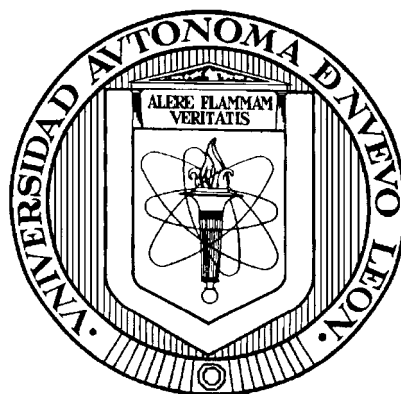


UNIVERSIDAD AUTONOMA DE NUEVO LEÓN

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS



**ESTUDIO SOBRE LA ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS
DE COMPUESTOS PUROS Y MEZCLAS REALES CON LA
ECUACIÓN CUÁRTICA GENERALIZADA DE SHAH**

Por

RODOLFO ROCHA VILLAGÓMEZ

**Como requisito parcial para obtener el Grado de
MAESTRÍA EN CIENCIAS con Orientación en
INGENIERÍA QUÍMICA**

Diciembre, 2007

**ESTUDIO SOBRE LA ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES
TERMODINÁMICAS DE COMPUESTOS PUROS Y
MEZCLAS REALES CON LA ECUACIÓN
CUÁRTICA GENERALIZADA
DE SHAH**

Aprobación de la tesis:

Dr. Erardo Mario Elizondo Villarreal
Asesor de la tesis - Presidente

Dr. Eduardo Soto Regalado
Secretario

M.C. José Angel Loredo Medrano
Vocal

Dr. Maria Teresa Garza González
Subdirector de Estudios de Postgrado

RESUMEN

Rodolfo Rocha Villagómez

Fecha de graduación: Diciembre, 2007

Universidad Autónoma de Nuevo León

Facultad de Ciencias Químicas

Título del Estudio: ESTUDIO SOBRE LA ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE COMPUESTOS PUROS Y MEZCLAS REALES CON LA ECUACIÓN CUÁRTICA GENERALIZADA DE SHAH.

Número de páginas: 187

Candidato al grado de Maestría
en Ciencias con orientación en
Ingeniería Química.

Área de Estudio: Simulación y Termodinámica

Propósito y Método de Estudio: La estimación de propiedades termodinámicas de compuestos puros y mezclas reales tales como: volumen, entalpía y entropía en la región de líquido saturado, vapor saturado y vapor sobrecalentado, se compara con datos experimentales reportados. Se emplea la ecuación cuártica de Shah y col.(1994) para compuestos puros no polares, la extensión de Lin y col. (1996) para compuestos polares y la modificación de Li y col.(2001) para mezclas. Se usa el método de propiedades residuales para estimar las propiedades termodinámicas de gases y se elabora un estudio comparativo entre la ecuación cuártica de Shah y las ecuaciones cúbicas propuestas por Soave-Redlich-Kwong (1972) y Peng-Robinson (1976).

Contribuciones y Conclusiones: Se establecieron intervalos de predicción seguros en los cuales la ecuación cuártica de Shah y sus actualizaciones presentan mejora respecto a la ecuación de Soave-Redlich-Kwong (1972) y Peng-Robinson (1976) para los compuestos: oxígeno, etano, argón, clorotrifluorometano, agua, trifluorometano y aire en las regiones vapor sobrecalentado, vapor saturado y líquido saturado. La ecuación que predice mejores resultados en la región de vapor saturado y líquido saturado para todos los compuestos estudiados es Li y col. (2001) con un valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) de 3.85 % comparado con los modelos cúbicos Soave-Redlich-Kwong (1972) con 5.31 % y Peng-Robinson (1976) con 8.77 %; además de los otros modelos cuárticos Lin y col.(1996) con 3.99 % para los compuestos puros no-polares y polares; así mismo Shah y col.(1994) con 3.56 % para los compuestos puros no-polares. En la región de vapor sobrecalentado la ecuación que mejor predice el volumen, entalpía y entropía para el gas es Soave-Redlich-Kwong (1972) con un valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) de 1.06 % comparado con: Li y col. (2001) con 2.14 % y Peng-Robinson (1976) con 2.63 % para todos los compuestos estudiados; además de Lin y col. (1996) con 2.48 % para compuestos puros no-polares y polares y finalmente Shah y col. (1994) con 2.26 % para compuestos no-polares.

FIRMA DEL ASESOR: _____

AGRADECIMIENTOS

Le agradezco a mi esposa e hijos por el tiempo que de ellos he tomado durante los estudios de grado y la realización de esta tesis, y a mi director de tesis Dr. Erardo Mario Elizondo Villarreal por su invaluable estímulo, excelente asesoría y apoyo para la elaboración de esta tesis.

También quisiera agradecer a la UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN, por brindarme un lugar en sus aulas de clase; a mi querida FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS, por la preparación profesional que de ella he recibido.

A los Honorables miembros del jurado por evaluar mi tesis y los conocimientos que pongo a sus distinguidas órdenes y consideración.

DEDICATORIA

A MI DIOS

Por darme la vida, la salud, la capacidad y la fortaleza.

A MIS PADRES

C.P. Rodolfo Rocha Nuñez y Sra. Eva Villagómez Taméz

Por sus esfuerzos, desvelos y ejemplo.

A MI ESPOSA

C.P. Lorena Arrambide Licón

Por su Amor, Comprensión y Apoyo.

A MIS HIJOS

Jonathan Rodolfo, Aldo Rodolfo, Lorena Yamileth y Alan Daniel Rocha
Arrambide.

Con Amor y cariño.

A MIS HERMANOS

Lic. Ada Irasema Rocha Villagómez e Ing. Obed Rocha Villagómez

Con amor fraternal.

TABLA DE CONTENIDO

Capítulo	Página
1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Breve introducción a la Ingeniería Química	1
1.2 La Termodinámica	2
1.2.1 Primera ley de la termodinámica	2
1.2.2 Segunda ley de la termodinámica	3
1.2.3 Tercera ley de la termodinámica	4
1.2.4 Ley cero de la termodinámica	4
1.3 Las Ecuaciones de Estado	5
1.3.1 Definición y tipos	5
1.3.2 Ecuación de Shah-Bienkowski-Cochran	7
1.3.3 Ecuación de Lin-Bienkowski-Shah-Cochran	8
1.3.4 Ecuación de Li-Shah-Cochran.	11
1.4 Objetivo del trabajo	13
2. PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO	15
2.1 Cálculo del volumen específico.	15
2.1.1 Compuestos puros	15
2.1.2 Mezclas	16
2.2 Cálculo de propiedades termodinámicas de gases	16
2.2.1 Ecuación para calcular entalpía específica de gases	17
2.2.1.1 Compuestos puros	17
2.2.1.2 Mezclas	19
2.2.2 Ecuación para calcular entropía específica de gases	20
2.2.2.1 Compuestos puros	20
2.2.2.2 Mezclas	21
2.3 Cálculo de propiedades termodinámicas de líquidos	23
2.3.1 Ecuaciones para calcular (dP^{sat} / dT)	24
2.3.1.1 Compuestos puros	24
2.3.1.2 Mezclas	26
2.3.2 Ecuaciones para calcular ΔH_{vap}	28
2.3.2.1 Ecuación de Antoine	28
2.3.2.2 Ecuación de Antoine Modificada	28
2.3.2.3 Ecuación de Wagner	29
2.3.2.4 Ecuación de Gómez-Nieto-Thodos	29

Capítulo	Página
3. PREDICCIONES Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS	32
3.1 Componentes puros no polares	35
3.1.1 Oxígeno	35
3.1.2 Etano	44
3.1.3 Argón	52
3.2 Componentes puros polares	61
3.2.1 Trifluoroclorometano	61
3.2.2 Agua	70
3.2.3 Trifluorometano	81
3.3 Mezcla	90
3.3.1 Aire	90
4. CONCLUSIONES	110
BIBLIOGRAFÍA	115
APÉNDICES	117
APÉNDICE A.- MÉTODO PARA RESOLVER UNA ECUACIÓN DE CUARTO ORDEN	118
APÉNDICE B.- FUNCIÓN PARA EVALUAR LA LA ENTALPÍA RESIDUAL USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH	125
APÉNDICE C.- FUNCIÓN PARA EVALUAR LA LA ENTROPÍA RESIDUAL USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH	143
APÉNDICE D.- FUNCIÓN DE LA PRESIÓN DE SATURACIÓN USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH	160
APÉNDICE E.- FUNCIÓN PARA EVALUAR LA LA DERIVADA DE LA PRESIÓN DE SATURACIÓN RESPECTO DE LA TEMPERATURA USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH	165
APÉNDICE F.- DIAGRAMA DE BLOQUES SIMPLIFICADO	179

LISTA DE TABLAS

Tabla	Página
I. Coeficientes de ajuste de la ecuación de Shah-Bienkowski-Cochran	8
II. Coeficientes de ajuste de la ecuación de Lin-Bienkowski-Shah-Cochran	10
III. Coeficientes de ajuste de la ecuación de Li-Shah-Cochran	12
IV. Propiedades de los compuestos puros	32
V. Capacidades caloríficas para gases a presión constante de compuestos puros	33
VI. Constantes de las ecuaciones de Antoine y Wagner para compuestos puros	33
VII. Condiciones de referencia consideradas en el estudio y capacidades caloríficas promedio del aire líquido	34
VIII. Estimación de volumen específico en la región líquido-vapor para el oxígeno usando modelos cuárticos y cúbico	37
IX. Estimación de entalpía específica en la región líquido-vapor para el oxígeno usando modelos cuárticos y cúbicos	38
X. Estimación de entropía específica en la región líquido-vapor para el oxígeno usando modelos cuárticos y cúbicos	39
XI. Estimación de entalpía y entropía específica del líquido saturado para el oxígeno usando la ecuación de Shah	40
XII. Estimación de propiedades termodinámicas del oxígeno en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cuárticos	41

LISTA DE TABLAS (CONTINÚA)

Tabla	Página
XIII. Estimación de propiedades termodinámicas del oxígeno en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cúbicos	42
XIV. Estimación de presión de vapor y entalpía de vaporización para el oxígeno usando modelos cuárticos	43
XV. Estimación de volumen específico en la región líquido-vapor para el etano usando modelos cuárticos y cúbicos	45
XVI. Estimación de entalpía específicas en la región líquido-vapor para el etano usando modelos cuárticos y cúbicos	46
XVII. Estimación de entropía específica en la región de líquido-vapor para el etano usando modelos cuárticos y cúbicos	47
XVIII. Estimación de entalpía y entropía específica del líquido saturado para el etano usando modelos cuárticos	48
XIX. Estimación de propiedades termodinámicas del etano en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cuárticos	49
XX. Estimación de propiedades termodinámicas del etano en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cúbicos	50
XXI. Estimación de presión de vapor y entalpía de vaporización para el etano usando modelos cuárticos	51
XXII. Estimación de volumen específico en la región líquido-vapor para el argón usando modelos cuárticos y cúbicos	54

LISTA DE TABLAS (CONTINÚA)

Tabla	Página
XXIII. Estimación de entalpías específicas en la región líquido-vapor para el argón usando modelos cuárticos y cúbicos	55
XXIV. Estimación de entropía específica en la región líquido-vapor para el argón usando modelos cuárticos y cúbicos	56
XXV. Estimación de entalpía y entropía específica del líquido saturado para el argón usando modelos cuárticos	57
XXVI. Estimación de propiedades termodinámicas del argón en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cuárticos.	58
XXVII. Estimación de propiedades termodinámicas del argón en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cúbicos	59
XXVIII. Estimación de presión de vapor y entalpía de vaporización para el argón usando modelos cuárticos	60
XXIX. Estimación de volumen específico en la región líquido-vapor para el trifluoroclorometano usando modelos cuárticos y cúbicos	63
XXX. Estimación de entalpía específica en la región líquido-vapor para el trifluoroclorometano usando modelos cuárticos y cúbicos	64
XXXI. Estimación de entropía específica en la región líquido-vapor para el trifluoroclorometano usando modelos cuárticos y cúbicos	65

LISTA DE TABLAS (CONTINÚA)

Tabla	Página
XXXII. Estimación de entalpía y entropía específica del líquido saturado para el trifluoroclorometano usando modelos cuárticos.	66
XXXIII. Estimación de propiedades termodinámicas para el trifluoroclorometano en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cuárticos	67
XXXIV. Estimación de propiedades termodinámicas para el trifluoroclorometano en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cúbicos	68
XXXV. Estimación de presión de vapor y entalpía de vaporización para el Trifluoroclorometano usando modelos cuárticos.	69
XXXVI. Estimación de volumen específico en la región líquido-vapor para el agua usando modelos cuárticos y cúbicos	72
XXXVII. Estimación de entalpía específica en la región líquido-vapor para el agua usando modelos cuárticos y cúbicos	73
XXXVIII. Estimación de entropía específica en la región líquido-vapor para el agua usando modelos cuárticos y cúbicos	74
XXXIX. Estimación de entalpía y entropía específica del líquido saturado para el agua usando modelos cuárticos.	75
XL. Estimación de propiedades termodinámicas para el agua en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cuárticos	76
XLI. Estimación de propiedades termodinámicas para el agua en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cúbicos.	78

LISTA DE TABLAS (CONTINÚA)

Tabla	Página
XLII. Estimación de presión de vapor y entalpía de vaporización para el agua usando modelos cuárticos	80
XLIII. Estimación de volumen específico en la región líquido -vapor para el trifluorometano usando modelos cuárticos y cúbicos	83
XLIV. Estimación de entalpía específica en la región líquido -vapor para el trifluorometano usando modelos cuárticos y cúbicos	84
XLV. Estimación de entropía específica en la región líquido -vapor para el trifluorometano usando modelos cuárticos y cúbicos	85
XLVI. Estimación de entalpía y entropía específica del líquido saturado para el trifluorometano usando modelos cuárticos	86
XLVII. Estimación de propiedades termodinámicas del trifluorometano en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cuárticos	87
XLVIII. Estimación de propiedades termodinámicas del trifluorometano en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cúbicos	88
XLIX. Estimación de presión de vapor y entalpía de Vaporización para el trifluorometano usando modelos cuárticos	89
L. Estimación de volumen específico en la región líquido -vapor para el aire usando modelos cuárticos y cúbicos	92
LI. Estimación de entalpía específica de vapor y líquido saturado para el aire usando modelos cuárticos y cúbicos	94

LISTA DE TABLAS (CONTINÚA)

Tabla	Página
LII. Estimación de entropía de vapor y líquido saturado para el aire usando modelos cuárticos y cúbicos	96
LIII. Estimación de propiedades termodinámicas del aire en la región de vapor sobrecalentado usando modelos cuárticos y cúbicos	98
LIV. Estimación de presiones de vapor y calores de vaporización para el aire usando modelos cuárticos y empíricos	101
LV. Valores promedio de los % de desviación absolutos (% AAD) para volumen, entalpía y entropía en la región de líquido y vapor saturado	103
LVI. Valores promedio de los % de desviación absolutos (% AAD) para volumen, entalpía y entropía en la región de vapor sobrecalentado	108

NOMENCLATURA

a	Parámetro de las ecuaciones analíticas de estado
a_r	Ecuación cuadrática función del factor acéntrico y del momento dipolar reducido
a_{r0}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah
a_{r1}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah
a_{r2}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah
a_{r3}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Lin y Li
a_{r4}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Lin y Li
a_c	Valor del parámetro a en el punto crítico
b	Constante de la ecuación de Wagner
b_r	Constante de la ecuación cuártica de Shah
B	Constante de la ecuación de Antoine
c	Parámetro de las ecuaciones cuárticas
c_c	Valor del parámetro c en el punto crítico
c_r	Ecuación cuadrática función del factor acéntrico y del momento dipolar reducido
c_{r0}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah
c_{r1}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah

NOMENCLATURA (CONTINÚA)

c_{r2}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah
c_{r3}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Lin y Li
c_{r4}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Lin y Li
C	Constante de la ecuación de Antoine
C_p	Capacidad calorífica de gases a presión constante
c_w	Constante de la ecuación de Wagner
d	Constante de la ecuación de Wagner
e	Parámetro de la ecuación cuártica
e_r	Ecuación cuadrática función del factor acéntrico
e_{r0}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah
e_{r1}	Constante de regresión para la ecuación cuártica de Shah
e_{r2}	Parámetro de la ecuación cuártica en una mezcla
E	Constante de la ecuación de Antoine Modificada
F	Derivada de la ecuación de la esfera dura
f	Constante de la ecuación de Antoine Modificada
H	Entalpía

NOMENCLATURA (CONTINÚA)

k_1, k_0	Constantes de la ecuación cuártica de Shah
M	Peso molecular
m	Función de la ecuación de Gómez nieta y Thodos
m_1	Derivada
n	Constante de la ecuación de Antoine Modificada
N	Número de componentes en la mezcla
P	Presión
Q	Calor
R	Constante universal de los gases $\left[83.147 \frac{cm^3 - bar}{gmol - K} \right]$
s	Función de la ecuación de Gómez-Nieto-Thodos
S	Entropía
T	Temperatura del compuesto
Tb	Temperatura de ebullición a la presión normal
U	Energía interna
V	Volumen específico
W	Trabajo
X	Funciones de la ecuación Shah

NOMENCLATURA (CONTINÚA)

x Fracción molar de un componente en fase líquida

y Fracción molar de un componente en fase gas

LETRAS GRIEGAS

A Constante a de la ecuación de Gómez-Nieto-Thodos

α Factor de corrección por condición diferente a la crítica

B Constante b de la ecuación de Gómez-Nieto-Thodos

β Volumen de la esfera dura del fluido

β_c Volumen de la esfera dura en el punto crítico

χ Constante de x de ecuación de Antoine Modificada

γ Función de la ecuación de Gómez - Nieto - Thodos

Δ Diferencia de una propiedad termodinámica

Λ Constante Δ de la ecuación de Gómez-Nieto-Thodos

μ Momento dipolar

ρ Densidad

τ Función de la ecuación de Wagner

Y Función de la ecuación Gómez-Nieto-Thodos

ω Factor acéntrico

NOMENCLATURA (CONTINÚA)

ξ	Parte dependiente de la temperatura del parámetro c
ψ	Derivada de presión Saturación respecto a la temperatura

SUBÍNDICES

c	Condición crítica
g	Fase gas o vapor
$irev$	Condición irreversible
l	Fase líquida
m	Valor para la mezcla
o	Indica un punto de referencia
r	Condición reducida
rev	Condición reversible
vap	Estado de vaporización
mix	Se aplica a la condición por mezclado

SUPERÍNDICES

IG	Estado de gas ideal
sat	Estado de saturación

NOMENCLATURA (CONTINÚA)

- * Condición reducida para el momento dipolar
- ' Propiedad residual

ABREVIACIONES

%AAD Desviación media absoluta (% Average Absolute Deviation)

%Desv Desviación (Deviation)

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 Breve introducción a la Ingeniería Química

La ingeniería Química se define como “...la aplicación de los principios de las ciencias físicas y naturales, junto con los principios de economía y relaciones humanas, a campos que atañen en forma directa a los procesos y equipos de proceso en los cuales se trata la materia con el fin de transformarla, modificar su estado, contenido de energía o composición...”^[2]

La práctica de la ingeniería química consiste en la concepción, el diseño, la innovación de los procesos y sus productos; también concierne el desarrollo económico, el diseño, la construcción, la operación, el control y la dirección de las plantas químicas; además de la investigación y la enseñanza en esos campos.

Estos procesos comprenden una gran variedad de operaciones unitarias, como lo son: destilación, secado, extracción, intercambio de calor, transporte de fluidos y otras. En estas operaciones de separación, transporte, intercambio de materia e intercambio de energía, estimaciones incorrectas en las propiedades termodinámicas son causa de sobre diseños o de equipos sin la capacidad requerida.

Para la estimación de propiedades termodinámicas es necesario el conocimiento de los compuestos involucrados y de las ecuaciones que predicen dichas propiedades.

La termodinámica clásica y el uso de las relaciones P-V-T también llamadas ecuaciones de estado, proporcionan un medio para obtener estimaciones de propiedades termodinámicas. Las propiedades termodinámicas mencionadas son: Volumen específico, Entalpía específica y Entropía específica; es de particular interés la ecuación cuártica de Shah original, así como algunas modificaciones.

1.2 La Termodinámica

La palabra termodinámica proviene de dos palabras griegas: thermé, que significa “calor”, y dynamis, cuyo sentido original es “fuerza” etimológicamente, pues “termodinámica” es la ciencia que estudia los cambios en los sistemas físicos en los que interviene el calor^[8,12].

Son cuatro las leyes de la termodinámica, las cuales se presentan a continuación:

1.2.1 Primera Ley de la termodinámica

La primera ley de la termodinámica en su forma original dice que si en un sistema se produce una transformación, entonces el cambio de energía interna del sistema, es igual a la diferencia entre el calor total entregado al sistema durante la transformación y el trabajo total realizado por el sistema durante esa transformación.

$$\Delta U = Q + W \quad (1)$$

La ecuación (1) se aplica a procesos que implican cambios finitos dentro del sistema. En el caso de cambios diferenciales, esta ecuación se expresa como:

$$\delta U = \delta Q + \delta W \quad (2)$$

La primera ley de la termodinámica nos dice que la energía se conserva.^[13] Se podría objetar que esta ley es una aproximación corregida por la teoría de la relatividad; que en lugar de la energía, lo que se conserva es la combinación de masa y energía.

1.2.2 Segunda Ley de la termodinámica

Esta ley indica la dirección en que se llevan a cabo las transformaciones energéticas. En un sistema aislado, es decir, que no intercambia materia ni energía con su entorno, la entropía (fracción de energía de un sistema que no es posible convertir en trabajo) siempre aumenta con el tiempo. En otras palabras: El flujo espontáneo de calor siempre es unidireccional, desde los cuerpos a temperatura más alta a aquellos de temperatura más baja^[12].

A continuación se presentan sus dos principales postulados:

“Ningún equipo puede funcionar de tal modo que su único efecto sea convertir completamente todo el calor absorbido por el sistema en trabajo hecho por el sistema”^[12].

“No existe ningún proceso que consista exclusivamente en la transferencia de calor de un nivel de temperatura a otro mayor”^[12].

La combinación de la primera y segunda ley de la termodinámica permite conocer la situación de equilibrio de los procesos.

Con la segunda ley se define otra propiedad, la que se conoce como entropía y se define:

$$dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T} \quad (3)$$

$$dS > \frac{\delta Q_{irrev}}{T} \quad (4)$$

Los procesos pueden ser reversibles o irreversibles, en los primeros el cambio de entropía es cero, y en los últimos el cambio de entropía es positivo. No existen procesos naturales en los cuales el cambio de entropía sea negativo.^[12]

1.2.3 Tercera ley de la termodinámica

Esta ley afirma que es imposible alcanzar una temperatura igual al cero absoluto mediante un número finito de procesos físicos, también afirma que, a medida que un sistema dado se aproxima al cero absoluto, su entropía tiende a un valor constante específico. Por lo tanto la entropía absoluta es cero para todas las sustancias cristalinas perfectas a la temperatura del cero absoluto^[12].

1.2.4 Ley cero de la termodinámica

La ley cero de la termodinámica establece que si un cuerpo "A" en equilibrio térmico con el cuerpo "C" y, un cuerpo "B" también está en equilibrio con el cuerpo "C", entonces los cuerpos "A" y "B" están en equilibrio térmico, también afirma que si dos sistemas se influyen térmicamente, después de un determinado tiempo alcanzarán el equilibrio térmico.^[12]

1.3 Las Ecuaciones de Estado

1.3.1 Definición y tipos

Las ecuaciones de estado se definen como: expresiones algebraicas que relacionan el volumen específico V , la presión absoluta P , y la temperatura absoluta T ^[7].

Entre los principales tipos de ecuaciones de estado se pueden mencionar^[7]:

-) Estados Correspondientes
-) Ecuación Virial
-) Ecuaciones Analíticas de estado:
 - =) Ecuaciones Cúbicas (o de tercer orden)
 - =) Ecuaciones Cuárticas (o de cuarto orden)
-) Ecuaciones no-analíticas de estado

Es del interés en este trabajo la ecuación del tipo cuártica, por lo que se presenta la historia en el desarrollo de estas ecuaciones:

En 1986 Kubic, E. L. propuso la primer ecuación cuártica de estado para cadena de moléculas-semejantes. Kubic usó una ecuación que contiene un modelo matemático simple para representar las fuerzas repulsivas de las moléculas y un término atractivo obtenido empíricamente, además extendió su ecuación cuártica de estado de cuatro parámetros a mezclas en el mismo año,

aplicando la regla de mezclado de Van der Waals para el parámetro “a” y el término atractivo; y la regla de Kay para los otros parámetros.^[4,11,14]

Luego, en 1990, Giorgio Soave también propuso una ecuación cuártica para fluidos puros, la cual también presentó desviaciones altas^[4].

Posteriormente en 1994, Vinod M. Shah y col. desarrollaron una ecuación cuártica de estado para fluidos puros no-polares que contiene cuatro parámetros, los cuales dependen de tres propiedades del fluido: Temperatura crítica, volumen crítico y factor acentrico. Esta ecuación contiene un modelo matemático “ β ” que representa la contribución repulsiva para la presión basado en simulación de dinámica molecular llamada “ecuación de la esfera dura” y las fuerzas atractivas fueron representadas por un termino empírico obtenido de datos experimentales, así como 24 coeficientes que contiene esta ecuación de estado.

[11]

En 1996 Yen-liang Lin y col. extendieron la ecuación cuártica de Shah y col. (1994) a fluidos puros polares, modificando los parámetros “a” y “c” para que estos fueran función del factor acentrico y del momento dipolar; para esta modificación, agregaron 16 coeficientes, además de los 24 coeficientes de la ecuación original.^[6]

En 1999 Yun Zhi y col. publicaron una ecuación general para ser usada tanto en modelos cúbicos como en cuárticos, buscando generalizar de alguna forma las ecuaciones analíticas de estado.^[15]

En 2001 H. C. Li y col. publicaron una simplificación de coeficientes de 40 a 25 de la ecuación modificada por Lin y col. 1996 y la aplicaron a mezclas. La aplicación a mezclas consiste en el uso de las reglas de mezclado de Van der Waals a los parámetros “a” y “c”, la regla de Kay para el parámetro “e” y la regla de Boublink-Mansoori para el parámetro “ β ”.^[5]

A continuación se presenta la ecuación cuártica de Shah y col. con sus actualizaciones:

1.3.2 Ecuación de Shah-Bienkowski-Cochran (SBC-94) ^[11] es:

$$P = \frac{RT}{(V - k_0\beta)} + \frac{\beta k_1 RT}{(V - k_0\beta)^2} - \frac{aV + k_0\beta c}{V(V + e)(V - k_0\beta)} \quad (5)$$

Donde:

$$\beta = \beta_c \left\{ \exp \left[-0.03125 \ln(T_r) - 0.0054 [\ln(T_r)]^2 \right] \right\}^3 \quad (6)$$

$$\beta_c = b_r V_c \quad (7)$$

$$a = a_c \alpha(T_r) \quad (8)$$

$$c = c_c \xi(T_r) \quad (9)$$

Para $T_r \leq 1$ entonces:

$$\alpha(T_r) = \left[1 + X_2(1 - \sqrt{T_r}) + X_3(1 - \sqrt{T_r})^2 + X_4(1 - \sqrt{T_r})^3 \right]^2 \quad (10)$$

Para $T_r > 1$ entonces:

$$\alpha(T_r) = \left[1 + X_2(1 - \sqrt{T_r}) + X_5(1 - \sqrt{T_r})^2 + X_6(1 - \sqrt{T_r})^3 \right]^2 \quad (11)$$

$$\xi(T_r) = \left[1 + X_7(1 - \sqrt{T_r}) \right]^2 \quad (12)$$

$$a_c = \frac{a_r RT_c}{\rho_c} \quad (13)$$

$$c_c = \frac{c_r RT_c}{\rho_c} \quad (14)$$

$$e = \frac{e_r}{\rho_c} \quad (15)$$

$$X_i = X_{i1} + X_{i2}\omega \quad \text{para } i = 2,3,4,5,6, \text{ y } 7 \quad (16)$$

$$a_r = a_{r0}(1 + a_{r1}\omega + a_{r2}\omega^2) \quad (17)$$

$$c_r = c_{r0}(1 + c_{r1}\omega + c_{r2}\omega^2) \quad (18)$$

$$e_r = e_{r0}(1 + e_{r1}\omega + e_{r2}\omega^2) \quad (19)$$

TABLA I

**COEFICIENTES DE AJUSTE DE LA ECUACIÓN
DE SHAH-BIENKOWSKI-COCHRAN^[11]**

a_{r0}	1.84713	X_{21}	0.14988
a_{r1}	-0.05218	X_{22}	0.97848
a_{r2}	1.06446	X_{31}	-0.32379
b_r	0.165	X_{32}	1.84591
c_{r0}	1.78336	X_{41}	0.14833
c_{r1}	-1.2969	X_{42}	-3.46693
c_{r2}	2.78945	X_{51}	0.11048
e_{r0}	0.63189	X_{52}	0.57743
e_{r1}	-0.8166	X_{61}	0.02581
e_{r2}	3.25246	X_{62}	-0.027
k_0	1.2865	X_{71}	-0.7737
k_1	2.8225	X_{72}	-1.45342

La Tabla I presenta 24 coeficientes para la ecuación cuártica propuesta por Shah y col. en 1994 (SBC-94) para compuestos puros no-polares, los parámetros de a, c y e dependen del factor acéntrico y la temperatura reducida, y las funciones X_1 hasta X_7 dependen del factor acéntrico y de ciertas constantes como se observa en las ecuaciones (8) – (19), para obtener los valores de dichas constantes Shah y col. hicieron una regresión no lineal donde se consideraron para la regresión datos de 16 compuestos no polares; las diferentes propiedades consideradas en la regresión mencionada fueron datos experimentales de: segundos coeficientes viriales, entalpías residuales a altas temperaturas y densidades.

1.3.3 Ecuación de Lin-Bienkowski-Shah-Cochran (LBSC-96)^[5] es:

$$P = \frac{RT}{(V - k_0\beta)} + \frac{\beta k_1 RT}{(V - k_0\beta)^2} - \frac{aV + k_0\beta c}{V(V + e)(V - k_0\beta)} \quad (20)$$

Donde:

$$\beta = \beta_c \left\{ \exp \left[-0.03125 \ln(T_r) - 0.0054 [\ln(T_r)]^2 \right] \right\}^3 \quad (21)$$

$$\beta_c = b_r V_c \quad (22)$$

$$a = a_c \alpha(T_r) \quad (23)$$

$$c = c_c \xi(T_r) \quad (24)$$

Donde para $T_r \leq 1$ entonces:

$$\alpha(T_r) = \left[1 + X_2(1 - \sqrt{T_r}) + X_3(1 - \sqrt{T_r})^2 + X_4(1 - \sqrt{T_r})^3 \right]^2 \quad (25)$$

Donde para $T_r > 1$ entonces:

$$\alpha(T_r) = \left[1 + X_2(1 - \sqrt{T_r}) + X_5(1 - \sqrt{T_r})^2 + X_6(1 - \sqrt{T_r})^3 \right]^2 \quad (26)$$

$$\xi(T_r) = \left[1 + X_7(1 - \sqrt{T_r}) \right]^2 \quad (27)$$

$$a_c = \frac{a_r RT_c}{\rho_c} \quad (28)$$

$$c_c = \frac{c_r RT_c}{\rho_c} \quad (29)$$

$$e = \frac{e_r}{\rho_c} \quad (30)$$

$$X_i = X_{i1} + X_{i2}\omega + X_{i3}\mu^* + X_{i4}\mu^{*2} \quad \text{para } i = 2,3,4,5,6, y7 \quad (31)$$

$$\mu^* = \frac{0.3976\mu}{(RT_c V_c)^{0.5}} \quad (32)$$

$$a_r = a_{r0}(1 + a_{r1}\omega + a_{r2}\omega^2 + a_{r3}\mu^* + a_{r4}\mu^{*2}) \quad (33)$$

$$c_r = c_{r0}(1 + c_{r1}\omega + c_{r2}\omega^2 + c_{r3}\mu^* + c_{r4}\mu^{*2}) \quad (34)$$

$$e_r = e_{r0}(1 + e_{r1}\omega + e_{r2}\omega^2) \quad (35)$$

TABLA II

**COEFICIENTES DE AJUSTE DE LA ECUACIÓN DE
LIN-BIENKOWSKI-COCHRAN^[5]**

a_{r0}	1.84713	X_{21}	0.14988
a_{r1}	-0.05218	X_{22}	0.97848
a_{r2}	1.06446	X_{31}	-0.32379
b_r	0.165	X_{32}	1.84591
c_{r0}	1.78336	X_{41}	0.14833
c_{r1}	-1.2969	X_{42}	-3.46693
c_{r2}	2.78945	X_{51}	0.11048
e_{r0}	0.63189	X_{52}	0.57743
e_{r1}	-0.8166	X_{61}	0.02581
e_{r2}	3.25246	X_{62}	-0.027
k_0	1.2865	X_{71}	-0.7737
k_1	2.8225	X_{72}	-1.45342
a_{r3}	-0.0273	X_{43}	-0.3917
a_{r4}	0.02048	X_{44}	-0.01597
c_{r3}	0.07	X_{53}	0.41218
c_{r4}	0.01188	X_{54}	-0.10676
X_{23}	-0.0139	X_{63}	0.38327
X_{24}	0.02928	X_{64}	-0.09008
X_{33}	0.369338	X_{73}	-0.04725
X_{34}	-0.25483	X_{74}	-0.09669

Para extender la ecuación de Shah y col. 1994 a compuestos de naturaleza polar era necesario mantener la precisión de la ecuación de Shah para compuestos no polares, por lo tanto Lin y col. en 1996 (LBSC-96) agregaron 16 coeficientes a los 24 que tenía la ecuación de Shah y col. 1994 , esto se presenta en la Tabla II , también se modificaron las ecuaciones (16) – (18) por (31), (33) y (34) además de considerar la ecuación (33) para el momento dipolar reducido. Los 16 coeficientes que se agregaron a esta ecuación fueron obtenidos por medio de una técnica de regresión no lineal y los datos experimentales de 30 compuestos polares de las propiedades termodinámicas: presión de vapor, densidad de vapor saturado, densidad de líquido saturado, entalpía residual, entalpía de vaporización y segundos coeficientes viriales.

1.3.4 Ecuación de Li-Shah-Cochran (LSC-01) ^[4] es:

$$P = \frac{RT}{(V_m - k_0\beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V_m - k_0\beta_m)^2} - \frac{a_m V_m + k_0 \beta_m c_m}{V_m (V_m + e_m)(V_m - k_0\beta_m)} \quad (36)$$

Regla de mezclado para la esfera dura propuesta por Boublik y Mansoori

$$\beta_m = \sum_{i=1}^N y_i \beta_i \quad (37)$$

Donde:

$$\beta_i = \beta_{ci} \left\{ \exp \left[-0.03125 \ln(T_{ri}) - 0.0054 [\ln(T_{ri})]^2 \right] \right\}^3 \quad (38)$$

$$\beta_{ci} = b_r V_{ci} \quad (39)$$

Regla de mezclado de Van Der Waals:

$$a_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j (a_{ci} \alpha_i a_{cj} \alpha_j)^{1/2} \quad (40)$$

$$c_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j (c_{ci} \xi_i c_{cj} \xi_j)^{1/2} \quad (41)$$

$$e_m = \sum_{i=1}^N y_i e_i \quad (42)$$

$$\mu_i^* = \frac{0.3976 \mu_i}{(RT_{ci} V_{ci})^{0.5}} \quad (43)$$

$$X_{ni} = X_{n1i} + X_{n2i} \omega_i + X_{n3i} \mu_i^* + X_{n4i} \mu_i^{*2} \quad \text{para } n = 2,3,4,5,6 \text{ y } 7 \quad (44)$$

Donde para $T_{ri} \leq 1$ entonces:

$$\alpha_i = \left[1 + X_{2i} (1 - \sqrt{T_{ri}}) + X_{3i} (1 - \sqrt{T_{ri}})^2 + X_{4i} (1 - \sqrt{T_{ri}})^3 \right]^2 \quad (45)$$

Donde para $T_{ri} > 1$ entonces:

$$\alpha_i = \left[1 + X_{2i} (1 - \sqrt{T_{ri}}) + X_{5i} (1 - \sqrt{T_{ri}})^2 + X_{6i} (1 - \sqrt{T_{ri}})^3 \right]^2 \quad (46)$$

$$\xi_i = [1 + X_{7i}(1 - \sqrt{T_{ri}})]^2 \quad (47)$$

$$a_{ri} = a_{r0}(1 + a_{r1}\omega_i + a_{r2}\omega_i^2 + a_{r3}\mu_i^* + a_{r4}\mu_i^{*2}) \quad (48)$$

$$c_{ri} = c_{r0}(1 + c_{r1}\omega_i + c_{r2}\omega_i^2 + c_{r3}\mu_i^* + c_{r4}\mu_i^{*2}) \quad (49)$$

$$e_{ri} = e_{r0}(1 + e_{r1}\omega_i + e_{r2}\omega_i^2) \quad (50)$$

$$a_{ci} = \frac{a_{ri}RT_{ci}}{\rho_{Ci}} \quad (51)$$

$$c_{ci} = \frac{c_{ri}RT_{ci}}{\rho_{Ci}} \quad (52)$$

$$e_i = \frac{e_{ri}}{\rho_{Ci}} \quad (53)$$

TABLA III

**COEFICIENTES DE AJUSTE DE LA ECUACIÓN DE
LI-SHAH-COCHRAN^[4]**

a_{r0}	1.825716	X_{21}	0.1436
a_{r1}	0	X_{22}	0.968548
a_{r2}	0.896586	X_{31}	-0.237932
b_r	0.165	X_{32}	1.022857
c_{r0}	1.854436	X_{41}	0.065036
c_{r1}	0.596539	X_{42}	-2.067206
c_{r2}	-1.946911	X_{51}	0.114614
e_{r0}	0.62248	X_{52}	0.678414
e_{r1}	0	X_{61}	0.021573
e_{r2}	1.316413	X_{62}	0.029885
k_0	1.2865	X_{71}	-0.853536
k_1	2.8225	X_{72}	-0.231363
a_{r3}	0	X_{43}	0
a_{r4}	0	X_{44}	0
c_{r3}	0	X_{53}	0
c_{r4}	0.02223	X_{54}	0.131914
X_{23}	0	X_{63}	0
X_{24}	0	X_{64}	0.156664
X_{33}	0	X_{73}	0
X_{34}	0	X_{74}	0

La Tabla III presenta la simplificación de coeficientes que propuso Li y col. en 2001 (LSC-01), esta simplificación consiste en igualar a cero 15 de los 40 coeficientes presentados por Lin y col. en 1996 (LBSC-96); 8 de los 15 coeficientes igualados a cero corresponden a los términos lineales que son función del momento dipolar de la ecuación (44) desde X_1 hasta X_6 , los otros 7 coeficientes igualados a cero son coeficientes relacionados con los parámetros a, c y e , por medio de las ecuaciones (47) – (50) y también son términos lineales que son función del momento dipolar, esta simplificación basada según Li y col. en que estos términos lineales no aparecen en ninguna expresión de mecánica estadística para propiedades de equilibrio. Los 25 coeficientes remanentes fueron nuevamente estimados por medio de regresión no lineal; además elaboraron el estudio de sensibilidad para analizar el efecto de igualar a cero los 15 coeficientes llegando a la conclusión que no existía ningún efecto al eliminarlos.

1.4 Objetivo del trabajo

El objetivo principal del presente trabajo es la estimación de propiedades termodinámicas de compuestos puros y mezclas reales con el uso de la ecuación cuártica de estado propuesta por Shah, mediante la elaboración de programa computacional en lenguaje fortran 90 y la comparación de las predicciones con datos experimentales o reportados en la bibliografía.

Se propone probar la ecuación cuártica de Shah y sus actualizaciones, además de comparar las estimaciones obtenidas con modelos cúbicos tales como: SRK-72 y PR-76.

