

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO VAPOR
DEL SISTEMA ÁCIDO PROPIÓNICO AGUA

MARÍA ANGÉLICA PARRA MEDINA

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ, D.C.
2017

ESTUDIO TEÓRICO Y EXPERIMENTAL DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO VAPOR
DEL SISTEMA ÁCIDO PROPIÓNICO AGUA

MARÍA ANGÉLICA PARRA MEDINA

Proyecto integral de grado para optar el título de:
INGENIERO QUÍMICO

Director:
Yovanny Morales Hernández
Ingeniero Químico

FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA
FACULTAD DE INGENIERÍAS
PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA
BOGOTÁ D.C.
2017

Nota De Aceptación

Firma del presidente del jurado

Firma del jurado

Firma del jurado

Bogotá, D.C. Octubre, 2017.

DIRECTIVAS DE LA UNIVERSIDAD

Presidente de la Universidad y Rector del Claustro

Dr. Jaime Posada Díaz

Vicerrector de Desarrollo y Recursos Humanos.

Dr. Luis Jaime Posada García-Peña

Vicerrectora Académica y de Posgrados

Dra. Ana Josefa Herrera Vargas

Secretario General

Dr. Juan Carlos Posada García-Peña

Decano Facultad de Ingeniería

Ing. Julio César Fuentes Arismendi

Director de Investigación

Ing. Armando Fernández Cárdenas

Director Programa ingeniería

Ing. Leonardo de Jesús Herrera Gutiérrez

Las directivas de la Fundación Universidad de América, los jurados calificadores y el cuerpo docente no son responsables por los criterios e ideas expuestas en el presente documento. Estos corresponden únicamente a los autores.

DEDICATORIA

Dedico este trabajo a mis padres Manuel y María, que han sido el principal cimiento para crear mis sueños, que como la noche y el día siempre me han acompañado, y a mi amada gemela Mafe que ha sido mi apoyo siempre, a la vida doy gracias por darme la mejor de las hermanas. A todos mis amigos que hicieron parte de esta experiencia y que siempre llevaré en corazón.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a la Universidad de América y en especial a todos sus profesores que hicieron parte de mi formación, especialmente al Ingeniero Yovanny Morales y el Ingeniero Jaime Arturo, que me permitieron conocer un poco más de mí al darme estos desafíos, y ayudarme a salir victoriosa. A mi familia por ser ese faro guía en todo momento. A mis compañeros y amigos que pusieron su granito de arena en la construcción de este proyecto, y finalmente a todos los que creyeron en mí.

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	16
OBJETIVOS	17
1. GENERALIDADES DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN	18
1.1 EL ÁCIDO PROPIÓNICO Y SUS PROCESOS DE OBTENCIÓN	18
1.2 EQUILIBRIO DE FASES	19
1.3.1 Fase líquida: Coeficiente de actividad	21
1.2.2 Fase Vapor: Coeficiente de fugacidad	23
1.3 OBTENCIÓN EXPERIMENTAL DE LOS EQUILIBRIOS DE FASES	24
1.3.1 Método Punto de rocío- Punto de burbuja	25
1.3.2 Cromatografía	25
1.4 CONSITENCIA TERMODINÁMICA	31
1.5 OPTIMIZACIÓN Y MINIMIZACIÓN	34
1.5.1 Optimización determinística	34
1.5.2 Optimización Estocástica	35
2. EQUILIBRIOS DE FASES	37
2.1 EQUILIBRIOS DE FASES EXPERIMENTALES	37
2.2 CONSITENCIA TERMODINÁMICA	39
3. TERMODINÁMICA DEL EQUILIBRIO DE FASES	44
3.1 SELECCIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO	44
3.2 AJUSTE DEL MODELO DE ACTIVIDAD	46
3.2.1. Resultados	50
3.3 VALIDACIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO	51
3.3.1 Coeficiente de Fugacidad	51
3.3.2 Coeficiente de Actividad	52

3.4 AZEOTROPÍA DEL SISTEMA	54
3.5 ANÁLISIS DE RESULTADOS	55
4. CONCLUSIONES	57
5. RECOMENDACIONES	59
BIBLIOGRAFÍA	60
ANEXOS	65

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Esquema básico en diagrama de bloques para un HPLC típico isocrático.	27
Figura 2. Árbol de decisión guía para seleccionar la correcta cromatografía.	28
Figura 3. Esquema típico del sistema de un CG.	29
Figura 4. Cromatograma hipotético.	30
Figura 5. Dimerización del ácido propiónico.	38
Figura 6. Diagrama de flujo para el test de consistencia termodinámica de Wisniak.	40
Figura 7. Selección de los modelos termodinámicos.	45
Figura 8. Paso a paso para el cálculo de los modelos de actividad.	47

LISTA DE TABLAS

	pág.
Tabla 1. Conjuntos de datos seleccionados para su evaluación.	37
Tabla 2. Coeficientes de Anotine para la mezcla.	38
Tabla 3. Resultados para el test de consistencia de Wisniak.	42
Tabla 4. Funciones objetivo utilizadas en cada ajuste realizado.	51
Tabla 5. Parámetros ajustables dependientes para Hayden O'Connell.	52
Tabla 6. Parámetros de ajuste para Hayden O'Connell.	52
Tabla 7. RMSD para los modelos de actividad.	54
Tabla 8. Azeótropos del sistema	55

LISTA DE ANEXOS

	pág
Anexo A. Datos de las Sustancias Puras	58
Anexo B. Modelos Termodinámicos Para La Fase Vapor y Fase Líquida	59
Anexo C. Datos Del Equilibrio Líquido – Vapor Experimentales Del Ácido Propiónico (1) – Agua (2) Con Sus Respective Coeficientes De Fugacidad Y Actividad.	63
Anexo D. Parámetros Binarios Obtenidos Resultados del Proceso de Minimización del Equilibrio Agua - Ácido Propiónico de los Modelos de Composición Local	68
Anexo E. Equilibrios Líquido-Vapor (Elv) Del Agua (1) - Ácido Propiónico (2) Resultados del Proceso De Minimización.	71
Anexo F. Gráficas De Equilibrios Líquido-Vapor (Elv) del Ácido Propiónico-Agua Calculados En Aspen Properties V9	102
Anexo G. Reportes Azeotropía	114

NOMENCLATURA

R	Constante Universal de los gases
T	Temperatura
P	Presión
μ	Potencial químico
f	Fugacidad
f_i^o	Fugacidad estándar
f_i^V	Fugacidad del vapor
f_i^L	Fugacidad del líquido
p_i^{sat}	Presión de vapor del componente i
T_b	Temperatura de ebullición
γ	Coefficiente de actividad del componente i
a	Coefficiente de actividad del componente i
$\hat{\phi}_i$	Coefficiente de fugacidad
φ_i^{sat}	Coefficiente de fugacidad de saturación del componente i
ρ	Densidad molar
σ	Desviación estándar
Φ_i	Relación de los Coeficientes de fugacidad
n_i	Moles del componente i
g_i	Energía libre de Gibbs específica del componente i
g_i^E	Energía libre de Gibbs en exceso específica del componente i
G	Energía libre de Gibbs
G^E	Energía libre de Gibbs en exceso
H^E	Entalpía en exceso
V^E	Volumen en exceso
A^E	Energía de Helmholtz
U^E	Energía interna del sistema
S	Entropía
FP	Factor de Poynting
x_i	Fracción molar de la fase líquida del componente i
y_i	Fracción molar de la fase vapor del componente i
m	Número total de puntos
z	Desviación de la idealidad
η	Índice de refracción
b_o	Constante de Boltzman
n	Parámetro de interacción de Hayden O'Connell

g_{ij}	Parámetros de energía de interacción para el NRTL
ε	Parámetro de energía de segmento
B_{ij}	Segundo coeficiente del Virial
Ω_{ij}	Factor de balance energético para la composición local
ϵ_{ij}	Balance de fluido de la molécula i alrededor de la molécula j
$\Delta s_{i,k}^o$	Entropía de vaporización
$\Delta h_{i,k}^o$	Entalpía de vaporización

Subíndices

i	Componente i
j	Componente j
k	Punto de equilibrio
b	Ebullición

Superíndices

cal	Calculado
exp	Experimental
L	Líquido
V	Vapor
E	Condición Exceso
sat	Condición de Saturación
o	Estandar

Unidades

K	Temperatura
N/sqm	Presión
mol/mol	Fracción Molar

RESUMEN

Uno de los principales retos actuales en la industria de los ácidos carboxílicos, se centra en los procesos de separación donde la herramienta fundamental son los equilibrios de fases. Gracias a esto se han dado una gran cantidad de publicaciones que no han sido evaluadas posteriormente dando paso a la incertidumbre. Este trabajo de investigación busca llenar esas incertidumbres realizando el estudio de la termodinámica del equilibrio líquido vapor del ácido propiónico en su mezcla binaria con el agua.

Después de una revisión bibliográfica de los datos experimentales disponibles y un trabajo previo realizado por el Grupo de Investigación en Procesos de Separación no Convencionales GPS (del cual el presente hace parte) se seleccionaron 8 equilibrios de fases que hayan sido obtenidos a diferentes presiones, con diferente cantidad de datos, y determinados con diferentes técnicas experimentales, para obtener un conjunto de equilibrios suficientemente diverso.

Estos equilibrios fueron evaluados por medio del test de consistencia termodinámica de Wisniak, que parte de las relaciones termodinámicas de la ecuación de Clausius Clapeyron, el equilibrio de fases y un modelo consistente de energía libre de gibbs, que tenga una restricción termodinámica implícita, el modelo seleccionado fue NRTL.

En el tratamiento de los datos de equilibrio, la fase vapor fue modelada por la ecuación del Virial calculada por el modelo de Hayden y O'Connell, y la fase líquida por los modelos de composición local Wilson, NRTL, y UNIQUAC. Se desarrolló un algoritmo de minimización para la obtención de los parámetros de interacción binarios, y la evaluación de los errores medios cuadráticos para determinar su exactitud a la hora de representar los diferentes equilibrios,

De los equilibrios evaluados, solo 3 resultaron consistentes, cumpliendo con las restricciones termodinámicas, y se demostró que NRTL y UNIQUAC son los modelos que mejor representan los equilibrios en conjunto con Hayden & O'Connell en la fase vapor.

PALABRAS CLAVE: Termodinámica, equilibrios líquido vapor, consistencia termodinámica, mezclas binarias.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas ha habido un creciente desarrollo en el estudio de las propiedades de los fluidos, dando como consecuencia una notable cantidad de publicaciones y recopilaciones de datos experimentales acerca de compuestos puros y de mezcla. Uno de los motivos de este rápido crecimiento de estudios es consecuente a la demanda de la Ingeniería Química, cuando se buscan mejorar, o diseñar nuevos procesos respondiendo a suplir las necesidades actuales de la industria. Siendo uno retos más altos los procesos de separación, gran parte de estos estudios se centran en concreto en la termodinámica y el equilibrio de fases, pues son las bases necesarias para llevar a cabo estos procesos.

Otro de los principales objetivos es puramente científico, el de poder entender, interpretar y simular el comportamiento de las fases en un sistema. En este sentido, se han experimentado evoluciones progresivas en el desarrollo de nuevas teorías que han sido posibles de llevar a cabo con la contribución del avance tecnológico y otras ciencias como la matemática con la implementación de nuevos algoritmos y las ciencias de la computación con los nuevos lenguajes de programación.

Sin embargo, a la mayoría de estos estudios no se les ha realizado una evaluación posterior a sus publicaciones, dando paso a un cierto grado de incertidumbre sobre estos para ser utilizados posteriormente.

Para el caso del presente estudio, el ácido propiónico, el grupo de investigación en procesos de separación no convencionales de la Universidad de América (GPS) busca realizar un análisis termodinámico en su mezcla binaria con el agua para responder al principal objetivo actual con los ácidos carboxílicos: lograr migrar sus procesos a obtenciones biotecnológicas donde el principal reto se encuentra en su separación. Este trabajo de investigación pretende evaluar algunos de los estudios recopilados de la literatura con el fin de entender el comportamiento de estas sustancias en su equilibrio líquido-vapor y que pueda servir de referente para el posterior planteamiento y diseño de esquemas de procesos de separación que den solución al problema planteado por la industria.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL

Evaluar termodinámicamente el equilibrio líquido vapor de la mezcla ácido propiónico y agua.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Analizar la literatura experimental existente acerca del equilibrio de fases vapor líquido para el sistema binario ácido propiónico agua.
- Validar la consistencia termodinámica de los datos experimentales del equilibrio.
- Realizar el equilibrio de fases y los azeótropos del ELV mediante un modelo termodinámico.

1. GENERALIDADES DEL PROYECTO DE INVESTIGACIÓN

1.1 EL ÁCIDO PROPIÓNICO Y SUS PROCESOS DE OBTENCIÓN

Los ácidos carboxílicos son compuestos que tienen diversas aplicaciones industriales, como bactericidas y fungicidas, como aditivos en la industria alimentaria y farmacéutica, entre otras aplicaciones. Están divididos en ácidos carboxílicos alifáticos y aromáticos según su estructura molecular.

El ácido propiónico, junto con el fórmico y acético son los primeros ácidos en la serie de los alifáticos y tienen especial importancia en la industria, estos están presentes diversas reacciones biológicas¹ por lo que en el siglo 19 se planteó su obtención de fuentes naturales, sin embargo fue remplazado en el siglo 20 por procesos sintéticos a gran escala². Para el caso específico del ácido carboxílico de estudio, el propiónico, se obtiene de forma casi exclusiva por síntesis química en tres procesos, carbonilación del etileno (conocido como proceso BASF), la oxidación del propanol³ y como subproducto de la condensación fraccionada de la oxidación de ácido acrílico⁴, de estos el procesos mencionados, el proceso BASF tiene la mayor participación en el mercado⁵.

Hoy en día se intentado volver a migrar el proceso de producción del ácido propiónico a una vía biotecnológica, ya que es más sustentable al poder utilizar residuos agroindustriales como fuentes de carbono, y genera un menor impacto

¹ PubChem. Propionic Acid. [Electronic(1)]. [Consultado el 10/25/20172017]. Disponible en: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/propionic_acid#section=FEMA-Number

² RIEMENSCHNEIDER, Wilhelm. Carboxylic Acids, Aliphatic. Wiley Online Library, 2002.

³ SAMEL, Ulf-Rainer, et al. Propionic acid and derivatives. En: Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry.

⁴ THIEL, Joachim; SCHRÖDER, Jürgen y NESTLER, Gerhard. En: Fractional Condensation of a Product Gas Mixture Containing Acrylic Acid.

⁵ YEUNG, Joyce. BASF and SINOPEC expand capacity for propionic acid in Nanjing, China. [Electronic(1)]. [Consultado el 07/192017]. Disponible en: <https://www.basf.com/en/company/news-and-media/news-releases/2017/06/p-CI-170601.html>

ambiental a lo largo de su proceso productivo⁶. El principal limitante de la obtención biotecnológica se presenta cuando son llevados a gran escala, al momento seleccionar el método de separación y purificación⁷. El ácido propiónico es un compuesto de bajo peso molecular, altamente afín con el agua y de baja volatilidad. Cuando se obtiene por una vía fermentativa, se obtiene junto con otros ácidos afines (como el succínico, láctico y butírico) y agua⁸. Desde de la primera patente de la producción de ácido propiónico por un proceso fermentativo, se han utilizado solventes orgánicos para su separación para que sea competitivo frente a la síntesis química.⁹

Para el estudio de nuevos métodos de separación que sean efectivos y no afecten los costos globales de producción, son necesarios los estudios de los equilibrios de fases que permitan la selección y diseño de un proceso de separación efectivo.

1.2 EQUILIBRIO DE FASES

Una de las aplicaciones más extensas de la termodinámica es el equilibrio de fases, según el estado en el que se encuentren las fases, entre los más ampliamente estudiados y utilizados se encuentran los equilibrios líquido-vapor, *ELV* por sus siglas. Se refiere a ELV cuando las propiedades temperatura (T), presión (P) y potencial químico (μ) de un sistema multicomponente entre dos o más fases, son iguales en todas sus fases sin tendencia a cambiar en el tiempo.

$$T' = T'' = T''' \dots \quad \text{Ec. 1}$$

$$P' = P'' = P''' \dots \quad \text{Ec. 2}$$

$$\mu' = \mu'' = \mu''' \dots (i = 1, 2 \dots m) \quad \text{Ec. 3}$$

⁶ POSADA, John A. y CARDONA, Carlos A. Propionic acid production from raw glycerol using commercial and engineered strains. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. vol. 51, no. 5, p. 2354-2361

⁷ LÓPEZ-GARZÓN, Camilo S. y STRAATHOF, Adrie J. J. Recovery of carboxylic acids produced by fermentation. En: Biotechnology Advances. 0. vol. 32, no. 5, p. 873-904

⁸ WANG, Zhongqiang, et al. Propionic Acid Fermentation. En: Bioprocessing Technologies in Biorefinery for Sustainable Production of Fuels, Chemicals, and Polymers. John Wiley & Sons, Inc., 2013. p. 331-350. ISBN 9781118642047

⁹ WILSON, Perry W. En: Propionic Acid Fermentation.

Los equilibrios líquido-vapor no son estáticos, es decir que se refiere a equilibrio cuando hay un igual intercambio de moléculas del vapor al líquido, la temperatura es la misma (Ec. 1) pues existe un flujo irreversible de energía calorífica entre ellas, y la presión debe ser también igual (Ec. 2), ya que si no fuese así habría una expansión irreversible entre una de las fases y la compresión de otra. Para entender el potencial químico (Ec. 3) se puede expresar en el concepto de sus fugacidades.

$$f' = f'' = f''' \dots (i = 1, 2 \dots m) \quad \text{Ec. 4}$$

Aplicado a un equilibrio binario líquido-vapor para el componente i :

$$f_i^V = f_i^L \quad \text{Ec. 5}$$

Donde la concentración de la fase líquida y vapor, están dadas por sus fracciones molares en el líquido y vapor respectivamente.

$$f_i^V = y_i \hat{\phi}_i P \quad \text{Ec. 6}$$

$$f_i^L = x_i \gamma_i f_i^{oL} \quad \text{Ec. 7}$$

Donde γ_i es el coeficiente de actividad del líquido, que es función de la temperatura, presión y composición de la fase líquida. f_i^o la fugacidad en estado estándar (Ec. 10) y $\hat{\phi}_i$ es el coeficiente de fugacidad, tiene relación con directa la presión como se muestra en la ecuación 8:

$$\hat{\phi}_i = \exp\left(\frac{1}{RT} \int_0^P \left(V_i^G - \frac{RT}{P}\right) dP\right) \quad \text{Ec. 8}$$

Este es el punto de partida para el cálculo de los coeficientes de fugacidad. A presiones bajas de los gases ideales la fugacidad, es por definición, igual a su presión, por lo que este coeficiente de fugacidad tiende a uno y puede ser omitido. En el caso de que se presenten no idealidades en el vapor, como algún tipo de polimerización (formación de dímeros, trímeros o hexámeros), mezclas con componentes polares o cuando el sistema se encuentre a presiones moderadas (sobre los 10-20 bares), es necesario calcularse el coeficiente de fugacidad por

medio de ecuaciones de estado que brindan los datos necesarios para el cálculo de V_i^G .

La fugacidad a presiones y temperaturas estándar es, en la mayoría de los casos, cercana a la fugacidad del componente en estado puro, y es calculada en relación con su presión de vapor:

$$f_i^{oL} = p_i^{sat} \varphi_i^{sat} \exp\left(\frac{1}{RT} \int_0^P (V_i^L) dP\right) \quad \text{Ec. 9}$$

La expresión que acompaña a la presión de vapor p_i^{sat} y el coeficiente de fugacidad de saturación φ_i^{sat} , permite calcular la influencia de la presión en estos y es llamada factor de corrección de Poytting (FP).

Al combinar las ecuaciones 5, 6, 7 y 9. Se obtiene la ecuación general del equilibrio líquido-vapor, que relaciona presión, temperatura y tiene incluido de forma implícita el potencial químico.

$$y_i \hat{\phi}_i P = x_i \gamma_i p_i^{sat} \varphi_i^{sat} \exp\left(\frac{1}{RT} \int_0^P (V_i^L) dP\right) \quad \text{Ec. 10}$$

El entendimiento de estos equilibrios de fase permite el desarrollo de los esquemas y síntesis de proceso de separación.

1.3.1 Fase líquida: Coeficiente de actividad. La actividad de la mezcla está definida como el cociente ente la fugacidad f_i a unas condiciones de temperatura, presión y composición y la fugacidad en estados estándar f_i^0 .

$$a_i = \frac{f_i}{f_i^0} \quad \text{Ec. 11}$$

Los estados estándar son escogidos de forma arbitraria, pero son especificados, usualmente a temperatura y presión atmosférica. El coeficiente de actividad γ_i se define entonces como el cociente entre la actividad y la composición de la fase

líquida especificada como fracción molar para la mayoría de las mezclas a excepción de polímeros o electrolitos.

$$\gamma_i = \frac{a_i}{x_i} \quad \text{Ec. 12}$$

El cálculo del coeficiente de actividad es clave para la correcta obtención de los equilibrios líquido-vapor, ya que representa la no idealidad en la fase líquida de la mezcla. En una mezcla ideal, se asume que la forma y el tamaño de las moléculas es similar (casi idéntico), como en el caso de la mezcla butano e isobutano, y puede ser representada por la ley de Raoult, donde se asume que el coeficiente de actividad es esencialmente la unidad. Sin embargo, en la mayoría de los casos esto no se cumple siendo necesario obtener una expresión matemática que corrija la aproximación realizada por la ley de Raoult y tenga en cuenta las consideraciones moleculares de la mezcla. Los coeficientes de actividad están relacionados con la energía libre de Gibbs en exceso como:

$$G^E = RT \sum_i x_i \ln \gamma_i \quad \text{Ec. 13}$$

La termodinámica clásica es limitada para modelar este tipo de desviaciones y parten de aproximaciones netamente algebraicas para el cálculo de g^E , como expansiones polinómicas, que no tienen en cuenta la morfología de las moléculas. A partir de la necesidad de obtener modelos que representen correctamente equilibrios con no-idealidades en la fase líquida se crean los modelos de composición local.

1.2.1.1 Modelos de composición local. Los modelos basados en la teoría regular de las soluciones suponen que las interacciones moleculares de las mezclas son independientes unas de otras. Sin embargo en la gran mayoría de los casos las interacciones moleculares son relacionadas a la composición de la mezcla, y no permiten asumirse como independientes.

La teoría de la composición local asume que la “composición local” de la mezcla puede tener una fuerte desviación de las composiciones del seno del fluido dadas por interacciones moleculares fuertes como puentes de hidrógeno o la polaridad. La hipótesis en la cual se basa el desarrollo de esta teoría es que las diferencias

energéticas conducen a la no aleatoriedad de las mezclas haciendo que las reglas de mezclado cuadráticas tiendan a fallar¹⁰.

Al poder representar de forma correcta la mayoría de equilibrios a bajas presiones, los modelos de composición local son ampliamente utilizados en la industria¹¹. El primero en proponerse fue el modelo de Wilson (1964)¹², seguido de NRTL *Non Random Two Liquid* (1968)¹³ y UNICUAQ *Universal Quasi-Chemical* (1975)¹⁴, siendo estos tres los modelos más comunes y utilizados aun actualmente (con algunas modificaciones dependiendo del equilibrio) para describir la fase líquida de las mezclas. Estos cuentan con parámetros binarios de interacción que permiten el ajuste a los datos experimentales y así predecir efectivamente todo el rango de los equilibrios. La descripción y forma de estos modelos para mezclas multicomponente en su forma extendida se encuentran en el anexo B.

1.2.2 Fase Vapor: Coeficiente de fugacidad. La fase vapor se define a partir del equilibrio de fases como se muestra en la ecuación 6. El coeficiente de fugacidad debe ser calculado por medio de una ecuación de estado confiable. En la literatura se han publicado un largo número de ecuaciones de estado, donde la mayoría de ellas resultan ser parcialmente empíricas¹⁵. De igual manera que con los coeficientes de actividad, si la ecuación que es utilizada para el cálculo de los

¹⁰ LEE, L. L.; CHUNG, T. H. y STARLING, K. E. A Molecular Theory for the Thermodynamic Behavior of Polar Mixtures. I. the Statistical-Mechanical Local-Composition Model. [Electronic(1)]: 1983. p. 105-1240378-3812

¹¹ KONTOGEORGIS, Georgios M. y FOLAS, Georgios K. Activity Coefficient Models, Part 2: Local Composition Models, from Wilson and NRTL to UNIQUAC and UNIFAC. En: *Thermodynamic Models for Industrial Applications: From Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories*. John Wiley & Sons, 2009. p. 109.

¹² WILSON, Grant M. Vapor-liquid equilibrium. XI. A new expression for the excess free energy of mixing. En: *Journal of the American Chemical Society*. vol. 86, no. 2, p. 127-130

¹³ RENON, Henri y PRAUSNITZ, John M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. En: *AIChE Journal*. vol. 14, no. 1, p. 135-144

¹⁴ ABRAMS, Denis S. y PRAUSNITZ, John M. Statistical thermodynamics of liquid mixtures: a new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems. En: *AIChE Journal*. vol. 21, no. 1, p. 116-128

¹⁵ PRAUSNITZ, John M.; LICHTENTHALER, Rudiger N. y DE AZEVEDO, Edmundo Gomes. Fugacities in Gas Mixtures. En: *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria*. Pearson Education, 1998. p. 123.

coeficientes de fugacidad tiene en cuenta significados físicos puede en sus parámetros de interacción representar las fuerzas intermoleculares presentes en la muestra. La ecuación de estado que tiene en cuenta estas características es la ecuación del Virial (Ec. 14).

$$z = \frac{Pv}{RT} = 1 + B'P + C'P^2 + \dots \quad \text{Ec. 14}$$

Donde B es el segundo coeficiente del virial, C el tercero, y así sucesivamente se desarrolla el polinomio de la función. Usualmente se trunca la ecuación al segundo término, y se calcula solamente el segundo coeficiente. Para mezclas el B_{mezcla} se expresa como:

$$B_{mez} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m y_i y_j B_{ij} \quad \text{Ec. 15}$$

El coeficiente de fugacidad se puede calcular entonces de la ecuación del virial para mezclas binarias como:

$$\ln \varphi_i = \frac{2}{v} \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m y_j y_k - \ln Z_{mez} \quad \text{Ec. 16}$$

Una de las ecuaciones más usadas para representar las no-idealidades de las mezclas en la fase vapor es el modelo propuesto por J. George Hayden y John P. O'Connell en 1975¹⁶, que tiene en cuenta en el desarrollo del modelo las interacciones moleculares en la fase vapor, como las dimerizaciones y los puentes de hidrógeno propias de los ácidos carboxílicos en mezcla con el agua.

1.3 OBTENCIÓN EXPERIMENTAL DE LOS EQUILIBRIOS DE FASES

Las mediciones experimentales de equilibrios líquido-vapor binarios, han sido estudiadas desde principios de siglo veinte, pero cobran especial importancia hacia mediados de siglo. Uno de los primeros métodos y equipos efectivos con los

¹⁶ HAYDEN, J. George y O'CONNELL, John P. A generalized method for predicting second virial coefficients. En: Ind.Eng.Chem.Process Des.Dev. vol. 14, no. 3, p. 209-216

que se cuenta es propuesto por Othmer¹⁷ entre otros investigadores, en donde se utilizan ebulómetros diferenciales, y es necesario corregir la diferencia entre la composición de alimentación y el estado estacionario. En la mayoría de las medidas convencionales es necesario el análisis previo de las muestras y los puntos de burbuja y rocío son calculados aparte, siendo especialmente difícil la medición de los puntos de rocío¹⁸.

Una forma certera de obtener tanto los puntos de burbuja cómo también los de rocío es el uso del método conocido como “Punto de Burbuja-Punto de Rocío” descrito por primera vez por Kato y Masahiro¹⁹ como, que es el utilizado actualmente en la mayoría de mediciones de ELV isobáricos.

Las medidas de los equilibrios deben de realizarse siempre en sistemas cerrados que aseguren las condiciones y acoplados con una técnica de medición analítica que permita determinar las composiciones obtenidas. Habitualmente se utilizan métodos de alta precisión como las cromatografías.

1.3.1 Método Punto de rocío- Punto de burbuja. En este método se busca medir al tiempo el punto de burbuja y el punto de rocío, y es aplicado tanto a datos isotérmicos como isobáricos. El líquido alimentado es llevado a punto de ebullición, hasta formar vapor donde posteriormente se condensa y se toma una muestra tanto del condensando y del líquido en el momento en que se llegue al estado estacionario que es determinado por el equilibrio entre temperaturas, si es isobárico, o el equilibrio de presiones, si es isotérmico.

1.3.2 Cromatografía. La definición según IUPAC es “Un método físico de separación en donde los componentes a separar son distribuidos en dos fases, una estacionaria (fase estacionaria) mientras la otra se mueve en una dirección

¹⁷ OTHMER, Donald F.; CHUDGAR, Manu M. y LEVY, Sherman L. Binary and ternary systems of acetone, methyl ethyl ketone, and water. En: Industrial & Engineering Chemistry. vol. 44, no. 8, p. 1872-1881

¹⁸ KATO, Masahiro, et al. Measurement of vapor-liquid equilibria by dew-bubble point method and bubble-condensation point method. En: Journal of Chemical Engineering of Japan. vol. 4, no. 1, p. 6-10

¹⁹ KATO, Masahiro. Vapor-liquid equilibrium measurements for binary systems of acetic acid with ethyl acetate and vinyl acetate by the dew-bubble point temperature method. En: Journal of Chemical and Engineering Data. vol. 33, no. 4, p. 499-501

definida (fase móvil)".²⁰ Cada componente de la muestra, llamados analitos, tiene propiedades particulares que hacen que sea más o menos afín a una de las dos fases, de esta forma cada uno se retrasa de forma particular y salen a tiempos de retención diferentes, lo que permite caracterizar las muestras analizadas. La distribución entre las fases es expresada con la constante de distribución K.

Este método es de los más utilizados por su precisión y efectividad. Existen diferentes tipos de cromatografía dependiendo cuál sea su aplicación, según su fase móvil se clasifican en dos grupos generales: cromatografía líquida y de gases.

1.3.2.1 Cromatografía Líquida. Como dice su nombre, la cromatografía líquida (CL) se refiere a cuando su fase móvil es líquida. El principio utilizado por la CL es la elución, donde se extrae un compuesto que ha sido absorbido en un medio sólido (fase estacionaria) mediante un líquido apropiado (la fase móvil). El método más aplicado es la cromatografía líquida de alta eficiencia o alta precisión (HPLC por sus siglas en inglés).

Un sistema de HPLC cuenta con una fase líquida que se compone de uno hasta cuatro solventes de diferentes polaridades (dependiendo la capacidad de reservorios del equipo en cuestión), una fase estacionaria que generalmente se encuentra como un sólido poroso de un tamaño entre 1,8-10 μm empacado en una columna, y un detector que puede ser ultravioleta, de índice de refracción, electroquímico o de fluorescencia entre los más comunes. La selección de tanto la columna como el eluyente depende de la afinidad (según la polaridad) que presenten con el compuesto a analizar, y el tamaño de partícula, por su parte la selección del detector depende de la naturaleza química de los compuestos.²¹

Las eluciones en el análisis HPLC se clasifican como isocráticas y de gradiente. Una elución isocrática maneja únicamente un solvente y se utiliza comúnmente cuando se tienen pocos compuestos a separar (entre 2 y 3) o cuando se tiene una mezcla donde el compuesto que se busca analizar tiene una polaridad diferente a los otros y puede ser fácilmente separado por la fase móvil. La elución por

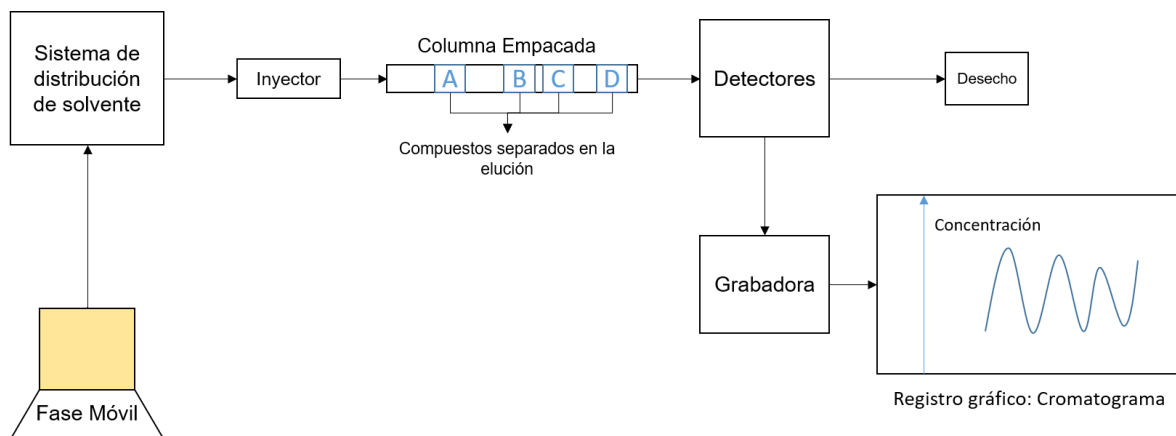
²⁰ DETTMER-WILDE, Katja y ENGEWALD, Werner. Introduction. En: Practical Gas Chromatography. Springer, 2016. p. 3.

²¹ BIDLINGMEYER, Brian A. Approaching the Problem. En: Practical HPLC Methodology and Applications. John Wiley & Sons, 1992. p. 104.

gradiente en cambio utiliza entre dos o más solventes (dependiendo de la capacidad del equipo), de manera que, como su nombre lo indica, cree un gradiente de polaridades de tal forma que la polaridad total del conjunto pueda ser aumentada o disminuida según se requiera.

