+04)		100	3	6.2120E+03	-1.0510E+03	8.8050E+01	-1.5260E+00	8.5850E-03		
Liquid Heat Capacity Min(87.90, 9.1034E+04) Max(298.15, 1.0304E+05)	3	100	4	1.0580E+05	-2.3435E+02	7.5500E-01				
Ideal Gas Heat Capacity Min(90.00, 4.1332E+04) Max(1500.00, 1.6799E+05)		107	2	4.1300E+04	1.5250E+05	1.3520E+03	7.4400E+04	5.7800E+02		
Second Virial Coefficient Min(182.50, -1.0999E+00) Max(1825.00, 5.1522E-02)		104	3	1.0010E-01	-8.7450E+01	-4.0140E+06	1.9460E+17	-4.9100E+19		
Liquid Viscosity Min(90.00, 1.1608E-02) Max(220.00, 2.8430E-04)		101	5	-4.4830E+01	1.3370E+03	5.6710E+00				
Vapor Viscosity Min(193.00, 5.4509E-06) Max(1000.00, 2.4090E-05)		102	5	8.7900E-06	2.3200E-01	8.0000E+02	1.2000E+04			
Liq Thermal Conductivity Min(87.90, 1.8867E-01) Max(340.49, 8.2835E-02)	4	100	4	2.2550E-01	-4.1900E-04					
Vap Thermal Conductivity Min(250.00, 1.2537E-02) Max(1000.00, 1.2897E-01)		102	4	2.2390E-05	1.2928E+00	3.1214E+02				
Surface Tension Min(87.90, 3.8344E-02) Max(364.76, 0.0000E+00)		106	3	5.3467E-02	1.2058E+00					

Issue Date: JULY 1981

Revision Date: AUG. 1987

- NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.
 2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.
 3. For the range 300 K to 340 K use the coefficients: A = 1.8564E+06, B = -1.1633E+04, C = 1.9286E+01.
 4. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.



2. 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 8	PS	
Normal Boiling Point	K	231.11		XE2P	43 47 1631	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.075642	2	X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.0468E+08		XE3	1486 47 400	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-2.4400E+07		XE3	1486 2419 2987	31 47
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.7020E+05		XE3	1486 2419 2987	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.5238E+06		XE2	47 1377	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.0431E+09		XE3Y	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) ^{0.5}	1.3091E+04	3	D	635	
Dipole Moment	C*m	0.0		D	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		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 1981 Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. At equilibrium with vapor (triple point).
 2. Determined at the normal boiling point from the liquid density correlation.
 3. For the hypothetical liquid at 298 K and 101325 Pa.
 4. At saturation pressure.
 5. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: PROPANE						C3H8		
						PROPANE		
Property	NOTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	2	1.8861E+01	-2.0332E-02			
Min(23.15, 1.8390E+01)								
Max(85.44, 1.7124E+01)								
Liquid Density		105	2	1.3937E+00	2.7744E-01	3.6982E+02	2.8700E-01	
Min(85.44, 1.6496E+01)								
Max(369.82, 5.0234E+00)								
Vapor Pressure		101	3	5.4276E+01	-3.3680E+03	-5.2610E+00	8.6000E-06	2.0000E+00
Min(85.44, 2.0744E-04)								
Max(369.82, 4.1420E+06)								
Heat of Vaporization	1	106	3	2.6720E+07	3.8550E-01	-8.6000E-02	6.8600E-02	
Min(85.44, 2.4250E+07)								
Max(369.82, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-1.1230E+04	1.0590E+03	-3.6000E+00		
Min(30.00, 1.7300E+04)								
Max(84.00, 5.2324E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	3	1.2220E+05	-9.9430E+02	9.0810E+00	-3.3549E-02	4.7384E-05
Min(85.44, 8.5138E+04)								
Max(350.00, 1.5926E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	3	4.4000E+04	1.9380E+05	1.3690E+03	9.8000E+04	5.8300E+02
Min(100.00, 4.4115E+04)								
Max(1500.00, 2.0467E+05)								
Second Virial Coefficient		104	3	1.1250E-01	-1.0000E+02	-4.3140E+06	-1.8000E+16	-1.6500E+19
Min(184.91, -1.1891E+00)								
Max(1849.10, 5.7737E-02)								
Liquid Viscosity		101	4	-1.5765E+01	6.1823E+02	8.6390E-01	-1.8000E-13	5.0000E+00
Min(85.44, 9.2095E-03)								
Max(369.82, 3.6065E-05)								
Vapor Viscosity		102	3	2.2090E-06	3.8240E-01	4.0500E+02		
Min(193.15, 5.3383E-06)								
Max(750.00, 1.8034E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	3	3.4810E-01	-1.2365E-03	1.2464E-06		
Min(85.44, 2.5155E-01)								
Max(369.82, 6.1284E-02)								
Vap Thermal Conductivity		102	5	6.1500E-05	1.1696E+00	4.9760E+02		
Min(232.70, 1.1491E-02)								
Max(773.15, 8.9370E-02)								
Surface Tension	2	106	4	4.9624E-02	1.1920E+00			
Min(85.44, 3.6282E-02)								
Max(369.82, 0.0000E+00)								

Issue Date: JULY 1981 Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.
 2. Data predicted by Sugden's method used in regression.



