



**Escuela Superior
de Ingeniería y Tecnología**
Universidad de La Laguna

**UNIVERSIDAD DE LA LAGUNA
ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA
GRADO EN INGENIERÍA QUÍMICA INDUSTRIAL**

**ANÁLISIS DE DATOS EXPERIMENTALES DE
EQUILIBRIO LÍQUIDO VAPOR DE SISTEMAS
BIFÁSICOS POR MEDIO DE LA APLICACIÓN DE
DIVERSOS MODELOS TERMODINÁMICOS**
Trabajo de Fin de Grado. Curso 2021 - 2022

Autor: De La Cabada Orta, Andrés Eduardo
Tutores: Luis Enrique Rodríguez Gómez; Manuel F. Álvarez Díaz

La Laguna, septiembre de 2022

Agradecimientos

Dentro de la Universidad, a todos los profesores y el personal con el que he tenido la suerte de coincidir. Al venir de otra universidad y otro país, se me recibió con brazos abiertos. En especial a Luis y Manolo, por la oportunidad de realizar este trabajo y porque a pesar de la distancia me ofrecieron su apoyo. También a Juan Rodríguez Sevilla y José Macías por su ayuda a pesar de no ser mis tutores.

También a mis compañeros de estudio por guiarme y hacerme sentir uno más de ellos.

Fuera de la universidad, son demasiados los nombres de las personas a las que debo agradecer. No me atrevo a mencionarlos por miedo a que me falte alguno. Sin embargo, agradezco a mis padres y mi hermano, a mi pareja, a mis amigos. Espero poder expresar mi gratitud personalmente cada uno de ellos.

Una especial mención a mi abuela que siempre soñó con verme recibir el título.

ÍNDICE GENERAL

Contenido

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES	1
ÍNDICE DE TABLAS	3
ÍNDICE DE ECUACIONES.....	5
RESUMEN / ABSTRACT	6
Resumen	6
Abstract.....	6
1. INTRODUCCIÓN	7
2. OBJETIVOS	9
2.1. Objetivo general	9
2.2. Objetivos específicos	9
3. MARCO TEÓRICO.....	10
3.1. Fase.....	10
3.2. Equilibrio Líquido-Vapor	10
3.3. Curva de rocío.....	11
3.4. Curva de burbuja.....	11
3.5. Azeótropo.....	11
3.6. Volatilidad	11
3.7. Modelo termodinámico	12
3.8. Conceptos claves sobre las ecuaciones de Estado	12
3.8.1. Ecuación de los Gases Ideales	12
3.8.2. Ley de Raoult	13
3.8.3. Ley de Raoult modificada	13
3.8.4. Ecuación de Antoine	14
3.8.5. Ecuación de Van Der Waals.....	14
3.8.6. Ecuación de Redlich/Kwong.....	15
3.8.7. Modelo de Wilson.....	16
3.8.8. NRTL	16
3.8.9. UNIQUAC	17
3.9. Tipos de mezclas binarias.....	18
3.10. Criterios para seleccionar el Modelo Termodinámico	19
4. MATERIALES Y MÉTODOS	23
4.1. Elección de componentes de la mezcla.....	23
4.1.1. Breve descripción de las sustancias.....	23

4.1.2. Montaje experimental	24
4.1.3. Datos experimentales de ELV	25
4.2. El simulador UNISIM	26
4.2.1. Construcción de las curvas de equilibrio en el simulador.....	26
4.2.2. Uso de los Modelos Termodinámicos en Unisim	27
4.3. Comparación de los resultados obtenidos	28
4.3.1. Comparación gráfica	28
4.3.2. Comparación analítica	29
4.3.3. Posibles mejoras para el modelo.....	32
5. RESULTADOS Y ANÁLISIS	34
5.1. Comparación gráfica	34
5.1.1. Mezcla 1.....	34
5.1.2. Mezcla 2.....	38
5.2. Comparación analítica.....	42
5.2.1. Mezcla 1.....	42
5.2.2. Mezcla 2.....	43
5.2.3. Comparación de simulaciones	43
5.3. Mejoras para el ajuste	44
5.3.1. Mezcla 1.....	45
5.3.2. Mezcla 2.....	52
5.4. Comparación analítica para la simulación modificada	59
CONCLUSIONES / CONCLUSIONS.....	61
Conclusiones	61
Conclusions	62
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63
ANEXOS.....	65

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1: ELV furano / tetracloruro de carbono a 1 atm.	10
Ilustración 2: ELV etanol / tolueno a 1 atm	11
Ilustración 3: Curvas de Van der Waals.....	15
Ilustración 4: Diagrama del montaje experimental	24
Ilustración 5: ejemplo de paquete no recomendado	26
Ilustración 6: Diagrama de flujo de la simulación de la mezcla 2	27
Ilustración 7: Modelos de actividad en Unisim	28
Ilustración 8. Variación del flujo molar en el estudio de caso	29
Ilustración 9: Variables dependiente e independientes.....	29
Ilustración 10: Constantes de Antoine en UNISIM	32
Ilustración 11: Algunos elementos modificables en UNISIM	32
Ilustración 12: Propiedades de las sustancias puras en UNISIM	33
Ilustración 13 Comparación mezcla 1 a 101 kPa	34
Ilustración 14: Comparación mezcla 1 a 80 kPa	35
Ilustración 15 Comparación mezcla 1 a 60 kPa	36
Ilustración 16: Comparación mezcla 1 a 40 kPa	37
Ilustración 17: Comparación mezcla 2 a 101 kPa	38
Ilustración 18: Comparación mezcla 2 a 80 kPa	39
Ilustración 19: Comparación mezcla 2 a 40 kPa	40
Ilustración 20: Comparación mezcla 2 a 60 kPa	41
Ilustración 21: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 101 kPa	45
Ilustración 22: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 80 kPa	46
Ilustración 23: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 60 kPa	46
Ilustración 24: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 40 kPa	47
Ilustración 25: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 101 kPa	47
Ilustración 26: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 80 kPa	48
Ilustración 27: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 60 kPa	49
Ilustración 28: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 40 kPa	49
Ilustración 29: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 101 kPa	50
Ilustración 30: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 80 kPa	50
Ilustración 31: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 60 kPa	51
Ilustración 32: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 40 kPa	51
Ilustración 33: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 101 kPa	52
Ilustración 34: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 80 kPa	53
Ilustración 35: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 60 kPa	53
Ilustración 36: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 40 kPa	54

Ilustración 37: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 101 kPa	55
Ilustración 38: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 80 kPa	55
Ilustración 39: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 60 kPa	56
Ilustración 40: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 40 kPa	56
Ilustración 41: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 101 kPa	57
Ilustración 42: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 80 kPa	58
Ilustración 43: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 60 kPa	58
Ilustración 44: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 40 kPa	59

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Parámetros de distintos modelos para los tipos de mezclas binarias.....	18
Tabla 2: Clasificación de los compuestos puros	20
Tabla 3: Clasificación de compuestos de acuerdo con las desviaciones de la ley de Raoult	20
Tabla 4: Clasificación de tipos de mezcla en grupos:	21
Tabla 5: Precisión esperada de los modelos termodinámicos	21
Tabla 6: Rangos de T/P y otros parámetros para distintos modelos termodinámicos	22
Tabla 7: Algunas propiedades físicas de los compuestos.....	23
Tabla 8: Datos experimentales de ELV	25
Tabla 9: total de tablas de ELV a generar.....	28
Tabla 10: Comparación de datos experimentales vs simulados hecha por Yim et al (2021)	30
Tabla 11: Comparación de las simulaciones con las de Yim et al (202).....	44
Tabla 12: Propiedades del simulador vs literatura	45
Tabla 13: comparación de las simulaciones luego de modificar los parámetros	59
Tabla 14: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante NRTL para graficar.....	65
Tabla 15: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante Wilson para graficar	66
Tabla 16: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante UNIQUAC para graficar	67
Tabla 17: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante NRTL para graficar.....	68
Tabla 18: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante Wilson Para graficar.....	69
Tabla 19: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante UNIQUAC Para graficar	70
Tabla 20: Estudio analítico. Mezcla 1 a 101 kPa, mediante NRTL.....	71
Tabla 21: Estudio analítico. Mezcla 1 a 101 kPa, mediante Wilson	71
Tabla 22: Estudio analítico. Mezcla 1 a 101 kPa, mediante UNIQUAC.....	72
Tabla 23: Estudio analítico. Mezcla 1 a 80 kPa, mediante NRTL.....	72
Tabla 24: Estudio analítico. Mezcla 1 a 80 kPa, mediante Wilson	73
Tabla 25: Estudio analítico. Mezcla 1 a 80 kPa, mediante UNIQUAC.....	73
Tabla 26: Estudio analítico. Mezcla 1 a 60 kPa, mediante NRTL.....	74
Tabla 27: Estudio analítico. Mezcla 1 a 60 kPa, mediante Wilson	74
Tabla 28: Estudio analítico. Mezcla 1 a 60 kPa, mediante UNIQUAC.....	75
Tabla 29: Estudio analítico. Mezcla 1 a 40 kPa, mediante NRTL.....	75
Tabla 30: Estudio analítico. Mezcla 1 a 40 kPa, mediante Wilson	76
Tabla 31: Estudio analítico. Mezcla 1 a 40 kPa, mediante UNIQUAC.....	76
Tabla 32: Estudio analítico. Mezcla 2 a 101 kPa, mediante NRTL.....	77
Tabla 33: Estudio analítico. Mezcla 2 a 101 kPa, mediante Wilson	77
Tabla 34: Estudio analítico. Mezcla 2 a 101 kPa, mediante UNIQUAC.....	78
Tabla 35: Estudio analítico. Mezcla 2 a 80 kPa, mediante NRTL.....	78