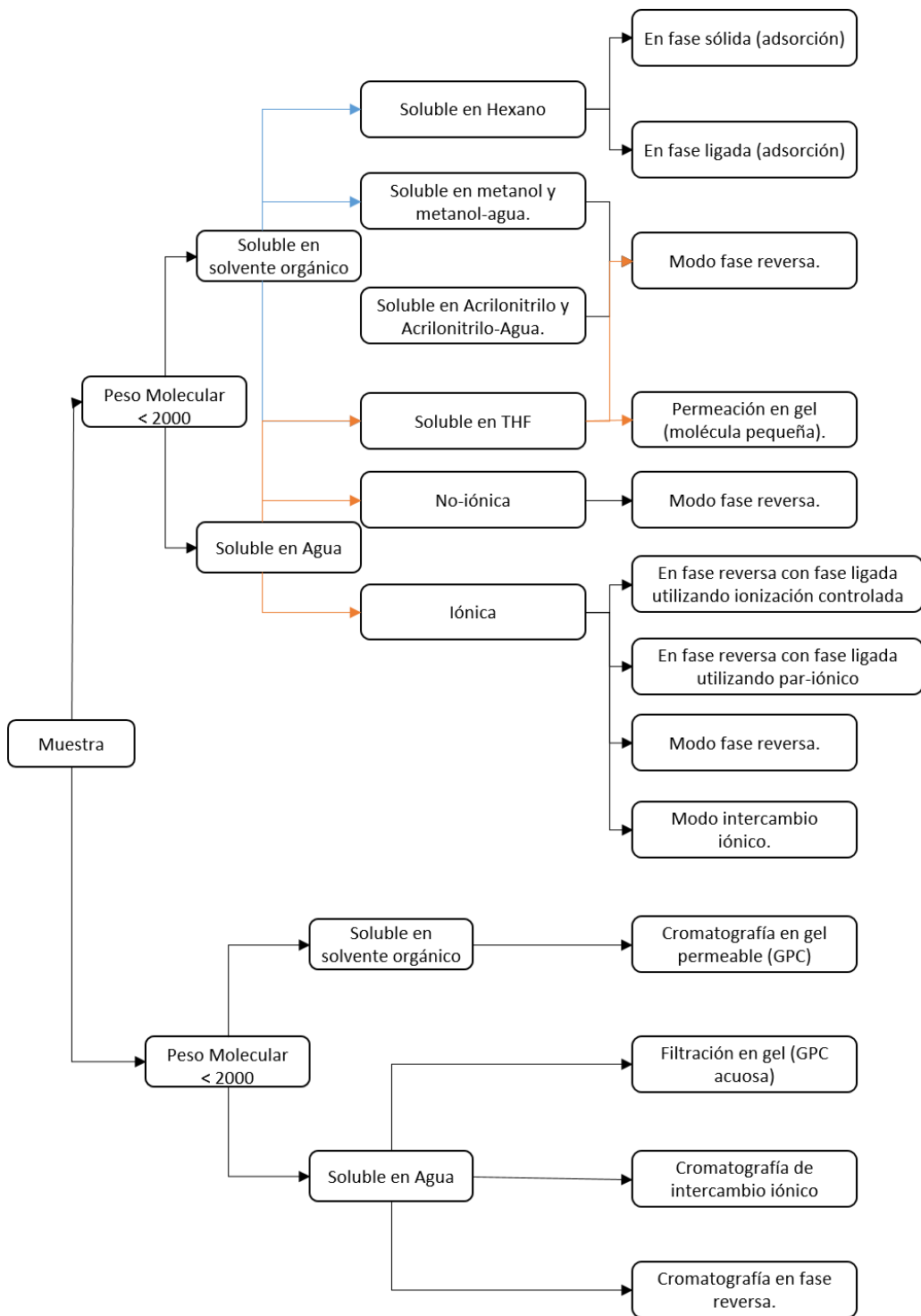
En el sistema básico de un HPLC (figura 1), la muestra es inyectada directamente al cromatografo, donde la fase móvil la transporta a través de la columna donde ocurre la separación. Es por esto que el corazón de todo tipo de cromatografía es la columna y la selección de esta es uno de los factores de incidencia más importante en los resultados de la cromatografía (expresados en el cromatograma). En la figura 2 se muestra un árbol de decisión para la selección de la fase estacionaria (columna) según la polaridad de la fase móvil y la muestra.

Figura 1. Esquema básico en diagrama de bloques para un HPLC típico isocrático.



Fuente: BIDLINGMEYER, Brian A. Practical HPLC Methodology and Applications. John Wiley & Sons, 1992. P. 3. Modificada por el autor.

Figura 2. Árbol de decisión guía para seleccionar la correcta cromatografía.



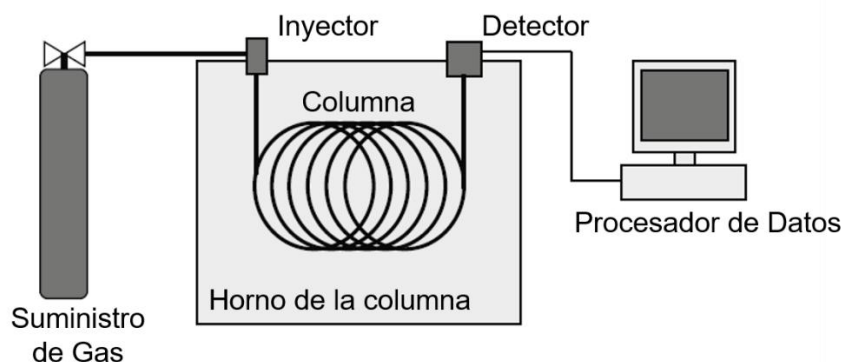
Fuente: BIDLINGMEYER, Brian A. Practical HPLC Methodology and Applications. John Wiley & Sons, 1992. P. 109. Modificada por el Autor.

1.3.2.2 Cromatografía de Gases. La cromatografía de gases se refiere a cuando su fase móvil es un gas portador inerte a la muestra a analizar. Para el desarrollo del cromatograma, en la CG se utilizan varias técnicas, cómo frontal o por desplazamiento, sin embargo la mayoría de equipos actuales utilizan también la técnica de la elución, al ser más precisa y versátil.

A diferencia de la cromatografía líquida en la cromatografía de gases, la fase estacionaria puede ser líquida o sólida, y son referidas como cromatografía gas-líquido (CGL) o cromatografía gas-sólido (CGS). Cuando la fase estacionaria es líquida la separación ocurre por partición que es la repetida solvatación y vaporización de los solutos. Este es utilizado especialmente con sustancias orgánicas de mediana a baja volatilidad, y la columna puede trabajar a temperaturas menores al punto de ebullición de los analitos. Cabe aclarar que la selección del líquido a utilizar como fase móvil es crucial, pues si se seleccionan líquidos volátiles a una diferencia menor a los cien grados con el punto de ebullición de la muestra, o se degraden a temperaturas elevadas no hay retención de las muestras.

Cuando se utiliza CGS, la columna debe trabajar sobre el punto de ebullición del analito, lo que la hace más apropiada para determinar y separar gases y sustancias muy volátiles como hidrocarburos. La separación ocurre por adsorción, así pues es muy importante seleccionar el correcto empaque de la columna. En la figura 3, se muestra un esquema general de un cromatógrafo de gases típico.

Figura 3. Esquema típico del sistema de un CG.

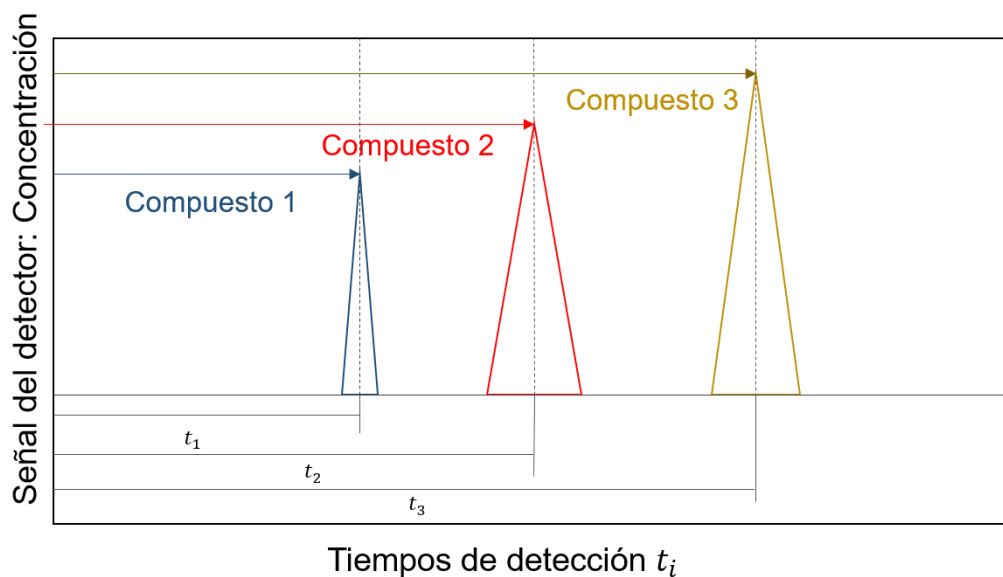


Fuente: WILDE, Katja D. ENGEWALD, Werner. Practical gas chromatography: a comprehensive reference. Springer, Heidelberg, Alemania, 2002. P.9. Modificada por el Autor.

1.3.2.3 Cromatograma. El cromatograma es la carta obtenida con los resultados de la cromatografía, es la representación gráfica de la respuesta del detector en función del tiempo e indica la presencia de algún componente en forma de 'picos'.

Al final de la columna se coloca un sistema de detección que brinda esta respuesta en función de alguna propiedad del analito, para cromatografía de gases se cuenta con detectores de ionización de llama (FID), detector de captura de electrones (SD), detector de nitrógeno-fósforo (NPD) y para la cromatografía líquida se tienen los de Quimioluminiscencia (CL), Fotodiodo Array (PDA), Índice de refracción (RI) y Ultravioleta (UV) entre los más comunes, para ambos tipos de cromatografía se cuenta con el detector de espectrómetro de masas que es el único que permite determinar y cuantificar los compuestos de la muestra a analizar²². En la figura 4 se muestra un cromatograma hipotético para dos componentes.

Figura 4. Cromatograma hipotético.



La ubicación en el eje x representa el tiempo de retención y la ubicación en el eje y la abundancia. Según la ubicación del pico es posible determinar cuántos componentes se encuentran y con el uso de estándares la identidad de estos, la altura del pico sirve para determinar la concentración de cada compuesto y por último, si no conoce nada sobre la mezcla, los picos del cromatograma se pueden

²² SMITH, Ivor. Chromatography. Elsevier, 2013.

combinar con otros métodos experimentales de análisis químico para identificar las sustancias.

1.4 CONSISTENCIA TERMODINÁMICA

La termodinámica tiene especial importancia para evaluar los datos experimentales de equilibrios de fases utilizados en diferentes procesos de separación. Generalmente los equilibrios líquido-vapor reportan los datos de composición del líquido en función de su temperatura a presión constante o en función de la presión a temperatura constante. De acuerdo con la regla de las fases, esta es suficiente información para caracterizar completamente el equilibrio.

Sin embargo los datos experimentales de los equilibrios están sujetos a errores en las medidas, aquí la termodinámica no se utilizan solo para la correlación de esto si no para evaluar su consistencia. Esto significa un análisis de los datos con el fin de mostrar que estos cumplen con las relaciones básicas de la termodinámica y representan de forma real los equilibrios de fases.

Estos procedimientos se llaman test de consistencia termodinámica y se basan en la ecuación de Gibbs-Duhem:

$$d(n_T G) = n_T V dp - n_T S dT + \sum_{n=1}^i g_i dn_i \quad \text{Ec. 17}$$

Donde G es la energía libre de gibbs, n_i el número de moles del componente i , V el volumen molar, S la entropía molar, g_i la energía de gibbs parcial de i en el sistema y n_T las moles totales definidas como:

$$n_T = \sum_{n=1}^i n_i \quad \text{Ec. 18}$$

Si el sistema se aplica a dos fases en equilibrio la ecuación de Gibbs-Duhem queda de la forma:

$$\sum \ln \left(\frac{y_1}{y_2} \right) dx_1 - \frac{H^E}{RT^2} dT - \frac{V^E}{RT} dp = 0 \quad \text{Ec. 19}$$

Donde γ_1 y γ_2 es el coeficiente de actividad de los compuestos 1 y 2, x_1 la fracción molar del componente 1, H^E las entalpías en exceso de mezcla y V^E el volumen en exceso de la mezcla.

Dado que estos datos experimentales consisten en la presión o temperatura y la composición de una de las dos fases (x_i o y_i) se verifica la calidad de los datos experimentales con la ecuación 18 en su forma derivada de γ_i . Se dice entonces que los datos experimentales que pasan los test de consistencia termodinámica pasan a ser datos reales, pues si se replicara exactamente las mismas condiciones de la experimentación el resultado debería ser el mismo, representando la realidad del equilibrio.

Siendo que los equilibrios son brindados usualmente como datos isotérmicos o isobáricos. En el caso isotérmico el segundo término de la ecuación 19 es igual a 0 al no haber cambio de temperatura. A presiones bajas y moderadas, se puede simplificar más dado que el cambio de volumen con respecto a la presión es bajo, pudiéndose omitir el término de $\frac{V^E}{RT} dp$. El desarrollo de la ecuación de Gibbs-Duhem queda entonces:

$$\sum \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) dx_1 = 0 \quad \text{Ec. 20}$$

En el caso isobárico, no puede omitirse el término de la entalpía, quedando de la forma:

$$\sum \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) dx_1 + \frac{H^E}{RT^2} dT = 0 \quad \text{Ec. 21}$$

Diversos test de consistencia han sido desarrollados para la validación de ELV utilizando modificaciones y desarrollados de la ecuación de Gibbs-Duhem. Entre los más utilizados está el test de áreas de Herington (1950)²³ que evalúa el término de la entalpía por medio de una aproximación empírica para los datos cuando se realiza la integral la ecuación de Gibbs-Duhem entre los límites de x_1 y x_2 al conocido como test de áreas de Redlich-Kister (1948). Para un sistema binario, este queda expresado como:

²³ WISNIAK, Jaime. The Herington test for thermodynamic consistency. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. vol. 33, no. 1, p. 177-180

$$\int_0^1 \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) dx_1 = \int_{T_2^o}^{T_1^o} \frac{H^E}{RT^2} dT \quad \text{Ec. 22}$$

Donde se dice que hay consistencia cuando las áreas bajo la curva representadas por las integrales cumplen con la condición de igualdad. El test de áreas de Herrington es simple y fácil de implementar, ya que los datos de las entalpías de mezcla a las condiciones exactas del equilibrio dadas son raramente disponibles para aplicar directamente el test de Redlich-Kister. Wisniak (1993) ²⁴ demostró errores conceptuales en este, ya que las correlaciones empíricas incluyen el estudio de solo 15 sistemas válidos y propone un nuevo test de punto y de área donde incluye las relaciones de los coeficientes de actividad (Ec 21), la relación entre las energías de Gibbs en exceso de la mezcla (Eq 12) con el punto de burbuja y la ecuación de Clausius-Clapeyron (Eq 22):

$$\ln \frac{P}{P_k^o} = \frac{\Delta h_k^o(T_b^o - T)}{RT_b^o T} = \frac{\Delta S^o(T_b^o - T)}{RT} \quad \text{Ec. 23}$$

Los tests de punto permiten la reducción de los datos para discernir cuáles cumplen y cuáles no la consistencia, a diferencia que la evaluación de todo el equilibrio. Entre los tests más ampliamente utilizados, se encuentra el test de punto de Van Ness y col (1973) y posteriormente estudiada por Fredenslund (1977) ²⁵ donde a partir de los datos experimentales dados calcula de las fracciones molares del vapor y_i y evalúa un criterio de la diferencia σy_i en los datos calculados experimentalmente. Las ecuaciones que se llevan a cabo en este test de punto son las presentadas a continuación:

$$\sigma = 100 \times \sum_{j=1}^m |\sigma_j^*| / m \quad \text{Ec. 24}$$

$$\sigma_j^* = d\left(\frac{G^E}{RT}\right) - \ln\left(\frac{\gamma_1}{\gamma_2}\right) - \varepsilon \quad \text{Ec. 25}$$

²⁴ WISNIAK, Jaime. A new test for the thermodynamic consistency of vapor-liquid equilibrium. En: Industrial and Engineering Chemistry Research. vol. 32, p. 1531-1531

²⁵ FREDENSLUND, Aage; GMEHLING, Juergen y RASMUSSEN, Peter. Determination of Unifac Parameters. En: Vapor-Liquid Equilibria using UNIFAC: A Group-Contribution Method. 1 ed. Ámsterdam: Elsevier, 1977. p. 65.

Donde m es el número de los datos y ε el criterio de la ecuación de Gibbs-Duhem isobárico o isotérmico. Se dice que hay consistencia, si las desviaciones relativas $\sigma y_i < 0.01$.

Los test de consistencia termodinámica son de gran importancia en la industria química, pues evalúan, validan y determinan la utilidad de los datos de los equilibrios de fases que son los puntos de partida para los diseños de los procesos de separación.

1.5 OPTIMIZACIÓN Y MINIMIZACIÓN

Al ser uno de los objetivos encontrar la curva que describa de forma correcta los equilibrios de fases, la optimización es utilizada en los problemas relacionados para solucionar los modelos que se han descrito anteriormente. Específicamente se refieren a la minimización de funciones objetivo para obtener ya sea parámetros de interacción binarios (como el caso de los modelos para coeficientes de actividad o coeficientes de fugacidad), o los test basados en relaciones termodinámicas utilizados para validar la consistencia termodinámica de los datos experimentales de los ELV entre otros problemas.

La optimización matemática se define entonces como un proceso en el cual se encuentran los valores óptimos para un problema definido donde se tiene como objetivo maximizar o minimizar una función que representa la realidad del problema. Los valores se obtienen mediante un método sucesivo de cómputo definido por un algoritmo matemático, y se encuentran en un dominio específico del problema.

Las metodologías de optimización se pueden describir en dos grandes grupos, la optimización determinística y la optimización estocástica.

1.5.1 Optimización determinística. Es la rama clásica de la optimización que busca obtener un resultado global del problema con un algoritmo que tenga bases teóricas matemáticas y que garantice que el resultado de la optimización sea el resultado óptimo global. La minimización determinística se enfoca en tres temas²⁶:

²⁶ CAVAZZUTI, Marco. Deterministic Optimization. En: Optimization Methods: From Theory to Design Scientific and Technological Aspects in Mechanics.

- a) Determinar el mínimo global de la función objetivo FO sujeto a las restricciones de R . (f debe tener el mínimo valor posible en R).
- b) Determinar los límites inferior y superior del mínimo global de la función objetivo FO en R que es la región posible de R .
- c) Encontrar las posibles soluciones del set de las restricciones de igualdad y desigualdades en R .

La principal característica que diferencia los métodos determinísticos de los estocásticos es que estos no contemplan el azar en sus algoritmos por lo que es importante el valor de los parámetros de entrada o condiciones iniciales para obtener valores de salida globales y no locales o falsos. Su ventaja es que se desarrollan en un tiempo finito porque requiere menos evaluaciones para llegar a la solución ya que esta ejecuta en cada paso una simulación de la optimización, por lo tanto el número de estimaciones requeridas por el algoritmo de minimización será equivalente al tiempo de cómputo requerido.

1.5.2 Optimización Estocástica. La optimización estocástica incluye los métodos de optimización en donde la aleatoriedad o azar hace parte del algoritmo de búsqueda del óptimo. La mayoría de métodos de programación u optimización estocásticos evalúan la aleatoriedad basada en la observación desde diferentes ciencias como la biología, física o geología de diferentes fenómenos de la naturaleza. En la familia de la optimización estocástica se encuentran²⁷:

- a) Optimización de enjambre de partículas (*Particle Swarm Optimization* PSO): Emula el comportamiento social de las aves al congregarse.
- b) Optimización basada en la teoría del juego (*Game Theory Based Optimization* GT): Simula la evolución o progreso en un juego donde cada jugador trata de completar sus propios objetivos, están basadas en la teoría del juego de John Nash.
- c) Algoritmos evolucionarios y genéticos (*Evolutionary Algorithm* EA, & *Genetic Algorithm* GA): Es la categoría más importante y ampliamente utilizada en la optimización estocástica. Se basa en la teoría de la selección natural de la evolución de las especies de Darwin. Si bien ambas utilizan el mismo principio

Moderna, Italia: Springer Science & Business Media, 2012. p. 77. ISBN 978-3-642-31186-4

²⁷ CAVAZZUTI, Marco. Stochastic Optimization. En: Optimization Methods: From Theory to Design Scientific and Technological Aspects in Mechanics. Moderna, Italia: Springer Science & Business Media, 2012. p. 103. ISBN 978-3-642-31186-4

evalúan la evolución desde un punto de vista diferente por lo que los EA se consideran una subcategoría de los GA.

La principal característica es que estos algoritmos evalúan el azar, a diferencia del método determinístico, no tiene un tiempo definido de solución ya que la convergencia es mucho más lenta. El algoritmo se ajusta a su ambiente y por esto no depende de los valores iniciales para llegar a un óptimo global si no, al tamaño de la población y su espacio o superficie de solución.

2. EQUILIBRIOS DE FASES

Para la evaluación del equilibrio del ácido propiónico y el agua isobárico se seleccionaron diferentes conjuntos de datos a diferentes presiones. En la tabla 1 se muestran los conjuntos de datos analizados en el presente trabajo.

Tabla 1. Conjuntos de datos seleccionados para su evaluación.

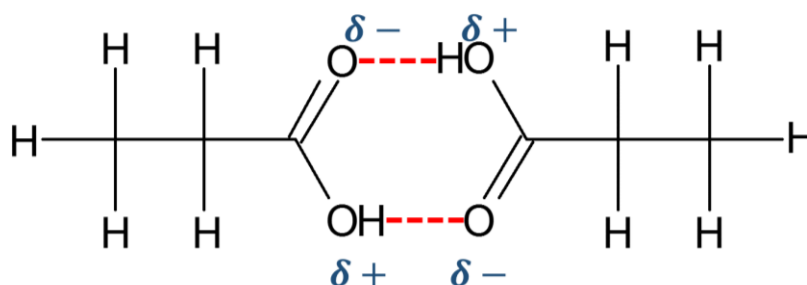
ELV	Año	Presión (N/sqm)	Número de puntos	Bibliografía
1	1961	26660	12	(Rivenq 1961)
2	1963	9330	24	(Ito et al. 1963)
3	1963	26660	8	(Ito et al. 1963)
4	1975	101320	6	(Amer Amezaga 1975)
5	1985	101300	12	(Sako et al. 1985)
6	2009	13330	24	(Peng et al. 2009)
7	2009	101330	8	(Peng et al. 2009)
8	2016	74660	6	(Monguí Rojas et al. 2016)

Los datos seleccionados fueron obtenidos a partir de una revisión bibliográfica en la que se tuvo en cuenta 4 aspectos: que el equilibrio se encontrara a presiones diferentes, tuvieran suficientes puntos de equilibrio, que los datos aportaran de temperatura, presión, composición experimental en el vapor y composición experimental en el líquido y que fueran publicados en diferentes años para asegurarse que hayan utilizado diferentes técnicas experimentales.

2.1 EQUILIBRIOS DE FASES EXPERIMENTALES

Para poder realizar cualquier análisis de los datos experimentales, es necesario resolver el equilibrio de fases experimental. Los ácidos carboxílicos, especialmente los de bajo peso molecular presentan interacciones moleculares fuertes en la fase vapor de tipo puentes de hidrógeno (figura 5).

Figura 5. Dimerización del ácido propiónico.



Aún a bajas presiones, esto representa una desviación de la idealidad en la fase vapor, por lo que resulta necesario incluir el coeficiente de fugacidad total en el equilibrio de fases:

$$y_i \phi_i P = x_i \gamma_i p_i^o \quad \text{Ec. 26}$$

El coeficiente de actividad ϕ_i se calculó con la ecuación del virial, utilizando el modelo de Hayden O'Connell ²⁸, en el capítulo 3 se realiza la discusión sobre el uso de este modelo. Las presiones de saturación p_i^o se calcularon por medio de la ecuación de Antoine extendida (Ec. 27) utilizando los coeficientes se encuentran en la tabla 2 y fueron obtenidos del libro *Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds* ²⁹

Tabla 2. Coeficientes de Anotine para la mezcla.

	A ¹	B ¹	C ¹	D ¹	E ¹
Ácido Propiónico	20.2835	-3.12E+03	-3.6015	-1.39E-03	7-1801E-7
Agua	29.8605	-3.15E+03	-7.3037	2.43E-09	1.81E-06

¹P (mmHg), T(K)

$$\log P = A + \frac{B}{T} + C \log T + DT + ET^2 \quad \text{Ec. 27}$$

²⁸ HAYDEN, J. George y O'CONNELL, John P. A generalized method for predicting second virial coefficients. En: Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. vol. 14, no. 3, p. 209-216

²⁹ YAWS, Carl L. y GABBULA, Chaitanya. *Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds*. Knovel, 2003.

Finalmente el coeficiente de actividad experimental se calculó a partir del desarrollo del equilibrio de fases:

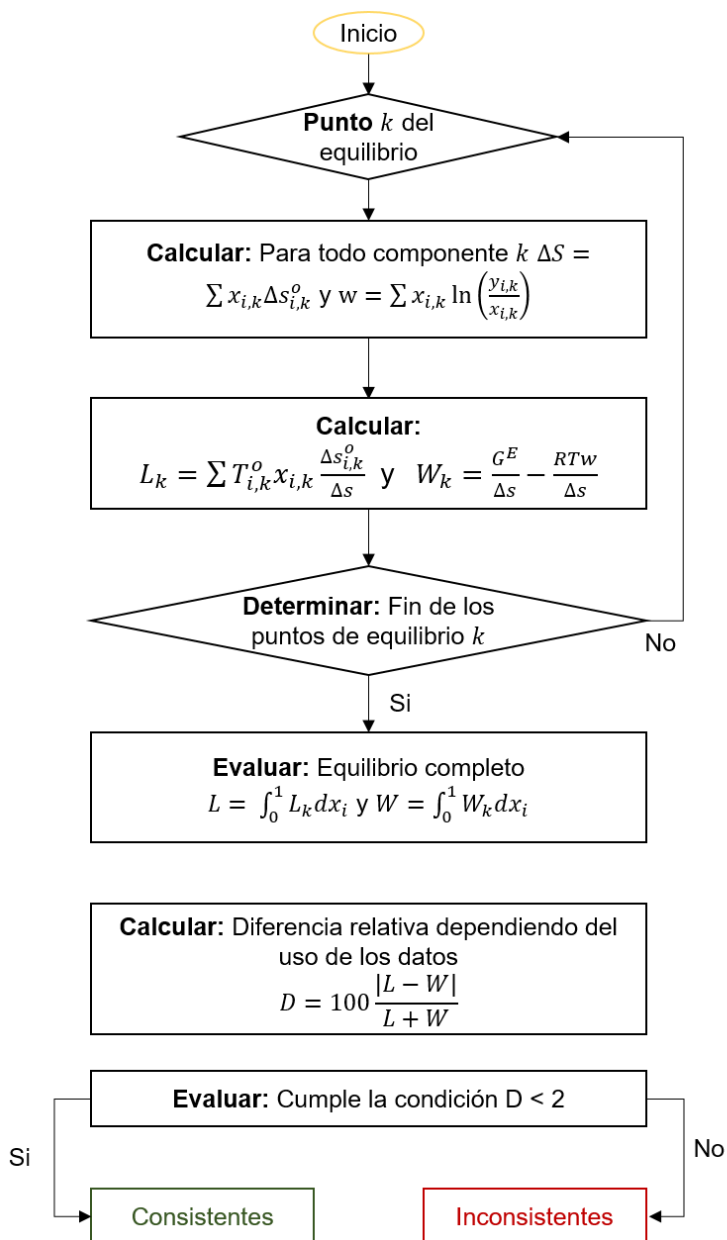
$$\gamma_i = \frac{y_i \phi_i P}{x_i p_i^o} \quad \text{Ec. 28}$$

Para todos los sistemas el coeficiente de actividad γ_i en todos los puntos de equilibrio fue mayor a la unidad, dando una desviación positiva de la ley de Raoult, siendo congruente con el comportamiento del sistema. Los equilibrios experimentales y el cálculo de sus respectivos coeficientes de actividad y fugacidad se encuentran consignados en el anexo C.

2.2 CONSISTENCIA TERMODINÁMICA

El test de consistencia seleccionado fue el test de Wisniak al realizar una evaluación de tipo test de punto, y test de área en su desarrollo. Este presenta una mejor correlación que el clásico test de áreas de Herrington, y presenta una mejor convergencia para sistemas altamente no ideales que el test de punto de Van. Ness y Fredenslud. En la figura 6 se muestra el paso a paso del desarrollo e implementación del test de consistencia.

Figura 6. Diagrama de flujo para el test de consistencia termodinámica de Wisniak.



Las entropías de vaporización $\Delta s_{i,k}^o$ se calcularon a partir de la entropía de vaporización a la temperatura en el punto i (Ec 25) Los datos para el cálculo de la entalpía de vaporización se encuentran en el anexo A. La temperatura de ebullición T_b a la presión del equilibrio fue obtenida a partir de los datos brindados por el equilibrio de fases:

$$\Delta S_{i,k} = \frac{\Delta h_{i,k}}{T_b} \quad \text{Ec. 29}$$

El término L_i evalúa la relación termodinámica dada por la ecuación de Clausius Clapeyron (Ec. 23) donde se tiene en cuenta las características de transición de fase dadas para compuestos puros, mientras el término W_i evalúa la desviación de las energías libres de Gibbs en exceso G^E del equilibrio de fases experimental (evaluado en el término w).

Para el cálculo de la energía libre de Gibbs en exceso se utilizó el modelo de NRTL, utilizando los parámetros minimizados en la sección 3.2 para el modelo que NRTL-HOC que incluye la desviación del equilibrio dada por el coeficiente de fugacidad. Este fue implementado en el test de consistencia por su versatilidad al tener 2 parámetros ajustables (4 en su forma extendida) y un parámetro de no aleatoriedad, siendo adecuado para mezclas de ácidos carboxílicos como se muestra en la sección 3.1.

NRTL es un modelo de composición local de energía de Helmholtz, para un sistema binario, la energía interna del sistema U^E está dada por:

$$U^E = \frac{N_A Z}{2} \left[\frac{x_1 x_2 \Omega_{21} (\epsilon_{21} - \epsilon_{11})}{x_1 + x_2 \Omega_{21}} + \frac{x_2 x_1 \Omega_{12} (\epsilon_{12} - \epsilon_{22})}{x_2 + x_{21} \Omega_{12}} \right] \quad \text{Ec. 30}$$

Restringida a:

$$\frac{A^E}{RT} = \int_{T=\infty}^T \frac{U^E}{RT} \frac{dT}{T} + \frac{A^E}{RT} \quad \text{Ec. 31}$$

Donde el parámetro Ω_{ij} es el factor del balance energético de la composición local, y $N_A = 1$ para NRTL, Z el número de componentes, y la diferencia $\epsilon_{ij} - \epsilon_{ii}$ el desarrollo de la teoría de dos fluidos para el cálculo de energía interna del sistema, que relaciona el concepto de composición local (la molécula i alrededor de la molécula j). A^E es la energía de Helmholtz del sistema y el factor $\frac{A^E}{RT}$ está

relacionada a la forma y tamaño de la molécula. A diferencia de los demás modelos de composición local, NRTL no asume que $A^E = G^E$.³⁰

Los parámetros de entrada para el cálculo de G^E (Anexo B), son la temperatura y la composición. Este modelo incluye una relación termodinámica en su desarrollo donde la restricción está dada por esta misma, el modelo se asume consistente termodinámicamente.

Dado que tanto los valores de L como los valores de W no son conocidos, son resultados de la evaluación de una integral, y se sabe que no tienen las mismas magnitudes (por lo modelos seleccionados para el cálculo), Wisniak propone una desviación medida de tipo absoluto y porcentual basada en la correlación original hecha por Herrington³¹, donde se dice que el valor debe ser menor a 1 o 1.5 (dependiendo de donde se requieran) cuando la fase vapor es ideal, ya que la desviación dada por las medidas en el vapor es menor, y se es más laxo llegando a 2 para no idealidades en el vapor, al tener en cuenta los posibles errores en el cálculo del coeficiente de fugacidad con los modelos propuestos a la época.

2.2.1. Resultados. Los resultados del test de consistencia se encuentran consignados en la tabla 3.

Tabla 3. Resultados para el test de consistencia de Wisniak.

Número	L	W	D	Evaluación
1	435.412647	-371889.623	1.0023444	Consistente
2	No satisface la ecuación de Gibbs (W_i)			Inconsistente
3	No satisface la ecuación de Gibbs (W_i)			Inconsistente
4	320.000571	-5517724.74	1.000116	Consistente
5	<i>No Evaluable</i>			
6	361.423056	186840.762	0.9961387	Consistente
7	No satisface la ecuación de Gibbs (W_i)			Inconsistente
8	No satisface la ecuación de Gibbs (W_i)			Inconsistente

³⁰ ELLIOTT, J. Richard y LIRA, Carl T. Chapter 13. Local Composition Activity Models. En: Introductory Chemical Engineering Thermodynamics - 2nd Edition. Prentice Hall PTR Upper Saddle River, NJ, 2012. p. 543.

³¹ WISNIAK, Jaime. The Herington test for thermodynamic consistency. En: Industrial & Engineering Chemistry Research. vol. 33, no. 1, p. 177-180

Los equilibrios 2, 3, 7 y 8 se considera que no son consistentes termodinámicamente, ya que no lograron cumplir la restricción de la función de gibbs dada por el modelo de composición local para todo el rango de composición. El equilibrio 5 no es evaluable al través del test de Wisniak, ya que los datos de la temperatura no tienen diferencias mayores a 0.03 grados entre ellas tendiendo a ser Isotérmico-Isobárico.

3. TERMODINÁMICA DEL EQUILIBRIO DE FASES

3.1 SELECCIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO

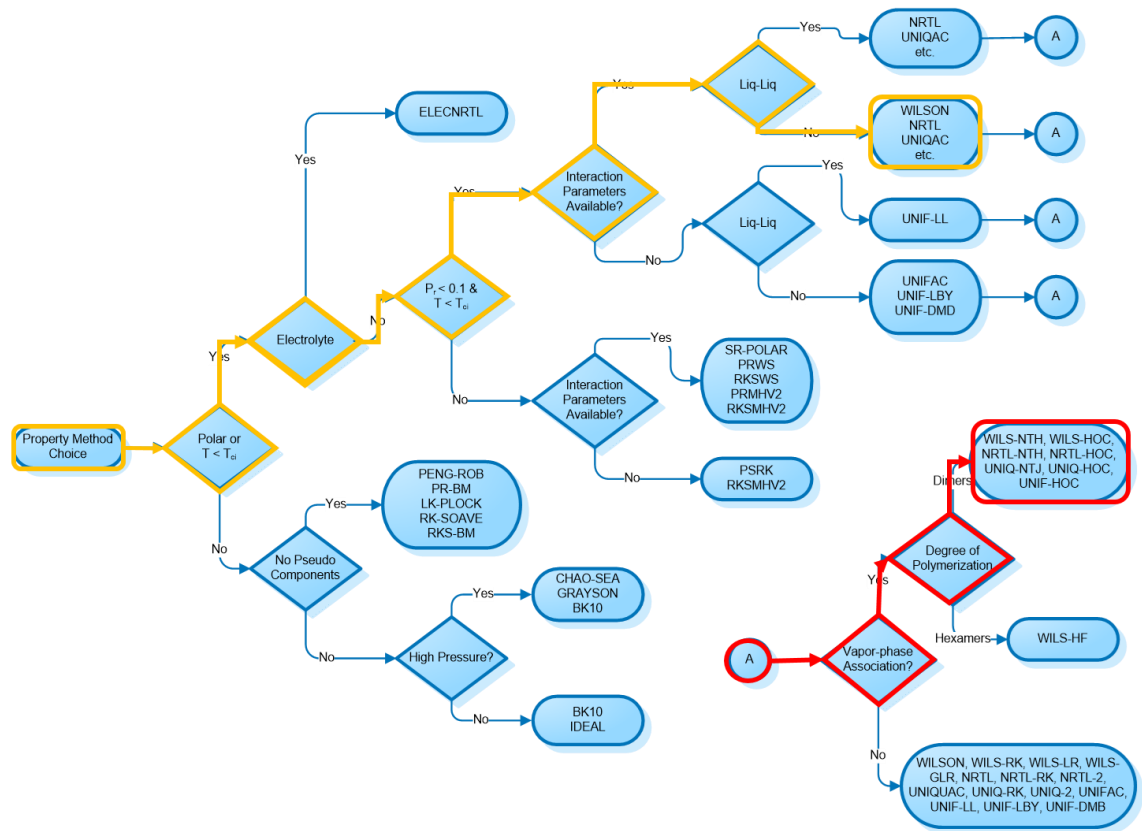
Los modelos termodinámicos son herramientas que permiten estimar las propiedades termodinámicas de las mezclas, vitales para el desarrollo de simulación de procesos. La no adecuada selección de este modelo, hará que la simulación tenga poco o nada que ver con la realidad, y resulte inútil al momento de realizar un diseño de un proceso de separación.