Los objetivos específicos del presente trabajo son:

- a) Establecer intervalos de predicción en los cuales la ecuación cuártica de Shah y col. para compuestos puros no polares (SBC-94) presentan mejora

respecto a las ecuaciones cúbicas (PR-76 y SRK-72) , las propiedades termodinámicas a estimar son: el volumen, entalpía y entropía específicas.

- b) Usar la modificación de Lin y col. (LSBC-96) a la ecuación de Shah y col. (SBC-94) para establecer los intervalos en los cuales se obtiene mayor exactitud en la predicción de las propiedades: volumen, entalpía y entropía específicas, respecto de las ecuaciones cúbicas (PR-76 y SRK-72) en compuestos polares.
- c) Aplicar la simplificación de Li y col. (LSC-01) para estimar: volumen, entalpía y entropía específica para compuestos polares y no polares.
- d) Usar la ecuación de Li y col. (LSC-01) para estimar: volumen, entalpía y entropía específicas para mezclas.

Las regiones donde se estimaron las propiedades termodinámicas con la ecuación cuártica fueron: vapor sobrecalentado, vapor saturado y líquido saturado para compuestos puros y mezclas.

CAPÍTULO 2

PROCEDIMIENTO DE CÁLCULO

2.1 Cálculo del volumen específico

El procedimiento inicia con el cálculo del volumen específico del compuesto puro o mezcla de interés usando la ecuación cuártica de estado propuesta por Shah en sus diferentes actualizaciones (5),(20) y (36).

El volumen específico se obtiene a partir de la solución del polinomio de cuarto orden que se presenta a continuación para compuestos puros y mezclas^[5,11]:

2.1.1 Compuestos puros^[5,11]:

$$V^4 + q_3V^3 + q_2V^2 + q_1V + q_0 = 0 \quad (54)$$

Donde:

$$q_3 = \left(-2k_0\beta + e - \frac{RT}{P} \right) \quad (55)$$

$$q_2 = \left\{ \frac{RT}{P} [\beta(k_0 - k_1) - e] + k_0\beta(k_0\beta - 2e) \right\} + \frac{a}{P} \quad (56)$$

$$q_1 = e \left[k_0^2\beta^2 + \frac{RT}{P} \beta(k_0 - k_1) \right] + \left[\frac{k_0\beta(c - a)}{P} \right] \quad (57)$$

$$q_0 = -\frac{ck_0\beta^2}{P} \quad (58)$$

2.1.2 Mezclas:

$$V_m^4 + q_3V_m^3 + q_2V_m^2 + q_1V_m + q_0 = 0 \quad (59)$$

14

Donde:

$$q_3 = \left(-2k_0\beta_m + e_m - \frac{RT}{P} \right) \quad (60)$$

$$q_2 = \left\{ \frac{RT}{P} [\beta_m(k_0 - k_1) - e_m] + k_0\beta_m(k_0\beta_m - 2e_m) \right\} + \frac{a_m}{P} \quad (61)$$

$$q_1 = e_m \left[k_0^2\beta_m^2 + \frac{RT}{P}\beta_m(k_0 - k_1) \right] + \left[\frac{k_0\beta_m(c_m - a_m)}{P} \right] \quad (62)$$

$$q_0 = -\frac{c_mk_0\beta_m^2}{P} \quad (63)$$

La naturaleza matemática de las raíces del polinomio nos indica el estado de agregación en que se encuentra el compuesto puro o mezcla a las condiciones finales o de interés. En el Apéndice A se desarrolla el método analítico para calcular las raíces del polinomio.

2.2 Cálculo de propiedades termodinámicas de gases

La segunda parte del procedimiento es el cálculo de la entalpía específica y la entropía específica del compuesto puro o mezcla de interés usando la ecuación cuártica de estado propuesta por Shah en sus diferentes actualizaciones (5),(20) y (36).

El más satisfactorio procedimiento de cálculo para propiedades termodinámicas de gases y vapores requiere datos de Presión, Volumen específico, Temperatura además de las capacidades caloríficas de gases ideales^[6].

Las ecuaciones primarias se basan en el concepto del estado de un gas ideal y utilizan las funciones residuales^[6]:

$$H_g = H_g^{IG} + \Delta H' \quad (64)$$

$$S_g = S_g^{IG} + \Delta S' \quad (65)$$

La entalpía y la entropía son simples sumas de la propiedad de gas ideal (IG) y la propiedad residual.^[6]

La propiedad residual es la diferencia entre la propiedad de interés en su estado real a una temperatura y presión; y su estado de gas ideal a la misma temperatura y presión.^[13]

Para este procedimiento, se parte de condiciones iniciales que son subcríticas en el lado del vapor y se lleva a condiciones finales o de interés donde lo que se obtiene es: vapor sobrecalentado o vapor saturado^[6].

2.2.1 Ecuación para calcular entalpía específica de gases^[6]

2.2.1.1 Compuestos puros.

$$H_g = H_0^{IG} + \int_{T_0}^T C_p^{IG} dT + \Delta H' \quad (66)$$

La siguiente ecuación que representa la entalpía residual se desarrolla en el Apéndice B.

$$\begin{aligned}
\Delta H' = & - \left\{ \frac{3\beta RT(k_1 + k_0)}{(V_g - k_0\beta)} + \frac{6k_1k_0RT\beta^2}{2(V - k_0\beta)^2} \right\} F + \\
& - \frac{(-\alpha c_c - \sqrt{\alpha T_r} a_c m_1)}{(e + k_0\beta)} \ln \left[\frac{(V_g - k_0\beta)}{(V_g + e)} \right] - \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F}{(e + k_0\beta)^2} \ln(V_g + e) + \\
& - \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F}{2e(e - k_0\beta)} \ln(V_g - k_0\beta) + \\
& + \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F (e - k_0\beta)}{2e(e + k_0\beta)^2} \ln(V_g - k_0\beta) + \\
& + \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F}{(e + k_0\beta)(e - k_0\beta)} \ln(V_g - k_0\beta) + \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F}{(e + k_0\beta)(V_g - k_0\beta)} + \\
& - \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F}{ek_0^2 \beta^2} \ln(V_g) + \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F}{e(e + k_0\beta)^2} \ln(V_g + e) + \\
& - \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F}{2e^2(e - k_0\beta)} \ln(V_g - k_0\beta) + \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F (e - k_0\beta)}{k_0^2 \beta^2 e^2} \ln(V_g - k_0\beta) + \\
& - \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F (e - k_0\beta)}{2e^2(e + k_0\beta)^2} \ln(V_g - k_0\beta) + \\
& + \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F}{(e - k_0\beta)(e + k_0\beta)k_0\beta} \ln(V_g - k_0\beta) + \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F}{(V_g - k_0\beta)(e + k_0\beta)k_0\beta} + \\
& + \frac{\left\{ -k_0\beta c_c \xi - k_0 c_c X_7 \beta \sqrt{\xi T_r} + 3k_0 c_c \beta \xi F \right\}}{k_0 \beta e} \ln(V_g) + \\
& - \frac{\left\{ -k_0\beta c_c \xi - k_0 c_c X_7 \beta \sqrt{\xi T_r} + 3k_0 c_c \beta \xi F \right\}}{e(e + k_0\beta)} \ln(V_g + e) + \\
& - \frac{\left\{ -k_0\beta c_c \xi - k_0 c_c X_7 \beta \sqrt{\xi T_r} + 3k_0 c_c \beta \xi F \right\}}{k_0 \beta (e + k_0\beta)} \ln(V_g - k_0\beta) - RT + PV_g \tag{67}
\end{aligned}$$

$$F = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_r)] \tag{68}$$

$$\text{Cuando } T_r \leq 1 \quad m_1 = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_r}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_r})^2] \quad (69-a)$$

$$\text{Cuando } T_r > 1 \quad m_1 = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_r}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_r})^2] \quad (69-b)$$

2.2.1.2 Mezclas

$$H_{mg} = H_{m0}^{IG} + \int_{T_0}^T \sum_{i=1}^{i=N} y_i C_{p_i}^{IG} dT + \Delta H_m' \quad (70)$$

La siguiente ecuación que representa la entalpía residual se desarrolla en el Apéndice B:

$$\begin{aligned} \Delta H_m' = & -\frac{3RT(k_1 + k_0) \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{6k_1 k_0 RT \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{2(V_{mg} - k_0 \beta_m)^2} + \\ & - \frac{\left\{ -a_m - \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left[\sqrt{\frac{\alpha_i T_{rj}}{4}} m_{1j} + \sqrt{\frac{\alpha_j T_{ri}}{4}} m_{1i} \right] \right\}}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{(V_{mg} + e_m)} \right] + \\ & - \frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} \ln(V_{mg} + e_m) - \frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{2e_m (e_m - k_0 \beta_m)} \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) + \\ & + \frac{3a_m (e_m - k_0 \beta_m) k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{2e_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) + \frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m)(e_m - k_0 \beta_m)} \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) + \\ & + \frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m)(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{k_0^2 (e_m)(\beta_m)^2} \ln(V_{mg}) + \\ & + \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} \ln(V_{mg} + e_m) - \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{2(e_m)^2 (e_m - k_0 \beta_m)} \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) + \\ & + \frac{3k_0^2 c_m \beta_m (e_m - k_0 \beta_m) \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{k_0^2 (\beta_m)^2 (e_m)^2} \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) - \frac{3k_0^2 c_m \beta_m (e_m - k_0 \beta_m) \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{2(e_m)^2 (e_m + k_0 \beta_m)^2} \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m - k_0 \beta_m)(e_m + k_0 \beta_m) k_0 \beta_m} \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) + \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)(e_m + k_0 \beta_m) k_0 \beta_m} \\
& + \frac{\left\{ -k_0 \beta_m c_m - k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i T_{rj}}{4}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j T_{ri}}{4}} \right] + 3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \right\}}{k_0 \beta_m e_m} \ln(V_{mg}) + \\
& - \frac{\left\{ -k_0 \beta_m c_m - k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i T_{rj}}{4}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j T_{ri}}{4}} \right] + 3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \right\}}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)} \ln(V_{mg} + e_m) + \\
& - RT + PV_{gm} \tag{71}
\end{aligned}$$

$$F_i = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \tag{72}$$

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \tag{73-a}$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \tag{73-b}$$

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \tag{74-a}$$

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \tag{74-b}$$

2.2.2 Ecuación para calcular entropía específica de gases^[6]

2.2.2.1 Compuestos puros.

$$S_g = S_0^{IG} + \int_{T_0}^T C_p^{IG} \frac{dT}{T} - R \ln \frac{P}{P_0} + \Delta S' \tag{75}$$

La siguiente ecuación que representa la entalpía residual se desarrolla en el Apéndice C:

$$\begin{aligned}
\Delta S' = & -R \ln(V_g) + R \ln(V_g - k_0 \beta) - \frac{[k_1 R \beta + 3R \beta (k_1 + k_0) F]}{(V_g - k_0 \beta)} - \frac{6k_1 k_0 R \beta^2 F}{2(V_g - k_0 \beta)^2} + \\
& + \frac{a_c \sqrt{\alpha}}{\sqrt{TT_c}} \frac{[X_2 + 2X_{3-5}(1 - \sqrt{T_r}) + 3X_{4-6}(1 - \sqrt{T_r})^2]}{(e + k_0 \beta)} \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta)}{(V_g + e)} \right] +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{3a_c k_0 \beta \alpha F \ln(V_g + e)}{T(e + k_0 \beta)^2} - \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F \ln(V_g - k_0 \beta)}{2Te(e - k_0 \beta)} + \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F (e - k_0 \beta) \ln(V_g - k_0 \beta)}{2Te(e - k_0 \beta)^2} + \\
& + \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F \ln(V_g - k_0 \beta)}{T(k_0 \beta + e)(e - k_0 \beta)} + \frac{3a_c k_0 \beta \alpha F}{T(k_0 \beta + e)(V_g - k_0 \beta)} + \\
& - \left\{ \frac{-k_0 c_c X_7 \beta \xi^{1/2}}{\sqrt{TT_c}} + \frac{3k_0 c_c \beta \xi F}{T} \right\} \left(-\frac{\ln(V_g)}{k_0 \beta e} + \frac{\ln(V_g + e)}{e(e + k_0 \beta)} + \frac{\ln(V_g - k_0 \beta)}{k_0 \beta (k_0 \beta + e)} \right) + \\
& - \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F}{T} \left\{ \frac{\ln(V_g)}{ek_0^2 \beta^2} - \frac{\ln(V_g + e)}{e(e + k_0 \beta)^2} + \frac{\ln(V_g - k_0 \beta)}{2e^2(e - k_0 \beta)} - \frac{(e - k_0 \beta) \ln(V_g - k_0 \beta)}{k_0^2 \beta^2 e^2} \right\} + \\
& - \frac{3k_0^2 c_c \beta^2 \xi F}{T} \left\{ \frac{(e - k_0 \beta) \ln(V_g - k_0 \beta)}{2e^2(e + k_0 \beta)^2} - \frac{\ln(V_g - k_0 \beta)}{(e - k_0 \beta)(e + k_0 \beta)k_0 \beta} - \frac{1}{(V_g - k_0 \beta)(e + k_0 \beta)k_0 \beta} \right\}
\end{aligned} \tag{76}$$

$$F = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_r)] \tag{68}$$

$$\text{Cuando } T_r \leq 1 \quad m_1 = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_r}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_r})^2] \tag{69-a}$$

$$\text{Cuando } T_r > 1 \quad m_1 = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_r}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_r})^2] \tag{69-b}$$

2.2.2.2 Mezclas

$$S_{mg} = S_{m0}^{IG} + \int_{T_0}^T \sum_{i=1}^{i=N} y_i C_{p_i}^{IG} \frac{dT}{T} - R \ln \frac{P}{P_0} + \Delta S_m' + S_{mix} \tag{77}$$

La siguiente ecuación que representa la entalpía residual se desarrolla en el Apéndice C:

$$\begin{aligned}
\Delta S_m' &= -R \ln(V_{mg}) + R \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m) + \\
& - \frac{\left[k_1 R \beta_m + 3R(k_1 + k_0) \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_y F_i \right]}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{6k_1 k_0 R \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{2(V_{mg} - k_0 \beta_m)^2} + \\
& + \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2}}{(e_m + k_0 \beta)} \left\{ m_{1i} \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} + m_{1i} \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \right\} \ln \left[\frac{(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{(V_g + e_m)} \right] +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{3a_m k_0 \left(\sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \right) \ln(V_{mg} + e_m)}{T(e_m + k_0 \beta_m)^2} - \frac{3a_m k_0 \left(\sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \right) \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{2Te_m(e_m - k_0 \beta_m)} + \\
& + \frac{3a_m k_0 \left(\sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \right) (e_m - k_0 \beta_m) \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{2Te_m(e_m - k_0 \beta_m)^2} + \frac{3a_m k_0 \left(\sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \right) (e_m - k_0 \beta_m) \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{T(k_0 \beta_m + e_m)(e_m - k_0 \beta_m)} \\
& + \frac{3a_m k_0 \left(\sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \right) (e_m - k_0 \beta_m)}{T(k_0 \beta_m + e_m)(V_g - k_0 \beta_m)} + \\
& - k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right] \left(\frac{\ln(V_{mg})}{k_0 \beta_m e_m} \right) \\
& + \frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T} \left(\frac{\ln(V_{mg})}{k_0 \beta_m e_m} \right) - \frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T} \frac{\ln(V_{mg} + e_m)}{e_m(e_m + k_0 \beta_m)} + \\
& + k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right] \frac{\ln(V_{mg} + e_m)}{e_m(e_m + k_0 \beta_m)} + \\
& - \frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{Tk_0 \beta_m (k_0 \beta_m + e_m)} + \\
& + k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right] \frac{\ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{k_0 \beta_m (k_0 \beta_m + e_m)} + \\
& - \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \left\{ \frac{\ln(V_{mg})}{e_m k_0^2 \beta_m^2} - \frac{\ln(V_{mg} + e_m)}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} \right\}}{T} + \\
& - \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \left\{ \frac{\ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{2e_m^2 (e_m - k_0 \beta_m)} - \frac{(e_m - k_0 \beta_m) \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{k_0^2 \beta_m^2 e_m^2} \right\}}{T} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T} \left\{ \frac{(e_m - k_0 \beta_m) \ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{2e_m^2 (e_m + k_0 \beta_m)^2} - \frac{\ln(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{(e_m - k_0 \beta_m)(e_m + k_0 \beta_m)k_0 \beta_m} \right\} + \\
& + \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)(e_m + k_0 \beta_m)k_0 \beta_m T} \quad (78)
\end{aligned}$$

$$F_i = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (72)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

2.3 Cálculo de propiedades termodinámicas de líquidos

La tercer y última parte del procedimiento es necesaria calcular solamente cuando la fase en que se encuentra el compuesto puro o mezcla de interés es la fase líquida.

La extensión para la fase líquida se hace despejando algebraicamente la entalpía del fluido (H_l) de la ecuación de Clapeyron ^[1] presentada a continuación:

$$H_g - H_l = TV_{g-l} \left(\frac{dP^{sat}}{dT} \right) \quad (79)$$

Donde:

$$V_{g-l} = V_g - V_l \quad (80)$$

También se calculó la entalpía del fluido (H_l) a partir de la entalpía de vaporización o de cambio de fase (ΔH_{vap}) con algunas ecuaciones empíricas y despejando la entalpía del fluido de la siguiente ecuación:

$$H_g - H_l = \Delta H_{vap} \quad (81)$$

Utilizando la siguiente ecuación se calculó la entropía de vaporización^[1,6,7] :

$$\Delta S_{vap} = \frac{\Delta H_{vap}}{T} \quad (82)$$

También se obtuvo la entropía del fluido (S_l) a partir de la entropía de vaporización o de cambio de fase (ΔS_{vap}) calculada con (69); despejando la entropía del fluido de la siguiente ecuación:

$$\Delta S_{vap} = S_g - S_l \quad (83)$$

2.3.1 Ecuaciones para calcular (dP^{sat} / dT)

Para desarrollar esta ecuación es necesario obtener primero la ecuación que representa la presión de saturación para compuestos puros y mezclas la cual se muestra en el Apéndice D, aplicando la Regla de Maxwell de áreas iguales y la ecuación de Shah y col. (1994).

2.3.1.1 Compuestos puros

La siguiente ecuación que representa la derivada de la presión de vapor respecto a la temperatura se desarrolla en los Apéndices D y E:

$$\begin{aligned}
\frac{dP^{sat}}{dT} = & \frac{\{-3Rk_0\beta F - k_1R\beta\} \left[\frac{1}{(V_g - k_0\beta)} - \frac{1}{(V_l - k_0\beta)} \right]}{(V_g - V_l)} + \\
& + \frac{\left\{ -3k_1R\beta F + \frac{3k_0\alpha a_c\beta F}{T(e + k_0\beta)} \right\} \left[\frac{1}{(V_g - k_0\beta)} - \frac{1}{(V_l - k_0\beta)} \right]}{(V_g - V_l)} + \\
& + \frac{\frac{3k_0c_c\xi\beta F}{T(k_0\beta + e)} \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0\beta_m)} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0\beta_m)} \right]}{(V_g - V_l)} + \\
& + \frac{\left[R + \frac{3k_0c_c\xi\beta F}{T(k_0\beta + e)^2} \right] \ln \left[\frac{(V_g - k_0\beta_m)}{(V_l - k_0\beta_m)} \right]}{(V_g - V_l)} + \\
& + \frac{\frac{X_7c_c\sqrt{\frac{\xi}{TT_c}}}{(k_0\beta + e)} \ln \left[\frac{(V_{mg} - k_0\beta_m)}{(V_{mg} - k_0\beta_m)} \right]}{(V_g - V_l)} + \\
& - \frac{3k_0k_1R\beta^2 F \left[\frac{1}{(V_g - k_0\beta)^2} - \frac{1}{(V_l - k_0\beta)^2} \right]}{(V_g - V_l)} + \\
& - \frac{\frac{3a_c\alpha k_0\beta F}{T(e + k_0\beta)^2} \ln \left[\frac{(V_l - k_0\beta)(V_g + e)}{(V_g - k_0\beta)(V_l + e)} \right]}{(V_g - V_l)} + \\
& - \frac{\frac{a_cm_1\sqrt{\frac{\alpha}{TT_c}}}{(e + k_0\beta)} \ln \left[\frac{(V_l - k_0\beta)(V_g + e)}{(V_g - k_0\beta)(V_l + e)} \right]}{(V_g - V_l)} - \frac{\frac{c_cX_7\sqrt{\frac{\xi}{TT_c}}}{e} \ln \left[\frac{V_{mg}}{V_{ml}} \right]}{(V_g - V_l)} +
\end{aligned}$$

$$+ \frac{\left[\frac{k_0 \beta X_{7j} \sqrt{\frac{\xi}{TT_c}}}{e(e+k_0\beta)} - \frac{3k_0 c_c \xi \beta F}{Te(e+k_0\beta)} + \frac{3k_0^2 c_c \xi \beta^2 F}{Te(e+k_0\beta)^2} \right] \ln \left[\frac{(V_g + e)}{(V_l + e)} \right]}{(V_g - V_l)} \quad (84)$$

$$F = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_r)] \quad (68)$$

$$\text{Cuando } T_r \leq 1 \quad m_1 = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_r}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_r})^2] \quad (69-a)$$

$$\text{Cuando } T_r > 1 \quad m_1 = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_r}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_r})^2] \quad (69-b)$$

2.3.1.2 Mezclas

La siguiente ecuación que representa la derivada de la presión de vapor respecto a la temperatura se desarrolla en los Apéndices D y E:

$$\begin{aligned} \frac{dP_m^{sat}}{dT} = & \frac{\left\{ -3Rk_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i - k_1 R \beta_m \right\} \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \\ & + \frac{\left\{ -3k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i + \frac{3k_0 a_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m) T} \right\} \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \\ & + \frac{\frac{3c_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(k_0 \beta_m + e_m)} \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \\ & + \frac{\left[R + \frac{3c_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(k_0 \beta_m + e_m)^2} \right] \ln \left[\frac{(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right]}{(k_0 \beta_m + e_m)} \ln \left[\frac{(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} \right] + \\
& \frac{3k_0 k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)^2} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)^2} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} \\
& - \frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(e_m + k_0 \beta_m)^2} \ln \left[\frac{(V_{ml} - k_0 \beta_m)(V_{mg} + e_m)}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)(V_{ml} + e_m)} \right] + \\
& \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left[m_{1j} \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} + m_{1i} \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \right]}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_{ml} - k_0 \beta_m)(V_{mg} + e_m)}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)(V_{ml} + e_m)} \right] + \\
& \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{cj} c_{ci})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right]}{e_m} \ln \left[\frac{V_{mg}}{V_{ml}} \right] + \\
& \frac{k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right]}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_{mg} + e_m)}{(V_{ml} + e_m)} \right] + \\
& \frac{\left[-\frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{Te_m (e_m + k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{Te_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} \right] \ln \left[\frac{(V_{mg} + e_m)}{(V_{ml} + e_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})}
\end{aligned} \tag{85}$$

$$F_i = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (72)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

2.3.2 Ecuaciones para calcular ΔH_{vap}

2.3.2.1 Ecuación de Antoine^[7]

$$\psi_i = \frac{2.303B_i}{T_{ci}} \left(\frac{T_{ri}}{T_{ri} + (C_i - 273.15)/T_{ci}} \right)^2 \quad (86)$$

$$\Delta H^{vap}_i = RT_{ci} \psi_i V_{g-l} \quad (87)$$

Donde:

$$V_{g-l} = V_g - V_l \quad (80)$$

$$\Delta H_m^{vap} = \sum_{i=1}^{i=N} x_i \Delta H^{vap}_i \quad (88)$$

2.3.2.2 Ecuación de Antoine Modificada^[7]

$$\psi_i = \frac{2.303B_i}{T_{ci}} \left(\frac{T_{ri}}{T_{ri} + (C_i - 273.15)/T_{ci}} \right)^2 + T_{ri}^2 (n_i \chi_i^{n_i-1} + 18.421E_i \chi_i^7 + 27.631f_i \chi_i^{11}) \quad (89)$$

$$\Delta H^{vap}_i = RT_{ci} \psi_i V_{g-l} \quad (87)$$

Donde:

$$V_{g-l} = V_g - V_l \quad (80)$$

$$\Delta H_m^{vap} = \sum_{i=1}^{i=N} x_i \Delta H_i^{vap} \quad (88)$$

2.3.2.3 Ecuación de Wagner^[7]

$$\psi_i = -a_i + b_i \tau_i^{0.5} (0.5\tau_i - 1.5) + c w_i \tau_i^{1.5} (2\tau_i - 3) + d_i \tau_i^4 (5\tau_i - 6) \quad (90)$$

Para agua: $\psi_i = -a_i + b_i \tau_i^{0.5} (0.5\tau_i - 1.5) + c w_i \tau_i^2 (2\tau_i - 3) + d_i \tau_i^5 (5\tau_i - 6)$ (90-a)

$$\tau_i = (1 - T_{ri}) \quad (91)$$

$$\Delta H^{vap}_i = RT_{ci} \psi_i V_{g-l} \quad (87)$$

Donde:

$$V_{g-l} = V_g - V_l \quad (80)$$

$$\Delta H_m^{vap} = \sum_{i=1}^{i=N} x_i \Delta H_i^{vap} \quad (88)$$

2.3.2.4 Ecuación de Gómez-Nieto-Thodos^[10]

$$\psi_i = 7\gamma_i T_{ri}^6 - Y_i m_i (1/T_{ri}^{m_i-1}) \quad (92)$$

$$A_i = \frac{\frac{1}{T b_{ri}} - 1}{1 - T b_{ri}^7} \quad (93)$$

$$B_i = \frac{\frac{1}{Tb_{ri}} - 1}{1 - Tb_{ri}^7} \quad (94)$$

$$s_i = \frac{Tb_i \ln(P_{ci} / 1.01325)}{T_{ci} - Tb_i} \quad (P_{ci} = \text{bar}) \quad (95)$$

$$m_i = 0.78425 \exp(0.089315s) - \frac{8.5217}{\exp(0.78426s)} \quad (96)$$

$$\gamma_i = a_i s_i + b_i \beta_i \quad (97)$$

$$Y_i = -4.267 - \frac{221.79}{s_i^{2.5} \exp(0.0384s_i^{2.5})} + \frac{3.8126}{\exp(2272.44/s_i^3)} + \Lambda_i \quad (98)$$

Donde $\Lambda_i = 0$ excepto para el He ($\Lambda_i = 0.4185$), H ($\Lambda_i = 0.19904$) y Ne ($\Lambda_i = 0.02319$). Las tres ecuaciones anteriores para “ m_i ”, “ γ_i ” y “ β_i ” son válidas para compuestos no-polares. Para compuestos polares que no forman puente de hidrógeno, incluyendo al amoníaco y al ácido acético, “ m_i ” y “ β_i ” se calculan de las siguientes relaciones:

$$m_i = 0.466T_{ci}^{0.166} \quad (99)$$

$$\gamma_i = 0.08594 \exp(7.462 * 10^4 T_{ci}) \quad (100)$$

Para sustancias que forman puente de hidrógeno (como el agua y los alcoholes):

$$m_i = 0.0052M_i^{0.29}T_{ci}^{0.72} \quad (101)$$

$$\gamma_i = \frac{2.464}{M_i} \exp(9.8 * 10^6 * M_i T_{ci}) \quad (102)$$

Donde M es el peso molecular del monómero. Para estas dos categorías de sustancias, β_i se obtiene de la ecuación que define a γ_i , es decir:

$$Y_i = \frac{\gamma_i - A_i S_i}{B_i} \quad (103)$$

Finalmente:

$$\Delta H^{vap}_i = RT_{ci} \psi_i V_{g-l} \quad (87)$$

Donde:

$$V_{g-l} = V_g - V_l \quad (80)$$

$$\Delta H_m^{vap} = \sum_{i=1}^{i=N} x_i \Delta H^{vap}_i \quad (88)$$

CAPÍTULO 3

PREDICCIONES Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS

Las Tablas IV, V y VI muestran los datos que se emplearon en los resultados obtenidos y que se presentan en este capítulo. La Tabla VII presenta las condiciones de referencia al realizar las estimaciones, así como las capacidades caloríficas del aire líquido.

TABLA IV

PROPIEDADES DE LOS COMPUESTOS PUROS^[5,7]

Compuesto	PM	Tc (K)	Tb (K)	Vc (dm ³ /gmol)	Pc (bar)	ω	Dipolo (Debye)
<i>O</i> ₂	31.9994	154.581	90.200	0.0734	50.430	0.021	0
<i>Ar</i>	39.9480	150.700	87.300	0.0749	48.649	0.001	0
<i>C</i> ₂ <i>H</i> ₆	30.0700	305.880	184.300	0.1455	50.102	0.099	0
<i>CClF</i> ₃	104.4600	301.840	191.700	0.1803	38.730	0.175	0.5
<i>H</i> ₂ <i>O</i>	18.0150	647.300	373.100	0.0734	221.200	0.344	1.8
<i>CHF</i> ₃	70.0140	298.970	184.300	0.1330	48.360	0.267	1.649
<i>N</i> ₂	28.014	126.200	77.400	0.0901	34.000	0.037	0
<i>Aire</i>	28.960	132.500	78.800		37.700		0

TABLA V
CAPACIDADES CALORÍFICAS PARA GASES A PRESIÓN CONSTANTE DE
COMPUESTOS PUROS [7]

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + DT^4 [=] \text{Joule/gmol K}$$

Componente	Rango (K)	A	Bx10 ⁻²	Cx10 ⁻⁴	Dx10 ⁻⁷	Ex10 ⁻¹¹
O ₂	50-1000	30.17982	-1.4915316	0.547061	-0.4996714	1.488206
Ar	-----	20.78500	0	0	0	0
C ₂ H ₆	50-1000	34.73589	-3.6806078	4.705724	-5.5296414	20.67692
CClF ₃	50-1000	19.69587	19.8380354	-1.3127806	-0.3042924	4.389792
H ₂ O	50-1000	36.54003	-3.4802404	1.168117	-1.3003096	5.254448
CHF ₃	50-1000	28.68330	2.8993272	2.5041768	-3.7013928	15.24788
N ₂	50-1000	29.32425	-0.2169954	0.0058198	0.1305298	-0.823086

TABLA VI
CONSTANTES DE LAS ECUACIONES DE ANTOINE Y WAGNER PARA
COMPUESTOS PUROS [7]

1.- Ecuación de Antoine

Compuesto	Rango de P _{vap} (bar)	Rango de Temp.(K)	Ecuación de Antoine			Ecuación de Antoine Modificada				
			A	B	C	T _c	t _o	n	E	F
O ₂	0.02 - 2.0	64.29 - 97.20	3.81634	319.013	266.700					
Ar	0.6 - 2.0	82.59 - 94.26	3.74141	304.227	267.320					
C ₂ H ₆	0.02 - 2.0	133.80 - 198.16	3.95405	663.720	256.681					
CClF ₃	0.02 - 2.0	140.61 - 205.48	3.90353	654.656	249.390					
CClF ₃	2.26 - 28.39	208.15 - 288.15	3.90353	654.656	249.390	301.84	-76	2.46214	62.986	-2130.8
H ₂ O	0.01 - 16.0	273.20 - 473.20	5.11564	1687.537	230.170					
CHF ₃	0.02 - 2.0	142.79 - 203.75	4.22140	707.396	249.840					
CHF ₃	2.48 - 36.91	208.15 - 288.15	4.22140	707.396	249.840	298.97	-70	2.79148	70.243	2833.0

2.- Ecuación de Wagner

Compuesto	Rango de P _{vap} (bar)	Rango de Temp.(K)	T _c	a	b	cw _i	d	P _c
C ₂ H ₆	--- - 48.71	--- - 305.33	305.33	-6.475	1.41071	-1.1440	-1.859	48.710
H ₂ O	0.01 - 221	273.20 - 647.24	647.30	-7.772	1.457	-2.7194	-1.413	

TABLA VII
CONDICIONES DE REFERENCIA CONSIDERADAS EN EL ESTUDIO Y CAPACIDADES CALORÍFICAS PROMEDIO DEL AIRE LÍQUIDO ^[5,6,7]

Compuesto	T ref (K)	P ref (MPa)	H ref (J/gmol)	S ref (J/gmol K)
O_2	54.34	0.0001453	7755.6946	142.7237
Ar	83.8	0.06871	6617.3862	78.9652
C_2H_6	150	0.009591	16213.1400	108.0868
$CClF_3$	150	0.005238	17434.3740	116.2326
H_2O	273.16	0.0006113	45056.2144	164.945488
CHF_3	150	0.004367	18877.0000	125.847
<i>Aire</i>	63.15	0.00791	6341.2065	100.415

Capacidades caloríficas del aire en la región de líquido saturado

Presión (Mpa)	Temp. Gas (K)	Temp. Liq. (K)	$C_{p_l}^{sat}$ (kJ / kg - K)
0.1013	81.8	78.8	1.8765
0.3	92.4	90.2	1.9557
0.4	95.8	93.6	1.9890
0.6	100.9	98.9	2.0517
1	108.2	106.3	2.1942
1.6	115.9	114.2	2.4770
2	119.8	118.4	2.8370
2.5	124	122.9	4.0676
3	127.7	127	4.5850

3.1 Compuestos puros no polares

3.1.1 Oxígeno

Los resultados obtenidos de volumen, entalpía y entropía específica para el oxígeno puro en la región de saturación con modelos cuárticos y cúbicos son mostrados en las TABLAS VIII, IX, X y XI; en la Tabla VIII el volumen del vapor saturado se observa que el modelo cúbico de SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.71%; para el volumen del líquido saturado, se observa que el modelo cuártico SBC-94 tiene la menor desviación media absoluta 3.25%, lo cual indica que estos modelos son los que mejor predicen el volumen específico. Para la entalpía del vapor saturado y líquido saturado (ver Tabla IX) se observa que el modelo cuártico LSC-01 y la ecuación de Antoine para determinar la entalpía de vaporización tienen las menores desviaciones medias absolutas 1.4% y 2.32%, respectivamente, por lo tanto es el modelo que mejor predice las entalpías específicas del líquido y vapor saturado. De la misma forma la entropía de vapor saturado y líquido saturado (ver Tabla X) se observa que el modelo cuártico LSC-01 y la ecuación de Antoine tienen las menores desviaciones medias absolutas 2.87% y 4.47% respectivamente.

Para la región de vapor sobrecalentado los resultados de volumen, entalpía y entropía específica son mostrados en las TABLAS XII y XIII, en las cuales se observa lo siguiente: para el volumen específico el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta de 0.62%, para la entalpía específica el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.11% y para la entropía específica el modelo cuártico LSC-01 tiene la menor desviación media absoluta 1.35%, lo anterior nos indica que estos modelos son los que mejor predicen respecto a los otros modelos.

También se presenta en la TABLA XIV las estimaciones de presión de vapor y entalpías de vaporización obtenidas a partir de los modelos cuárticos, el modelo LSC-01 presentó las menores desviaciones medias absolutas 2.06% y 3.11% respectivamente, comparado con el modelo cuártico SBC-94.