3. 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: CH ₃ CH(CH ₃)CH ₃						
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	PS 2368	
Triple Pt Pressure	Pa	1.4232E 02		P 3P	PS	
Normal Boiling Point	K	261.43		XE2P	43 47 31	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.097704	2	X 1P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.3418E+08		XE3	1486 545 47	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-2.0760E+07		XE4	1486 2987 545	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.9539E+05		XE4	1486 545 31	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	4.5396E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.6490E+09		XE3	1486 47 400	
Acentric Factor		0.1770		D	PS 43 11	
Radius of Gyration	m	2.9480E-10		D 3	1112 12 11	
Solubility Parameter	(J/m ³) ^{0.5}	1.4027E+04	2	D 3	PS	
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		
						ISOBUTANE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (113.54, 1.4700E+01)	1	100	6	1.4700E+01				
Liquid Density Min(113.54, 1.2575E+01) Max(408.14, 3.8334E+00)		105	2	1.0463E+00	2.7294E-01	4.0814E+02	2.7301E-01	
Vapor Pressure Min(113.54, 1.4216E-02) Max(408.14, 3.6346E+06)		101	3	7.6858E+01	-4.4974E+03	-8.8060E+00	1.3240E-05	2.0000E+00
Heat of Vaporization Min(113.54, 2.8115E+07) Max(408.14, 0.0000E+00)	2	106	3	3.1944E+07	3.9170E-01			
Solid Heat Capacity Min(77.00, 5.1280E+04) Max(107.00, 7.4254E+04)		100	2	-1.5660E+05	7.1841E+03	-8.7142E+01	3.7537E-01	
Liquid Heat Capacity Min(113.54, 1.0039E+05) Max(390.00, 2.1244E+05)		100	4	2.2870E+05	-2.8505E+03	2.1722E+01	-6.6330E-02	7.4614E-05
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 7.2181E+04) Max(1500.00, 2.6656E+05)		107	2	6.5490E+04	2.4776E+05	1.5870E+03	1.5750E+05	-7.0699E+02
Second Virial Coefficient Min(204.07, -1.7707E+00) Max(2040.65, 8.2339E-02)		104	3	1.4580E-01	-1.2733E+02	-9.0460E+06	-6.5400E+17	-6.5300E+18
Liquid Viscosity Min(190.00, 7.3533E-04) Max(400.00, 5.2408E-05)		101	6	-1.8345E+01	1.0203E+03	1.0978E+00	-6.1000E-27	1.0000E+01
Vapor Viscosity Min(150.00, 3.3816E-06) Max(1000.00, 2.0758E-05)		102	5	1.7750E-07	6.9460E-01	2.5000E+01	1.2100E+04	
Liq Thermal Conductivity Min(113.54, 1.6101E-01) Max(253.54, 1.1392E-01)	3	100	5	1.9920E-01	-3.3636E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(261.43, 1.2901E-02) Max(673.15, 7.6611E-02)		102	4	-4.9900E-02	2.7550E-01	-2.2700E+03	-7.0000E+05	
Surface Tension Min(113.54, 3.4455E-02) Max(408.14, 0.0000E+00)		106	3	5.2165E-02	1.2723E+00			

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.
2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.
3. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.



4. 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	PS	
Triple Pt Pressure	Pa	6.5451E-01		P 4P	PS	
Normal Boiling Point	K	266.25		XE2P	43 47	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.089424	2	X 1P	PS	
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	PS 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	PS	
Dipole Moment	C*m	1.6678E-30		XE2Z	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, 2.0887E-04) Max(350.00, 1.2442E-04)		101	5	-4.8766E+01	1.9070E+03	5.9030E+00	-9.2000E-27	1.0000E+01
Vapor Viscosity Min(175.00, 4.5955E-06) Max(1000.00, 2.4388E-05)		102	5	7.6750E-06	2.6640E-01	9.8200E+02		
Liq Thermal Conductivity Min(192.20, 1.6668E-01) Max(395.20, 7.5725E-02)		100	4	3.9180E-01	-1.5230E-03	1.8300E-06		
Vap Thermal Conductivity Min(250.00, 1.2269E-02) Max(850.00, 1.1274E-01)		102	5	-1.7165E+04	8.1240E-01	-3.1035E+10		
Surface Tension Min(132.81, 3.4434E-02) Max(417.90, 0.0000E+00)		106	3	5.5440E-02	1.2453E+00			

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.
2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.



5. 1-BUTENO

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 1-BUTENE						C4H8
IUPAC NAME: 1-BUTENE						1-BUTENE
Synonyms: alpha-BUTENE						BUTENE-1
alpha-BUTYLENE						1-BUTYLENE
ETHYLETHYLENE						
Chemical Abstracts Number: 106-98-9						Structural Formula: CH ₂ CHCH ₂ CH ₃
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	PS	
Triple Pt Pressure	Pa	3.5593E-07		P 9	PS	
Normal Boiling Point	K	266.90		XE2P	43	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.089621	3	X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-5.4000E+05		XE3	1269 1831	47 31 3067
IG Gibbs of Formation	J/kmol	7.0240E+07		XE4	1269 1831	3067 47 31
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.0783E+05		XE4	1269 1831	3067 47 31
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.8484E+06		XE2	47 1269 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.5412E+09		XE2Z	400 47 1269	
Acentric Factor		0.1867		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	2.7620E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m ³) ^{0.5}	1.5022E+04	3	D 3	PS	
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		XU0	256	
Autoignition Temp	K	657.04		XU0	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						C4H8		
						1-BUTENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density	1	100	6	1.6700E+01				
Only one value available (87.80, 1.6700E+01)								
Liquid Density		105	2	1.1023E+00	2.6630E-01	4.1959E+02	2.8530E-01	
Min(87.80, 1.4267E+01) Max(419.59, 4.1393E+00)								
Vapor Pressure		101	3	6.7780E+01	-4.4290E+03	-7.2064E+00	8.4000E-06	2.0000E+00
Min(87.80, 3.5593E-07) Max(419.59, 3.9211E+06)								
Heat of Vaporization	2	106	3	3.3380E+07	3.9270E-01			
Min(87.80, 3.0440E+07) Max(419.59, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	1.5877E+03	-5.7789E+02	6.4207E+01	-1.0392E+00	5.3867E-03
Min(10.00, 1.2442E+03) Max(87.82, 6.2578E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	3	1.4020E+05	-5.5487E+02	2.6242E+00	-3.0270E-03	
Min(87.80, 1.0966E+05) Max(300.00, 1.2819E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	6.6500E+04	2.0567E+05	1.7713E+03	1.4075E+05	-7.9732E+02
Min(200.00, 6.9582E+04) Max(1500.00, 2.2866E+05)								
Second Virial Coefficient		104	3	1.3305E-01	-1.1353E+02	-1.0255E+07	-2.0550E+18	2.0150E+20
Min(209.80, -1.8102E+00) Max(2098.00, 7.7826E-02)								
Liquid Viscosity		101	5	-2.6725E+00	3.3610E+02	-1.2860E+00		
Min(160.00, 8.2630E-04) Max(270.00, 1.7916E-04)								
Vapor Viscosity		102	5	1.0319E-06	4.8960E-01	3.4737E+02		
Min(175.00, 4.3340E-06) Max(800.00, 1.8984E-05)								
Liq Thermal Conductivity	3	100	5	2.1353E-01	-3.5020E-04			
Min(104.90, 1.7679E-01) Max(264.90, 1.2076E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	5	-2.2790E+03	7.6560E-01	-3.5260E+09		
Min(225.00, 9.1934E-03) Max(800.00, 8.6329E-02)								
Surface Tension		106	3	5.6000E-02	1.2341E+00			
Min(87.80, 4.1914E-02) Max(419.59, 0.0000E+00)								

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



6. 1,3-BUTADIENO

PROPERTY CONSTANTS

PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Chemical Abstracts Name: 1,3-BUTADIENE C4H6 1,3-BUTADIENE						
IUPAC NAME: 1,3-BUTADIENE						
Synonyms: BIETHYLENE BUTADIENE alpha,gamma-BUTADIENE ERVTHRENE VINYLETHYLENE						
Chemical Abstracts Number: 106-99-0 Structural Formula: CH ₂ CHCHCH ₂						
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		XUO	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) ^{0.5}	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		XUO	397	
Flash Point	K		5			
Flammability Limits	vol %	2.0 TO 11.5		XUO	256	
Autoignition Temp	K	702.04		XUO	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

Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (0.0, 1.7877E+01)	1	100	4	1.7877E+01				
Liquid Density Min(164.25, 1.4061E+01) Max(425.37, 4.5473E+00)		105	3	1.2381E+00	2.7227E-C1	4.2537E+02	2.9074E-01	
Vapor Pressure Min(164.25, 6.9049E+01) Max(425.37, 4.33C8E+06)		101	2	7.4102E+01	-4.5800E+C3	-8.2922E+00	1.1820E-05	2.0000E+00
Heat of Vaporization Min(164.25, 2.7646E+07) Max(425.37, 0.00C0E+00)	2	106	2	3.5600E+07	6.2200E-01	-2.8900E-01	5.2000E-02	
Solid Heat Capacity Min(15.00, 6.1024E+03) Max(162.00, 8.6898E+04)		100	3	-5.1000E+03	7.1000E+02	3.5000E+00	-7.4000E-02	2.9000E-04
Liquid Heat Capacity Min(165.00, 1.0333E+05) Max(350.00, 1.4148E+05)		100	2	1.2886E+05	-3.2310E+02	1.0150E+00	3.2000E-05	
Ideal Gas Heat Capacity Min(100.00, 4.3229E+04) Max(1500.00, 1.9472E+05)		107	3	4.3029E+04	1.7311E+05	1.2393E+03	1.0922E+05	5.5614E+02
Second Virial Coefficient Min(212.50, -1.4984E+00) Max(2125.00, 6.7486E-02)		104	4	1.2440E-01	-1.1890E+02	-9.2200E+06	4.0250E+18	-9.4580E+20
Liquid Viscosity Min(250.00, 2.5471E-04) Max(400.00, 4.8797E-05)		101	5	1.7844E+01	-3.1020E+02	-4.5058E+00		
Vapor Viscosity Min(250.00, 7.4635E-06) Max(650.00, 1.6739E-05)		102	4	7.0140E-08	8.4530E-01			
Liq Thermal Conductivity Min(164.25, 1.6213E-01) Max(268.74, 1.2384E-01)	3	100	5	2.2231E-01	-3.6640E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(250.00, 1.1115E-02) Max(850.00, 1.2225E-01)		102	5	-2.0890E+04	9.5930E-01	-9.3820E+10		
Surface Tension Min(164.25, 2.8555E-02) Max(425.37, 0.0000E+00)		106	5	4.7682E-02	1.0507E+00			

Issue Date: JULY 1981

Revision Date: AUG. 1987

- NOTES: 1. Theoretical density calculated from crystallographic data.
 2. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.
 3. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.



7. N-BUTANO

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: BUTANE						C4H10
IUPAC NAME: BUTANE						n-BUTANE
Synonyms: DIETHYL						METHYLETHYLMETHANE
Chemical Abstracts Number: 106-97-8						Structural Formula: CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	58.123			1	
Critical Temperature	K	425.18		XE2P	43 47 1632	
Critical Pressure	Pa	3.7969E+06		XE4P	43 47 1632	
Critical Volume	m ³ /kmol	0.25490		XE4	2419 43 47	
Crit Compress Factor		0.274		D	43	
Melting Point	K	134.86	1	P 2	PS 43 47	
Triple Pt Temperature	K	134.86		XE2	1632 456	456
Triple Pt Pressure	Pa	6.7358E-01		XE0	1632 PS 1762	
Normal Boiling Point	K	272.65		XE2P	43 47 1632	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.096553	2	X 2	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.2565E+08		XE3	1486 47 40	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-1.6560E+07		XE3	1486 545 31	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.0991E+05		XE3	1486 2419 2987	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	4.6610E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.6575E+09		XE3	1486 400 1830	
Acentric Factor		0.1993		D	PS 43	11
Radius of Gyration	m	2.8860E-10		D 3	1112 11 12	
Solubility Parameter	(J/m ³) ^{0.5}	1.4453E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			169	
van der Waals Volume	m ³ /kmol	0.04780		D 2	72	
van der Waals Area	m ² /kmol	6.9400E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3292	3	XE1	47 2987	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 8.5		XU0	1647 256	
Autoignition Temp	K	678.15		XU0	256 1647	

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated to be equal to the triple point temperature.
2. Determined at the normal boiling point.
3. At saturation pressure.
4. Property inappropriate for this substance.

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: BUTANE						C4H10
IUPAC NAME: BUTANE						n-BUTANE
Synonyms: DIETHYL						METHYLETHYLMETHANE
Chemical Abstracts Number: 106-97-8						Structural Formula: CH ₃ (CH ₂) ₂ CH ₃
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	58.123			1	
Critical Temperature	K	425.18		XE2P	43 47 1632	
Critical Pressure	Pa	3.7969E+06		XE4P	43 47 1632	
Critical Volume	m ³ /kmol	0.25490		XE4	2419 43 47	
Crit Compress Factor		0.274		D	43	
Melting Point	K	134.86	1	P 2	PS 43 47	
Triple Pt Temperature	K	134.86		XE2	1632 456	456
Triple Pt Pressure	Pa	6.7358E-01		XE0	1632 PS 1762	
Normal Boiling Point	K	272.65		XE2P	43 47 1632	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.096553	2	X 2	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-1.2565E+08		XE3	1486 47 40	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-1.6560E+07		XE3	1486 545 31	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.0991E+05		XE3	1486 2419 2987	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	4.6610E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.6575E+09		XE3	1486 400 1830	
Acentric Factor		0.1993		D	PS 43	11
Radius of Gyration	m	2.8860E-10		D 3	1112 11 12	
Solubility Parameter	(J/m ³) ^{0.5}	1.4453E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	0.0			169	
van der Waals Volume	m ³ /kmol	0.04780		D 2	72	
van der Waals Area	m ² /kmol	6.9400E+08		D 2	72	
Refractive Index		1.3292	3	XE1	47 2987	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 8.5		XU0	1647 256	
Autoignition Temp	K	678.15		XU0	256 1647	

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated to be equal to the triple point temperature.
2. Determined at the normal boiling point.
3. At saturation pressure.
4. Property inappropriate for this substance.