Para la selección del correcto modelo termodinámico es necesario tener en cuenta las situaciones físicas de que describen el comportamiento del equilibrio. Como se mencionó antes, los sistemas que incluyen ácidos carboxílicos presentan dimerizaciones en la fase vapor, y para el caso particular del sistema ácido propiónico-agua, no presenta interacción de tipo líquido-líquido en la fase líquida³².

La herramienta utilizada en la selección fue el diagrama de decisión para los métodos de propiedades de Aspen Plus que reúne algunos los métodos de propiedades físicas más utilizados bajo cuatro criterios: la naturaleza de las propiedades de interés, la composición de la mezcla, los rangos de presión y temperatura, y la viabilidad de los parámetros, en la figura 7 se muestra la selección realizada:

³² TAYLOR, Moddie D. y BRUTON, Joseph. The Vapor Phase Dissociation of Some Carboxylic Acids. II. Formic and Propionic Acids¹, 2. En: Journal of the American Chemical Society. vol. 74, no. 16, p. 4151-4152

Figura 7. Selección de los modelos termodinámicos.



Fuente: Aspen Propeties Help V.9. Modificada por el autor.

El resultado, arroja el uso de los modelos de composición local (NRTL, Wilson y UNIQUAC) para modelar el coeficiente de actividad para la fase líquida, y por el grado de polimerización de la fase vapor el modelo de Hayden O’Connell o Nothnagel para el cálculo del coeficiente de actividad.

Se descarta el modelo de Nothnagel ya que es una ecuación de estado de tipo corrección de la idealidad, mientras que el modelo de Hayden O’Connell (HOC por su abreviación) es del tipo Virial, es decir calcula el segundo coeficiente de la ecuación del Virial (Ec.14) y tiene en cuenta las asociaciones moleculares en su desarrollo lo que resulta mejor para modelar el comportamiento de los ácidos carboxílicos en el vapor. El cálculo de la ecuación del Virial por HOC presenta 3 ventajas frente al uso de otra ecuación de estado: primero es que es consistente termodinámicamente, permite el desarrollo de la “teoría química” para sustancias con asociaciones moleculares fuertes como el caso de los ácidos carboxílicos al ajustarse a datos experimentales consistentes (Anexo B), y ha sido ampliamente

estudiada a diferencia de otros modelos como el de Nothngel, como se muestra en la revisión bibliográfica realizada en el trabajo de Monguí et. al siendo la más frecuentemente utilizada para modelar este tipo de sistemas. Estas razones permiten que se realice un ajuste correcto del modelo en el software Aspen Properties.

En el anexo B se muestra la ruta utilizada en otro árbol de decisión, corroborando la selección realizada.

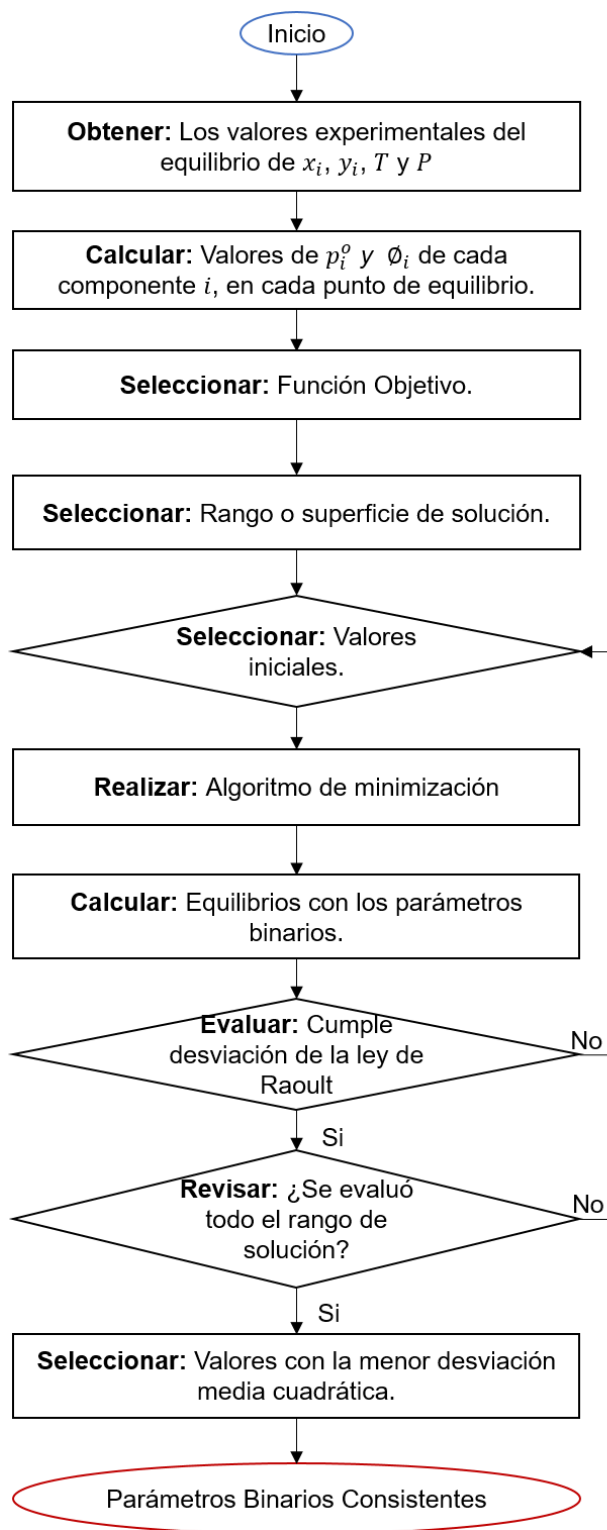
3.2 AJUSTE DEL MODELO DE ACTIVIDAD

Para calcular equilibrios líquido-vapor binarios, se deben ajustar los modelos de actividad a los datos experimentales. El algoritmo utilizado para realizar el ajuste se presenta a continuación (figura 8), y es basado en el paso a paso propuesto por Polling y Prausnitz (2001)³³. Es importante tener en cuenta los modelos de composición local son basados en la mezcla local, y los valores que se utilizan en el algoritmo de minimización corresponden exclusivamente a los valores de mezcla de los equilibrios, y para obtener una buena regresión se necesitan mínimo 5 puntos de estos³⁴.

³³ POLING, Bruce E.; PRAUSNITZ, John M. y O'CONNELL, John P. Chapter 8. Fluid Phase Equilibria in Multicomponent Systems. En: [Anónimo]The Properties of Gases and Liquids. Mcgraw-hill New York, 2001.

³⁴ BRANCH, Marry Ann y GRACE, Andrew. Optimization Toolbox: For use with MATLAB: User's Guide: Version 1. Math works, 1998.

Figura 8. Paso a paso para el cálculo de los modelos de actividad.



El rango o superficie de solución se refiere al conjunto de números que van a ser evaluados desde un límite inferior hasta un límite superior, siendo que es imposible evaluar un rango desde $-\infty$ a ∞ , estos son seleccionados arbitrariamente inicialmente. El límite superior e inferior se pueden determinar a medida que se realiza el algoritmo de minimización cuando la solución sobre ese número inicial (límite superior) o debajo de este (límite inferior), llega al mismo valor inicial seleccionado, en este punto se pueden establecer los límites. Una buena forma de seleccionar el rango es revisar en la bibliografía el orden del rango en el que se encuentra los parámetros binarios de cada función dependiendo de las unidades en las que se esté realizando el algoritmo. En el caso del presente estudio, el rango seleccionado va de -1000 a 1000 para todos los modelos³⁵.

Existen diferentes funciones objetivo (FO), el orden de importancia en la selección de esta depende de cuantas incertidumbres tenga en cuenta en la construcción de la función³⁶. Las funciones objetivos más frecuentemente utilizadas y el orden de selección propuesto se muestra a continuación:

- Principio de la máxima verosimilitud:

$$OBJ = \sum_{\text{puntos}} \left\{ \frac{(P_{true} - P_{exp})_i^2}{\sigma_p^2} + \frac{(T_{true} - T_{exp})_i^2}{\sigma_T^2} + \frac{(x_{1,true} - x_{1,exp})_i^2}{\sigma_x^2} + \frac{(y_{1,true} - y_{1,exp})_i^2}{\sigma_y^2} \right\} \quad \text{Ec. 31}$$

Donde σ_i^2 es la varianza estimada de cada valor medido, Aspen Properties toma este valor por defecto de 0.002.

Esta función objetivo es la que tiene en cuenta la mayor cantidad de incertidumbres en su forma, asumiendo errores experimentales en cada una de las mediciones del equilibrio de forma explícita (temperatura, presión y

³⁵ WESTHAUS,U.; DRÖGE,T. y SASS,R. DETHERM®—a thermophysical property database. En: Fluid Phase Equilibria. vol. 158, p. 429-435

³⁶ PRAUSNITZ, John M. Chapter 6. Parameter Estimation. En: [Anónimo]Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria. Prentice Hall, 1980.

composiciones de ambas fases), por lo cual el principio de máxima verosimilitud es el primero en la línea de selección de FO.

- La minimización de la diferencia de los coeficientes de actividad:

$$OBJ = \sum_{puntos} (\gamma_{i,calc} - \gamma_{i,exp})^2 \quad \text{Ec. 32}$$

La segunda FO en el orden de selección, es la minimización de la diferencia de los coeficientes de actividad, ya que el coeficiente de actividad experimental se calcula a partir del equilibrio de fases que incluye de forma implícita las restricciones del equilibrio (Ec.28), esta es seleccionada cuando los equilibrios no cumplen con todas las restricciones del principio anteriormente descrito.

- La minimización de la diferencia de las energías libres de Gibbs en exceso específicas:

$$OBJ = \sum_{puntos} \left(\frac{g_{calc}^E}{RT} - \frac{g_{exp}^E}{RT} \right)^2 \quad \text{Ec. 33}$$

La siguiente FO en el orden de selección es la Ec.33. Si bien para el cálculo de la energía de gibbs específica experimental g_{exp}^E tiene incluidas las mismas restricciones dadas por el equilibrio de fases que en la minimización de la diferencia del coeficiente de actividad (se calcula a partir de gamma), las ecuaciones para g_{calc}^E no sería el modelo para el cálculo de gamma si no, el desarrollado para el cálculo de las energías de gibbs en exceso (Anexo B). Esta es seguida porque si bien también tiene de forma implícita en el equilibrio de fases experimental, es menos imprecisa.

- El método de Baker para la minimización de las diferencias de la presión o temperatura de burbuja.

$$OBJ = \sum_{puntos} (P_{calc} - P_{exp})^2 \quad \text{Ec. 34}$$

$$P_{calc} = \sum x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad \text{Ec. 35}$$

Este principio realiza la minimización de los puntos de burbuja. La presión calculada a partir de los parámetros estimados, la medida de la temperatura y la fracción molar del líquido. Es la última en el orden de selección ya que no incluye las incertidumbres dadas por el vapor, por lo que ajusta de forma menos rigurosa los datos dados. Cabe aclarar que si bien no tiene en cuenta la medida del vapor esto no quiere decir que no sea apta para sistemas que tengan no idealidades en el vapor.

Siendo que los parámetros binarios obtenidos fueron utilizados en el test de consistencia termodinámico, se seleccionó como función objetivo el principio de máxima verosimilitud. Con este principio se dice que cada valor experimental si es replicado en exactas condiciones brinda un valor real del equilibrio, que es el mismo fundamento de los test de consistencia termodinámica.

El procedimiento de minimización fue llevado a cabo en Aspen Properties V.9 por medio de un algoritmo de minimización propio de este para los modelos de NRTL-HOC, WILSON-HOC Y UNIQUAC-HOC, del paquete de propiedades.

3.2.1. Resultados. No se cumplió el principio de máxima verosimilitud para todas las minimizaciones no logrando obtener parámetros que cumplieran las restricciones de este. Para aquellos que no cumplieron se cambió la función objetivo a la minimización de los coeficientes de actividad, y para el caso del equilibrio 5 el único método de minimización viable fue el método de Baker. El equilibrio 8 no es posible de minimizar al no tener suficientes datos experimentales de mezcla (4 puntos), para este se utilizaron la base de datos APV88 VLE-HOC para resolver el equilibrio. En la tabla 4 se encuentra la función objetivo utilizada en cada ajuste realizado.

Tabla 4. Funciones objetivo utilizadas en cada ajuste realizado.

ELV	Función Objetivo Utilizada		
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
1	1	1	1
2	1	2	1
3	2	2	1
4	1	1	3
5	3	3	3
6	1	1	1
7	1	2	2
8	No evaluable		

1 = Principio de máxima Verosimilitud
 2 = Minimización de los coeficientes de actividad
 3 = Principio de Baker

3.3 VALIDACIÓN DEL MODELO TERMODINÁMICO

3.3.1 Coeficiente de Fugacidad. El modelo de Hayden O'Connell calcula el segundo coeficiente del Virial dependiendo de las características de la mezcla y fue previamente validado en el trabajo de investigación de Monguá et al.

$$B_{Total} = B_{Free} + B_{metastable} + B_{Bound} + B_{chemical} \quad \text{Ec. 36}$$

El coeficiente del Virial $B_{Chemical}$, debe ser tenido en cuenta en este caso, ya que las interacciones entre las moléculas del ácido propiónico en el vapor son del tipo polar asociativas (forman puentes de hidrógeno). Este contiene el único parámetro ajustable específico n para la mezcla en esta correlación, ya que la simetría en las moléculas es dependiente de la mezcla dada y permite el ajuste del modelo. Sin este parámetro el modelo sería genérico para todo tipo de mezclas y no daría una correcta correlación. El cálculo de $B_{Chemical}$ se muestra a continuación:

$$B_{chemical} = b_o \exp \left[\eta_{ij} \left(\frac{n}{\left(\frac{\varepsilon_{ij}}{k} \right) + 22400} - 4.27 \right) \right] \left[1 - \exp \left(\frac{1500 \eta_{ij}}{T} \right) \right] \quad \text{Ec. 37}$$

Monguí et al. Obtienen este parámetro ajustable utilizando como función objetivo la minimización de los coeficientes de actividad a datos termodinámicamente consistentes a baja presión (103322 N/sqm).

El parámetro ajustado n y el parámetro recomendado en la publicación original se encuentran en la tabla 5.

Tabla 5. Parámetros ajustables dependientes para Hayden O’Connell.

	Monguí & Rodriguez (2016)	Hayden & O’Connel (1975)
n	20082	42800

La desviación promedio del ajuste fue $\Delta y = 0,0152$ y $\Delta P [\%] = 17,0192^{37}$.

Los parámetros de ajuste η_{ij} son reportados y dependen del tipo de sustancias. Estos fueron tomados de la base de datos de Aspen Properties V9³⁸ para ácidos carboxílicos de bajo peso molecular, y se encuentran en la tabla 6.

Tabla 6. Parámetros de ajuste para Hayden O’Connell.

η_{ij}	Ácido Propiónico	Agua
Ácido Propiónico	4.5	2.5
Agua	1.5	2.7

3.3.2 Coeficiente de Actividad. Para la validación de los modelos de actividad se utilizó la desviación media cuadrática de la temperatura (RMSD por sus siglas en inglés) siendo la medida estadística para evaluar el ajuste de un modelo a datos experimentales.

$$RMSD = \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (T_k^{cal} - T_k^{exp})^2 \right)^{0.5} \quad \text{Ec. 37}$$

³⁷ MONGUÍ ROJAS, María Jimena; RODRÍGUEZ PÁEZ, Cristian Camilo y MORALES HERNÁNDEZ, Yovanny. Análisis Termodinámico De Mezclas De Ácidos Carboxílicos y Agua. Bogotá, D.C.: Fundación Universidad de América, 2016.

³⁸ WESTHAUS, U.; DRÖGE, T. y SASS, R. DETHERM®—a thermophysical property database. En: Fluid Phase Equilibria. vol. 158, p. 429-435

La RMSD cuenta con 2 componentes, el ruido que se refiere a la heterogeneidad en la tendencia de los datos y el fallo del ajuste presente en todo modelo. No existe un modelo perfecto para todo sistema, siempre hay algo que no es tenido en cuenta y da un mínimo de desviación en el ajuste, llamado también *lack of fit*.

No existe un valor universal para la determinación de un buen criterio de RMSD por lo que depende exclusivamente de los casos de estudio. En el caso de los modelos termodinámicos los datos tienden a ser relativamente homogéneos siendo incluso posibles de representar por expansiones polinómicas por lo que desde una apreciación cualitativa el ruido es poco. Ya que el modelo sólo incluye la fase líquida, la no-idealidad en el vapor presenta una desviación en el sistema a considerar dando un valor significativo de desviación en el ajuste³⁹. Los valores de RMSD dependen también de la técnica utilizada⁴⁰, para el caso de los equilibrios termodinámicos se obtienen bajo principios similares, sean dinámicos, estáticos, o por punto de burbuja-rocío, la medida a tomar corresponde las condiciones cuantitativas variables de equilibrios: la temperatura o presión.

Según lo estudiado por Renon y Prausnitz (1968)⁴¹, Rogalski et. al (1977)⁴², Svedzen (2008)⁴³ y Hizaddin (2015)⁴⁴, es posible asumir que parámetros binarios ajustados a modelos con RMSD menores a 2,5 son aplicables y utilizables cuando

³⁹ HYNDMAN, Rob J. y KOEHLER, Anne B. Another Look at Measures of Forecast Accuracy. [Electronic(1)]: 2006. p. 679-6880169-2070

⁴⁰ ROGALSKI, Marek y MALANOWSKI, Stanisław. Ebulliometers Modified for the Accurate Determination of vapour—liquid Equilibrium. [Electronic(1)]: 1980. p. 97-1120378-3812

⁴¹ RENON, Henri y PRAUSNITZ, John M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. En: AIChE Journal. vol. 14, no. 1, p. 135-144

⁴² ROGALSKI, M. y MALANOWSKI, S. A New Equation for Correlation of Vapour-Liquid Equilibrium Data of Strongly Non-Ideal Mixtures. [Electronic(1)]: 1977. p. 137-1520378-3812

⁴³ KIM, Inna; SVENDSEN, Hallvard F. y BØRRESEN, Eli. Ebulliometric determination of vapor– liquid equilibria for pure water, monoethanolamine, n-methyldiethanolamine, 3-(methylamino)-propylamine, and their binary and ternary solutions. En: Journal of Chemical & Engineering Data. vol. 53, no. 11, p. 2521-2531

⁴⁴ HIZADDIN, Haneer F., et al. Extraction of nitrogen compounds from diesel fuel using imidazolium- and pyridinium-based ionic liquids: Experiments, COSMO-RS prediction and NRTL correlation. En: Fluid Phase Equilibria. 11/15. vol. 405, p. 55-67

se quiere utilizar cualquiera de los modelos de composición local, por lo tanto cuanto menor sea a 2,5 mejor será el ajuste realizado por el modelo.

Los resultados se encuentran en la tabla 7.

Tabla 7. RMSD para los modelos de actividad.

	RMSD		
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
1	1.9332	1.9468	1.9459
2	3.4664	3.4636	3.453
3	4.7821	3.3328	3.3379
4	1.6471	2.0466	1.5411
5		<i>No evaluable</i>	
6	1.919	8.5182	1.9151
7	3.8796	4.3172	<i>No Evaluable</i>
8		<i>No evaluable</i>	
Media (consistentes)	1.8331	4.17053333	1.8007
Media Total	2.9379	3.93753333	2.0321667

Los resultados de los equilibrios calculados y las gráficas Txy se encuentran en el anexo E y F.

3.4 AZEOTROPÍA DEL SISTEMA

La evaluación de la azeotropía es necesaria en el estudio del equilibrio, pues brinda la información sobre la complejidad en la separación del sistema.

Los azeotropos se calcularon por medio de la herramienta *Azeotrope Search* de Aspen Properties V.9 para los paquetes de propiedades y las composiciones calculadas en la resolución de los equilibrios, estas se encuentran en la tabla 8.

Tabla 8. Azeótropos del sistema

P (N/sqm)	Composición calculada		
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
26660	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo
9330	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo
101320	No se encontró Azeótropo	0.0414	No se encontró Azeótropo
13330	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo
101330	No se encontró Azeótropo	0.0414	No se encontró Azeótropo
74660	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo	No se encontró Azeótropo

La herramienta no encontró ninguno de los azeótropos del sistema salvo para el caso de WILSON-HOC, pudiéndose afirmar parcialmente con el análisis que si bien este modelo de actividad tiene la mayor desviación para la predicción de los equilibrios, es a su vez el único con la capacidad de predecir los azeótropos.

3.5 ANÁLISIS DE RESULTADOS

Un modelo de actividad es consistente termodinámicamente cuando tiene implícita una restricción termodinámica, por lo que el modelo de energía libre de Gibbs utilizado en el test de consistencia de Wisniak, debe ser consistente también. Este modelo debe tener unos parámetros ajustables que deben ser obtenidos específicamente para las condiciones únicas del equilibrio a evaluar, y debe ser lo más exacto posible en la representación del equilibrio. Desde un criterio estadístico, los datos de equilibrios poseen una tendencia relativamente homogénea y los modelos una desviación de ajuste dado por las no idealidades, siendo la desviación media cuadrática una medida de error adecuada para evaluar esta exactitud. Una expansión polinómica relaciona poco o nada la termodinámica del sistema siendo una expresión meramente matemática, aunque tenga un buen ajuste desde un punto de vista estadístico.

Hay una notable relación entre los equilibrios que son consistentes termodinámicamente y los que fueron posibles de minimizar por el principio de máxima verosimilitud. Primeramente es importante notar que esta función objetivo es la más rigurosa en su construcción ya que relaciona directamente las medidas cuantitativas del equilibrio (T, P, y y x) que se tomaron como condición a la hora de seleccionar los equilibrios y que también son necesarios en el algoritmo de minimización (ver figura 8) y es porque este asume que un valor experimental del equilibrio es real cuando es de alguna manera replicable y por lo tanto representa el ELV de forma correcta. Siendo así es posible atreverse a decir que los datos que cumplen el principio de máxima verosimilitud tienden a pasar más fácil los test de consistencia al ser congruentes con el principal objetivo de estos: que al cumplir las relaciones termodinámicas básicas, los datos experimentales representen de forma correcta y real los datos de equilibrio.

En cuanto a la selección del modelo termodinámico, una recomendación que se tiene en cuenta a la hora de su selección es que deben evaluarse para cada condición de equilibrio y no para toda la mezcla en sí. Esto quiere decir que si se obtienen datos experimentales de equilibrios que sean consistentes, la selección del modelo debe acompañarse de una base teórica, una evaluación estadística, y una evaluación específica de las características del sistema. En el caso del ácido propiónico y el agua, las características del sistema a tenerse en cuenta es si representan o no la azeotropía, las no idealidades, las presiones de vapor y la temperatura de saturación.

El desarrollo de este trabajo busca ser una base teórica para el estudio de la termodinámica del equilibrio líquido vapor de sistemas de ácidos carboxílicos de bajo peso molecular y agua, teniendo en cuenta diferentes aspectos necesarios, como son la evaluación de la consistencia de los equilibrios, los algoritmos de minimización, la selección de los modelos termodinámicos y las soluciones de los equilibrios.

4. CONCLUSIONES

- Se analizaron de sistemas de equilibrio obtenidos de una revisión de la literatura existente referente al sistema ácido propiónico y agua, que tuvieran diferencias entre sí, como la presión, número de datos, composiciones, año de publicación y que no haya sido evaluado posteriormente. Se lograron obtener 7 equilibrios con estas características más el obtenido experimentalmente en el grupo de investigación. Esta recopilación permitió realizar un estudio completo del comportamiento del equilibrio.
- La evaluación de estos 8 equilibrios arrojó que tan solo 3 cumplían con las condiciones de consistencia termodinámicas evaluadas a través del test de Wisniak (1993). Se utilizó un modelo de Gibbs que tuviera implícita una restricción termodinámica (NRTL) para evaluar la desviación entre los coeficientes de actividad y los datos brindados por los equilibrios experimentales para la evaluación de la relación termodinámica de Clausius Clapeyron, de cambio de fase mono componente. Los equilibrios inconsistentes no encontraron solución real con la restricción del modelo de Gibbs.
- Los equilibrios líquido-vapor fueron resueltos en su totalidad, utilizando el modelo de Hayden & O'Connell previamente validado para el cálculo del coeficiente de fugacidad, y los modelos de composición local NRTL, Wilson y UNIQUAQ, realizando el algoritmo de minimización y obteniendo los parámetros binarios para cada modelo de cada equilibrio evaluado, a excepción del equilibrio número 8 (2016) ya que no cuenta con suficientes datos experimentales para realizar un ajuste válido. Los parámetros binarios del modelo NRTL fueron usados para evaluar los equilibrios al ser el modelo actividad consistente termodinámicamente.
- Se observó una concordancia en los equilibrios que cumplían el principio de máxima verosimilitud para el ajuste del coeficiente de actividad y los consistentes termodinámicamente, siendo posible afirmar que aquellos que cumplen las restricciones del mismo, es decir el menor error entre las mediciones calculadas experimentalmente y las obtenidas, tienden a ser consistentes.
- No es posible seleccionar bajo sólo criterios teóricos un modelo de composición local sobre otro sin realizar una validación estadística del modelo frente a los datos experimentales. Para el caso de estudio se utilizó la

desviación media cuadrática donde el mejor modelo para el cálculo del coeficiente de actividad fue UNIQUAC con una desviación media de 1.801 para datos consistentes y 2.032 para todos los equilibrios evaluados, siendo que en la literatura el más utilizado es NRTL, sin embargo UNIQUAC es limitado para calcular los puntos puros de ciertas mezclas. Su ventaja puede deberse a que es un modelo que tiene en su desarrollo un término residual que tienen en cuenta la entropía del sistema a diferencia de NRTL o Wilson que son netamente entálpicos.

- Los datos calculados a partir de la minimización de los equilibrios evaluados como consistentes, y los parámetros binarios son aplicables y pueden ser utilizados en posteriores trabajos para el diseño de sistemas de separación.

5. RECOMENDACIONES

- Para los equilibrios que se ha declarado inconsistentes se recomienda acompañarlos de una re-evaluación experimental para tener datos confiables y llevarlos a evaluación como la presentada en este trabajo.
- Las herramientas de la suite de Aspen Plus son insuficientes para realizar un análisis de la azeotropía del sistema, por lo que para tener mayor certeza en los puntos en el que el sistema presenta un azeótropo acompañarlo con un estudio experimental.
- Continuar con el estudio de la termodinámica del equilibrio evaluando nuevos modelos termodinámicos y otras formas de optimización, para el caso del ajuste de los parámetros binarios, para diseñar esquemas de separación aplicables mezclas complejas de ácidos carboxílicos.

BIBLIOGRAFÍA

ABRAMS, Denis S. y PRAUSNITZ, John M. Statistical thermodynamics of liquid mixtures: a new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems. En: AIChE JOURNAL. vol. 21, no. 1, p. 116-128

AMER AMEZAGA, S. Vapor-liquid equilibrium at 760 mm of binary systems formed by propionic acid with water and n-amyl, isoamyl, secamyl, tert-amyl, and n-hexyl alcohols. En: ANAL.QUIM.(1968- 1979). vol. 71, p. 127

BRANCH, Marry Ann y GRACE, Andrew. Optimization Toolbox: For use with MATLAB: User's Guide: Version 1. Math works, 1998.

BIDLINGMEYER, Brian A. Approaching the Problem. En: Practical HPLC Methodology and Applications. John Wiley & Sons, 1992. 104 p.

CARLSON, Eric C. Don't gamble with physical properties for simulations. En: CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS. vol. 92, no. 10, p. 35-46

CAVAZZUTI, Marco. Deterministic Optimization. En: Optimization Methods: From Theory to Design Scientific and Technological Aspects in Mechanics. Moderna, Italia: Springer Science & Business Media, 2012a. 77 p. ISBN 978-3-642-31186-4

_____. Stochastic Optimization. En: Optimization Methods: From Theory to Design Scientific and Technological Aspects in Mechanics. Moderna, Italia: Springer Science & Business Media, 2012b. 103 p. ISBN 978-3-642-31186-4

DETTMER-WILDE, Katja y ENGEWALD, Werner. Introduction. En: Practical Gas Chromatography. Springer, 2016. 3 p.

ELLIOTT, J. Richard y LIRA, Carl T. Chapter 13. Local Composition Activity Models. En: Introductory Chemical Engineering Thermodynamics - 2nd Edition. Prentice Hall PTR Upper Saddle River, NJ, 2012. 543 p.

FREDENSLUND, Aage; GMEHLING, Juergen y RASMUSSEN, Peter. Determination of Unifac Parameters. En: Vapor-Liquid Equilibria using UNIFAC: A Group-Contribution Method. 1st ed. Amsterdam: Elsevier, 1977. 65 p.

HAYDEN, J. George y O'CONNELL, John P. A generalized method for predicting second virial coefficients. En: IND.ENG.CHEM.PROCESS DES.DEV. vol. 14, no. 3, p. 209-216

HIZADDIN, Haneer F., et al. Extraction of nitrogen compounds from diesel fuel using imidazolium- and pyridinium-based ionic liquids: Experiments, COSMO-RS prediction and NRTL correlation. En: FLUID PHASE EQUILIBRIA. 11/15.vol. 405, p. 55-67

HYNDMAN, Rob J. y KOEHLER, Anne B. Another Look at Measures of Forecast Accuracy. [Electronic(1)]:2006. 679-688

INSTITUTO COLOMBIANO DE NORMAS TECNICAS Y CERTIFICACIÓN. Documentación. Presentación de tesis, trabajos de grado y otros trabajos de investigación. NTC 1486. Sexta actualización. Bogotá: El Instituto, 2008, p. 1-42

_____. Referencias bibliográficas, contenido, forma y estructura. NTC 5613. Bogotá: El Instituto, 2008, p.1-38

_____. Referencias documentales para fuentes de informaciones electrónicas. NTC 4490. Bogotá: El Instituto, 1998, p.1-27

ITO, Tetsuo y YOSHIDA, Fumitake. Vapor-Liquid Equilibria of Water-Lower Fatty Acid Systems: Water-Formic Acid, Water Acetic Acid and Water-Propionic Acid. En: JOURNAL OF CHEMICAL AND ENGINEERING DATA. vol. 8, no. 3, p. 315-320

KATO, Masahiro. Vapor-liquid equilibrium measurements for binary systems of acetic acid with ethyl acetate and vinyl acetate by the dew-bubble point temperature method. En: JOURNAL OF CHEMICAL AND ENGINEERING DATA. vol. 33, no. 4, p. 499-501

_____. Measurement of vapor-liquid equilibria by dew-bubble point method and bubble-condensation point method. En: JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN. vol. 4, no. 1, p. 6-10

KIM, Inna; SVENDSEN, Hallvard F. y BØRRESEN, Eli. Ebulliometric determination of vapor- liquid equilibria for pure water, monoethanolamine, n-methyldiethanolamine, 3-(methylamino)-propylamine, and their binary and ternary solutions. En: JOURNAL OF CHEMICAL & ENGINEERING DATA. vol. 53, no. 11, p. 2521-2531

KONTOGEOORGIS, Georgios M. y FOLAS, Georgios K. Activity Coefficient Models, Part 2: Local Composition Models, from Wilson and NRTL to UNIQUAC and UNIFAC. En: Thermodynamic Models for Industrial Applications: From Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories. John Wiley & Sons, 2009a. 109 p.

_____. Thermodynamic Models for Industrial Applications: From Classical and Advanced Mixing Rules to Association Theories. John Wiley & Sons, 2009b.

LEE, L. L.; CHUNG, T. H. y STARLING, K. E. A Molecular Theory for the Thermodynamic Behavior of Polar Mixtures. I. the Statistical-Mechanical Local-Composition Model. [Electronic(1)]:1983. 105-124

LÓPEZ-GARZÓN, Camilo S. y STRAATHOF, Adrie J. J. Recovery of carboxylic acids produced by fermentation. En: BIOTECHNOLOGY ADVANCES. 0.vol. 32, no. 5, p. 873-904

MONGUÍ ROJAS, María Jimena; RODRÍGUEZ PÁEZ, Cristian Camilo y MORALES HERNÁNDEZ, Yovanny. Análisis Termodinámico De Mezclas De Ácidos Carboxílicos y Agua. Bogotá, D.C.: Fundación Universidad de América, 2016.

OTHMER, Donald F.; CHUDGAR, Manu M. y LEVY, Sherman L. Binary and ternary systems of acetone, methyl ethyl ketone, and water. En: INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY. vol. 44, no. 8, p. 1872-1881

PENG, Yong, et al. Thermodynamic consistency for the vapor-liquid equilibrium data of associating system. En: ACTA PET.SIN.(PET.PROCESS.). vol. 25, p. 717-724

POLING, Bruce E.; PRAUSNITZ, John M. y O'CONNELL, John P. Chapter 8. Fluid Phase Equilibria in Multicomponent Systems. En: The Properties of Gases and Liquids. Mcgraw-hill New York, 2001.

POSADA, John A. y CARDONA, Carlos A. Propionic acid production from raw glycerol using commercial and engineered strains. En: INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. vol. 51, no. 5, p. 2354-2361

PRAUSNITZ, John M. Chapter 6. Parameter Estimation. En: Computer Calculations for Multicomponent Vapor-Liquid and Liquid-Liquid Equilibria. Prentice Hall, 1980.

PRAUSNITZ, John M.; LICHTENTHALER, Rudiger N. y DE AZEVEDO, Edmundo Gomes. Fugacities in Gas Mixtures. En: Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria. Pearson Education, 1998. 123 p.

PubChem. Propionic Acid. [Electronic(1)]. 03/25/2017. [Consultado el 10/25/2017]. Disponible en: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/propionic_acid#section=FEMA-Number

RENON, Henri y PRAUSNITZ, John M. Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures. En: AIChE JOURNAL. vol. 14, no. 1, p. 135-144

RIEMENSCHNEIDER, Wilhelm. Carboxylic Acids, Aliphatic. Wiley Online Library, 2002.

RIVENQ,F. Vapor-liquid data for the system water-propionic acid. En: BULL.SOC.CHIM.FR. vol. 1392,

ROGALSKI, Marek y MALANOWSKI, Stanisław. A New Equation for Correlation of Vapour-Liquid Equilibrium Data of Strongly Non-Ideal Mixtures. [Electronic(1)]:1977. 137-152

_____. Ebulliometers Modified for the Accurate Determination of vapour—liquid Equilibrium. [Electronic(1)]:1980. 97-112

SAKO, T.; HAKUTA,T. y YOSHITOME,H. J. En: CHEM. ENG. JPN. vol. 18, p. 42

SAMEL, Ulf-Rainer, et al. Propionic acid and derivatives. En: ULLMANN'S ENCYCLOPEDIA OF INDUSTRIAL CHEMISTRY.