TABLA VIII

ESTIMACIÓN DE VOLUMEN ESPECÍFICO EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL OXÍGENO USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94				Modelo cuártico LSC-01			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg (m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg (m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv
0.03009	80	0.6818000	0.0008400	0.6837000	0.28	0.0008875	5.65	0.6837700	0.29	0.0008031	-4.39
0.5434	110	0.0470100	0.0009660	0.0476400	1.34	0.0009188	-4.89	0.0477100	1.49	0.00090939	-5.86
1.7490	130	0.0146300	0.0011080	0.0150370	2.78	0.0010875	-1.85	0.0151127	3.30	0.0010688	-3.54
2.7880	140	0.0085620	0.0012300	0.0089533	4.57	0.0012375	0.61	0.0090340	5.51	0.0012000	-2.44
				AAD(%)	2.24	AAD(%)	3.25	AAD(%)	2.65	AAD(%)	4.06

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg (m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg (m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv
0.03009	80	0.6818000	0.0008400	0.6827700	0.14	0.0008385	-0.18	0.6825770	0.11	0.0007450	-11.31
0.5434	110	0.0470100	0.0009660	0.0472480	0.51	0.0009829	1.75	0.0469817	-0.06	0.0008681	-10.13
1.7490	130	0.0146300	0.0011080	0.0147585	0.88	0.0011765	6.18	0.0144800	-1.03	0.0010386	-6.26
2.7880	140	0.0085620	0.0012300	0.0086739	1.31	0.0013598	10.55	0.0084010	-1.88	0.0012040	-2.11
				AAD(%)	0.71	AAD(%)	4.67	AAD(%)	0.77	AAD(%)	7.46

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA IX

**ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL OXÍGENO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.03009	80	264.86	42.56	265.48	0.23	42.24	-0.75	265.48	0.23	42.19	-0.87
0.5434	110	284.21	94.52	286.79	0.91	95.43	0.96	286.84	0.93	95.16	0.68
1.7490	130	286.95	133.65	291.80	1.69	139.16	4.12	292.10	1.79	138.39	3.55
2.7880	140	282.02	156.91	288.78	2.40	164.72	4.98	289.43	2.63	163.48	4.19
				AAD(%)	1.31	AAD(%)	2.70	AAD(%)	1.40	AAD(%)	2.32

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.03009	80	264.86	42.56	265.37	0.19	42.43	-0.31	265.95	0.41	43.05	1.15
0.5434	110	284.21	94.52	285.75	0.54	96.27	1.85	293.35	3.22	104.48	10.54
1.7490	130	286.95	133.65	289.29	0.82	140.65	5.24	311.53	8.57	164.44	23.04
2.7880	140	282.02	156.91	284.90	1.02	167.30	6.62	320.61	13.68	204.89	30.58
				AAD(%)	0.64	AAD(%)	3.50	AAD(%)	6.47	AAD(%)	16.33

* En la estimación de entalpía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA X

**ESTIMACIÓN DE ENTROPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL OXÍGENO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	SI kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv
0.03009	80	3.4193	0.6405	3.4295	0.30	0.6390	-0.23	3.4294	0.30	0.6384	-0.33
0.5434	110	2.9104	1.1860	2.9587	1.66	1.2991	9.54	2.9584	1.65	1.2159	2.52
1.7490	130	2.6811	1.5018	2.7826	3.79	1.6084	7.10	2.7828	3.79	1.6004	6.57
2.7880	140	2.5587	1.6650	2.70420	5.69	1.8180	9.19	2.7053	5.73	1.8057	8.45
				AAD(%)	2.86	AAD(%)	6.51	AAD(%)	2.87	AAD(%)	4.47

Presión (MPa)	Temperatura (°K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Sg(kJ/kg K)	SI kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv
0.03009	80	3.4193	0.6405	3.4290	0.28	0.6423	0.28	3.4301	0.32	0.64380	0.52
0.5434	110	2.9104	1.1860	2.9569	1.60	1.2343	4.07	2.9691	2.02	1.2522	5.58
1.7490	130	2.6811	1.5018	2.7831	3.80	1.6398	9.19	2.8173	5.08	1.6858	12.25
2.7880	140	2.5587	1.6650	2.7092	5.88	1.8692	12.26	2.7634	8.00	1.9369	16.33
				AAD(%)	2.89	AAD(%)	6.45	AAD(%)	3.85	AAD(%)	8.67

* En la estimación de entropía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XI

**ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA Y ENTROPÍA ESPECÍFICA DEL LÍQUIDO SATURADO PARA EL OXÍGENO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	% Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.03009	80	264.86	42.56	265.48	0.23	66.15	55.43	265.48	0.23	49.91	17.27
0.5434	110	284.21	94.52	286.79	0.91	95.43	0.96	286.84	0.93	95.39	0.92
1.7490	130	286.95	133.65	291.80	1.69	134.54	0.67	292.10	1.79	134.29	0.48
2.7880	140	282.02	156.91	288.78	2.40	158.54	1.04	289.43	2.63	157.34	0.27
				AAD(%)	1.31	AAD(%)	14.52	AAD(%)	1.40	AAD(%)	4.74

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	SI(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg°K)	%Desv	Sg(kJ/kg°K)	%Desv	SI(kJ/kg°K)	%Desv
0.03009	80	3.4193	0.6405	3.4295	0.30	0.9379	46.43	3.4294	0.30	0.6384	-0.33
0.5434	110	2.9104	1.1860	2.9587	1.66	1.2191	2.79	2.9584	1.65	1.2181	2.71
1.7490	130	2.6811	1.5018	2.7826	3.79	1.5730	4.74	2.7828	3.79	1.5689	4.47
2.7880	140	2.5587	1.6650	2.70420	5.69	1.7739	6.54	2.7053	5.73	1.7618	5.81
				AAD(%)	2.86	AAD(%)	15.13	AAD(%)	2.87	AAD(%)	3.33

* En la estimación de entalpía y entropía del líquido se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL OXÍGENO EN LA REGIÓN VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico SBC-94					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.05	200	1.03800	374.65	4.1275	1.03764	-0.03	374.73	0.02	4.1309	0.08
0.5	200	0.10240	372.35	3.5212	0.10231	-0.09	372.42	0.02	3.5284	0.20
5	200	0.00876	346.74	2.8310	0.00796	-9.11	341.21	-1.59	2.8750	1.55
10	200	0.00361	313.19	2.5239	0.00477	32.19	335.63	7.16	2.6552	5.20
5	1000	0.05244	1176.75	4.4977	0.05262	0.34	1175.92	-0.07	4.4954	-0.05
					AAD(%)	8.35	AAD(%)	1.77	AAD(%)	1.42

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LSC-01					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.05	200	1.03800	374.65	4.1275	1.03767	-0.03	374.74	0.02	4.1309	0.08
0.5	200	0.10240	372.35	3.5212	0.10233	-0.07	372.45	0.03	3.5285	0.21
5	200	0.00876	346.74	2.8310	0.00822	-6.16	342.20	-1.31	2.8716	1.43
10	200	0.00361	313.19	2.5239	0.00518	43.60	339.75	8.48	2.6495	4.98
5	1000	0.05244	1176.75	4.4977	0.05258	0.27	1175.78	-0.08	4.4956	-0.05
					AAD(%)	10.03	AAD(%)	1.98	AAD(%)	1.35

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XIII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL OXÍGENO EN LA REGIÓN VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico SRK-72					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.05	200	1.03800	374.65	4.1275	1.03768	-0.03	374.72	0.02	4.1311	0.09
0.5	200	0.10240	372.35	3.5212	0.10234	-0.06	372.32	-0.01	3.5296	0.24
5	200	0.00876	346.74	2.8310	0.00879	0.29	345.88	-0.25	2.8943	2.24
10	200	0.00361	313.19	2.5239	0.00370	2.35	312.28	-0.29	2.6628	5.50
5	1000	0.05244	1176.75	4.4977	0.05263	0.36	1176.83	0.01	4.4996	0.04
					AAD(%)	0.62	AAD(%)	0.11	AAD(%)	1.62

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico PR-76					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.05	200	1.03800	374.65	4.1275	1.03738	-0.06	374.99	0.09	4.1314	0.09
0.5	200	0.10240	372.35	3.5212	0.10203	-0.36	374.99	0.71	3.5332	0.34
5	200	0.00876	346.74	2.8310	0.00855	-2.37	374.99	8.15	2.9349	3.67
10	200	0.00361	313.19	2.5239	0.00351	-2.83	374.99	19.73	2.7549	9.15
5	1000	0.05244	1176.75	4.4977	0.05209	-0.68	1174.29	-0.21	4.5003	0.06
					AAD(%)	1.26	AAD(%)	5.78	AAD(%)	2.66

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XIV

**ESTIMACIÓN DE PRESIÓN DE VAPOR Y ENTALPÍA DE VAPORIZACIÓN PARA EL OXÍGENO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS**

Reportado por Reynolds			Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
Presión (MPa)	Temperatura (K)	Hvap (kJ/kg)	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv
0.03009	80	222.30	0.03640	20.97	199.32	-10.34	0.03170	5.35	215.56	-3.03
0.5434	110	189.69	0.55520	2.17	191.36	0.88	0.55240	1.66	191.44	0.92
1.7490	130	153.30	1.77990	1.77	157.26	2.58	1.76310	0.81	157.80	2.94
2.7880	140	125.11	2.83390	1.65	130.24	4.10	2.79970	0.42	132.08	5.57
			AAD(%)	6.64	AAD(%)	4.47	AAD(%)	2.06	AAD(%)	3.11

* En la estimación de presión de saturación y calor de vaporización se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

3.1.2 Etano

Los resultados obtenidos de volumen, entalpía y entropía específica para el etano puro en la región de saturación con modelos cuárticos y cúbicos son mostrados en las TABLAS XV, XVI, XVII y XVIII; en la Tabla XV el volumen del vapor saturado se observa que el modelo cúbico de PR-76 tiene la menor desviación media absoluta 0.73%; para el volumen del líquido saturado se observa que el modelo cuártico SBC-94 tiene la menor desviación media absoluta 3.46% (ver Tabla XV), lo cual indica que estos modelos son los que mejor predicen el volumen específico. Analizando la entalpía del vapor saturado y líquido saturado se observa que el modelo cúbico SRK-72 y las ecuaciones de Antoine y Wagner para determinar la entalpía de vaporización tienen las menores desviaciones medias absolutas 0.75% y 1.72% (ver Tabla XVI), respectivamente, por lo tanto es el modelo que mejor predice las entalpías específicas del líquido y vapor saturado. Por otra parte la entropía de líquido saturado y vapor saturado el modelo cuártico LSC-01 y las ecuaciones de Antoine y Wagner tienen las menores desviaciones medias absolutas 2.46 % y 2.03% respectivamente. Para la región de vapor sobrecalentado los resultados de volumen, entalpía y entropía específica son mostrados en las TABLAS XIX y XX, en las cuales se observa lo siguiente: para el volumen específico el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta de 0.87%, para la entalpía específica el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.33% y para la entropía específica el modelo cuártico SBC-94 tiene la menor desviación media absoluta 0.98%, lo anterior nos indica que estos modelos son los que mejor predicen respecto a los otros modelos.

También se presenta en la TABLA XXI las estimaciones de presión de vapor y entalpías de vaporización obtenidas a partir de los modelos cuárticos, el modelo LSC-01 presentó las menores desviaciones medias absolutas 0.79% y 3.84 % respectivamente.

TABLA XV

ESTIMACIÓN DE VOLUMEN ESPECÍFICO EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL ETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94				Modelo cuártico LSC-01			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Error	VI(m3/kg)	%Desv
0.04329	170	1.0640000	0.0017790	1.0712100	0.68	0.0017958	0.94	1.0713830	0.69	0.001669	-6.18
0.22	200	0.2355000	0.0019180	0.2394113	1.66	0.0018024	-6.03	0.2395600	1.72	0.001779	-7.25
0.9730	240	0.0565500	0.0021470	0.0584935	3.44	0.0020685	-3.66	0.0585733	3.58	0.0020319	-5.36
2.8220	280	0.0175900	0.0025550	0.0187462	6.57	0.0026372	3.22	0.0188900	7.39	0.0025108	-1.73
				AAD(%)	3.09	AAD(%)	3.46	AAD(%)	3.35	AAD(%)	5.13

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI(m3/kg)	%Desv
0.04329	170	1.0640000	0.0017790	1.0695000	0.52	0.0017960	0.96	1.0690260	0.47	0.0015938	-10.41
0.22	200	0.2355000	0.0019180	0.2383600	1.21	0.0019350	0.89	0.2378000	0.98	0.0017110	-10.79
0.9730	240	0.0565500	0.0021470	0.0577960	2.20	0.0022386	4.27	0.0571960	1.14	0.0019700	-8.24
2.8220	280	0.0175900	0.0025550	0.0182375	3.68	0.0029141	14.05	0.0176490	0.34	0.0025780	0.90
				AAD(%)	1.90	AAD(%)	5.04	AAD(%)	0.73	AAD(%)	7.59

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XVI

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL ETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.04329	170	562.92	53.61	563.49	0.10	53.14	-0.88	563.50	0.10	53.00	-1.14
0.22	200	595.61	131.50	599.21	0.60	124.99	-4.95	599.21	0.60	124.78	-5.11
0.9730	240	629.31	238.21	639.33	1.59	236.23	-0.83	639.36	1.60	230.65	-3.17
2.8220	280	638.78	362.34	656.69	2.80	361.49	-0.23	658.22	3.04	358.07	-1.18
				AAD(%)	1.28	AAD(%)	1.72	AAD(%)	1.34	AAD(%)	2.65

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.04329	170	562.92	53.61	563.18	0.05	53.64	0.06	564.96	0.36	55.56	3.64
0.22	200	595.61	131.50	598.12	0.42	126.26	-3.98	605.66	1.69	134.47	2.26
0.9730	240	629.31	238.21	635.84	1.04	234.86	-1.41	642.23	2.05	243.65	2.28
2.8220	280	638.78	362.34	648.38	1.50	367.59	1.45	728.38	14.03	358.07	-1.18
				AAD(%)	0.75	AAD(%)	1.72	AAD(%)	4.53	AAD(%)	2.34

* En la estimación de entalpía del líquido se utilizó las ecuaciones de Antoine y Wagner para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XVII

ESTIMACIÓN DE ENTROPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL ETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg°K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.04329	170	3.3312	0.3353	3.3378	0.20	0.3357	0.13	3.3378	0.20	0.33489	-0.12
0.22	200	3.0761	0.7555	3.1040	0.91	0.7829	3.63	3.1040	0.91	0.73184	-3.13
0.9730	240	2.8642	1.2346	2.9411	2.68	1.2615	2.18	2.9406	2.67	1.23766	0.25
2.8220	280	2.6821	1.6948	2.8425	5.98	1.7882	5.51	2.8447	6.06	1.77273	4.60
				AAD(%)	2.44	AAD(%)	2.86	AAD(%)	2.46	AAD(%)	2.03

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg°K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.04329	170	3.3312	0.3353	3.3372	0.18	0.3399	1.37	3.3391	0.24	0.3426	2.18
0.22	200	3.0761	0.7555	3.1025	0.86	0.7432	-1.63	3.1099	1.10	0.7539	-0.21
0.9730	240	2.8642	1.2346	2.9393	2.62	1.2685	2.75	2.9654	3.53	1.3046	5.67
2.8220	280	2.6821	1.6948	2.8462	6.12	1.8434	8.77	2.9169	8.75	1.9306	13.91
				AAD(%)	2.44	AAD(%)	3.63	AAD(%)	3.41	AAD(%)	5.49

* En la estimación de entropía del líquido se utilizó las ecuaciones de Antoine y Wagner para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XVIII

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA Y ENTROPÍA ESPECÍFICA DEL LÍQUIDO SATURADO PARA EL ETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.04329	170	562.92	53.61	563.49	0.10	86.19	60.77	563.50	0.10	61.49	14.70
0.22	200	595.61	131.50	599.21	0.60	124.99	-4.95	599.21	0.60	124.78	-5.11
0.9730	240	629.31	238.21	639.33	1.59	232.58	-2.36	639.36	1.60	235.63	-1.08
2.8220	280	638.78	362.34	656.69	2.80	367.00	1.29	658.22	3.04	360.56	-0.49
				AAD(%)	1.28	AAD(%)	17.34	AAD(%)	1.34	AAD(%)	5.35

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	SI kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv
0.04329	170	3.3312	0.3353	3.3378	0.20	0.5301	58.10	3.3378	0.20	0.3848	14.76
0.22	200	3.0761	0.7555	3.1040	0.91	0.7329	-2.99	3.1040	0.91	0.7318	-3.14
0.9730	240	2.8642	1.2346	2.9411	2.68	1.2463	0.95	2.9406	2.67	1.2584	1.93
2.8220	280	2.6821	1.6948	2.8425	5.98	1.8079	6.67	2.8447	6.06	1.78160	5.12
				AAD(%)	2.44	AAD(%)	17.18	AAD(%)	2.46	AAD(%)	6.24

* En la estimación de entalpía y entropía del líquido se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XIX

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL ETANO EN LA REGIÓN VAPOR SOBREALENTADO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico SBC-94					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.2	300	0.40889	761.74	3.7720	0.40870	-0.05	759.26	-0.33	3.7646	-0.20
2	300	0.03451	720.03	3.0353	0.03490	1.13	723.84	0.53	3.0908	1.83
4	340	0.01813	766.56	3.0271	0.01760	-3.09	764,.02	-0.33	3.0940	2.21
1	300	0.07648	744.60	3.2865	0.07680	0.35	744.64	0.01	3.3040	0.53
7	460	0.01604	1039.90	3.5841	0.01390	-13.40	1012.20	-2.66	3.5882	0.11
					AAD(%)	3.60	AAD(%)	0.77	AAD(%)	0.98

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LSC-01					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.2	300	0.40890	761.74	3.7720	0.40884	-0.01	759.31	-0.32	3.7647	-0.19
2	300	0.03451	720.03	3.0353	0.03501	1.45	724.48	0.62	3.0890	1.77
4	340	0.01813	766.56	3.0271	0.01841	1.54	770.31	0.49	3.0997	2.40
1	300	0.07648	744.60	3.2865	0.07680	0.42	744.91	0.04	3.3049	0.56
7	460	0.01604	1039.90	3.5841	0.01452	-9.48	1019.92	-1.92	3.5939	0.27
					AAD(%)	2.58	AAD(%)	0.68	AAD(%)	1.04

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XX

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL ETANO EN LA REGIÓN VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico SRK-72					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg°K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.2	300	0.40890	761.74	3.7720	0.4087	-0.05	759.05	-0.35	3.7650	-0.19
2	300	0.03451	720.03	3.0353	0.03477	0.75	722.73	0.37	3.1024	2.21
4	340	0.01813	766.56	3.0271	0.01837	1.32	765.11	-0.19	3.1087	2.70
1	300	0.07648	744.60	3.2865	0.07665	0.22	743.44	-0.16	3.3065	0.61
7	460	0.01604	1039.90	3.5841	0.01636	2.00	1033.77	-0.59	3.6147	0.85
					AAD(%)	0.87	AAD(%)	0.33	AAD(%)	1.31

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico PR-76					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg°K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.2	300	0.40890	761.74	3.7720	0.4080	-0.22	762.71	0.13	3.7681	-0.10
2	300	0.03451	720.03	3.0353	0.0341	-1.19	762.71	5.93	3.1315	3.17
4	340	0.01813	766.56	3.0271	0.01780	-1.82	836.14	9.08	3.1694	4.70
1	300	0.07648	744.60	3.2865	0.07601	-0.61	762.71	2.43	3.3231	1.11
7	460	0.01604	1039.90	3.5841	0.01587	-1.06	1096.39	5.43	3.6664	2.30
					AAD(%)	0.98	AAD(%)	4.60	AAD(%)	2.28

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXI

ESTIMACIÓN DE PRESIÓN DE VAPOR Y ENTALPÍA DE VAPORIZACIÓN PARA EL ETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
Presión (MPa)	Temperatura (K)	Hvap (kJ/kg)	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv
0.04329	170	509.29	0.04630	6.95	477.30	-6.28	0.04320	-0.21	502.00	-1.43
0.22	200	464.11	0.22300	1.36	474.22	2.18	0.22230	1.05	474.43	2.22
0.9730	240	391.10	0.99640	2.40	406.74	4.00	0.96640	-0.68	406.82	4.02
2.8220	280	276.44	2.86220	1.42	289.69	4.79	2.78710	-1.24	297.65	7.67
			AAD(%)	3.04	AAD(%)	4.31	AAD(%)	0.79	AAD(%)	3.84

* En la estimación de presión de saturación y calor de vaporización se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

3.1.2 Argón

Los resultados obtenidos de volumen, entalpía y entropía específica para el argón puro en la región de saturación con modelos cuárticos y cúbicos son mostrados en las TABLAS XXII, XXIII, XXIV y XXV; para el volumen del vapor saturado se observa que el modelo cúbico de SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.27%; para el volumen del líquido saturado se observa que el modelo cuártico SBC-94 tiene la menor desviación media absoluta 3.75%, lo cual indica que estos modelos son los que mejor predicen el volumen específico. Revisando la entalpía del vapor saturado y líquido saturado en forma conjunta se observa que el modelo cuártico LSC-01 y calculando la entalpía de vaporización con este mismo modelo usando la regla Maxwell de áreas iguales (ver Tabla XXV), se obtienen las menores desviaciones medias absolutas 1.11% y 3.24%, respectivamente, por lo tanto es el modelo que mejor predice las entalpías específicas del líquido y vapor saturado en forma conjunta; cabe mencionar que el modelo cúbico SRK-72 predice la entalpía de vapor saturado con un 0.16 % de desviación media absoluta pero la entalpía de líquido saturado con un 7.34 %. Por otra parte, el modelo cuártico LSC-01 y calculando la entropía de vaporización con la regla de Maxwell de áreas iguales, presentan las menores desviaciones medias absolutas para la entropía de líquido saturado y vapor saturado en forma conjunta (ver Tabla XXV) las cuales fueron de 4.52% y 6.98% respectivamente.

Para la región de vapor sobrecalentado los resultados de volumen, entalpía y entropía específica son mostrados en las TABLAS XXVI y XXVII, en las cuales se observa lo siguiente: para el volumen específico el modelo cuártico LSC-01 tiene la menor desviación media absoluta de 0.38%, para la entalpía específica el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.51% y para la entropía específica el modelo cuártico SBC-94 tiene la menor desviación media

absoluta 0.61%, lo anterior nos indica que estos modelos son los que mejor predicen respecto a los otros modelos.

También se presenta en la TABLA XXVIII las estimaciones de presión de vapor y entalpías de vaporización obtenidas a partir de los modelos cuárticos, el modelo LSC-01 presentó las menores desviaciones medias absolutas en forma conjunta de 0.30% y 2.73% respectivamente, cabe mencionar que el modelo LBSC-96 presentó una menor desviación media absoluta de 2.18 % para la entalpía de vaporización, sin embargo este modelo presentó para la presión de vapor una desviación media absoluta de 1.55 %.

TABLA XXII

ESTIMACIÓN DE VOLUMEN ESPECÍFICO EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL ARGÓN USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94				Modelo Cuártico LSC-01			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI(m3/kg)	%Desv
0.3245	100	0.0592500	0.0007630	0.0598128	0.95	0.0007184	-5.85	0.0598670	1.04	0.0007159	-6.17
1.215	120	0.0166600	0.0008620	0.0169069	1.48	0.0008336	-3.29	0.0169700	1.86	0.00082607	-4.17
3.17	140	0.0056660	0.0010590	0.0058501	3.25	0.0010814	2.12	0.0059227	4.53	0.0010489	-0.95
				AAD(%)	1.89	AAD(%)	3.75	AAD(%)	2.48	AAD(%)	3.76

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI(m3/kg)	%Desv
0.3245	100	0.0592500	0.0007630	0.0594790	0.39	0.0007622	-0.10	0.0600000	1.27	0.0006740	-11.66
1.215	120	0.0166600	0.0008620	0.0167075	0.29	0.0008896	3.20	0.0164854	-1.05	0.0007852	-8.91
3.17	140	0.0056660	0.0010590	0.0056580	-0.14	0.0011879	12.17	0.0054418	-3.96	0.0010550	-0.38
				AAD(%)	0.27	AAD(%)	5.16	AAD(%)	2.09	AAD(%)	6.98

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXIII

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL ARGÓN USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.3245	100	170.82	20.37	170.77	-0.03	19.27	-5.40	170.78	-0.02	19.13	-6.09
1.215	120	171.91	44.74	173.26	0.79	47.30	5.72	173.26	0.79	46.74	4.47
3.17	140	161.54	75.76	164.88	2.07	82.51	8.91	165.59	2.51	81.40	7.44
				AAD(%)	0.96	AAD(%)	6.68	AAD(%)	1.11	AAD(%)	6.00

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.3245	100	170.82	20.37	170.23	-0.35	19.69	-3.34	174.08	1.91	21.98	7.90
1.215	120	171.91	44.74	171.88	-0.02	47.92	7.11	184.48	7.31	61.44	37.33
3.17	140	161.54	75.76	161.73	0.12	84.52	11.56	194.89	20.65	119.12	57.23
				AAD(%)	0.16	AAD(%)	7.34	AAD(%)	9.96	AAD(%)	34.15

* En la estimación de entalpía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XXIV

ESTIMACIÓN DE ENTROPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL ARGÓN USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.3245	100	1.7255	0.2209	1.74066	0.88	0.22564	2.15	1.74035	0.86	0.22381	1.32
1.215	120	1.4959	0.4361	1.54699	3.42	0.49730	14.03	1.54698	3.41	0.49269	12.98
3.17	140	1.2725	0.6598	1.38930	9.18	0.80096	21.39	1.39061	9.28	0.78929	19.63
				AAD(%)	4.49	AAD(%)	12.52	AAD(%)	4.52	AAD(%)	11.31

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Sg(KJ/kg°K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.3245	100	1.7255	0.229	1.73939	0.80	0.23404	2.20	1.74557	1.16	0.22460	-1.92
1.215	120	1.4959	0.4361	1.54650	3.38	0.51350	17.75	1.56567	4.66	0.54035	23.91
3.17	140	1.2725	0.6598	1.39715	9.80	0.84564	28.17	1.44629	13.66	0.90506	37.17
				AAD(%)	4.66	AAD(%)	16.04	AAD(%)	6.49	AAD(%)	21.00

* En la estimación de entropía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XXV

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA Y ENTROPÍA ESPECÍFICA DEL LÍQUIDO SATURADO PARA EL ARGÓN USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.3245	100	170.82	20.37	170.77	-0.03	18.84	-7.51	170.78	-0.02	19.10	-6.23
1.215	120	171.91	44.74	173.26	0.79	43.49	-2.79	173.26	0.79	43.49	-2.79
3.17	140	161.54	75.76	164.88	2.07	76.07	0.41	165.59	2.51	75.24	-0.69
				AAD(%)	0.96	AAD(%)	3.57	AAD(%)	1.11	AAD(%)	3.24

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico SBC-94*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	SI(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv
0.3245	100	1.7255	0.2209	1.74066	0.88	0.22140	0.23	1.74035	0.86	0.22360	1.22
1.215	120	1.4959	0.4361	1.54699	3.42	0.46550	6.74	1.54698	3.41	0.46560	6.76
3.17	140	1.2725	0.6598	1.38930	9.18	0.75500	14.43	1.39061	9.28	0.74530	12.96
				AAD(%)	4.49	AAD(%)	7.13	AAD(%)	4.52	AAD(%)	6.98

* En la estimación de entalpía y entropía del líquido se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXVI

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL ARGÓN EN LA REGIÓN VAPOR SOBREALENTADO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico SBC-94					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg°K)	Vg(m3/kg)	%Error	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.3	300	0.20770	278.73	2.3407	0.20772	0.01	277.53	-0.43	2.3323	-0.36
0.8	300	0.07767	277.80	2.1341	0.07757	-0.13	276.56	-0.45	2.1266	-0.35
20	300	0.00297	247.36	1.3798	0.00277	-6.70	238.49	-3.59	1.3689	-0.79
20	800	0.00880	540.07	1.9675	0.00879	-0.11	540.46	0.07	1.9492	-0.93
					AAD(%)	1.74	AAD(%)	1.13	AAD(%)	0.61

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LSC-01					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg°K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Error	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.3	300	0.20770	278.73	2.3407	0.20773	0.01	277.54	-0.43	2.3323	-0.36
0.8	300	0.07767	277.80	2.1341	0.07765	-0.03	276.55	-0.45	2.1261	-0.37
20	300	0.00297	247.36	1.3798	0.00300	1.11	239.23	-3.29	1.3563	-1.70
20	800	0.00880	540.07	1.9675	0.00877	-0.39	538.40	-0.31	1.9481	-0.99
					AAD(%)	0.38	AAD(%)	1.12	AAD(%)	0.86

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXVII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL ARGÓN EN LA REGIÓN VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico SRK-72					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.3	300	0.20770	278.73	2.3407	0.20779	0.04	277.54	-0.43	2.3327	-0.34
0.8	300	0.07767	277.80	2.1341	0.07772	0.06	276.56	-0.45	2.1274	-0.31
20	300	0.00297	247.36	1.3798	0.00305	2.69	245.81	-0.63	1.4122	2.35
20	800	0.00880	540.07	1.9675	0.00882	0.23	543.03	0.55	1.9649	-0.13
					AAD(%)	0.76	AAD(%)	0.51	AAD(%)	0.78

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico PR-76					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.3	300	0.20770	278.73	2.3407	0.20757	-0.06	278.14	-0.21	2.3352	-0.23
0.8	300	0.07767	277.80	2.1341	0.07750	-0.22	278.13	0.12	2.1262	-0.37
20	300	0.00297	247.36	1.3798	0.00291	-2.02	278.14	12.44	1.4595	5.78
20	800	0.00880	540.07	1.9675	0.00871	-1.02	538.29	-0.33	1.9698	0.12
					AAD(%)	0.83	AAD(%)	3.28	AAD(%)	1.62

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XXVIII

ESTIMACIÓN DE PRESIÓN DE VAPOR Y ENTALPÍA DE VAPORIZACIÓN PARA EL ARGÓN USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
Presión (MPa)	Temperatura (K)	Hvap (kJ/kg)	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv
0.3245	100	150.45	0.31250	-3.70	151.93	0.98	0.32660	0.65	151.68	0.82
1.215	120	127.17	1.21800	0.25	129.77	2.04	1.21730	0.19	129.77	2.04
3.17	140	85.78	3.19210	0.70	88.80	3.52	3.16820	-0.06	90.34	5.32
			AAD(%)	1.55	AAD(%)	2.18	AAD(%)	0.30	AAD(%)	2.73

* En la estimación de presión de saturación y calor de vaporización se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

3.2 Compuestos puros polares

3.2.1 Trifluoroclorometano (Refrigerante 13)

Los resultados obtenidos de volumen, entalpía y entropía específica para el trifluoroclorometano puro en la región de saturación con modelos cuárticos y cúbicos son mostrados en las TABLAS XXIX, XXX, XXXI y XXXII; para el volumen del vapor saturado se observa que el modelo cúbico de PR-76 tiene la menor desviación media absoluta 1.1%; para el volumen del líquido saturado se observa que el modelo cuártico LBSC-96 tiene la menor desviación media absoluta 2.79%, lo cual indica que estos modelos son los que mejor predicen el volumen específico. Estudiando la entalpía del vapor saturado y líquido saturado en forma conjunta se observa que el modelo cuártico LSC-01 y obteniendo la entalpía de vaporización con este mismo modelo, se presentan las menores desviaciones medias absolutas 2.83% y 0.88% (ver Tabla XXXII), respectivamente, por lo tanto es el modelo que mejor predice las entalpías específicas del líquido y vapor saturado, cabe mencionar que el modelo cuártico LBSC-96 y la ecuación de Antoine para calcular la entalpía de vaporización predicen la entalpía del vapor saturado con una desviación media absoluta de 2.80 % pero 0.96 % para la entalpía del líquido saturado (ver Tabla XXX). Por otra parte en la entropía de vapor saturado y líquido saturado el modelo cuártico LSBC-96 y obteniendo la entropía de vaporización con la ecuación de Antoine, se obtienen tienen las menores desviaciones medias absolutas 4.76 % y 3.90 % respectivamente (ver Tabla XXXI).

Para la región de vapor sobrecalentado los resultados de volumen, entalpía y entropía específica son mostrados en las TABLAS XXXIII y XXXIV, en las cuales se observa lo siguiente: para el volumen específico el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta de 0.81%, para la entalpía

específica el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.93% y para la entropía específica el modelo cuártico LBSC-96 tiene la menor desviación media absoluta 2.63%, lo anterior nos indica que estos modelos son los que mejor predicen respecto a los otros modelos.

También se presenta en la TABLA XXXV las estimaciones de presión de vapor y entalpías de vaporización obtenidas a partir de los modelos cuárticos, el modelo LBSC-96 presentó las menores desviaciones medias absolutas 1.25% y 5.35% respectivamente.

TABLA XXIX

**ESTIMACIÓN DE VOLUMEN ESPECÍFICO EN LA REGIÓN LÍQUIDO VAPOR PARA EL TRIFLUOROCLOROMETANO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96				Modelo Cuártico LSC-01			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI(m3/kg)	%Desv
0.05158	180	0.2704000	0.0006390	0.2726560	0.83	0.0006012	-5.92	0.2727400	0.87	0.0005973	-6.53
0.1965	205	0.0773600	0.0006810	0.0787400	1.78	0.0006596	-3.14	0.0787960	1.86	0.0006404	-5.96
0.7647	240	0.0207100	0.0007610	0.0214168	3.41	0.0007457	-2.01	0.0214520	3.58	0.0007266	-4.52
1.211	255	0.0128500	0.0008100	0.0134060	4.33	0.0008061	-0.48	0.0134348	4.55	0.0007792	-3.80
1.821	270	0.0081480	0.0008760	0.0086004	5.55	0.0008874	1.30	0.0086224	5.82	0.0008501	-2.96
2.952	290	0.0042780	0.0010380	0.0047022	9.92	0.001075	3.56	0.0047089	10.07	0.0010004	-3.62
3.306	295	0.0034960	0.0011200	0.0039632	13.36	0.0011545	3.08	0.0039584	13.23	0.0010569	-5.63
				AAD(%)	5.60	AAD(%)	2.79	AAD(%)	5.71	AAD(%)	4.72

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI(m3/kg)	%Desv
0.05158	180	0.2704000	0.0006390	0.2720870	0.62	0.0006700	4.86	0.2719000	0.55	0.0005935	-7.12
0.1965	205	0.0773600	0.0006810	0.0783409	1.27	0.0007167	5.24	0.0781300	1.00	0.0007167	5.24
0.7647	240	0.0207100	0.0007610	0.0211380	2.07	0.0008193	7.66	0.0211380	2.07	0.0008193	7.66
1.211	255	0.0128500	0.0008100	0.0131500	2.33	0.0008890	9.76	0.0129255	0.59	0.0007834	-3.28
1.821	270	0.0081480	0.0008760	0.0083500	2.48	0.0009910	13.13	0.0081280	-0.25	0.0008749	-0.13
2.952	290	0.0042780	0.0010380	0.0044145	3.19	0.0012642	21.79	0.0042061	-1.68	0.0011249	8.37
3.306	295	0.0034960	0.0011200	0.0036418	4.17	0.0014123	26.10	0.0034407	-1.58	0.0012627	12.74
				AAD(%)	2.30	AAD(%)	12.65	AAD(%)	1.10	AAD(%)	6.36

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXX

**ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO VAPOR PARA EL TRIFLUOROCLOROMETANO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo Cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.05158	180	179.48	24.35	180.25	0.43	24.24	-0.45	180.26	0.43	24.21	-0.57
0.1965	205	189.45	46.75	191.36	1.01	46.99	0.51	191.42	1.04	46.92	0.36
0.7647	240	200.96	81.34	205.15	2.08	82.83	1.83	205.26	2.14	82.62	1.57
1.211	255	204.39	97.35	209.75	2.62	100.03	2.75	209.84	2.67	99.78	2.50
1.821	270	206.28	114.34	212.98	3.25	114.24	-0.09	213.64	3.57	113.76	-0.51
2.952	290	203.77	140.40	213.29	4.67	141.03	0.45	212.49	4.28	139.71	-0.49
3.306	295	200.75	148.70	211.86	5.53	149.69	0.66	212.09	5.65	147.86	-0.56
				AAD(%)	2.80	AAD(%)	0.96	AAD(%)	2.83	AAD(%)	0.94

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.05158	180	179.48	24.35	180.12	0.36	24.49	0.57	180.89	0.79	25.32	3.98
0.1965	205	189.45	46.75	191.02	0.83	47.50	1.60	193.55	2.16	50.27	7.53
0.7647	240	200.96	81.34	204.10	1.56	83.87	3.11	212.68	5.83	93.19	14.57
1.211	255	204.39	97.35	208.17	1.85	101.42	4.18	221.36	8.30	115.64	18.79
1.821	270	206.28	114.34	210.56	2.07	116.36	1.77	230.32	11.65	137.45	20.21
2.952	290	203.77	140.40	208.44	2.29	145.68	3.76	242.67	19.09	181.29	29.12
3.306	295	200.75	148.70	205.60	2.42	156.24	5.07	245.83	22.46	197.61	32.89
				AAD(%)	1.63	AAD(%)	2.87	AAD(%)	10.04	AAD(%)	18.16

* En la estimación de entalpía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXXI

**ESTIMACIÓN DE ENTROPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO VAPOR PARA EL TRIFLUOROCLOROMETANO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo Cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.05158	180	1.0094	0.1476	1.0149	0.54	0.1482	0.41	1.0150	0.55	0.1480	0.27
0.1965	205	0.9596	0.2635	0.9725	1.34	0.2683	1.82	0.9727	1.36	0.2678	1.63
0.7647	240	0.9157	0.4173	0.9444	3.13	0.4347	4.17	0.9446	3.16	0.4336	3.91
1.211	255	0.9003	0.4805	0.9381	4.20	0.5078	5.68	0.9382	4.21	0.5066	5.43
1.821	270	0.8838	0.5433	0.9330	5.57	0.5373	-1.10	0.9357	5.87	0.5672	4.40
2.952	290	0.8510	0.6324	0.9238	8.55	0.6746	6.67	0.9208	8.20	0.6660	5.31
3.306	295	0.8360	0.6595	0.9196	10.00	0.7088	7.48	0.9207	10.13	0.7027	6.55
				AAD(%)	4.76	AAD(%)	3.90	AAD(%)	4.78	AAD(%)	3.93

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.05158	180	1.0094	0.1476	1.0147	0.53	0.1500	1.63	1.0156	0.61	0.1513	2.51
0.1965	205	0.9596	0.2635	0.9721	1.30	0.2720	3.23	0.9749	1.59	0.2760	4.74
0.7647	240	0.9157	0.4173	0.9439	3.07	0.4429	6.13	0.9528	4.05	0.4550	9.03
1.211	255	0.9003	0.4805	0.9377	4.15	0.5190	8.02	0.9513	5.67	0.5367	11.70
1.821	270	0.8838	0.5433	0.9328	5.54	0.5838	7.46	0.9530	7.83	0.6091	12.10
2.952	290	0.8510	0.6324	0.9236	8.53	0.7072	11.83	0.9586	12.64	0.7469	18.11
3.306	295	0.8360	0.6595	0.9191	9.94	0.7518	13.99	0.9605	14.89	0.7970	20.85
				AAD(%)	4.72	AAD(%)	7.47	AAD(%)	6.75	AAD(%)	11.29

* En la estimación de entropía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XXXII

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA ESPECÍFICA Y ENTROPÍA ESPECÍFICA DEL LÍQUIDO SATURADO PARA EL TRIFLUOROCLOROMETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo Cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.05158	180	179.48	24.35	180.25	0.43	21.61	-11.25	180.26	0.43	25.24	3.66
0.1965	205	189.45	46.75	191.36	1.01	45.19	-3.34	191.42	1.04	47.32	1.22
0.7647	240	200.96	81.34	205.15	2.08	80.83	-0.63	205.26	2.14	81.24	-0.12
1.211	255	204.39	97.35	209.75	2.62	97.79	0.45	209.84	2.67	97.29	-0.06
1.821	270	206.28	114.34	212.98	3.25	114.24	-0.09	213.64	3.57	114.97	0.55
2.952	290	203.77	140.40	213.29	4.67	145.08	3.33	212.49	4.28	140.96	0.40
3.306	295	200.75	148.70	211.86	5.53	153.68	3.35	212.09	5.65	148.49	-0.14
				AAD(%)	2.80	AAD(%)	3.21	AAD(%)	2.83	AAD(%)	0.88

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo Cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg°K)	SI(kJ/kg°K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv
0.05158	180	1.0094	0.1476	1.0149	0.54	0.1336	-9.49	1.015	0.55	0.1537	4.13
0.1965	205	0.9596	0.2635	0.9725	1.34	0.2595	-1.52	0.9727	1.36	0.2698	2.39
0.7647	240	0.9157	0.4173	0.9444	3.13	0.4264	2.18	0.9446	3.16	0.4279	2.54
1.211	255	0.9003	0.4805	0.9381	4.20	0.4991	3.87	0.9382	4.21	0.4964	3.31
1.821	270	0.8838	0.5433	0.933	5.57	0.5749	5.82	0.9357	5.87	0.5703	4.97
2.952	290	0.851	0.6324	0.9238	8.55	0.6886	8.89	0.9208	8.2	0.6741	6.59
3.306	295	0.836	0.6595	0.9196	10.00	0.7224	9.54	0.9207	10.13	0.7051	6.91
				AAD(%)	4.76	AAD(%)	5.90	AAD(%)	4.78	AAD(%)	4.41

* En la estimación de entalpía y entropía del líquido se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XXXIII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL TRIFLUOROCLOROMETANO EN LA REGIÓN VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.101325	300	0.23350	247.74	1.2436	0.23350	0.00	248.38	0.26	1.2478	0.34
0.7	250	0.02470	208.93	0.9542	0.02520	2.02	212.10	1.52	0.9762	2.31
1	250	0.01593	204.18	0.9114	0.01650	3.58	208.87	2.30	0.9441	3.59
2	300	0.00943	230.48	0.9633	0.00955	1.26	234.09	1.57	0.9940	3.19
3	550	0.01441	431.81	1.4189	0.01422	-1.32	431.25	-0.13	1.4226	0.26
3	300	0.00506	216.50	0.8937	0.00527	4.21	223.03	3.02	0.9482	6.10
					AAD(%)	2.07	AAD(%)	1.46	AAD(%)	2.63

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LSC-01					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.101325	300	0.23350	247.74	1.2436	0.23354	0.02	248.39	0.26	1.2478	0.34
0.7	250	0.02470	208.93	0.9542	0.02516	1.86	212.12	1.53	0.9765	2.34
1	250	0.01593	204.18	0.9114	0.01654	3.83	209.06	2.39	0.9446	3.64
2	300	0.00943	230.48	0.9633	0.00956	1.34	234.19	1.61	0.9943	3.22
3	550	0.01441	431.81	1.4189	0.01423	-1.25	431.27	-0.13	1.4223	0.24
3	300	0.00506	216.50	0.8937	0.00528	4.29	223.20	3.09	0.9487	6.15
					AAD(%)	2.10	AAD(%)	1.50	AAD(%)	2.65

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXXIV

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL TRIFLUOROCLOROMETANO EN LA REGIÓN VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico SRK-72					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg°K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.101325	300	0.23350	247.74	1.2436	0.23350	0.00	248.33	0.24	1.2479	0.35
0.7	250	0.02470	208.93	0.9542	0.02498	1.13	211.32	1.14	0.9760	2.28
1	250	0.01593	204.18	0.9114	0.01625	2.01	207.59	1.67	0.9437	3.55
2	300	0.00943	230.48	0.9633	0.00946	0.28	232.57	0.91	0.9948	3.27
3	550	0.01441	431.81	1.4189	0.01438	-0.21	431.27	-0.13	1.4237	0.34
3	300	0.00506	216.50	0.8937	0.00512	1.25	219.78	1.52	0.9493	6.22
					AAD(%)	0.81	AAD(%)	0.93	AAD(%)	2.67

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico PR-76					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.101325	300	0.23350	247.74	1.2436	0.23325	-0.11	249.02	0.52	1.2485	0.39
0.7	250	0.02470	208.93	0.9542	0.02476	0.24	218.43	4.55	0.9833	3.05
1	250	0.01593	204.18	0.9114	0.01603	0.63	218.43	6.98	0.9550	4.78
2	300	0.00943	230.48	0.9633	0.00924	-2.07	249.02	8.04	1.0111	4.96
3	550	0.01441	431.81	1.4189	0.01420	-1.47	437.51	1.32	1.4297	0.76
3	300	0.00506	216.50	0.8937	0.00492	-2.80	249.03	15.02	0.9789	9.53
					AAD(%)	1.22	AAD(%)	6.07	AAD(%)	3.91

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXXV

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL TRIFLUOROCLOROMETANO EN LA REGIÓN VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CÚBICOS

Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96				Modelo Cuártico LSC-01*			
Presión (MPa)	Temperatura (K)	Hvap (kJ/kg)	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv
0.05158	180	155.64	0.05170	0.23	158.64	1.93	0.05170	0.23	155.02	-0.40
0.1965	205	142.7	0.19870	1.12	146.18	2.44	0.19440	-1.07	144.09	0.97
0.7647	240	119.62	0.77730	1.65	124.32	3.93	0.75000	-1.92	122.64	2.52
1.211	255	107.04	1.23270	1.79	111.95	4.59	1.18690	-1.99	112.68	5.27
1.821	270	91.94	1.85620	1.93	96.69	5.17	1.78380	-2.04	98.67	7.32
2.952	290	63.37	2.98710	1.19	68.21	7.64	2.87940	-2.46	75.65	19.38
3.306	295	52.05	3.33260	0.80	58.18	11.78	3.21330	-2.80	63.60	22.19
			AAD(%)	1.25	AAD(%)	5.35	AAD(%)	1.79	AAD(%)	8.29

*En la estimación de presión de saturación y calor de vaporización se utilizó la ecuación de Shah y el método de áreas iguales de Maxwell.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

3.2.2 Agua

Los resultados obtenidos de volumen, entalpía y entropía específica para el agua pura en la región de saturación con modelos cuárticos y cúbicos son mostrados en la TABLA XXXVI, XXXVII, XXXVIII y XXXIX; para el volumen del vapor saturado se observa que el modelo cúbico de PR-76 tiene la menor desviación media absoluta 6.01%; para el volumen del líquido saturado se observa que el modelo cuártico LSC-01 tiene la menor desviación media absoluta 12.95%, lo cual indica que estos modelos son los que mejor predicen el volumen específico. Estudiando la entalpía del vapor saturado y líquido saturado en forma conjunta se observa que el modelo cuártico LBSC-96 con las ecuaciones de Antoine y Wagner para el cálculo de la entalpía de vaporización se obtienen las menores desviaciones medias absolutas 3.84% y 1.50% (ver Tabla XXXVII), respectivamente, por lo tanto es el modelo que mejor predice las entalpías específicas del líquido y vapor saturado, cabe mencionar que el modelo cúbico SRK-72 predice con 2.71 % la entalpía de vapor saturado, pero 2.97 % para la entalpía del líquido saturado. Por otra parte la entropía de vapor saturado y líquido saturado el modelo cuártico LSC-01 y las ecuaciones de Antoine y Wagner para el cálculo de la entropía de vaporización, se obtienen tienen las menores desviaciones medias absolutas 2.89% y 1.44% (ver Tabla XXXVIII) respectivamente. En la Tabla XXXIX se puede observar que los modelos cuárticos y la regla de Maxwell para determinar la entalpía de vaporización, no predicen de forma segura la entalpía y entropía del líquido saturado; la desviación media absoluta que presentaron estos modelos fueron: en el caso de entalpía de líquido saturado 21.17 % usando LBSC-96 y 21.01 % usando LSC-01; para el caso de entropía de líquido saturado 19.91 % usando LBSC-96 y 19.27 % usando LSC-01.