8. TRANS-2-BUTENO

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (E)- IUPAC NAME: trans-2-BUTENE Synonyms: trans-1,2-DIMETHYLETHYLENE Chemical Abstracts Number: 624-64-6 Structural Formula: CH3CHCHCH3						C4H8 trans-2-BUTENE
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		XE4P	43 47	
Crit Compress Factor		0.274		D	43	
Melting Point	K	167.62		XE2P	43 31 47	
Triple Pt Temperature	K	167.60	1	P 2	PS	
Triple Pt Pressure	Pa	7.2321E+01		P 2P	PS	
Normal Boiling Point	K	274.03		XE2P	43 47 31	
Liq Molar Volume	m 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	XU0	456	
Flash Point	K		4			
Flammability Limits	vol %	1.8 TO 9.7		XU0	256	
Autoignition Temp	K	597.04		XU0	256	

Issue Date: JAN. 1982
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated to be equal to the melting point temperature.
2. Determined at the normal boiling point.
3. Determined at 248 K.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (E)-						C4H8 trans-2-BUTENE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (167.60, 1.5300E+01)	1	100	6	1.5300E+01				
Liquid Density Min(167.60, 1.3085E+01) Max(428.63, 4.2293E+00)	2	105	3	1.1511E+00	2.7217E-01	4.2863E+02	2.8571E-01	
Vapor Pressure Min(167.60, 7.2321E+01) Max(428.63, 4.1029E+06)		101	2	1.0412E+02	-5.1712E+03	-1.4152E+01	2.0860E-02	1.0000E+00
Heat of Vaporization Min(167.60, 2.7716E+07) Max(428.63, 0.0000E+00)	3	106	3	3.3200E+07	3.6400E-01			
Solid Heat Capacity Min(14.56, 1.9324E+03) Max(160.40, 1.0202E+05)		100	4	-1.1910E+04	9.8100E+02	-1.8250E+00	-1.9350E-02	1.2597E-04
Liquid Heat Capacity Min(170.66, 1.1007E+05) Max(271.03, 1.2265E+05)		100	2	1.1276E+05	-1.0470E+02	5.2100E-01		
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 7.4340E+04) Max(1500.00, 2.2817E+05)		107	2	7.2018E+04	2.0046E+05	1.8017E+03	1.3044E+05	-8.2484E+02
Second Virial Coefficient Min(214.30, -1.7903E+00) Max(2143.05, 6.9819E-02)		104	4	1.3400E-01	-1.3530E+02	-1.0300E+07	-1.7400E+18	1.3800E+20
Liquid Viscosity Min(200.00, 5.6226E-04) Max(360.00, 1.1960E-04)		101	6	-1.0175E+01	6.6492E+02	-1.1950E-01		
Vapor Viscosity Min(274.00, 6.9855E-06) Max(650.00, 1.5827E-05)		102	3	1.0500E-06	4.8670E-01	3.5870E+02		
Liq Thermal Conductivity Min(167.60, 1.5610E-01) Max(267.60, 1.2068E-01)	4	100	5	2.1546E-01	-3.5420E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(285.22, 1.3107E-02) Max(1256.77, 1.3701E-01)		102	3	7.8576E-05	1.0565E+00	1.4630E+01	1.0592E+05	
Surface Tension Min(167.60, 3.3696E-02) Max(428.63, 0.0000E+00)		106	4	6.7640E-02	1.4050E+00			

Issue Date: JAN. 1982
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.
2. Equation coefficients derived from modified Rackett equation. See ref 1108.
3. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.
4. Data predicted by method of Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.



9. CIS-2-BUTENO

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: 2-BUTENE, (Z)-						C4H8
IUPAC NAME: cis-2-BUTENE						cis-2-BUTENE
Synonyms: DIMETHYLETHYLENE						cis-1,2-DIMETHYLETHYLENE
PSEUDOBTUYLENE						
Chemical Abstracts Number: 590-18-1						Structural Formula: CH3CHCHCH3
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	56.107			1	
Critical Temperature	K	435.58		XE2P	43 47 31	
Critical Pressure	Pa	4.2058E+06		XE2P	43 47	
Critical Volume	m**3/kmol	0.23398		XE4P	43 47	
Crit Compress Factor		0.272		D	43	
Melting Point	K	134.26	1	P 1	PS 43 47	
Triple Pt Temperature	K	134.26		XE1	999	
Triple Pt Pressure	Pa	2.4703E-01		P 2P	PS	
Normal Boiling Point	K	276.87		XE2P	43 47 31	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.087450	2	X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-6.9873E+06		XE3	47 400 3067	31
IG Gibbs of Formation	J/kmol	6.5856E+07		XE4	47 31 3067	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.0083E+05		XE4	47 3067 31	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	7.3095E+06		XE2	47 31	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-2.5344E+09		XE1Y	400 47 1831	
Acentric Factor		0.2030		D	PS 43	
Radius of Gyration	m	2.8390E-10		D 3	1112 11	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.5543E+04	2	D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	1.0007E-30		XE7Z	25	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.04428		D 3	72	
van der Waals Area	m**2/kmol	6.4000E+08		D 3	72	
Refractive Index		1.3842	3	XU0	456	
Flash Point	K		4			
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		
cis-2-BUTENE								
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
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	2.8571E-01	
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	1.1717E-05	2.0000E+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	-5.3450E-02	2.5940E-02
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	-2.1278E-02	2.5200E-02
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	9.0200E+04	2.4520E+04
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	-3.8370E+18	4.2650E+18
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	1.2939E+05	
Surface Tension Min(134.26, 3.7171E-02) Max(435.58, 0.0000E+00)	5	106	4	5.8810E-02	1.2450E+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 Pachaiyappan (as modified in Technical Data Book - Petroleum Refining, 4th edition) used in regression.
5. Data predicted by Sugden's method used in regression.



10. 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	3.3668E+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						CSH12 n-PENTANE		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	4	1.3533E+01	-6.0608E-03			
Min(23.15, 1.3393E+01)								
Max(143.42, 1.2664E+01)								
Liquid Density		105	2	8.6360E-01	2.6923E-01	4.6965E+02	2.8215E-01	
Min(143.42, 1.0481E+01)								
Max(469.65, 3.2077E+00)								
Vapor Pressure		101	3	8.1624E+01	-5.5785E+03	-9.2354E+00	9.4522E-06	2.0000E+00
Min(143.42, 5.2931E-02)								
Max(469.65, 3.3178E+06)								
Heat of Vaporization	1	106	3	3.9850E+07	3.9790E-01			
Min(143.42, 3.4472E+07)								
Max(469.65, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-1.0050E+04	1.0103E+03	4.2700E+00	-1.0169E-01	4.2200E-04
Min(12.29, 2.8324E+03)								
Max(134.60, 9.3832E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	4	1.5016E+05	-1.1700E+02	1.4490E-01	1.4840E-03	
Min(148.60, 1.4084E+05)								
Max(302.87, 1.6924E+05)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	8.8050E+04	3.0110E+05	1.6502E+03	1.8920E+05	-7.4760E+02
Min(200.00, 9.4039E+04)								
Max(1500.00, 3.2927E+05)								
Second Virial Coefficient		104	3	1.6860E-01	-1.7264E+02	-2.0155E+07	-6.5450E+18	4.6000E+20
Min(234.80, -2.6201E+00)								
Max(2348.00, 9.3517E-02)								
Liquid Viscosity		101	3	-2.0383E+01	1.0504E+03	1.4874E+00	-2.0167E-27	1.0000E+01
Min(143.42, 3.4377E-03)								
Max(469.65, 4.3235E-05)								
Vapor Viscosity		107	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.