SMITH, Ivor. Chromatography. Elsevier, 2013.

TAYLOR, Moddie D. y BRUTON, Joseph. The Vapor Phase Dissociation of Some Carboxylic Acids. II. Formic and Propionic Acids¹, 2. En: JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. vol. 74, no. 16, p. 4151-4152

THIEL, Joachim; SCHRÖDER, Jürgen y NESTLER, Gerhard. En: FRACTIONAL CONDENSATION OF a PRODUCT GAS MIXTURE CONTAINING ACRYLIC ACID.

WANG, Zhongqiang, *et al.* Propionic Acid Fermentation. En: Bioprocessing Technologies in Biorefinery for Sustainable Production of Fuels, Chemicals, and Polymers. John Wiley & Sons, Inc., 2013. 331-350 p. ISBN 9781118642047

WILSON, Grant M. Vapor-liquid equilibrium. XI. A new expression for the excess free energy of mixing. En: JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. vol. 86, no. 2, p. 127-130

WILSON, Perry W. En: PROPIONIC ACID FERMENTATION.

WESTHAUS,U.; DRÖGE,T. y SASS,R. DETHERM®—a thermophysical property database. En: FLUID PHASE EQUILIBRIA. vol. 158, p. 429-435

WISNIAK, Jaime. A new test for the thermodynamic consistency of vapor-liquid equilibrium. En: INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. vol. 32, p. 1531-1531

_____. The Herington test for thermodynamic consistency. En: INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH. vol. 33, no. 1, p. 177-180

YAWS, Carl L. y GABBULA, Chaitanya. Yaws" Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds. Knovel, 2003.

YEUNG, Joyce. BASF and SINOPEC Expand Capacity for Propionic Acid in Nanjing, China. [Electronic(1)]. 06/01/2017. [Consultado el 07/192017]. Disponible en: <https://www.basf.com/en/company/news-and-media/news-releases/2017/06/p-CI-170601.html>

ANEXOS

ANEXO A DATOS DE LAS SUSTANCIAS PURAS

En la tabla A.1 se encuentran los datos de las sustancias puras, y en la A.2 los datos para el cálculo de la entalpía de vaporización:

Tabla A.1 Datos sustancias puras.

	Ácido Propiónico	Agua
Propiedades Físicas		
Masa molecular (Mm) [g/mol]	74.0794	18.0153
Temperatura de Ebullición (T _b) [K]	404.829	364.823
Temperatura Critica (T _c) [K]	600.81	647.096
Presión Critica (P _c) [bar]	46.68	220.64
Volumen Critico (V _c) [m ³ /kmol]	0.235	0.05595
Momento Dipolar (μ) [debye]	1.75079	1.84972
Radio de Giro (R _g) [Å]	3.107	0.615

Fuente: Tomado de Aspen Properties V.9 data bank.

Tabla A.2 Datos cálculo de la entalpía de vaporización.

Entalpía de vaporización ΔH_{vap} (kJ/mol)							
$\Delta H_{vap} = A\left(1 - \frac{T}{T_c}\right)$							
	A	T _c	n	T _{min}	T _{max}	T _b	HV
Ácido Propiónico	41.271	604	0.241	390	604	414.32	31.22
Agua	52.053	647.13	0.321	273.16	647.13	373.15	39.5

Fuente: YAWS, Carl L. y GABBULA, Chaitanya. Yaws" Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds. Knovel, 2003.

ANEXO B
MODELOS DE COMPOSICIÓN LOCAL PARA EL CÁLCULO DEL
COEFICIENTE DE ACTIVIDAD BINARIO.

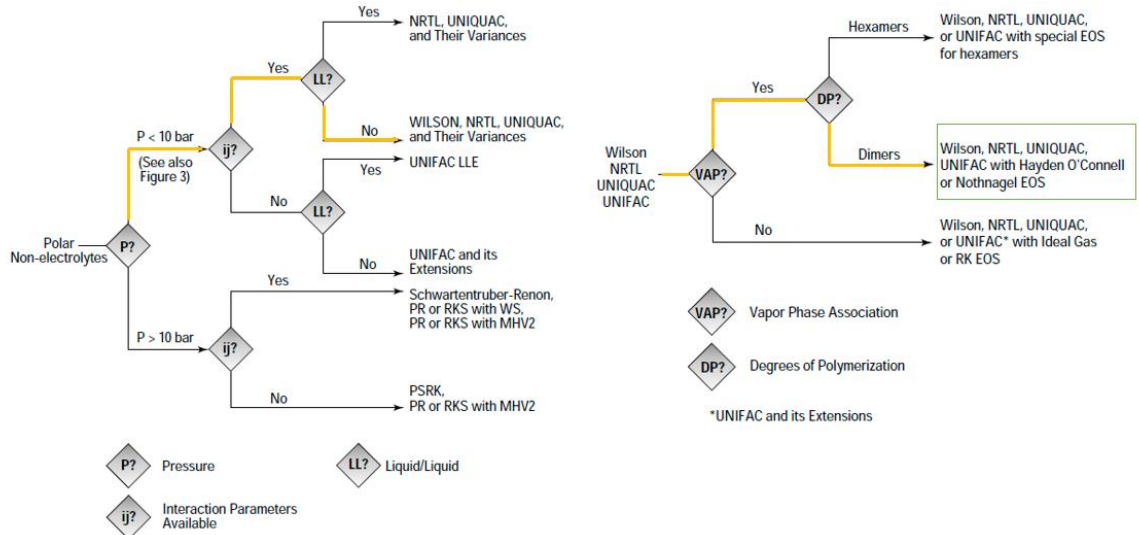
Tabla B1. Modelos de composición local para el cálculo de la energía libre de Gibbs en exceso multicomponente.

Modelo	Energía libre de Gibbs en Exceso
Wilson	$\frac{g^E}{RT} = - \sum_i^N x_i \ln(\sum_j^N x_j \Lambda_{ij})$ <p style="text-align: right;">Ec. B19</p> <p>Donde, los parámetros de interacción binarios:</p> $\Lambda_{ij} = \exp(a_{ij} - \frac{b_{ij}}{T})$ <p style="text-align: right;">Ec. B20</p>
NRTL	$\frac{g^E}{RT} = \sum_i^N x_i \frac{\sum_j^N \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_k^N G_{ki} x_k}$ <p style="text-align: right;">Ec. B21</p> <p>Donde, los parámetros de interacción binarios:</p> $G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \tau_{ij})$ <p style="text-align: right;">Ec. B22</p> $\tau_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T}$ <p style="text-align: right;">Ec. B23</p>
UNICUAQ	$\frac{g^E}{RT} = \sum_i^N x_i \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} \sum_i^N q_i x_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} - \sum_i^N q_i x_i \ln(\sum_j^N \theta_j \tau_{ji})$ <p style="text-align: right;">Ec. B24</p> <p>Donde, los parámetros de interacción binarios:</p> $\tau_{ij} = \exp(a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T})$ <p style="text-align: right;">Ec. B25</p> <p>q y r son los parámetros de los componentes puros y z el número de coordinación de la mezcla.</p>

Tabla B1. Modelos de composición local para el cálculo del coeficiente de actividad para mezclas multicomponente.

Modelo	Coeficiente de actividad para el componente <i>i</i>	
Wilson	$\ln \gamma_i = -\ln \left(\sum_k^N x_k \Lambda_{ki} \right) + 1 - \sum_k^N \frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_j^N x_j \Lambda_{kj}}$	
NRTL	$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j^N \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_j^N G_{ki} x_k} + \sum_j^N \frac{x_j G_{ji}}{\sum_k^N G_{kj} x_k} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_k^N x_k \tau_{kj} G_{kj}}{\sum_k^N G_{kj} x_k} \right)$	
UNICUAQ	$\ln \gamma_i = \ln \frac{\phi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\phi_i} + q_i - \frac{\phi_i}{x_i} \sum_j^N x_j l_j - q_i \ln \left(\sum_j^N \theta_j \tau_{ji} \right)$ $+ q_i - q_i \sum_j^N \frac{\theta_j \tau_{ji}}{\sum_k^N \theta_k \tau_{ki}}$ <p style="text-align: center;">Donde:</p> $\phi_i = \frac{r_i x_i}{\sum_k^N r_k x_k} \text{ y } \phi_i = \frac{q_i x_i}{\sum_k^N q_k x_k}$	
		Ec. B29

Selección modelos termodinámicos.



Modificado de: CARLSON, Eric C. Don't Gamble With Physical Properties For Simulation. En: CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS. October, 1996. p. 36.

ANEXO C
DATOS DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO – VAPOR EXPERIMENTALES DEL ACIDO
PROPIÓNICO (1) – AGUA (2) CON SUS RESPECTIVOS COEFICIENTES DE
FUGACIDAD Y ACTIVIDAD.

C.1 Datos experimentales isobáricos a 26660 N/sqm (ELV 1).

T(K)¹	x (1)¹	y (1)¹	γ (1)²	γ (2)²	φ (1)²	φ (2)²
339.424	0.022	0.023	5.798233	1.09341	1.100509	1.000406
339.424	0.029	0.03	5.737382	1.093401	1.08765	1.000727
339.424	0.031	0.032	5.725043	1.093399	1.084021	1.000834
339.424	0.046	0.044	5.304999	1.096823	1.062651	1.001621
339.424	0.048	0.045	5.199502	1.097978	1.060902	1.001698
339.424	0.077	0.06	4.321664	1.114688	1.035212	1.003059
339.524	0.089	0.064	3.968506	1.119595	1.029169	1.003502
339.824	0.116	0.074	3.46864	1.126416	1.015022	1.004707
339.824	0.133	0.078	3.188809	1.143541	1.008731	1.005221
339.924	0.156	0.084	2.913349	1.161915	1.000209	1.006041
340.024	0.239	0.103	2.32023	1.256354	0.97276	1.009012
340.024	0.252	0.106	2.264629	1.273914	0.968428	1.009538
340.224	0.271	0.111	2.183521	1.288392	0.963259	1.010391
340.924	0.37	0.138	1.920957	1.401761	0.934624	1.01555
341.424	0.398	0.145	1.830965	1.423534	0.931573	1.016795
342.324	0.484	0.178	1.768876	1.535268	0.90467	1.024062
343.8239	0.559	0.203	1.624328	1.632365	0.898394	1.028955
348.5235	0.758	0.328	1.548805	2.055437	0.867639	1.057903
350.9232	0.803	0.375	1.495614	2.126394	0.874619	1.066331
357.623	0.88	0.493	1.327303	2.163591	0.910142	1.079956
359.723	0.908	0.543	1.292526	2.34351	0.919323	1.086648
366.6234	0.945	0.731	1.246967	1.775832	0.952098	1.109106
370.0237	0.956	0.803	1.177269	1.434721	0.97099	1.110914
373.124	0.96	0.887	1.142853	0.809629	0.986264	1.115849

¹ Datos experimentales

² Datos calculados

C.2 Datos experimentales isobáricos a 9330 N/sqm (ELV 2).

T(K)¹	x (1)¹	y (1)¹	γ (1)²	γ (2)²	φ (1)²	φ (2)²
317.6786	0.019	0.018	6.222011	1.084481	1.164127	1.000434
317.6786	0.049	0.041	5.495404	1.104236	1.099344	1.002176
317.8786	0.113	0.07	4.021903	1.136339	1.026959	1.006281
318.6783	0.317	0.125	2.445309	1.332597	0.919585	1.01911
323.7768	0.71	0.264	1.731364	2.042923	0.821995	1.061781
336.374	0.928	0.541	1.39459	2.82929	0.887121	1.117905
344.8738	0.971	0.76	1.232328	2.527723	0.95392	1.139939

¹ Datos experimentales² Datos calculados**C.3 Datos experimentales isobáricos a 26660 N/sqm (ELV 3).**

T(K)¹	x (1)¹	y (1)¹	γ (1)²	γ (2)²	φ (1)²	φ (2)²
339.574	0.02	0.022	6.067436	1.096729	1.102669	1.000416
339.574	0.049	0.044	4.953009	1.068536	1.063308	1.001658
340.074	0.109	0.071	3.505117	1.084061	1.021472	1.004361
340.874	0.247	0.112	2.345738	1.183716	0.968152	1.010392
341.074	0.276	0.12	2.227239	1.209386	0.95942	1.011799
344.5739	0.583	0.222	1.646179	1.595271	0.890753	1.033196
348.3735	0.722	0.296	1.480613	1.84402	0.88485	1.047862
358.573	0.9	0.493	1.247252	2.445444	0.91981	1.076304
368.1735	0.967	0.747	1.170198	2.569869	0.962174	1.105552

¹ Datos experimentales² Datos calculados**C.4 Datos experimentales isobáricos a 101320 N/sqm (ELV 4).**

T(K)¹	x (1)¹	y (1)¹	γ (1)²	γ (2)²	φ (1)²	φ (2)²
373.0244	0.008	0.01	5.672355	1.066448	1.058147	0.999969
373.0244	0.012	0.018	6.806826	1.049058	1.050239	1.000075
372.9244	0.02	0.023	5.23946	1.056	1.045195	1.000117
372.9244	0.023	0.027	5.348409	1.054905	1.041305	1.000213
373.0244	0.025	0.028	5.08243	1.05222	1.040525	1.000294
373.1244	0.042	0.041	4.412185	1.052808	1.028427	1.000773
373.1244	0.057	0.049	3.885442	1.060632	1.021021	1.001114
373.0244	0.057	0.05	3.9806	1.063303	1.019812	1.001111

373.2244	0.082	0.06	3.293999	1.073082	1.011358	1.00173
373.3243	0.094	0.063	3.005154	1.07997	1.009027	1.001951
373.1244	0.128	0.072	2.542387	1.119251	1.00036	1.002433
373.3243	0.148	0.079	2.393423	1.128809	0.995084	1.003017
373.3243	0.167	0.083	2.228515	1.149541	0.991665	1.003321
373.6243	0.186	0.086	2.048565	1.160074	0.990432	1.003675
373.8242	0.204	0.091	1.960745	1.171463	0.987184	1.004158
374.2242	0.239	0.102	1.846358	1.193462	0.980222	1.005258
374.5241	0.261	0.108	1.769033	1.207888	0.977029	1.005912
375.3239	0.314	0.123	1.622603	1.243734	0.96999	1.007624
375.9238	0.339	0.13	1.55145	1.253771	0.968237	1.008494
376.0238	0.355	0.14	1.589243	1.26566	0.961978	1.009622
376.7237	0.391	0.156	1.564385	1.283734	0.955552	1.011606
377.0236	0.409	0.153	1.449712	1.313725	0.959171	1.011265
378.3233	0.438	0.166	1.396473	1.300334	0.958709	1.01292
378.6233	0.463	0.178	1.400248	1.327472	0.95363	1.014422
379.4231	0.505	0.189	1.321786	1.382261	0.952368	1.015812
380.6229	0.557	0.218	1.320235	1.429403	0.945097	1.019607
381.4227	0.572	0.227	1.298573	1.423235	0.945833	1.020698
381.8226	0.586	0.233	1.281481	1.440296	0.945601	1.02145
382.2226	0.611	0.244	1.267757	1.490592	0.943321	1.022927
383.0224	0.633	0.252	1.226306	1.521682	0.944914	1.023821
383.7223	0.644	0.269	1.253344	1.497495	0.942554	1.026069
385.122	0.707	0.296	1.192407	1.672435	0.941457	1.029495
386.7217	0.742	0.321	1.161444	1.737607	0.943119	1.032399
388.2214	0.751	0.355	1.201316	1.628354	0.942392	1.036681
390.5209	0.791	0.401	1.185529	1.672442	0.944634	1.04204
390.6209	0.802	0.402	1.167984	1.756755	0.944987	1.042102
392.9204	0.846	0.44	1.116493	1.965504	0.95011	1.045807
395.4199	0.863	0.492	1.120899	1.852627	0.9546	1.051159
397.0196	0.88	0.542	1.14551	1.814354	0.955841	1.057059
401.1188	0.89	0.638	1.159057	1.38	0.965439	1.065998
402.4185	0.913	0.656	1.112061	1.594384	0.969713	1.066569
405.218	0.949	0.75	1.114542	1.818477	0.975504	1.076065
407.7175	0.975	0.809	1.07827	2.633734	0.982544	1.080002
410.6169	0.988	0.896	1.073416	2.747411	0.990287	1.086751

¹ Datos experimentales

² Datos calculados

C.5 Datos experimentales isobáricos – isotérmicos a 101300 N/sqm (ELV 5).

T(K)	x (1)	y (1)	γ (1)	γ (2)	φ (1)	φ (2)
373.1744	7.65E-06	8.61E-06	5.124443	1.049628	1.068278	1.000009
373.1744	1.30E-05	1.50E-05	5.253549	1.067649	1.068272	1.000009
373.1744	2.47E-05	2.95E-05	5.437884	1.067646	1.068257	1.000009
373.1744	4.99E-05	6.10E-05	5.565885	1.06764	1.068225	1.000009
373.1744	7.36E-05	9.20E-05	5.691345	1.067632	1.068194	1.000009
373.1744	0.000119	0.000148	5.662649	1.067621	1.068138	1.000009
373.1744	0.000242	0.000304	5.719567	1.067585	1.067981	1.000009
373.1744	0.000357	0.000445	5.675403	1.067557	1.067839	1.000009
373.1744	0.000476	0.000593	5.672215	1.067527	1.06769	1.000009
373.1744	0.000589	0.00074	5.720333	1.06749	1.067542	1.000009
373.1744	0.000825	0.00105	5.794824	1.067411	1.06723	1.00001
373.1744	0.00105	0.00133	5.76723	1.067352	1.066948	1.00001

¹ Datos experimentales

² Datos calculados

C.6 Datos experimentales isobáricos a 13330 N/sqm (ELV 6).

T(K) ¹	x (1) ¹	y (1) ¹	γ (1) ²	γ (2) ²	φ (1) ²	φ (2) ²
324.85	0.021	0.02	5.850423	1.061172	1.140297	1.000488
324.85	0.022	0.021	5.86372	1.130249	1.13781	1.000534
324.85	0.031	0.03	5.944785	1.13026	1.115776	1.001046
324.85	0.038	0.036	5.819631	1.131442	1.101435	1.001488
324.85	0.045	0.041	5.596905	1.133824	1.089692	1.001918
324.85	0.078	0.059	4.646586	1.152362	1.048928	1.003931
324.85	0.08	0.06	4.607208	1.15364	1.046731	1.004064
324.95	0.114	0.071	3.804971	1.178108	1.023958	1.005667
324.95	0.144	0.078	3.309253	1.210208	1.009373	1.006829
324.95	0.147	0.079	3.283278	1.213147	1.007315	1.007004
325.05	0.238	0.099	2.52743	1.322047	0.968737	1.010935
325.15	0.261	0.106	2.454205	1.346002	0.956763	1.012474
325.25	0.267	0.107	2.408487	1.348892	0.95622	1.012652
325.35	0.316	0.118	2.232002	1.42076	0.937595	1.015299
326.45	0.387	0.138	2.007628	1.468647	0.919935	1.01972
327.35	0.493	0.169	1.838407	1.639021	0.887934	1.028002
327.75	0.506	0.174	1.804925	1.640181	0.887603	1.029

330.65	0.689	0.255	1.66502	2.047247	0.845272	1.052119
333.75	0.792	0.328	1.585345	2.39004	0.839989	1.071383
337.45	0.866	0.401	1.468307	2.794741	0.858161	1.085343
342.85	0.908	0.542	1.449896	2.452907	0.88476	1.113204
346.65	0.941	0.625	1.34495	2.662072	0.914271	1.120668
352.55	0.957	0.781	1.256985	1.670734	0.95598	1.134742
354.05	0.967	0.838	1.247153	1.51566	0.965352	1.14268

¹ Datos experimentales

² Datos calculados

C.7 Datos experimentales isobáricos a 101330 N/sqm (ELV 7).

T(K) ¹	x (1) ¹	y (1) ¹	γ (1) ²	γ (2) ²	φ (1) ²	φ (2) ²
373.05	0.021	0.026	5.530083	1.136708	1.04249	1.000255
372.95	0.05	0.05	4.484489	1.027487	1.019584	1.001072
373.05	0.108	0.075	3.101809	1.061702	0.997422	1.002609
374.15	0.242	0.118	2.084617	1.145606	0.967422	1.00682
380.45	0.618	0.267	1.445458	1.517505	0.921598	1.027521
386.35	0.768	0.367	1.281472	1.77054	0.927289	1.040554
394.25	0.885	0.529	1.206381	2.060981	0.942774	1.059285
404.95	0.96	0.748	1.092291	2.287168	0.974526	1.076311

¹ Datos experimentales

² Datos calculados

C.8 Datos experimentales isobáricos a 74660 N/sqm (ELV 8).

T(K)	x (1)	y (1)	γ (1)	γ (2)	φ (1)	φ (2)
365.15	0.2967	0.0954	1.379742	1.295269	0.983637	1.005051
367.55	0.5586	0.1756	1.220614	1.574226	0.933062	1.015984
370.15	0.6246	0.2195	1.226558	1.593266	0.924804	1.0226
372.45	0.7099	0.2467	1.105328	1.831469	0.927899	1.026143

¹ Datos experimentales

² Datos calculados

ANEXO D
PARÁMETROS BINARIOS OBTENIDOS RESULTADOS DEL PROCESO DE
MINIMIZACIÓN DEL EQUILIBRIO AGUA (i) - ÁCIDO PROPIÓNICO (j) DE LOS
MODELOS DE COMPOSICIÓN LOCAL.

D.1 Parámetros binarios para los datos ELV – 1 isobáricos 26660 N/sqm.

ELV 1 - 26660 N/sqm, T (K)			
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
Aij	-27.1358	7.518579	-1.0912
Aji	10.69746	-14.6017	5.086889
Bij	10000	-2677.43	402.3721
Bji	-3675.11	4268.127	-1977.16
Cij	0.3	-	-

D.2 Parámetros binarios para los datos ELV – 2 isobáricos a 9330 N/sqm.

ELV 2 - 9330 N/sqm, T(K)			
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
Aij	-24.4424	-8.78835	9.176246
Aji	13.46043	21.81116	-14.6864
Bij	8530.039	2673.994	-2920.27
Bji	-4317.28	-7597.05	4478.166
Cij	0.3	-	-

D.3 Parámetros binarios para los datos ELV – 3 isobáricos a 26660 N/sqm.

ELV 3 - 26660 N/sqm, T(K)			
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
Aij	-18.3599	-4.26804	4.534574
Aji	10.03925	12.56261	-6.6729
Bij	7114.883	1371.673	-1571.06
Bji	-3508.89	-5005.43	2122.338
Cij	0.3	-	-

D.4 Parámetros binarios para los datos ELV – 4 isobáricos a 101320 N/sqm.

ELV 4 - 101320 N/sqm, T(K)			
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
Aij	-11.6624	-1.71966	8.998994
Aji	4.552744	7.237939	-22.3563
Bij	5430.333	698.1152	-3162.34
Bji	-1931.35	-3659.49	7749.764
Cij	0.3	-	-

D.5 Parámetros binarios para los datos ELV – 5 isobáricos isotérmicos a 101300 N/sqm.

ELV 5 - 101300 N/sqm, T(K)			
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
Aij	-12.5551	-4.7366	6.583913
Aji	6.57933	7.863083	-268.132
Bij	5097.124	-427.581	-2264.8
Bji	-1175.08	-3431.59	-70016.9
Cij	0.3	-	-

D.6 Parámetros binarios para los datos ELV – 6 isobáricos a 13330 N/sqm.

ELV 6 - 13330 N/sqm, T(K)			
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
Aij	-35.048	-12.1608	14.31954
Aji	20.6996	28.73894	-24.3757
Bij	12188.3	3848.225	-4687.89
Bji	-6789.52	-10035.6	7779.652
Cij	0.3	-	-

D.7 Parámetros binarios para los datos ELV – 7 isobáricos a 101330 N/sqm.

ELV 7 - 101330 N/sqm, T(K)			
	NRTL-HOC	WILSON-HOC	UNIQUAC-HOC
Aij	-14.3173	-3.74826	8.800883
Aji	7.440062	10.23168	-268.132
Bij	6369.014	1382.162	-3039.98
Bji	-2952.57	-4689.77	-70016.9
Cij	0.3	-	-

ANEXO E
EQUILIBRIOS LÍQUIDO-VAPOR (ELV) DEL AGUA (1) - ÁCIDO PROPIÓNICO (2)
RESULTADOS DE EL PROCESO DE MINIMIZACIÓN.

E.1 Equilibrios calculados con NRTL y Hayden & O'Connell

E.1.1 ELV 1- isobárico calculado a 2666 N/sqm.

T(K)	y(1)	y(2)	x(1)	x(2)	y(1)	y(2)
339,5685	8,874084	1	0	1	0	1
339,6336	7,470122	1,001656	0,017678	0,982322	0,019608	0,980392
339,664	6,38474	1,006374	0,036049	0,963951	0,039216	0,960784
339,6938	5,524329	1,013831	0,052125	0,947875	0,058824	0,941177
339,7319	4,83268	1,023751	0,065285	0,934715	0,078431	0,921569
339,7784	4,270822	1,035898	0,075774	0,924226	0,098039	0,901961
339,8309	3,810065	1,050077	0,084077	0,915923	0,117647	0,882353
339,8868	3,428787	1,066123	0,090682	0,909318	0,137255	0,862745
339,9443	3,110536	1,083904	0,096006	0,903994	0,156863	0,843137
340,0023	2,842713	1,103305	0,100385	0,899615	0,176471	0,823529
340,0607	2,615606	1,124229	0,104082	0,895918	0,196078	0,803922
340,1199	2,421676	1,14659	0,107301	0,892699	0,215686	0,784314
340,1808	2,255022	1,170307	0,110202	0,889798	0,235294	0,764706
340,2447	2,110986	1,195307	0,112913	0,887087	0,254902	0,745098
340,313	1,985856	1,22152	0,115535	0,884465	0,27451	0,72549
340,3876	1,87665	1,248878	0,118151	0,881849	0,294118	0,705882
340,4703	1,780951	1,277315	0,120829	0,879171	0,313726	0,686275
340,5629	1,696778	1,306769	0,123628	0,876372	0,333333	0,666667
340,6674	1,622502	1,33718	0,126599	0,873402	0,352941	0,647059
340,7857	1,556764	1,368492	0,129785	0,870215	0,372549	0,627451
340,9197	1,498428	1,400654	0,133227	0,866773	0,392157	0,607843
341,0714	1,446533	1,433622	0,136964	0,863037	0,411765	0,588235
341,2426	1,400264	1,467358	0,14103	0,85897	0,431373	0,568628
341,435	1,358925	1,501831	0,145461	0,854539	0,45098	0,54902
341,6506	1,321916	1,537021	0,150292	0,849708	0,470588	0,529412
341,8912	1,288722	1,572916	0,155559	0,844441	0,490196	0,509804
342,1587	1,258894	1,609512	0,1613	0,8387	0,509804	0,490196
342,455	1,232042	1,646813	0,167557	0,832443	0,529412	0,470588
342,7823	1,207827	1,684834	0,174374	0,825626	0,54902	0,45098
343,1428	1,185952	1,723591	0,181802	0,818198	0,568628	0,431373

343,5392	1,166157	1,763108	0,1899	0,8101	0,588235	0,411765
343,9744	1,148214	1,803408	0,198733	0,801267	0,607843	0,392157
344,4518	1,131922	1,844509	0,208379	0,791621	0,627451	0,372549
344,9754	1,117106	1,886418	0,218932	0,781068	0,647059	0,352941
345,5499	1,103613	1,92912	0,230503	0,769497	0,666667	0,333333
346,1811	1,091306	1,972564	0,243227	0,756773	0,686275	0,313726
346,8761	1,080067	2,016637	0,257271	0,742729	0,705882	0,294118
347,6435	1,069793	2,061134	0,272844	0,727156	0,72549	0,27451
348,4943	1,060393	2,1057	0,290211	0,70979	0,745098	0,254902
349,4423	1,051792	2,149754	0,309711	0,69029	0,764706	0,235294
350,5052	1,04392	2,19235	0,331791	0,668209	0,784314	0,215686
351,7063	1,036723	2,231966	0,357042	0,642958	0,803922	0,196078
353,0758	1,030155	2,266173	0,386271	0,613729	0,823529	0,176471
354,6541	1,024178	2,291064	0,420587	0,579413	0,843137	0,156863
356,4949	1,01877	2,300367	0,461529	0,538471	0,862745	0,137255
358,6657	1,013921	2,284234	0,511209	0,488791	0,882353	0,117647
361,242	1,009646	2,228126	0,572314	0,427686	0,901961	0,098039
364,2654	1,006006	2,114791	0,647377	0,352623	0,921569	0,078431
367,6386	1,003133	1,935982	0,736112	0,263888	0,941177	0,058824
371,0133	1,001201	1,713626	0,831473	0,168527	0,960784	0,039216
373,9519	1,000238	1,494325	0,921875	0,078126	0,980392	0,019608
376,2599	1	1,309634	1	0	1	0

E.1.2 ELV 2 - isobárico calculado a 9330 N/sqm.

T(K)	y(1)	y(2)	x(1)	x(2)	y(1)	y(2)
317,6041	9,745809	1	0	1	0	1
317,6852	8,104221	1,001778	0,016513	0,983487	0,019608	0,980392
317,7258	6,852291	1,006827	0,034255	0,965745	0,039216	0,960784
317,761	5,874151	1,014784	0,049655	0,950345	0,058824	0,941177
317,8001	5,098189	1,025346	0,062023	0,937977	0,078431	0,921569
317,8435	4,474966	1,038261	0,071653	0,928347	0,098039	0,901961
317,8894	3,968761	1,05332	0,079078	0,920922	0,117647	0,882353
317,9358	3,553253	1,070352	0,08482	0,91518	0,137255	0,862745
317,9813	3,208828	1,089216	0,089313	0,910687	0,156863	0,843137
318,0255	2,920732	1,109793	0,092901	0,907099	0,176471	0,823529
318,0684	2,677757	1,13198	0,09585	0,90415	0,196078	0,803922
318,1106	2,471304	1,155687	0,098364	0,901636	0,215686	0,784314
318,1533	2,294704	1,18083	0,1006	0,8994	0,235294	0,764706

318,1978	2,142734	1,207337	0,102681	0,897319	0,254902	0,745098
318,2455	2,011259	1,235137	0,104703	0,895297	0,27451	0,72549
318,298	1,89697	1,264167	0,106745	0,893255	0,294118	0,705882
318,3569	1,797198	1,294367	0,108868	0,891132	0,313726	0,686275
318,424	1,709767	1,325686	0,111126	0,888874	0,333333	0,666667
318,5008	1,632888	1,358078	0,113562	0,886438	0,352941	0,647059
318,589	1,565078	1,391505	0,116214	0,883786	0,372549	0,627451
318,69	1,505097	1,425941	0,119116	0,880884	0,392157	0,607843
318,8054	1,451904	1,461368	0,122298	0,877702	0,411765	0,588235
318,9365	1,404617	1,497783	0,125789	0,874211	0,431373	0,568628
319,0847	1,362484	1,535196	0,129617	0,870383	0,45098	0,54902
319,2513	1,324863	1,573631	0,133808	0,866192	0,470588	0,529412
319,4376	1,2912	1,61313	0,13839	0,86161	0,490196	0,509804
319,645	1,261019	1,653753	0,143392	0,856608	0,509804	0,490196
319,8747	1,233906	1,695579	0,148846	0,851154	0,529412	0,470588
320,1283	1,209503	1,738705	0,154785	0,845215	0,54902	0,45098
320,4071	1,187497	1,783253	0,161247	0,838753	0,568628	0,431373
320,7129	1,167615	1,829369	0,168276	0,831725	0,588235	0,411765
321,0477	1,149621	1,877223	0,175919	0,824081	0,607843	0,392157
321,4136	1,133305	1,927014	0,184236	0,815764	0,627451	0,372549
321,8133	1,118485	1,978972	0,193293	0,806707	0,647059	0,352941
322,2498	1,105004	2,033363	0,203171	0,796829	0,666667	0,333333
322,7268	1,09272	2,09049	0,213968	0,786033	0,686275	0,313726
323,2489	1,081514	2,150696	0,2258	0,7742	0,705882	0,294118
323,8215	1,071279	2,214372	0,238814	0,761186	0,72549	0,27451
324,4515	1,061923	2,281954	0,253192	0,746808	0,745098	0,254902
325,1477	1,053367	2,353924	0,269176	0,730824	0,764706	0,235294
325,921	1,045545	2,430801	0,287039	0,712961	0,784314	0,215686
326,786	1,038397	2,513115	0,30719	0,69281	0,803922	0,196078
327,7616	1,031878	2,601345	0,330161	0,669839	0,823529	0,176471
328,8736	1,025951	2,695798	0,356683	0,643317	0,843137	0,156863
330,1577	1,020587	2,796324	0,387797	0,612204	0,862745	0,137255
331,6646	1,01577	2,901725	0,425022	0,574979	0,882353	0,117647
333,4687	1,011496	3,00844	0,470666	0,529334	0,901961	0,098039
335,6817	1,007777	3,107581	0,528341	0,471659	0,921569	0,078431
338,4686	1,00465	3,178436	0,603802	0,396198	0,941177	0,058824
342,0461	1,002197	3,176426	0,705467	0,294533	0,960784	0,039216
346,5336	1,000573	3,028568	0,840791	0,159209	0,980392	0,019608
351,4678	1	2,704912	1	0	1	0

E.1.3 ELV 3 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.