Para la región de vapor sobrecalentado los resultados de volumen, entalpía y entropía específica son mostrados en la TABLA XL y XLI, en las cuales se

observa lo siguiente: para el volumen específico el modelo cúbico PR-76 tiene la menor desviación media absoluta de 1.85%, para la entalpía específica el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.86% y para la entropía específica el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.76%, lo anterior nos indica que los modelos mencionados son los que mejor predicen respecto a los otros modelos. También se presentan en la TABLA XLII las estimaciones de presión de vapor y entalpías de vaporización obtenidas a partir de los modelos cuárticos, las cuales, dan una alta desviación absoluta fuera de ser aceptable, lo cual nos indica que es inapropiado usar las ecuaciones cuárticas para estimar dichas propiedades.

TABLA XXXVI

ESTIMACIÓN DE VOLUMEN ESPECÍFICO EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL AGUA USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96				Modelo cuártico LSC-01			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI(m3/kg)	%Desv
0.1795	390	0.9800000	0.0010580	0.9913000	1.15	0.0012267	15.95	0.9918290	1.21	0.0010713	1.26
0.101325	373.14	1.6730000	0.0010430	1.6873000	0.85	0.0014870	42.57	1.6879800	0.90	0.0007605	-27.09
8	568.22	0.0235200	0.0013850	0.0260800	10.88	0.0015205	9.78	0.0263210	11.91	0.0015320	10.61
7.1	560	0.0269400	0.0013550	0.0296030	9.88	0.0014930	10.18	0.0298360	10.75	0.0014930	10.18
10	584.22	0.0235200	0.0013850	0.0204600	-13.01	0.0016042	15.83	0.0206800	-12.07	0.0016152	16.62
12	597.9	0.0142600	0.0015270	0.0166241	16.58	0.0016819	10.14	0.0168580	18.22	0.0017090	11.92
				AAD(%)	8.73	AAD(%)	17.41	AAD(%)	9.18	AAD(%)	12.95

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI(m3/kg)	%Desv
0.1795	390	0.9800000	0.0010580	0.9893100	0.95	0.0014285	35.02	0.9889000	0.91	0.0012668	19.74
0.101325	373.14	1.6730000	0.0010430	1.6850830	0.72	0.0014034	34.55	1.6846980	0.70	0.0012439	19.26
8	568.22	0.0235200	0.0013850	0.0251090	6.76	0.0020041	44.70	0.0246166	4.66	0.0017657	27.49
7.1	560	0.0269400	0.0013550	0.0286170	6.22	0.0019486	43.81	0.0281230	4.39	0.0017164	26.67
10	584.22	0.0235200	0.0013850	0.0194700	-17.22	0.0021300	53.79	0.0189868	-19.27	0.0018823	35.91
12	597.9	0.0142600	0.0015270	0.0156100	9.47	0.0022789	49.24	0.0151329	6.12	0.0020100	31.63
				AAD(%)	6.89	AAD(%)	43.52	AAD(%)	6.01	AAD(%)	26.78

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXXVII

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL AGUA USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96				Modelo cuártico LSC-01			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.1795	390	2701.30	490.40	2714.83	0.50	477.99	-2.53	2714.89	0.50	476.49	-2.84
0.101325	373.14	2675.60	419.50	2684.81	0.34	412.11	-1.76	2685.09	0.35	410.72	-2.09
8	568.22	2757.50	1317.00	2901.10	5.21	1300.36	-1.26	2910.09	5.53	1294.46	-1.71
7.1	560	2770.30	1272.50	2902.48	4.77	1255.31	-1.35	2910.54	5.06	1249.53	-1.81
10	584.22	2757.50	1407.90	2893.20	4.92	1392.17	-1.12	2904.20	5.32	1386.06	-1.55
12	597.9	2684.40	1491.20	2879.74	7.28	1476.44	-0.99	2892.88	7.77	1470.35	-1.40
				AAD(%)	3.84	AAD(%)	1.50	AAD(%)	4.09	AAD(%)	1.90

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.1795	390	2701.30	490.40	2713.20	0.44	481.30	-1.86	2720.04	0.69	488.70	-0.35
0.101325	373.14	2675.60	419.50	2683.90	0.31	414.30	-1.24	2687.90	0.46	418.60	-0.21
8	568.22	2757.50	1317.00	2863.50	3.84	1357.63	3.09	3067.62	11.25	1578.31	19.84
7.1	560	2770.30	1272.50	2869.65	3.59	1306.69	2.69	3051.34	10.14	1503.72	18.17
10	584.22	2757.50	1407.90	2844.26	3.15	1463.91	3.98	3099.76	12.41	1738.15	23.46
12	597.9	2684.40	1491.20	2817.44	4.96	1565.44	4.98	3091.30	15.16	1858.85	24.65
				AAD(%)	2.71	AAD(%)	2.97	AAD(%)	8.35	AAD(%)	14.45

* En la estimación de entalpía del líquido se utilizó las ecuaciones de Antoine y Wagner para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XXXVIII

ESTIMACIÓN DE ENTROPIA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL AGUA USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.1795	390	7.1624	1.4936	7.1971	0.48	1.4616	-2.14	7.1972	0.49	1.4578	-2.40
0.101325	373.14	7.3541	1.3038	7.3784	0.33	1.2877	-1.23	7.3809	0.36	1.2858	-1.38
8	568.22	6.1810	3.2073	6.0797	-1.64	3.2625	1.72	6.1810	0.00	3.2073	0.00
7.1	560	5.8052	3.1306	6.1165	5.36	3.1751	1.42	6.1249	5.51	3.1588	0.90
10	584.22	6.1810	3.3600	6.0075	-2.81	3.4382	2.33	6.0187	-2.63	3.4202	1.79
12	597.9	5.4916	3.4960	5.9451	8.26	3.5980	2.92	5.9512	8.37	3.5720	2.17
				AAD(%)	3.15	AAD(%)	1.96	AAD(%)	2.89	AAD(%)	1.44

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	Sl(kJ/kg K)	%Desv
0.1795	390	7.1624	1.4936	7.1958	0.47	1.4729	-1.39	7.2000	0.52	1.4786	-1.00
0.101325	373.14	7.3541	1.3038	7.3776	0.32	1.2951	-0.67	7.3801	0.35	1.2985	-0.41
8	568.22	6.1810	3.2073	6.0889	-1.49	3.2456	1.19	6.0796	-1.64	3.2625	1.72
7.1	560	5.8052	3.1306	6.1022	5.12	3.3112	5.77	6.2072	6.92	3.4436	10.00
10	584.22	6.1810	3.3600	5.9868	-3.14	3.6240	7.86	6.1337	-0.76	3.8030	13.18
12	597.9	5.4916	3.4960	5.9183	7.77	3.8243	9.39	6.0093	9.43	3.9480	12.93
				AAD(%)	3.05	AAD(%)	4.38	AAD(%)	3.27	AAD(%)	6.54

* En la estimación de entropía del líquido se utilizó las ecuaciones Antoine y Wagner para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XXXIX

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA Y ENTROPÍA DEL LÍQUIDO SATURADO PARA EL AGUA USANDO LOS MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	HI(kJ/kg)	%Desv
0.1795	390	2701.30	490.40	2714.83	0.50	604.92	23.35	2714.89	0.50	331.43	-32.42
0.101325	373.14	2675.60	419.50	2684.81	0.34	806.50	92.25	2685.09	0.35	84.17	-79.94
8	568.22	2757.50	1317.00	2901.10	5.21	1347.87	2.34	2910.09	5.53	1348.88	2.42
7.1	560	2770.30	1272.50	2902.48	4.77	1295.15	1.78	2910.54	5.06	1293.95	1.69
10	584.22	2757.50	1407.90	2893.20	4.92	1454.39	3.30	2904.20	5.32	1500.82	6.60
12	597.9	2684.40	1491.20	2879.74	7.28	1550.25	3.96	2892.88	7.77	1536.27	3.02
				AAD(%)	3.84	AAD(%)	21.17	AAD(%)	4.09	AAD(%)	21.01

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	SI(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv	SI(kJ/kg K)	%Desv
0.1795	390	7.1624	1.4936	7.1971	0.48	1.7871	19.65	7.1972	0.49	1.0858	-27.30
0.101325	373.14	7.3541	1.3038	7.3784	0.33	2.3447	79.84	7.3809	0.36	0.4106	-68.51
8	568.22	6.1810	3.2073	6.0797	-1.64	3.3462	4.33	6.0889	-1.49	3.3414	4.18
7.1	560	5.8052	3.1306	6.1165	5.36	3.2463	3.70	6.1249	5.51	3.2381	3.43
10	584.22	6.1810	3.3600	6.0075	-2.81	3.5447	5.50	6.0187	-2.63	3.5482	5.60
12	597.9	5.4916	3.4960	5.9451	8.26	3.7216	6.45	5.9512	8.37	3.7274	6.62
				AAD(%)	3.15	AAD(%)	19.91	AAD(%)	3.14	AAD(%)	19.27

* En la estimación de entalpía y entropía del líquido se utilizó modelos cuárticos y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XL

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL AGUA EN LA REGIÓN VAPOR SOBREALENTADO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temp. (°K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.004	350	40.35000	2644.00	8.7504	40.36800	0.04	2644.27	0.01	8.7513	0.01
0.07	400	2.61700	2732.70	7.6707	2.62630	0.36	2642.91	-3.29	7.4055	-3.46
0.07	900	5.93200	3763.80	9.3284	5.93130	-0.01	3762.70	-0.03	9.3284	0.00
0.2**	400	0.90240	2720.20	7.1616	0.91214	1.08	2733.41	0.49	7.1955	0.47
0.4**	450	0.50530	2811.00	7.0634	0.51021	0.97	2825.23	0.51	7.0991	0.51
1**	500	0.22060	2890.20	6.8223	0.22320	1.18	2910.93	0.72	6.8743	0.76
2	600	0.13260	3084.50	6.8704	0.13320	0.45	3098.88	0.47	6.9107	0.59
20	800	0.01575	3323.00	6.2477	0.01548	-1.71	3337.65	0.44	6.3505	1.65
30	900	0.01208	3528.00	6.3276	0.01125	-6.87	3501.91	-0.74	6.3994	1.13
30	950	0.01318	3678.10	6.4900	0.01271	-3.60	3659.11	-0.52	6.5405	0.78
40	950	0.00954	3607.80	6.2982	0.00793	-16.86	3509.90	-2.71	6.3464	0.77
50	950	0.00738	3323.00	6.2477	0.00325	-56.00	3072.65	-7.53	6.0282	-3.51
100	950	0.00335	3230.70	5.5581	0.00527	57.24	3613.50	11.85	5.8454	5.17
					AAD(%)	11.26	AAD(%)	2.25	AAD(%)	1.45

** Se indica que la ecuación de volumen predice líquido-vapor.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XL (CONTINÚA)

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LSC-01					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg°K)	%Desv
0.004	350	40.35000	2644.00	8.7504	40.36897	0.05	2644.27	0.01	8.7513	0.01
0.07	400	2.61700	2732.70	7.6707	2.62682	0.38	2737.18	0.16	7.6822	0.15
0.07	900	5.93200	3763.80	9.3284	5.93139	-0.01	3762.71	-0.03	9.3284	0.00
0.2**	400	0.90240	2720.20	7.1616	0.91260	1.13	2733.67	0.50	7.1956	0.47
0.4**	450	0.50530	2811.00	7.0634	0.51057	1.04	2825.74	0.52	7.0996	0.51
1**	500	0.22060	2890.20	6.8223	0.22350	1.31	2912.08	0.76	6.8756	0.78
2	600	0.13260	3084.50	6.8704	0.13333	0.55	3100.22	0.51	6.9120	0.61
20	800	0.01575	3323.00	6.2477	0.01533	-2.67	3330.50	0.23	6.3446	1.55
30	900	0.01208	3528.00	6.3276	0.01087	-10.02	3485.37	-1.21	6.3943	1.05
30	950	0.01318	3678.10	6.4900	0.01238	-6.05	3636.24	-1.14	6.5264	0.56
40	950	0.00954	3607.80	6.2982	0.00741	-22.33	3370.52	-6.58	6.1643	-2.13
50	950	0.00738	3323.00	6.2477	0.00413	-44.04	3124.47	-5.97	6.0022	-3.93
100	950	0.00335	3230.70	5.5581	0.00490	46.33	3491.05	8.06	5.7553	3.55
					AAD(%)	10.45	AAD(%)	1.97	AAD(%)	1.18

** Se indica que la ecuación de volumen predice líquido-vapor.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XLI

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS PARA EL AGUA EN LA REGIÓN VAPOR SOBREALENTADO USANDO MODELOS CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico SRK-72					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.004	350	40.35000	2644.00	8.7504	40.36570	0.04	2644.23	0.01	8.7513	0.01
0.07**	400	2.61700	2732.70	7.6707	2.62450	0.29	2736.56	0.14	7.6816	0.14
0.07	900	5.93200	3763.80	9.3284	5.93167	-0.01	3762.62	-0.03	9.3283	0.00
0.2**	400	0.90240	2720.20	7.1616	0.91025	0.87	2731.89	0.43	7.1942	0.46
0.4**	450	0.50530	2811.00	7.0634	0.50889	0.71	2823.01	0.43	7.0976	0.48
1**	500	0.22060	2890.20	6.8223	0.22227	0.76	2906.62	0.57	6.8720	0.73
2	600	0.13260	3084.50	6.8704	0.13274	0.11	3093.37	0.29	6.9087	0.56
20	800	0.01575	3323.00	6.2477	0.01595	1.24	3311.39	-0.35	6.3356	1.41
30	900	0.01208	3528.00	6.3276	0.01244	2.96	3503.72	-0.69	6.3897	0.98
30	950	0.01318	3678.10	6.4900	0.01356	2.88	3650.18	-0.76	6.5289	0.60
40	950	0.00954	3607.80	6.2982	0.01001	4.97	3579.10	-0.80	6.3549	0.90
50	950	0.00738	3323.00	6.2477	0.00793	7.44	3511.97	5.69	6.2118	-0.58
100	950	0.00335	3230.70	5.5581	0.00410	22.39	3261.95	0.97	5.7237	2.98
					AAD(%)	3.44	AAD(%)	0.86	AAD(%)	0.76

** Se indica que la ecuación de volumen predice líquido-vapor.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XLI (CONTINÚA)

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico PR-76					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.004**	350	40.35000	2644.00	8.7504	40.36536	0.04	2644.40	0.02	8.7514	0.01
0.07**	400	2.61700	2732.70	7.6707	2.62409	0.27	2739.06	0.23	7.6833	0.16
0.07	900	5.93200	3763.80	9.3284	5.93118	-0.01	3763.21	-0.02	9.3287	0.00
0.2**	400	0.90240	2720.20	7.1616	0.90983	0.82	2739.05	0.69	7.1987	0.52
0.4**	450	0.50530	2811.00	7.0634	0.50842	0.62	2835.03	0.85	7.1049	0.59
1**	500	0.22060	2890.20	6.8223	0.22178	0.53	2932.46	1.46	6.8873	0.95
2	600	0.13260	3084.50	6.8704	0.13223	-0.28	3131.60	1.53	6.9302	0.87
20	800	0.01575	3323.00	6.2477	0.01552	-1.46	3547.08	6.74	6.4645	3.47
30	900	0.01208	3528.00	6.3276	0.01206	-0.20	3763.42	6.67	6.5323	3.24
30	950	0.01318	3678.10	6.4900	0.01319	0.08	3873.77	5.32	6.6515	2.49
40	950	0.00954	3607.80	6.2982	0.00967	1.32	3873.82	7.37	6.5187	3.50
50	950	0.00738	3323.00	6.2477	0.00761	3.10	3873.82	16.58	6.4158	2.69
100	950	0.00335	3230.70	5.5581	0.00386	15.30	3873.82	19.91	6.0959	9.68
					AAD(%)	1.85	AAD(%)	5.18	AAD(%)	2.17

** Se indica que la ecuación de volumen predice líquido-vapor.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XLII

ESTIMACIÓN DE PRESIÓN DE VAPOR Y ENTALPÍA DE VAPORIZACIÓN PARA EL AGUA USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96				Modelo Cuártico LSC-01			
Presión (MPa)	Temperatura (K)	Hvap (kJ/kg)	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv
0.1795	390	2210.90	0.1963	9.36	2236.83	1.17	0.1829	1.89	2238.39	1.24
0.101325	373.14	2256.10	0.1628	60.67	2272.70	0.74	1.5758	1455.19	2274.36	0.81
8	568.22	1440.50	8.3370	4.21	1600.74	11.12	8.7966	9.96	1615.62	12.16
7.1	560	1497.80	7.4161	4.45	1647.17	9.97	7.8211	10.16	1661.01	10.90
10	584.22	1316.40	10.3626	3.63	1501.02	14.02	10.9460	9.46	1518.14	15.33
12	597.9	1193.20	12.3563	2.97	1403.29	17.61	13.0673	8.89	1422.52	19.22
			AAD(%)	14.22	AAD(%)	9.11	AAD(%)	249.26	AAD(%)	9.94

* En la estimación de presión de saturación y calor de vaporización se utilizó modelos cuárticos y el método de áreas iguales de Maxwell..

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

3.2.3 Trifluorometano (Refrigerante 23)

Los resultados obtenidos de volumen, entalpía y entropía específica para el trifluorometano en la región de saturación con modelos cuárticos y cúbicos son mostrados en las TABLAS XLIII, XLIV, XLV y XLVI; para el volumen del vapor saturado se observa que el modelo cúbico de PR-76 tiene la menor desviación media absoluta 2.01%; para el volumen del líquido saturado se observa que el modelo cuártico LSC-01 tiene la menor desviación media absoluta 1.17%, lo cual indica que estos modelos son los que mejor predicen el volumen específico. Estudiando la entalpía del vapor saturado y líquido saturado en forma conjunta (ver Tablas XLIV y XLVI) se observa que el modelo cuártico LBSC-96 y la ecuación de Antoine, presentan la menor desviación media absoluta 3.26% y 2.57% respectivamente, por lo tanto es el modelo que mejor predice las entalpías específicas del líquido y vapor saturado (ver Tabla XLIV), sin embargo cabe mencionar que el modelo cúbico SRK-72 presentó una desviación media absoluta de 2.17 % en la entalpía de vapor saturado pero 3.95 % en la entalpía de líquido saturado. Por otra parte la entropía de vapor saturado y líquido saturado en forma conjunta (ver Tablas XLV y XLVI) el modelo cuártico LSC-01 y la ecuación de Antoine, presentan la menor desviación media absoluta 4.64 % y 4.05 % respectivamente, cabe mencionar que el modelo cúbico SRK-72 presentó una desviación media absoluta de 4.38 % en la entropía del vapor saturado pero 6.95 % en la entropía de líquido saturado.

Para la región de vapor sobrecalentado los resultados de volumen, entalpía y entropía específica son mostrados en la TABLA XLVII y XLVIII, en las cuales se observa lo siguiente: para el volumen específico el modelo cúbico LBSC-96 tiene la menor desviación media absoluta de 1.22%, para la entalpía específica el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.69% y para la entropía específica el modelo cuártico LBSC-96 tiene la menor desviación

media absoluta 1.21%, lo anterior nos indica que estos modelos son los que mejor predicen respecto a los otros modelos.

También se presenta en la TABLA XLIX las estimaciones de presión de vapor y entalpías de vaporización obtenidas a partir de los modelos cuárticos, el modelo LBSC-96 presentó las menores desviaciones medias absolutas 1.23% y 6.67% respectivamente, por lo tanto es apropiado usar el modelo cuártico LSBC-96 en la predicción de la presión de vapor, pero para estimar calores de vaporización este modelo es inapropiado en el rango de temperatura 240 – 290 °K y de presión 0.9087 – 3.867 MPa.

TABLA XLIII

**ESTIMACIÓN DE VOLUMEN ESPECÍFICO EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL TRIFLUOROMETANO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96				Modelo cuártico LSC-01			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv.	VI (m3/kg)	%Desv.	Vg(m3/kg)	%Desv.	VI(m3/kg)	%Desv.
0.03616	175	0.5616000	0.0006720	0.5682419	1.18	0.0006412	-4.58	0.5684462	1.22	0.0006755	0.52
0.101325	191.13	0.2139000	0.0006950	0.2183000	2.06	0.0006930	-0.29	0.2185000	2.15	0.0006784	-2.39
0.34	215	0.0678600	0.0007400	0.0702800	3.57	0.0007400	0.00	0.0704200	3.77	0.0007240	-2.16
0.9087	240	0.0258300	0.0008070	0.0271890	5.26	0.0008126	0.69	0.0272920	5.66	0.0007997	-0.90
1.994	265	0.0112000	0.0009170	0.0120300	7.41	0.0009297	1.38	0.0121150	8.17	0.0009168	-0.02
2.998	280	0.0067910	0.0010310	0.0074779	10.11	0.0010382	0.70	0.0075650	11.40	0.0010297	-0.13
3.867	290	0.0046020	0.0011680	0.0052942	15.04	0.0011425	-2.18	0.0054013	17.37	0.0011440	-2.05
				AAD(%)	6.38	AAD(%)	1.40	AAD(%)	7.11	AAD(%)	1.17

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
		Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv.	VI (m3/kg)	%Desv.	Vg(m3/kg)	%Desv.	VI(m3/kg)	%Desv.
0.03616	175	0.5616000	0.0006720	0.5673700	1.03	0.0007751	15.34	0.5671560	0.99	0.0006872	2.26
0.101325	191.13	0.2139000	0.0006950	0.2176500	1.75	0.0007133	2.63	0.2174100	1.64	0.0007233	4.07
0.34	215	0.0678600	0.0007400	0.0695300	2.46	0.0007648	3.35	0.0695300	2.46	0.0007648	3.35
0.9087	240	0.0258300	0.0008070	0.0267980	3.75	0.0009616	19.15	0.0265300	2.71	0.0008472	4.98
1.994	265	0.0112000	0.0009170	0.0116700	4.20	0.0011277	22.98	0.0106900	-4.55	0.000994	8.40
2.998	280	0.0067910	0.0010310	0.0071098	4.69	0.0013173	27.77	0.0068527	0.91	0.0011657	13.06
3.867	290	0.0046020	0.0011680	0.004885	6.15	0.0015650	33.99	0.0046407	0.84	0.0013941	19.36
				AAD(%)	3.43	AAD(%)	17.89	AAD(%)	2.01	AAD(%)	7.93

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XLIV

**ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL TRIFLUOROMETANO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.
0.03616	175	281.56	30.91	282.77	0.43	28.46	-7.93	282.79	0.44	28.41	-8.09
0.101325	191.13	288.42	49.60	291.14	0.94	47.34	-4.56	291.20	0.96	47.19	-4.86
0.34	215	296.68	78.72	302.51	1.97	76.97	-2.22	302.70	2.03	76.69	-2.58
0.9087	240	302.28	112.15	311.85	3.17	110.57	-1.41	312.33	3.32	110.58	-1.40
1.994	265	303.27	148.38	316.46	4.35	149.16	0.53	317.40	4.66	148.63	0.17
2.998	280	299.14	173.20	315.00	5.30	174.70	0.87	316.37	5.76	173.99	0.46
3.867	290	290.85	194.69	310.19	6.65	193.78	-0.47	312.16	7.33	192.74	-1.00
				AAD(%)	3.26	AAD(%)	2.57	AAD(%)	3.50	AAD(%)	2.65

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.
0.03616	175	281.56	30.91	282.64	0.38	28.78	-6.89	283.34	0.63	29.55	-4.40
0.101325	191.13	288.42	49.60	290.85	0.84	47.93	-3.37	292.62	1.46	49.87	0.54
0.34	215	296.68	78.72	301.76	1.71	78.23	-0.62	306.96	3.47	83.95	6.64
0.9087	240	302.28	112.15	310.16	2.61	113.42	1.13	322.77	6.78	127.19	13.41
1.994	265	303.27	148.38	312.80	3.14	153.88	3.71	339.41	11.92	182.46	22.97
2.998	280	299.14	173.20	308.79	3.23	182.69	5.48	349.80	16.94	225.92	30.44
3.867	290	290.85	194.69	300.41	3.29	207.30	6.48	356.90	22.71	265.86	36.56
				AAD(%)	2.17	AAD(%)	3.95	AAD(%)	9.13	AAD(%)	16.42

* En la estimación de la entalpía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XLV

**ESTIMACIÓN DE ENTROPÍA ESPECÍFICA EN LA REGIÓN LÍQUIDO VAPOR PARA EL TRIFLUOROMETANO
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv.	Sl(kJ/kg K)	%Desv.	Sg(kJ/kg K)	%Desv.	Sl(kJ/kg K)	%Desv.
0.03616	175	1.6232	0.1909	1.6304	0.44	0.1772	-7.18	1.6304	0.44	0.1768	-7.39
0.101325	191.13	1.5423	0.2928	1.5576	0.99	0.2821	-3.65	1.5578	1.00	0.2811	-4.00
0.34	215	1.4492	0.4354	1.4808	2.18	0.4318	-0.83	1.4813	2.22	0.4301	-1.22
0.9087	240	1.3727	0.5805	1.4256	3.85	0.5868	1.08	1.4266	3.93	0.5861	0.96
1.994	265	1.3048	0.7203	1.3827	5.97	0.7514	4.32	1.3849	6.14	0.7481	3.86
2.998	280	1.2575	0.8077	1.3570	7.91	0.8560	5.98	1.3600	8.15	0.8515	5.42
3.867	290	1.2113	0.8797	1.3359	10.29	0.9345	6.23	1.3397	10.60	0.9280	5.48
				AAD(%)	4.52	AAD(%)	4.18	AAD(%)	4.64	AAD(%)	4.05

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72*				Modelo cúbico PR-76*			
		Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv.	Sl(kJ/kg K)	%Desv.	Sg(kJ/kg K)	%Desv.	Sl(kJ/kg K)	%Desv.
0.03616	175	1.6232	0.1909	1.6301	0.43	0.1795	-5.97	1.6310	0.48	0.1808	-5.29
0.101325	191.13	1.5423	0.2928	1.5572	0.97	0.2862	-2.25	1.5594	1.11	0.2893	-1.20
0.34	215	1.4492	0.4354	1.4799	2.12	0.4402	1.10	1.4863	2.56	0.4491	3.15
0.9087	240	1.3727	0.5805	1.4242	3.75	0.6047	4.17	1.4391	4.84	0.6242	7.53
1.994	265	1.3048	0.7203	1.3809	5.83	0.7812	8.45	1.4117	8.19	0.8195	13.77
2.998	280	1.2575	0.8077	1.3545	7.71	0.9038	11.90	1.4014	11.44	0.9590	18.73
3.867	290	1.2113	0.8797	1.3307	9.86	1.0096	14.77	1.3961	15.26	1.0821	23.01
				AAD(%)	4.38	AAD(%)	6.95	AAD(%)	6.27	AAD(%)	10.38

* En la estimación de la entropía del líquido se utilizó la ecuación de Antoine para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XLVI

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA Y ENTROPÍA DEL LÍQUIDO SATURADO PARA EL TRIFLUOROMETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	% Desv.
0.03616	175	281.56	30.91	282.77	0.43	22.83	-26.14	282.79	0.44	35.20	13.88
0.101325	191.13	288.42	49.60	291.14	0.94	48.17	-2.88	291.20	0.96	45.85	-7.56
0.34	215	296.68	78.72	302.51	1.97	75.09	-4.61	302.70	2.03	74.86	-4.90
0.9087	240	302.28	112.15	311.85	3.17	110.38	-1.58	312.33	3.32	110.47	-1.50
1.994	265	303.27	148.38	316.46	4.35	150.72	1.58	317.40	4.66	150.56	1.47
2.998	280	299.14	173.20	315.00	5.30	178.41	3.01	316.37	5.76	178.34	2.97
3.867	290	290.85	194.69	310.19	6.65	199.12	2.27	312.16	7.33	199.64	2.54
				AAD(%)	3.26	AAD(%)	6.01	AAD(%)	3.50	AAD(%)	4.97

Presión (MPa)	Temperatura (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
		Sg(kJ/kg°K)	SI(kJ/kg°K)	Sg(kJ/kg°K)	%Desv.	SI(kJ/kg°K)	%Desv.	Sg(kJ/kg°K)	%Desv.	SI(kJ/kg°K)	%Desv.
0.03616	175	1.6232	0.1909	1.6304	0.44	0.1450	-24.04	1.6304	0.44	0.2156	12.94
0.101325	191.13	1.5423	0.2928	1.5576	0.99	0.2864	-2.19	1.5578	1.00	0.2741	-6.39
0.34	215	1.4492	0.4354	1.4808	2.18	0.4231	-2.82	1.4813	2.22	0.4216	-3.17
0.9087	240	1.3727	0.5805	1.4256	3.85	0.5860	0.95	1.4266	3.93	0.5856	0.88
1.994	265	1.3048	0.7203	1.3827	5.97	0.7573	5.14	1.3849	6.14	0.7554	4.87
2.998	280	1.2575	0.8077	1.3570	7.91	0.8692	7.61	1.3600	8.15	0.8670	7.34
3.867	290	1.2113	0.8797	1.3359	10.29	0.9530	8.33	1.3397	10.60	0.9517	8.18
				AAD(%)	4.52	AAD(%)	7.30	AAD(%)	4.64	AAD(%)	6.25

* En la estimación de la entalpía y entropía del líquido se utilizó modelos cuarticos y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA XLVII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL TRIFLUOROMETANO EN LA REGIÓN DE VAPOR SOBRECALENTADO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.07	300	0.50640	363.46	1.8949	0.50646	0.01	363.61	0.04	1.8963	0.07
0.4	300	0.08649	360.34	1.6803	0.08661	0.14	361.05	0.20	1.6863	0.36
1	300	0.03297	354.33	1.5567	0.03314	0.52	356.33	0.56	1.5718	0.97
4	300	0.00544	310.40	1.2754	0.00580	6.64	322.13	3.78	1.3631	6.88
0.101325	600	0.70290	639.43	2.4766	0.70814	0.75	640.17	0.12	2.4767	0.00
0.7	600	0.10150	638.21	2.2453	0.10148	-0.02	639.03	0.13	2.2459	0.03
4	600	0.01762	631.64	2.0287	0.01754	-0.44	632.92	0.20	2.0317	0.15
					AAD(%)	1.22	AAD(%)	0.72	AAD(%)	1.21

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LSC-01					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.07	300	0.50640	363.46	1.8949	0.50648	0.02	363.62	0.04	1.8964	-0.08
0.4	300	0.08649	360.34	1.6803	0.08663	0.16	361.12	0.22	1.6864	-0.36
1	300	0.03297	354.33	1.5567	0.03314	0.52	356.33	0.56	1.5719	-0.98
4	300	0.00544	310.40	1.2754	0.00587	7.90	323.44	4.20	1.3656	-7.07
0.101325	600	0.70290	639.43	2.4766	0.70283	-0.01	640.17	0.12	2.4767	0.00
0.7	600	0.10150	638.21	2.2453	0.10150	0.00	639.02	0.13	2.2458	-0.02
4	600	0.01762	631.64	2.0287	0.01757	-0.28	632.88	0.20	2.0313	-0.13
					AAD(%)	1.27	AAD(%)	0.78	AAD(%)	1.24

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XLVIII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL TRIFLUOROMETANO EN LA REGIÓN DE VAPOR SOBREALENTADO USANDO MODELOS CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico SRK-72					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.07	300	0.50640	363.46	1.8949	0.50639	0.00	363.55	0.02	1.8964	0.08
0.4	300	0.08649	360.34	1.6803	0.08653	0.05	360.72	0.11	1.6862	0.35
1	300	0.03297	354.33	1.5567	0.03537	7.28	363.30	2.53	1.5803	1.52
4	300	0.00544	310.40	1.2754	0.00560	2.90	315.44	1.62	1.3609	6.70
0.101325	600	0.70290	639.43	2.4766	0.70312	0.03	640.18	0.12	2.4767	0.00
0.7	600	0.10150	638.21	2.2453	0.10179	0.29	639.09	0.14	2.2460	0.03
4	600	0.01762	631.64	2.0287	0.01787	1.42	633.33	0.27	2.0324	0.18
					AAD(%)	1.71	AAD(%)	0.69	AAD(%)	1.27

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico PR-76					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv	Hg(kJ/kg)	%Desv	Sg(kJ/kg K)	%Desv
0.07	300	0.50640	363.46	1.8949	0.50610	-0.06	364.14	0.19	1.8970	-0.11
0.4	300	0.08649	360.34	1.6803	0.08877	2.64	364.14	1.05	1.6900	-0.58
1	300	0.03297	354.33	1.5567	0.04187	26.99	364.14	2.77	1.5812	-1.57
4	300	0.00544	310.40	1.2754	0.00536	-1.47	364.14	17.31	1.4166	-11.07
0.101325	600	0.70290	639.43	2.4766	0.70290	0.00	640.37	0.15	2.4769	-0.01
0.7	600	0.10150	638.21	2.2453	0.10158	0.08	640.37	0.34	2.2474	-0.09
4	600	0.01762	631.64	2.0287	0.01767	0.28	640.36	1.38	2.0404	-0.58
					AAD(%)	4.50	AAD(%)	3.31	AAD(%)	2.00

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA XLIX

ESTIMACIÓN DE PRESIÓN DE VAPOR Y CALOR DE VAPORIZACIÓN PARA EL TRIFLUOROMETANO USANDO MODELOS CUÁRTICOS

Reportado por Reynolds			Modelo cuártico LBSC-96*				Modelo cuártico LSC-01*			
Presión (MPa)	Temperatura (K)	Hvap (kJ/kg)	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv	Psat(MPa)	%Desv	Hvap(kJ/kg)	%Desv
0.03616	175	250.65	0.03530	-2.38	259.93	3.70	0.03660	1.22	247.59	-1.22
0.101325	191.13	238.82	0.09960	-1.70	242.96	1.73	0.10170	0.37	245.34	2.73
0.34	215	217.96	0.33710	-0.85	227.42	4.34	0.24500	-27.94	227.84	4.53
0.9087	240	190.13	0.90690	-0.20	201.46	5.96	0.92630	1.94	201.85	6.16
1.994	265	154.89	1.99020	-0.19	165.74	7.00	1.99400	0.00	166.84	7.72
2.998	280	125.94	2.96770	-1.01	136.59	8.46	3.03640	1.28	138.03	9.60
3.867	290	96.16	3.77940	-2.27	111.07	15.51	3.87810	0.29	112.53	17.02
			AAD(%)	1.23	AAD(%)	6.67	AAD(%)	4.72	AAD(%)	7.00

* En la estimación de la presión de saturación y el calor de vaporización se utilizó modelos cuárticos y el método de áreas iguales de Maxwell.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

3.3 Mezcla

3.2.3 Aire

Los resultados obtenidos de volumen, entalpía y entropía específica para el aire en la región de saturación con modelos cuárticos y cúbicos se muestran en la TABLAS L, LI y LII respectivamente; para el volumen del vapor saturado se observa que el modelo cúbico de SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 0.49%; para el volumen del líquido saturado se observa que también el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta 4.47%, lo cual indica que este modelo es el que mejor predice el volumen específico (ver Tabla L). Evaluando la entalpía del vapor saturado y líquido saturado en forma conjunta se observa que el modelo cuártico LSC-01 y la ecuación de Gómez-Nieto-thodos para calcular el calor de vaporización, presentan las menor desviación media absoluta 0.88% y 3.02%, respectivamente, por lo tanto este modelo es el que mejor predice las entalpías específicas del líquido y vapor saturado. Por otra parte la entropía de vapor saturado y líquido saturado el modelo cuártico LSC-01 y obteniendo la entropía de vaporización con este mismo modelo usando la regla de áreas iguales de Maxwell presenta la menor desviación media absoluta 2.17% y 3.77% respectivamente.

Para la región de vapor sobrecalentado los resultados de volumen, entalpía y entropía específica son mostrados en la TABLA LIII, en la cual se observa lo siguiente: para el volumen específico el modelo cúbico SRK-72 tiene la menor desviación media absoluta de 0.01%, para la entalpía específica el modelo cuártico PR-76 tiene la menor desviación media absoluta 0.35% y para la entropía específica el modelo cúbico PR-76 tiene la menor desviación media absoluta 1.19%, lo anterior nos indica que estos modelos son los que mejor predicen respecto a los otros modelos.

También se presenta en la TABLA LIV las estimaciones de presión de vapor y entalpías de vaporización obtenidas a partir del modelo cuártico LSC-01 las cuales fueron de 2.03% y 2.41% respectivamente (%AAD).