11. MTBE

PROPERTY CONSTANTS						
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Chemical Abstracts Name: PROPANE, 2-METHOXY-2-METHYL- C5H12O						
IUPAC NAME: METHYL t-BUTYL ETHER METHYL tert-BUTYL ETHER						
Synonyms: MTBE METHYL t-BUTYL ETHER						
Chemical Abstracts Number: 1634-04-4 Structural Formula: H3COC(CH3)3						
Molecular Weight	kg/kmol	88.150			1	
Critical Temperature	K	497.10		XU1	1035 2721	
Critical Pressure	Pa	3.4300E+06		XU2	1035 2721	
Critical Volume	m**3/kmol	0.32900	1	P 5	639 2721	
Crit Compress Factor		0.273		D	PS	
Melting Point	K	164.55		XE2P	3 1036 2721	
Triple Pt Temperature	K	164.55	2	P 2	PS 1193 2721	
Triple Pt Pressure	Pa	5.3646E-01		P 4	PS	
Normal Boiling Point	K	328.35		XE2	3 422 2721	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.119887		X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-2.9288E+08		XE3	31 400 3	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-1.2544E+08		XE0	31	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	3.5296E+05		XE0	31 1193 2498	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	7.6000E+06		XU0	1193 2721	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-3.0999E+09		XE2Y	400 2721	
Acentric Factor		0.2674		D	PS 2721	
Radius of Gyration	m	3.1790E-10		D 3	1112	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	1.5117E+04		D 4	PS	
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	XU0	1101	

Revision Date: AUG. 1987

Issue Date: JAN. 1982

- 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								
METHYL tert-BUTYL ETHER								
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density Only one value available (164.55, 1.1400E+01)	1	100	6	1.1400E+01				
Liquid Density Min(164.55, 9.7682E+00) Max(497.10, 3.0392E+00)		105	2	8.2157E-01	2.7032E-01	4.9710E+02	2.8290E-01	
Vapor Pressure Min(164.55, 5.3646E-01) Max(497.10, 3.4230E+06)	2	101	3	5.5874E+01	-5.1301E+03	-4.9617E+00	1.9765E-17	6.0000E+00
Heat of Vaporization Min(164.55, 3.5987E+07) Max(497.10, 0.0000E+00)	3	106	4	4.4910E+07	7.8420E-01	-8.7600E-01	5.1800E-01	
Solid Heat Capacity Min(10.00, 2.0096E+03) Max(164.55, 1.4125E+05)		100	4	-9.8000E+03	1.1890E+03	-1.8000E-01	-6.5900E-02	3.4630E-04
Liquid Heat Capacity Min(164.55, 1.5388E+05) Max(328.35, 1.9786E+05)		100	2	1.4012E+05	-9.0000E+00	5.6300E-01		
Ideal Gas Heat Capacity Min(200.00, 1.0394E+05) Max(1500.00, 3.4321E+05)		107	2	9.9328E+04	3.0667E+05	1.7426E+03	2.0764E+05	-7.9558E+02
Second Virial Coefficient Min(248.60, -2.8901E+00) Max(2478.60, 1.1118E-01)	4	104	5	1.9706E-01	-2.0888E+02	-2.4428E+07	4.0528E+19	-1.2458E+22
Liquid Viscosity Min(219.25, 1.0747E-03) Max(449.93, 1.0517E-04)		101	3	-7.3165E+00	8.1050E+02	-5.9662E-01		
Vapor Viscosity Min(300.00, 7.4407E-06) Max(1000.00, 2.3814E-05)	5	102	5	6.1865E-07	5.7210E-01	3.5180E+02		
Liq Thermal Conductivity Min(299.48, 1.1621E-01) Max(460.87, 8.0103E-02)		100	4	1.8320E-01	-2.2370E-04			
Vap Thermal Conductivity Min(273.00, 1.0033E-02) Max(1000.00, 1.1083E-01)	6	102	5	-2.5118E+01	1.1646E+00	-7.9540E+08	8.8900E+10	
Surface Tension Min(164.55, 3.6076E-02) Max(497.10, 0.0000E+00)	7	106	4	5.9353E-02	1.2385E+00			

Issue Date: JAN. 1982

Revision Date: AUG. 1987

- NOTES: 1. Estimated by Project Staff from liquid density at the triple point.
 2. Data predicted by Riedel's method used in regression.
 3. Data calculated from Clapeyron equation used in regression.
 4. Data predicted by method of Tsonopoulos used in regression.
 5. Data predicted by modified Chapman-Enskog method used in regression.
 6. Data predicted by method of Roy and Thodos used in regression.
 7. Data predicted by Sugden's method used in regression.



12. METANOL

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: METHANOL						CH40
IUPAC NAME: METHANOL						METHANOL
Synonyms: CARBINOL						
COLUMBIAN SPIRIT						COLONIAL SPIRIT
METHYL ALCOHOL						HYDROXYMETHANE
MONOHYDROXYMETHANE						METHYL HYDROXIDE
WOOD NAPHTHA						WOOD ALCOHOL
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	PS	
Normal Boiling Point	K	337.85		XE2	30 6 3	
Liq Molar Volume	m ³ /kmol	0.040702		X 2P	PS	
IG Heat of Formation	J/kmol	-2.0067E+08		XE2	1511 30 3	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-1.6242E+08		XEO	1511 30 3	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	2.3970E+05		XEO	1511 15 3	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	3.2049E+06		XE2	30 2865	29 382
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	-6.3810E+08		XE2Y	400	
Acentric Factor		0.5656		D	PS 11 12	
Radius of Gyration	m	1.5520E-10		D 3	1112 11 12	
Solubility Parameter	(J/m ³) ^{0.5}	2.9523E+04		D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	5.6706E-30		XEZZ	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		XUO	256	
Flammability Limits	vol %	7.3 TO 36.0		XUO	256	
Autoignition Temp	K	737.04		XUO	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						CH40		
						METHANOL		
Property	NTE	EQN	Q	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 universal constant should be 1.2 (see ref. #1008).