T(K)	$\gamma(1)$	$\gamma(2)$	$x(1)$	$x(2)$	$y(1)$	$y(2)$
339,5685	9,694712	1	0	1	0	1
339,6014	7,946494	1,001938	0,0191	0,9809	0,019608	0,980392
339,6091	6,632803	1,007413	0,037901	0,962099	0,039216	0,960784
339,6262	5,624078	1,015979	0,053306	0,946694	0,058824	0,941177
339,6567	4,837563	1,027266	0,065144	0,934856	0,078431	0,921569
339,6966	4,215897	1,040965	0,074042	0,925958	0,098039	0,901961
339,7416	3,718193	1,056821	0,080723	0,919277	0,117647	0,882353
339,7882	3,314921	1,074621	0,0858	0,9142	0,137255	0,862745
339,8347	2,984527	1,094185	0,089748	0,910252	0,156863	0,843137
339,8807	2,711102	1,11536	0,092925	0,907075	0,176471	0,823529
339,9266	2,482762	1,138008	0,095596	0,904404	0,196078	0,803922
339,9738	2,290522	1,162006	0,09796	0,90204	0,215686	0,784314
340,0238	2,127502	1,187241	0,100164	0,899836	0,235294	0,764706
340,0784	1,988371	1,213611	0,102324	0,897676	0,254902	0,745098
340,1396	1,868951	1,241019	0,104526	0,895474	0,27451	0,72549
340,2096	1,765929	1,269379	0,106841	0,893159	0,294118	0,705882
340,2902	1,676652	1,298611	0,109323	0,890677	0,313726	0,686275
340,3834	1,598973	1,328647	0,112021	0,887979	0,333333	0,666667
340,4911	1,531139	1,359425	0,114971	0,885029	0,352941	0,647059
340,6149	1,471708	1,390897	0,11821	0,88179	0,372549	0,627451
340,7565	1,419482	1,423027	0,121767	0,878233	0,392157	0,607843
340,9174	1,373461	1,45579	0,125671	0,874329	0,411765	0,588235
341,0989	1,332803	1,489176	0,129949	0,870051	0,431373	0,568628
341,3024	1,296797	1,523189	0,134629	0,865371	0,45098	0,54902
341,5291	1,264836	1,557849	0,139739	0,860261	0,470588	0,529412
341,7803	1,236404	1,593191	0,145306	0,854694	0,490196	0,509804
342,0572	1,211057	1,629266	0,151362	0,848638	0,509804	0,490196
342,3612	1,188413	1,666142	0,157941	0,842059	0,529412	0,470588
342,6935	1,168142	1,703908	0,165077	0,834923	0,54902	0,45098
343,0557	1,149959	1,742668	0,172814	0,827186	0,568628	0,431373
343,4495	1,133616	1,78255	0,181197	0,818803	0,588235	0,411765
343,8768	1,118898	1,823701	0,190278	0,809722	0,607843	0,392157
344,3398	1,105617	1,866296	0,20012	0,79988	0,627451	0,372549
344,8411	1,09361	1,910534	0,210794	0,789206	0,647059	0,352941
345,3839	1,082736	1,956647	0,222383	0,777618	0,666667	0,333333
345,9718	1,07287	2,004901	0,234987	0,765014	0,686275	0,313726

346,6094	1,063905	2,055602	0,248728	0,751272	0,705882	0,294118
347,3022	1,055749	2,109106	0,263759	0,736241	0,72549	0,27451
348,0569	1,04832	2,165818	0,280217	0,719783	0,745098	0,254902
348,8818	1,041549	2,226213	0,298381	0,701619	0,764706	0,235294
349,7877	1,035377	2,290832	0,318503	0,681497	0,784314	0,215686
350,7878	1,029755	2,360304	0,340946	0,659054	0,803922	0,196078
351,8997	1,024643	2,435343	0,366179	0,633821	0,823529	0,176471
353,1461	1,020008	2,516746	0,394829	0,605171	0,843137	0,156863
354,558	1,015828	2,605362	0,427741	0,572259	0,862745	0,137255
356,1775	1,012088	2,701995	0,466152	0,533848	0,882353	0,117647
358,0643	1,008786	2,807159	0,51177	0,488231	0,901961	0,098039
360,305	1,00593	2,920461	0,567169	0,432831	0,921569	0,078431
363,0284	1,003548	3,039086	0,636301	0,363699	0,941177	0,058824
366,4241	1,001691	3,154102	0,725349	0,274651	0,960784	0,039216
370,7553	1,000457	3,242155	0,843345	0,156655	0,980392	0,019608
376,26	1	3,253107	1	0	1	0

E.1.4 ELV-5 isobárico calculado a 101320 N/sqm.

T(K)	y(1)	y(2)	x(1)	x(2)	y(1)	y(2)
373,1665	8,489303	1	0	1	0	1
373,163	6,801997	1,002163	0,020018	0,979982	0,019608	0,980392
373,1678	5,576756	1,00818	0,037111	0,962889	0,039216	0,960784
373,2008	4,666228	1,017435	0,050088	0,949912	0,058824	0,941177
373,2533	3,976666	1,029423	0,059626	0,940374	0,078431	0,921569
373,3161	3,445242	1,04373	0,066657	0,933343	0,098039	0,901961
373,3832	3,029039	1,060013	0,071961	0,928039	0,117647	0,882353
373,452	2,69828	1,07798	0,076118	0,923882	0,137255	0,862745
373,5223	2,431969	1,097382	0,079545	0,920455	0,156863	0,843137
373,5956	2,215055	1,117999	0,082537	0,917463	0,176471	0,823529
373,6741	2,03657	1,139634	0,085306	0,914694	0,196078	0,803922
373,7608	1,888392	1,162109	0,088005	0,911995	0,215686	0,784314
373,8585	1,764413	1,185263	0,090748	0,909252	0,235294	0,764706
373,9703	1,659973	1,208948	0,093622	0,906378	0,254902	0,745098
374,099	1,571472	1,233032	0,096694	0,903306	0,27451	0,72549
374,2473	1,496087	1,257395	0,100019	0,899981	0,294118	0,705882
374,4176	1,431586	1,28193	0,103643	0,896357	0,313726	0,686275
374,6121	1,376179	1,306547	0,107606	0,892394	0,333333	0,666667
374,8327	1,328421	1,331165	0,111945	0,888055	0,352941	0,647059

375,0811	1,287132	1,355721	0,116693	0,883307	0,372549	0,627451
375,3589	1,251341	1,380162	0,121883	0,878117	0,392157	0,607843
375,6673	1,220242	1,404451	0,12755	0,872451	0,411765	0,588235
376,0075	1,193164	1,428561	0,133725	0,866275	0,431373	0,568628
376,3807	1,169542	1,452479	0,140444	0,859557	0,45098	0,54902
376,7879	1,148899	1,476205	0,147742	0,852258	0,470588	0,529412
377,2301	1,13083	1,499747	0,15566	0,84434	0,490196	0,509804
377,7083	1,11499	1,523125	0,164238	0,835762	0,509804	0,490196
378,2236	1,101083	1,54637	0,173522	0,826479	0,529412	0,470588
378,7772	1,088854	1,56952	0,18356	0,816441	0,54902	0,45098
379,3704	1,078084	1,592626	0,194411	0,805589	0,568628	0,431373
380,0047	1,068584	1,615743	0,206123	0,793877	0,588235	0,411765
380,682	1,060191	1,638938	0,218766	0,781234	0,607843	0,392157
381,4043	1,052763	1,662285	0,232428	0,767572	0,627451	0,372549
382,1739	1,046175	1,685868	0,247185	0,752815	0,647059	0,352941
382,9939	1,040322	1,709778	0,263129	0,736871	0,666667	0,333333
383,8675	1,035111	1,734116	0,280373	0,719627	0,686275	0,313726
384,799	1,030462	1,758994	0,299045	0,700955	0,705882	0,294118
385,7932	1,026305	1,784533	0,319292	0,680708	0,72549	0,27451
386,8558	1,022582	1,810866	0,341288	0,658712	0,745098	0,254902
387,9939	1,019241	1,838138	0,36524	0,63476	0,764706	0,235294
389,2161	1,016239	1,866508	0,391393	0,608607	0,784314	0,215686
390,5327	1,013541	1,896145	0,420046	0,579954	0,803922	0,196078
391,9564	1,011118	1,927234	0,451563	0,548438	0,823529	0,176471
393,503	1,008945	1,959967	0,486392	0,513608	0,843137	0,156863
395,1924	1,007008	1,994541	0,52508	0,47492	0,862745	0,137255
397,0487	1,005294	2,031141	0,568383	0,431617	0,882353	0,117647
399,1043	1,003798	2,06992	0,617169	0,382831	0,901961	0,098039
401,3996	1,002525	2,110946	0,672631	0,327369	0,921569	0,078431
403,9875	1,001482	2,15411	0,736312	0,263688	0,941177	0,058824
406,9366	1,000691	2,198955	0,810239	0,189762	0,960784	0,039216
410,3353	1,000182	2,244353	0,897041	0,102959	0,980392	0,019608
414,2921	1	2,287949	1	0	1	0

E.1.5 ELV-6 isobárico calculado a 1333 N/sqm.

T(K)	y(1)	y(2)	x(1)	x(2)	y(1)	y(2)
324,6951	9,631592	1	0	1	0	1
324,7667	7,961155	1,001836	0,01708	0,982921	0,019608	0,980392

324,8023	6,699258	1,007032	0,034848	0,965152	0,039216	0,960784
324,8361	5,721325	1,015187	0,049976	0,950024	0,058824	0,941177
324,876	4,951519	1,025966	0,061973	0,938027	0,078431	0,921569
324,9211	4,337639	1,03909	0,071245	0,928755	0,098039	0,901961
324,969	3,842151	1,05433	0,078378	0,921622	0,117647	0,882353
325,0176	3,437634	1,071501	0,083911	0,916089	0,137255	0,862745
325,0654	3,103864	1,090449	0,088277	0,911723	0,156863	0,843137
325,1121	2,825785	1,111043	0,091813	0,908187	0,176471	0,823529
325,1581	2,592079	1,133172	0,094776	0,905224	0,196078	0,803922
325,2041	2,394133	1,156733	0,097362	0,902638	0,215686	0,784314
325,2515	2,225324	1,181636	0,099721	0,900279	0,235294	0,764706
325,3015	2,080489	1,207796	0,101973	0,898027	0,254902	0,745098
325,356	1,955563	1,235135	0,104211	0,895789	0,27451	0,72549
325,4165	1,847303	1,263584	0,106509	0,893492	0,294118	0,705882
325,4848	1,753097	1,29308	0,108928	0,891073	0,313726	0,686275
325,5623	1,670814	1,323571	0,111518	0,888482	0,333333	0,666667
325,6508	1,598704	1,355017	0,114321	0,885679	0,352941	0,647059
325,7516	1,535312	1,38739	0,117374	0,882626	0,372549	0,627451
325,8661	1,479424	1,420679	0,120705	0,879295	0,392157	0,607843
325,9954	1,430013	1,454886	0,124344	0,875656	0,411765	0,588235
326,1407	1,386211	1,490033	0,128313	0,871687	0,431373	0,568628
326,3031	1,347278	1,526163	0,132637	0,867363	0,45098	0,54902
326,4835	1,31258	1,563333	0,137336	0,862664	0,470588	0,529412
326,6829	1,281574	1,601626	0,142434	0,857566	0,490196	0,509804
326,9023	1,253791	1,641143	0,147953	0,852047	0,509804	0,490196
327,1427	1,228827	1,682009	0,153918	0,846082	0,529412	0,470588
327,4052	1,206332	1,724371	0,160356	0,839644	0,54902	0,45098
327,6912	1,186005	1,768401	0,167298	0,832702	0,568628	0,431373
328,0021	1,167582	1,814297	0,174778	0,825222	0,588235	0,411765
328,3397	1,150838	1,862285	0,182838	0,817162	0,607843	0,392157
328,706	1,135575	1,912622	0,191527	0,808473	0,627451	0,372549
329,1036	1,121623	1,965595	0,200905	0,799096	0,647059	0,352941
329,5356	1,108835	2,021527	0,211041	0,788959	0,666667	0,333333
330,0059	1,097082	2,080775	0,222027	0,777974	0,686275	0,313726
330,5194	1,086255	2,14373	0,233971	0,76603	0,705882	0,294118
331,0822	1,076259	2,210811	0,247013	0,752987	0,72549	0,27451
331,702	1,067013	2,28245	0,261335	0,738665	0,745098	0,254902
332,3891	1,058449	2,359056	0,27717	0,72283	0,764706	0,235294
333,1569	1,050509	2,440947	0,294834	0,705166	0,784314	0,215686

334,0237	1,043144	2,528205	0,314769	0,685231	0,803922	0,196078
335,0152	1,036318	2,62038	0,33756	0,66244	0,823529	0,176471
336,1681	1,029999	2,715863	0,364122	0,635878	0,843137	0,156863
337,5375	1,024166	2,810516	0,395841	0,604159	0,862745	0,137255
339,211	1,018806	2,894515	0,434973	0,565027	0,882353	0,117647
341,336	1,013911	2,944609	0,485448	0,514552	0,901961	0,098039
344,1737	1,009479	2,904781	0,554639	0,445361	0,921569	0,078431
348,135	1,005523	2,650324	0,655624	0,344376	0,941177	0,058824
353,1042	1,002267	2,084826	0,792175	0,207825	0,960784	0,039216
357,0918	1,000445	1,545319	0,915042	0,084958	0,980392	0,019608
359,4682	1	1,226523	1	0	1	0

E.1.6 ELV-7 isobárico calculado a 101330 N/sqm.

T(K)	$\gamma(1)$	$\gamma(2)$	$x(1)$	$x(2)$	$y(1)$	$y(2)$
373,1692	9,080709	1	0	1	0	1
373,1215	7,360626	1,002061	0,021988	0,978012	0,019608	0,980392
373,082	6,085578	1,007844	0,041427	0,958573	0,039216	0,960784
373,0783	5,12155	1,016821	0,056488	0,943512	0,058824	0,941177
373,1026	4,381073	1,028548	0,067673	0,932327	0,078431	0,921569
373,1441	3,803683	1,042659	0,075924	0,924076	0,098039	0,901961
373,1945	3,346961	1,058851	0,082087	0,917913	0,117647	0,882353
373,2489	2,980844	1,076868	0,086815	0,913185	0,137255	0,862745
373,3054	2,683774	1,096492	0,090584	0,909416	0,156863	0,843137
373,3638	2,440091	1,117532	0,09374	0,90626	0,176471	0,823529
373,4252	2,238257	1,139818	0,096534	0,903466	0,196078	0,803922
373,4915	2,069647	1,163198	0,099148	0,900852	0,215686	0,784314
373,5652	1,927725	1,18753	0,101718	0,898282	0,235294	0,764706
373,6487	1,80747	1,212688	0,104346	0,895654	0,254902	0,745098
373,7447	1,704976	1,238555	0,107111	0,892889	0,27451	0,72549
373,8556	1,617167	1,265026	0,110076	0,889924	0,294118	0,705882
373,9839	1,541595	1,29201	0,113292	0,886709	0,313726	0,686275
374,1316	1,476288	1,319426	0,1168	0,8832	0,333333	0,666667
374,3009	1,419647	1,347206	0,120639	0,879361	0,352941	0,647059
374,4935	1,370362	1,375297	0,124842	0,875158	0,372549	0,627451
374,7111	1,327349	1,403659	0,129438	0,870562	0,392157	0,607843
374,9551	1,289707	1,432264	0,134456	0,865544	0,411765	0,588235
375,2268	1,256683	1,461101	0,139927	0,860073	0,431373	0,568628
375,5275	1,227641	1,490172	0,145878	0,854123	0,45098	0,54902

375,8583	1,202042	1,519492	0,152339	0,847661	0,470588	0,529412
376,2204	1,17943	1,549091	0,159341	0,840659	0,490196	0,509804
376,6148	1,159413	1,579012	0,16692	0,833081	0,509804	0,490196
377,0429	1,141656	1,609312	0,175109	0,824891	0,529412	0,470588
377,5059	1,12587	1,640064	0,183951	0,816049	0,54902	0,45098
378,0053	1,111806	1,671352	0,193489	0,806511	0,568628	0,431373
378,5428	1,099251	1,703278	0,203773	0,796227	0,588235	0,411765
379,1202	1,088017	1,735959	0,214859	0,785141	0,607843	0,392157
379,74	1,077943	1,769528	0,226811	0,773189	0,627451	0,372549
380,4047	1,06889	1,804139	0,239705	0,760295	0,647059	0,352941
381,1176	1,060736	1,839966	0,253639	0,746361	0,666667	0,333333
381,8825	1,053376	1,877206	0,268668	0,731332	0,686275	0,313726
382,7041	1,046719	1,916085	0,284956	0,715045	0,705882	0,294118
383,588	1,040687	1,956861	0,302632	0,697368	0,72549	0,27451
384,5411	1,035212	1,999828	0,321874	0,678126	0,745098	0,254902
385,5717	1,030237	2,045324	0,342877	0,657123	0,764706	0,235294
386,6904	1,025713	2,093741	0,365904	0,634096	0,784314	0,215686
387,91	1,021599	2,14553	0,391277	0,608723	0,803922	0,196078
389,2472	1,017864	2,201212	0,419407	0,580593	0,823529	0,176471
390,7231	1,014481	2,26139	0,450821	0,549179	0,843137	0,156863
392,3655	1,011434	2,32675	0,486202	0,513798	0,862745	0,137255
394,2108	1,008711	2,398051	0,526526	0,473474	0,882353	0,117647
396,3089	1,006311	2,47609	0,573046	0,426954	0,901961	0,098039
398,7287	1,004241	2,561574	0,627574	0,372426	0,921569	0,078431
401,5677	1,002524	2,654801	0,692725	0,307276	0,941177	0,058824
404,9647	1,001196	2,75486	0,772372	0,227628	0,960784	0,039216
409,1198	1,000321	2,857749	0,872168	0,127832	0,980392	0,019608
414,2953	1	2,952116	1	0	1	0

E.1.7 ELV-8 isobárico calculado a 74660 N/sqm.

T(K)	$\gamma(1)$	$\gamma(2)$	$x(1)$	$x(2)$	$y(1)$	$y(2)$
364,8225	6,875771	1	0	1	0	1
364,9267	6,049581	1,001257	0,016474	0,983527	0,019608	0,980392
364,9922	5,364947	1,004896	0,033756	0,966244	0,039216	0,960784
365,0498	4,792964	1,010739	0,049909	0,950091	0,058824	0,941177
365,1094	4,311514	1,018637	0,064232	0,935768	0,078431	0,921569
365,1742	3,903466	1,028466	0,07661	0,92339	0,098039	0,901961
365,2442	3,555414	1,040118	0,087184	0,912816	0,117647	0,882353

365,3185	3,256772	1,053503	0,096191	0,903809	0,137255	0,862745
365,396	2,999108	1,068546	0,103882	0,896118	0,156863	0,843137
365,4756	2,775654	1,08518	0,110497	0,889503	0,176471	0,823529
365,5569	2,580936	1,103351	0,116247	0,883753	0,196078	0,803922
365,6395	2,410497	1,123011	0,121316	0,878684	0,215686	0,784314
365,7237	2,260688	1,144122	0,125857	0,874143	0,235294	0,764706
365,8102	2,128497	1,16665	0,130003	0,869997	0,254902	0,745098
365,8996	2,01143	1,190567	0,133862	0,866138	0,27451	0,72549
365,9932	1,907409	1,215848	0,137528	0,862472	0,294118	0,705882
366,0922	1,814692	1,242474	0,141081	0,858919	0,313726	0,686275
366,1981	1,731813	1,270427	0,144589	0,855411	0,333333	0,666667
366,3126	1,657534	1,299692	0,148112	0,851888	0,352941	0,647059
366,4373	1,590801	1,330256	0,151706	0,848294	0,372549	0,627451
366,5742	1,530718	1,362106	0,155418	0,844582	0,392157	0,607843
366,7254	1,476517	1,395231	0,159296	0,840704	0,411765	0,588235
366,893	1,427536	1,42962	0,163383	0,836617	0,431373	0,568628
367,0793	1,383207	1,465258	0,167724	0,832276	0,45098	0,54902
367,2867	1,343035	1,502132	0,172363	0,827637	0,470588	0,529412
367,5179	1,306593	1,540224	0,177346	0,822654	0,490196	0,509804
367,7758	1,273508	1,579516	0,182722	0,817278	0,509804	0,490196
368,0633	1,243452	1,619983	0,188544	0,811456	0,529412	0,470588
368,3837	1,21614	1,661596	0,194869	0,805131	0,54902	0,45098
368,7407	1,19132	1,704319	0,201763	0,798237	0,568628	0,431373
369,1382	1,168771	1,748109	0,209298	0,790702	0,588235	0,411765
369,5806	1,148297	1,792911	0,217557	0,782443	0,607843	0,392157
370,0726	1,129723	1,838663	0,226636	0,773364	0,627451	0,372549
370,6197	1,112895	1,885287	0,236644	0,763356	0,647059	0,352941
371,228	1,097676	1,932687	0,24771	0,75229	0,666667	0,333333
371,9042	1,083942	1,980751	0,259986	0,740014	0,686275	0,313726
372,6561	1,071583	2,029344	0,273649	0,726351	0,705882	0,294118
373,4923	1,0605	2,078303	0,288919	0,711081	0,72549	0,27451
374,4234	1,050603	2,127435	0,306032	0,693968	0,745098	0,254902
375,4608	1,041812	2,176508	0,325304	0,674696	0,764706	0,235294
376,6181	1,034053	2,225249	0,347107	0,652893	0,784314	0,215686
377,9113	1,027257	2,273332	0,37189	0,62811	0,803922	0,196078
379,3588	1,021363	2,320372	0,400207	0,599793	0,823529	0,176471
380,9827	1,016312	2,365912	0,432736	0,567264	0,843137	0,156863
382,8093	1,012051	2,409412	0,470315	0,529685	0,862745	0,137255
384,8698	1,008527	2,450235	0,513985	0,486015	0,882353	0,117647

387,2012	1,005689	2,48764	0,565033	0,434967	0,901961	0,098039
389,8487	1,003487	2,520756	0,625062	0,374938	0,921569	0,078431
392,8657	1,001872	2,548581	0,696024	0,303976	0,941177	0,058824
396,3163	1,000791	2,569975	0,78028	0,21972	0,960784	0,039216
400,2755	1,000187	2,583676	0,88059	0,11941	0,980392	0,019608
404,8291	1	2,588341	1	0	1	0

E.2 Equilibrios calculados con Wilson y Hayden & O'Connell

E.2.1 ELV 1 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.

T (°K)	$v(1)$	$v(2)$	$x(1)$	$x(2)$	$y(1)$	$y(2)$
339.5685	1	10.37189	1	0	1	0
339.5826	1.002361	8.117721	0.980387	0.019613	0.980392	0.019608
339.5867	1.00854	6.61644	0.962271	0.037729	0.960784	0.039216
339.6057	1.017594	5.559904	0.947619	0.052381	0.941177	0.058824
339.6387	1.028932	4.782827	0.935989	0.064011	0.921569	0.078431
339.6821	1.042164	4.191139	0.926652	0.073348	0.901961	0.098039
339.7325	1.057027	3.72795	0.918996	0.081004	0.882353	0.117647
339.7882	1.073335	3.357053	0.912562	0.087438	0.862745	0.137255
339.8479	1.090959	3.054415	0.907018	0.092982	0.843137	0.156863
339.9112	1.109811	2.803517	0.902122	0.097878	0.823529	0.176471
339.9782	1.129828	2.592669	0.897697	0.102303	0.803922	0.196078
340.0491	1.150969	2.413389	0.893613	0.106387	0.784314	0.215686
340.1244	1.17321	2.259388	0.889769	0.110231	0.764706	0.235294
340.2048	1.196537	2.125915	0.886088	0.113912	0.745098	0.254902
340.2909	1.220945	2.009319	0.882509	0.117491	0.72549	0.27451
340.3835	1.24644	1.906757	0.878981	0.12102	0.705882	0.294118
340.4837	1.273028	1.815982	0.875461	0.124539	0.686275	0.313726
340.5922	1.300722	1.735198	0.871913	0.128087	0.666667	0.333333
340.7103	1.329537	1.662954	0.868303	0.131697	0.647059	0.352941
340.8392	1.359489	1.598067	0.8646	0.1354	0.627451	0.372549
340.98	1.390595	1.539565	0.860774	0.139227	0.607843	0.392157
341.1343	1.42287	1.486639	0.856794	0.143207	0.588235	0.411765
341.3037	1.456325	1.438617	0.852628	0.147372	0.568628	0.431373
341.49	1.490967	1.39493	0.848245	0.151755	0.54902	0.45098
341.6951	1.526795	1.3551	0.843607	0.156393	0.529412	0.470588
341.9213	1.563801	1.318719	0.838674	0.161326	0.509804	0.490196
342.1711	1.601961	1.285439	0.833402	0.166598	0.490196	0.509804

342.4476	1.641233	1.254961	0.827739	0.172261	0.470588	0.529412
342.7539	1.681555	1.227029	0.821626	0.178374	0.45098	0.54902
343.0938	1.722834	1.201421	0.814994	0.185006	0.431373	0.568628
343.4718	1.764941	1.177945	0.807763	0.192237	0.411765	0.588235
343.8927	1.8077	1.156434	0.799837	0.200163	0.392157	0.607843
344.3625	1.850876	1.136746	0.791102	0.208898	0.372549	0.627451
344.8877	1.894162	1.118754	0.78142	0.21858	0.352941	0.647059
345.4762	1.937162	1.102351	0.770626	0.229375	0.333333	0.666667
346.137	1.979367	1.087443	0.758517	0.241483	0.313726	0.686275
346.8804	2.020138	1.073948	0.74485	0.25515	0.294118	0.705882
347.7184	2.058681	1.061795	0.729321	0.270679	0.27451	0.72549
348.6649	2.09402	1.050924	0.711564	0.288436	0.254902	0.745098
349.7353	2.124988	1.04128	0.691125	0.308875	0.235294	0.764706
350.9468	2.150215	1.032814	0.667457	0.332543	0.215686	0.784314
352.3177	2.168158	1.025481	0.639894	0.360106	0.196078	0.803922
353.8674	2.177144	1.019234	0.60767	0.39233	0.176471	0.823529
355.6149	2.175479	1.014024	0.569908	0.430092	0.156863	0.843137
357.5732	2.161722	1.009794	0.525644	0.474356	0.137255	0.862745
359.7508	2.134833	1.006477	0.473959	0.526042	0.117647	0.882353
362.1449	2.094527	1.003987	0.414092	0.585908	0.098039	0.901961
364.7398	2.041463	1.002223	0.345651	0.654349	0.078431	0.921569
367.4997	1.977501	1.001068	0.268801	0.731199	0.058824	0.941177
370.3781	1.905272	1.000397	0.184432	0.815568	0.039216	0.960784
373.3179	1.827943	1.000081	0.094129	0.905871	0.019608	0.980392
376.2599	1.748676	1	0	1	0	1

E.2.2 ELV 2 - isobárico calculado a 9330 N/sqm.

T (°K)	ν (1)	ν (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
317.6041	1	11.21614	1	0	1	0
317.6512	1.002533	8.592188	0.982183	0.017817	0.980392	0.019608
317.678	1.009076	6.910299	0.965421	0.03458	0.960784	0.039216
317.7119	1.018545	5.752827	0.952002	0.047998	0.941177	0.058824
317.7545	1.030272	4.916385	0.941455	0.058545	0.921569	0.078431
317.8034	1.043827	4.288645	0.933023	0.066977	0.901961	0.098039
317.8568	1.058931	3.802979	0.926097	0.073903	0.882353	0.117647
317.9136	1.075398	3.417743	0.92024	0.07976	0.862745	0.137255
317.9732	1.093101	3.105776	0.915145	0.084855	0.843137	0.156863
318.0356	1.111956	2.848713	0.910593	0.089407	0.823529	0.176471

318.1009	1.131907	2.633746	0.906429	0.093571	0.803922	0.196078
318.1695	1.152918	2.451698	0.902538	0.097462	0.784314	0.215686
318.2418	1.174971	2.295844	0.898832	0.101169	0.764706	0.235294
318.3185	1.19806	2.161147	0.895243	0.104757	0.745098	0.254902
318.4002	1.222186	2.043771	0.89172	0.10828	0.72549	0.27451
318.4874	1.247363	1.940743	0.888218	0.111783	0.705882	0.294118
318.5808	1.273609	1.84973	0.8847	0.1153	0.686275	0.313726
318.6811	1.300952	1.768871	0.881134	0.118866	0.666667	0.333333
318.7892	1.329424	1.696673	0.877493	0.122507	0.647059	0.352941
318.9057	1.359064	1.631915	0.87375	0.126251	0.627451	0.372549
319.0314	1.38992	1.573599	0.869879	0.130121	0.607843	0.392157
319.1673	1.422044	1.520895	0.865857	0.134143	0.588235	0.411765
319.3144	1.455495	1.473112	0.86166	0.13834	0.568628	0.431373
319.4735	1.490342	1.429664	0.857261	0.142739	0.54902	0.45098
319.6458	1.526662	1.39006	0.852635	0.147365	0.529412	0.470588
319.8326	1.564539	1.353877	0.847753	0.152247	0.509804	0.490196
320.035	1.604069	1.320755	0.842586	0.157415	0.490196	0.509804
320.2546	1.645361	1.290382	0.837099	0.162901	0.470588	0.529412
320.4931	1.688533	1.262489	0.831256	0.168744	0.45098	0.54902
320.7522	1.73372	1.236842	0.825015	0.174985	0.431373	0.568628
321.034	1.781074	1.213235	0.818328	0.181672	0.411765	0.588235
321.3408	1.830764	1.191488	0.811141	0.188859	0.392157	0.607843
321.6754	1.882981	1.171445	0.803387	0.196613	0.372549	0.627451
322.0409	1.93794	1.152965	0.794998	0.205003	0.352941	0.647059
322.4411	1.995882	1.135926	0.785882	0.214118	0.333333	0.666667
322.8802	2.057078	1.120218	0.775935	0.224065	0.313726	0.686275
323.3634	2.121833	1.105745	0.765028	0.234972	0.294118	0.705882
323.897	2.190487	1.092421	0.753006	0.246994	0.27451	0.72549
324.4886	2.263416	1.080171	0.739673	0.260327	0.254902	0.745098
325.1478	2.341026	1.068927	0.724785	0.275216	0.235294	0.764706
325.8865	2.423745	1.058631	0.708025	0.291975	0.215686	0.784314
326.72	2.511989	1.049231	0.688981	0.311019	0.196078	0.803922
327.6682	2.606105	1.040685	0.667096	0.332904	0.176471	0.823529
328.7583	2.706221	1.032954	0.641629	0.358371	0.156863	0.843137
330.0268	2.811978	1.02601	0.611499	0.388501	0.137255	0.862745
331.5258	2.921894	1.019831	0.575143	0.424857	0.117647	0.882353
333.3309	3.032	1.014407	0.530197	0.469803	0.098039	0.901961
335.5562	3.132664	1.009738	0.472963	0.527038	0.078431	0.921569
338.3718	3.201301	1.005848	0.397522	0.602478	0.058824	0.941177

342.0047	3.187506	1.0028	0.295081	0.704919	0.039216	0.960784
346.5686	3.004382	1.000751	0.158079	0.841921	0.019608	0.980392
351.4678	2.621688	1	0	1	0	1

E.2.3 ELV 3 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
339.5685	1	10.82974	1	0	1	0
339.5719	1.002683	8.181033	0.9802	0.0198	0.980392	0.019608
339.5777	1.009538	6.518034	0.963064	0.036936	0.960784	0.039216
339.6036	1.019353	5.394143	0.949849	0.050151	0.941177	0.058824
339.6449	1.0314	4.593284	0.93964	0.06036	0.921569	0.078431
339.6962	1.045221	3.998675	0.931521	0.068479	0.901961	0.098039
339.7543	1.060517	3.542494	0.924834	0.075166	0.882353	0.117647
339.8177	1.077089	3.183087	0.91913	0.08087	0.862745	0.137255
339.8857	1.094803	2.893658	0.914105	0.085895	0.843137	0.156863
339.9581	1.113563	2.656291	0.909549	0.090451	0.823529	0.176471
340.0353	1.133305	2.458603	0.905312	0.094688	0.803922	0.196078
340.1178	1.153986	2.291789	0.901286	0.098714	0.784314	0.215686
340.2062	1.175577	2.149436	0.897389	0.102611	0.764706	0.235294
340.3012	1.198062	2.026766	0.893559	0.106441	0.745098	0.254902
340.4035	1.221434	1.920159	0.889745	0.110256	0.72549	0.27451
340.514	1.245693	1.826818	0.885905	0.114095	0.705882	0.294118
340.6334	1.270846	1.744559	0.882006	0.117995	0.686275	0.313726
340.7626	1.296905	1.671644	0.878014	0.121986	0.666667	0.333333
340.9025	1.323888	1.606682	0.873902	0.126098	0.647059	0.352941
341.054	1.351818	1.548541	0.869644	0.130356	0.627451	0.372549
341.2183	1.380721	1.496296	0.865212	0.134788	0.607843	0.392157
341.3962	1.410629	1.44918	0.86058	0.13942	0.588235	0.411765
341.589	1.441577	1.406556	0.855723	0.144277	0.568628	0.431373
341.7979	1.473608	1.367886	0.850612	0.149388	0.54902	0.45098
342.0241	1.506766	1.332717	0.845217	0.154783	0.529412	0.470588
342.2693	1.541103	1.300663	0.839506	0.160494	0.509804	0.490196
342.5348	1.576678	1.271394	0.833444	0.166556	0.490196	0.509804
342.8226	1.613553	1.244625	0.826992	0.173008	0.470588	0.529412
343.1344	1.6518	1.220111	0.820107	0.179893	0.45098	0.54902
343.4726	1.691499	1.197637	0.81274	0.187261	0.431373	0.568628
343.8395	1.732736	1.177019	0.804835	0.195165	0.411765	0.588235

344.2378	1.775611	1.158092	0.796328	0.203672	0.392157	0.607843
344.6707	1.820232	1.140713	0.787147	0.212853	0.372549	0.627451
345.1418	1.866722	1.124756	0.777206	0.222794	0.352941	0.647059
345.6553	1.915218	1.110109	0.766404	0.233596	0.333333	0.666667
346.2159	1.965872	1.096675	0.754623	0.245377	0.313726	0.686275
346.8293	2.018855	1.084365	0.741721	0.258279	0.294118	0.705882
347.5021	2.074359	1.073102	0.727528	0.272472	0.27451	0.72549
348.2425	2.1326	1.062817	0.711835	0.288165	0.254902	0.745098
349.06	2.193816	1.05345	0.69438	0.30562	0.235294	0.764706
349.9666	2.258272	1.044948	0.674862	0.325138	0.215686	0.784314
350.9768	2.326257	1.037264	0.652866	0.347134	0.196078	0.803922
352.1091	2.398082	1.030356	0.627874	0.372126	0.176471	0.823529
353.3868	2.474061	1.024192	0.599206	0.400794	0.156863	0.843137
354.8406	2.554482	1.018742	0.565963	0.434038	0.137255	0.862745
356.5109	2.639541	1.013985	0.526917	0.473083	0.117647	0.882353
358.4524	2.729201	1.009906	0.480367	0.519633	0.098039	0.901961
360.7415	2.822892	1.006499	0.423891	0.576109	0.078431	0.921569
363.486	2.918871	1.003771	0.353962	0.646039	0.058824	0.941177
366.8367	3.01286	1.001741	0.265323	0.734677	0.039216	0.960784
371.0095	3.095009	1.000456	0.150508	0.849492	0.019608	0.980392
376.26	3.144399	1	0	1	0	1

E.2.4 ELV 4 - isobárico calculado a 101320 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
373.1665	1	3.660967	1	0	1	0
373.4782	1.000628	3.402513	0.990907	0.009093	0.980392	0.019608
373.7577	1.00244	3.179704	0.981081	0.018919	0.960784	0.039216
374.0218	1.005345	2.984657	0.970948	0.029052	0.941177	0.058824
374.2753	1.009274	2.812405	0.960772	0.039228	0.921569	0.078431
374.5217	1.01417	2.659174	0.950712	0.049288	0.901961	0.098039
374.7632	1.01999	2.52204	0.940852	0.059148	0.882353	0.117647
375.0022	1.026697	2.398651	0.93125	0.06875	0.862745	0.137255
375.24	1.034266	2.287125	0.921918	0.078082	0.843137	0.156863
375.4779	1.042674	2.185909	0.912856	0.087144	0.823529	0.176471
375.7169	1.051907	2.093715	0.904053	0.095947	0.803922	0.196078
375.958	1.061954	2.009465	0.895488	0.104512	0.784314	0.215686
376.2022	1.072808	1.932244	0.887136	0.112864	0.764706	0.235294
376.4502	1.084466	1.861275	0.878969	0.121031	0.745098	0.254902