TABLA L

ESTIMACIÓN DE VOLUMEN ESPECÍFICO EN LA REGIÓN LÍQUIDO-VAPOR PARA EL AIRE** USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. Gas (K)	Temp. Liq. (K)	Reportado por Reynolds		Modelo Cuártico LSC-01				Modelo cúbico SRK-72			
			Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv	Vg(m3/kg)	%Desv	VI (m3/kg)	%Desv
0.1013	81.8	78.8	0.2231000	0.0011380	0.2244820	0.62	0.0010704	-5.94	0.2237488	0.29	0.0011397	0.15
0.14	84.7	82.0	0.1654000	0.0011580	0.1666367	0.75	0.0010877	-6.07	0.1659725	0.35	0.0011618	0.33
0.3	92.4	90.2	0.0812500	0.0012160	0.0820269	0.96	0.0011499	-5.44	0.0815010	0.31	0.0012285	1.03
0.4	95.8	93.6	0.0618800	0.0012440	0.0626070	1.17	0.0011809	-5.07	0.0621275	0.40	0.0012615	1.41
0.6	100.9	98.9	0.0418800	0.0012940	0.0424448	1.35	0.0012327	-4.74	0.0420177	0.33	0.0013212	2.10
1	108.2	106.3	0.0251500	0.0013820	0.0255905	1.75	0.0013191	-4.55	0.0252169	0.27	0.0014279	3.32
1.6	115.9	114.2	0.0151900	0.0015100	0.0156008	2.70	0.0014468	-4.19	0.0152508	0.40	0.0015914	5.39
2	119.8	118.4	0.0117000	0.0016030	0.0120822	3.27	0.0015366	-4.14	0.0117266	0.23	0.0017158	7.04
2.5	124.0	122.9	0.0087460	0.0017390	0.0091644	4.78	0.0016644	-4.29	0.0087901	0.50	0.0019044	9.51
3	127.7	127.0	0.0066000	0.0019190	0.0071271	7.99	0.0018267	-4.81	0.0067208	1.83	0.0021962	14.45
					AAD(%)	2.53	AAD(%)	4.92	AAD(%)	0.49	AAD(%)	4.47

* En la estimación de los volúmenes específicos de vapor y líquido saturado fue necesario para cada presión de saturación resolver dos ecuaciones cúbicas o cuárticas según el caso, para obtener a la temperatura de la fase gas el volumen específico del vapor saturado y a la temperatura del líquido el volumen del líquido saturado.

** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA L (CONTINÚA)

Presión (MPa)	Temp. Gas (K)	Temp. Liq. (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico PR-76*				
			Vg (m3/kg)	VI (m3/kg)	Vg(m3/kg)	%Desv.	VI (m3/kg)	%Desv.	
0.1013	81.8	78.8	0.2231000	0.0011380	0.2234313	0.15	0.0010094	-11.30	
0.14	84.7	82.0	0.1654000	0.0011580	0.1656461	0.15	0.0010283	-11.20	
0.3	92.4	90.2	0.0812500	0.0012160	0.0811566	-0.11	0.0010856	-10.72	
0.4	95.8	93.6	0.0618800	0.0012440	0.0617773	-0.17	0.0011141	-10.44	
06	100.9	98.9	0.0418800	0.0012940	0.0416615	-0.52	0.0011661	-9.88	
1	108.2	106.3	0.0251500	0.0013820	0.0248568	-1.17	0.0012600	-8.83	
1.6	115.9	114.2	0.0151900	0.0015100	0.0148933	-1.95	0.0014062	-6.87	
2	119.8	118.4	0.0117000	0.0016030	0.0113742	-2.78	0.0015189	-5.25	
2.5	124.0	122.9	0.0087460	0.0017390	0.0084473	-3.42	0.0016923	-2.69	
3	127.7	127.0	0.0066000	0.0019190	0.0063925	-3.14	0.0019642	2.36	
						AAD(%)	1.36	AAD(%)	7.95

* En la estimación de los volúmenes específicos de vapor y líquido saturado fue necesario para cada presión de saturación resolver dos ecuaciones cúbicas o cuárticas según el caso, para obtener a la temperatura de la fase gas el volumen específico del vapor saturado y a la temperatura del líquido el volumen del líquido saturado.

** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA LI

ESTIMACIÓN DE ENTALPÍA DE VAPOR Y LÍQUIDO SATURADO PARA EL AIRE* USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temp. Gas (°K)	Temp. Liq. (K)	Reportado por Reynolds		LSC-01+ Gomez-Nieto-Thodos*				Modelo Cuártico LSC-01**			
			Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.
0.1013	81.8	78.8	238.79	33.28	236.02	-1.16	32.64	-1.92	236.02	-1.16	34.88	4.81
0.14	84.7	82.0	240.89	37.75	238.34	-1.06	37.93	0.48	238.34	-1.06	40.34	6.86
0.3	92.4	90.2	245.71	52.08	243.75	-0.80	53.55	2.82	243.75	-0.80	56.43	8.35
0.4	95.8	93.6	247.35	59.04	245.76	-0.64	61.19	3.64	245.76	-0.64	63.61	7.74
0.6	100.9	98.9	249.24	70.48	248.12	-0.45	73.00	3.58	248.12	-0.45	74.80	6.13
1	108.2	106.3	250.26	88.09	249.98	-0.11	91.45	3.81	249.98	-0.11	91.69	4.09
1.6	115.9	114.2	248.38	108.34	249.32	0.38	112.55	3.89	249.32	0.38	111.13	2.58
2	119.8	118.4	245.60	119.91	247.24	0.67	124.30	3.66	247.24	0.67	122.19	1.90
2.5	124.0	122.9	240.44	133.53	243.36	1.21	138.71	3.88	243.36	1.21	135.96	1.82
3	127.7	127.0	232.75	147.47	238.03	2.27	151.19	2.52	238.03	2.27	148.80	0.90
					AAD(%)	0.88	AAD(%)	3.02	AAD(%)	0.88	AAD(%)	4.52

* En la estimación de la entalpía del líquido se utilizó la ecuación de Gómez – Nieto – Thodos para estimar el calor de vaporización de la mezcla a la temperatura del aire en la fase gas y posteriormente calcular el cambio de entalpía en la fase líquida desde temperatura del gas a la temperatura del líquido.

** En la estimación de la entalpía del líquido se utilizó la ecuación LSC-01 y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización de la mezcla a la temperatura del aire en la fase gas y posteriormente calcular el cambio de entalpía en la fase líquida desde la temperatura del gas a la temperatura del líquido.

*** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA LI (CONTINÚA)

Presión (MPa)	Temp. Gas (K)	Temp. Liq. (K)	Reportado por Reynolds		PR-76 + Gómez-Nieto-Thodos*				SRK-72 + Gómez-Nieto-Thodos*				
			Hg(kJ/kg)	HI(kJ/kg)	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	HI(kJ/kg)	%Desv.	
0.1013	81.8	78.8	238,79	33.28	237.77	-0.43	35.32	6.13	235.70	-1.29	33.07	-0.63	
0.14	84.7	82.0	240,89	37.75	240.69	-0.08	41.44	9.77	237.94	-1.22	38.44	1.83	
0.3	92.4	90.2	245.71	52.08	248.44	1.11	60.18	15.55	243.02	-1.09	54.27	4.21	
0.4	95.8	93.6	247.35	59.04	251.87	1.83	69.66	17.99	244.86	-1.01	62.01	5.03	
0.6	100.9	98.9	249.24	70.48	257.00	3.11	85.00	20.60	246.89	-0.94	74.00	4.99	
1	108.2	106.3	250.26	88.09	264.35	5.63	110.33	25.25	248.13	-0.85	92.83	5.38	
1.6	115.9	114.2	248.38	108.34	272.08	9.54	141.94	31.01	246.53	-0.74	114.67	5.84	
2	119.8	118.4	245.60	119.91	276.00	12.38	161.34	34.55	243.72	-0.77	127.19	6.07	
2.5	124.0	122.9	240.44	133.53	280.22	16.54	186.43	39.62	238.71	-0.72	143.01	7.10	
3	127.7	127.0	232.75	147.47	283.94	21.99	211.91	43.70	231.74	-0.43	158.07	7.19	
						AAD(%)	7.27	AAD(%)	24.42	AAD(%)	0.91	AAD(%)	4.83

* En la estimación de la entalpía del líquido se utilizó la ecuación de Gómez – Nieto – Thodos para estimar el calor de vaporización de la mezcla a la temperatura del aire en la fase gas y posteriormente calcular el cambio de entalpía en la fase líquida desde temperatura del gas a la temperatura del líquido.

*** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA LII

ESTIMACIÓN DE ENTROPÍA DE VAPOR Y LÍQUIDO SATURADO PARA EL AIRE*** USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS

Presión (MPa)	Temp. Gas (K)	Temp. Liq. (K)	Reportado por Reynolds		LSC-01+ Gomez-Nieto-Thodos*				Modelo Cuártico LSC-01**			
			Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg °K)	Sg(kJ/kg K)	%Desv.	Sl(kJ/kg K)	%Desv.	Sg(kJ/kg K)	%Desv.	Sl(kJ/kg K)	%Desv.
0.1013	81.8	78.8	3.2111	0.6517	3.1675	-1.36	0.54230	-16.79	3.1675	-1.36	0.57025	-12.50
0.14	84.7	82.0	3.1474	0.7097	3.1086	-1.23	0.62075	-12.53	3.1086	-1.23	0.64926	-8.52
0.3	92.4	90.2	2.9971	0.8769	2.9726	-0.82	0.82058	-6.42	2.9726	-0.82	0.85179	-2.86
0.4	95.8	93.6	2.9394	0.9512	2.9235	-0.54	0.90504	-4.85	2.9235	-0.54	0.93021	-2.21
0.6	100.9	98.9	2.8556	1.0665	2.85338	-0.08	1.03608	-2.85	2.85338	-0.08	1.05392	-1.18
1	108.2	106.3	2.7423	1.2305	2.7648	0.82	1.22230	-0.67	2.7648	0.82	1.22454	-0.48
1.6	115.9	114.2	2.6215	1.4040	2.6795	2.21	1.42630	1.59	2.6795	2.21	1.41412	0.72
2	119.8	118.4	2.5526	1.4973	2.6341	3.19	1.54140	2.95	2.6341	3.19	1.52381	1.77
2.5	124.0	122.9	2.4689	1.6030	2.5843	4.67	1.66806	4.06	2.5843	4.67	1.64586	2.67
3	127.7	127.0	2.3775	1.7077	2.53810	6.75	1.80775	5.86	2.53810	6.75	1.789	4.76
					AAD(%)	2.17	AAD(%)	5.86	AAD(%)	2.17	AAD(%)	3.77

* En la estimación de la entropía del líquido se utilizó la ecuación de Gómez – Nieto – Thodos para estimar el calor de vaporización de la mezcla a la temperatura del aire en la fase gas y posteriormente calcular el cambio de entalpía en la fase líquida desde temperatura del gas a la temperatura del líquido. Además se consideró la entropía de mezclado 0.174519 KJ/kg °K según Reynolds.

** En la estimación de la entropía del líquido se utilizó la ecuación LSC-01 y el método de áreas iguales de Maxwell para estimar el calor de vaporización de la mezcla a la temperatura del aire en la fase gas y posteriormente calcular el cambio de entropía en la fase líquida desde la temperatura del gas a la temperatura del líquido. Además se consideró la entropía de mezclado de 0.174519 KJ/kg °K según Reynolds.

***La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA LII (CONTINÚA)

Presión (MPa)	Temp. Gas (K)	Temp. Liq. (K)	Reportado por Reynolds		Modelo cúbico SRK-72				Modelo cúbico PR-76			
			Sg(kJ/kg K)	Sl(kJ/kg°K)	Sg(kJ/kg°K)	%Desv.	Sl(kJ/kg°K)	%Desv.	Sg(kJ/kg K)	%Desv.	Sl(kJ/kg K)	%Desv.
0.1013	81.8	78.8	3.2111	0.6517	3.16665	-1.38	0.55057	-15.52	3.17086	-1.25	0.55692	-14.54
0.14	84.7	82.0	3.1474	0.7097	3.10753	-1.27	0.6305	-11.16	3.11308	-1.09	0.63887	-9.98
0.3	92.4	90.2	2.9971	0.8769	2.97131	-0.86	0.83496	-4.78	2.98167	-0.51	0.85056	-3.00
0.4	95.8	93.6	2.9394	0.9512	2.92217	-0.59	0.92172	-3.10	2.93569	-0.13	0.94181	-0.99
0.6	100.9	98.9	2.8556	1.0665	2.85228	-0.12	1.05717	-0.87	2.87147	0.56	1.08503	1.74
1	108.2	106.3	2.7423	1.2305	2.76488	0.82	1.25212	1.76	2.79507	1.92	1.29422	5.18
1,6	115.9	114.2	2.6215	1.404	2.70590	3.22	1.49516	6.49	2.72922	4.11	1.53327	9.21
2	119.8	118.4	2.5526	1.4973	2.63940	3.40	1.60016	6.87	2.69843	5.71	1.67484	11.86
2.5	124.0	122.9	2.4689	1.603	2.59309	5.03	1.74903	9.11	2.6689	8.10	1.84024	14.80
3	127.7	127.0	2.3775	1.7077	2.55046	7.27	1.92328	12.62	2.64616	11.30	2.03179	18.98
					AAD(%)	2.40	AAD(%)	7.23	AAD(%)	3.47	AAD(%)	9.03

* En la estimación de la entropía del líquido se utilizó la ecuación de Gómez – Nieto – Thodos para estimar el calor de vaporización de la mezcla a la temperatura del aire en la fase gas y posteriormente calcular el cambio de entropía en la fase líquida desde temperatura del gas a la temperatura del líquido. Además se consideró la entropía de mezclado de 0.174519 KJ/kg °K según Reynolds.

*** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA LIII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DEL AIRE EN LA REGIÓN DE VAPOR SOBREALENTADO USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y CÚBICOS**

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo Cuártico LSC-01*					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg°K)	Vg(m3/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	Sg(kJ/kg K)	%Desv.
0.14	200	0.40880	359.12	4.0326	0.40871	-0.02	355.71	-0.95	3.9742	-1.45
0.4	200	0.14220	357.85	3.7266	0.14214	-0.04	354.39	-0.97	3.6698	-1.52
0.7	200	0.08069	356.37	3.5606	0.08062	-0.09	352.87	-0.98	3.5058	-1.54
0.4	900	0.64680	1092.41	5.2857	0.64676	-0.01	1089.40	-0.28	5.2268	-1.11
0.7	900	0.37000	1092.56	5.1250	0.36993	-0.02	1089.55	-0.28	5.0658	-1.16
0.3	1000	0.95780	1205.31	5.4873	0.95781	0.00	1202.43	-0.24	5.4287	-1.07
0.14	1000	2.05100	1205.21	5.7062	2.05147	0.02	1202.33	-0.24	5.6477	-1.03
0.2	800	1.14900	981.47	5.3543	1.14912	0.01	978.39	-0.31	5.2954	-1.10
0.7	800	0.32890	981.65	4.9943	0.32888	-0.01	978.58	-0.31	4.9316	-1.26
					AAD(%)	0.02	AAD(%)	0.51	AAD(%)	1.25

* En la estimación de la entropía del gas se considera la entropía de mezclado 0.174519 KJ/kg °K según Reynolds.

** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA LIII (CONTINÚA)

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico SRK-72*					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg°K)	Vg(m3/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	Sg(kJ/kg K)	%Desv.
0.14	200	0.40880	359.12	4.0326	0.40880	0.00	355.68	-0.96	3.9746	-1.44
0.4	200	0.14220	357.85	3.7266	0.14223	0.02	354.33	-0.98	3.6710	-1.49
0.7	200	0.08069	356.37	3.5606	0.08071	0.02	352.76	-1.01	3.5078	-1.48
0.4	900	0.64680	1092.41	5.2857	0.64682	0.00	1089.50	-0.27	5.0528	-4.41
0.7	900	0.37000	1092.56	5.1250	0.36990	-0.03	1089.73	-0.26	5.0666	-1.14
0.3	1000	0.95780	1205.31	5.4873	0.95783	0.00	1202.50	-0.23	5.4290	-1.06
0.14	1000	2.05100	1205.21	5.7062	2.05149	0.02	1202.37	-0.24	5.6478	-1.02
0.2	800	1.14900	981.47	5.3543	1.14919	0.02	978.45	-0.31	5.2957	-1.09
0.7	800	0.32890	981.65	4.9943	0.32895	0.02	978.75	-0.30	4.9359	-1.17
					AAD(%)	0.01	AAD(%)	0.51	AAD(%)	1.59

* En la estimación de la entropía del gas se considera la entropía de mezclado 0.174519 KJ/kg °K según Reynolds

** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \left(\frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right) \right| 100\%$$

TABLA LIII (CONTINÚA)

Presión (MPa)	Temp. (K)	Reportado por Reynolds			Modelo cúbico PR-76*					
		Vg(m3/kg)	Hg(kJ/kg)	Sg(kJ/kg K)	Vg(m3/kg)	%Desv.	Hg(kJ/kg)	%Desv.	Sg(kJ/kg K)	%Desv.
0.14	200	0.40880	359.12	4.0326	0.40842	-0.09	355.72	-0.95	3.9757	-1.41
0.4	200	0.14220	357.85	3.7266	0.14185	-0.25	356.41	-0.40	3.6743	-1.40
0.7	200	0.08069	356.37	3.5606	0.08034	-0.43	356.41	0.01	3.5137	-1.32
0.4	900	0.64680	1092.41	5.2857	0.64667	-0.02	1089.21	-0.29	5.2273	-1.10
0.7	900	0.37000	1092.56	5.1250	0.36984	-0.04	1089.21	-0.31	5.0667	-1.14
0.3	1000	0.95780	1205.31	5.4873	0.95771	-0.01	1202.25	-0.25	5.4290	-1.06
0.14	1000	2.05100	1205.21	5.7062	2.05137	0.02	1202.25	-0.25	5.6478	-1.02
0.2	800	1.14900	981.47	5.3543	1.14903	0.00	978.32	-0.32	5.2958	-1.09
0.7	800	0.32890	981.65	4.9943	0.32878	-0.04	978.32	-0.34	4.9361	-1.16
					AAD(%)	0.10	AAD(%)	0.35	AAD(%)	1.19

* En la estimación de la entropía del gas se considera la entropía de mezclado 0.174519 KJ/kg °K según Reynolds

** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

TABLA LIV

ESTIMACIÓN DE PRESIONES DE VAPOR Y CALORES DE VAPORIZACIÓN PARA AIRE*
USANDO MODELOS CUÁRTICOS Y EMPÍRICOS**

Reportado por Reynolds				LSC-01*				Gomez-Nieto-Thodos**	
Presión (MPa)	Temp. Gas (K)	Temp. Liq. (K)	Hvap (kJ/kg)	Psat(MPa)	%Desv.	Hvap(kJ/kg)	%Desv.	Hvap(kJ/kg)	%Desv.
0.1013	81.8	78.8	205.51	0.10720	5.82	201.14	-2.13	203.38	-1.04
0.14	84.7	82.0	203.14	0.14940	6.71	198.00	-2.53	200.41	-1.34
0.3	92.4	90.2	193.63	0.31820	6.07	187.32	-3.26	190.20	-1.77
0.4	95.8	93.6	188.31	0.42190	5.47	182.15	-3.27	184.57	-1.99
0.6	100.9	98.9	178.76	0.62600	4.33	173.32	-3.04	175.12	-2.04
1	108.2	106.3	162.17	1.02470	2.47	158.29	-2.39	158.53	-2.24
1.6	115.9	114.2	140.04	1.61800	1.13	138.19	-1.32	136.77	-2.34
2	119.8	118.4	125.69	2.00750	0.37	125.05	-0.51	122.94	-2.19
2.5	124.0	122.9	106.91	2.49490	-0.20	107.40	0.46	104.65	-2.11
3	127.7	127.0	85.28	2.99800	-0.07	89.23	4.63	86.84	1.83
				AAD(%)	2.03	AAD(%)	2.41	AAD(%)	1.66

* En la estimación de la entalpía de vaporización y la presión de saturación se usó la ecuación de cuártica LSC-01 y el método de áreas iguales de Maxwell. En el cálculo de la presión de vapor, se calculó a temperatura promedio de la fase gas y líquido.

** En la estimación de la entalpía de vaporización se usó la ecuación de Gómez – Nieto – Thodos.

*** La composición molar del aire considerada en el estudio fue: N_2 - 0.7809 ; O_2 - 0.2095 ; Ar - 0.0096.

$$AAD(\%) = \frac{1}{N_d} \sum_{i=1}^{N_d} \left| \frac{y_i^{calc} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right| 100\%$$

En la TABLA LV se presentan los % de desviación medios absolutos (% AAD) obtenidos de las estimaciones en la región líquido-vapor, por sustancia y por propiedad termodinámica, esta tabla presenta un resumen de los resultados obtenidos de cada ecuación cúartica y cúbica estudiada, en esta tabla se puede observar en forma general que el modelo cúartico LSC-01 y la ecuación de Antoine para la estimación de entalpía de vaporización en el caso de compuestos puros así como la ecuación de Gómez–Nieto–Thodos en la mezcla, son las ecuaciones que presentaron el menor valor promedio de los % de desviación medios absolutos (% AAD), este valor fue de 3.85 %.

Para compuestos puros no-polares (oxígeno, Argón y etano) el menor valor promedio de los % de desviación medios absolutos (% AAD) obtenido fue el modelo LSC-01 y la ecuación de Antoine para la estimación de entalpía de vaporización, este valor fue de 3.55 %, como valor promedio de las tres sustancias, es importante hacer notar que en el caso del etano la ecuación que menor valor promedio de los % de desviación medios absolutos (%AAD) lo presentó el modelo cúartico LBSC-96 y la ecuación de Antoine para la estimación de la entalpía de vaporización, este valor fue de 2.48 %.

Para compuestos puros polares (Trifluoroclorometano, agua y trifluorometano) el menor valor promedio de los % de desviación medios absolutos (% AAD) obtenido fue el modelo LSC-01 y la ecuación de Antoine para la estimación de la entalpía de vaporización, este valor fue de 4.36 %, como valor promedio de las tres sustancias, sin embargo para los compuestos trifluoroclorometano y trifluorometano se predicen mejor con el modelo cúartico LBSC-96 y la ecuación de Antoine para la estimación de la entalpía de vaporización, 3.47 % y 3.72 respectivamente. En resumen lo anteriormente mencionado nos indica que los modelos cúarticos LSC-01 y LBSC-96 presentan una mejora respecto a los modelos cúbicos SRK-72 y PR-76 en la región de líquido saturado y vapor saturado en las condiciones de presión y temperatura presentados así como en los compuestos estudiados.

TABLA LV

VALORES PROMEDIO DE LOS % DE DESVIACIÓN MEDIOS ABSOLUTOS (% AAD) PARA VOLUMEN, ENTALPÍA Y ENTROPÍA EN LA REGIÓN DE LÍQUIDO Y VAPOR SATURADO

1.- Ecuación de SBC-94 + Ecuación de Antoine y Wagner (según caso) para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	0	0	0	0	11
Propiedad	O_2	Ar	C_2H_6	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	2.24	1.89	3.09					2.41
VI	3.25	3.75	3.46					3.49
Hg	1.31	0.96	1.28					1.18
HI	2.70	6.68	1.72					3.70
Sg	2.86	4.49	2.44					3.26
SI	6.51	12.52	2.86					7.30
	3.15	5.05	2.48					3.56
	Compuestos no-polares		3.56					

2.- Ecuación de SBC-94 + SBC-94 y la Regla de Maxwell para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	0	0	0	0	11
Propiedad	O_2	Ar	C_2H_6	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	2.24	1.89	3.09					2.41
VI	3.25	3.75	3.46					3.49
Hg	1.31	0.96	1.28					1.18
HI	14.52	6.68	17.34					12.85
Sg	2.86	4.49	2.44					3.26
SI	15.13	12.52	17.18					14.94
	6.55	5.05	7.47					6.36
	Compuestos no-polares		6.36					

TABLA LV (CONTINÚA)

3.- Ecuación de LBSC-96 + Ecuación de Antoine y Wagner (según caso) para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	7	6	7	0	31
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	<i>Aire</i>	% Valor Promedio
Vg	2.24	3.09	1.89	5.60	8.73	6.38		4.66
VI	3.25	3.46	3.75	2.79	17.41	1.40		5.34
Hg	1.31	1.28	0.96	2.80	3.84	3.26		2.24
HI	2.70	1.72	6.68	0.96	1.50	2.57		2.69
Sg	2.86	2.44	4.49	4.76	3.15	4.52		3.70
SI	6.51	2.86	12.52	3.90	1.96	4.18		5.32
	3.15	2.48	5.05	3.47	6.10	3.72		3.99
	Compuestos no-polares		3.56	Compuestos polares		4.43		

4.- Ecuación de LBSC-96 + LBSC-96 y la Regla de Maxwell para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	7	6	7	0	31
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	<i>Aire</i>	% Valor Promedio
Vg	2.24	3.09	1.89	5.60	8.73	6.38		4.66
VI	3.25	3.46	3.75	2.79	17.41	1.40		5.34
Hg	1.31	1.28	0.96	2.80	3.84	3.26		2.24
HI	14.52	17.34	6.68	3.21	21.17	6.01		11.49
Sg	2.86	2.44	4.49	4.76	3.15	4.52		3.70
SI	15.13	17.18	12.52	5.90	19.90	7.30		12.99
	6.55	7.47	5.05	4.18	12.37	4.81		6.74
	Compuestos no-polares		6.36	Compuestos polares		7.12		

TABLA LV (CONTINÚA)

5.- Ecuación de LSC-01 + Ecuación de Antoine y Wagner (según caso) para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	7	6	7	10	41
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	<i>Aire</i>	% Valor Promedio
Vg	2.65	3.35	2.48	5.71	9.18	7.11	2.53	4.72
VI	4.06	5.13	3.76	4.72	12.95	1.17	4.92	5.24
Hg	1.40	1.34	1.11	2.83	4.09	3.50	0.88	2.16
HI	2.32	2.65	6.00	0.94	1.90	2.65	3.02	2.78
Sg	2.87	2.46	4.52	4.78	2.89	4.64	2.17	3.48
SI	4.47	2.03	11.31	3.93	1.44	4.05	5.86	4.73
	2.96	2.83	4.86	3.82	5.41	3.85	3.23	3.85
	Compuestos no-polares		3.55	Compuestos polares		4.36		

6.- Ecuación de LSC-01 + LSC-01 y la Regla de Maxwell para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	7	6	7	10	41
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	<i>Aire</i>	% Valor Promedio
Vg	2.65	3.35	2.48	5.71	9.18	7.11	2.53	4.72
VI	4.06	5.13	3.76	4.72	12.95	1.17	4.92	5.24
Hg	1.40	1.34	1.11	2.83	4.09	3.50	0.88	2.16
HI	4.74	5.35	3.22	0.88	21.01	4.97	4.52	6.38
Sg	2.87	2.46	4.52	4.78	2.89	4.64	2.17	3.48
SI	3.33	6.24	6.97	4.41	19.27	6.25	3.77	7.18
	3.18	3.98	3.68	3.89	11.57	4.61	3.13	4.86
	Compuestos no-polares		3.61	Compuestos polares		6.69		

TABLA LV (CONTINÚA)

VALORES PROMEDIO DE LOS % DE DESVIACIÓN MEDIOS ABSOLUTOS (% AAD) PARA VOLUMEN, ENTALPÍA Y ENTROPÍA EN LA REGIÓN DE LÍQUIDO Y VAPOR SATURADO

7.- Ecuación de SRK-72+Ecuación de Antoine y Wagner (según caso) para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	7	6	7	10	41
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	0.71	1.90	0.27	2.30	6.89	3.43	0.49	2.28
VI	4.67	5.04	5.16	12.65	43.52	17.89	4.47	13.34
Hg	0.64	0.75	0.16	1.63	2.71	2.17	0.91	1.28
HI	3.51	1.72	7.32	2.87	2.97	3.95	4.83	3.88
Sg	2.89	2.44	4.66	4.72	3.05	4.38	2.40	3.51
SI	6.45	3.63	16.84	7.47	4.38	6.94	7.23	7.56
	3.15	2.58	5.74	5.27	10.59	6.46	3.39	5.31
	Compuestos no-polares		3.82	Compuestos polares		7.44		

8.- Ecuación de PR-76+Ecuación de Antoine y Wagner (según caso) para estimar la entalpía de vaporización

No Datos	4	3	4	7	6	7	10	41
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	0.77	0.73	2.09	1.10	6.01	2.01	1.36	2.01
VI	7.46	7.59	6.98	6.36	26.78	7.93	7.95	10.15
Hg	6.47	4.53	9.96	10.04	8.35	9.13	7.27	7.96
HI	16.33	2.34	34.15	18.16	14.45	16.42	24.42	18.04
Sg	3.85	1.62	6.49	6.75	3.27	6.27	3.47	4.53
SI	8.67	2.69	21.00	11.29	6.54	10.38	9.03	9.94
	7.26	3.25	13.45	8.95	10.90	8.69	8.92	8.77
	Compuestos no-polares		7.98	Compuestos polares		9.51		

En la TABLA LVI se pueden observar los valores promedio de los % de desviación medios absolutos (% AAD) obtenidos en la región de vapor sobrecalentado, por sustancia y por propiedad termodinámica, esta tabla presenta un resumen de los resultados obtenidos de cada ecuación cuártica y cúbica estudiada, el modelo que mejor valor promedio de los % de desviación medios absolutos (% AAD) presentó para compuestos puros, fue SRK-72, este valor fue de 1.06 %.

Lo que se refiere a compuestos puros no-polares (oxígeno, Argón y etano) el menor valor promedio de los % de desviación medios absolutos (% AAD) obtenido fue el modelo cúbico SRK-72, este valor fue de 0.77 %.

Para compuestos puros polares (Trifluoro-clorometano, agua y trifluorometano) el menor valor promedio de los % de desviación medios absolutos (% AAD) obtenido fue el modelo cúbico SRK-72 este valor fue de 1.46 %, como valor promedio de las tres sustancias.

Para el aire, el modelo que menor valor promedio de los % desviación medios absolutos (% AAD) obtenido fue el modelo cúbico PR-76 de 0.55 %.

Lo anteriormente mencionado establece que los modelos cúbicos en la región de vapor sobrecalentado son los modelos que mejor predicen las propiedades termodinámicas en las condiciones de presión y temperatura de los compuestos puros polares y no polares, además de la mezcla estudiados en el presente trabajo.

TABLA LVI

VALORES PROMEDIO DE LOS % DE DESVIACIÓN MEDIOS ABSOLUTOS PARA VOLUMEN, ENTALPÍA Y ENTROPÍA EN LA REGIÓN DE VAPOR SOBREALENTADO

1.- Ecuación de SBC-94

No Datos	5	5	4	0	0	0	0	14
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_{3,5}$	H_2O_3	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	8.35	3.60	1.74					4.56
Hg	1.77	0.77	1.13					1.22
Sg	1.42	0.98	0.61					1.00
	3.85	1.78	1.16					2.26
	Compuestos no-polares		2.26					

2.- Ecuación de LBSC-96

No Datos	5	5	4	6	13	7	0	40
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_{3,5}$	H_2O_3	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	8.35	3.60	1.74	2.07	11.26	1.22		4.71
Hg	1.77	0.77	1.13	1.46	2.25	0.72		1.35
Sg	1.42	0.98	0.61	2.63	1.45	1.21		1.38
	3.85	1.78	1.16	2.05	4.99	1.05		2.48
	Compuestos no-polares		2.26	Compuestos polares		2.70		

3.- Ecuación de LSC-01

No Datos	5	5	4	6	13	7	9	49
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_{3,5}$	H_2O_3	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	10.03	2.58	0.38	2.10	10.45	1.27	0.02	3.83
Hg	1.98	0.68	1.12	1.50	1.97	0.78	0.51	1.22
Sg	1.35	1.04	0.86	2.65	1.18	1.24	1.25	1.37
	4.45	1.43	0.79	2.08	4.53	1.10	0.59	2.14
	Compuestos no-polares		2.22	Compuestos polares		2.57		

TABLA LVI (CONTINÚA)

4.- Ecuación de SRK-72

No Datos	5	5	4	6	13	7	9	49
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	0.62	0.87	0.76	0.81	3.44	1.71	0.01	1.17
Hg	0.11	0.33	0.51	0.93	0.86	0.69	0.51	0.56
Sg	1.62	1.31	0.78	2.67	0.76	1.27	1.59	1.43
	0.78	0.84	0.68	1.47	1.69	1.22	0.70	1.06
	Compuestos no-polares		0.77	Compuestos polares		1.46		

5.- Ecuación de PR-76

No Datos	5	5	4	6	13	7	9	49
Propiedad	O_2	C_2H_6	Ar	$CClF_3$	H_2O	CHF_3	$Aire$	% Valor Promedio
Vg	1.26	0.98	0.83	1.22	1.85	4.50	0.10	1.53
Hg	5.78	4.60	3.28	6.07	5.18	3.31	0.35	4.08
Sg	2.66	2.28	1.62	3.91	2.17	2.00	1.19	2.26
	3.23	2.62	1.91	3.73	3.07	3.27	0.55	2.63
	Compuestos no-polares		2.59	Compuestos polares		3.36		

CAPÍTULO 4

CONCLUSIONES

En la estimación de volumen específico del vapor saturado para compuestos puros y aire, los modelos cúbicos PR-76 y SRK-72 presentaron las mejores estimaciones con valores promedio de los % de desviación media absoluta (% AAD) de 2.01 % y 2.28 % respectivamente. Para el volumen específico del líquido saturado, el modelo cuártico LSC-01 fue el modelo que presentó el menor valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) el cual fue de 5.24 % para los compuestos puros y aire.

Respecto a la entalpía específica de vapor saturado el modelo cúbico SRK-72 fue el modelo que menor valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) presentó, 1.28 % para los compuestos puros y aire. Respecto a la entalpía del líquido saturado de compuestos puros, el menor valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) fue el que presentó el modelo cuártico LBSC-96 y la ecuación de Antoine y Wagner (según el caso) para la estimación de la entalpía de vaporización el cual fue de 2.69 % y para el aire, el modelo modelo cuártico LSC-01 y la ecuación de Gómez-Nieto –Thodos para la estimación de la entalpía de vaporización presentó las mejores estimaciones de entalpía de líquido saturado, cuyo valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) fue de 3.02 %.

Para la entropía de vapor saturado el modelo cuártico LSC-01 fue el que mejores estimaciones presentó con un valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) de 3.48 % para los compuestos puros y aire. De la misma manera, para la entropía de líquido saturado el modelo cuártico LSC01 y

la ecuación de Antoine para la estimación de la entalpía de vaporización fue la que presentó el menor valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) de 4.73 % para los compuestos puros y aire.

Por otro lado las mejores estimaciones de volumen específico de vapor y entalpía específica del gas en la región de vapor sobrecalentado para los compuestos puros y aire se obtuvieron del modelo cúbico SRK-72 con los menores valores promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) los cuales fueron: 1.17 % y 0.56 respectivamente. Para la entropía del gas en la región de vapor sobrecalentado el modelo cuártico LSC-01 presentó las mejores estimaciones con un valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) de 1.37 %.

Los intervalos de predicción seguros en los cuales el modelo cuártico de Shah y sus actualizaciones presentaron predicciones aceptables son los siguientes:

Para la estimación de volumen específico, entalpía y entropía para el oxígeno en la región de vapor saturado y líquido saturado se recomiendan usar los modelos cuárticos SBC-94 y LSC-01 además de la ecuación de Antoine para determinar la entalpía de vaporización en el intervalo de temperatura de 80 – 140 K y presión de 0.03009 -2.788 MPa, sin embargo para la entropía específica del líquido el % de desviación absoluto alcanza hasta un 9.54 % en este intervalo. En la región de vapor sobrecalentado se recomienda usar los mismos modelos SBC-94 y LSC-01 en el intervalo de temperatura de 200 – 1000 K y de presión de 0.05 – 5.0 MPa. En el caso del etano para determinar el volumen específico, entalpía específica y entropía específica en la región de vapor saturado y líquido saturado se recomienda el modelo cuártico SBC-94 además de la ecuación de Antoine y Wagner para determinar la entalpía de vaporización en el intervalo de temperatura de 170 – 280 K y presión de 0.0433 – 2.822 MPa. En la región de vapor sobrecalentado se recomienda usar los modelos cuárticos SBC-94 y LSC-

01 en el intervalo que comprende 300 – 340 K y presión de 0.2 – 4.0 MPa para volumen específico, entalpía específica y entropía específica.

Respecto al argón para determinar el volumen específico, entalpía específica y entropía específica en la región de vapor saturado y líquido saturado el modelo SBC-94 además de la ecuación de Antoine para determinar la entalpía de vaporización es el modelo cuártico recomendado en el intervalo 100 – 120 K y presión de 0.3245 – 1.215 MPa, sin embargo para la entalpía específica del líquido saturado el % de desviación absoluto alcanza hasta un 14 % en este intervalo. En la región de vapor sobrecalentado se recomienda estimar volumen específico, entalpía específica y entropía específica del gas con los modelos cuárticos SBC-94 y LSC-01 en el intervalo de temperatura de 300 – 800 K y presión de 0.3 – 20 MPa.

En la estimación de volumen específico, entalpía específica y entropía específica en la región de vapor saturado y líquido saturado del trifluoroclorometano (Refrigerante 13) es recomendable usar los modelos cuárticos LBSC-96 y LSC-01 además de la ecuación de Antoine para determinar la entalpía de vaporización en los intervalos de temperatura de 180 -270 K y de presión en 0.05158 – 1.821 MPa. En la región de vapor sobrecalentado es recomendable calcular con los modelos cuárticos LBSC-96 y LSC-01 en el intervalo de temperatura de 250 – 550 K y presión de 0.101325 – 3.0 MPa.

En el caso particular de agua las estimaciones obtenidas de entalpía específica, y entropía específica en la región de vapor saturado y líquido saturado es recomendable usar los modelos cuárticos LBSC-96 y LSC-01 además de la ecuación de Antoine y Wagner en el intervalo de temperatura 373.14 – 568.22 K y presión 0.101325 – 8.0 MPa; pero en el caso de volumen específico de vapor saturado y líquido saturado para el agua usando modelos cuárticos estos predicen con % de desviación absoluto muy variable, por lo tanto no son confiables.

Para la región de vapor sobrecalentado los modelos cuárticos LSBC-96 y LSC-01 son recomendables para estimar volumen específico, entalpía específica y entropía específica del gas en el intervalo de temperatura 350 – 900 K y presión 0.004 – 20 MPa.

Para la estimación de volumen específico, entalpía y entropía para el trifluoro metano (Refrigerante 23) en la región de vapor saturado y líquido saturado se recomiendan usar los modelos cuárticos LBSC-96 y LSC-01 además de la ecuación de Antoine para determinar la entalpía de vaporización en el intervalo de temperatura de 175 – 265 K y presión de 0.03616 -1.994 MPa,. En la región de vapor sobrecalentado se recomienda usar los mismos modelos LBSC-96 y LSC-01 en el intervalo de temperatura de 300 – 600 K y presión de 0.07 – 4.0 MPa.

En el caso del aire respecto a la estimación de volumen específico, entalpía específica y entropía específica en la región de vapor saturado y líquido saturado el modelo cuártico LSC-01 y la ecuación de Gómez – Nieto – Thodos para estimar la entalpía de vaporización se recomiendan en el intervalo de temperatura de 78.8 – 122.9 K y presión de 0.1013 – 2.5 MPa. Para la región de vapor sobrecalentado se recomienda el modelo cuártico LSC-01 en el intervalo de temperatura de 200 – 1000 K y presión de 0.14 – 0.7 MPa.

Finalmente se puede concluir que el modelo cuártico LSC-01 fue el mejor debido a que predice con un valor promedio de los % de desviación media absolutos (% AAD) de 3.85 % tomando en cuenta volumen, entalpía y entropía en la región líquido - vapor, respecto a los modelos cúbicos SRK-72 y PR-76; estos modelos estimaron con un valor absoluto promedio de los % de desviación media absoluta (% AAD) de 5.31 % y 8.77 % respectivamente; este comparativo se elaboró con la ecuación de Antoine y Wagner (según caso) para estimar los calores de vaporización para todos los modelos. En la región de vapor sobrecalentado el modelo cúbico SRK-72 fue el que mejor predice volumen,

entalpía y entropía con un valor promedio de los % de desviación media absolutos de 1.06 %, respecto al modelo cuártico LSC-01 de 2.14 % y el modelo cúbico PR-76 con 2.63 %.