Tabla 36: Estudio analítico. Mezcla 2 a 80 kPa, mediante Wilson	79
Tabla 37: Estudio analítico. Mezcla 2 a 80 kPa, mediante UNIQUAC.....	79
Tabla 38: Estudio analítico. Mezcla 2 a 60 kPa, mediante NRTL.....	80
Tabla 39: Estudio analítico. Mezcla 2 a 60 kPa, mediante Wilson	80
Tabla 40: Estudio analítico. Mezcla 2 a 60 kPa, mediante UNIQUAC.....	81
Tabla 41: Estudio analítico. Mezcla 2 a 40 kPa, mediante NRTL.....	81
Tabla 42: Estudio analítico. Mezcla 2 a 40 kPa, mediante Wilson	82
Tabla 43: Estudio analítico. Mezcla 2 a 40 kPa, mediante UNIQUAC.....	82
Tabla 44: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante NRTL para la gráfica modificada ..	83
Tabla 45: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante Wilson para la gráfica modificada.	84
Tabla 46: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante UNIQUAC para la gráfica modificada	85
Tabla 47: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante NRTL para la gráfica modificada ..	86
Tabla 48: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante Wilson para la gráfica modificada.	87
Tabla 49: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante UNIQUAC para la gráfica modificada	88
Tabla 50: Resumen de la simulación modificada para la mezcla 1	89
Tabla 51: Resumen de la simulación modificada para la mezcla 2.....	90

ÍNDICE DE ECUACIONES

Ecuación 1: Ecuación de los gases ideales	12
Ecuación 2: Ecuación de Raoult.....	13
Ecuación 3: Propiedad parcial molar	13
Ecuación 4: Ecuación de Raoult corregida	14
Ecuación 5: Ecuación de Antoine.....	14
Ecuación 6: Ecuación de Van der Waals.....	14
Ecuación 7: constante a de Van der Waals	14
Ecuación 8: constante b de Van der Waals	14
Ecuación 9: Ecuación de Redlich/Kwong	15
Ecuación 10: Constante a de Redlich/Kwong	15
Ecuación 11: Constante b de Redlich/Kwong	15
Ecuación 12: Ecuación de Wilson para mezcla binaria.....	16
Ecuación 13. Ecuación de Wilson para el componente 1	16
Ecuación 14: Ecuación de Wilson para el componente 2	16
Ecuación 15: Actividad de Wilson para dilución infinita del componente1	16
Ecuación 16: Actividad de Wilson para dilución infinita del componente 2	16
Ecuación 17: NRTL.....	17
Ecuación 18: Actividad de NRTL para dilución infinita del componente 1	17
Ecuación 19: Actividad de NRTL para dilución infinita del componente 2.....	17
Ecuación 20 Término combinatorio UNIQUAC	17
Ecuación 21: Término residual UNIQUAC.....	17
Ecuación 22: Coeficiente de actividad parcial	18
Ecuación 23: Ecuación de UNIQUAC con coeficientes de actividad.....	18
Ecuación 24: Término combinatorio UNIQUAC aplicado a coeficientes de actividad.....	18
Ecuación 25: Término residual UNIQUAC aplicado a coeficientes de actividad	18
Ecuación 26: Balance de materia en MIX-100.....	27
Ecuación 27: Desviación porcentual en composición	30
Ecuación 28: Desviación porcentual en composición promedio	30
Ecuación 29: Desviación en coeficiente de actividad	31
Ecuación 30: Desviación en coeficiente de actividad promedio.....	31
Ecuación 31: Coeficientes de actividad mediante UNIQUAC	31

RESUMEN / ABSTRACT

Resumen

El estudio del ELV es de vital importancia para las operaciones de separación en la industria química. En la búsqueda de datos fiables del equilibrio, diversos autores han realizado estudios experimentales que arrojan tablas de datos que pueden ser considerados como reales.

El objetivo del presente trabajo es evaluar qué tan ajustada es la simulación del comportamiento de una mezcla binaria en su ELV en distintas condiciones y utilizando varios modelos termodinámicos.

Yim et al (2021) han publicado datos de ELV de los sistemas 2-metil-1-pentanol / 2,3-butanodiol y 3-metil-1-butanol / 2,3-butanodiol a 4 presiones diferentes: 101, 80, 60 y 40 kPa. Con base en los criterios de selección, se escogieron los modelos Wilson, NRTL y UNIQUAC.

Mediante el uso del simulador UNISIM[®] y sus parámetros por defecto, se generaron las mismas curvas y se realizó una comparación gráfica y una analítica. En el caso del sistema 2-metil-1-pentanol / 2,3-butanodiol, los modelos NRTL y UNIQUAC arrojaron prácticamente los mismos valores y tienen un ajuste mejor al de Wilson. Las desviaciones promedio se ubican en el orden de 1 a 10%.

En el caso del sistema 3-metil-1-butanol / 2,3-butanodiol, el modelo UNIQUAC muestra un ajuste mucho mejor que NRTL y Wilson, arrojando desviaciones porcentuales promedio menores al 1%.

Finalmente, al observar un posible sesgo hacia arriba en los datos obtenidos, se modificó un parámetro en el simulador para desplazar las curvas hacia abajo. Esto redujo las desviaciones promedio en la mayoría de los casos.

Palabras clave: Equilibrio líquido-vapor, modelos termodinámicos, simulación, UNISIM.

Abstract

The study of VLE is vital for the separation processes in the chemical industry. Pursuing reliable data of the equilibrium, multiple authors have made experimental research that provided tables of data that can be considered as real.

The objective of this work is to evaluate how good is the fitting of the simulation of the behavior of a two a binary mixture in VLE under different conditions and using multiple thermodynamic models.

Yim et al (2021) published VLE of the systems 2-methyl-1-pentanol / 2,3-butanediol and 3-methyl-1-butanol / 2,3-butanediol at 4 different pressures: 101, 80, 60 and 40 kPa. Based on the selection criteria, the models Wilson, NRTL and UNIQUAC were selected.

Using the UNISIM[®] simulator and its default parameters, the same curves were generated, and they were compared graphic and analytically. In the case of 2-methyl-1-pentanol / 2,3-butanediol, NRTL and UNIQUAC provided practically the same values and they have a better fitting than Wilson. The mean deviations are in the order of $\bar{\mu}$ 1 and 10%.

In the case of 3-methyl-1-butanol / 2,3-butanediol, UNIQUAC provided a much better fitting than NRTL and Wilson, with mean deviations lower than 1%.

Finally, after observing a positive bias in the data, one parameter was modified in the simulator to move the curves down. This reduced the mean deviation in most cases.

Keywords: Vapor-liquid equilibrium, thermodynamic models, simulation, UNISIM.

1. INTRODUCCIÓN

El mundo de hoy en día depende enormemente de la tecnología. Esta dependencia se debe a que los procesos son cada vez más complejos y hay más necesidades que satisfacer. En medio de esta complejidad, la búsqueda de mejor calidad y menor daño medioambiental hace que cada vez más profesionales en todo el mundo se dediquen a buscar maneras alternativas de mantener y mejorar nuestro nivel de vida.

La industria química no es la excepción. Se trata de una industria creciente en muchos países, que genera crecimiento económico, empleo y diversidad de productos. Sin embargo, es un sector industrial que produce contaminación ambiental y utiliza recursos no renovables (Montes-Valencia, 2015). En este contexto, surge como alternativa la Química Verde, cuyo objetivo es la sostenibilidad.

Estas demandas del mundo actual requieren cambios y los cambios pueden ser tareas complicadas para cualquier organización. La simulación ha ganado importancia en los años recientes y ha permitido a los diseñadores imaginar nuevos sistemas para cuantificar y observar el comportamiento (Hosseinpour y Hajihosseini, 2009). La simulación le abre las puertas a aquellas personas que deseen trabajar por un mundo mejor, permitiéndoles descubrir “qué pasaría” si se utilizara un proceso distinto o nuevo, sin necesidad de experimentar. Se podría medir el impacto y el coste de un proceso antes de que exista.

Otro aspecto a tener en cuenta es el coste de dichos procesos. La simulación permite estimar los costes de producción. Durán-García y Ruiz-Navas (2020) afirman que la importancia de la simulación en ingeniería química radica en el diseño y la evaluación de plantas y equipos de procesos, en los que se transforma la materia prima para la manufactura de productos de alto valor comercial.

Yue et al (2009) han hecho un estudio del equilibrio líquido-vapor del sistema compuesto por epíclorohidrina y agua. Ellos afirman que “Los datos de equilibrio líquido-vapor son útiles para el modelado de procesos que pueden ser útiles como alternativas a los procesos existentes”. En este caso, su estudio va enfocado a que la producción de epíclorohidrina a partir del glicerol es una alternativa al petróleo, en vista del aumento de los precios de la producción de este último y su característica de ser no renovable.

De modo que la simulación es una herramienta poderosa que permite diseñar procesos mejores y menos costosos. Sin embargo, para que una simulación sea buena (ajustada a la realidad) se debe contar con datos confiables. Son muchísimos los investigadores que han dedicado sus carreras profesionales a buscar datos y modelos que representen la realidad en la industria química. Los simuladores utilizados actualmente, incluyen ecuaciones que han sido desarrolladas por numerosos científicos e ingenieros a lo largo de más de un siglo. Desde Van der Waals en 1973 en adelante, los modelos son cada vez mejores y más sofisticados, pero la cantidad de sustancias y situaciones del mundo real son demasiadas para ser simuladas fácilmente mediante una ecuación.

En este contexto, los simuladores aprovechan el poder de procesamiento de datos de los ordenadores para almacenar una enorme cantidad de datos, recopilando las ecuaciones y los modelos que permiten trabajar con una variedad de sustancias. Entre otras cosas, los simuladores permiten utilizar balances de materia y distintas ecuaciones para obtener propiedades físicas en determinadas condiciones (Durán-García y Ruiz-Navas, 2020).

Los simuladores comerciales más comunes en la industria son ANSYS CFX®, ASPEN PLUS®, COMSOL®, PRO II®, HYSYS® y UNISIM®.

En el universo de los procesos químicos, es de vital importancia hablar de las operaciones de separación. Una vez obtenidos los productos terminados, es necesario separarlos del resto de las sustancias que han participado en el proceso. En la mayoría de los casos, los procesos se llevan a cabo con fluidos (en estado líquido, gaseoso o ambos).