376.7029	1.09693	1.795892	0.870956	0.129044	0.72549	0.27451
376.9612	1.110203	1.735521	0.863068	0.136932	0.705882	0.294118
377.226	1.12429	1.679663	0.855273	0.144728	0.686275	0.313726
377.4982	1.139201	1.627885	0.847537	0.152463	0.666667	0.333333
377.779	1.154943	1.579808	0.83983	0.16017	0.647059	0.352941
378.0694	1.17153	1.5351	0.832118	0.167882	0.627451	0.372549
378.3707	1.188973	1.493468	0.824365	0.175635	0.607843	0.392157
378.6841	1.207284	1.454652	0.816538	0.183462	0.588235	0.411765
379.0111	1.226476	1.418425	0.808598	0.191402	0.568628	0.431373
379.3535	1.246563	1.384581	0.800506	0.199494	0.54902	0.45098
379.7129	1.267553	1.35294	0.79222	0.20778	0.529412	0.470588
380.0914	1.289455	1.323339	0.783695	0.216305	0.509804	0.490196
380.4913	1.312275	1.295635	0.774882	0.225118	0.490196	0.509804
380.9151	1.336011	1.269695	0.765725	0.234275	0.470588	0.529412
381.3656	1.360656	1.245406	0.756165	0.243835	0.45098	0.54902
381.8462	1.386193	1.22266	0.746133	0.253867	0.431373	0.568628
382.3603	1.412592	1.201366	0.735552	0.264448	0.411765	0.588235
382.9123	1.439807	1.181437	0.724334	0.275666	0.392157	0.607843
383.5068	1.467768	1.162798	0.712377	0.287623	0.372549	0.627451
384.1494	1.496379	1.14538	0.699562	0.300438	0.352941	0.647059
384.8464	1.525503	1.129122	0.685753	0.314247	0.333333	0.666667
385.605	1.554952	1.11397	0.670786	0.329214	0.313726	0.686275
386.4338	1.584476	1.099874	0.654468	0.345532	0.294118	0.705882
387.3424	1.613733	1.086791	0.636567	0.363433	0.27451	0.72549
388.3423	1.642271	1.074684	0.616808	0.383192	0.254902	0.745098
389.4467	1.669484	1.063521	0.594856	0.405144	0.235294	0.764706
390.6709	1.69457	1.053276	0.570309	0.429691	0.215686	0.784314
392.0305	1.716521	1.043929	0.542689	0.457311	0.196078	0.803922
393.5484	1.733881	1.035465	0.511414	0.488586	0.176471	0.823529
395.2426	1.744965	1.027878	0.475822	0.524178	0.156863	0.843137
397.131	1.747679	1.021171	0.435179	0.564821	0.137255	0.862745
399.2273	1.739582	1.015355	0.388755	0.611245	0.117647	0.882353
401.5327	1.718173	1.010454	0.335965	0.664036	0.098039	0.901961
404.025	1.681488	1.006493	0.276638	0.723362	0.078431	0.921569
406.6482	1.628981	1.003498	0.211364	0.788636	0.058824	0.941177
409.3098	1.562382	1.001464	0.141756	0.858244	0.039216	0.960784
411.8941	1.485832	1.000338	0.070345	0.929655	0.019608	0.980392
414.2921	1.404841	1	0	1	0	1

E.2.5 ELV 6 - isobárico calculado a 13330 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
324.6951	1	11.41174	1	0	1	0
324.7206	1.002673	8.617805	0.981087	0.018913	0.980392	0.019608
324.7356	1.009513	6.86542	0.964046	0.035954	0.960784	0.039216
324.764	1.019322	5.678989	0.950761	0.049239	0.941177	0.058824
324.8043	1.031373	4.832683	0.940473	0.059527	0.921569	0.078431
324.8527	1.045211	4.204014	0.932301	0.067699	0.901961	0.098039
324.9067	1.060545	3.721551	0.925588	0.074412	0.882353	0.117647
324.9649	1.077181	3.341319	0.919885	0.080115	0.862745	0.137255
325.0267	1.094992	3.03501	0.914887	0.085114	0.843137	0.156863
325.0919	1.113889	2.783694	0.910379	0.089621	0.823529	0.176471
325.1609	1.133817	2.574289	0.906211	0.093789	0.803922	0.196078
325.234	1.154738	2.397498	0.902273	0.097727	0.784314	0.215686
325.3117	1.176632	2.246548	0.898484	0.101517	0.764706	0.235294
325.3945	1.19949	2.116396	0.894778	0.105222	0.745098	0.254902
325.4832	1.223314	2.003218	0.891107	0.108893	0.72549	0.27451
325.5782	1.248115	1.904063	0.88743	0.112571	0.705882	0.294118
325.6804	1.27391	1.816621	0.88371	0.11629	0.686275	0.313726
325.7904	1.300726	1.739058	0.879919	0.120081	0.666667	0.333333
325.9089	1.328595	1.669899	0.876029	0.123971	0.647059	0.352941
326.0367	1.357555	1.60795	0.872015	0.127985	0.627451	0.372549
326.1746	1.387653	1.552229	0.867853	0.132147	0.607843	0.392157
326.3235	1.418943	1.501923	0.86352	0.13648	0.588235	0.411765
326.4841	1.451484	1.456355	0.858993	0.141007	0.568628	0.431373
326.6576	1.485348	1.414955	0.854247	0.145753	0.54902	0.45098
326.845	1.520612	1.377241	0.849258	0.150742	0.529412	0.470588
327.0474	1.557365	1.342803	0.843997	0.156003	0.509804	0.490196
327.2661	1.595706	1.311287	0.838436	0.161564	0.490196	0.509804
327.5026	1.635746	1.282391	0.832542	0.167458	0.470588	0.529412
327.7584	1.677611	1.255853	0.826279	0.173721	0.45098	0.54902
328.0353	1.721439	1.231443	0.819607	0.180393	0.431373	0.568628
328.3354	1.767387	1.208963	0.812479	0.187521	0.411765	0.588235
328.6611	1.815627	1.188238	0.804842	0.195158	0.392157	0.607843
329.0151	1.866354	1.169114	0.796633	0.203367	0.372549	0.627451
329.4007	1.91978	1.151457	0.787779	0.212221	0.352941	0.647059
329.8216	1.976141	1.135146	0.778192	0.221808	0.333333	0.666667
330.2826	2.035693	1.120077	0.767767	0.232233	0.313726	0.686275

330.789	2.098708	1.106156	0.756374	0.243626	0.294118	0.705882
331.3479	2.165467	1.093299	0.743853	0.256147	0.27451	0.72549
331.9676	2.236244	1.081434	0.730003	0.269997	0.254902	0.745098
332.659	2.311266	1.070496	0.714564	0.285436	0.235294	0.764706
333.4361	2.390651	1.060428	0.697196	0.302804	0.215686	0.784314
334.3174	2.474272	1.05118	0.677442	0.322558	0.196078	0.803922
335.3282	2.561501	1.04271	0.65467	0.34533	0.176471	0.823529
336.5037	2.650672	1.034982	0.627974	0.372026	0.156863	0.843137
337.8959	2.737958	1.027964	0.595996	0.404004	0.137255	0.862745
339.5839	2.814829	1.021633	0.556599	0.443401	0.117647	0.882353
341.6963	2.861981	1.015969	0.506202	0.493798	0.098039	0.901961
344.4536	2.834049	1.010953	0.438389	0.561611	0.078431	0.921569
348.2029	2.627362	1.006565	0.341956	0.658044	0.058824	0.941177
352.9969	2.113985	1.002886	0.210014	0.789987	0.039216	0.960784
357.0879	1.544844	1.000604	0.084913	0.915087	0.019608	0.980392
359.4682	1.200397	1	0	1	0	1

E.2.6 ELV 7 - isobárico calculado a 101330 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
373.1692	1	10.79585	1	0	1	0
373.0526	1.003066	7.840557	0.976311	0.023689	0.980392	0.019608
373.0032	1.010678	6.096311	0.958608	0.041392	0.960784	0.039216
373.0069	1.021302	4.970488	0.945905	0.054095	0.941177	0.058824
373.041	1.03407	4.194967	0.936402	0.063598	0.921569	0.078431
373.093	1.048465	3.633556	0.928895	0.071105	0.901961	0.098039
373.1571	1.064161	3.211109	0.922651	0.077349	0.882353	0.117647
373.2306	1.080944	2.883312	0.917214	0.082786	0.862745	0.137255
373.3126	1.098669	2.622563	0.912296	0.087704	0.843137	0.156863
373.403	1.117237	2.410878	0.907706	0.092294	0.823529	0.176471
373.5022	1.136576	2.236083	0.903312	0.096688	0.803922	0.196078
373.6109	1.156637	2.089673	0.89902	0.10098	0.784314	0.215686
373.7298	1.177385	1.965538	0.89476	0.10524	0.764706	0.235294
373.8596	1.198798	1.859184	0.890479	0.109521	0.745098	0.254902
374.0014	1.220861	1.767237	0.886133	0.113867	0.72549	0.27451
374.156	1.243566	1.687118	0.881685	0.118315	0.705882	0.294118
374.3242	1.266913	1.616823	0.877104	0.122896	0.686275	0.313726
374.5071	1.290905	1.554773	0.872362	0.127638	0.666667	0.333333
374.7056	1.315551	1.499707	0.86743	0.13257	0.647059	0.352941

374.9208	1.340862	1.450609	0.862285	0.137715	0.627451	0.372549
375.1537	1.366857	1.406647	0.856898	0.143102	0.607843	0.392157
375.4055	1.393554	1.367138	0.851245	0.148755	0.588235	0.411765
375.6774	1.42098	1.331514	0.845297	0.154703	0.568628	0.431373
375.9706	1.449162	1.2993	0.839026	0.160974	0.54902	0.45098
376.2866	1.478134	1.270095	0.8324	0.1676	0.529412	0.470588
376.627	1.507933	1.243558	0.825386	0.174615	0.509804	0.490196
376.9933	1.538603	1.219398	0.817946	0.182054	0.490196	0.509804
377.3875	1.570192	1.197367	0.810039	0.189961	0.470588	0.529412
377.8116	1.602754	1.177248	0.801621	0.198379	0.45098	0.54902
378.2679	1.636351	1.158855	0.79264	0.207361	0.431373	0.568628
378.7589	1.671051	1.142026	0.783037	0.216963	0.411765	0.588235
379.2876	1.706932	1.126617	0.772749	0.227251	0.392157	0.607843
379.8572	1.744081	1.112505	0.761699	0.238301	0.372549	0.627451
380.4714	1.782596	1.09958	0.749801	0.250199	0.352941	0.647059
381.1347	1.822588	1.087745	0.736956	0.263044	0.333333	0.666667
381.8518	1.864183	1.076915	0.723045	0.276955	0.313726	0.686275
382.6287	1.907523	1.067014	0.707923	0.292077	0.294118	0.705882
383.4722	1.952769	1.057975	0.691446	0.308554	0.27451	0.72549
384.3904	2.000106	1.049738	0.673407	0.326593	0.254902	0.745098
385.393	2.049745	1.042253	0.653569	0.346431	0.235294	0.764706
386.4915	2.101926	1.035472	0.631641	0.368359	0.215686	0.784314
387.7003	2.156926	1.029356	0.607266	0.392735	0.196078	0.803922
389.037	2.21506	1.02387	0.579991	0.420009	0.176471	0.823529
390.5237	2.276688	1.018984	0.549246	0.450754	0.156863	0.843137
392.1886	2.342214	1.014675	0.514291	0.485709	0.137255	0.862745
394.0681	2.412084	1.010922	0.474153	0.525847	0.117647	0.882353
396.2105	2.486763	1.007714	0.427528	0.572473	0.098039	0.901961
398.681	2.566679	1.005044	0.372624	0.627376	0.078431	0.921569
401.5696	2.652089	1.002914	0.306925	0.693075	0.058824	0.941177
405.0015	2.742749	1.001339	0.226797	0.773203	0.039216	0.960784
409.1587	2.837154	1.000349	0.127012	0.872988	0.019608	0.980392
414.2953	2.930746	1	0	1	0	1

E.2.7 ELV 8 - isobárico calculado a 74660 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
364.8225	1	8.946168	1	0	1	0
364.8194	1.002125	7.178521	0.979823	0.020178	0.980392	0.019608

364.8159	1.007755	5.958011	0.961564	0.038436	0.960784	0.039216
364.8341	1.016088	5.074728	0.946537	0.053463	0.941177	0.058824
364.8711	1.026594	4.411478	0.934334	0.065666	0.921569	0.078431
364.9222	1.038916	3.89847	0.924317	0.075683	0.901961	0.098039
364.9835	1.052802	3.491928	0.915931	0.084069	0.882353	0.117647
365.0523	1.068077	3.163186	0.908752	0.091248	0.862745	0.137255
365.1272	1.084615	2.892793	0.902465	0.097536	0.843137	0.156863
365.2076	1.102324	2.667142	0.896835	0.103165	0.823529	0.176471
365.2933	1.121141	2.476463	0.891688	0.108312	0.803922	0.196078
365.3844	1.141021	2.31358	0.886892	0.113108	0.784314	0.215686
365.4814	1.161935	2.173121	0.882344	0.117656	0.764706	0.235294
365.5849	1.183866	2.050987	0.877964	0.122036	0.745098	0.254902
365.6956	1.206803	1.944008	0.873687	0.126313	0.72549	0.27451
365.8144	1.230747	1.849693	0.869459	0.130541	0.705882	0.294118
365.9423	1.255701	1.766063	0.865234	0.134766	0.686275	0.313726
366.0801	1.281676	1.691528	0.860972	0.139028	0.666667	0.333333
366.2291	1.308686	1.624795	0.856638	0.143362	0.647059	0.352941
366.3904	1.336747	1.564807	0.852197	0.147804	0.627451	0.372549
366.5654	1.36588	1.510686	0.847617	0.152384	0.607843	0.392157
366.7554	1.396107	1.461704	0.842866	0.157134	0.588235	0.411765
366.962	1.427453	1.417248	0.837912	0.162088	0.568628	0.431373
367.1868	1.459942	1.376803	0.832722	0.167278	0.54902	0.45098
367.4316	1.493601	1.339929	0.82726	0.172741	0.529412	0.470588
367.6985	1.528456	1.306251	0.821487	0.178513	0.509804	0.490196
367.9897	1.564533	1.275447	0.815362	0.184638	0.490196	0.509804
368.3076	1.601857	1.247239	0.80884	0.191161	0.470588	0.529412
368.655	1.640451	1.221386	0.801866	0.198134	0.45098	0.54902
369.035	1.680335	1.19768	0.794384	0.205616	0.431373	0.568628
369.451	1.721524	1.175938	0.786327	0.213673	0.411765	0.588235
369.9068	1.764027	1.156	0.777617	0.222383	0.392157	0.607843
370.4068	1.807847	1.137725	0.768166	0.231834	0.372549	0.627451
370.9561	1.852977	1.120991	0.757871	0.242129	0.352941	0.647059
371.5603	1.899396	1.105687	0.74661	0.25339	0.333333	0.666667
372.2259	1.947067	1.091718	0.734241	0.265759	0.313726	0.686275
372.9605	1.995937	1.078997	0.720593	0.279407	0.294118	0.705882
373.7725	2.045924	1.067449	0.705456	0.294544	0.27451	0.72549
374.6725	2.096915	1.057006	0.688604	0.311396	0.254902	0.745098
375.6722	2.148762	1.047607	0.66973	0.33027	0.235294	0.764706
376.7853	2.201267	1.039198	0.648472	0.351528	0.215686	0.784314

378.0285	2.254175	1.031729	0.624387	0.375613	0.196078	0.803922
379.4212	2.307157	1.025157	0.596924	0.403076	0.176471	0.823529
380.9871	2.359797	1.01944	0.5654	0.4346	0.156863	0.843137
382.7543	2.41157	1.01454	0.528958	0.471042	0.137255	0.862745
384.7573	2.46182	1.01042	0.486523	0.513477	0.117647	0.882353
387.0376	2.509735	1.007046	0.436727	0.563273	0.098039	0.901961
389.6462	2.554317	1.00438	0.377849	0.622151	0.078431	0.921569
392.6456	2.594356	1.002386	0.307717	0.692283	0.058824	0.941177
396.1117	2.628405	1.001024	0.223634	0.776366	0.039216	0.960784
400.1366	2.654784	1.000246	0.122325	0.877675	0.019608	0.980392
404.829	2.671614	1	0	1	0	1

E.3 Equilibrios calculados con UNIQUAC y Hayden & O'Connell

E.3.1 ELV 1 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
339.5685	1	8.838634	1	0	1	0
339.6351	1.001692	7.427787	0.982448	0.017552	0.980392	0.019608
339.6674	1.006441	6.347422	0.964236	0.035764	0.960784	0.039216
339.6983	1.013843	5.502236	0.948163	0.051837	0.941177	0.058824
339.7365	1.023581	4.829447	0.934764	0.065236	0.921569	0.078431
339.7824	1.035406	4.285877	0.923815	0.076185	0.901961	0.098039
339.8343	1.049123	3.840946	0.914888	0.085112	0.882353	0.117647
339.8906	1.064574	3.472499	0.90756	0.09244	0.862745	0.137255
339.9496	1.081637	3.164185	0.901463	0.098537	0.843137	0.156863
340.0106	1.100212	2.903741	0.8963	0.1037	0.823529	0.176471
340.0733	1.120223	2.68184	0.891839	0.108161	0.803922	0.196078
340.1379	1.141609	2.491298	0.887894	0.112106	0.784314	0.215686
340.2049	1.16432	2.326516	0.884321	0.115679	0.764706	0.235294
340.275	1.188321	2.183084	0.881009	0.118991	0.745098	0.254902
340.3492	1.213583	2.057496	0.877864	0.122136	0.72549	0.27451
340.4285	1.240085	1.946937	0.874814	0.125186	0.705882	0.294118
340.5143	1.26781	1.849128	0.871799	0.128201	0.686275	0.313726
340.6078	1.296744	1.76221	0.868767	0.131234	0.666667	0.333333
340.7106	1.326877	1.684656	0.865672	0.134328	0.647059	0.352941
340.8242	1.358197	1.615203	0.862476	0.137524	0.627451	0.372549
340.9502	1.390693	1.552797	0.859139	0.140861	0.607843	0.392157
341.0905	1.42435	1.496557	0.855627	0.144373	0.588235	0.411765

341.2471	1.459148	1.445741	0.851901	0.148099	0.568628	0.431373
341.422	1.495059	1.39972	0.847922	0.152078	0.54902	0.45098
341.6178	1.532049	1.357959	0.843654	0.156346	0.529412	0.470588
341.837	1.570067	1.320002	0.839052	0.160948	0.509804	0.490196
342.0824	1.609049	1.285456	0.834065	0.165935	0.490196	0.509804
342.3574	1.648911	1.253985	0.82864	0.17136	0.470588	0.529412
342.6655	1.689541	1.225298	0.822713	0.177288	0.45098	0.54902
343.0107	1.730801	1.199142	0.81621	0.18379	0.431373	0.568628
343.3976	1.772511	1.175299	0.809047	0.190953	0.411765	0.588235
343.8315	1.81445	1.153577	0.801123	0.198877	0.392157	0.607843
344.3181	1.856339	1.133811	0.79232	0.20768	0.372549	0.627451
344.8641	1.897839	1.115855	0.782496	0.217504	0.352941	0.647059
345.477	1.938532	1.099583	0.771482	0.228518	0.333333	0.666667
346.1654	1.977916	1.084881	0.759074	0.240926	0.313726	0.686275
346.939	2.015389	1.071653	0.745027	0.254973	0.294118	0.705882
347.8087	2.050238	1.059811	0.729047	0.270954	0.27451	0.72549
348.7866	2.081638	1.049277	0.710775	0.289225	0.254902	0.745098
349.8862	2.108645	1.03998	0.689785	0.310215	0.235294	0.764706
351.122	2.130208	1.031855	0.665564	0.334436	0.215686	0.784314
352.5092	2.145202	1.02484	0.637503	0.362497	0.196078	0.803922
354.064	2.152448	1.018874	0.604912	0.395088	0.176471	0.823529
355.8005	2.150852	1.013895	0.566992	0.433009	0.156863	0.843137
357.731	2.139453	1.009834	0.522896	0.477104	0.137255	0.862745
359.8637	2.1176	1.006621	0.471775	0.528225	0.117647	0.882353
362.1996	2.08509	1.004171	0.412875	0.587125	0.098039	0.901961
364.7306	2.042301	1.002396	0.345678	0.654322	0.078431	0.921569
367.4386	1.990226	1.001196	0.270064	0.729936	0.058824	0.941177
370.2904	1.930566	1.000466	0.186451	0.813549	0.039216	0.960784
373.2465	1.86536	1.000101	0.095888	0.904112	0.019608	0.980392
376.2599	1.796871	1	0	1	0	1

E.3.2 ELV 2 - isobárico calculado a 9330 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
317.6041	1	9.688262	1	0	1	0
317.687	1.001811	8.042142	0.983653	0.016347	0.980392	0.019608
317.7299	1.006894	6.797514	0.966131	0.03387	0.960784	0.039216
317.767	1.014811	5.835258	0.950819	0.049181	0.941177	0.058824
317.8072	1.02522	5.077907	0.938327	0.061673	0.921569	0.078431

317.8516	1.037848	4.472557	0.928374	0.071626	0.901961	0.098039
317.8988	1.05248	3.982002	0.920472	0.079528	0.882353	0.117647
317.9473	1.068944	3.57952	0.91415	0.08585	0.862745	0.137255
317.9961	1.087103	3.245584	0.909014	0.090986	0.843137	0.156863
318.0448	1.106849	2.96571	0.904755	0.095245	0.823529	0.176471
318.0935	1.128093	2.728999	0.901131	0.098869	0.803922	0.196078
318.1427	1.150767	2.52714	0.897958	0.102042	0.784314	0.215686
318.1929	1.174815	2.353722	0.895092	0.104908	0.764706	0.235294
318.2451	1.200192	2.203738	0.892424	0.107577	0.745098	0.254902
318.3004	1.226865	2.073238	0.889864	0.110136	0.72549	0.27451
318.3599	1.254808	1.959073	0.887342	0.112658	0.705882	0.294118
318.4247	1.284001	1.858707	0.884802	0.115198	0.686275	0.313726
318.4961	1.314432	1.770081	0.882196	0.117804	0.666667	0.333333
318.5754	1.346096	1.691511	0.879482	0.120518	0.647059	0.352941
318.6637	1.378994	1.621604	0.876625	0.123375	0.627451	0.372549
318.7625	1.41313	1.559202	0.873593	0.126407	0.607843	0.392157
318.873	1.448519	1.503337	0.870353	0.129647	0.588235	0.411765
318.9965	1.485181	1.453191	0.866878	0.133122	0.568628	0.431373
319.1345	1.523143	1.408072	0.863138	0.136862	0.54902	0.45098
319.2884	1.56244	1.367388	0.859103	0.140897	0.529412	0.470588
319.4597	1.603116	1.330633	0.854743	0.145257	0.509804	0.490196
319.65	1.645224	1.297368	0.850025	0.149975	0.490196	0.509804
319.8611	1.68883	1.267217	0.844914	0.155087	0.470588	0.529412
320.0946	1.734007	1.23985	0.839369	0.160631	0.45098	0.54902
320.3527	1.780844	1.21498	0.833346	0.166654	0.431373	0.568628
320.6377	1.829443	1.192355	0.826797	0.173203	0.411765	0.588235
320.9519	1.879921	1.171754	0.819663	0.180337	0.392157	0.607843
321.2983	1.932409	1.152982	0.811875	0.188125	0.372549	0.627451
321.6802	1.98706	1.135868	0.80336	0.19664	0.352941	0.647059
322.1014	2.044042	1.120259	0.794022	0.205978	0.333333	0.666667
322.5664	2.103544	1.106019	0.783752	0.216248	0.313726	0.686275
323.0804	2.165776	1.093028	0.772415	0.227586	0.294118	0.705882
323.6499	2.230966	1.081181	0.759845	0.240155	0.27451	0.72549
324.2828	2.299356	1.070381	0.745839	0.254161	0.254902	0.745098
324.9886	2.371197	1.060545	0.73014	0.26986	0.235294	0.764706
325.7792	2.44673	1.051598	0.712409	0.287592	0.215686	0.784314
326.6703	2.526155	1.043474	0.692242	0.307758	0.196078	0.803922
327.6815	2.609576	1.036115	0.669058	0.330942	0.176471	0.823529
328.8387	2.696895	1.029471	0.642089	0.357911	0.156863	0.843137

330.1768	2.787615	1.023499	0.610272	0.389728	0.137255	0.862745
331.7432	2.880468	1.018166	0.5721	0.4279	0.117647	0.882353
333.6043	2.97272	1.013445	0.525384	0.474616	0.098039	0.901961
335.8537	3.058863	1.009323	0.466883	0.533117	0.078431	0.921569
338.6199	3.128397	1.005807	0.391786	0.608214	0.058824	0.941177
342.0674	3.162903	1.002942	0.293366	0.706634	0.039216	0.960784
346.3491	3.13688	1.000871	0.163998	0.836002	0.019608	0.980392
351.4678	3.036568	1	0	1	0	1

E.3.3 ELV 3 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
339.5685	1	9.067276	1	0	1	0
339.6274	1.001842	7.507971	0.982214	0.017786	0.980392	0.019608
339.6571	1.007	6.331991	0.964374	0.035626	0.960784	0.039216
339.6895	1.015017	5.426437	0.949205	0.050795	0.941177	0.058824
339.7304	1.025529	4.716634	0.937	0.063	0.921569	0.078431
339.7785	1.038248	4.151473	0.927339	0.072661	0.901961	0.098039
339.8313	1.052941	3.695125	0.919676	0.080324	0.882353	0.117647
339.8866	1.069419	3.32197	0.91352	0.08648	0.862745	0.137255
339.9432	1.087528	3.013369	0.908474	0.091526	0.843137	0.156863
340.0006	1.107141	2.755541	0.904228	0.095772	0.823529	0.176471
340.0591	1.128155	2.538149	0.900547	0.099453	0.803922	0.196078
340.1194	1.150481	2.353329	0.897251	0.102749	0.784314	0.215686
340.1825	1.174045	2.195029	0.894201	0.105799	0.764706	0.235294
340.2495	1.198787	2.058528	0.89129	0.10871	0.745098	0.254902
340.322	1.224654	1.940109	0.888434	0.111566	0.72549	0.27451
340.4012	1.251601	1.836813	0.885566	0.114434	0.705882	0.294118
340.4886	1.279593	1.746263	0.88263	0.11737	0.686275	0.313726
340.5858	1.308599	1.66653	0.87958	0.12042	0.666667	0.333333
340.6943	1.338594	1.596038	0.876377	0.123623	0.647059	0.352941
340.8155	1.36956	1.53349	0.872983	0.127017	0.627451	0.372549
340.9511	1.401482	1.477809	0.869367	0.130633	0.607843	0.392157
341.1025	1.434353	1.428093	0.865496	0.134504	0.588235	0.411765
341.2713	1.468169	1.383588	0.86134	0.13866	0.568628	0.431373
341.4591	1.502933	1.343652	0.856867	0.143133	0.54902	0.45098
341.6677	1.538652	1.307741	0.852044	0.147956	0.529412	0.470588
341.8987	1.575341	1.27539	0.846837	0.153163	0.509804	0.490196
342.1539	1.613019	1.246199	0.841207	0.158793	0.490196	0.509804

342.4354	1.651714	1.219823	0.835115	0.164886	0.470588	0.529412
342.7452	1.69146	1.195963	0.828513	0.171487	0.45098	0.54902
343.0856	1.7323	1.174359	0.821351	0.178649	0.431373	0.568628
343.4591	1.774286	1.154783	0.813571	0.186429	0.411765	0.588235
343.8685	1.817478	1.137036	0.805106	0.194894	0.392157	0.607843
344.317	1.861949	1.120944	0.79588	0.20412	0.372549	0.627451
344.8082	1.907783	1.106351	0.785805	0.214195	0.352941	0.647059
345.346	1.955081	1.093121	0.774777	0.225223	0.333333	0.666667
345.9352	2.003955	1.081134	0.762673	0.237327	0.313726	0.686275
346.5814	2.05454	1.070283	0.749349	0.250651	0.294118	0.705882
347.2908	2.106988	1.060472	0.734623	0.265377	0.27451	0.72549
348.0713	2.161478	1.051617	0.718304	0.281696	0.254902	0.745098
348.9321	2.218216	1.043645	0.700122	0.299878	0.235294	0.764706
349.8844	2.277441	1.036487	0.679757	0.320243	0.215686	0.784314
350.942	2.339428	1.030085	0.656807	0.343193	0.196078	0.803922
352.1221	2.404499	1.024389	0.630761	0.369239	0.176471	0.823529
353.4466	2.473023	1.019354	0.600959	0.399041	0.156863	0.843137
354.9436	2.545425	1.01494	0.566534	0.433466	0.137255	0.862745
356.6505	2.622186	1.011118	0.526323	0.473677	0.117647	0.882353
358.6172	2.703833	1.007863	0.478729	0.521271	0.098039	0.901961
360.9134	2.79091	1.005158	0.421508	0.578492	0.078431	0.921569
363.637	2.883875	1.002998	0.351361	0.648639	0.058824	0.941177
366.9341	2.982871	1.001391	0.263426	0.736574	0.039216	0.960784
371.0258	3.087131	1.000368	0.150194	0.849806	0.019608	0.980392
376.26	3.193534	1	0	1	0	1

E.3.4 ELV 4 - isobárico calculado a 101320 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
373.1665	1	6.3797	1	0	1	0
373.2907	1.001431	5.499859	0.984373	0.015627	0.980392	0.019608
373.3857	1.00542	4.814296	0.968976	0.031024	0.960784	0.039216
373.4785	1.011589	4.268892	0.954996	0.045004	0.941177	0.058824
373.5747	1.019643	3.827831	0.942656	0.057344	0.921569	0.078431
373.6758	1.029349	3.466075	0.931832	0.068168	0.901961	0.098039
373.7821	1.040523	3.165641	0.922293	0.077707	0.882353	0.117647
373.8932	1.053019	2.913339	0.913802	0.086198	0.862745	0.137255
374.009	1.066722	2.699321	0.906146	0.093854	0.843137	0.156863
374.1297	1.081542	2.516123	0.899145	0.100855	0.823529	0.176471

374.2555	1.097408	2.358012	0.892651	0.107349	0.803922	0.196078
374.387	1.114266	2.220529	0.886541	0.113459	0.784314	0.215686
374.5247	1.132074	2.100165	0.880717	0.119283	0.764706	0.235294
374.6696	1.150802	1.994135	0.875097	0.124903	0.745098	0.254902
374.8224	1.170428	1.900203	0.869612	0.130389	0.72549	0.27451
374.984	1.190941	1.816559	0.864203	0.135797	0.705882	0.294118
375.1554	1.212332	1.741727	0.858822	0.141179	0.686275	0.313726
375.3377	1.234602	1.674492	0.853422	0.146578	0.666667	0.333333
375.532	1.257753	1.613847	0.847966	0.152034	0.647059	0.352941
375.7395	1.281795	1.558955	0.842414	0.157586	0.627451	0.372549
375.9614	1.30674	1.50911	0.836732	0.163268	0.607843	0.392157
376.1991	1.332603	1.463719	0.830885	0.169115	0.588235	0.411765
376.4541	1.359402	1.422275	0.824839	0.175162	0.568628	0.431373
376.7279	1.387159	1.384349	0.818557	0.181443	0.54902	0.45098
377.0223	1.415897	1.34957	0.812003	0.187997	0.529412	0.470588
377.3391	1.445642	1.31762	0.805138	0.194863	0.509804	0.490196
377.6804	1.476422	1.288223	0.797918	0.202082	0.490196	0.509804
378.0483	1.508268	1.26114	0.790299	0.209701	0.470588	0.529412
378.4456	1.541209	1.236161	0.782229	0.217772	0.45098	0.54902
378.8748	1.57528	1.213103	0.77365	0.22635	0.431373	0.568628
379.3392	1.610513	1.191805	0.764499	0.235501	0.411765	0.588235
379.8422	1.646944	1.172126	0.754702	0.245298	0.392157	0.607843
380.3878	1.684606	1.15394	0.744177	0.255823	0.372549	0.627451
380.9804	1.723535	1.137136	0.732828	0.267173	0.352941	0.647059
381.6252	1.763764	1.121615	0.720542	0.279459	0.333333	0.666667
382.328	1.805322	1.10729	0.707189	0.292811	0.313726	0.686275
383.0955	1.848237	1.094084	0.692616	0.307384	0.294118	0.705882
383.9356	1.89253	1.081926	0.676641	0.323359	0.27451	0.72549
384.8573	1.938212	1.070755	0.659045	0.340955	0.254902	0.745098
385.8715	1.98528	1.060518	0.639565	0.360435	0.235294	0.764706
386.9909	2.033714	1.051165	0.617883	0.382117	0.215686	0.784314
388.2307	2.083464	1.042655	0.593606	0.406395	0.196078	0.803922
389.6092	2.134441	1.034952	0.566249	0.433751	0.176471	0.823529
391.1484	2.186506	1.028028	0.535206	0.464794	0.156863	0.843137
392.8755	2.23944	1.021858	0.499715	0.500285	0.137255	0.862745
394.8235	2.29292	1.016426	0.458808	0.541192	0.117647	0.882353
397.0338	2.346482	1.011725	0.411247	0.588753	0.098039	0.901961
399.5577	2.399467	1.007758	0.355445	0.644555	0.078431	0.921569
402.4585	2.450984	1.004544	0.289357	0.710643	0.058824	0.941177

405.8141	2.499892	1.002121	0.210383	0.789617	0.039216	0.960784
409.7205	2.544826	1.000563	0.115254	0.884747	0.019608	0.980392
414.2921	2.584474	1	0	1	0	1