BIBLIOGRAFÍA

1. Elizondo Villarreal E. M.; Notas de Termodinámica Avanzada ; 2004.
2. Foust A. S. , Wenzel L.A., Clump C.W. y Maus L.; Principios de Operaciones Unitarias, ·Edición Nueva, Editorial CECSA, México, 1990.
3. Herbison Don, Evans ; Solving Quartics and Cubics for Graphics, Technical Report TR94-487; Basser Departament of Computer Science; University of Sydney ; Australia, 2005.
4. Li H. C., V. M. Shah, H. D. Cochran; A Generalized Quartic Equation of State: Simplification and Performance on Mixtures, First Edition, Vol. 36 No 5-6, page. 1163-1182, Taylor & Francis, Tennessee, United States of America, 2001.
5. Lin Y. L., Bienkowski P.R., Shah V. M. and Cochran H. D.; Extension of a Generalized Quartic Equation of state to pure polar Fluids, First edition, Vol. 42 No 2, page. 562-570, AIChE Journal, Tennessee, United States of America, 1996.
6. Perry R. H., Green D.W. y Maloney J.O.; Perry's Chemical Engineers' handbook, Seventh Edition, McGraw-Hill, New York, United States of America , 1999.
7. Poling B. E., Prausnitz J. M. and O'Connell J.P. ; The Properties of Gases and Liquids, Fifth edition, McGraw-Hill, New York, United States of America, 2001.
8. Prausnitz J. M, , Lichtenthaler R.N. y Gómez de Acevedo E.; Termodinámica Molecular de los equilibrios de fases, Tercera edición, Editorial Prentice Hall, Madrid, España, 2000.
9. Reynolds W.C.; Thermodynamic Properties in SI; graphs , tables, and computational equations for forty substances; Departament of Mechanical Engineering ; Stanford University ; 1979.
10. Scenna N. J. ; Modelado, Simulación y Optimización de procesos Químicos; Primera Edición, Editorial Universidad Tecnológica Nacional, El Rosario, Argentina, 1999.

11. Shah V. M., Bienkowski P.R., Cochran, H.D.; A Generalized Quartic Equation of state for pure no polar fluids, First edition, Vol. 40 No 1, pag.152-159, AIChE Journal, Tennessee, United States of America, 1994.
12. Smith,J.M.; Van Ness H.C.; Abbott, M.M.; Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics, Seventh Edition, McGraw-Hill,2005.
13. Tester J. W., Modell M. Thermodynamics and its Aplications, Third Edition, Prentice Hall, 1996.
14. Ya Song Wei and Richard J. Sadus; Equations of State for the calculation of Fluid-Phase Equilibria, Volumen 46 No 1, page. 189-196, AIChE Journal Review, United States of America, 2000.
15. Zhi Yun, Qin Jinping, Shi Meiren, Shi Jun; A New General Equation of State, Volumen 7 No 2, Chinese Journal of Chemical Engineering, 1999.

APÉNDICES

APÉNDICE A
MÉTODO PARA RESOLVER UNA ECUACIÓN DE CUARTO ORDEN

APÉNDICE A

MÉTODO PARA RESOLVER UNA ECUACIÓN DE CUARTO ORDEN

Al partir de la ecuación (59):

$$V_m^4 + q_3 V_m^3 + q_2 V_m^2 + q_1 V_m + q_0 = 0 \quad (59)$$

Donde:

$$q_3 = \left(-2k_0 \beta_m + e_m - \frac{RT}{P} \right) \quad (60)$$

$$q_2 = \left\{ \frac{RT}{P} [\beta_m (k_0 - k_1) - e_m] + k_0 \beta_m (k_0 \beta_m - 2e_m) \right\} + \frac{a_m}{P} \quad (61)$$

$$q_1 = e_m \left[k_0^2 \beta_m^2 + \frac{RT}{P} \beta_m (k_0 - k_1) \right] + \left[\frac{k_0 \beta_m (c_m - a_m)}{P} \right] \quad (62)$$

$$q_0 = -\frac{c_m k_0 \beta_m^2}{P} \quad (63)$$

Existen 5 métodos analíticos para determinar las raíces de esta ecuación de cuarto orden, los cuales son: Christianson-Brown (1991), Descartes-Euler-Cardano (1859), Ferrari-Lagrange (1947), Neumark (1965) y Yacoub-Fraidenraich-Brown (2003)^[3]

APÉNDICE A (Continuación)

En el presente trabajo se utilizó el método de Descartes-Euler-Cardano para resolver la ecuación cuártica de Shah, el método mencionado se aplicó de la siguiente manera:

Primeramente reduciendo el orden de la ecuación (59) de una ecuación cuártica a una cúbica usando la siguiente ecuación:

$$y^6 + by^4 + cy^2 + d = 0 \quad (59-a)$$

$$b = 2 \left(q_2 - \frac{3q_3^2}{8} \right) \quad (59-b)$$

$$c = \left(q_2 - \frac{3q_3^2}{8} \right)^2 - 4 \left\{ q_0 - \frac{3q_3^4}{256} + \frac{q_2 q_3^2}{16} - \frac{q_3 q_1}{4} \right\} \quad (59-c)$$

$$d = - \left(q_1 + \frac{q_3^3}{8} - \frac{q_3 q_2}{2} \right)^2 \quad (59-d)$$

Resolviendo como si se tratara de una ecuación cúbica en (59-a) por el método de Cardano ^[1,12]:

$$y^6 + by^4 + cy^2 + d = 0 \quad (59-a)$$

$$Q = \frac{(3c - b^2)}{9} \quad (59-b)$$

$$R^* = \frac{(9bc - 27d - 2b^3)}{54} \quad (59-c)$$

APÉNDICE A (Continuación)

$$D = (Q^3 + R^{*2}) \quad (59-d)$$

a) Si $D > 0$ se obtiene 1 raíz real + 1 compleja conjugada:

$$S = (R^* + \sqrt{D})^{1/3} \quad (59-e)$$

$$T = (R^* - \sqrt{D})^{1/3} \quad (59-f)$$

$$y_1 = S + T - \frac{b}{3} \quad (59-g)$$

$$y_{2,3} = -\frac{1}{2}(S + T) - \frac{1}{3}b \pm \frac{1}{2}i\sqrt{3}(S - T) \quad (59-h)$$

b) Si $D < 0$ se presentan 3 raíces reales (diferentes entre sí):

$$\cos \theta = \frac{R^*}{\sqrt{-Q^3}} \Rightarrow \theta = \cos^{-1} \left(\frac{R^*}{\sqrt{-Q^3}} \right) \quad (59-i)$$

$$y_1 = 2\sqrt{-Q} \cos\left(\frac{\theta}{3}\right) - \frac{b}{3} \quad (59-j)$$

$$y_2 = 2\sqrt{-Q} \cos\left(\frac{\theta}{3} + 120^\circ\right) - \frac{b}{3} \quad (59-k)$$

$$y_3 = 2\sqrt{-Q} \cos\left(\frac{\theta}{3} + 240^\circ\right) - \frac{b}{3} \quad (59-l)$$

c) Si $D = 0$ esto significa que $S = T$:

APÉNDICE A (Continuación)

Condición 1) 3 raíces Nulas si $Q = R^*$

Condición 2) 2 soluciones si $Q^3 = -R^{*2} \neq 0$

De las 3 raíces reales, 2 son iguales; aquí, la parte imaginaria desaparece.

$$y_{2,3} = -\frac{1}{2}(S+T) - \frac{b}{3} \quad (59-m)$$

$$y_1 = S+T - \frac{b}{3} \quad (59-n)$$

Tomando una raíz real positiva de la solución de la ecuación cúbica:

$$h = \sqrt{y^2_{i=1,2,3}} \quad (59-ñ)$$

$$j = \left[\frac{q_2}{2} + \frac{h^2}{2} - \frac{\left(q_1 + \frac{q_3^3}{8} - \frac{q_3 q_2}{2} \right)^2}{2h^2} \right] \quad (59-o)$$

Con las constantes obtenidas a partir de las ecuaciones (59-ñ) y (59-o) obtenemos para la raíz tomada de la ecuación cúbica las siguientes ecuaciones cuadráticas:

$$(V^2 + b_1 V + c_1)(V^2 + b_2 V + c_2) \quad (59-p)$$

APÉNDICE A (Continuación)

$$b_1 = \frac{q_3}{2} + h \quad (59-q)$$

$$c_1 = \frac{q_3^2}{16} + \frac{hq_3}{4} + j \quad (59-r)$$

$$b_2 = \frac{q_3}{2} - h \quad (59-s)$$

$$c_2 = \frac{q_3^2}{16} - \frac{hq_3}{4} + \frac{\left(q_0 - \frac{3q_3^4}{256} + \frac{q_3^2 q_2}{16} - \frac{q_3 q_1}{4} \right)}{j} \quad (59-t)$$

Si $b^2 - 4c$ es positiva en cualquiera de las dos ecuaciones cuadráticas o en ambas, entonces se determinan las raíces de ambas ecuaciones, pero si la diferencia es negativa, entonces se toma otra raíz real de la ecuación cúbica y se vuelven a calcular las constantes de las ecuaciones (59-q), (59-r), (59-s) y (59-t).

$$V_1 = \frac{-b_1 + \sqrt{b_1^2 - 4c_1}}{2} \quad (59-u)$$

$$V_2 = \frac{-b_1 - \sqrt{b_1^2 - 4c_1}}{2} \quad (59-v)$$

$$V_3 = \frac{-b_2 + \sqrt{b_2^2 - 4c_2}}{2} \quad (59-w)$$

APÉNDICE A (Conclusión)

$$V_4 = \frac{-b_2 - \sqrt{b_2^2 - 4c_2}}{2} \quad (59-x)$$

Las raíces obtenidas de la ecuación cuártica de estado tienen las siguientes propiedades^[5,10]:

- 1.- Una raíz siempre es real y negativa y no tiene significado físico.
- 2.- En el punto crítico, tres raíces son reales, positivas e iguales.
- 3.- En la región de líquido-vapor se obtienen las cuatro raíces reales: la raíz positiva con menor valor corresponde al volumen de la fase líquida y la raíz positiva de mayor valor corresponde al volumen de la fase vapor.
- 4.- En las regiones de vapor sobrecalentado se obtienen dos raíces reales y dos complejas y la única raíz positiva corresponde al volumen del vapor sobrecalentado.

APÉNDICE B

FUNCIÓN PARA EVALUAR LA ENTALPÍA RESIDUAL USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH

APÉNDICE B

FUNCIÓN PARA EVALUAR LA ENTALPÍA RESIDUAL USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH

Partiendo de la definición de propiedad residual para la entalpía específica^[2]:

$$\Delta H' = H_g - H^{IG} \quad (104)$$

Para el estado de gas ideal a composición constante se tiene:

$$dH^{IG} = \sum_{i=1}^{i=N} y_i C_{p_i}^{IG} dT \quad (105)$$

Integrando desde un estado de referencia de gas ideal a las condiciones T_0 y P_0 hasta T y P de interés:

$$H_g = H_0^{IG} + \int_{T_0}^T \sum_{n=0}^{n=i} y_i C_{p_i}^{IG} dT + \Delta H_m' \quad (66)$$

Partiendo de la primera ley de la termodinámica ecuación (2):

$$dU = dQ + dW \quad (2-a)$$

$$dW = -PdV \quad (106)$$

$$dQ = dH \quad (107)$$

$$\Delta H_m' = \Delta U_m' + P\Delta V_m' = \Delta U_m' - RT + PV_m' \quad (108)$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$\Delta U'_m = - \int_{\infty}^{V_m} \left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V_m} \right] dV_m \quad (109)$$

Partiendo de la ecuación de Shah (36):

$$P = \frac{RT}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V - k_0 \beta_m)^2} - \frac{a_m V + k_0 \beta_m c_m}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} \quad (36)$$

y considerando las ecuaciones (37) – (53) en la metodología:

$$\beta_m = \sum_{i=1}^N y_i \beta_i \quad (37)$$

Donde:

$$\beta_i = \beta_{ci} \left\{ \exp \left[-0.03125 \ln(T_{ri}) - 0.0054 [\ln(T_{ri})]^2 \right] \right\}^3 \quad (38)$$

$$\beta_{ci} = b_r V_{ci} \quad (39)$$

Regla de mezclado de Van der Waals aplicadas a la ecuación cuártica de Shah:

$$a_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j (a_{ci} \alpha_i a_{cj} \alpha_j)^{1/2} \quad (40)$$

$$c_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j (c_{ci} \xi_i c_{cj} \xi_j)^{1/2} \quad (41)$$

$$e_m = \sum_{i=1}^N y_i e_i \quad (42)$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$\mu_i^* = \frac{0.3976\mu_i}{(RT_{ci}V_{ci})^{0.5}} \quad (43)$$

$$X_{ni} = X_{n1i} + X_{n2i}\omega_i + X_{n3i}\mu_i^* + X_{n4i}\mu_i^{*2} \quad \text{para } n = 2,3,4,5,6, \text{ y } 7 \quad (44)$$

Donde para $T_{ri} \leq 1$ entonces:

$$\alpha_i = \left[1 + X_{2i}(1 - \sqrt{T_{ri}}) + X_{3i}(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 + X_{4i}(1 - \sqrt{T_{ri}})^3 \right]^2 \quad (45)$$

Donde para $T_{ri} > 1$ entonces:

$$\alpha_i = \left[1 + X_{2i}(1 - \sqrt{T_{ri}}) + X_{5i}(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 + X_{6i}(1 - \sqrt{T_{ri}})^3 \right]^2 \quad (46)$$

$$\xi_i = \left[1 + X_{7i}(1 - \sqrt{T_{ri}}) \right]^2 \quad (47)$$

$$a_{ri} = a_{r0}(1 + a_{r1}\omega_i + a_{r2}\omega_i^2 + a_{r3}\mu_i^* + a_{r4}\mu_i^{*2}) \quad (48)$$

$$c_{ri} = c_{r0}(1 + c_{r1}\omega_i + c_{r2}\omega_i^2 + c_{r3}\mu_i^* + c_{r4}\mu_i^{*2}) \quad (49)$$

$$e_{ri} = e_{r0}(1 + e_{r1}\omega_i + e_{r2}\omega_i^2) \quad (50)$$

$$a_{ci} = \frac{a_{ri}RT_{ci}}{\rho_{Ci}} \quad (51)$$

$$c_{ci} = \frac{c_{ri}RT_{ci}}{\rho_{Ci}} \quad (52)$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$e_i = \frac{e_{ri}}{\rho_{Ci}} \quad (53)$$

En el caso de mezclas, se deriva la ecuación (36) y además al considerar las ecuaciones (37) – (53) se llega a:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_V &= R \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{T}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_{Vm} + k_1 R \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m T}{(V - k_0 \beta_m)^2} \right]_V + \\ &- \frac{1}{(V + e_m)} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{a_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V - \frac{k_0}{V(V + e_m)} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m c_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V \end{aligned} \quad (110)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{T}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V = \frac{(V - k_0 \beta_m) + 3k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^2} \quad (111)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m T}{(V - k_0 \beta_m)^2} \right]_V &= \frac{\beta_m (V - k_0 \beta_m)^2}{(V - k_0 \beta_m)^4} + \frac{3(V - k_0 \beta_m)^2 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^4} + \\ &+ \frac{6k_0 (V - k_0 \beta_m) \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{(V - k_0 \beta_m)^4} \end{aligned} \quad (112)$$

$$\frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{a_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V = \frac{- \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} m_{1j} + \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} m_{1i} \right\}}{(V - k_0 \beta_m)^2} +$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$+ \frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V - k_0 \beta_m)^2} \quad (113)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m c_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V = & - \frac{\beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\}}{(V - k_0 \beta_m)} + \\ & + \frac{3c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{T(V - k_0 \beta_m)^2} \end{aligned} \quad (114)$$

Donde:

$$F_i = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (72)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

$$\left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \right] = \frac{RT}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V - k_0 \beta_m)^2} - \frac{a_m}{(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} +$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$\begin{aligned}
& - \frac{k_0 \beta_m c_m}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} - \frac{RT}{(V - k_0 \beta_m)} - \frac{3RTk_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^2} + \\
& - \frac{k_1 RT \beta_m}{(V - k_0 \beta_m)^2} - \frac{3k_1 RT \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^2} - \frac{6k_1 k_0 RT \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{(V - k_0 \beta_m)^3} + \\
& - \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left[m_{1j} \sqrt{\frac{\alpha_i T_{ri}}{4}} + m_{1i} \sqrt{\frac{\alpha_j T_{rj}}{4}} \right]}{(V - k_0 \beta_m)(V + e_m)} + \frac{3k_0 a_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^2 (V + e_m)} + \\
& - \frac{k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i T_{rj}}{4}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j T_{ri}}{4}} \right]}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \\
& + \frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0^2 c_m \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2}
\end{aligned} \tag{115}$$

Agrupando términos semejantes se tiene:

$$\begin{aligned}
\left[P - T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V_m} \right] &= \frac{A'}{(V_m - k_0 \beta_m)^2} + \frac{B'}{(V_m - k_0 \beta_m)^3} + \frac{C'}{(V_m + e_m)(V_m - k_0 \beta_m)} \\
& + \frac{D'}{(V_m + e_m)(V_m - k_0 \beta_m)^2} + \frac{E'}{V_m (V_m + e_m)(V_m - k_0 \beta_m)^2} + \\
& \frac{F'}{V_m (V_m + e_m)(V_m - k_0 \beta_m)}
\end{aligned} \tag{116}$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$A' = -3RT(k_1 + k_0) \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (117)$$

$$B' = -6RTk_1 k_0 \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (118)$$

$$C' = -a_m - \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ \sqrt{\frac{\alpha_i T_{rj}}{4}} m_{1j} + \sqrt{\frac{\alpha_j T_{ri}}{4}} m_{1i} \right\} \quad (119)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

$$D' = 3k_0 a_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (120)$$

$$E' = 3c_m k_0^2 \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 [0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (121)$$

$$F' = -k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=N}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[\sqrt{\frac{\xi_i T_{rj}}{4}} - \sqrt{\frac{\xi_j T_{ri}}{4}} \right] - k_0 c_m \beta_m +$$

$$+ 3k_0 c_m \sum_{n=0}^{n=i} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (122)$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$\Delta U' = - \int_{\infty}^V \left[\frac{A'}{(V - k_0 \beta_m)^2} + \frac{B'}{(V - k_0 \beta_m)^3} + \frac{C'}{(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \frac{D'}{(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} + \frac{E'}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} + \frac{F'}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} \right] dV \quad (123)$$

Resolviendo analíticamente y evaluando cada una de las integrales en los límites se tiene:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{A'}{(V - k_0 \beta_m)} dV = - \frac{A'}{(V - k_0 \beta_m)} = - \frac{A'}{(V_m - k_0 \beta_m)} \quad (124)$$

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{B'}{(V - k_0 \beta_m)^3} dV = - \frac{B'}{2(V - k_0 \beta_m)^2} = - \frac{B'}{2(V_m - k_0 \beta_m)^2} \quad (125)$$

La siguiente integral se resuelve a través de fracciones parciales:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{C'}{(V - k_0 \beta_m)(V + e_m)} dV = C'' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{C''}{(V + e_m)} + \frac{C'''}{(V - k_0 \beta_m)} \right] dV \quad (126)$$

Donde:

$$\frac{1}{(V - k_0 \beta_m)(V + e_m)} = \frac{C''}{(V + e_m)} + \frac{C'''}{(V - k_0 \beta_m)} \quad (126-a)$$

$$1 = C''(V - k_0 \beta_m) + C'''(V + e_m) \quad (126-b)$$

Si $V = k_0 \beta_m$ y sustituyendo en (126-b):

$$1 = C''(0) + C'''(k_0 \beta_m + e_m) \quad (126-c)$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$C^{III} = \frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)} \quad (126-d)$$

Usando nuevamente la ecuación (126-b):

$$1 = C^{II} (V - k_0\beta_m) + C^{III} (V + e_m) \quad (126-b)$$

Si $V = -e_m$ entonces sustituyendo en (126-b):

$$1 = C^{II} (-e_m - k_0\beta_m) + C^{III} (0) \quad (126-e)$$

$$C^{II} = -\frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)} \quad (126-f)$$

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{C'}{(V - k_0\beta_m)(V + e_m)} dV = C' \int_{\infty}^{V_m} \left[-\frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)(V + e_m)} + \frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)(V - k_0\beta_m)} \right] dV \quad (126-g)$$

Resolviendo las integrales analíticamente:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{C'}{(V - k_0\beta_m)(V + e_m)} dV = \frac{C'}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V - k_0\beta_m)}{(V + e_m)} \right] \quad (126-h)$$

Sustituyendo los límites de integración se tiene:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{C'}{(V - k_0\beta_m)(V + e_m)} dV = \frac{C'}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V_m - k_0\beta_m)}{(V_m + e_m)} \right] \quad (126-i)$$

La siguiente integral se resuelve a través de fracciones parciales:

APÉNDICE B (Continuación)

$$\int_{-\infty}^{V_m} \frac{D'}{(V - k_0 \beta_m)^2 (V + e_m)} dV = D' \int_{-\infty}^{V_m} \left[\frac{D''}{(V + e_m)} + \frac{D'''}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{D^{IV}}{(V - k_0 \beta_m)^2} \right] dV \quad (127)$$

Donde:

$$\frac{1}{(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} = \frac{D''}{(V + e_m)} + \frac{D'''}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{D^{IV}}{(V - k_0 \beta_m)^2} \quad (127-a)$$

$$1 = D'' (V - k_0 \beta_m)^2 + D''' (V + e_m)(V - k_0 \beta_m) + D^{IV} (V + e_m) \quad (127-b)$$

Si $V = -e_m$ y sustituyendo en (127-b):

$$1 = D'' (-e_m - k_0 \beta_m)^2 + D''' (0)(-e_m - k_0 \beta_m) + D^{IV} (0) \quad (127-c)$$

$$D'' = \frac{1}{(k_0 \beta_m + e_m)^2} \quad (127-d)$$

Si $V = k_0 \beta_m$ y sustituyendo en (127-b):

$$1 = D'' (0)^2 + D''' (k_0 \beta_m + e_m)(0) + D^{IV} (k_0 \beta_m + e_m) \quad (127-e)$$

$$D^{IV} = \frac{1}{(k_0 \beta_m + e_m)} \quad (127-f)$$

Sustituyendo (127-d) y (127-f) en (127-b)

$$1 = \frac{(V - k_0 \beta_m)^2}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} + D''' (V + e_m)(V - k_0 \beta_m) + \frac{(V + e_m)}{(k_0 \beta_m + e_m)} \quad (127-g)$$

APÉNDICE B (Continuación)

Si $V = e_m$ y sustituyendo en (127-g):

$$1 = \frac{(e_m - k_0 \beta_m)^2}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} + D^{III} (e_m + e_m)(e_m - k_0 \beta_m) + \frac{(e_m + e_m)}{(k_0 \beta_m + e_m)} \quad (127-h)$$

$$D^{III} = \frac{1}{2e_m (e_m - k_0 \beta_m)} - \frac{(e_m - k_0 \beta_m)}{2e_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} - \frac{1}{(k_0 \beta_m + e_m)(e_m - k_0 \beta_m)} \quad (127-i)$$

$$\begin{aligned} \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{D^{II}}{(V + e_m)} + \frac{D^{III}}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{D^{IV}}{(V - k_0 \beta_m)^2} \right] dV &= D' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{(e_m + k_0 \beta_m)^2 (V + e_m)} + \\ &+ D' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{2e_m (e_m - k_0 \beta_m)(V - k_0 \beta_m)} - D' \int_{\infty}^{V_m} \frac{(e_m - k_0 \beta_m) dV}{2e_m (e_m - k_0 \beta_m)^2 (V - k_0 \beta_m)} \\ &- D' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{(e_m - k_0 \beta_m)(V - k_0 \beta_m)(e_m + k_0 \beta_m)} + D' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{(e_m + k_0 \beta_m)(V - k_0 \beta_m)^2} \end{aligned} \quad (127-j)$$

$$\begin{aligned} \int_{\infty}^{V_m} \frac{D'}{(V - k_0 \beta_m)^2 (V + e_m)} dV &= D' \frac{\ln(V + e_m)}{(e + k_0 \beta_m)} + D' \frac{\ln(V - k_0 \beta_m)}{2e_m (e - k_0 \beta_m)} \\ &- D' \frac{(e_m - k_0 \beta_m) \ln(V - k_0 \beta_m)}{2e_m (e + k_0 \beta_m)^2} - D' \frac{\ln(V - k_0 \beta_m)}{(e_m - k_0 \beta_m)(e_m + k_0 \beta_m)} \\ &- \frac{D'}{(V - k_0 \beta_m)(e + k_0 \beta_m)} \end{aligned} \quad (127-k)$$

Sustituyendo los límites de integración se tiene:

APÉNDICE B (Continuación)

$$\begin{aligned}
 \int_{\infty}^{V_m} \frac{D'}{(V - k_0\beta_m)^2 (V + e_m)} dV &= D' \frac{\ln(V_m + e_m)}{(e_m + k_0\beta_m)} + D' \frac{\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e_m - k_0\beta_m)} \\
 &- D' \frac{(e_m - k_0\beta_m) \ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} - D' \frac{\ln(V_m - k_0\beta_m)}{(e_m - k_0\beta_m)(e_m + k_0\beta_m)} \\
 &- \frac{D'}{(V_m - k_0\beta_m)(e_m + k_0\beta_m)}
 \end{aligned} \tag{127-I}$$

La siguiente integral se resuelve a través de fracciones parciales:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{E'}{V(V - k_0\beta_m)^2 (V + e_m)} dV = \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{E''}{V} + \frac{E'''}{(V + e_m)} + \frac{E'''}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{E^V}{(V - k_0\beta_m)^2} \right] dV \tag{128}$$

Donde:

$$\frac{1}{V(V - k_0\beta_m)(V + e_m)} = \frac{E''}{V} + \frac{E'''}{(V + e_m)} + \frac{E'''}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{E^V}{(V - k_0\beta_m)^2} \tag{128-a}$$

$$\begin{aligned}
 1 &= E''(V + e_m)(V - k_0\beta_m)^2 + E'''V(V - k_0\beta_m)^2 + E''V(V + e_m)(V - k_0\beta_m) + \\
 &+ E^V V(V + e_m)
 \end{aligned} \tag{128-b}$$

Si $V = -e_m$ y sustituyendo en (130-b):

$$1 = E''(0) + E'''(-e_m - k_0\beta_m)^2(-e_m) + E''V(0) + E^V(0) \tag{128-c}$$

$$E''' = -\frac{1}{e_m(k_0\beta_m + e_m)^2} \tag{128-d}$$

Si $V = 0$ y sustituyendo en (130-b):

APÉNDICE B (Continuación)

$$1 = E^{\text{II}}(e_m)(-k_0\beta_m)^2 + E^{\text{III}}(0) + E^{\text{IV}}(0) + E^{\text{V}}(0) \quad (128-e)$$

$$E^{\text{II}} = \frac{1}{e_m(k_0\beta_m)^2} \quad (128-f)$$

Si $V = k_0\beta_m$ y sustituyendo en (130-b):

$$1 = E^{\text{II}}(0) + E^{\text{III}}(0) + E^{\text{IV}}(0) + E^{\text{V}}(e_m + k_0\beta_m)k_0\beta_m \quad (128-g)$$

$$E^{\text{V}} = \frac{1}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (128-h)$$

$$1 = \frac{(V + e_m)(V - k_0\beta_m)}{e_mk_0\beta_m} - \frac{V(V - k_0\beta_m)^2}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + E^{\text{IV}}V(V + e_m)(V - k_0\beta_m) + \frac{V(V + e_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (128-i)$$

Si $V = e_m$ y sustituyendo en (130-i):

$$1 = \frac{(2e_m)(e_m - k_0\beta_m)^2}{e_mk_0^2\beta_m^2} - \frac{e_m(e_m - k_0\beta_m)^2}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + E^{\text{IV}}e_m(2e_m)(e_m - k_0\beta_m) + \frac{e_m(2e_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (128-j)$$

$$E^{\text{IV}} = \frac{1}{2e_m^2(e_m - k_0\beta_m)} - \frac{(e_m - k_0\beta_m)}{k_0^2\beta_m^2e_m^2} + \frac{(e_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m + k_0\beta_m)^2} + \frac{1}{(e_m - k_0\beta_m)(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m} \quad (128-k)$$

$$E' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{E^{\text{II}}}{V} + \frac{E^{\text{III}}}{(V + e_m)} + \frac{E^{\text{IV}}}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{E^{\text{V}}}{(V - k_0\beta_m)^2} \right] = \frac{E' \ln(V)}{e_mk_0^2\beta_m^2} +$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$\begin{aligned}
& -\frac{E'\ln(V+e_m)}{e_m(e_m+k_0\beta_m)^2} + \frac{E'\ln(V-k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m-k_0\beta_m)} - \frac{(e_m-k_0\beta_m)E'\ln(V-k_0\beta_m)}{k_0^2\beta_m^2e_m^2} + \\
& + \frac{(e_m-k_0\beta_m)E'\ln(V-k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m+k_0\beta_m)^2} - \frac{E'\ln(V-k_0\beta_m)}{(e_m-k_0\beta_m)(k_0\beta_m+e_m)k_0\beta_m} + \\
& - \frac{1}{k_0\beta_m(k_0\beta_m+e_m)(V-k_0\beta_m)}
\end{aligned} \tag{128-l}$$

Sustituyendo los límites de integración se tiene:

$$\begin{aligned}
& E' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{E^{II}}{V} + \frac{E^{III}}{(V+e_m)} + \frac{E^{IV}}{(V-k_0\beta_m)} + \frac{E^V}{(V-k_0\beta_m)^2} \right] = \frac{E'\ln(V_m)}{e_mk_0^2\beta_m^2} + \\
& -\frac{E'\ln(V_m+e_m)}{e_m(e_m+k_0\beta_m)^2} + \frac{E'\ln(V_m-k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m-k_0\beta_m)} - \frac{(e_m-k_0\beta_m)E'\ln(V_m-k_0\beta_m)}{k_0^2\beta_m^2e_m^2} + \\
& + \frac{(e_m-k_0\beta_m)E'\ln(V_m-k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m+k_0\beta_m)^2} - \frac{E'\ln(V_m-k_0\beta_m)}{(e_m-k_0\beta_m)(k_0\beta_m+e_m)k_0\beta_m} + \\
& - \frac{1}{k_0\beta_m(k_0\beta_m+e_m)(V_m-k_0\beta_m)}
\end{aligned} \tag{128-m}$$

La última integral también resuelve a través de fracciones parciales:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{F'}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV = \int_{\infty}^{V_m} \frac{F^{II}}{V} + \frac{F^{III}}{(V+e_m)} + \frac{F^{IV}}{(V-k_0\beta_m)} dV \tag{129}$$

Donde:

APÉNDICE B (Continuación)

$$\frac{1}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} = \frac{F^{II}}{V} + \frac{F^{III}}{(V+e_m)} + \frac{F^{IV}}{(V-k_0\beta_m)} \quad (129-a)$$

$$1 = F^{II}(V+e_m)(V-k_0\beta_m) + F^{III}V(V-k_0\beta_m) + F^{IV}V(V+e_m) \quad (129-b)$$

Si $V = 0$ y sustituyendo en (129-b):

$$1 = F^{II}(e_m)(-k_0\beta_m) + F^{III}(0) + F^{IV}(0) \quad (129-c)$$

$$F^{II} = -\frac{1}{k_0\beta_m e_m} \quad (129-d)$$

Si $V = -e_m$ y sustituyendo en (129-b):

$$1 = F^{II}(0) + F^{III}(-e_m)(-e_m - k_0\beta_m) + F^{IV}(0) \quad (129-e)$$

$$F^{III} = \frac{1}{e_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (129-f)$$

Si $V = k_0\beta_m$ y sustituyendo en (129-b):

$$1 = F^{II}(0) + F^{III}(0) + F^{IV}(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m \quad (129-g)$$

$$F^{IV} = \frac{1}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (129-h)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{V_m} \frac{F'}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV &= -\int_{-\infty}^{V_m} \frac{F'}{k_0\beta_m e_m V} dV + \int_{-\infty}^{V_m} \frac{F'}{e_m(e_m + k_0\beta_m)(V+e_m)} dV + \\ &+ \int_{-\infty}^{V_m} \frac{dV}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)(V-k_0\beta_m)} \end{aligned} \quad (129-i)$$

APÉNDICE B (Continuación)

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{F'}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV = -\frac{F'\ln(V)}{k_0\beta_m e_m} + \frac{F'\ln(V+e_m)}{e_m(e_m+k_0\beta_m)} + \frac{F'\ln(V-k_0\beta_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m+e_m)} \quad (129-j)$$

Sustituyendo los límites de integración se tiene:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{F'}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV = -\frac{F'\ln(V_m)}{k_0\beta_m e_m} + \frac{F'\ln(V_m+e_m)}{e_m(e_m+k_0\beta_m)} + \frac{F'\ln(V_m-k_0\beta_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m+e_m)} \quad (129-k)$$

Sustituyendo las integrales (124), (125), (126-i), (127-l),(128-m) y (129-k) en la ecuación (123) queda:

$$\begin{aligned} \Delta U'_m = & \frac{A'}{(V_m - k_0)} + \frac{B'}{2(V_m - k_0\beta_m)} - \frac{C'}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V_m - k_0\beta_m)}{(V_m + e_m)} \right] + \\ & - \frac{D'\ln(V_m + e_m)}{(e_m + k_0\beta_m)^2} - \frac{D'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e_m - k_0\beta_m)} + \frac{D'(e_m - k_0\beta_m)\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + \\ & + \frac{D'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{(k_0\beta_m + e_m)(e_m - k_0\beta_m)} + \frac{D'}{(k_0\beta_m + e_m)(V_m - k_0\beta_m)} - \frac{E'\ln(V_m)}{e_m k_0^2 \beta_m^2} + \\ & + \frac{E'\ln(V_m + e_m)}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} - \frac{E'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m - k_0\beta_m)} + \frac{E'(e_m - k_0\beta_m)\ln(V_m - k_0\beta_m)}{k_0^2 \beta_m^2 e_m^2} + \\ & - \frac{E'(e_m - k_0\beta_m)\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m + k_0\beta_m)^2} + \frac{E'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{(e_m - k_0\beta_m)(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m} + \\ & + \frac{E'}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)(V_m - k_0\beta_m)} + \frac{F'\ln(V_m)}{k_0\beta_m e_m} - \frac{F'\ln(V_m + e_m)}{e_m(e_m + k_0\beta_m)} + \\ & - \frac{F'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \end{aligned} \quad (130)$$

Sustituyendo la ecuación (130) en (108) se obtiene:

APÉNDICE B (Conclusión)

$$\begin{aligned}
\Delta H'_m = & \frac{A'}{(V_m - k_0)} + \frac{B'}{2(V_m - k_0\beta_m)} - \frac{C'}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V_m - k_0\beta_m)}{(V_m + e_m)} \right] + \\
& - \frac{D' \ln(V_m + e_m)}{(e_m + k_0\beta_m)^2} - \frac{D' \ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e_m - k_0\beta_m)} + \frac{D'(e_m - k_0\beta_m) \ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + \\
& + \frac{D' \ln(V_m - k_0\beta_m)}{(k_0\beta_m + e_m)(e_m - k_0\beta_m)} + \frac{D'}{(k_0\beta_m + e_m)(V_m - k_0\beta_m)} - \frac{E' \ln(V_m)}{e_m k_0^2 \beta_m^2} + \\
& + \frac{E' \ln(V_m + e_m)}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} - \frac{E' \ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m - k_0\beta_m)} + \frac{E'(e_m - k_0\beta_m) \ln(V_m - k_0\beta_m)}{k_0^2 \beta_m^2 e_m^2} + \\
& - \frac{E'(e_m - k_0\beta_m) \ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m + k_0\beta_m)^2} + \frac{E' \ln(V_m - k_0\beta_m)}{(e_m - k_0\beta_m)(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m} + \\
& + \frac{E'}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)(V_m - k_0\beta_m)} + \frac{F' \ln(V_m)}{k_0\beta_m e_m} - \frac{F' \ln(V_m + e_m)}{e_m(e_m + k_0\beta_m)} + \\
& - \frac{F' \ln(V_m - k_0\beta_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} - RT + PV_m
\end{aligned} \tag{131}$$

Se sustituyen los términos A' , B' , C' , D' , E' y F' de las ecuaciones (117) – (124).

La ecuación (131) puede aplicarse a compuestos puros haciendo $i=1$ y se obtiene (67).