Dada la importancia de la separación, conviene contar con datos que permitan simularla. Al hablar de mezclas de sustancias que deben ser separadas, es vital comprender el equilibrio líquido-vapor de los componentes de la mezcla (Aldana Rivera, 2015). El estudio de mezclas binarias tiene su fundamento científico en la termodinámica de sistemas multicomponentes y su cálculo puede ser muy complicado.

De modo que, una vez más, la simulación cobra importancia al proporcionar la capacidad de procesar datos rápidamente para obtener resultados complejos mediante cálculos iterativos (cosa que no sería factible hacer por una persona). Prácticamente no existen límites para el diseño utilizando la simulación, pero las limitaciones que se podrían presentar al no contar con los datos apropiados.

El presente trabajo tiene como objetivo la búsqueda de datos experimentales de equilibrio líquido-vapor de un sistema binario para compararlos con datos obtenidos a partir de una simulación. Dichos datos experimentales podrán ser considerados como los reales y los simulados como los teóricos.

Existen muchas maneras de simular un proceso o un estado de un sistema. Como se mencionó anteriormente, la cantidad de estudios que se han realizado para obtener datos de las sustancias puras y en mezclas es enorme y los simuladores comprenden muchos de estos datos. Otro de los objetivos de este trabajo es seleccionar varios modelos termodinámicos que puedan ajustarse a la realidad, basándose en criterios fundamentados.

El simulador se utilizará para generar los datos a partir de las condiciones reales, valiéndose de la capacidad de realizar cálculos iterativos. Se generarán varias curvas de equilibrio líquido-vapor a distintas condiciones para poder evaluar qué modelos termodinámicos se ajustan mejor al comportamiento real.

Los simuladores también permiten acceder a la configuración y modificar parámetros. Como objetivo final del trabajo, se intentará proponer mejoras en los parámetros del modelo para mejorar el ajuste de los datos simulados con respecto a los reales.

El Trabajo de Fin de Grado está estructurado de la siguiente manera:

Un marco teórico que explica los conceptos básicos relacionados con el equilibrio líquido-vapor de una mezcla binaria, explicando desde las bases científicas los modelos utilizados hoy en día. También explica cómo se debe escoger un modelo para determinada mezcla binaria siguiendo varios criterios.

Un marco metodológico y de materiales que contiene la selección de los datos reales y la generación de los datos teóricos.

Finalmente, se hará una comparación gráfica y analítica de los resultados obtenidos, para cumplir con los objetivos propuestos.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo general

Comparar valores obtenidos mediante varios modelos termodinámicos con datos reales de equilibrio líquido-vapor de una mezcla binaria mediante el uso del simulador UNISIM.

2.2. Objetivos específicos

1. Estudiar los modelos termodinámicos más habituales y sus aplicaciones.
2. Seleccionar varios modelos termodinámicos que puedan ajustarse al comportamiento de la mezcla binaria seleccionada, con base en criterios fundamentados.
3. Utilizar el simulador UNISIM para generar las curvas de equilibrio líquido-vapor (diagrama T-X a presión constante).
4. Comparar gráfica y cuantitativamente los datos reales con los datos obtenidos mediante la simulación.
5. Proponer cambios en los parámetros de los modelos termodinámicos que puedan mejorar el ajuste.

3. MARCO TEÓRICO

3.1. Fase

En el estudio del equilibrio líquido-vapor se habla constantemente de dos fases: líquido y vapor. Ambas son estados de la materia en el que las sustancias pueden fluir (a diferencia de la fase sólida). Sin embargo, son distintas principalmente debido a que su densidad difiere bastante. En la fase vapor, las moléculas están mucho más dispersas que en la fase líquida, lo que permite mayor libertad de movimiento.

Una fase se considera como líquida cuando puede vaporizarse manteniendo la temperatura constante y disminuyendo la presión o aumentando la temperatura al mantener la presión constante (Smith et al, 2007).

3.2. Equilibrio Líquido-Vapor

Cuando ambas fases están en contacto, se produce un equilibrio líquido vapor (ELV). Moléculas de una sustancia viajan de una fase a otra y viceversa. En el caso de una sustancia pura, existe una única temperatura para este cambio de fase (a determinada presión). Si calentamos agua, por ejemplo, su temperatura llegará hasta 100 °C. Comenzará el cambio de fase y la temperatura se mantendrá constante, hasta que se haya vaporizado todo el líquido. Esta es la temperatura de ebullición.

Sin embargo, la situación es distinta para el caso en el que haya más de una sustancia, pues no habrá una única temperatura de ebullición. Para sistemas de más de una sustancia, se suele hablar de sistemas multicomponentes. Para especificar un sistema así, ya no es suficiente conocer dos propiedades termodinámicas (típicamente presión y temperatura), sino que entra en juego en qué proporción estén mezcladas las sustancias. En este trabajo, como en la mayoría de los relacionados con el ELV, se sobreentiende que, al hablar de composición, se refiere a la composición molar y no a la composición en masa.

El siguiente diagrama muestra cómo se comporta típicamente una mezcla de dos componentes en su ELV, variando la composición.

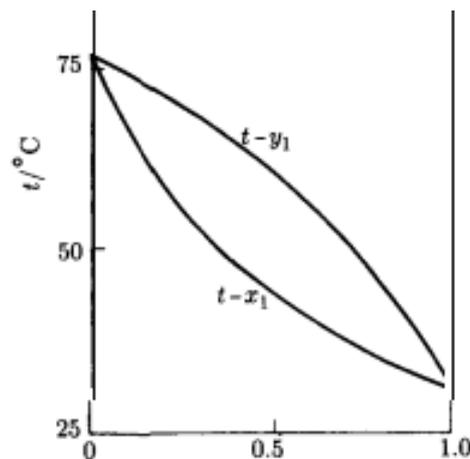


Ilustración 1: ELV furano / tetracloruro de carbono a 1 atm.

En cada uno de los extremos, se observa la temperatura de ebullición del componente puro. Entre ellos, se observan dos curvas que limitan el equilibrio: las curvas de rocío (superior) y burbuja (inferior).

3.3. Curva de rocío

En primer lugar, se debe definir el punto de rocío. Se trata del límite del ELV. Si se tiene una fase vapor, y se enfría a presión constante, el punto de rocío es la temperatura a la cual comienza la condensación. Este punto depende de la composición, por lo que, si se varía la composición de 0 a 1, se puede construir la curva de rocío, que agrupa todos los puntos de rocío (la curva superior en la *ilustración 1*).

3.4. Curva de burbuja

Análoga a la curva de rocío, es la que agrupa todos los puntos de burbuja (la curva inferior en la *ilustración 1*). En un caso similar al anterior, si se pretende calentar una fase líquida a presión constante, el punto de burbuja es la temperatura a la cual comienza la evaporación.

3.5. Azeótropo

No todas las mezclas se comportan como en la *ilustración 1*. En algunos casos, las curvas de rocío y burbuja pueden cruzarse. Si coinciden en un punto quiere decir que la volatilidad relativa para esa composición es igual a uno.

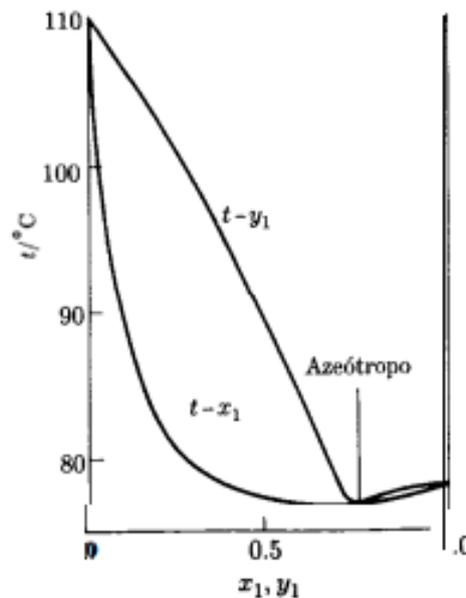


Ilustración 2: ELV etanol / tolueno a 1 atm

Los sistemas de ELV son muy diversos y hay demasiados factores que inciden en su comportamiento. Por ejemplo: la polaridad de los compuestos, las interacciones moleculares, etc. En la *ilustración 1* se puede apreciar un comportamiento distinto al de la *ilustración 2*. Hay un punto cercano a $X=0,8$ (aproximadamente) en el que las curvas de burbuja y rocío se cruzan y a partir de ese punto se invierten (la curva de rocío queda por debajo de la burbuja). Cerca de este punto, es inviable la separación de los dos componentes por medio de una destilación.

En el presente trabajo, no se abordarán los cálculos de volatilidad relativa, pues se trabajará con una mezcla de componentes que no presente un azeótropo para facilitar la simulación.

3.6. Volatilidad

En el estudio del ELV, se suele hablar únicamente del componente más volátil. La volatilidad hace referencia a la velocidad con la que viajan las moléculas entre la fase líquida y la fase vapor. Por lo general, el compuesto más ligero es el que viaja más rápido,

por lo que su temperatura de ebullición es menor. En este trabajo, se hablará únicamente de la composición del compuesto más volátil.

3.7. Modelo termodinámico

Se refiere al conjunto de ecuaciones y cálculos que permiten caracterizar el estado de un sistema. Típicamente, se aplica a un fluido y dependiendo de sus características, se pueden requerir más o menos datos para definir por completo su estado. Los modelos termodinámicos permiten predecir el comportamiento de componentes puros y mezclas de varios fluidos, bajo ciertas condiciones de temperatura, presión, composición, entalpía, etc.

Para cada componente, existen varios parámetros que los modelos utilizan para distinguirlos de otros componentes. Estos parámetros suelen ser: masa molecular, temperatura crítica, presión crítica, entre otros. Se trata de valores propios de cada sustancia y que no dependen de su cantidad (propiedad intensiva) o las condiciones en que se encuentre. El punto crítico es un punto en el diagrama Presión-Temperatura de una sustancia pura a partir del cual ya no se puede distinguir la fase líquida de la fase vapor (Smith et al, 2007). También se utilizan las temperaturas de ebullición (a 1 atm de presión) y en este caso las ecuaciones suelen hacer correcciones para poder utilizar otras temperaturas y presiones.