E.3.5 ELV 6 - isobárico calculado a 13330 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
324.6951	1	9.593441	1	0	1	0
324.7677	1.001887	7.915113	0.983049	0.016951	0.980392	0.019608
324.8047	1.007172	6.651374	0.965501	0.034499	0.960784	0.039216
324.8394	1.015386	5.681906	0.950522	0.049478	0.941177	0.058824
324.8791	1.026161	4.925129	0.938512	0.061488	0.921569	0.078431
324.9235	1.0392	4.324804	0.929066	0.070934	0.901961	0.098039
324.9704	1.05427	3.84156	0.921635	0.078365	0.882353	0.117647
325.0183	1.071182	3.447394	0.91572	0.08428	0.862745	0.137255
325.0662	1.089784	3.122067	0.910922	0.089078	0.843137	0.156863
325.1138	1.109953	2.850711	0.906927	0.093073	0.823529	0.176471
325.1615	1.131588	2.622238	0.903499	0.096501	0.803922	0.196078
325.2097	1.154608	2.428255	0.900456	0.099544	0.784314	0.215686
325.2596	1.178945	2.262324	0.897658	0.102342	0.764706	0.235294
325.3121	1.204546	2.119439	0.894997	0.105003	0.745098	0.254902
325.3684	1.231367	1.995663	0.89239	0.10761	0.72549	0.27451
325.4297	1.259378	1.887866	0.889767	0.110233	0.705882	0.294118
325.4972	1.288558	1.793531	0.887076	0.112924	0.686275	0.313726
325.5722	1.318893	1.710615	0.884271	0.115729	0.666667	0.333333
325.6559	1.350384	1.637448	0.881315	0.118685	0.647059	0.352941
325.7494	1.383039	1.57265	0.878175	0.121826	0.627451	0.372549
325.8538	1.416877	1.515073	0.874821	0.125179	0.607843	0.392157
325.9704	1.45193	1.463755	0.871229	0.128771	0.588235	0.411765
326.1002	1.488238	1.417888	0.867373	0.132627	0.568628	0.431373
326.2444	1.525856	1.376784	0.863228	0.136772	0.54902	0.45098
326.4041	1.56485	1.339859	0.85877	0.14123	0.529412	0.470588
326.5806	1.6053	1.306612	0.853974	0.146026	0.509804	0.490196
326.7753	1.647301	1.276612	0.848812	0.151188	0.490196	0.509804
326.9894	1.690961	1.249487	0.843255	0.156745	0.470588	0.529412
327.2248	1.736404	1.224916	0.83727	0.16273	0.45098	0.54902
327.483	1.783772	1.202618	0.830819	0.169181	0.431373	0.568628
327.7661	1.833224	1.18235	0.823859	0.176141	0.411765	0.588235
328.0765	1.884938	1.163899	0.816341	0.183659	0.392157	0.607843

328.417	1.939108	1.147077	0.808206	0.191794	0.372549	0.627451
328.7907	1.99595	1.13172	0.799383	0.200617	0.352941	0.647059
329.2016	2.055694	1.117684	0.789788	0.210212	0.333333	0.666667
329.6545	2.118581	1.104843	0.779317	0.220684	0.313726	0.686275
330.1551	2.184858	1.093084	0.767841	0.232159	0.294118	0.705882
330.7107	2.254752	1.082307	0.755199	0.244801	0.27451	0.72549
331.3304	2.328446	1.072426	0.741184	0.258816	0.254902	0.745098
332.0262	2.406013	1.063363	0.725527	0.274473	0.235294	0.764706
332.8134	2.487305	1.055051	0.707868	0.292132	0.215686	0.784314
333.713	2.571753	1.047428	0.687715	0.312286	0.196078	0.803922
334.7539	2.657962	1.040444	0.664371	0.33563	0.176471	0.823529
335.9773	2.742935	1.034051	0.636816	0.363184	0.156863	0.843137
337.4445	2.820468	1.028211	0.603489	0.396511	0.137255	0.862745
339.2498	2.87778	1.022886	0.561879	0.438121	0.117647	0.882353
341.5478	2.888002	1.018043	0.507749	0.492251	0.098039	0.901961
344.5696	2.797523	1.013625	0.433973	0.566027	0.078431	0.921569
348.5279	2.528104	1.009497	0.331961	0.668039	0.058824	0.941177
352.9171	2.119192	1.005438	0.209754	0.790246	0.039216	0.960784
356.5664	1.807922	1.001788	0.09795	0.90205	0.019608	0.980392
359.4682	1.683163	1	0	1	0	1

E.3.6 ELV 7 - isobárico calculado a 101330 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
373.1692	1	7.142693	1	0	1	0
373.2348	1.001186	6.300636	0.981687	0.018313	0.980392	0.019608
373.2588	1.004458	5.646623	0.962152	0.037848	0.960784	0.039216
373.2741	1.009466	5.121446	0.943073	0.056927	0.941177	0.058824
373.2917	1.015937	4.690747	0.92506	0.07494	0.921569	0.078431
373.3164	1.023659	4.331598	0.908254	0.091746	0.901961	0.098039
373.3506	1.032463	4.027915	0.892606	0.107394	0.882353	0.117647
373.3957	1.042219	3.768017	0.877996	0.122004	0.862745	0.137255
373.4521	1.052823	3.543194	0.864286	0.135714	0.843137	0.156863
373.5204	1.064196	3.346815	0.851348	0.148652	0.823529	0.176471
373.6008	1.076277	3.173753	0.839066	0.160934	0.803922	0.196078
373.6938	1.089021	3.019986	0.827343	0.172658	0.784314	0.215686
373.7999	1.102394	2.882327	0.816095	0.183905	0.764706	0.235294
373.9194	1.116373	2.758224	0.805254	0.194746	0.745098	0.254902

374.053	1.130945	2.645613	0.794761	0.205239	0.72549	0.27451
374.2013	1.146102	2.542819	0.784566	0.215434	0.705882	0.294118
374.3649	1.161842	2.448463	0.774627	0.225373	0.686275	0.313726
374.5447	1.178169	2.361411	0.764903	0.235097	0.666667	0.333333
374.7414	1.195089	2.280719	0.755361	0.244639	0.647059	0.352941
374.956	1.212612	2.205598	0.745967	0.254034	0.627451	0.372549
375.1895	1.23075	2.135386	0.736688	0.263312	0.607843	0.392157
375.4431	1.249516	2.069523	0.727495	0.272506	0.588235	0.411765
375.7181	1.268921	2.007533	0.718353	0.281647	0.568628	0.431373
376.0158	1.288979	1.949009	0.709231	0.290769	0.54902	0.45098
376.338	1.309698	1.893603	0.700091	0.299909	0.529412	0.470588
376.6866	1.331082	1.841014	0.690896	0.309104	0.509804	0.490196
377.0637	1.353131	1.79098	0.681603	0.318397	0.490196	0.509804
377.4718	1.375833	1.743274	0.672165	0.327835	0.470588	0.529412
377.9138	1.399162	1.697698	0.662527	0.337473	0.45098	0.54902
378.3931	1.423074	1.654075	0.652627	0.347373	0.431373	0.568628
378.9136	1.447497	1.612252	0.642394	0.357606	0.411765	0.588235
379.48	1.472327	1.572092	0.631743	0.368257	0.392157	0.607843
380.0977	1.497412	1.533476	0.620575	0.379425	0.372549	0.627451
380.773	1.522538	1.496296	0.608771	0.391229	0.352941	0.647059
381.5199	1.547162	1.460386	0.596173	0.403827	0.333333	0.666667
382.3485	1.570758	1.425674	0.58258	0.41742	0.313726	0.686275
383.2641	1.592963	1.392163	0.567787	0.432214	0.294118	0.705882
384.2841	1.612772	1.359753	0.551502	0.448499	0.27451	0.72549
385.4291	1.628858	1.328371	0.533355	0.466645	0.254902	0.745098
386.7156	1.639922	1.298012	0.512943	0.487057	0.235294	0.764706
388.1646	1.644275	1.26866	0.489776	0.510224	0.215686	0.784314
389.7862	1.6409	1.240374	0.463427	0.536573	0.196078	0.803922
391.5727	1.630362	1.21326	0.433691	0.566309	0.176471	0.823529
393.4796	1.616967	1.187465	0.400919	0.599082	0.156863	0.843137
395.4168	1.611138	1.163095	0.366345	0.633656	0.137255	0.862745
397.2623	1.631343	1.140073	0.332078	0.667922	0.117647	0.882353
398.89	1.708071	1.118043	0.300767	0.699234	0.098039	0.901961
400.1667	1.901244	1.096417	0.275613	0.724388	0.078431	0.921569
400.8239	2.380156	1.074523	0.262589	0.737411	0.058824	0.941177
399.1641	4.15091	1.051848	0.293962	0.706038	0.039216	0.960784
325.0371	358.3641	1.028221	0.958799	0.041201	0.019608	0.980392
414.2953		1	0	1	0	1

E.3.7 ELV 8 - isobárico calculado a 74660 N/sqm.

T (°K)	γ (1)	γ (2)	x(1)	x (2)	y (1)	y (2)
0.999745	1	7.21893	1	0	1	0
1.002788	1.001523	6.175489	0.983126	0.016874	0.980392	0.019608
1.005726	1.005784	5.36386	0.966286	0.033714	0.960784	0.039216
1.0106	1.012403	4.720695	0.951153	0.048847	0.941177	0.058824
1.017887	1.021083	4.202732	0.938052	0.061948	0.921569	0.078431
1.027573	1.031591	3.779612	0.92683	0.07317	0.901961	0.098039
1.039488	1.043745	3.429556	0.917195	0.082805	0.882353	0.117647
1.053438	1.057403	3.136644	0.908849	0.091151	0.862745	0.137255
1.069251	1.072452	2.889036	0.901526	0.098474	0.843137	0.156863
1.086792	1.088806	2.677793	0.895005	0.104995	0.823529	0.176471
1.105961	1.106399	2.496069	0.889106	0.110894	0.803922	0.196078
1.126697	1.12518	2.338559	0.883684	0.116317	0.784314	0.215686
1.148964	1.145114	2.201099	0.878619	0.121381	0.764706	0.235294
1.172756	1.166178	2.080389	0.873818	0.126182	0.745098	0.254902
1.198088	1.188357	1.973787	0.869201	0.130799	0.72549	0.27451
1.224995	1.211646	1.879158	0.864702	0.135298	0.705882	0.294118
1.253532	1.236046	1.794764	0.860267	0.139733	0.686275	0.313726
1.283769	1.261566	1.719177	0.855846	0.144154	0.666667	0.333333
1.315796	1.288219	1.651215	0.851397	0.148603	0.647059	0.352941
1.349718	1.316025	1.589895	0.846882	0.153118	0.627451	0.372549
1.385659	1.345005	1.534395	0.842264	0.157737	0.607843	0.392157
1.423762	1.375188	1.484018	0.837507	0.162493	0.588235	0.411765
1.464189	1.406603	1.438177	0.832578	0.167422	0.568628	0.431373
1.507126	1.439283	1.396371	0.827441	0.172559	0.54902	0.45098
1.552781	1.473263	1.35817	0.82206	0.17794	0.529412	0.470588
1.601394	1.50858	1.323207	0.816397	0.183604	0.509804	0.490196
1.653232	1.545272	1.291162	0.810408	0.189592	0.490196	0.509804
1.708603	1.583377	1.26176	0.804048	0.195952	0.470588	0.529412
1.767854	1.622933	1.234762	0.797267	0.202733	0.45098	0.54902
1.83138	1.663977	1.209958	0.790007	0.209993	0.431373	0.568628
1.899633	1.706541	1.187166	0.782202	0.217798	0.411765	0.588235
1.973132	1.750658	1.166226	0.773777	0.226223	0.392157	0.607843
2.052473	1.796349	1.146995	0.764646	0.235354	0.372549	0.627451
2.138341	1.843631	1.129351	0.754709	0.245292	0.352941	0.647059
2.231536	1.892509	1.113184	0.743845	0.256155	0.333333	0.666667
2.332983	1.942972	1.098395	0.731916	0.268084	0.313726	0.686275

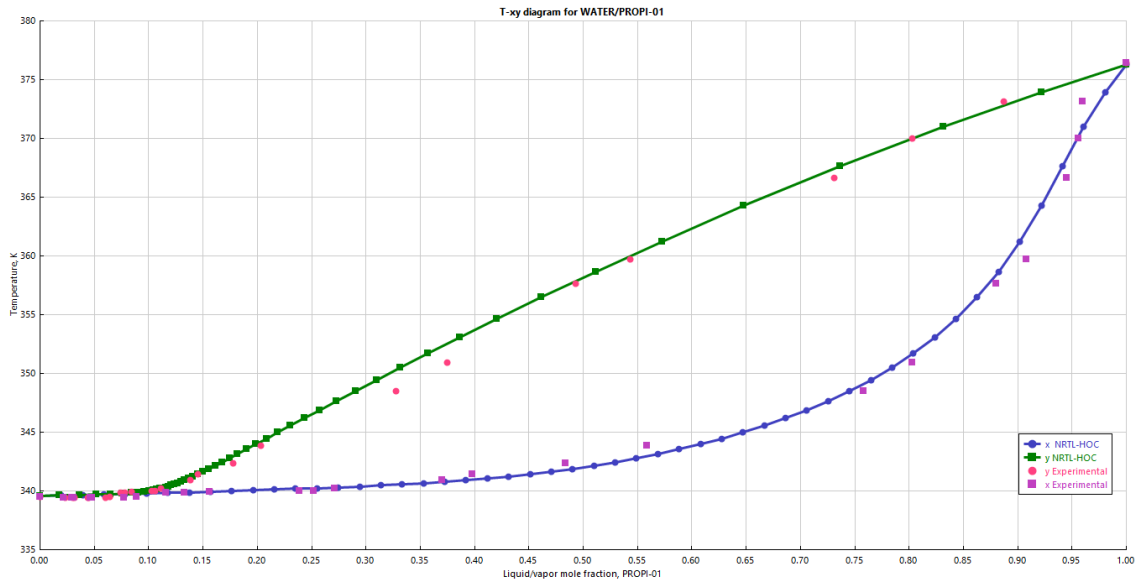
2.443766	1.994994	1.084901	0.718755	0.281246	0.294118	0.705882
2.565158	2.048521	1.072624	0.704161	0.295839	0.27451	0.72549
2.698634	2.103471	1.061496	0.687886	0.312114	0.254902	0.745098
2.846031	2.159721	1.051458	0.669654	0.330346	0.235294	0.764706
3.009434	2.2171	1.042455	0.649093	0.350907	0.215686	0.784314
3.191371	2.275376	1.034438	0.625759	0.374241	0.196078	0.803922
3.394876	2.334236	1.027365	0.599096	0.400904	0.176471	0.823529
3.623596	2.393272	1.021194	0.568407	0.431593	0.156863	0.843137
3.881927	2.451953	1.015889	0.532814	0.467187	0.137255	0.862745
4.175162	2.509594	1.011415	0.491195	0.508805	0.117647	0.882353
4.509678	2.565324	1.007738	0.442125	0.557875	0.098039	0.901961
4.892723	2.618057	1.004823	0.383743	0.616257	0.078431	0.921569
5.333003	2.666419	1.002635	0.313706	0.686294	0.058824	0.941177
5.839773	2.70874	1.001133	0.229011	0.770989	0.039216	0.960784
6.42218	2.743016	1.000273	0.125925	0.874075	0.019608	0.980392
7.087146	2.766935	1	0	1	0	1

ANEXO F

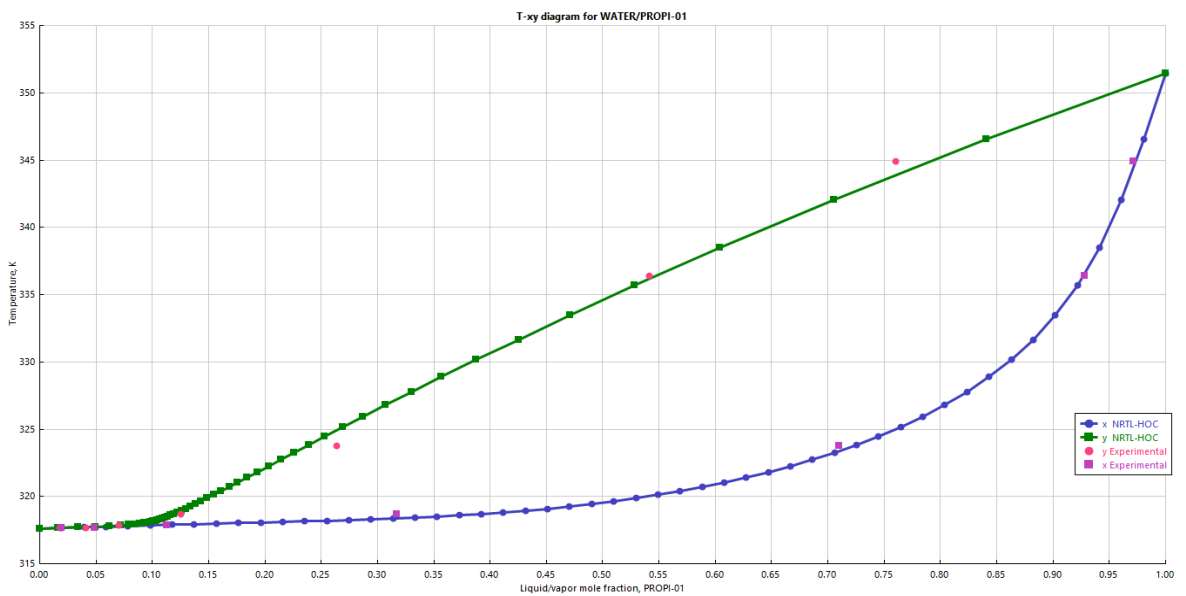
GRÁFICAS DE EQUILIBRIOS LÍQUIDO-VAPOR (ELV) DEL ÁCIDO PROPIÓNICO-AGUA CALCULADOS EN ASPEN PROPERTIES V9

F.1 Equilibrios calculados con NRTL – Hayden & O’Connell (NRTL-HOC)

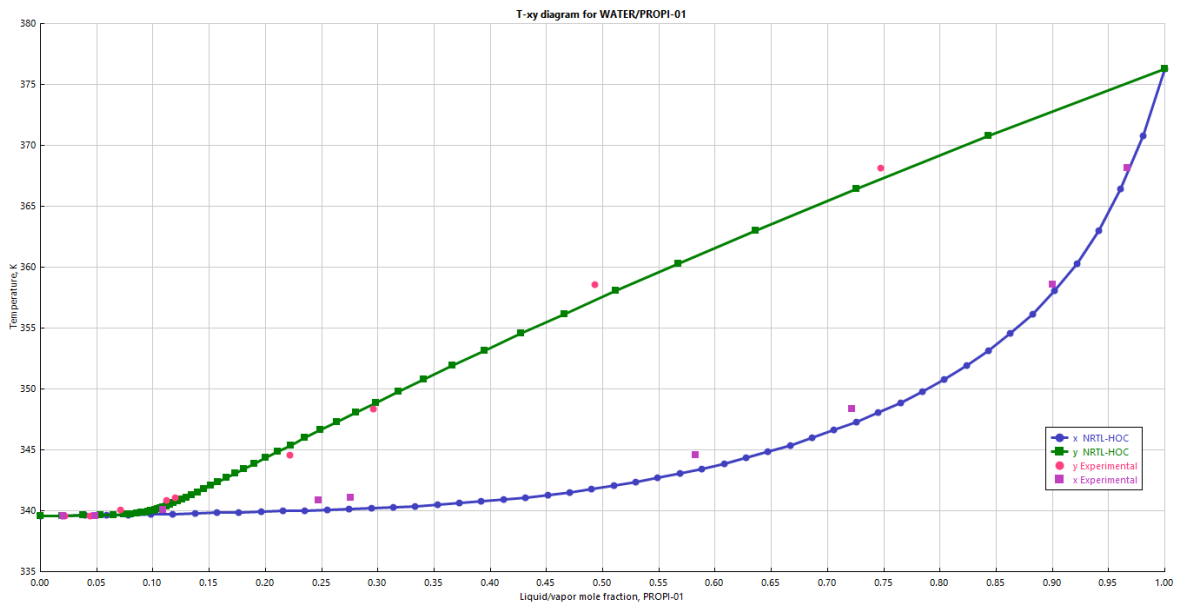
F.1.1 ELV 1 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.



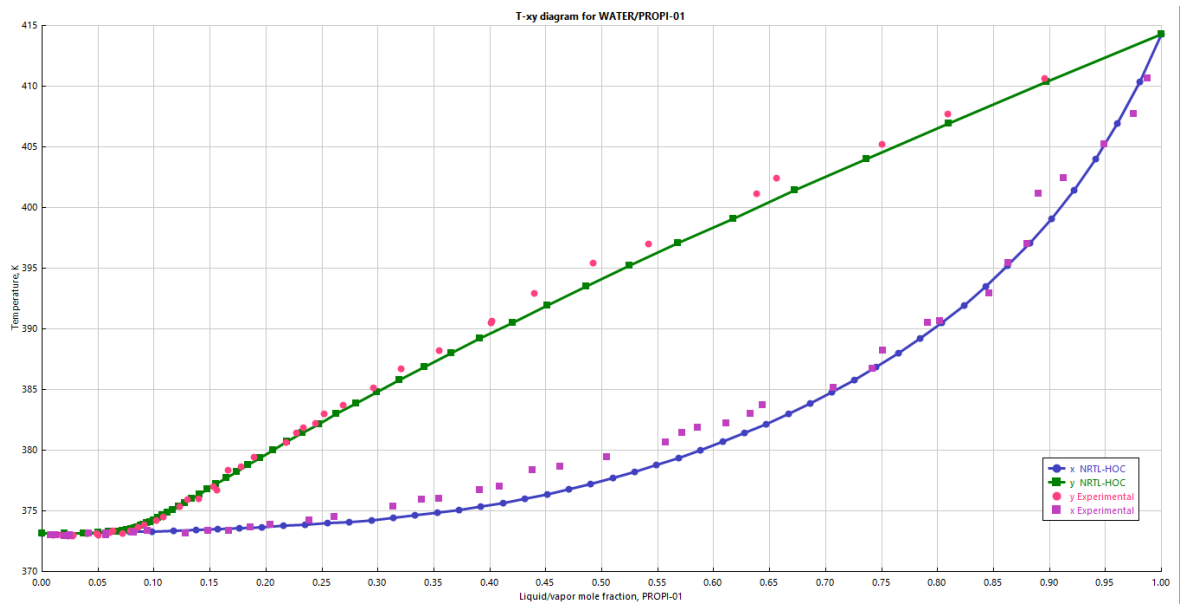
F.1.2 ELV 2 - isobárico calculado a 9330 N/sqm.



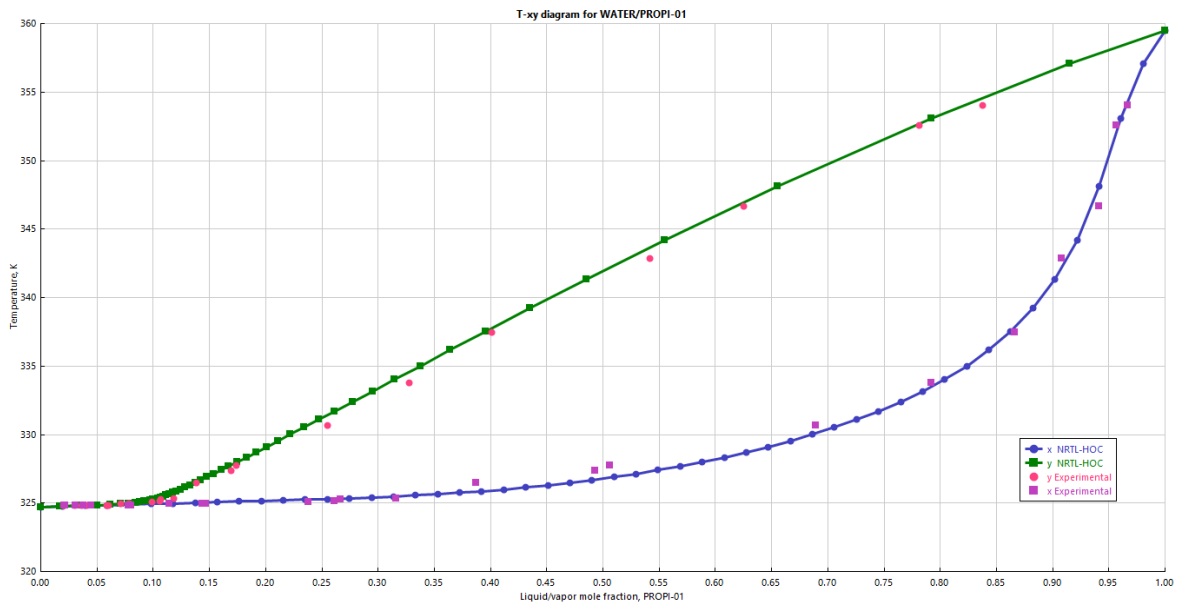
F.1.3 ELV 3 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.



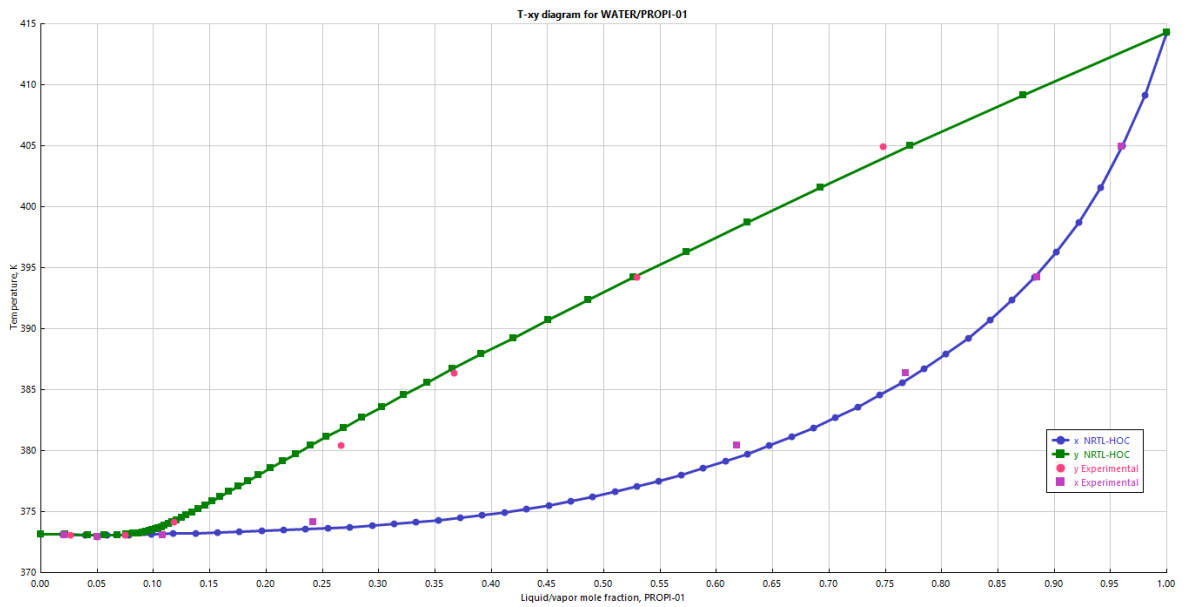
F.1.4 ELV 4 - isobárico calculado a 101320 N/sqm



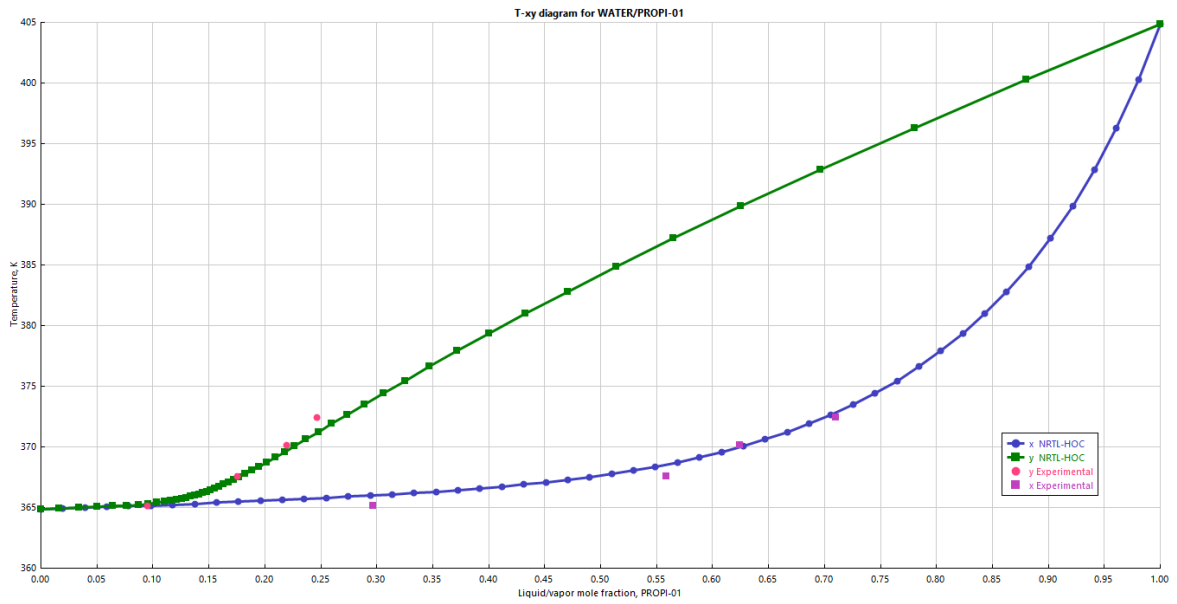
F.1.5 ELV 6 - isobárico calculado a 13330 N/sqm.



F.1.6 ELV 7 - isobárico calculado a 101330 N/sqm.

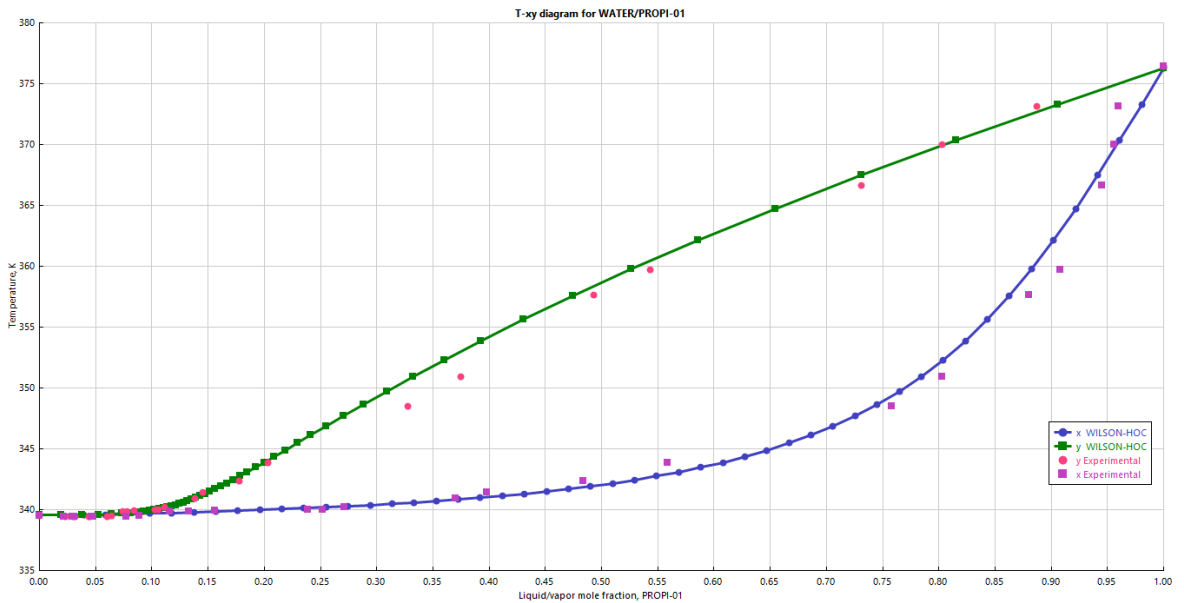


F.1.7 ELV 8 - isobárico calculado a 74660 N/sqm.

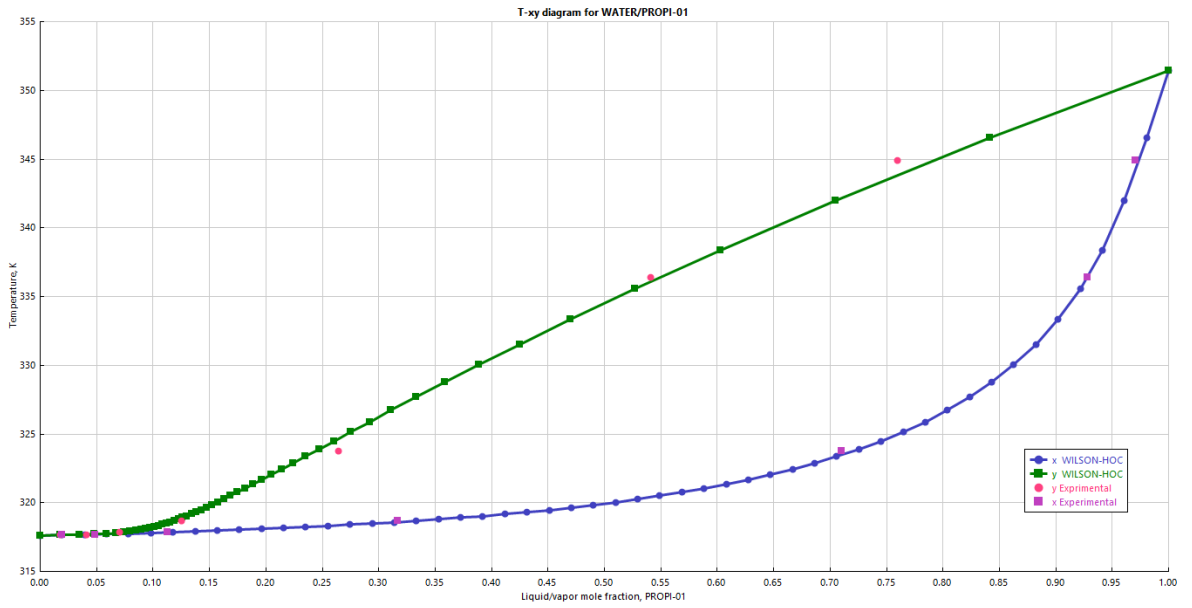


F.2. Equilibrios calculados con Wilson – Hayden & O’Connell (WILSON-HOC)

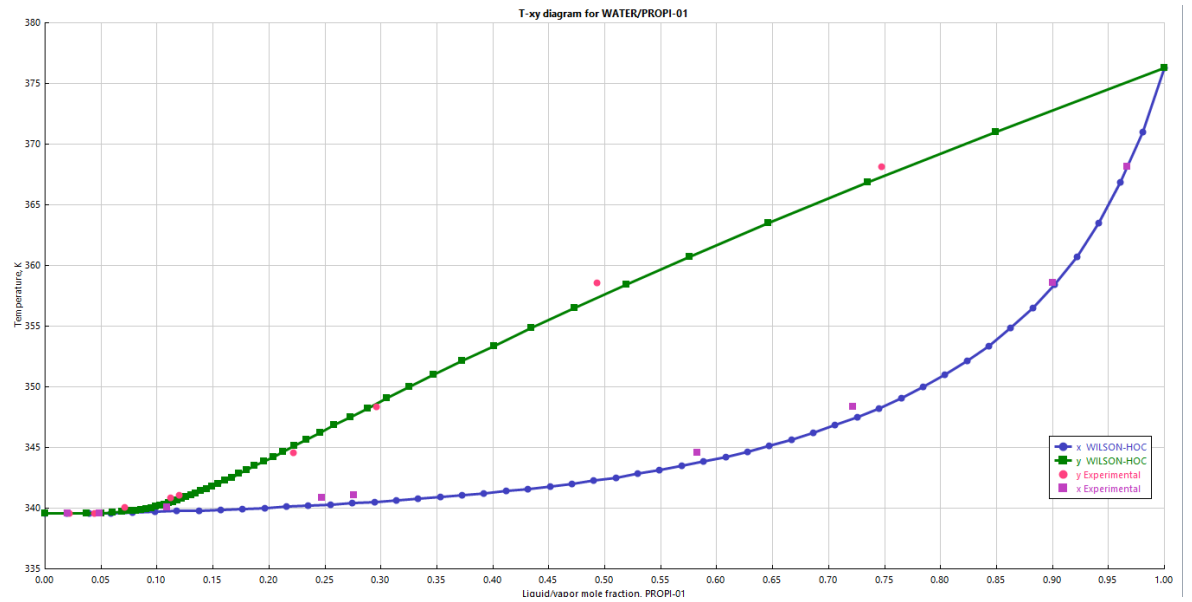
F.2.1 ELV 1 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.