APÉNDICE C

FUNCIÓN PARA EVALUAR LA ENTROPÍA RESIDUAL USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH

APÉNDICE C

FUNCIÓN PARA EVALUAR LA ENTROPÍA RESIDUAL USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH

Partiendo de la definición de propiedad residual para la entropía específica^[2]:

$$\Delta S' = S_g - S^{IG} \quad (132)$$

Para el estado de gas ideal a composición constante tenemos:

$$dS^{IG} = \sum_{i=1}^{i=N} y_i C_{p_i}^{IG} \frac{dT}{T} - R \frac{dP}{P} \quad (133)$$

Integrando desde un estado de referencia de gas ideal a las condiciones T_0 y P_0 hasta T y P de interés tenemos:

$$S_g = S_0^{IG} + \int_{T_0}^T \sum_{n=0}^{n=i} y_i C_{p_i}^{IG} dT - R \ln \left(\frac{P}{P_0} \right) + \Delta S_m' \quad (134)$$

$$\Delta S_m' = - \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{R}{V} - \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_{V_m} \right] dV \quad (135)$$

Partiendo de la ecuación de Shah (36):

$$P = \frac{RT}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V - k_0 \beta_m)^2} - \frac{a_m V + k_0 \beta_m c_m}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} \quad (36)$$

y considerando las ecuaciones (37) – (53) en la metodología:

$$\beta_m = \sum_{i=1}^N y_i \beta_i \quad (37)$$

APÉNDICE C (Continuación)

Donde:

$$\beta_i = \beta_{ci} \left\{ \exp \left[-0.03125 \ln(T_{ri}) - 0.0054 [\ln(T_{ri})]^2 \right] \right\}^3 \quad (38)$$

$$\beta_{ci} = b_r V_{ci} \quad (39)$$

Regla de mezclado de Van der Waals aplicadas a la ecuación cuártica de Shah:

$$a_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j (a_{ci} \alpha_i a_{cj} \alpha_j)^{1/2} \quad (40)$$

$$c_m = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j (c_{ci} \xi_i c_{cj} \xi_j)^{1/2} \quad (41)$$

$$e_m = \sum_{i=1}^N y_i e_i \quad (42)$$

$$\mu_i^* = \frac{0.3976 \mu_i}{(RT_{ci} V_{ci})^{0.5}} \quad (43)$$

$$X_{ni} = X_{n1i} + X_{n2i} \omega_i + X_{n3i} \mu_i^* + X_{n4i} \mu_i^{*2} \quad \text{para } n = 2, 3, 4, 5, 6, \text{ y } 7 \quad (44)$$

Donde para $T_{ri} \leq 1$ entonces:

$$\alpha_i = \left[1 + X_{2i} (1 - \sqrt{T_{ri}}) + X_{3i} (1 - \sqrt{T_{ri}})^2 + X_{4i} (1 - \sqrt{T_{ri}})^3 \right]^2 \quad (45)$$

Donde para $T_{ri} > 1$ entonces:

APÉNDICE C (Continuación)

$$\alpha_i = \left[1 + X_{2i}(1 - \sqrt{T_{ri}}) + X_{5i}(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 + X_{6i}(1 - \sqrt{T_{ri}})^3 \right]^2 \quad (46)$$

$$\xi_i = \left[1 + X_{7i}(1 - \sqrt{T_{ri}}) \right]^2 \quad (47)$$

$$a_{ri} = a_{r0}(1 + a_{r1}\omega_i + a_{r2}\omega_i^2 + a_{r3}\mu_i^* + a_{r4}\mu_i^{*2}) \quad (48)$$

$$c_{ri} = c_{r0}(1 + c_{r1}\omega_i + c_{r2}\omega_i^2 + c_{r3}\mu_i^* + c_{r4}\mu_i^{*2}) \quad (49)$$

$$e_{ri} = e_{r0}(1 + e_{r1}\omega_i + e_{r2}\omega_i^2) \quad (50)$$

$$a_{ci} = \frac{a_{ri}RT_{ci}}{\rho_{Ci}} \quad (51)$$

$$c_{ci} = \frac{c_{ri}RT_{ci}}{\rho_{Ci}} \quad (52)$$

$$e_i = \frac{e_{ri}}{\rho_{Ci}} \quad (53)$$

En el caso de mezclas, se deriva la ecuación (36) y además al considerar las ecuaciones (37) – (53) se obtiene:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V &= R \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{T}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V + k_1 R \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m T}{(V - k_0 \beta_m)^2} \right]_V + \\ &\quad - \frac{1}{(V + e_m)} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{a_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_{Vm} - \frac{K_0}{V(V + e_m)} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m c_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V \end{aligned} \quad (110)$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$\frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{T}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_V = \frac{(V - k_0 \beta_m) + 3k_0 \sum_{i=1}^{i=N} \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^2} \quad (111)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m T}{(V - k_0 \beta_m)^2} \right]_V &= \frac{\beta_m (V - k_0 \beta_m)^2}{(V - k_0 \beta_m)^4} + \frac{3(V - k_0 \beta_m)^2 \sum_{i=1}^{i=N} \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^4} + \\ &+ \frac{6k_0 (V - k_0 \beta_m) \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^4} \end{aligned} \quad (112)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{a_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_{V_m} &= \frac{- \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} m_{1j} + \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} m_{1i} \right\}}{(V - k_0 \beta_m)^2} + \\ &+ \frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} \beta_i F_i}{T(V - k_0 \beta_m)^2} \end{aligned} \quad (113)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{\beta_m c_m}{(V - k_0 \beta_m)} \right]_{V_m} &= - \frac{\beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\}}{(V - k_0 \beta_m)} + \\ &+ \frac{3c_m \sum_{i=1}^{i=N} \beta_i F_i}{T(V - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \beta_i F_i}{T(V - k_0 \beta_m)^2} \end{aligned} \quad (114)$$

Donde:

$$F_i = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (72)$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{R}{V} - \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_v \right] - \frac{R}{(V - k_0 \beta_m)} - \frac{3Rk_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^2} + \\ & - \frac{k_1 R \beta_m}{(V - k_0 \beta_m)^2} - \frac{3k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V - k_0 \beta_m)^2} - \frac{6k_1 k_0 R \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{(V - k_0 \beta_m)^3} + \\ & - \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left[m_{1j} \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} + m_{1i} \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \right]}{(V - k_0 \beta_m)(V + e_m)} + \frac{3k_0 a_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V - k_0 \beta_m)^2 (V + e_m)} + \\ & - \frac{k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right]}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \frac{R}{V} + \\ & + \frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0^2 c_m \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{T(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} \end{aligned} \quad (136)$$

APÉNDICE C (Continuación)

Agrupando términos semejantes se tiene:

$$\begin{aligned} \left[\frac{R}{V} - \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \right] &= \frac{A'}{V} + \frac{B'}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{C'}{(V - k_0 \beta_m)^2} + \frac{D'}{(V - k_0 \beta_m)^3} + \\ &+ \frac{E'}{(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \frac{F'}{(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} + \\ &+ \frac{G'}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \frac{H'}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} \end{aligned} \quad (137)$$

$$A' = R \quad (138)$$

$$B' = -R \quad (139)$$

$$C' = -k_1 R \beta_m - 3R(k_1 + k_0) \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (140)$$

$$D' = -6Rk_1 k_0 \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (141)$$

$$E' = - \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} m_{1j} + \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} m_{1i} \right\} \quad (142)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{li} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

$$F' = \frac{3k_0 a_m}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (143)$$

$$G' = -k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=N}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} - X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right] +$$

$$+ \frac{3k_0 c_m}{T} \sum_{n=0}^{n=i} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (144)$$

$$H' = \frac{3c_m k_0^2}{T} \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 [0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (145)$$

$$\Delta S' = - \int_{\infty}^V \left[\frac{A'}{V} + \frac{B'}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{C'}{(V - k_0 \beta_m)^2} + \frac{D'}{(V - k_0 \beta_m)^3} + \frac{E'}{(V + e)(V - k_0 \beta_m)} + \right. \\ \left. + \frac{F'}{(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} + \frac{G'}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)} + \frac{H'}{V(V + e_m)(V - k_0 \beta_m)^2} \right] dV \quad (146)$$

Resolviendo analíticamente y evaluando cada una de las integrales en los límites se tiene:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{A'}{V} dV = A' \ln(V) = A' \ln(V_m) \quad (147)$$

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{B'}{(V - k_0 \beta_m)} dV = B' \ln(V - k_0 \beta_m) = B' \ln(V_m - k_0 \beta_m) \quad (148)$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{D'}{(V - k_0 \beta)^3} dV = -\frac{D'}{2(V - k_0 \beta_m)^2} = -\frac{D'}{2(V_m - k_0 \beta_m)^2} \quad (150)$$

La siguiente integral se resuelve a través de fracciones parciales:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{E'}{(V - k_0 \beta_m)(V + e_m)} dV = E' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{E''}{(V + e_m)} + \frac{E'''}{(V - k_0 \beta_m)} \right] dV \quad (151)$$

Donde:

$$\frac{1}{(V - k_0 \beta_m)(V + e_m)} = \frac{E''}{(V + e_m)} + \frac{E'''}{(V - k_0 \beta_m)} \quad (151-a)$$

$$1 = E'' (V - k_0 \beta_m) + E''' (V + e_m) \quad (151-b)$$

Si $V = k_0 \beta_m$ y sustituyendo en (151-b):

$$1 = E'' (0) + E''' (k_0 \beta_m + e_m) \quad (151-c)$$

$$E''' = \frac{1}{(e_m + k_0 \beta_m)} \quad (151-d)$$

Usando nuevamente la ecuación (151-b):

$$1 = E'' (V - k_0 \beta_m) + E''' (V + e_m) \quad (151-b)$$

Si $V = -e_m$ entonces sustituyendo en (151-b):

$$1 = E'' (-e_m - k_0 \beta_m) + E''' (0) \quad (151-e)$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$E'' = -\frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)} \quad (151-f)$$

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{E'}{(V - k_0\beta_m)(V + e_m)} dV = \int_{\infty}^{V_m} \left[-\frac{E'}{(e_m + k_0\beta_m)(V + e_m)} + \frac{E'}{(e_m + k_0\beta_m)(V - k_0\beta_m)} \right] dV \quad (151-g)$$

Resolviendo las integrales analíticamente:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{E'}{(V - k_0\beta_m)(V + e_m)} dV = \frac{E'}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V - k_0\beta_m)}{(V + e_m)} \right] \quad (151-h)$$

Sustituyendo los límites de integración se tiene:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{E'}{(V - k_0\beta_m)(V + e_m)} dV = \frac{E'}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V_m - k_0\beta_m)}{(V_m + e_m)} \right] \quad (151-i)$$

La siguiente integral se resuelve a través de fracciones parciales:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{F'}{(V - k_0\beta_m)^2(V + e_m)} dV = F' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{F''}{(V + e_m)} + \frac{F'''}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{F^{IV}}{(V - k_0\beta_m)^2} \right] dV \quad (152)$$

Donde:

$$\frac{1}{(V - k_0\beta_m)^2(V + e_m)} = \frac{F''}{(V + e_m)} + \frac{F'''}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{F^{IV}}{(V - k_0\beta_m)^2} \quad (152-a)$$

$$1 = F''(V - k_0\beta_m)^2 + F'''(V + e_m)(V - k_0\beta_m) + F^{IV}(V + e_m) \quad (152-b)$$

APÉNDICE C (Continuación)

Si $V = -e_m$ y sustituyendo en (152-b):

$$1 = F^{II} (-e_m - k_0 \beta_m)^2 + F^{III} (0)(-e_m - k_0 \beta_m) + F^{IV} (0) \quad (152-c)$$

$$F^{II} = \frac{1}{(k_0 \beta_m + e_m)^2} \quad (152-d)$$

Si $V = k_0 \beta_m$ y sustituyendo en (152-b):

$$1 = F^{II} (0)^2 + F^{III} (k_0 \beta_m + e_m)(0) + F^{IV} (k_0 \beta_m + e_m) \quad (152-e)$$

$$F^{IV} = \frac{1}{(k_0 \beta_m + e_m)} \quad (152-f)$$

Sustituyendo (152-d) y (152-f) en (152-b):

$$1 = \frac{(V - k_0 \beta_m)^2}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} + F^{III} (V + e_m)(V - k_0 \beta_m) + \frac{(V + e_m)}{(k_0 \beta_m + e_m)} \quad (152-g)$$

Si $V = e_m$ y sustituyendo en (152-g):

$$1 = \frac{(e_m - k_0 \beta_m)^2}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} + F^{III} (e_m + e_m)(e_m - k_0 \beta_m) + \frac{(e_m + e_m)}{(k_0 \beta_m + e_m)} \quad (152-h)$$

$$F^{III} = \frac{1}{2e_m (e_m - k_0 \beta_m)} - \frac{(e_m - k_0 \beta_m)}{2e_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} - \frac{1}{(k_0 \beta_m + e_m)(e_m - k_0 \beta_m)} \quad (152-i)$$

$$\int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{F^{II}}{(V + e_m)} + \frac{F^{III}}{(V - k_0 \beta_m)} + \frac{F^{IV}}{(V - k_0 \beta_m)^2} \right] dV = F' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{(e_m + k_0 \beta_m)(V + e_m)} +$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$\begin{aligned}
 & + F' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{2e_m(e_m - k_0\beta_m)(V - k_0\beta_m)} - F' \int_{\infty}^{V_m} \frac{(e_m - k_0\beta_m)dV}{2e_m(e_m - k_0\beta_m)^2(V - k_0\beta_m)} \\
 & - F' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{(e_m - k_0\beta_m)(V - k_0\beta_m)(e_m + k_0\beta_m)} + F' \int_{\infty}^{V_m} \frac{dV}{(e_m + k_0\beta_m)(V - k_0\beta_m)^2}
 \end{aligned} \tag{152-j}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{\infty}^{V_m} \frac{F'}{(V - k_0\beta_m)^2(V + e_m)} dV = F' \frac{\ln(V + e_m)}{(e + k_0\beta_m)^2} + F' \frac{\ln(V - k_0\beta_m)}{2e_m(e_m - k_0\beta_m)} \\
 & - F' \frac{(e_m - k_0\beta_m)\ln(V - k_0\beta_m)}{2e_m(e + k_0\beta_m)^2} - F' \frac{\ln(V - k_0\beta_m)}{(e - k_0\beta_m)(e + k_0\beta_m)} \\
 & - \frac{F'}{(V - k_0\beta_m)(e_m + k_0\beta_m)}
 \end{aligned} \tag{152-k}$$

Sustituyendo los límites de integración se tiene:

$$\begin{aligned}
 & \int_{\infty}^{V_m} \frac{F'}{(V - k_0\beta_m)^2(V + e_m)} dV = F' \frac{\ln(V_m + e_m)}{(e + k_0\beta_m)^2} + F' \frac{\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e - k_0\beta_m)} \\
 & - F' \frac{(e_m - k_0\beta_m)\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m(e + k_0\beta_m)^2} - F' \frac{\ln(V_m - k_0\beta_m)}{(e - k_0\beta_m)(e + k_0\beta_m)} \\
 & - \frac{F'}{(V_m - k_0\beta_m)(e + k_0\beta_m)}
 \end{aligned} \tag{152-l}$$

La siguiente integral se resuelve a través de fracciones parciales:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{G'}{V(V + e_m)(V - k_0\beta_m)} dV = G' \int_{\infty}^{V_m} \frac{G^{II}}{V} + \frac{G^{III}}{(V + e_m)} + \frac{G^{IV}}{(V - k_0\beta_m)} dV \tag{153}$$

Donde:

APÉNDICE C (Continuación)

$$\frac{1}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} = \frac{G^{II}}{V} + \frac{G^{III}}{(V+e_m)} + \frac{G^{IV}}{(V-k_0\beta_m)} \quad (153-a)$$

$$1 = G^{II}(V+e_m)(V-k_0\beta_m) + G^{III}V(V-k_0\beta_m) + G^{IV}V(V+e_m) \quad (153-b)$$

Si $V = 0$ y sustituyendo en (153-b):

$$1 = G^{II}(e_m)(-k_0\beta_m) + G^{III}(0) + G^{IV}(0) \quad (153-c)$$

$$G^{II} = -\frac{1}{k_0\beta_me_m} \quad (153-d)$$

Si $V = -e_m$ y sustituyendo en (153-b):

$$1 = G^{II}(0) + G^{III}(-e_m)(-e_m - k_0\beta_m) + G^{IV}(0) \quad (153-e)$$

$$G^{III} = \frac{1}{e_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (153-f)$$

Si $V = k_0\beta_m$ y sustituyendo en (153-b):

$$1 = G^{II}(0) + G^{III}(0) + G^{IV}(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m \quad (153-g)$$

$$G^{IV} = \frac{1}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (153-h)$$

$$\int_{-\infty}^{V_m} \frac{G'}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV = -\int_{-\infty}^{V_m} \frac{G'}{k_0\beta_me_mV} dV + \int_{-\infty}^{V_m} \frac{G'}{e_m(e_m + k_0\beta_m)(V+e_m)} dV + \int_{-\infty}^{V_m} \frac{G'}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)(V-k_0\beta_m)} dV \quad (153-i)$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{G'}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV = -\frac{G'\ln(V)}{k_0\beta_me_m} + \frac{G'\ln(V+e_m)}{e_m(e_m+k_0\beta_m)} + \frac{G'\ln(V-k_0\beta_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m+e_m)} \quad (153-j)$$

La última integral también resuelve a través de fracciones parciales:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{H'}{V(V-k_0\beta_m)^2(V+e_m)} dV = H' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{H^{II}}{V} + \frac{H^{III}}{(V+e_m)} + \frac{H^{IV}}{(V-k_0\beta_m)} + \frac{H^V}{(V-k_0\beta_m)^2} \right] dV \quad (154)$$

Donde:

$$\frac{1}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)^2} = \frac{H^{II}}{V} + \frac{H^{III}}{(V+e_m)} + \frac{H^{IV}}{(V-k_0\beta_m)} + \frac{H^V}{(V-k_0\beta_m)^2} \quad (154-a)$$

$$1 = H^{II}(V+e_m)(V-k_0\beta_m)^2 + H^{III}V(V-k_0\beta_m)^2 + H^{IV}V(V+e_m)(V-k_0\beta_m) + H^V V(V+e_m) \quad (154-b)$$

Si $V = -e_m$ y sustituyendo en (154-b):

$$1 = H^{II}(0) + H^{III}(-e_m - k_0\beta_m)^2(-e_m) + H^{IV}(0) + H^V(0) \quad (157-c)$$

$$H^{III} = -\frac{1}{e_m(k_0\beta_m + e_m)^2} \quad (154-d)$$

Si $V = 0$ y sustituyendo en (154-b):

$$1 = H^{II}(e_m)(-k_0\beta_m)^2 + H^{III}(0) + H^{IV}(0) + H^V(0) \quad (154-e)$$

$$H^{II} = \frac{1}{e_m(k_0\beta_m)^2} \quad (154-f)$$

APÉNDICE C (Continuación)

Si $V = k_0\beta_m$ y sustituyendo en (154-b):

$$1 = H''(0) + H'''(0) + H^{IV}(0) + H^V(e_m + k_0\beta_m)k_0\beta_m \quad (154-g)$$

$$H^V = \frac{1}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (154-h)$$

$$1 = \frac{(V + e_m)(V - k_0\beta_m)}{e_mk_0\beta_m} - \frac{V(V - k_0\beta_m)^2}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + H^{IV}V(V + e_m)(V - k_0\beta_m) + \frac{V(V + e_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (154-i)$$

Si $V = e_m$ y sustituyendo en (130-i):

$$1 = \frac{(2e_m)(e_m - k_0\beta_m)}{e_mk_0\beta_m} - \frac{e_m(e_m - k_0\beta_m)^2}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + H^{IV}e_m(2e_m)(e_m - k_0\beta_m) + \frac{e_m(2e_m)}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)} \quad (154-j)$$

$$H^{IV} = \frac{1}{2e_m^2(e_m - k_0\beta_m)} - \frac{(e_m - k_0\beta_m)}{k_0^2\beta_m^2e_m^2} + \frac{(e_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m + k_0\beta_m)^2} + \frac{1}{(e_m - k_0\beta_m)(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m} \quad (154-k)$$

$$H' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{H''}{V} + \frac{H'''}{(V + e_m)} + \frac{H^{IV}}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{H^V}{(V - k_0\beta_m)^2} \right] = \frac{H' \ln(V)}{e_mk_0^2\beta_m^2} + \frac{H' \ln(V + e_m)}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + \frac{H' \ln(V - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m - k_0\beta_m)} - \frac{(e_m - k_0\beta_m)H' \ln(V - k_0\beta_m)}{k_0^2\beta_m^2e_m^2} +$$

APÉNDICE C (Continuación)

$$\begin{aligned}
 & + \frac{(e_m - k_0\beta_m)H'\ln(V - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m + k_0\beta_m)^2} - \frac{H'\ln(V - k_0\beta_m)}{(e_m - k_0\beta_m)(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m} + \\
 & \qquad \qquad \qquad - \frac{H'}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)(V - k_0\beta_m)}
 \end{aligned} \tag{154-l}$$

Sustituyendo los límites de integración se obtiene:

$$\begin{aligned}
 & H' \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{H''}{V} + \frac{H'''}{(V + e_m)} + \frac{H''''}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{H'''''}{(V - k_0\beta_m)^2} \right] = \frac{H'\ln(V_m)}{e_m k_0^2 \beta_m^2} + \\
 & - \frac{H'\ln(V_m + e_m)}{e_m(e_m + k_0\beta_m)^2} + \frac{H'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m - k_0\beta_m)} - \frac{(e_m - k_0\beta_m)H'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{k_0^2 \beta_m^2 e_m^2} + \\
 & + \frac{(e_m - k_0\beta_m)H'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{2e_m^2(e_m + k_0\beta_m)^2} - \frac{H'\ln(V_m - k_0\beta_m)}{(e_m - k_0\beta_m)(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m} + \\
 & \qquad \qquad \qquad - \frac{H'}{k_0\beta_m(k_0\beta_m + e_m)(V_m - k_0\beta_m)}
 \end{aligned} \tag{154-m}$$

Sustituyendo las integrales (147), (148), (149), (150), (151-i), (152-l), (153-k) y (154-m) en la ecuación (146) finalmente se obtiene:

APÉNDICE C (Conclusión)

$$\begin{aligned}
\Delta S_m' = & -A' \ln(V_m) - B' \ln(V_m - k_0 \beta_m) + \frac{C'}{(V_m - k_0 \beta_m)} + \frac{D'}{2(V_m - k_0 \beta_m)^2} + \\
& - \frac{E'}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_m - k_0 \beta_m)}{(V_m + e_m)} \right] - F' \frac{\ln(V_m + e_m)}{(e + k_0 \beta_m)^2} - F' \frac{\ln(V_m - k_0 \beta_m)}{2e_m (e - k_0 \beta_m)} + \\
& + F' \frac{(e_m - k_0 \beta_m) \ln(V_m - k_0 \beta_m)}{2e_m (e + k_0 \beta_m)^2} + F' \frac{\ln(V_m - k_0 \beta_m)}{(e - k_0 \beta_m)(e + k_0 \beta_m)} + \\
& + \frac{F'}{(V_m - k_0 \beta_m)(e + k_0 \beta_m)} + \frac{G' \ln(V_m)}{k_0 \beta_m e_m} - \frac{G' \ln(V_m + e_m)}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)} - \frac{G' \ln(V_m - k_0 \beta_m)}{k_0 \beta_m (k_0 \beta_m + e_m)} + \\
& - \frac{H' \ln(V_m)}{e_m k_0^2 \beta_m^2} + \frac{H' \ln(V_m + e_m)}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} - \frac{H' \ln(V_m - k_0 \beta_m)}{2e_m^2 (e_m - k_0 \beta_m)} + \frac{(e_m - k_0 \beta_m) H' \ln(V_m - k_0 \beta_m)}{k_0^2 \beta_m^2 e_m^2} + \\
& - \frac{(e_m - k_0 \beta_m) H' \ln(V_m - k_0 \beta_m)}{2e_m^2 (e_m + k_0 \beta_m)^2} + \frac{H' \ln(V_m - k_0 \beta_m)}{(e_m - k_0 \beta_m)(k_0 \beta_m + e_m) k_0 \beta_m} + \\
& + \frac{H'}{k_0 \beta_m (k_0 \beta_m + e_m)(V_m - k_0 \beta_m)}
\end{aligned} \tag{155}$$

Donde los términos $A', B', C', D', E', F', G'$ y H' se toman de las ecuaciones (138) – (145) y se obtiene la ecuación (78) para mezclas.

La misma ecuación (155) también puede aplicarse a compuestos puros haciendo $i = 1$ y quedando la ecuación (76).

APÉNDICE D

FUNCIÓN PARA EVALUAR LA PRESIÓN DE SATURACIÓN USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH

APÉNDICE D

FUNCIÓN PARA EVALUAR LA PRESIÓN DE SATURACIÓN USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH

Partiendo de la ecuación de Shah (36):

$$P = \frac{RT}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V - k_0\beta_m)^2} - \frac{a_m V + k_0\beta_m c_m}{V(V + e_m)(V - k_0\beta_m)} \quad (36)$$

Si se consideran las ecuaciones (37) – (53) en la metodología, además de usar el método de áreas iguales de Maxwell ^[1] se tiene que:

$$\int_l^g \left[\frac{RT}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V - k_0\beta_m)^2} - \frac{a_m V + k_0\beta_m c_m}{V(V + e_m)(V - k_0\beta_m)} \right] dV = P^{sat}(V_g - V_l) \quad (156)$$

Despejando la presión de saturación de la ecuación se tiene:

$$P^{sat} = \frac{\int_l^g \left[\frac{RT}{(V - k_0\beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V - k_0\beta_m)^2} - \frac{a_m V + k_0\beta_m c_m}{V(V + e_m)(V - k_0\beta_m)} \right] dV}{(V_g - V_l)} \quad (157)$$

Integrando cada uno de los términos se tiene:

$$\int_l^g \left[\frac{RT}{(V - k_0\beta_m)} \right] dV = RT \ln \left(\frac{V_g - k_0\beta_m}{V_l - k_0\beta_m} \right) \quad (158)$$

$$\int_l^g \left[\frac{\beta_m k_1 RT}{(V - k_0\beta_m)^2} \right] dV = -\frac{\beta_m k_1 RT}{(V_g - k_0\beta_m)} + \frac{\beta_m k_1 RT}{(V_l - k_0\beta_m)} \quad (159)$$

$$\int_l^g \left[-\frac{a_m}{(V + e_m)(V - k_0\beta_m)} \right] dV = -a_m \int_l^g \frac{A}{(V + e_m)} + \frac{B}{(V - k_0)} dV \quad (160)$$

Usando el método de fracciones parciales para simplificar la integral queda:

APÉNDICE D (Continuación)

$$\int_l^g \left[-\frac{a_m}{(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} \right] dV = -a_m \int_{\infty}^{V_m} \left[\frac{A}{(V+e_m)} + \frac{B}{(V-k_0\beta_m)} \right] dV \quad (161)$$

Donde:

$$\frac{1}{(V-k_0\beta_m)(V+e_m)} = \frac{A}{(V+e_m)} + \frac{B}{(V-k_0\beta_m)} \quad (161-a)$$

$$1 = A(V-k_0\beta_m) + B(V+e_m) \quad (161-b)$$

Si $V = -e_m$ entonces sustituyendo en (161-b):

$$A = -\frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)} \quad (161-c)$$

Si $V = k_0\beta_m$ y sustituyendo en (161-b):

$$1 = A(0) + B(k_0\beta_m + e_m) \quad (161-d)$$

$$B = \frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)} \quad (161-e)$$

$$\int_l^g \frac{-a_m}{(V-k_0\beta_m)(V+e_m)} dV = -a_m \int_{\infty}^{V_m} \left[-\frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)(V+e_m)} + \frac{1}{(e_m + k_0\beta_m)(V-k_0\beta_m)} \right] dV \quad (161-f)$$

Resolviendo la integral analíticamente y evaluando sus límites:

$$\int_{\infty}^{V_m} \frac{-a_m}{(V-k_0\beta_m)(V+e_m)} dV = \frac{a_m}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V_l - k_0\beta_m)(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \quad (161-g)$$

La siguiente integral se resuelve también por el método de fracciones parciales:

$$-\int_l^g \frac{k_0\beta_m c_m}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV = -k_0\beta_m c_m \int_l^g \frac{A}{V} + \frac{B}{(V+e_m)} + \frac{C}{(V-k_0\beta_m)} dV \quad (162)$$

Donde:

APÉNDICE D (Continuación)

$$\frac{1}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} = \frac{A}{V} + \frac{B}{(V+e_m)} + \frac{C}{(V-k_0\beta_m)} \quad (162-a)$$

$$1 = A(V+e_m)(V-k_0\beta_m) + BV(V-k_0\beta_m) + CV(V+e_m) \quad (162-b)$$

Si $V = 0$ y sustituyendo en (162-b):

$$1 = A(e_m)(-k_0\beta_m) + B(0) + C(0) \quad (162-c)$$

$$A = -\frac{1}{k_0\beta_m e_m} \quad (162-d)$$

Si $V = k_0\beta_m$ y sustituyendo en (162-b):

$$1 = A(0) + B(0) + C(k_0\beta_m + e_m)k_0\beta_m \quad (162-e)$$

$$C = \frac{1}{k_0\beta_m (k_0\beta_m + e_m)} \quad (162-f)$$

Si $V = -e_m$ y sustituyendo en (162-b):

$$1 = A(0) + B(-e_m)(-e_m - k_0\beta_m) + C(0) \quad (162-g)$$

$$B = \frac{1}{e_m (k_0\beta_m + e_m)} \quad (162-h)$$

Sustituyendo las constantes obtenidas:

$$\begin{aligned} -\int_l^g \frac{k_0\beta_m c_m}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV &= -\int_l^g \frac{k_0\beta_m c_m}{k_0\beta_m e_m V} dV + \int_l^g \frac{k_0\beta_m c_m}{e_m (e_m + k_0\beta_m)(V+e_m)} dV + \\ &+ \int_l^g \frac{k_0\beta_m c_m}{k_0\beta_m (k_0\beta_m + e_m)(V-k_0\beta_m)} dV \end{aligned} \quad (162-i)$$

Evaluando la integral en sus límites:

$$\begin{aligned} -\int_l^g \frac{k_0\beta_m c_m}{V(V+e_m)(V-k_0\beta_m)} dV &= -\frac{c_m}{e_m} \ln\left(\frac{V_g}{V_l}\right) - \frac{k_0}{e_m (e_m + k_0\beta_m)} \ln\left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)}\right] \\ &- \frac{c_m}{(k_0\beta_m + e_m)} \ln\left[\frac{(V_g - k_0\beta_m)}{(V_l - k_0\beta_m)}\right] \end{aligned} \quad (162-j)$$

APÉNDICE D (Conclusión)

con las integrales obtenidas (158), (159), (160), (161-g) y (162-j) se sustituyen en (157) y se obtiene:

$$P^{sat} = \frac{\left\{ \begin{aligned} &RT \ln \left(\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right) - k_1 \beta_m RT \left[\frac{1}{(V_g - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] + \\ &+ \frac{a_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0 \beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0 \beta_m)} \right] - \frac{k_0 \beta_m c_m}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right] + \\ &+ \frac{c_m}{e_m} \ln \left(\frac{V_g}{V_l} \right) - \frac{c_m}{(k_0 \beta_m + e_m)} \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \end{aligned} \right\}}{(V_g - V_l)} \quad (163)$$

La ecuación (163) puede aplicarse a compuestos puros haciendo $i = 1$ y sustituyendo los volúmenes específicos del líquido y vapor saturado obtenidos en el apéndice A con la ecuación (59) a la temperatura de saturación resolviendo el polinomio de cuarto orden.

Para aplicar esta ecuación a mezclas es necesario estimar el volumen de líquido saturado a la temperatura del líquido en la saturación y el volumen del vapor saturado a la temperatura del vapor en la saturación.

APÉNDICE E

**FUNCIÓN PARA EVALUAR LA DERIVADA DE LA PRESIÓN DE
SATURACIÓN RESPECTO DE LA TEMPERATURA
USANDO LA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH**

APÉNDICE E

FUNCIÓN PARA EVALUAR LA DERIVADA DE LA PRESIÓN DE SATURACIÓN RESPECTO DE LA TEMPERATURA USANDOLA ECUACIÓN CUÁRTICA DE SHAH

Tomando la ecuación (163) obtenida en el APÉNDICE D:

$$P^{sat} = \frac{\left\{ \begin{aligned} &RT \ln \left(\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right) - k_1 \beta_m RT \left[\frac{1}{(V_g - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] + \\ &\frac{a_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0 \beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0 \beta_m)} \right] - \frac{k_0 \beta_m c_m}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right] + \\ &\frac{c_m}{e_m} \ln \left(\frac{V_g}{V_l} \right) - \frac{c_m}{(k_0 \beta_m + e_m)} \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \end{aligned} \right\}}{(V_g - V_l)} \quad (163)$$

Derivando la ecuación (163) respecto a la temperatura se tiene:

$$\frac{dP^{sat}}{dT} = \frac{\left\{ \begin{aligned} &R \frac{d}{dT} \left[T \ln \left(\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right) \right] - k_1 R \frac{d}{dT} \left\{ \beta_m T \left[\frac{1}{(V_g - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right\} + \\ &\frac{d}{dT} \left\{ \frac{a_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0 \beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0 \beta_m)} \right] \right\} - \frac{k_0}{e_m} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right] \frac{d}{dT} \left\{ \frac{\beta_m c_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \right\} + \\ &\frac{1}{e_m} \ln \left(\frac{V_g}{V_l} \right) \frac{d}{dT} \{c_m\} - \frac{d}{dT} \left\{ \frac{c_m}{(k_0 \beta_m + e_m)} \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right\} \end{aligned} \right\}}{(V_g - V_l)} \quad (164)$$

Derivando cada término se tiene:

$$R \frac{d}{dT} \left[T \ln \left(\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right) \right] = T \frac{d}{dT} \left[\ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \right] + \ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \quad (165)$$

APÉNDICE E (Continuación)

$$\frac{d}{dT} \left[\ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \right] = \left(\frac{V_l - k_0 \beta_m}{V_g - k_0 \beta_m} \right) \frac{d}{dT} \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \quad (165-a)$$

$$\frac{d}{dT} \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) = \frac{(V_l - k_0 \beta_m) \frac{d}{dT} (V_g - k_0 \beta_m) - (V_g - k_0 \beta_m) \frac{d}{dT} (V_l - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)^2} \quad (165-b)$$

$$\frac{d}{dT} (V_g - k_0 \beta_m) = -k_0 \frac{d\beta_m}{dT} \quad (165-c)$$

y considerando las ecuaciones (37) – (39) en la metodología:

$$\beta_m = \sum_{i=1}^N y_i \beta_i \quad (37)$$

Donde:

$$\beta_i = \beta_{ci} \left\{ \exp \left[-0.03125 \ln(T_{ri}) - 0.0054 [\ln(T_{ri})]^2 \right] \right\}^3 \quad (38)$$

$$\beta_{ci} = b_r V_{ci} \quad (39)$$

Derivando:

$$\frac{d\beta_m}{dT} = 3 \sum_{i=1}^N y_i \beta_i \left[-\frac{0.03125}{T} - \frac{2(0.0054) \ln(T_{ri})}{T} \right] \quad (165-d)$$

Sustituyendo la derivada obtenida se tiene:

$$\frac{d}{dT} (V_g - k_0 \beta_m) = -\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^N y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (165-e)$$

$$\frac{d}{dT} (V_l - k_0 \beta_m) = -\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^N y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (165-f)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dT} \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) &= -\frac{3k_0 \sum_{i=1}^N y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})]}{T(V_l - k_0 \beta_m)} + \\ &+ \frac{3k_0 (V_g - k_0 \beta_m) \sum_{i=1}^N y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})]}{T(V_l - k_0 \beta_m)^2} \end{aligned} \quad (165-g)$$

APÉNDICE E (Continuación)

$$\frac{d}{dT} \left[\ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \right] = \left(\frac{V_l - k_0 \beta_m}{V_g - k_0 \beta_m} \right) \left\{ \begin{array}{l} - \frac{3k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V_l - k_0 \beta_m)} + \\ + \frac{3k_0 (V_g - k_0 \beta_m) \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V_l - k_0 \beta_m)^2} \end{array} \right\} \quad (165-h)$$

Donde:

$$F_i = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (72)$$

$$R \frac{d}{dT} \left[T \ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \right] = 3Rk_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \left\{ \frac{1}{(V_l - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_g - k_0 \beta_m)} \right\} + R \ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \quad (165-i)$$

$$-k_1 R \frac{d}{dT} \left\{ \beta_m T \left[\frac{1}{(V_g - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right\} = -k_1 R \frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m T}{(V_g - k_0 \beta_m)} \right] + k_1 R \frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m T}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \quad (166)$$

Resolviendo para el primer término de la derivada:

$$-k_1 R \frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m T}{(V_g - k_0 \beta_m)} \right] = \frac{k_1 R \left\{ \begin{array}{l} - (V_g - k_0 \beta_m) \frac{d(\beta_m T)}{dT} + \\ + \beta_m T \frac{d(V_g - k_0 \beta_m)}{dT} \end{array} \right\}}{(V_g - k_0 \beta_m)} \quad (166-a)$$

$$\frac{d(\beta_m T)}{dT} = \beta_m + T \frac{d\beta_m}{dT} = \beta_m + 3k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \quad (166-b)$$

De la ecuación (165-e) y (165-f):

$$\frac{d}{dT} (V_g - k_0 \beta_m) = -\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (165-e)$$

$$\frac{d}{dT} (V_l - k_0 \beta_m) = -\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (165-f)$$

APÉNDICE E (Continuación)

Sustituyendo las derivadas (166-a) y (165-e) en la ecuación (166-a) queda:

$$\begin{aligned}
 -k_1 R \frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m T}{(V_g - k_0 \beta_m)} \right] &= \frac{-k_1 R \beta_m}{(V_g - k_0 \beta_m)} - \frac{3k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_g - k_0 \beta_m)} + \\
 &- \frac{3k_0 k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{(V_g - k_0 \beta_m)^2}
 \end{aligned} \tag{166-c}$$

Desarrollando para el segundo término de la ecuación (166) solamente cambiando de signo la ecuación (166-c) se tiene:

$$\begin{aligned}
 k_1 R \frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m T}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] &= \frac{k_1 R \beta_m}{(V_l - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_l - k_0 \beta_m)} + \\
 &+ \frac{3k_0 k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{(V_l - k_0 \beta_m)^2}
 \end{aligned} \tag{166-d}$$

Sustituyendo (166-c) y (166-d) en (166) se obtiene:

$$\begin{aligned}
 -k_1 R \frac{d}{dT} \left\{ \beta_m T \left[\frac{1}{(V_g - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right\} &= \frac{-k_1 R \beta_m}{(V_g - k_0 \beta_m)} - \frac{3k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_g - k_0 \beta_m)} + \\
 &- \frac{3k_0 k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{(V_g - k_0 \beta_m)^2} + \frac{k_1 R \beta_m}{(V_l - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_l - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0 k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i}{(V_l - k_0 \beta_m)^2}
 \end{aligned} \tag{166-e}$$

El siguiente término se deriva respecto a la temperatura:

APÉNDICE E (Continuación)

$$\frac{d}{dT} \left\{ \frac{a_m}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0\beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \right\} = \frac{\left\{ \begin{aligned} &(e_m + k_0\beta_m) \frac{d}{dT} \left\{ a_m \ln \left[\frac{(V_l - k_0\beta_m)(V_g + e_m)}{(V_g - k_0\beta_m)(V_l + e_m)} \right] \right\} + \\ &- a_m \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0\beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \frac{d(e_m + k_0\beta_m)}{dT} \end{aligned} \right\}}{(e_m + k_0\beta_m)^2} \quad (167)$$

$$\frac{d}{dT} \left\{ a_m \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0\beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \right\} = a_m \frac{d}{dT} \left\{ \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0\beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \right\} + \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0\beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \frac{da_m}{dT} \quad (167-a)$$

$$\frac{d}{dT} \left\{ \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0\beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \right\} = \frac{d(V_l - k_0\beta_m)}{dT} \frac{1}{(V_l - k_0\beta_m)} - \frac{d(V_g - k_0\beta_m)}{dT} \frac{1}{(V_g - k_0\beta_m)} \quad (167-b)$$

De la ecuación (165-e) se tiene que:

$$\frac{d}{dT}(V_g - k_0\beta_m) = \frac{d}{dT}(V_l - k_0\beta_m) = -\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \quad (167-c)$$

Por lo tanto (167-b) queda:

$$\frac{d}{dT} \left\{ \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0\beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0\beta_m)} \right] \right\} = \frac{-\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_l - k_0\beta_m)} + \frac{\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_g - k_0\beta_m)} \quad (167-d)$$

Para la segunda parte de la derivada de la ecuación (167-a) se tiene que:

$$\frac{da_m}{dT} = \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \frac{d(\alpha_i^{1/2} \alpha_j^{1/2})}{dT} \quad (167-e)$$

$$\frac{d(\alpha_i^{1/2} \alpha_j^{1/2})}{dT} = \frac{\alpha_i^{1/2} \alpha_j^{-1/2}}{2} \frac{d\alpha_j}{dT} + \frac{\alpha_j^{1/2} \alpha_i^{-1/2}}{2} \frac{d\alpha_i}{dT} \quad (167-f)$$

$$\frac{d\alpha_i}{dT} = \frac{d}{dT} \left\{ (1 + X_2(1 - \sqrt{T_{ri}}) + X_3(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 + X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^3)^2 \right\} \quad (167-g)$$

APÉNDICE E (Continuación)

$$\frac{d\alpha_i}{dT} = 2\alpha_i^{1/2} \left[\frac{-X_2 T_{ci}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{ci}} - \frac{X_3 2(1-\sqrt{T_{ri}}) T_{ci}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{ci}} - \frac{X_4 3(1-\sqrt{T_{ri}})^2 T_{ci}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{ci}} \right] \quad (167-h)$$

$$\frac{d\alpha_i}{dT} = \frac{d}{dT} \left\{ (1 + X_2(1-\sqrt{T_{ri}}) + X_5(1-\sqrt{T_{ri}})^2 + X_6(1-\sqrt{T_{ri}})^3)^2 \right\} \quad (167-i)$$

$$\frac{d\alpha_i}{dT} = 2\alpha_i^{1/2} \left[\frac{-X_2 T_{ci}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{ci}} - \frac{X_5 2(1-\sqrt{T_{ri}}) T_{ci}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{ci}} - \frac{X_6 3(1-\sqrt{T_{ri}})^2 T_{ci}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{ci}} \right] \quad (167-j)$$

$$\frac{d\alpha_j}{dT} = \frac{d}{dT} \left\{ (1 + X_2(1-\sqrt{T_{rj}}) + X_5(1-\sqrt{T_{rj}})^2 + X_6(1-\sqrt{T_{rj}})^3)^2 \right\} \quad (167-k)$$

$$\frac{d\alpha_j}{dT} = 2\alpha_j^{1/2} \left[\frac{-X_2 T_{cj}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{cj}} - \frac{X_3 2(1-\sqrt{T_{rj}}) T_{cj}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{cj}} - \frac{X_4 3(1-\sqrt{T_{rj}})^2 T_{cj}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{cj}} \right] \quad (167-l)$$

$$\frac{d\alpha_j}{dT} = \frac{d}{dT} \left\{ (1 + X_2(1-\sqrt{T_{rj}}) + X_5(1-\sqrt{T_{rj}})^2 + X_6(1-\sqrt{T_{rj}})^3)^2 \right\} \quad (167-m)$$

$$\frac{d\alpha_j}{dT} = 2\alpha_j^{1/2} \left[\frac{-X_2 T_{cj}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{cj}} - \frac{X_5 2(1-\sqrt{T_{rj}}) T_{cj}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{cj}} - \frac{X_6 3(1-\sqrt{T_{rj}})^2 T_{cj}^{1/2}}{2T^{1/2} T_{cj}} \right] \quad (167-n)$$