Es de particular interés el estudio de las mezclas de dos componentes en la aplicación de los modelos termodinámicos, ya que esto complica considerablemente el cálculo, respecto a una sustancia pura. Como se mencionó en el punto 3.5 sobre los azeótropos, en el caso de mezclas binarias, su comportamiento depende en gran medida de cómo interactúan ambos componentes.

3.8. Conceptos claves sobre las ecuaciones de Estado

Una ecuación de estado es una expresión algebraica que se vale de variables en estado fundamental (puro) de un fluido. Estas permiten relacionar de manera analítica (mediante una ecuación) dichas variables para poder predecir el comportamiento del fluido. Dicho fluido puede estar en estado líquido, gaseoso o una mezcla de ambos. Las ecuaciones de estado permiten calcular diversas variables como son la temperatura, la presión, el volumen, la entalpía, entre otras.

A continuación, un recorrido por los avances científicos más relevantes en lo que respecta al presente trabajo: desde la ecuación de los gases ideales hasta algunas de las ecuaciones más complejas de gran uso hoy en día.

3.8.1. Ecuación de los Gases Ideales

Al considerar que las interacciones intermoleculares son despreciables, se puede decir que un gas tiene comportamiento ideal. En general, se puede afirmar que una sustancia se comporta como un gas ideal cuando se encuentra muy lejos del punto crítico. En la literatura se suele hablar de temperaturas altas y presiones moderadas, o simplemente de presiones bajas. Al incrementar la presión, las moléculas de la fase vapor tienen menos espacio libre, por lo que interactúan más (Smith et al, 2007).

La ecuación que describe el estado de gas ideal es la siguiente:

$$PV = NRT$$

Ecuación 1: Ecuación de los gases ideales

Donde:

P: Presión absoluta

V: Volumen

N: Número de moles
 R: Constante universal de los gases
 T: Temperatura

La simplicidad de esta ecuación reside en que no depende de propiedades intensivas del fluido. Es decir, que se podría aplicar a cualquier fluido. Sin embargo, la ecuación es sólo aplicable en casos muy concretos.

3.8.2. Ley de Raoult

Como ya se había mencionado, el cálculo se complica cuando hay más de una sustancia. En el caso de una mezcla binaria (el objeto de estudio del presente trabajo), cada fase tendrá una composición de cada componente tanto en la fase líquida como en la fase vapor. Una ecuación que permite relacionar las composiciones de ambos componentes es la Ley de Raoult.

$$Y_i P = X_i P_i^{sat}$$

Ecuación 2: Ecuación de Raoult

Donde:

Y_i: Composición del componente i en la fase vapor
 P: Presión total del sistema
 X_i: Composición del componente i en la fase líquida
 P_i^{sat}: Presión de vapor del componente i

Se puede observar cómo las propiedades intensivas comienzan a participar en las ecuaciones para permitir la aplicación en diversas mezclas. Sin embargo, esta ecuación aún considera la fase de vapor como ideal. La composición de un componente depende únicamente de sí mismo y no del otro componente. Más adelante veremos otras ecuaciones que permiten extender aún más este cálculo.

Un ejemplo típico de mezcla ideal es la mezcla de benceno y tolueno. Se trata de dos componentes muy similares en su estructura química. Esto hace que sus interacciones intermoleculares sean bajas. Si a esto se le suma una baja presión, el comportamiento del sistema Benceno/Tolueno sería predecible mediante la ecuación de gas ideal (Aldana Rivera, 2015).

3.8.3. Ley de Raoult modificada

Antes de introducir la modificación de la ecuación, se debe comprender el concepto de *propiedad parcial*. Es la manera de representar la interacción entre los componentes de la mezcla. Smith et al (2007) proponen una ecuación que define lo que es una *propiedad parcial molar*.

$$\dot{M}_i = \left(\frac{\partial M}{\partial n_i} \right)_{P,T,n_{j \neq i}}$$

Ecuación 3: Propiedad parcial molar

Donde:

Ṁ: Propiedad molar parcial
 M: propiedad termodinámica utilizada (por ejemplo, el volumen)

De manera general, se plantea una derivada parcial para cada componente. La propiedad podría ser cualquiera. Smith et al (2007. P.360) ilustran esto mediante un ejemplo: la mezcla de agua y alcohol. Experimentalmente, se demostró que al mezclar un volumen A de agua con un volumen B de alcohol, el volumen total es menor que A+B.

Este concepto permite introducir las propiedades parciales en las ecuaciones de estado para obtener resultados más alejados de la idealidad y más cercanos a la realidad.

Para corregir la ecuación de Raoult, se agregan dos términos. Podría considerarse que ambos ya existen en la ecuación original, pero para condiciones de idealidad, su valor es igual a uno.

El primero de estos términos es el *coeficiente de fugacidad*. Es el cociente entre una propiedad en estado ideal y en su estado real. En nuestro caso, esta propiedad es la presión. De modo que la presión real es la presión ideal multiplicada por este coeficiente.

El otro término introducido es el *coeficiente de actividad*. Se trata de un término similar al coeficiente de fugacidad, pero se corrige la concentración en lugar de la presión.

$$Y_i P \varphi_i = X_i P_i^{sat} \gamma_i$$

Ecuación 4: Ecuación de Raoult corregida

Donde:

φ_i : coeficiente de fugacidad del componente i

γ_i : coeficiente de actividad del componente i

3.8.4. Ecuación de Antoine

Es una de las primeras ecuaciones que utiliza valores de constantes que son propios de cada sustancia. Esto permite corregir de cierta manera la idealidad de la mezcla, para obtener un valor más cercano a la realidad (Carlier Nieto et al, 2016).

$$\text{Log}_{10} P^{sat} = A - \frac{B}{T + C}$$

Ecuación 5: Ecuación de Antoine

Donde:

A, B y C son constantes determinadas experimentalmente.

Nota: también se puede encontrar la ecuación utilizando el logaritmo natural (las constantes serán distintas).

Diversos investigadores han dedicado grandes esfuerzos a calcular estos coeficientes para muchas sustancias. De igual manera, se han llegado a más y mejores correlaciones. Las ecuaciones estudiadas hasta ahora son las bases para los modelos termodinámicos de gran aplicación hoy en día.

3.8.5. Ecuación de Van Der Waals

Las ecuaciones polinomiales cúbicas en el volumen molar son, de hecho, las ecuaciones más sencillas capaces de representar el comportamiento de líquidos y vapores (Smith et al, 2007. P.91).

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{V^2}$$

Ecuación 6: Ecuación de Van der Waals

Donde a y b son constantes positivas.

Los valores de a y b pueden calcularse a partir de propiedades intensivas para caracterizar cada sustancia.

$$a = \frac{27R^2 T_c^2}{64P_c}$$

Ecuación 7: constante a de Van der Waals

Donde:

T_c : Temperatura crítica

P_c : Presión crítica

$$b = \frac{RT_c}{8P_c}$$

Ecuación 8: constante b de Van der Waals

Nótese que, si las constantes a y b son iguales a cero, se obtiene la ecuación de los gases ideales. Esta ecuación fue la primera *ecuación cúbica de estado* propuesta por Johannes Diderik Van der Waals en 1873. Es muy utilizada a nivel académico por su importancia y sencillez. Sin embargo, muchos autores han hecho modificaciones de esta para ajustarla aún mejor a un comportamiento real.

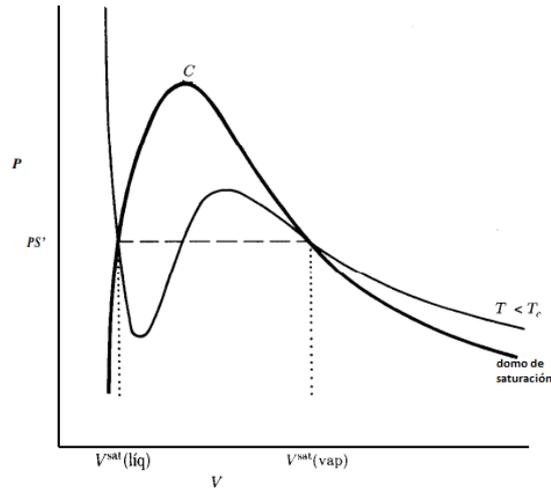


Ilustración 3: Curvas de Van der Waals

Se puede observar que curva tiene un comportamiento según lo esperado fuera del domo. Sin embargo, en su interior, sabemos que existe una única temperatura de ebullición (o condensación). Por lo tanto, un buen ajuste debería asemejarse más a la línea horizontal punteada. Este es uno de los principales problemas de las ecuaciones cúbicas de estado y el motivo por el cual se han desarrollado más ecuaciones a partir de la de Van der Waals. Cabe destacar que este es el comportamiento de una sustancia pura, por lo que el ajuste sería aún más alejado de la realidad para una mezcla binaria, como es el objeto de estudio de este trabajo.

3.8.6. Ecuación de Redlich/Kwong

Se trata de la primera ecuación cúbica de estado moderna de aplicación en la industria, fue publicada en 1949 (Smith et al, 2007. P.93).

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a}{\sqrt{T} V(V + b)}$$

Ecuación 9: Ecuación de Redlich/Kwong

De forma análoga a la ecuación de Van der Waals, los valores de a y b pueden obtenerse a partir de la temperatura y presión críticas:

$$a = \frac{0,42748R^2T_c^2}{P_c}$$

Ecuación 10: Constante a de Redlich/Kwong

$$b = \frac{0,08664RT_c}{P_c}$$

Ecuación 11: Constante b de Redlich/Kwong

Las ecuaciones de estado cúbicas permiten determinar los coeficientes de fugacidad correspondientes a factores correctores de la idealidad de las fases predichas por la Ley de Raoult para presiones bajas y moderadas (Durán-García y Ruiz-Navas, 2020. P.3).