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza

13. AGUA

PROPERTY CONSTANTS						
Chemical Abstracts Name: WATER						H2O
IUPAC NAME: WATER						WATER
Synonyms: DIHYDROGEN OXIDE						ICE
STEAM						
Chemical Abstracts Number: 7732-18-5						Structural Formula: HOH
PROPERTY	UNITS	VALUE	NOTE	QUAL CODE	ACCEPTED REFERENCE(S)	REJECTED REFERENCE(S)
Molecular Weight	kg/kmol	18.015			1	
Critical Temperature	K	647.13		XE1	2909 2729 1886	
Critical Pressure	Pa	2.2055E+07		XE1	2909 2984 2729	
Critical Volume	m**3/kmol	0.05595		XE1	2909 1886 2984	
Crit Compress Factor		0.229		D	PS	
Melting Point	K	273.15		XE1	424 3 48	
Triple Pt Temperature	K	273.16		XE1	424 48	
Triple Pt Pressure	Pa	6.1130E+02		XE2	424 1319 48	
Normal Boiling Point	K	373.15		XE1	2909 424 2729	
Liq Molar Volume	m**3/kmol	0.018069		XE1	2909 424 3	
IG Heat of Formation	J/kmol	-2.4182E+08		XE1	47 1314 1124	
IG Gibbs of Formation	J/kmol	-2.2859E+08		XE1	47 48 1124	
IG Absolute Entropy	J/kmol*K	1.8872E+05		XE1Z	9 1314 1124	
Heat Fusion at Melt Pt	J/kmol	6.0017E+06		XE1Z	424 48	
Stand Net Heat of Comb	J/kmol	0.0	1		PS	
Acentric Factor		0.3449		D	PS 43 11	22
Radius of Gyration	m	6.1500E-11		D 3	11 12	
Solubility Parameter	(J/m**3)**.5	4.7813E+04		D 3	PS	
Dipole Moment	C*m	6.1709E-30		XE2Z	25 1518	
van der Waals Volume	m**3/kmol	0.01237		D 3	72 389	
van der Waals Area	m**2/kmol	2.2600E+08	2	D 4	1092	
Refractive Index		1.3325		XE1P	43 8	
Flash Point	K		3			
Flammability Limits	vol %		3			
Autoignition Temp	K		3			

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. Product of combustion.
2. Estimated by method of Vera, et al.
3. Property inappropriate for this substance.

EQUATION COEFFICIENTS								
Chemical Abstracts Name: WATER						H2O		
						WATER		
Property	NTE	EQN	Q	COEFFICIENTS				
				A	B	C	D	E
Solid Density		100	2	5.3030E+01	-7.8409E-03			
Min(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(273.16, 6.1056E+02)								
Max(647.13, 2.1940E+07)								
Heat of Vaporization		106	2	5.2053E+07	3.1990E-01	-2.1200E-01	2.5795E-01	
Min(273.16, 4.4733E+07)								
Max(647.13, 0.0000E+00)								
Solid Heat Capacity		100	3	-2.6249E+02	1.4052E+02			
Min(3.15, 1.8015E+02)								
Max(273.15, 3.8121E+04)								
Liquid Heat Capacity		100	2	2.7637E+05	-2.0901E+03	8.1250E+00	-1.4116E-02	9.3701E-06
Min(273.15, 7.6151E+04)								
Max(533.15, 8.9394E+04)								
Ideal Gas Heat Capacity		107	2	3.3359E+04	2.6798E+04	2.6093E+03	8.8880E+03	1.1676E+03
Min(100.00, 3.3359E+04)								
Max(1500.00, 4.7105E+04)								
Second Virial Coefficient		104	6	-2.3040E-02	2.6860E+01	-2.8170E+07	3.3408E+20	-1.3837E+23
Min(323.64, -1.5475E+00)								
Max(3236.40, -1.5572E-02)								
Liquid Viscosity		101	3	-5.1964E+01	3.6706E+03	5.7331E+00	-5.3495E-29	1.0000E+01
Min(273.15, 1.7237E-03)								
Max(643.15, 5.3696E-05)								
Vapor Viscosity		102	2	2.6986E-06	4.9800E-01	1.2577E+03	-1.9570E+04	
Min(373.15, 1.2179E-05)								
Max(1073.10, 4.0452E-05)								
Liq Thermal Conductivity		100	2	-4.2670E-01	5.6903E-03	-8.0065E-06	1.8150E-09	
Min(273.15, 5.6722E-01)								
Max(633.15, 4.2715E-01)								
Vap Thermal Conductivity		102	2	6.9770E-05	1.1243E+00	8.4490E+02	-1.4885E+05	
Min(373.15, 2.4760E-02)								
Max(1073.10, 1.0750E-01)								
Surface Tension		106	2	1.8548E-01	2.7170E+00	-3.5540E+00	2.0470E+00	
Min(273.16, 7.7919E-02)								
Max(647.13, 0.0000E+00)								

Issue Date: JULY 1981
Revision Date: AUG. 1987

NOTES: 1. For the temperature range 333.15 to 403.15 K use the coefficients : A = 4.9669E+00, B = 2.7788E-01, C = 6.4713E+02, D = 1.8740E-01. For the temperature range 403.15 - 647.13 K use A = 4.3910E+00, B = 2.4870E-01, C = 6.4713E+02, D = 2.5340E-01.
2. For sublimation pressures in the temperature range of 149.3 K to 273.16 K use the coefficients: A = 7.5726E+01, B = -7.3035E+03, C = -7.7816E+00, D = 2.6034E-15, E = 6.0000E+00.



ANEXO 6

TABLAS DEL MÉTODO UNIFAC



TABLE 8-23 UNIFAC Group Specifications and Sample Group Assignments (Hansen, et al., 1991)