Sustituyendo las derivadas obtenidas (167-h), (167-j), (167-l), (167-n) en (167-f) se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{d(\alpha_i^{1/2} \alpha_j^{1/2})}{dT} = & -\sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} \left[X_2 + 2X_3(1-\sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1-\sqrt{T_{rj}})^2 \right] + \\ & -\sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \left[X_2 + 2X_3(1-\sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1-\sqrt{T_{ri}})^2 \right] \end{aligned} \quad (167-ñ)$$

Para el término j se sustituyen las derivadas obtenidas (167-h), (167-j), (167-l), (167-n) en (167-f) se tiene:

APÉNDICE E (Continuación)

$$\begin{aligned} \frac{d(\alpha_i^{1/2} \alpha_j^{1/2})}{dT} = & -\sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} \left[X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2 \right] + \\ & -\sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \left[X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 \right] \end{aligned} \quad (167-o)$$

Sustituyendo (167-n) o (167-ñ) en (167-d) queda:

$$\frac{da_m}{dT} = -\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ \begin{aligned} & \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} \left[X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2 \right] + \\ & \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \left[X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 \right] \end{aligned} \right\} \quad (167-o)$$

Y para el término j queda:

$$\frac{da_m}{dT} = -\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ \begin{aligned} & \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} \left[X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2 \right] + \\ & \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \left[X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 \right] \end{aligned} \right\} \quad (167-p)$$

Sustituyendo (167-o) o (167-p) en (167-a) queda:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dT} \left\{ a_m \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0 \beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0 \beta_m)} \right] \right\} = & a_m \left\{ \frac{-3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_l - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_g - k_0 \beta_m)} \right\} + \\ & -\ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0 \beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0 \beta_m)} \right] \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ \begin{aligned} & \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} \left[X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2 \right] + \\ & \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \left[X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2 \right] \end{aligned} \right\} \end{aligned} \quad (167-q)$$

Para facilitar el manejo de ecuaciones se hace que:

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

APÉNDICE E (Continuación)

$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{li} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{li} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dT} \left[\frac{a_m}{(e_m + k_0\beta_m)} \ln \left[\frac{(V_l - k_0\beta_m)(V_g + e_m)}{(V_g - k_0\beta_m)(V_l + e_m)} \right] \right] = \\ - \frac{3k_0 a_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(e_m + k_0\beta_m)(e_m + k_0\beta_m)} \left[\frac{1}{(V_l - k_0\beta_m)} - \frac{1}{(V_g - k_0\beta_m)} \right] + \\ \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left\{ m_{lj} \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} + m_{li} \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \right\} \ln \left[\frac{(V_l - k_0\beta_m)(V_g + e_m)}{(V_g - k_0\beta_m)(V_l + e_m)} \right]}{(e_m + k_0\beta_m)} + \\ \frac{3a_m k_0 \ln \left[\frac{(V_l - k_0\beta_m)(V_g + e_m)}{(V_g - k_0\beta_m)(V_l + e_m)} \right] i=1 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(e_m + k_0\beta_m)^2} \end{aligned} \quad (167-r)$$

Ahora se desarrolla la siguiente derivada:

$$\ln \left(\frac{V_g}{V_l} \right) \frac{1}{e_m} \frac{dc_m}{dT} = \ln \left(\frac{V_g}{V_l} \right) \frac{1}{e_m} \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \frac{d(\xi_i^{1/2} \xi_j^{1/2})}{dT} \quad (168)$$

Al desarrollar la derivada se tiene:

$$\frac{d(\xi_i^{1/2} \xi_j^{1/2})}{dT} = \xi_i \frac{d(\xi_j^{1/2})}{dT} + \xi_j \frac{d(\xi_i^{1/2})}{dT} \quad (168-a)$$

$$\frac{d(\xi_i^{1/2})}{dT} = \frac{d}{dT} \left\{ \left[(1 + X_{7i}(1 - \sqrt{T_{ri}})^2) \right]^{1/2} \right\} \quad (168-b)$$

$$\frac{d}{dT} \left[(1 + X_{7i}(1 - \sqrt{T_{ri}})) \right] = \frac{-X_{7i}}{\sqrt{4TT_{cj}}} \quad (168-c)$$

Para el término j se tiene:

$$\frac{d}{dT} \left[(1 + X_{7j}(1 - \sqrt{T_{ri}})) \right] = \frac{-X_{7j}}{\sqrt{4TT_{ci}}} \quad (168-d)$$

APÉNDICE E (Continuación)

Sustituyendo (168-c) y (168-d) en la ecuación (168-a):

$$\frac{d(\xi_i^{1/2} \xi_j^{1/2})}{dT} = \xi_i \left[\frac{-X_{7j}}{\sqrt{4TT_{ci}}} \right] + \xi_j \left[\frac{-X_{7i}}{\sqrt{4TT_{cj}}} \right] \quad (168-e)$$

Sustituyendo (168-e) en (168):

$$\frac{dc_m}{dT} = - \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\} \quad (168-f)$$

$$\ln \left(\frac{V_g}{V_l} \right) \frac{1}{e_m} \frac{dc_m}{dT} = - \ln \left(\frac{V_g}{V_l} \right) \frac{1}{e_m} \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\} \quad (168-g)$$

Al desarrollar la siguiente derivada se obtiene:

$$- \frac{k_0}{e_m} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right] \frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m c_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \right] =$$

$$\frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m c_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \right] = \frac{(e_m + k_0 \beta_m) \frac{d(\beta_m c_m)}{dT} - (\beta_m c_m) \frac{d(e_m + k_0 \beta_m)}{dT}}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} \quad (169)$$

$$\frac{d(\beta_m c_m)}{dT} = \beta_m \frac{dc_m}{dT} + c_m \frac{d\beta_m}{dT} \quad (169-a)$$

$$\frac{d(\beta_m c_m)}{dT} = -\beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\} + \frac{3c_m}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \quad (169-b)$$

$$\frac{d(e_m + k_0 \beta_m)}{dT} = \frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \quad (169-c)$$

APÉNDICE E (Continuación)

$$\frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m c_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \right] = - \frac{\beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right]}{(e_m + k_0 \beta_m)} + \quad (169-d)$$

$$\begin{aligned} & + \frac{3c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m)} - \frac{3k_0 \beta_m c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} \\ & - \frac{k_0}{e_m} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right] \frac{d}{dT} \left[\frac{\beta_m c_m}{(e_m + k_0 \beta_m)} \right] = \\ & \frac{\beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right] k_0}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right] + \quad (169-e) \end{aligned}$$

$$- \frac{3c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m)} \frac{k_0}{e_m} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right] + \frac{3k_0 \beta_m c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m)^2} \frac{k_0}{e_m} \ln \left[\frac{(V_g + e_m)}{(V_l + e_m)} \right]$$

Finalmente se desarrolla la última derivada de la ecuación:

$$\begin{aligned} & - \frac{d}{dT} \left\{ \frac{c_m}{(k_0 \beta_m + e_m)} \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right\} = \\ & - \frac{\left\{ (k_0 \beta_m + e_m) \frac{d}{dT} \left[c_m \ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \right] - c_m \ln \left(\frac{V_g - k_0 \beta_m}{V_l - k_0 \beta_m} \right) \frac{d(k_0 \beta_m + e_m)}{dT} \right\}}{(k_0 \beta_m + e_m)^2} \quad (170) \end{aligned}$$

$$\frac{d}{dT} \left[c_m \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right] = c_m \frac{d}{dT} \left\{ \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right\} + \frac{dc_m}{dT} \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \quad (170-a)$$

De la ecuación (167-d), (168-f) y (169-c) se tiene:

$$\frac{d}{dT} \left\{ \ln \left[\frac{(V_g + e_m)(V_l - k_0 \beta_m)}{(V_l + e_m)(V_g - k_0 \beta_m)} \right] \right\} = \frac{-3k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_l - k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_g - k_0 \beta_m)} \quad (167-d)$$

APÉNDICE E (Continuación)

$$\frac{dc_m}{dT} = - \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\} \quad (168-f)$$

$$\frac{d(e_m + k_0 \beta_m)}{dT} = \frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i \quad (169-c)$$

$$\frac{d}{dT} \left[c_m \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right] = c_m \left\{ \frac{-\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_l - k_0 \beta_m)} + \frac{\frac{3k_0}{T} \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(V_g - k_0 \beta_m)} \right\} + \quad (170-b)$$

$$\begin{aligned} & - \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\} \\ & - \frac{d}{dT} \left\{ \frac{c_m}{(k_0 \beta_m + e_m)} \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \right\} = \\ & \frac{3c_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V_g - k_0 \beta_m)(k_0 \beta_m + e_m)} - \frac{3c_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(V_l - k_0 \beta_m)(k_0 \beta_m + e_m)} + \\ & \frac{\ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left\{ X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right\}}{(k_0 \beta_m + e_m)} + \quad (170-c) \\ & + \frac{3k_0 c_m \ln \left[\frac{(V_g - k_0 \beta_m)}{(V_l - k_0 \beta_m)} \right] \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(k_0 \beta_m + e_m)^2} \end{aligned}$$

Finalmente sustituyendo las derivadas obtenidas (165-i), (166-e), (167-r), (168-g), (169-e), (170-c) en (164) y agrupando términos semejantes se llega a la ecuación (85):

APÉNDICE E (Conclusión)

$$\begin{aligned}
 \frac{dP^{sat}}{dT} = & \frac{\left\{ -3Rk_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i - k_1 R \beta_m \right\} \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \\
 & + \frac{\left\{ -3k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i + \frac{3k_0 a_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{(e_m + k_0 \beta_m) T} \right\} \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \\
 & + \frac{\frac{3c_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(k_0 \beta_m + e_m)} \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \\
 & + \frac{\left[R + \frac{3c_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(k_0 \beta_m + e_m)^2} \right] \ln \left[\frac{(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} + \\
 & + \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{\gamma_j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{\gamma_i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right] \ln \left[\frac{(V_{mg} - k_0 \beta_m)}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)} \right]}{(k_0 \beta_m + e_m) (V_{mg} - V_{ml})} + \\
 & - \frac{3k_0 k_1 R \sum_{i=1}^{i=N} (y_i \beta_i)^2 F_i \left[\frac{1}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)^2} - \frac{1}{(V_{ml} - k_0 \beta_m)^2} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} \\
 & - \frac{\frac{3a_m k_0 \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{T(e_m + k_0 \beta_m)^2} \ln \left[\frac{(V_{ml} - k_0 \beta_m)(V_{mg} + e_m)}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)(V_{ml} + e_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} +
 \end{aligned}$$

APÉNDICE E (Conclusión)

$$\begin{aligned}
 & - \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (a_{ci} a_{cj})^{1/2} \left[m_{1j} \sqrt{\frac{\alpha_i}{4TT_{cj}}} + m_{1i} \sqrt{\frac{\alpha_j}{4TT_{ci}}} \right]}{(e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_{ml} - k_0 \beta_m)(V_{mg} + e_m)}{(V_{mg} - k_0 \beta_m)(V_{ml} + e_m)} \right] + \\
 & \frac{\sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{cj} c_{ci})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right]}{e_m} \ln \left[\frac{V_{mg}}{V_{ml}} \right] + \\
 & + \frac{k_0 \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{j=1}^{j=N} y_i y_j (c_{ci} c_{cj})^{1/2} \left[X_{7j} \sqrt{\frac{\xi_i}{4TT_{cj}}} + X_{7i} \sqrt{\frac{\xi_j}{4TT_{ci}}} \right]}{e_m (e_m + k_0 \beta_m)} \ln \left[\frac{(V_{mg} + e_m)}{(V_{ml} + e_m)} \right] + \\
 & + \frac{\left[-\frac{3k_0 c_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{Te_m (e_m + k_0 \beta_m)} + \frac{3k_0^2 c_m \beta_m \sum_{i=1}^{i=N} y_i \beta_i F_i}{Te_m (e_m + k_0 \beta_m)^2} \right] \ln \left[\frac{(V_{mg} + e_m)}{(V_{ml} + e_m)} \right]}{(V_{mg} - V_{ml})} \quad (85)
 \end{aligned}$$

$$F_i = [-0.03125 - 2(0.0054) \ln(T_{ri})] \quad (72)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} \leq 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-a)$$

$$\text{Cuando } T_{rj} > 1 \quad m_{1j} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{rj}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{rj}})^2] \quad (73-b)$$

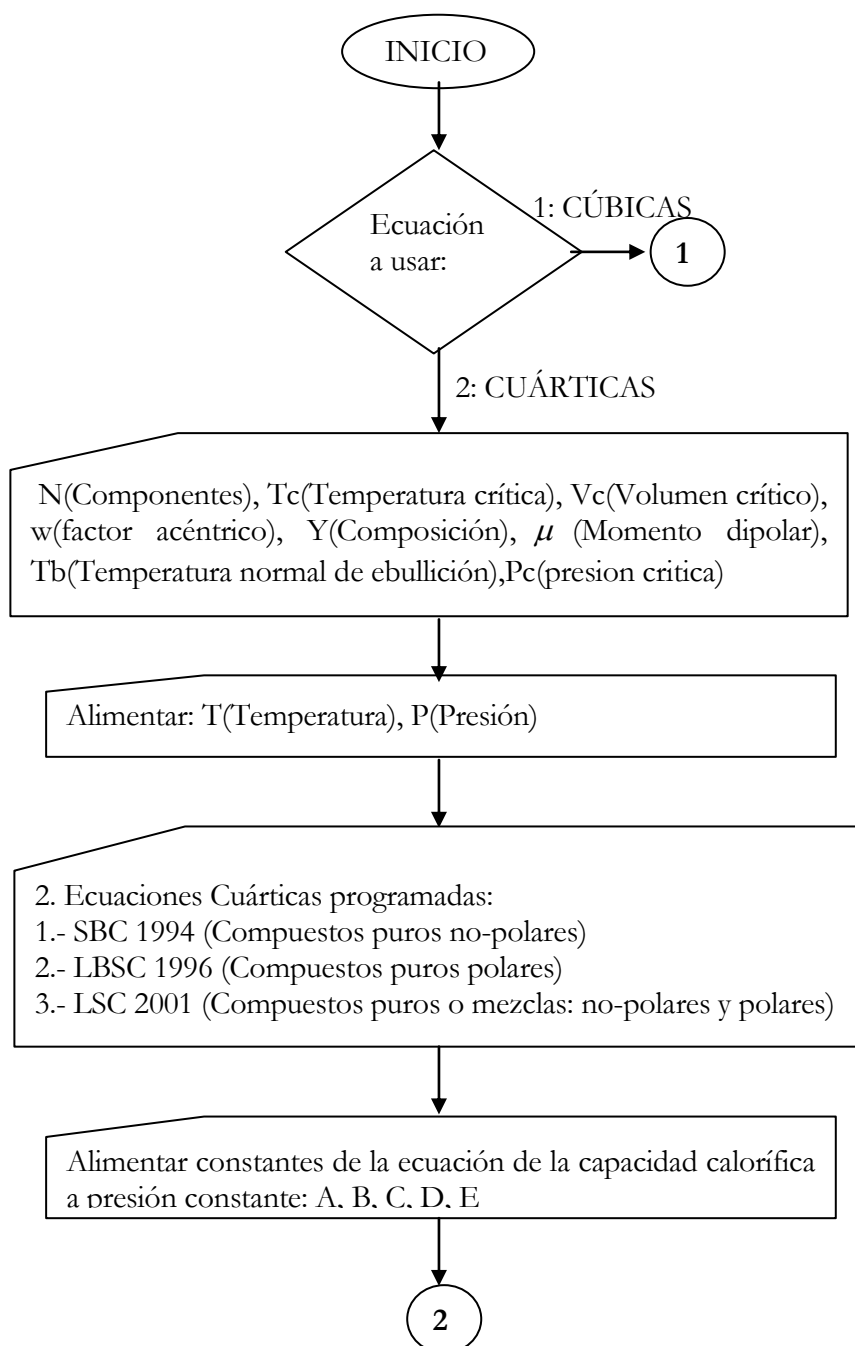
$$\text{Cuando } T_{ri} \leq 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_3(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_4(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-a)$$

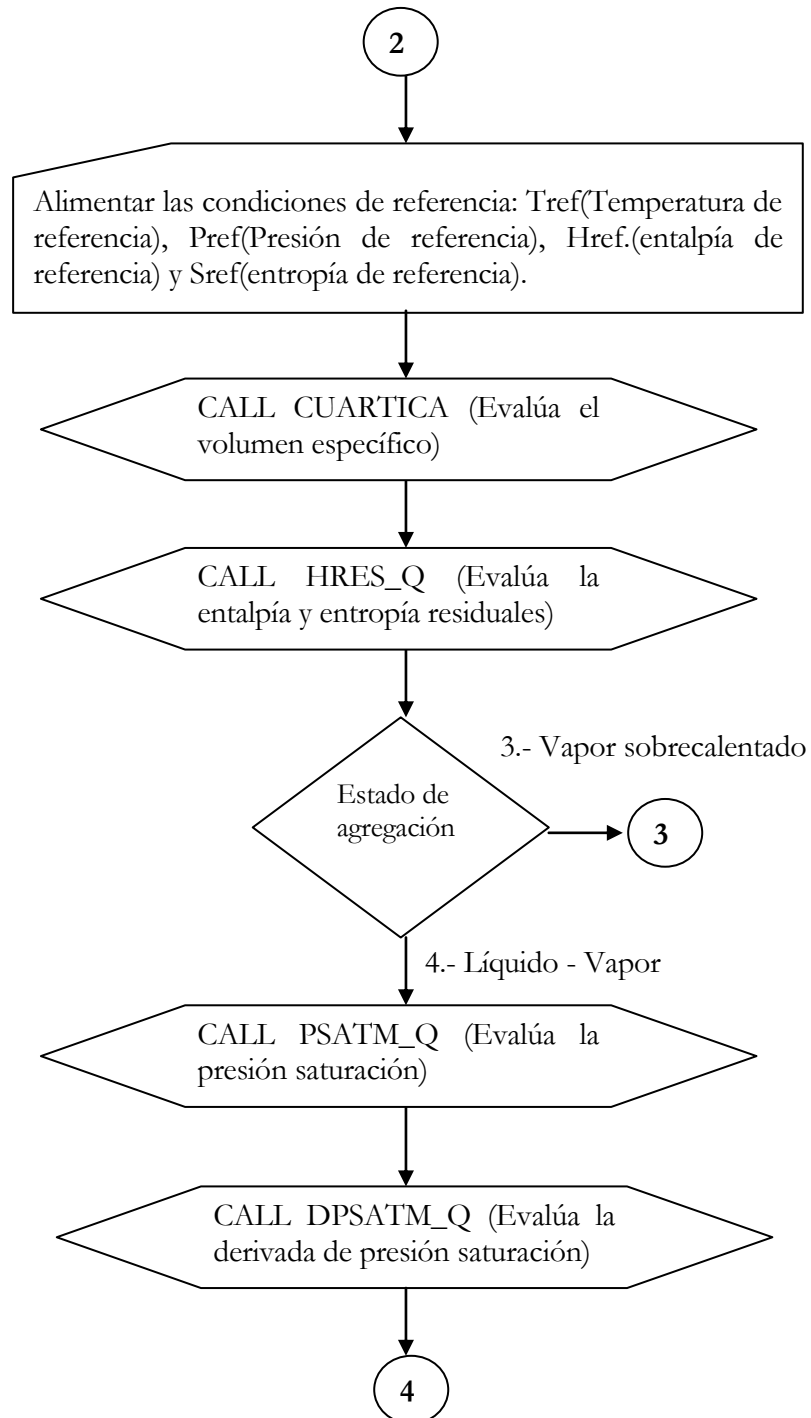
$$\text{Cuando } T_{ri} > 1 \quad m_{1i} = [X_2 + 2X_5(1 - \sqrt{T_{ri}}) + 3X_6(1 - \sqrt{T_{ri}})^2] \quad (74-b)$$

La ecuación (85) puede aplicarse a compuestos puros haciendo $i = 1$, con lo que se obtiene la ecuación (84).

APÉNDICE F
DIAGRAMA DE BLOQUES SIMPLIFICADO

**DIAGRAMA LÓGICO PARA CALCULAR PROPIEDADES TERMODINÁMICAS
DE COMPUESTOS PUROS Y MEZCLAS CON ECUACIONES CUÁRTICAS
EN LA REGIÓN DE LÍQUIDO SATURADO Y VAPOR SATURADO**



APÉNDICE F (Continuación)

APÉNDICE F (Continuación)

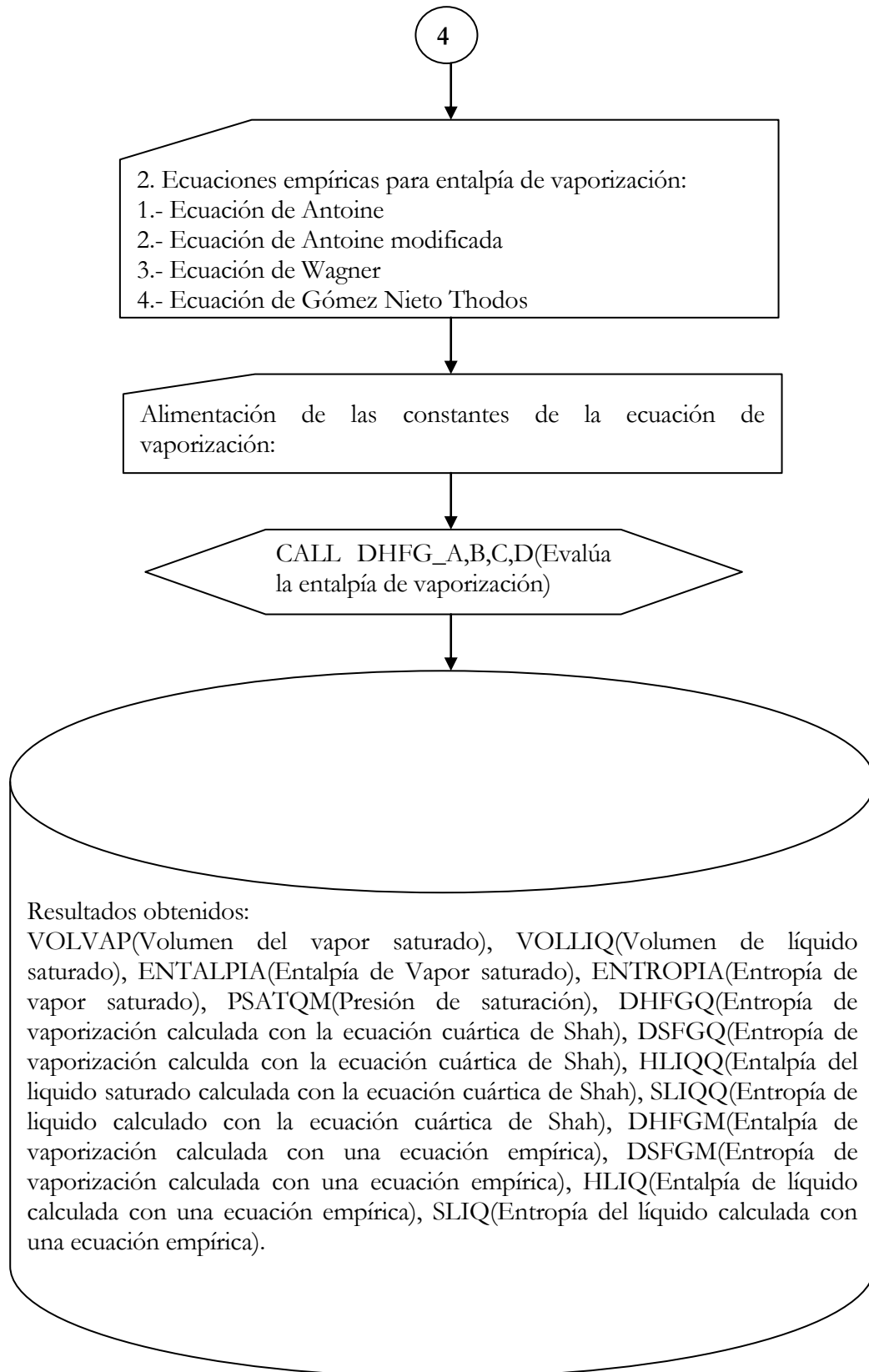
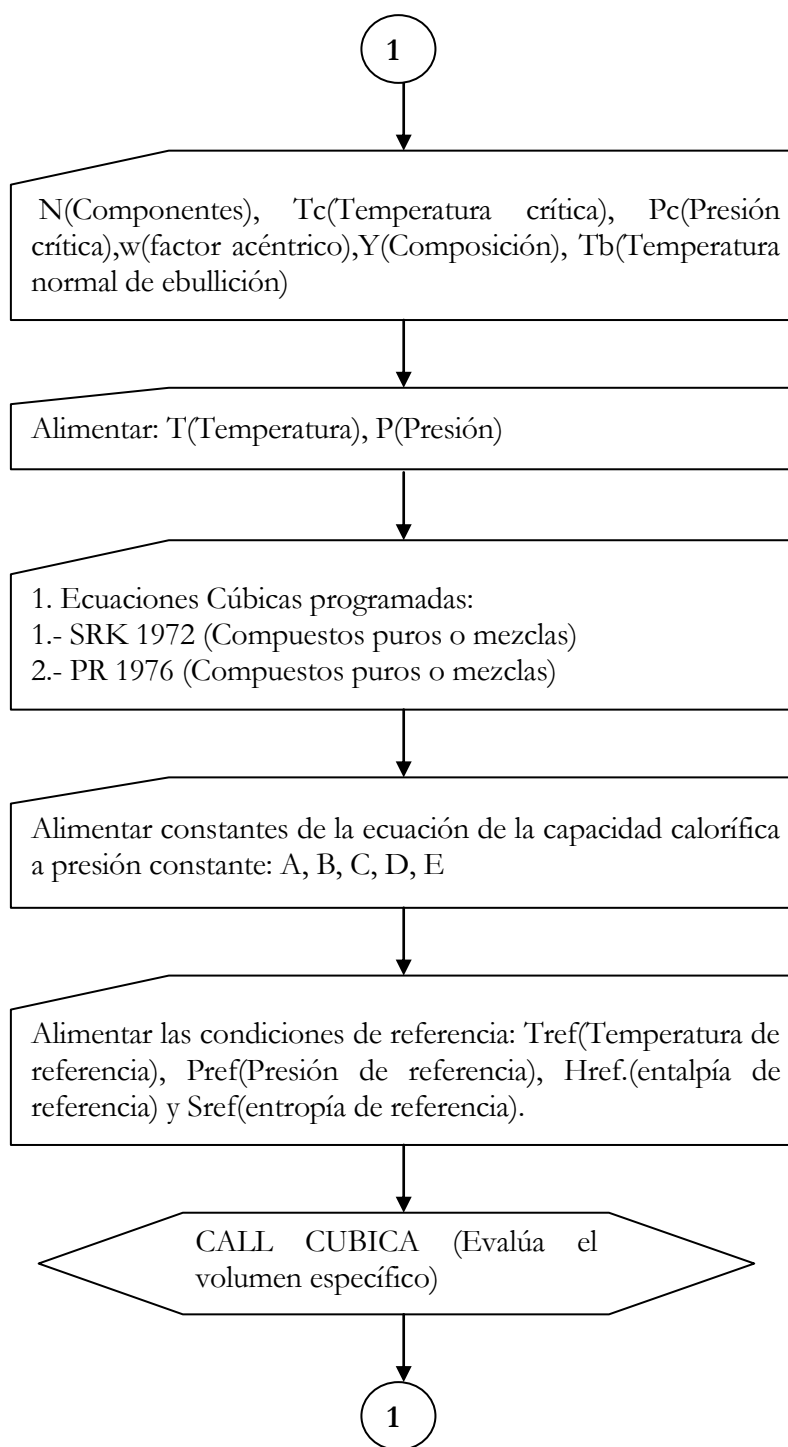
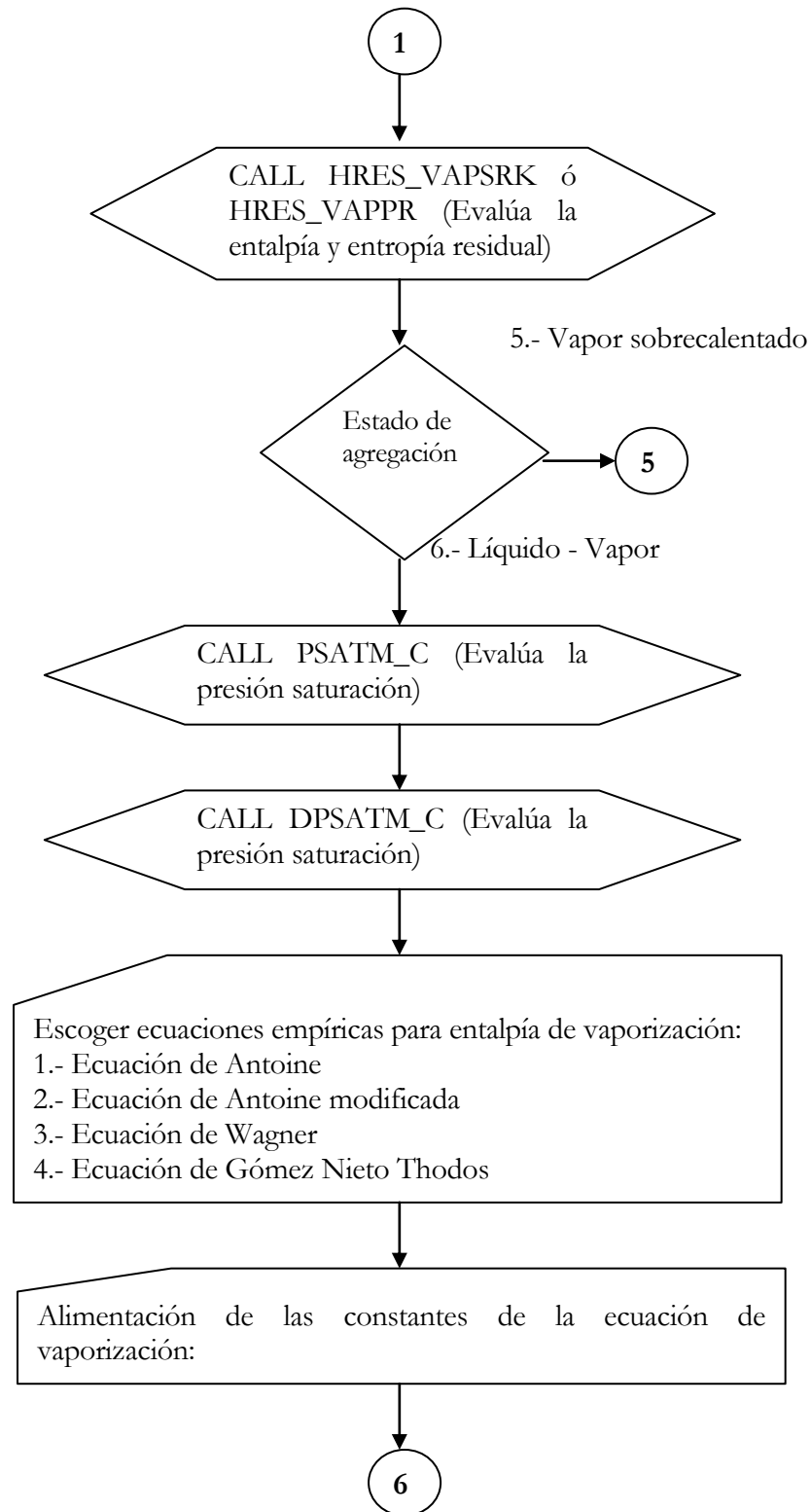
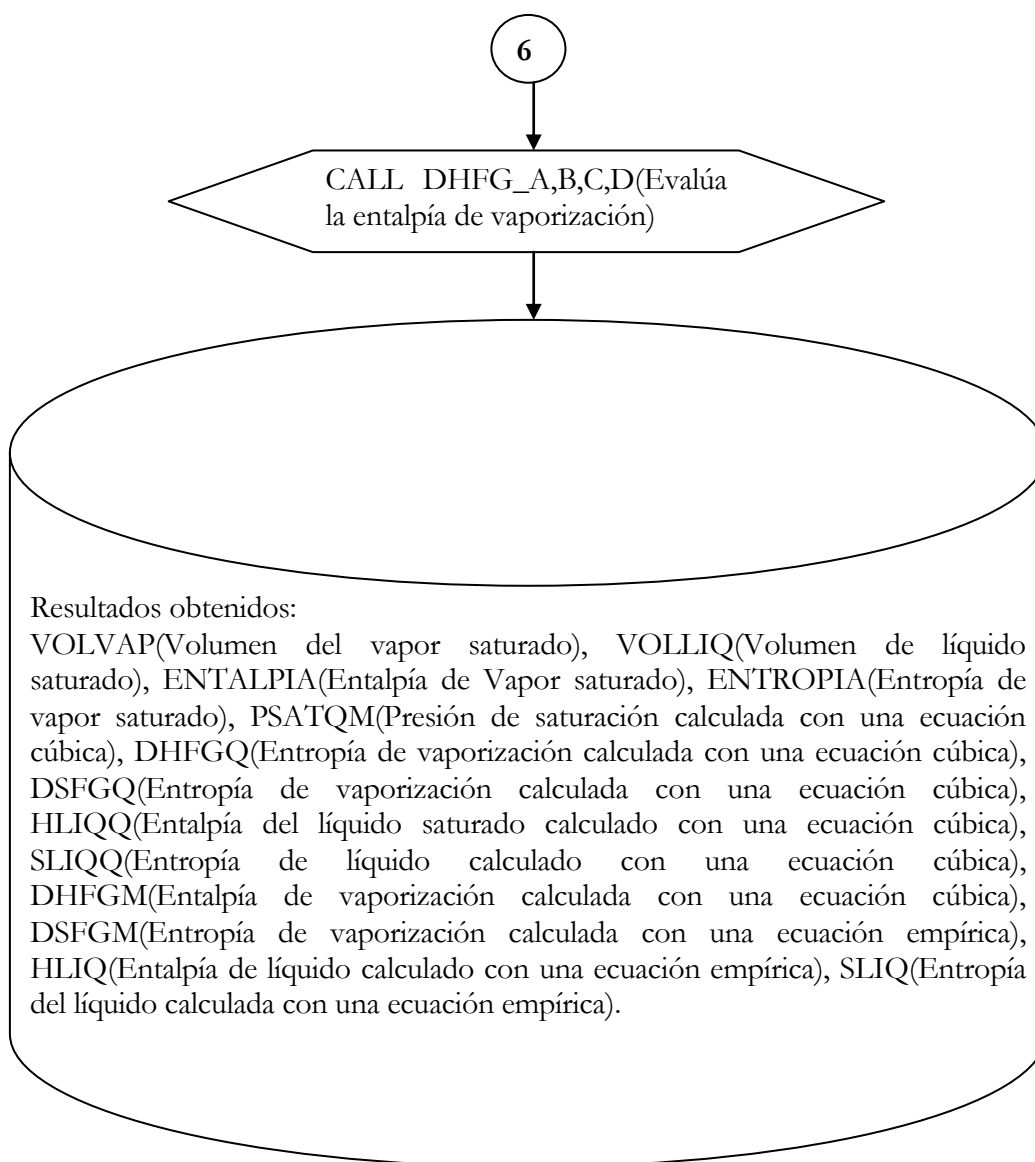


DIAGRAMA LÓGICO PARA CALCULAR PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE COMPUESTOS PUROS Y MEZCLAS CON ECUACIONES CÚBICAS EN LA REGIÓN DE LÍQUIDO SATURADO Y VAPOR SATURADO.

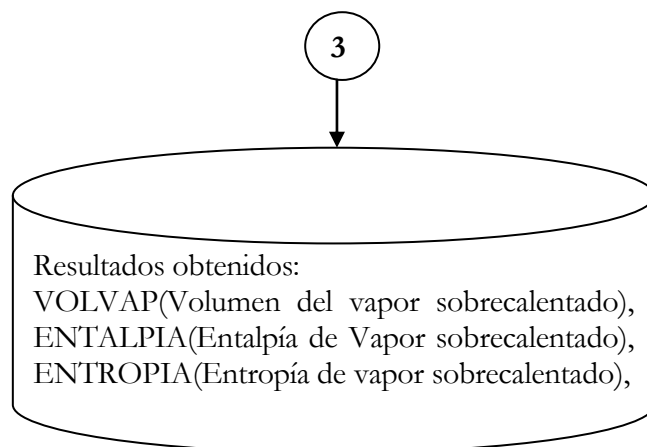


APENDICE F

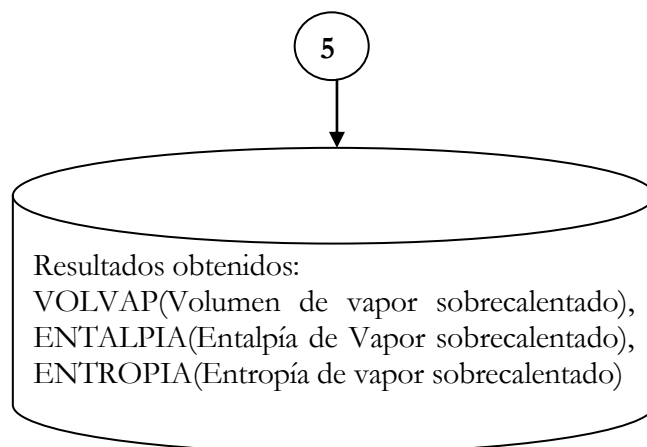


APENDICE F (Continuación)

**DIAGRAMA LÓGICO PARA CALCULAR PROPIEDADES TERMODINÁMICAS
DE COMPUESTOS PUROS Y MEZCLAS CON ECUACIONES CUÁRTICAS EN
LA REGIÓN DE VAPOR SOBRECALENTADO**



**DIAGRAMA LÓGICO PARA CALCULAR PROPIEDADES TERMODINÁMICAS
DE COMPUESTOS PUROS Y MEZCLAS CON ECUACIONES CÚBICAS EN
LA REGIÓN DE VAPOR SOBRECALENTADO.**



RESUMEN AUTOBIOGRÁFICO

Rodolfo Rocha Villagómez

Candidato para el Grado de

Maestro en Ciencias con Orientación en Ingeniería Química

Tesis: ESTUDIO SOBRE LA ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES
TERMODINÁMICAS DE COMPUESTOS PUROS Y MEZCLAS REALES
CON LA ECUACIÓN CUÁRTICA GENERALIZADA DE SHAH

Campo de Estudio: Ingeniería Química

Biografía:

Datos Personales: Nacido en Monterrey, Nuevo León el 3 de Diciembre de 1973, hijo de Rodolfo Rocha Nuñez y Eva Villagómez Taméz.

Educación: Egresado de la Universidad Autónoma de Nuevo León, grado obtenido Ingeniero Químico en 1994.

Experiencia Profesional: Jefe de Operaciones en Mexicana de Lubricantes S. A. de C. V. Planta Monterrey durante el periodo 1995 – 1998. Jefe de Ventas en LUBRIQUIM durante el periodo 1998 – 2000. Ingeniero de Proceso en Hilos Iris S.A. de C. V. desde febrero 2000.