Debido a la complejidad de la ecuación, obtener una solución analíticamente puede ser complicado. Por este motivo, se suele recurrir a métodos de cálculo iterativo para obtener una solución de forma rápida y sencilla (Smith et al, 2007. P.93). En este punto entran en juego los simuladores y programas de cálculo. Comercialmente se utilizan MathCad, Maple, Pro2, Unisim, HYSYS, entre otros.

Los simuladores hoy en día permiten calcular, con resultados reales y acertados, las propiedades como densidad, temperatura, entropía, entalpía, etc. Basándose en estas propiedades, se permiten estimar estados de equilibrio termodinámico (Lu et al, 2007).

3.8.7. Modelo de Wilson

G. M. Wilson publicó en 1964 un modelo de comportamiento de solución, conocido desde entonces como la Ecuación de Wilson. Su fundamento teórico es el concepto de *composición local*, que toma en cuenta para una mezcla las diferencias en el tamaño molecular y las fuerzas intermoleculares (Smith et al, 2007, P.443). Los mismos autores también afirman que los modelos de composición local tienen una flexibilidad limitada para el ajuste de datos, pero son adecuados para la mayor parte de las aplicaciones en ingeniería

Resultó ser de gran éxito para el tratamiento de mezclas en la correlación de datos de ELV. Por esto motivo, la ecuación de Wilson es la base para otros modelos alternativos de composición local, como por ejemplo el modelo NRTL. Estos dos modelos también suelen ser categorizados como *Modelos de energía libre de Gibbs en exceso* y también como *Modelos moleculares* (Simoni et al, 2008). Esta última categorización con el objetivo de diferenciarlos de los *Modelos Electrolitos*, como el eNRTL (Electrolyte Non-Random Two-Liquid model) que no se abarca en este trabajo.

$$\frac{G^E}{RT} = -x_1 \ln(x_1 + x_2 \Lambda_{12}) - x_2 \ln(x_2 + x_1 \Lambda_{21})$$

Ecuación 12: Ecuación de Wilson para mezcla binaria

Donde:

G^E : energía libre de Gibbs

X_i : composición

Λ_{ij} : Parámetro de interacción binaria

Reordenando la ecuación para incluir el coeficiente de actividad, resulta:

$$\ln(\gamma_1) = -\ln(x_1 + x_2 \Lambda_{12}) + x_2 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right)$$

Ecuación 13: Ecuación de Wilson para el componente 1

$$\ln(\gamma_2) = -\ln(x_2 + x_1 \Lambda_{21}) - x_1 \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right)$$

Ecuación 14: Ecuación de Wilson para el componente 2

Un concepto importante es el de dilución infinita. Se trata del caso en que la composición de uno de los componentes sea demasiado pequeña o despreciable. Esto da lugar a las siguientes ecuaciones:

$$\ln(\gamma_1^\infty) = -\ln(\Lambda_{12}) + 1 - \Lambda_{21}$$

Ecuación 15: Actividad de Wilson para dilución infinita del componente 1

$$\ln(\gamma_2^\infty) = -\ln(\Lambda_{21}) + 1 - \Lambda_{12}$$

Ecuación 16: Actividad de Wilson para dilución infinita del componente 2

Donde:

γ_1^∞ : Coeficiente de actividad del componente 1 en una dilución infinita.

γ_2^∞ : Coeficiente de actividad del componente 2 en una dilución infinita.

Estos dos valores son parámetros que permiten caracterizar un componente en la mezcla.

3.8.8. NRTL

El Modelo no aleatorio de dos líquidos NRTL (Non-Random Two-Liquid por sus siglas en inglés) es un modelo que relaciona los coeficientes de actividad de un componente con su composición en la mezcla. Es muy similar al de Wilson, pero contiene tres parámetros para modelar un sistema binario (Smith et al, 2007. P.444).

$$\frac{G^E}{x_1 x_2 RT} = \frac{G_{21} \tau_{21}}{x_1 + x_2 G_{21}} + \frac{G_{12} \tau_{12}}{x_2 + x_1 G_{12}}$$

Ecuación 17: NRTL

Donde:

$$\tau_{12} = \frac{b_{12}}{RT}, \tau_{21} = \frac{b_{21}}{RT}, G_{12} = e^{-\alpha \tau_{12}}, G_{21} = e^{-\alpha \tau_{21}}$$

Los parámetros b_{12} , b_{21} y α son específicos para un par de componentes en particular. Se trata de parámetros independientes de la temperatura y la composición, por lo que son muy útiles para trabajar a distintas condiciones.

Las ecuaciones para dilución infinita son en este caso:

$$\ln(\gamma_1^\infty) = \tau_{21} + \tau_{12} e^{-\alpha \tau_{12}}$$

Ecuación 18: Actividad de NRTL para dilución infinita del componente 1

$$\ln(\gamma_2^\infty) = 712 + 721 e^{-\alpha \tau_{21}}$$

Ecuación 19: Actividad de NRTL para dilución infinita del componente 2

3.8.9. UNIQUAC

Es un modelo aún más exhaustivo que sus predecesores Wilson y NRTL. Su nombre proviene de la mezcla de las palabras en inglés Universal Quasichemical. Simoni et al (2008) afirman que sus parámetros son menos sensibles a las variaciones de temperatura. Por su parte, Cidre et al (2009) indican que, debido al hecho de considerar parámetros representativos del tamaño molecular, la ecuación UNIQUAC es apropiada para todo tipo de sistemas.

Es un modelo de coeficiente de actividad similar a los dos anteriores mencionados, pero la energía libre de Gibbs consiste en la suma de un término de entropía y otro de entalpía. En la literatura también se habla de un término combinatorio y otro residual (Smith et al, 2007. P.832). Este último enfoque permite trabajar con la energía libre de Gibbs para compuestos puros y agregar un término para considerar las interacciones intermoleculares.

$$g^c = \sum_i x_i \ln\left(\frac{\Phi_i}{x_i}\right) + 5 \sum_i q_i x_i \ln\left(\frac{\theta_i}{\Phi_i}\right)$$

Ecuación 20 Término combinatorio UNIQUAC

Siendo:

$$\Phi_i = \frac{x_i r_i}{\sum x_j r_j}, \theta_i = \frac{x_i q_i}{\sum x_j q_j}$$

Donde:

g^c : término combinatorio

q_i : término relacionado con el área superficial de los compuestos químicos puros

r_i : volúmenes relativos de Van der Waals

$$g^R = - \sum_i q_i x_i \ln\left(\sum_j \theta_j \tau_{ji}\right)$$

Ecuación 21: Término residual UNIQUAC

Siendo:

$$\tau_{ji} = e^{\frac{-(u_{ji} - u_{ii})}{RT}}$$

u_{ij} : parámetros de la ecuación de UNIQUAC.

Para incluir el término del coeficiente de actividad en la ecuación, recurrimos a la ecuación 3, sobre propiedades parciales molares. Aplicando a γ_i :

$$\ln(\gamma_i) = \left[\frac{\partial \left(\frac{nG^E}{RT} \right)}{\partial n_i} \right]_{P,T,n_j}$$

Ecuación 22: Coeficiente de actividad parcial

Esto nos lleva a la siguiente expresión para el término combinatorio de la ecuación 20:

$$\ln(\gamma_i) = \ln(\gamma_i^C) + \ln(\gamma_i^R)$$

Ecuación 23: Ecuación de UNIQUAC con coeficientes de actividad

$$\ln(\gamma_i^C) = 1 - J_i + \ln(J_i) - 5q_i \left(1 - \frac{J_i}{L_i} + \ln\left(\frac{J_i}{L_i}\right) \right)$$

Ecuación 24: Término combinatorio UNIQUAC aplicado a coeficientes de actividad

Donde:

$$J_i = \frac{r_i}{\sum_j r_j x_j}, L_i = \frac{q_i}{\sum_j q_j x_j}$$

Finalmente, para el término residual de la ecuación 21, se tiene:

$$\ln(\gamma_i^R) = q_i \left[1 - \ln(S_i) - \sum_j \theta_j \frac{\tau_{ij}}{S_j} \right]$$

Ecuación 25: Término residual UNIQUAC aplicado a coeficientes de actividad

Donde:

$$S_i = \sum_l \theta_l \tau_{li}$$

3.9. Tipos de mezclas binarias

Como se ha mencionado en el apartado anterior, los modelos termodinámicos permiten predecir el comportamiento de sustancias puras o mezclas. En este trabajo, se utilizará una mezcla binaria. Dependiendo de la naturaleza de ambas especies, estas interaccionarán de una manera determinada y es necesario que el modelo se adecúe a la mezcla en particular.

En el apartado 8.8 se mencionó un parámetro α que depende precisamente de la interacción de las especies en el caso del modelo NRTL. Renon y Prausnitz (1968. P.139) resumen en la siguiente tabla los tipos de compuestos y algunos parámetros según distintos modelos termodinámicos:

Tabla 1: Parámetros de distintos modelos para los tipos de mezclas binarias

Type	Root-mean-square average deviation in vapor-phase mole fraction × 1000				Root-mean-square average relative deviation in pressure × 1000				α_{12}	No. of systems
	van Laar	Heil	Wilson	NRTL	van Laar	Heil	Wilson	NRTL		
Ia	4	4	4	4	3	3	3	3	0.30	8
Ib	7	7	7	7	6	6	6	6	0.30	10
Ic	7	7	7	7	9	9	9	9	0.30	11
II	7	8	13	6	8	10	21	8	0.20	9
III	15	7	11	7	15	4	8	4	0.40	3
IV	26	22	10	14	34	28	11	24	0.47	13
V	13	10	5	5	16	11	4	5	0.47	2
VI	10	10	13	10	16	16	21	16	0.30	2
VII	—	—	—	—	12	13	15	13	0.47	2

Renon y Prausnitz también explican qué compuestos pueden categorizarse según esta clasificación:

Tipo I: compuestos cuyo comportamiento no se desvía demasiado de la idealidad. Se sigue el siguiente criterio:

$$|G^E(\text{máxima})| < 0,35RT$$

- Ia: Incluye muchas de las mezclas no polares, por ejemplo, hidrocarburos y tetracloruro de carbono. No incluye mezclas de fluorocarbonos y parafinas.
- Ib: Incluye algunas mezclas de compuestos no polares y líquidos no asociados. Por ejemplo, n-heptano / metil-etil-cetona, benceno / acetona y tetracloruro de carbono / nitroetano.
- Ic: Algunas mezclas de líquidos polares: algunos con energía libre de Gibbs negativa. Por ejemplo, acetona / cloroformo y cloroformo / dioxano. También con energía libre de Gibbs positiva, pero pequeña, como la mezcla de acetona / metil-acetato y etanol / agua.