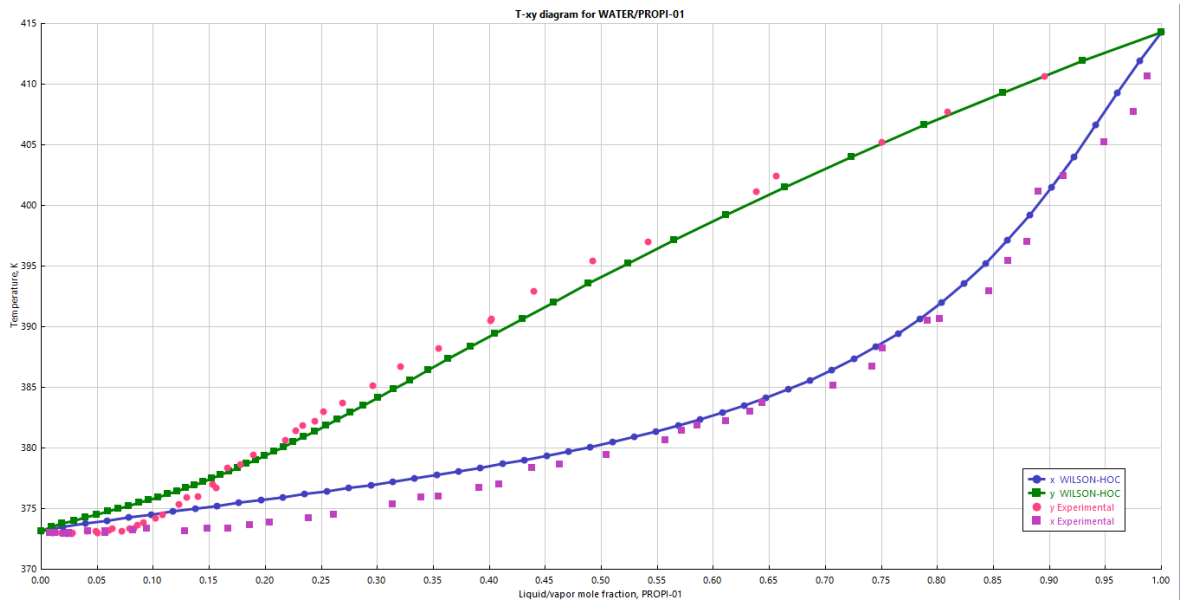
F.2.2 ELV 2 - isobárico calculado a 9330 N/sqm.



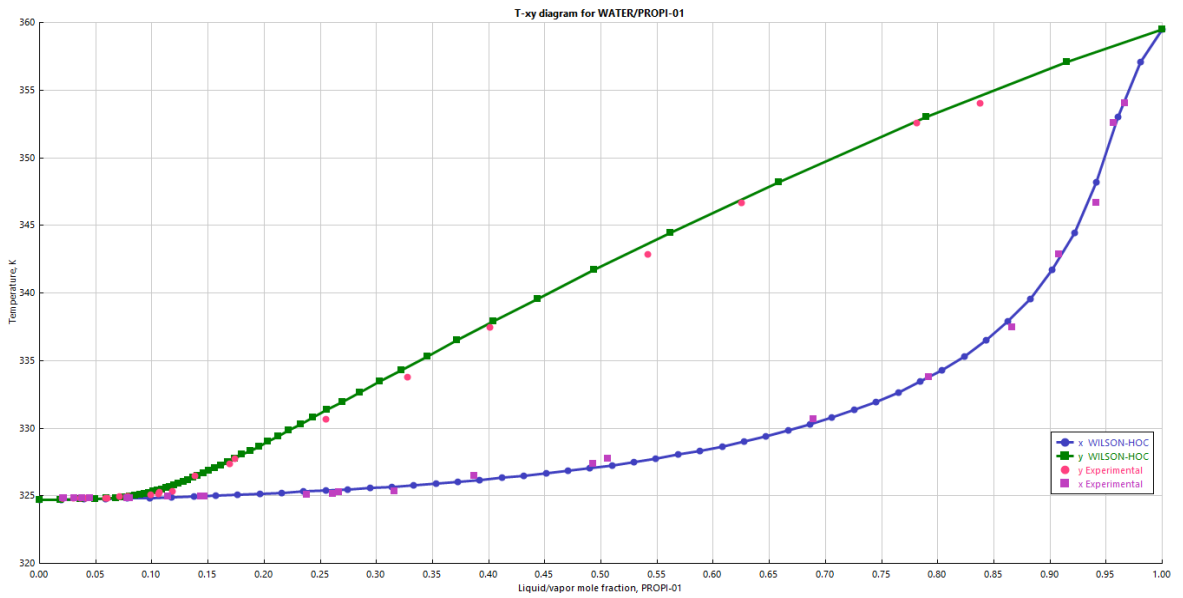
F.2.3 ELV 3 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.



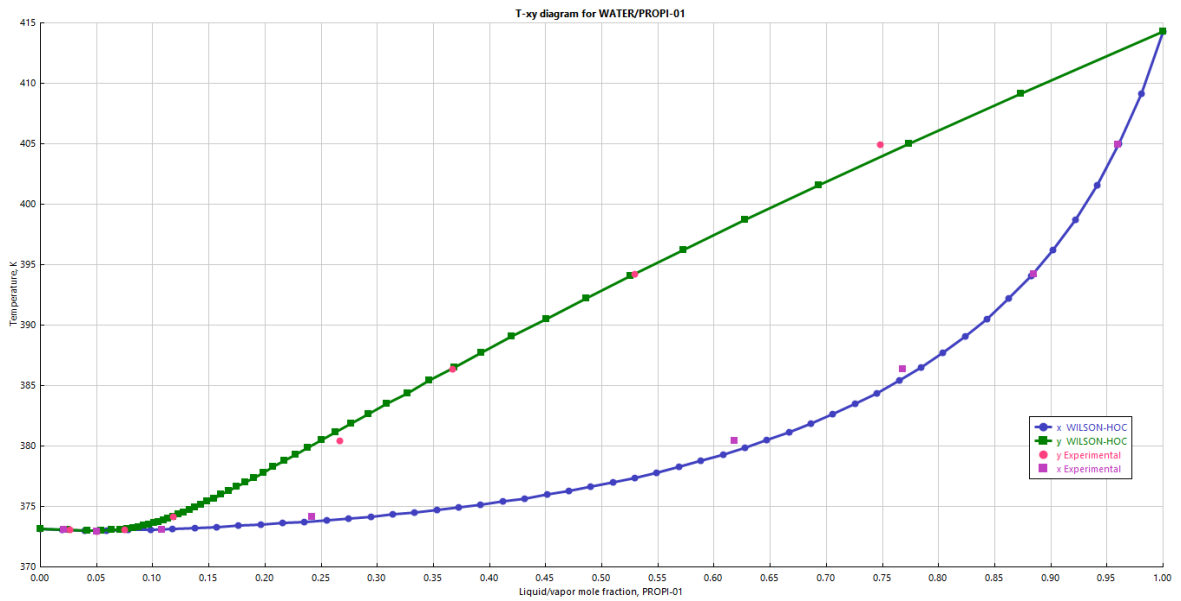
F.2.4 ELV 4 - isobárico calculado a 101320 N/sqm.



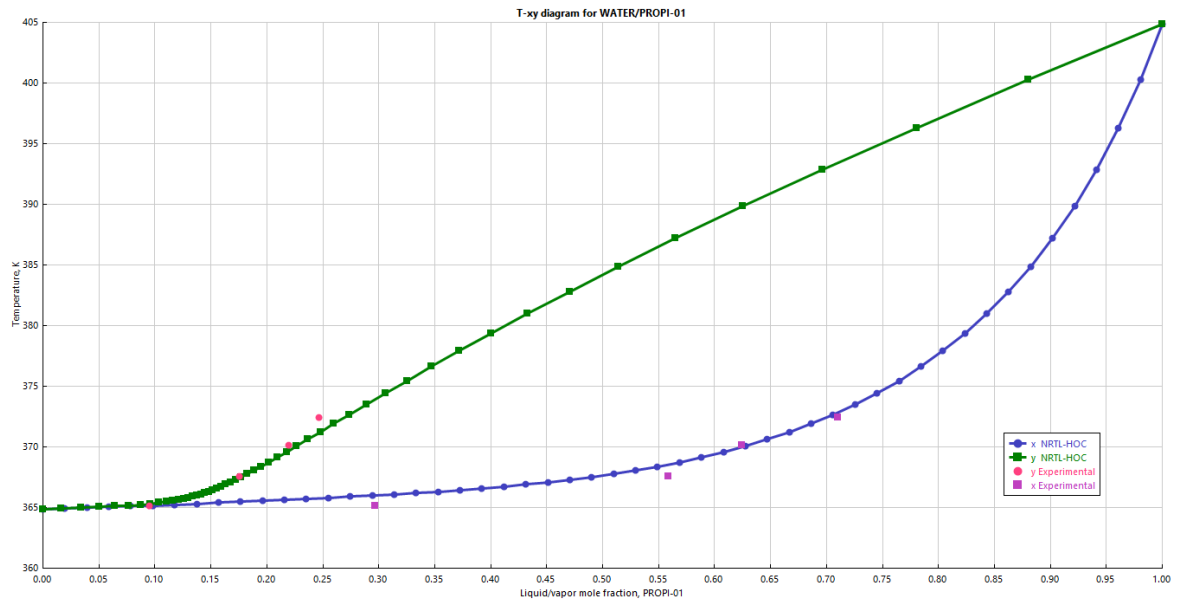
F.2.5 ELV 6 - isobárico calculado a 13330 N/sqm.



F.2.6 ELV 7 - isobárico calculado a 101330 N/sqm.

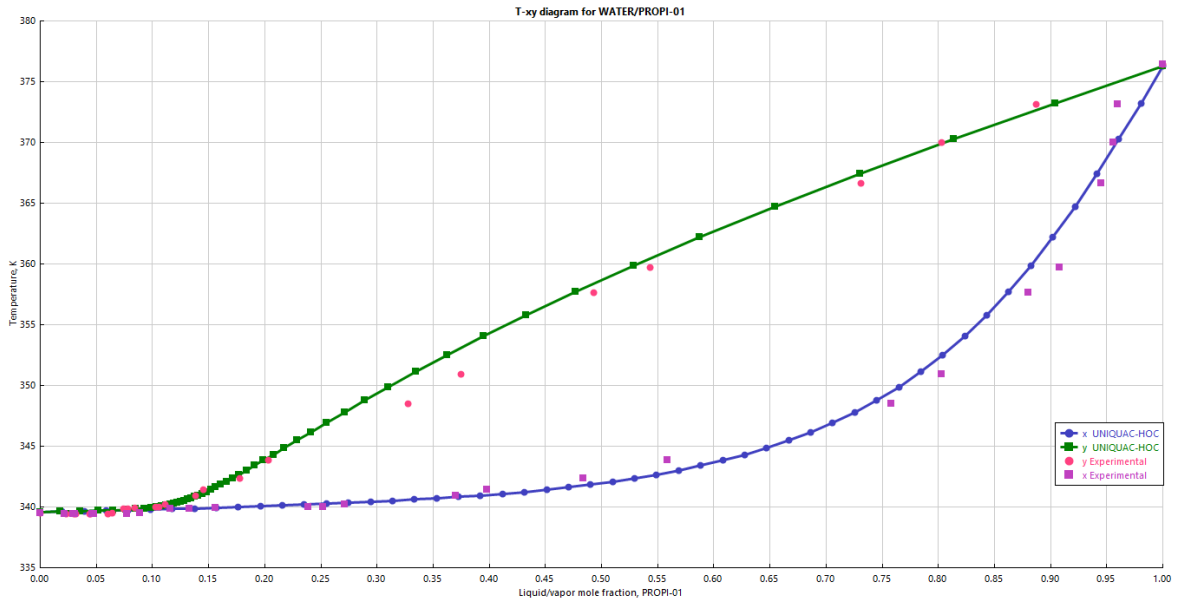


F.2.7 ELV 8 - isobárico calculado a 74660 N/sqm.

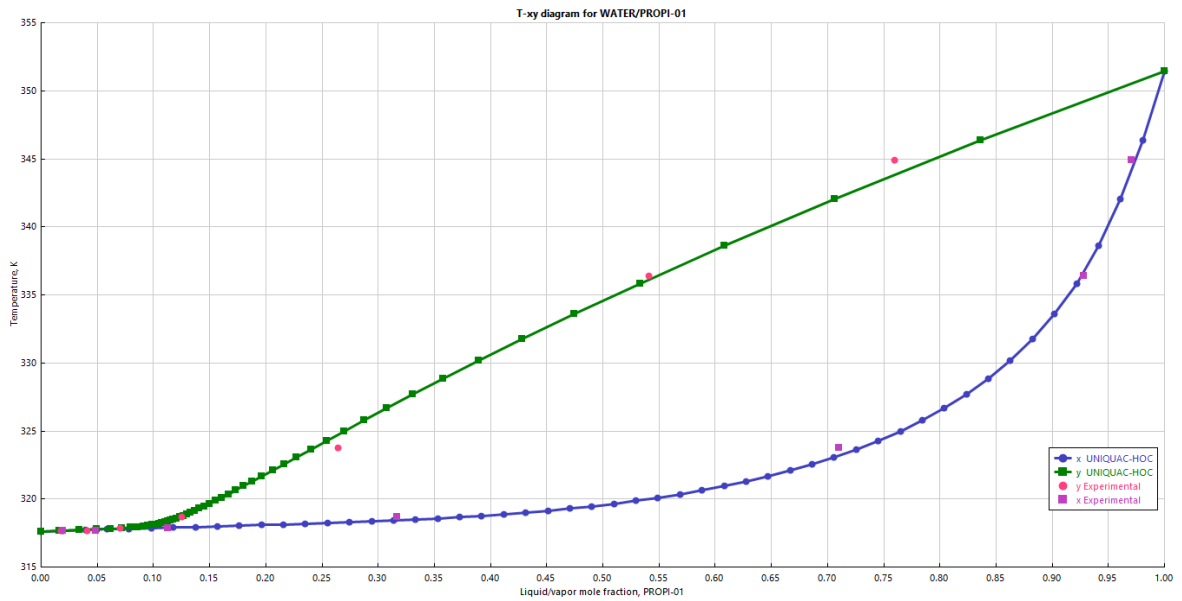


F.3 Equilibrios calculados con UNIQUAC – Hayden & O’Connell (UNIQUAC-HOC)

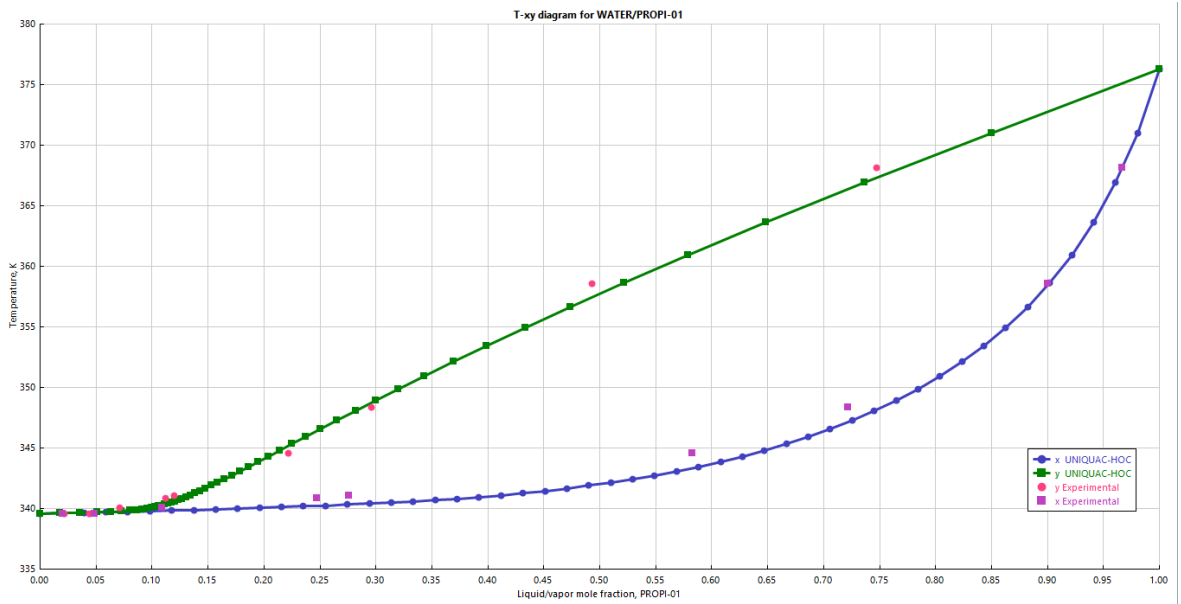
F.3.1 ELV 1 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.



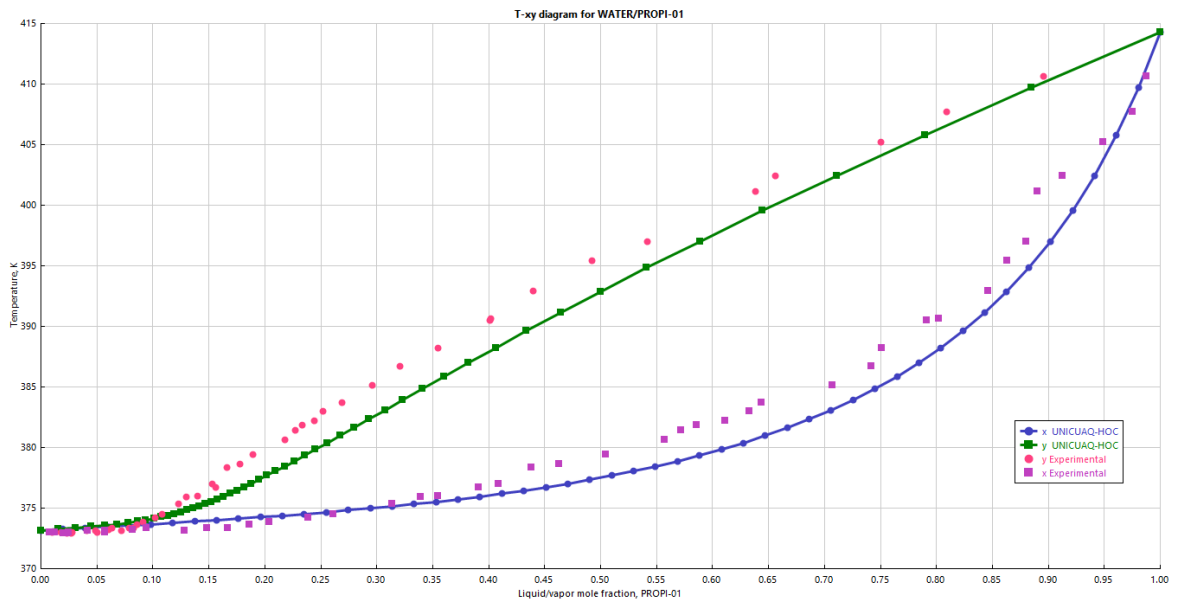
F.3.2 ELV 2 - isobárico calculado a 9330 N/sqm.



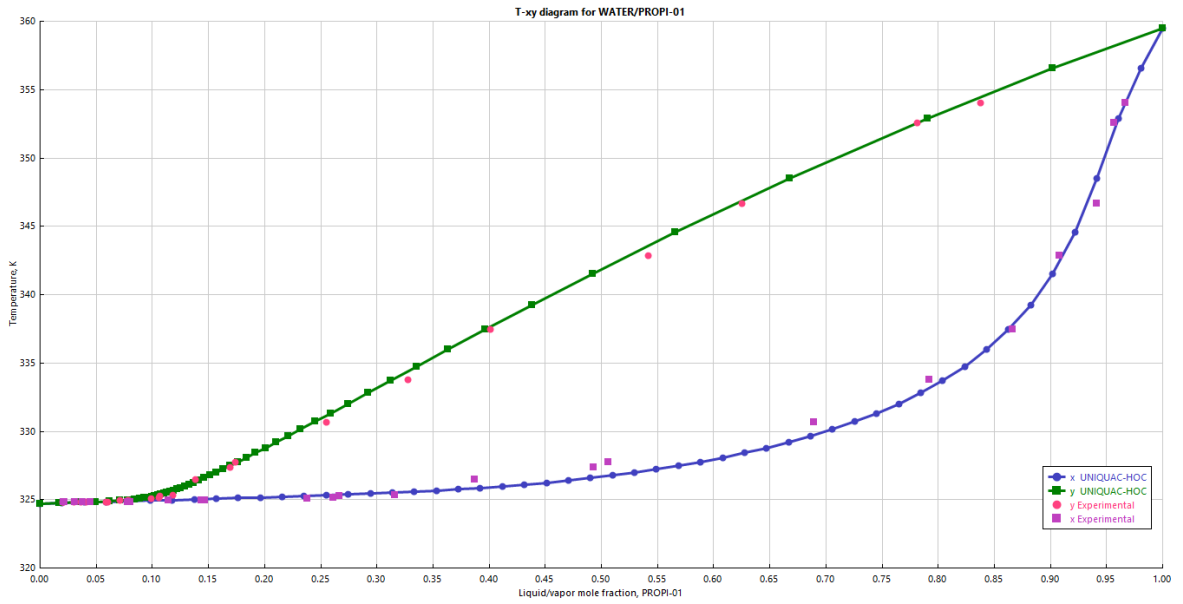
F.3.3 ELV 3 - isobárico calculado a 26660 N/sqm.



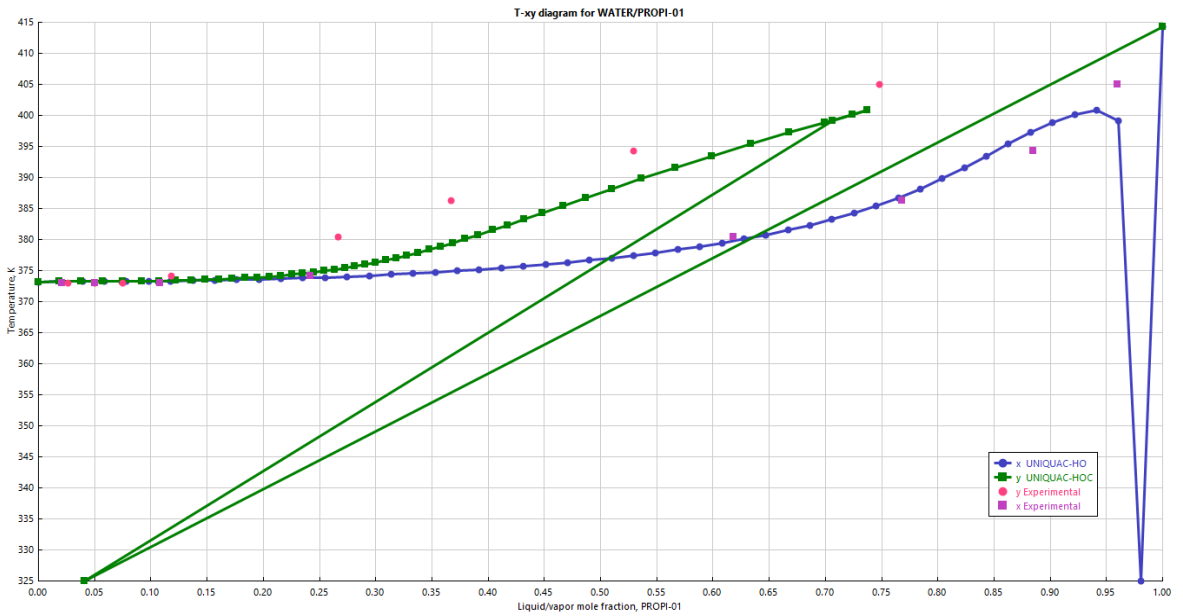
F.3.4 ELV 4 - isobárico calculado a 101320 N/sqm.



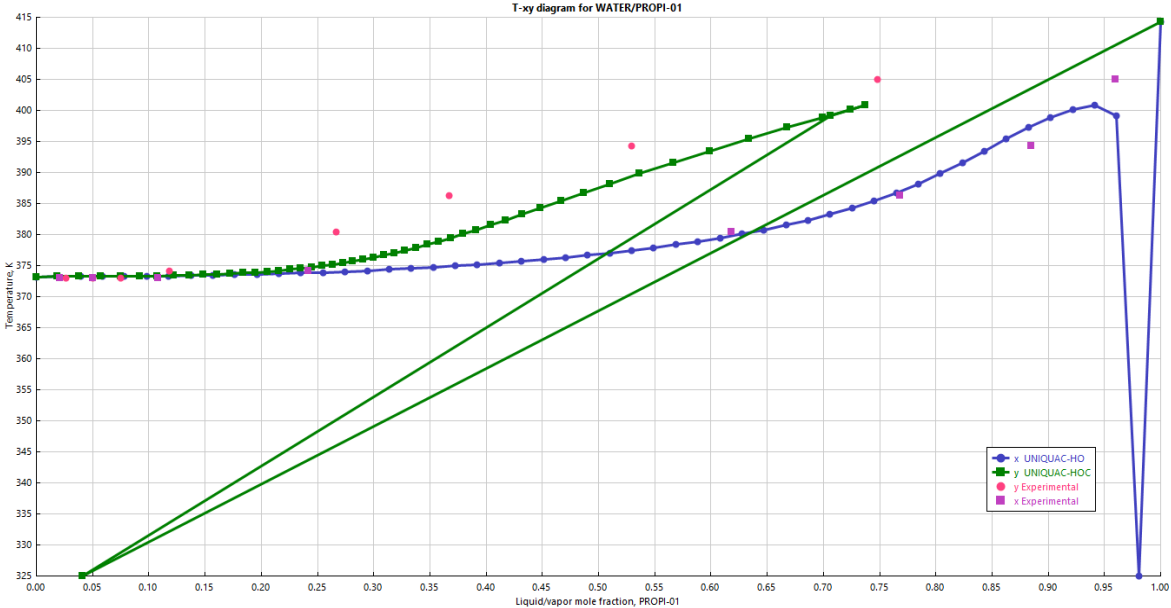
F.3.5 ELV 6 - isobárico calculado a 13330 N/sqm.



F.3.6 ELV 7 - isobárico calculado a 101330 N/sqm.



F.3.7 ELV 8 - isobárico calculado a 74660 N/sqm



ANEXO G REPORTES AZEOTROPÍA

G.1 Equilibrios calculados con NRTL – Hayden & O’Connell (NRTL-HOC)

G.1.1 ELV isobárico calculado a 26660 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: NRTL-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 26660 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	103.11 C
WATER	WATER	Unstable node	66.42 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.1.2 ELV isobárico calculado a 9330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: NRTL-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 9330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	78.32 C
WATER	WATER	Unstable node	44.45 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.1.3 ELV isobárico calculado a 101320 N/sqm

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: NRTL-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101320 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	141.14 C
WATER	WATER	Unstable node	100.02 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.1.4 ELV isobárico calculado a 13330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: NRTL-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 13330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	86.32 C
WATER	WATER	Unstable node	51.55 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.1.5 ELV isobárico calculado a 101330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: NRTL-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	141.15 C
WATER	WATER	Unstable node	100.02 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.1.6 ELV isobárico calculado a 74660 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: NRTL-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 74660 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	131.68 C
WATER	WATER	Unstable node	91.67 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.2. Wilson – Hayden & O’Connell (WILSON-HOC)

G.2.1 ELV isobárico calculado a 26660 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: WILS-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 26660 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	103.11 C
WATER	WATER	Unstable node	66.42 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.2.2 ELV isobárico calculado a 9330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: WILS-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 9330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	78.32 C
WATER	WATER	Unstable node	44.45 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.2.3 ELV isobárico calculado a 101320 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: WILS-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101320 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	141.14 C
WATER	WATER	Stable node	100.02 C

The Azeotrope

01	Number Of Components: 2		Temperature 99.97 C	
	Homogeneous		Classification: Unstable node	
			MOLE BASIS	MASS BASIS
	PROPI-01	0.0414	0.1507	
	WATER	0.9586	0.8493	

G.2.4 ELV isobárico calculado a 13330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: WILS-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 13330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	86.32 C
WATER	WATER	Unstable node	51.55 C

No Azeotropes Were Found

G.2.5 ELV isobárico calculado a 101330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: WILS-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	141.15 C
WATER	WATER	Stable node	100.02 C

The Azeotrope

01	Number Of Components: 2		Temperature 99.97 C	
	Homogeneous		Classification: Unstable node	
			MOLE BASIS	MASS BASIS
	PROPI-01	0.0414	0.1508	
	WATER	0.9586	0.8492	

G.2.6 ELV isobárico calculado a 74660 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: WILS-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 74660 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	131.68 C
WATER	WATER	Unstable node	91.67 C

No Azeotropes Were Found

G.3 UNIQUAC – Hayden & O’Connell (UNIQUAC-HOC)

G.3.1 ELV isobárico calculado a 26660 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQ-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 26660 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	103.11 C
WATER	WATER	Unstable node	66.42 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.3.2 ELV isobárico calculado a 9330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQ-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 9330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	78.32 C
WATER	WATER	Unstable node	44.45 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.3.3 ELV isobárico calculado a 101320 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQ-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101320 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	141.14 C
WATER	WATER	Unstable node	100.02 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.3.4 ELV isobárico calculado a 13330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQ-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 13330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	86.32 C
WATER	WATER	Unstable node	51.55 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.3.5 ELV isobárico calculado a 101330 N/sqm.

AZEOTROPE SEARCH REPORT

Physical Property Model: UNIQ-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 101330 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	141.15 C
WATER	WATER	Unstable node	100.02 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

G.3.6 ELV isobárico calculado a 74660 N/sqm

AZEOTROPE SEARCH REPORT


Physical Property Model: UNIQ-HOC Valid Phase: VAP-LIQ

Mixture Investigated For Azeotropes At A Pressure Of 74660 N/SQM

Comp ID	Component Name	Classification	Temperature
PROPI-01	PROPIONIC-ACID	Stable node	131.68 C
WATER	WATER	Unstable node	91.67 C

No Azeotropes Were Found

© Aspen Technology, Inc.

 Fundación Universidad de América	FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA	Código:
	PROCESO: GESTIÓN DE BIBLIOTECA	Versión 0
	Autorización para Publicación en el Repositorio Digital Institucional – Lumieres	Julio - 2016


AUTORIZACIÓN PARA PUBLICACIÓN EN EL REPOSITORIO DIGITAL INSTITUCIONAL LUMIERES




Yo **María Angélica Parra Medina** en calidad de titular de la obra **Estudio Teórico y Experimental del Equilibrio Líquido Vapor del Sistema Ácido Propiónico Agua**, elaborada en el año 2016, autorizo al **Sistema de Bibliotecas de la Fundación Universidad América** para que incluya una copia, indexe y divulgue en el Repositorio Digital Institucional – Lumieres, la obra mencionada con el fin de facilitar los procesos de visibilidad e impacto de la misma, conforme a los derechos patrimoniales que me corresponde y que incluyen: la reproducción, comunicación pública, distribución al público, transformación, en conformidad con la normatividad vigente sobre derechos de autor y derechos conexos (Ley 23 de 1982, Ley 44 de 1993, Decisión Andina 351 de 1993, entre otras).

Al respecto como Autor manifiesto conocer que:

- La autorización es de carácter no exclusiva y limitada, esto implica que la licencia tiene una vigencia, que no es perpetua y que el autor puede publicar o difundir su obra en cualquier otro medio, así como llevar a cabo cualquier tipo de acción sobre el documento.
- La autorización tendrá una vigencia de cinco años a partir del momento de la inclusión de la obra en el repositorio, prorrogable indefinidamente por el tiempo de duración de los derechos patrimoniales del autor y podrá darse por terminada una vez el autor lo manifieste por escrito a la institución, con la salvedad de que la obra es difundida globalmente y cosechada por diferentes buscadores y/o repositorios en Internet, lo que no garantiza que la obra pueda ser retirada de manera inmediata de otros sistemas de información en los que se haya indexado, diferentes al Repositorio Digital Institucional – Lumieres de la Fundación Universidad América.
- La autorización de publicación comprende el formato original de la obra y todos los demás que se requiera, para su publicación en el repositorio. Igualmente, la autorización permite a la institución el cambio de soporte de la obra con fines de preservación (impreso, electrónico, digital, Internet, intranet, o cualquier otro formato conocido o por conocer).
- La autorización es gratuita y se renuncia a recibir cualquier remuneración por los usos de la obra, de acuerdo con la licencia establecida en esta autorización.
- Al firmar esta autorización, se manifiesta que la obra es original y no existe en ella ninguna violación a los derechos de autor de terceros. En caso de que el trabajo haya sido financiado por terceros, el o los autores asumen la responsabilidad del cumplimiento de los acuerdos establecidos sobre los derechos patrimoniales de la obra.
- Frente a cualquier reclamación por terceros, el o los autores serán los responsables. En ningún caso la responsabilidad será asumida por la Fundación Universidad de América.
- Con la autorización, la Universidad puede difundir la obra en índices, buscadores y otros sistemas de información que favorezcan su visibilidad.

Conforme a las condiciones anteriormente expuestas, como autor establezco las siguientes condiciones de uso de mi obra de acuerdo con la **licencia Creative Commons** que se señala a continuación:

	FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA	Código:
	PROCESO: GESTIÓN DE BIBLIOTECA	Versión 0
	Autorización para Publicación en el Repositorio Digital Institucional – Lumieres	Julio - 2016

	Atribución- no comercial- sin derivar: permite distribuir, sin fines comerciales, sin obras derivadas, con reconocimiento del autor.	<input checked="" type="checkbox"/>
	Atribución – no comercial: permite distribuir, crear obras derivadas, sin fines comerciales con reconocimiento del autor.	<input type="checkbox"/>
	Atribución – no comercial – compartir igual: permite distribuir, modificar, crear obras derivadas, sin fines económicos, siempre y cuando las obras derivadas estén licenciadas de la misma forma.	<input type="checkbox"/>

Licencias completas: http://co.creativecommons.org/?page_id=13

Siempre y cuando se haga alusión de alguna parte o nota del trabajo, se debe tener en cuenta la correspondiente citación bibliográfica para darle crédito al trabajo y a su autor.

De igual forma como autor autorizo la consulta de los medios físicos del presente trabajo de grado así:

AUTORIZO	SI	NO
La consulta física (sólo en las instalaciones de la Biblioteca) del CD-ROM y/o Impreso	X	
La reproducción por cualquier formato conocido o por conocer para efectos de preservación	X	

Información Confidencial: este Trabajo de Grado contiene información privilegiada, estratégica o secreta o se ha pedido su confidencialidad por parte del tercero, sobre quien se desarrolló la investigación. En caso afirmativo expresamente indicaré, en carta adjunta, tal situación con el fin de que se respete la restricción de acceso.	SI	NO
		X

Para constancia se firma el presente documento en Bogotá, a los 26 días del mes de Octubre del año 2017.

EL AUTOR:

Autor

Nombres	Apellidos
María Angélica	Parra Medina
Documento de identificación No	Firma
1018468226	