Group numbers		Name	Volume R	Surface Area Q	Sample Assignments = (Number of Occurrences) × (Secondary Group Number)
Main	Secondary				
1	1	CH 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)
	70	C=C	0.6605	0.485	2,3-Dimethylbutene = (4)(1) + (1)(70)
3	9	ACH	0.5313	0.400	Benzene = (6)(9)
	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 ₃ 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 ₃ CO	1.6724	1.488	Methylethylketone = (1)(1) + (1)(2) + (1)(18)
	19	CH ₂ 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 ₃ COO	1.9031	1.728	Butyl acetate = (1)(1) + (3)(2) + (1)(21)
	22	CH ₂ 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 ₃ O	1.1450	1.088	Dimethyl ether = (1)(1) + (1)(24)
	25	CH ₂ 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 ₃ NH ₂	1.5959	1.544	Methylamine = (1)(28)
	29	CH ₂ NH ₂	1.3692	1.236	Ethylamine = (1)(1) + (1)(29)
	30	CHNH ₂	1.1417	0.924	Isopropylamine = (2)(1) + (1)(30)
15	31	CH ₃ NH	1.4337	1.244	Dimethyl amine = (1)(1) + (1)(31)
	32	CH ₂ 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 ₃ N	1.1865	0.940	Trimethylamine = (2)(1) + (1)(34)
	35	CH ₂ 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)
	37	C ₂ H ₅ N	2.9993	2.113	Pyridine = (1)(37)
	38	C ₃ H ₇ N	2.8332	1.833	2-Methylpyridine = (1)(1) + (1)(38)
18	39	C ₂ H ₅ N	2.6670	1.553	2,3-Dimethylpyridine = (2)(1) + (1)(39)
	40	CH ₃ CN	1.8701	1.724	Acetonitrile = (1)(40)
19	41	CH ₂ CN	1.6434	1.416	Propionitrile = (1)(1) + (1)(41)
	42	COOH	1.3013	1.224	Acetic Acid = (1)(1) + (1)(42)
20	43	HCOOH	1.5280	1.532	Formic Acid = (1)(43)
21	44	CH ₃ 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 8-23 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 ₂ 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 ₂ 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	
	76	CF	0.6150	0.460	Perfluoromethylcyclohexane = (1)(74) + (5)(75) + (1)(76)
41	77	COO	1.3800	1.200	Dioctylsebacate = (2)(1) + (2)(2) + (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	
	83	SiHO	1.3030	0.764	
	84	SiO	1.1044	0.466	Hexamethyldisiloxane = (6)(1) + (1)(81) + (1)(84)
44	85	NMP	3.9810	3.200	N-Methylpyrrolidone = (1)(85)
45	86	CCl ₃ F	3.0356	2.644	Trichlorofluoromethane = (1)(86)
	87	CCl ₂ F	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	CCIF 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	CCIF ₂	2.1721	2.100	Chlorotrifluoromethane = (1)(92)
	93	CCl ₂ F ₂	2.6243	2.376	Dichlorodifluoromethane = (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 ₃) ₂	2.8589	2.428	N,N-Dimethylacetamide = (1)(1) + (1)(97)
98		CONCH ₂ CH ₃	2.6322	2.120	N,N-Methylethylacetamide = (2)(1) + (1)(98)
47	99	CON(CH ₂) ₂	2.4054	1.812	N,N-Diethylacetamide = (3)(1) + (1)(99)
	100	C ₂ H ₅ O ₂	2.1226	1.904	2-Ethoxyethanol = (1)(1) + (1)(2) + (1)(100)
48	101	C ₂ H ₄ O ₂	1.8952	1.592	2-Ethoxy-1-propanol = (2)(1) + (1)(2) + (1)(101)
	102	CH ₃ S	1.6130	1.368	Dimethylsulfide = (1)(1) + (1)(102)
	103	CH ₂ S	1.3863	1.060	Diethylsulfide = (2)(1) + (1)(2) + (1)(103)
49	104	CHS	1.1589	0.748	Diisopropylsulfide = (4)(1) + (1)(3) + (1)(104)
	105	MORPH	3.4740	2.796	Morpholine = (1)(105)
50	106	C ₄ H ₄ S	2.8569	2.140	Thiophene = (1)(106)
	107	C ₃ H ₃ S	2.6908	1.860	2-Methylthiophene = (1)(1) + (1)(107)
	108	C ₄ H ₂ S	2.5247	1.580	2,3-Dimethylthiophene = (2)(1) + (1)(108)



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, σ_{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	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
28	NA	243.8	NA	112.4	NA	NA	NA	134.9	2475
29	NA	NA	201.5	63.71	106.7	NA	NA	NA	NA
30	NA	-146.3	NA	-87.31	NA	NA	NA	NA	NA

Main group	n = 10	11	12	13	14	15	16	17	18
n = 31	NA	152.0	NA	9.207	NA	NA	NA	192.3	NA
32	245.9	21.92	NA	476.6	NA	NA	NA	NA	NA
33	NA	24.37	NA	736.4	NA	NA	NA	NA	-42.71
34	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
35	NA	41.57	NA	-93.51	NA	NA	-257.2	NA	NA
36	354.0	175.5	NA	NA	NA	NA	NA	NA	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	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	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	NA	NA	NA	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	-3.444	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
48	NA	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	221.4



TABLE 8-24 UNIFAC Group-Group Interaction Parameters, a_{mn} , in Kelvins (Continued)

Main group	n = 19	20	21	22	23	24	25	26	27
n - 1	597.0	663.5	35.93	53.76	24.90	104.3	11.44	661.5	543.0
2	336.9	318.9	-36.87	58.55	-13.99	-109.7	100.1	357.5	NA
3	212.5	537.4	-18.81	-144.4	-231.9	3.000	187.0	168.0	194.9
4	6096	872.3	-114.1	-111.0	-80.25	-141.3	-211.0	3629	4448
5	6.712	199.0	75.62	65.28	-98.12	143.1	123.5	256.5	157.1
6	53.28	-202.0	-38.32	-102.5	-139.4	-44.76	-28.25	75.14	NA
7	112.6	-14.09	325.4	370.4	353.7	497.5	133.9	220.6	399.5
8	NA	408.9	NA	NA	NA	1827	6915	NA	NA
9	481.7	669.4	-191.7	-130.3	-354.6	-39.20	-119.8	137.5	548.5
10	NA	497.5	751.9	67.52	-483.7	NA	NA	NA	NA
11	494.6	660.2	-34.74	108.9	-209.7	54.57	442.4	-81.13	NA
12	-47.25	-268.1	NA	NA	-126.2	179.7	24.28	NA	NA
13	-18.51	664.6	301.1	137.8	-154.3	47.67	134.8	95.18	NA
14	358.9	NA	-82.92	NA	NA	-99.81	30.05	NA	NA
15	147.1	NA	NA	NA	NA	71.23	-18.93	NA	NA
16	NA	NA	NA	-73.85	-352.9	-262.0	-181.9	NA	NA
17	-281.6	-396.0	287.0	-111.0	NA	882.0	617.5	NA	-139.3
18	-169.7	-153.7	NA	-351.6	-114.7	-205.3	NA	NA	2845
19	0.0	NA	4.933	-152.7	-15.62	-54.86	-4.624	-0.5150	NA
20	NA	0.0	13.41	-44.70	39.63	183.4	-79.08	NA	NA
21	54.32	519.1	0.0	108.3	249.6	62.42	153.0	32.73	86.20
22	258.6	543.3	-84.53	0.0	0.0	56.33	223.1	108.9	NA
23	74.04	504.2	-157.1	0.0	0.0	-30.10	192.1	NA	NA
24	492.0	631	11.80	17.97	51.90	0.0	-75.97	490.9	534.7
25	363.5	993.4	-129.7	-8.309	-0.2266	248.4	0.0	132.7	2213
26	0.2830	NA	113.0	-9.639	NA	-34.68	132.9	0.0	533.2
27	NA	NA	1971	NA	NA	514.6	-123.1	-85.12	0.0
28	335.7	NA	-73.09	NA	-26.06	-60.71	NA	277.8	NA
29	161.0	NA	-27.94	NA	NA	NA	NA	NA	NA
30	NA	570.6	NA	NA	48.48	-133.2	NA	NA	NA