Tipo II: Incluye mezclas de hidrocarburos saturados con líquidos polares no asociados. Blackburn (1969) define a los líquidos asociados como aquellos que contienen moléculas que “se asocian” (se atraen), pero no mediante enlaces iónicos y covalentes, sino mediante puentes de hidrógeno. Ejemplos de mezclas tipo II son n-hexano / acetona y isooctano / nitroetano.

Tipo III: Incluye mezclas de hidrocarburos y sus homólogos perfluorocarbonos. Por ejemplo, n-hexano / perfluoro-n-hexano. Los autores Renon y Prausnitz (1969) recomiendan los modelos Heil y NRTL para este tipo de mezcla.

Tipo IV: Incluye mezclas de sustancias fuertemente autoasociadas y una sustancia no polar. Un ejemplo podría ser una mezcla de un alcohol con un hidrocarburo. Los autores recomiendan en este caso, el uso de Wilson y NRTL.

Tipo V: Representa un sistema de dos sustancias polares (acetonitrilo y nitrometano) con tetracloruro de carbono. Se recomienda en este caso el uso de NRTL y Wilson.

Tipo VI: Representa un sistema de agua y una sustancia polar no asociada (como la acetona y el dioxano). El mejor ajuste en este caso son las ecuaciones de Van Laar y NRTL.

Tipo VII: Representa un sistema de agua y una sustancia polar asociada (como por ejemplo el butilglicol y piridina).

3.10. Criterios para seleccionar el Modelo Termodinámico

Uno de los principales criterios para una mezcla binaria es la polaridad de las especies. Este es un concepto químico que explica cómo son las interacciones atómicas en una molécula. La diferencia de electronegatividad entre un átomo y otro puede causar una mayor densidad de carga hacia el átomo más electronegativo. Esto influye en la manera en que las sustancias a nivel macroscópico interactúan consigo misma y con otras sustancias cuando están en una mezcla. Un ejemplo del efecto de la polaridad entre dos sustancias es el del agua y el aceite.

Basándonos en este criterio existirían tres tipos de mezcla: polar / polar, polar / no polar y no polar / no polar. Sin embargo, como ya se ha visto en el apartado anterior, se deben considerar más interacciones entre las especies y también la magnitud de estas. Cidre et al (2009, P.6) proponen una clasificación basada en la desviación respecto a la idealidad en la Ley de Raoult. Para ello, realizaron la siguiente clasificación de los compuestos puros en distintas clases:

Tabla 2: Clasificación de los compuestos puros

Clase	Descripción	Ejemplos
I	Moléculas capaces de formar redes tridimensionales de fuertes enlaces H.	Agua, glicoles, glicerol, aminoalcoholes, hidroxilaminas, hidroxí-ácidos, polifenoles y amidas
II	Otras moléculas que contienen átomos de hidrógeno activos y átomos dadores (O, N y F) a la vez.	Alcoholes, ácidos, fenoles, aminas primarias y secundarias, oximas, compuestos nitro y nitrilos con átomos α -hidrógeno, amoníaco, hidracina, fluoruro de hidrógeno y cianuro de hidrógeno.
III	Moléculas que contienen átomos dadores pero no átomos de hidrógeno activos.	Éteres, cetonas, aldehídos, ésteres, aminas terciarias (incluidas las de tipo piridina) y compuestos nitro y nitrilo sin átomos α -hidrógeno.
IV	Moléculas que contienen átomos de hidrógeno activos, pero no átomos dadores, que tienen además dos o tres átomos cloro en el mismo átomo carbono en que tienen un átomo hidrógeno, o un átomo cloro en el mismo átomo carbono y uno o más átomos cloro en átomos carbono adyacentes.	CHCl ₃ , CH ₂ Cl ₂ , CH ₃ CHCl ₂ , CH ₂ ClCH ₂ Cl, CH ₂ ClCHClCH ₂ Cl y CH ₂ ClCHCl ₂ .
V	Todas las restantes moléculas que no tienen ni átomos hidrógeno ni átomos dadores activos.	Hidrocarburos, bisulfuro de carbono, sulfuros, mercaptanos e hidrocarburos halogenados que no pertenecen a la clase IV

Luego, propusieron posibles combinaciones y las categorizaron según la desviación de la Ley de Raoult.

Tabla 3: Clasificación de compuestos de acuerdo con las desviaciones de la ley de Raoult

Clase	Formación de enlace de hidrógeno	Tipo de desviación
III + IV	Formación exclusiva de enlaces H	Siempre negativa
III + III III + V IV + IV IV + V V + V	No hay presencia de enlaces H	Cuasi ideales, siempre positiva o ideal
I + I I + II I + III II + II II + III	Se forman y se rompen enlaces H	Generalmente positiva, pero algunas mezclas presentan desviaciones negativas
I + IV (frecuentemente con solubilidad limitada) II + IV	Se forman y se rompen enlaces H, pero la disociación de la Clase I o II es un efecto más importante	Siempre positiva
I + V II + V	Sólo se rompen enlaces H	Siempre positiva

A continuación, proponen unos grupos en función de las clases de compuestos involucrados (se ha cambiado la nomenclatura para que sea consistente con este trabajo).

Tabla 4: Clasificación de tipos de mezcla en grupos:

Grupo	Componentes		Ejemplo
	Presencia	Ausencia	
A	Clase V	Fluorocarburos Clases I, IV	Benzeno - Pentano Ciclohexano - CCl ₄
B	Hidrocarburos Fluorocarburos	Clases I, IV	C ₆ F ₁₄ - C ₆ H ₁₄
C	Clase III Clase V	Clases I, II, IV Compuestos de Nitrógeno o nitrilos	Acetato de Etilo - Hexano Acetona - CCl ₄
D	Clase III Clase I Compuestos de Nitrógeno o nitrilos	Clases I, II, IV	Nitrometano - Hexano Acetonitrilo - CCl ₄
E	Clase III	Clases I, II, IV	Nitrometano - Acetona Acetona - acetonitrilo
F	Clase III Clase IV	Clases I, II	CHCl ₃ - Acetona CH ₂ Cl ₂ - Acetato de etilo
G	Clases I, II Hidrocarburos saturados	Clases III, IV Hidrocarburos no saturados	Metanol - Hexano Etanol - Ciclohexano
H	Clases I, II Hidrocarburos no saturados	Clases II, IV	Metanol - Benceno Etanol - CCl ₄
I	Clases I, II Clase III		Metanol - Nitrometano Etanol - Acetona
J	Clases I, II Clase IV		Metanol - CHCl ₃ Etanol - Piridina
K	Agua Clase III	Compuestos asociados	Agua - Acetona
L	Agua Clases I, II		Agua - Etanol

Finalmente, Cidre et al (2009) evalúan en una tabla el nivel de aplicabilidad de distintos modelos termodinámicos, con valores del 1 al 5 (siendo 5 el mejor ajuste esperado). Dicha evaluación se refiere al comportamiento del líquido, lo cual puede ser aplicable al ELV, que es nuestro objeto de estudio.

Tabla 5: Precisión esperada de los modelos termodinámicos

Grupo	Grupo											
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
Wilson	5	4	5	4-5	5	4	5	5	5	4	4	4
NRTL	5	4	5	4-5	5	4	4	5	5	4-5	4	4

Grupo	Grupo											
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
UNIQUAC	5	4	5	4-5	5	4	4	5	5	5	4	4
Van Laar	5	4	4	3-4	4	4	2-3	3	3-4	3	2-3	3
Margules	5	3-4	4	3	4	3-4	2	3	3	3	2-3	3

Otros autores han demostrado que las condiciones de presión y temperatura también influyen en la elección del modelo termodinámico más adecuado. Esto es consistente con lo que se explicó en el marco teórico sobre el comportamiento ideal a temperaturas relativamente altas y presiones bajas. La siguiente tabla fue creada por Dimian et al (2014, P.79) para resumir el rango de temperaturas y presiones en las que ellos recomiendan utilizar las diferentes ecuaciones de estado.

Tabla 6: Rangos de T/P y otros parámetros para distintos modelos termodinámicos

K-factors method	T/P range	Mixture	Applications	Enthalpy/entropy
Grayson-Streed	-20 to 450 °C	Hydrocarbon + H ₂ , CH ₄	Refining Topping Heavy ends	Curl-Pitzer Lee-Kessler
Chao-Seader	20 to 250 °C 1 to 100 bar	Hydrocarbon + H ₂ (max 20%)	Gas processing Depropaniser Debutaniser	Curl-Pitzer Lee-Kessler
BK10	0.1 to 7 bar 40 to 500 °C	Naphta C1 to C7 BTX	Vacuum distillation Atmospheric distillation BTX columns	Lee-Kessler Rice
SRK	< T _c < P _c	Hydrocarbon LNG H ₂ S, CO ₂ , N ₂	Oil & gas Cryogenics	SRK
PR	< or > T _c < or > P _c	Hydrocarbon LNG H ₂ S, CO ₂ , N ₂	Oil & gas Cryogenics	PR
Modified EOS	< or > T _c < or > P _c	Hydrocarbon Polar Sub-critical Supercritical	Petrochemicals Basic organics Gas processing	Modified EOS PR, SRK
Wilson	20 to 200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat
NRTL	20:200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE, LLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat
UNIQUAC	20 to 200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE, LLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat
UNIFAC	20 to 200 °C < 5 bar	Non-ideal VLE, LLE	Organic Petrochemicals	Ideal + Latent heat

Como se puede apreciar, los modelos desarrollados en este trabajo (Wilson, NRTL y UNIQUAC) se ajustan al comportamiento real en condiciones similares: entre 20 y 200 °C y presiones menores a 5 bar.