Main group	n = 19	20	21	22	23	24	25	26	27
m - 31	169.6	NA	NA	NA	NA	NA	NA	481.3	NA
32	NA	616.6	NA	-40.82	21.76	48.49	NA	64.28	2448
33	136.9	5256	-262.3	-174.5	NA	77.55	-185.3	125.3	4288
34	329.1	NA	NA	NA	NA	NA	NA	174.4	NA
35	NA	-180.2	NA	-215.0	-343.6	-58.43	NA	NA	NA
36	-42.31	NA	NA	NA	NA	-85.15	NA	NA	NA
37	335.2	898.2	383.2	301.9	-149.8	-134.2	NA	379.4	NA
38	NA	NA	NA	NA	NA	-124.6	NA	NA	NA
39	150.6	-97.77	NA	NA	NA	-186.7	NA	223.6	NA
40	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
41	-61.6	1179	182.2	305.4	-193.0	335.7	956.1	NA	NA
42	NA	NA	NA	NA	NA	NA	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	NA	NA	NA	NA	NA	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	NA	NA	NA	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	NA	NA	NA	NA	NA	NA
13	140.9	-8.538	170.1	-20.11	-149.5	-202.3	NA	128.8	NA
14	NA	-70.14	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
15	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
16	NA	NA	NA	NA	NA	NA	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	NA	NA
32	-27.45	NA	NA	NA	0.0	NA	NA	-417.2	NA
33	NA	NA	NA	NA	NA	0.0	NA	NA	NA
34	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	32.90	NA
35	NA	85.70	NA	535.8	NA	NA	0.0	NA	NA
36	NA	NA	NA	NA	NA	-111.2	NA	0.0	NA
37	167.9	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.0
38	NA	NA	NA	NA	NA	NA	631.5	NA	837.2
39	NA	-71.00	NA	-191.7	NA	NA	NA	NA	NA
40	NA	NA	NA	NA	NA	NA	6.699	136.6	5.150
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, a_{mn} , in Kelvins (Continued)

Main group	n = 37	38	39	40	41	42	43	44	45
m = 1	-4.189	125.8	485.3	-2.859	387.1	-450.4	252.7	220.3	-5.869
2	-66.46	359.3	-70.45	449.4	-48.33	NA	NA	86.46	NA
3	-259.1	389.3	245.6	22.67	103.5	-432.3	238.9	30.04	-88.11
4	-282.5	101.4	5629	NA	69.26	NA	NA	46.38	NA
5	225.8	44.78	-143.9	NA	190.3	-817.7	NA	-504.2	72.96
6	33.47	-48.25	-172.4	NA	165.7	NA	NA	NA	-52.1
7	NA	NA	319.0	NA	-197.5	-363.8	NA	-452.2	NA
8	NA	NA	NA	NA	-494.2	NA	NA	-659.0	NA
9	-34.57	NA	-61.70	NA	-18.80	-588.9	NA	NA	NA
10	172.4	NA	-268.8	NA	-275.5	NA	NA	NA	NA
11	-275.2	NA	85.33	NA	560.2	NA	NA	NA	NA
12	11.40	NA	308.9	NA	-122.3	NA	NA	NA	NA
13	240.20	-274.0	254.8	NA	417.0	1338	NA	NA	NA
14	NA	NA	-164.0	NA	NA	-664.4	275.9	NA	NA
15	NA	570.9	NA	NA	-38.77	448.1	-1327	NA	NA
16	NA	-196.3	22.05	NA	NA	NA	NA	NA	NA
17	NA	NA	-334.4	NA	-89.42	NA	NA	NA	NA
18	160.7	-158.8	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
19	-55.77	NA	-151.5	NA	120.3	NA	NA	NA	NA
20	-11.16	NA	-228.0	NA	-337.0	NA	NA	NA	NA
21	-168.2	NA	NA	NA	63.67	NA	NA	NA	NA
22	-91.80	NA	NA	NA	-96.87	NA	NA	NA	NA
23	111.2	NA	NA	NA	255.8	NA	NA	-35.68	NA
24	1187.1	215.2	498.6	NA	256.5	NA	233.1	NA	NA
25	NA	NA	NA	NA	-71.18	NA	NA	-209.7	NA
26	10.76	NA	-223.1	NA	248.4	NA	NA	NA	-218.9
27	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
28	-47.37	NA	NA	NA	469.8	NA	NA	NA	NA
29	NA	NA	78.92	NA	NA	NA	NA	1004	NA
30	NA	NA	NA	NA	43.37	NA	NA	NA	NA

Main group	n = 37	38	39	40	41	42	43	44	45
n = 31	NA	NA	302.2	NA	347.8	NA	NA	-262	NA
32	NA	NA	NA	NA	68.55	NA	NA	NA	NA
33	NA	NA	NA	NA	-195.1	NA	NA	NA	NA
34	2073	NA	-119.8	NA	NA	NA	NA	NA	NA
35	NA	NA	-97.71	NA	153.7	NA	NA	NA	NA
36	-208.8	NA	-8.804	NA	423.4	NA	NA	NA	NA
37	0.0	NA	255.0	NA	730.8	NA	NA	26.35	NA
38	NA	0.0	NA	-117.2	NA	NA	NA	NA	NA
39	137.7	NA	0.0	-5.579	72.31	NA	NA	NA	NA
40	NA	185.6	55.80	0.0	NA	NA	NA	NA	NA
41	-198.0	NA	-28.65	NA	0.0	NA	NA	NA	111.8
42	NA	NA	NA	NA	NA	0.0	NA	NA	NA
43	NA	NA	NA	NA	NA	745.3	-2166	NA	NA
44	-66.31	NA	NA	NA	NA	NA	0.0	NA	NA
45	NA	NA	NA	-32.17	NA	NA	NA	0.0	NA
46	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	0.0
47	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA	NA
48	148.9	NA	NA	NA	101.2	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



Diseño de la sección de purificación de una planta de producción de MTBE de 120000 Tn/año

Francisco García Mendoza



Bibliografía

- ⇒ Internet
- ⇒ “Design Institute for Physical Properties”, Dippr
- ⇒ “Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemical”, Daubert, T.E. y Dannert, R.P.
- ⇒ “Manual del Ingeniero Químico”, Robert H. Perry
- ⇒ “The properties of Gases and Liquids”, Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O’Connell, J.P.
- ⇒ “Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes” de Richard Turton, Richard C. Bailie, Wallace B. Whiting, Joseph A. Shaeiwitz.
- ⇒ “Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química” de E. J. Henley, J. D. Seader.
- ⇒ “Introducción a las operaciones de separación. Cálculo por etapas de equilibrio” de A. Marcilla Gomis.
- ⇒ “The ChemSep Book” de Harry A. Kooijman, Ross Taylor.
- ⇒ “Mathematical modelling of mass transfer in multi-stage rotating disc contactor column” de Khairil Anuar Arshad, Jamalludin Talib, Normah Maan.