En el siguiente capítulo, se explicará cuál es la mezcla, por qué se ha escogido y qué modelos se aplicarán.

4. MATERIALES Y MÉTODOS

Este capítulo comprende las herramientas que se utilizarán y la manera de hacerlo para poder alcanzar los objetivos planteados. Se divide en dos partes: la primera consiste en la elección de las mezclas (datos reales) y la segunda consiste en todo lo que tiene que ver con la simulación (datos teóricos).

4.1. Elección de componentes de la mezcla

Conforme a los objetivos y el alcance de este trabajo, se realizó un estudio bibliográfico. Se buscaron artículos y publicaciones científicas, en revistas de suficiente renombre, que mostraran datos fiables de ELV. Los criterios para la elección de los datos fueron (basados en los criterios expuestos en el apartado anterior):

- Temperaturas entre 20 y 200 °C y presiones menores a 5 bar.
- Mezclas de componentes que no formen azeótropos.
- Artículos que contengan suficientes datos de ELV en distintas condiciones.

Además de esto, estudios como el de Castillo-Borja et al (2013) afirman que los resultados obtenidos mediante una simulación tienden a ajustarse favorablemente a los valores medidos experimentales lejos de la región del punto crítico

Se escogió el artículo *Isobaric vapor-liquid equilibria for two binary systems (2-methyl-1-pentanol + 2,3-butanediol and 3-methyl-1-butanol + 2,3-butanediol) at (40, 60, 80, and 101) kPa* (Yim et al, 2021). El artículo consiste en el estudio del ELV de dos mezclas binarias a 4 presiones distintas. El artículo fue publicado en la revista Elsevier en 2021.

Para la comparación en este trabajo, se utilizarán ambas mezclas. Para simplificar su nomenclatura, llamaremos *Mezcla 1* al sistema 2-metil-1-pentanol / 2,3-butanodiol y *Mezcla 2* al sistema 3-metil-1-butanol / 2,3-butanodiol.

4.1.1. Breve descripción de las sustancias

- 2,3-butanodiol: Es un alcohol clasificado como un glicol que puede encontrarse en la manteca de cacao y en las raíces de Ruta Graveolens (planta nativa del sur de Europa). También puede ser sintetizado por bacterias lácticas y mediante la hidrólisis de 2,3-epoxybutano. Se puede observar que este compuesto está en ambas mezclas. Yim et al (2021) explican que se trata de un compuesto difícil de producir a gran escala, pues los costes de producción y purificación son elevados. Actualmente se conocen diversas aplicaciones en alimentos, fármacos y combustibles para aviones. Debido al creciente interés en este compuesto, los autores decidieron realizar un estudio riguroso que arrojara valores concluyentes de ELV que puedan servir a otros estudios.
- 2-metil-1-pentanol: Es un alcohol utilizado como solvente y también aparece como intermediario en la síntesis de otros compuestos.
- 3-metil-1-butanol: También llamado isopentanol e isopentil alcohol. Es un compuesto encontrado en la síntesis de aceite de plátano. También es muy útil en microbiología para detectar la presencia de bacterias.

El siguiente cuadro compara las sustancias y algunas de sus propiedades. Los datos fueron obtenidos del Handbook de Ingeniería Química (Perry y Green, 1997).

Tabla 7: Algunas propiedades físicas de los compuestos

Compuesto	2,3-butanodiol	3-metil-1-butanol	2-metil-1-pentanol
Fórmula química	C ₄ H ₁₀ O ₂	C ₅ H ₁₂ O	C ₆ H ₁₄ O
Masa molecular (kg/kmol)	90,12	88,15	102,17
Temperatura de ebullición (°C)	177,0	131,1	149,0

Los tres compuestos son relativamente similares en lo que respecta a sus fórmulas, masa molecular y punto de ebullición normal. El 2,3-butanodiol es el que tiene mayor temperatura de ebullición, a pesar de no ser el más pesado. Debido a esto y a que el compuesto es común a las dos mezclas, el 2,3-butanodiol es el componente *clave pesado* en ambos casos. Es decir, en una mezcla líquido-vapor de cualquiera de las dos mezclas, la fase líquida será más rica en 2,3-butanodiol y más pobre en el caso de la fase vapor.

El otro compuesto será el *clave ligero*. En cada caso y según corresponda, 2-metil-1-pentanol y 3-metil-1-butanol. Como se había mencionado en el punto 8.2 del marco teórico, las gráficas y tablas muestran únicamente la composición del clave ligero (pues la composición del otro compuesto es el resto). A partir de este momento, se sobreentiende que la composición en la mezcla 1 se refiere al 2-metil-1-pentanol y la composición en la mezcla 2 se refiere al 3-metil-1-butanol.

4.1.2. Montaje experimental

Se realizó un estudio riguroso mediante un montaje experimental. El equipo se muestra a continuación.

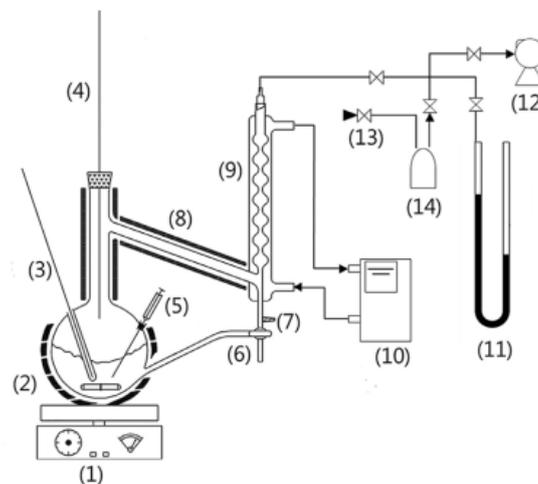


Ilustración 4: Diagrama del montaje experimental

Donde:

1. Agitador magnético
2. Manta térmica
3. Termopar para la fase líquida
4. Termopar para la fase vapor
5. Toma de muestra de fase líquida
6. Toma de muestra de vapor condensado
7. Toma de muestra de fase vapor
8. Cinta calentadora
9. Condensador
10. Circuito refrigerante
11. Manómetro
12. Bomba de vacío
13. Válvula de aguja
14. Matraz tampón

Las distintas sustancias fueron comprados a proveedores en Corea del Sur que garantizan una pureza de entre el 98 y el 99%. Las composiciones fueron medidas mediante cromatografía de gas, usando helio como gas de arrastre con una pureza de 99,9999%.

Para obtener los datos de ELV, se varió la concentración del clave ligero desde 0 hasta 100%, calentando hasta alcanzar el equilibrio a la presión fijada para cada concentración de la mezcla y midiendo los valores de temperatura y concentración para las fases de líquido y vapor.

4.1.3. Datos experimentales de ELV

Los datos de ELV reportados son los siguientes:

Tabla 8: Datos experimentales de ELV

Mezcla 1					Mezcla 2				
T/K	x_1	y_1	γ_1	γ_2	T/K	x_1	y_1	γ_1	γ_2
P = 101 kPa					P = 101 kPa				
453.7	0.0000	0.0000		1.0000	453.7	0.0000	0.0000		1.0000
452.3	0.0161	0.0534	1.2317	1.0738	449.9	0.0250	0.1264	1.3241	1.0828
449.4	0.0577	0.1615	1.1316	1.0934	446.4	0.0531	0.2425	1.3071	1.0873
445.4	0.1344	0.3092	1.0478	1.1222	439.8	0.1277	0.4673	1.2451	1.0416
442.2	0.2081	0.4220	1.0174	1.1453	434.8	0.1873	0.5820	1.2112	1.0470
437.0	0.3697	0.5995	0.9551	1.1959	426.1	0.3001	0.7211	1.1995	1.1151
432.6	0.5024	0.7204	0.9702	1.2380	420.3	0.4082	0.8263	1.2014	1.0234
429.7	0.6312	0.8105	0.9534	1.2583	416.1	0.4857	0.8822	1.2271	0.9403
426.9	0.7434	0.8730	0.9549	1.3442	413.5	0.5367	0.8934	1.2208	1.0469
424.7	0.8475	0.9305	0.9597	1.3440	410.4	0.6135	0.9209	1.2163	1.0546
422.5	0.9443	0.9768	0.9726	1.3350	407.8	0.6828	0.9505	1.2284	0.8940
421.5	1.0000	1.0000	1.0000		404.7	0.8388	0.9603	1.1207	1.6039
P = 80 kPa					P = 80 kPa				
446.8	0.0000	0.0000		1.0000	403.8	1.0000	1.0000	1.0000	
445.4	0.0164	0.0545	1.1988	1.0706	446.8	0.0000	0.0000		0.9984
442.6	0.0547	0.1723	1.2367	1.0733	444.1	0.0175	0.0990	1.3610	1.0677
438.0	0.1325	0.3470	1.1843	1.0832	439.6	0.0569	0.2729	1.2995	1.0489
434.3	0.2156	0.4787	1.1274	1.0909	434.7	0.1029	0.4195	1.2622	1.0471
430.2	0.3263	0.6074	1.0772	1.1099	429.4	0.1644	0.5555	1.2144	1.0433
425.2	0.4994	0.7533	1.0272	1.1297	421.2	0.2749	0.7174	1.1938	1.0398
423.0	0.5896	0.8129	1.0099	1.1356	414.9	0.3819	0.8152	1.1861	1.0193
419.0	0.7609	0.9024	0.9936	1.1853	411.6	0.4482	0.8706	1.1992	0.9119
417.3	0.8456	0.9434	0.9904	1.1372	407.4	0.5344	0.9028	1.1966	0.9630
415.1	0.9499	0.9858	0.9936	0.9587	404.6	0.5988	0.9263	1.2035	0.9516
413.9	1.0000	1.0000	1.0000		401.1	0.6939	0.9368	1.1842	1.2394
P = 60 kPa					P = 60 kPa				
438.5	0.0000	0.0000		1.0000	398.4	0.8142	0.9605	1.1373	1.4325
434.2	0.0510	0.1771	1.3267	1.0714	397.4	1.0000	1.0000	1.0002	
431.8	0.0864	0.2714	1.2952	1.0746	438.5	0.0000	0.0000		1.0000
429.2	0.1345	0.3776	1.2584	1.0656	436.3	0.0188	0.1074	1.2694	1.0427
425.7	0.2133	0.4846	1.1414	1.1055	430.5	0.0715	0.3176	1.1603	1.0383
422.2	0.3074	0.5997	1.1007	1.1131	425.6	0.1252	0.4775	1.1478	1.0116
417.0	0.4774	0.7552	1.0641	1.1027	420.4	0.1882	0.6042	1.1285	1.0060
414.1	0.5916	0.8233	1.0345	1.1419	412.5	0.3034	0.7534	1.1169	0.9958
410.9	0.7312	0.8883	1.0101	1.2466	407.3	0.3958	0.8430	1.1352	0.9027
408.8	0.8243	0.9280	1.0084	1.3387	404.5	0.4434	0.8682	1.1464	0.9238
406.3	0.9461	0.9783	1.0130	1.4575	400.9	0.5199	0.9031	1.1507	0.9164
405.2	1.0000	1.0000	1.0000		397.0	0.6090	0.9333	1.1646	0.9159
P = 40 kPa					P = 40 kPa				
427.5	0.0000	0.0000		1.0000	394.1	0.6921	0.9630	1.1739	0.7326
425.9	0.0174	0.0702	1.3425	1.0565	390.8	0.8316	0.9744	1.1164	1.0734
422.9	0.0540	0.2064	1.4045	1.0488	389.5	1.0000	1.0000	1.0000	
417.8	0.1375	0.4106	1.3030	1.0395	427.5	0.0000	0.0000		1.0000
414.3	0.2135	0.5266	1.2139	1.0507	424.1	0.0207	0.1365	1.3828	1.0534
409.4	0.3509	0.6615	1.1019	1.1083	418.5	0.0617	0.3133	1.2611	1.0834
405.6	0.4812	0.7547	1.0505	1.1747	413.4	0.1190	0.4867	1.1917	1.0541
402.2	0.6279	0.8477	1.0237	1.1725	409.4	0.1771	0.5991	1.1216	1.0354
399.8	0.7360	0.9010	1.0144	1.1897	403.3	0.2824	0.7433	1.0702	0.9783
397.5	0.8240	0.9387	1.0289	1.2200	399.3	0.3642	0.8197	1.0511	0.9191
395.1	0.9365	0.9852	1.0405	0.9064	395.9	0.4523	0.8856	1.0318	0.7844
393.8	1.0000	1.0000	1.0000		392.3	0.5489	0.9262	1.0138	0.7201
					389.9	0.6140	0.9508	1.0173	0.6248
					387.6	0.6794	0.9594	1.0121	0.6891
					383.1	0.8268	0.9728	1.0040	1.0525
					379.1	1.0000	1.0000	1.0000	

Como se puede observar, las tablas contienen las curvas de rocío y burbuja de cada mezcla a 101, 80, 60 y 40 kPa. Además, se muestran los coeficientes de actividad para cada punto. Las presiones son iguales o menores a una atmósfera y la temperatura máxima es 453,7 K (180.6°C). De modo que son datos consistentes con los criterios de selección utilizados y se tienen suficientes datos como para realizar varias simulaciones y poder contrastarlas.

4.2. El simulador UNISIM

Unisim Design ® es un simulador de procesos desarrollado por Honeywell. Se trata de una empresa multinacional norteamericana con sede en Nueva Jersey y tiene una variedad de productos de consumo, servicios de ingeniería y sistemas aeroespaciales. Entre su variedad de software, se encuentran programas para el control avanzado de procesos, el llamado Forge Corrosion Advisor, entre otros.

Unisim Design ® es el simulador utilizado en la Universidad de La Laguna en algunas de sus asignaturas y, por este motivo, fue la elección para realizar las simulaciones en este trabajo. El programa cuenta con una base de datos de compuestos bastante grande y también cuenta con una lista de paquetes termodinámicos (modelos) que se pueden utilizar. El programa es incluso capaz de recomendar un paquete para ciertos compuestos, o arrojar una alerta indicando que el paquete no es adecuado para una o más sustancias.

Por ejemplo, en la siguiente captura de pantalla, se observa que para el 2-metil-1-pentanol, el paquete SRK (Soave-Redlich-Kwong) no es recomendado. Aun así, el programa permite continuar, pero los cálculos pueden no converger y el programa podría dejar de responder.

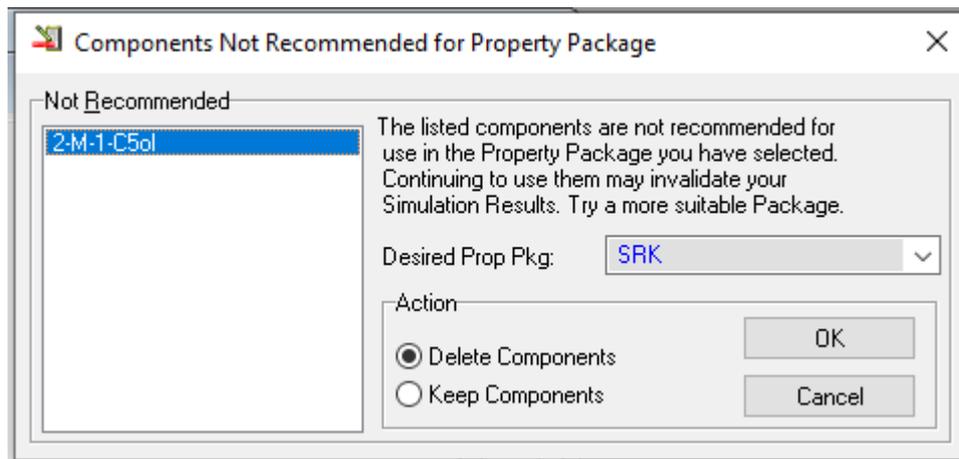


Ilustración 5: ejemplo de paquete no recomendado

4.2.1. Construcción de las curvas de equilibrio en el simulador

Para obtener las curvas de ELV que se van a comparar con los datos de la tabla 8, se seguirá un procedimiento similar a la construcción de las curvas con datos experimentales, pero todo a través del simulador.

En la siguiente figura, se puede observar el diagrama de flujo utilizado en la simulación de la mezcla 2 (el caso de la mezcla 1 es exactamente igual, pero con 2-metil-1-pentanol en lugar de 3-metil-1-butanol).

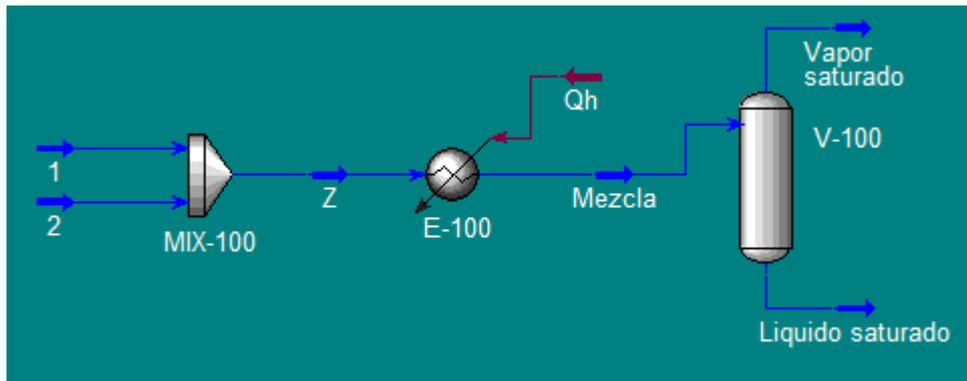


Ilustración 6: Diagrama de flujo de la simulación de la mezcla 2

Equipos y sus objetivos:

- MIX-100: un mezclador al cual entran dos corrientes de compuestos puros.
- E-100: un calentador cuyo objetivo es llevar la mezcla hasta una fracción de vapor que arbitrariamente hemos escogido como 50%, inyectando un calor Q_h .
- V-100: un separador Flash, cuyo objetivo es separar la fase vapor de la fase líquida.

Corrientes:

- 1: corriente de 3-metil-1-butanol puro.
- 2: corriente de 2,3-butanodiol puro.
- Z: ambos compuestos mezclados en la proporción necesaria.
- Mezcla: la corriente Z ha sido calentada hasta el 50% de vaporización.
- Vapor saturado: fase de vapor del ELV.
- Líquido saturado: fase líquida del ELV.

Nota 1: el separador Flash no es necesario, pues el simulador es capaz de proveer el valor de las composiciones del líquido y el vapor en el ELV. Sin embargo, se ha decidido incluirlos para que sea más sencillo apreciar la separación de forma visual.

Nota 2: el diagrama en el caso de la mezcla 1 es exactamente el mismo, pero la corriente 1 contiene 2-m-1-pentanol puro.

La herramienta *Case Study* (estudio de caso), permite hacer un cálculo iterativo para variar la composición del clave ligero desde 0 hasta 100%. Se ha hecho la simulación de modo que el flujo molar de Z sea igual a uno. Haciendo un balance de materia en el MIX-100:

$$m_z = 1 \frac{\text{kmol}}{h} = m_1 + m_2$$

Ecuación 26: Balance de materia en MIX-100

El simulador permite variar m_i desde cero hasta uno. Al tratarse de un flujo molar, la composición varía en la misma manera. El objetivo de la simulación es reproducir la tabla 8 para construir las curvas de rocío y burbuja, por lo que se hará un *Case Study* para cada mezcla y cada valor de presión (8 en total).

4.2.2. Uso de los Modelos Termodinámicos en Unisim

Para este trabajo, se han seleccionado los modelos Wilson, NRTL y UNIQUAC. Los 3 se encuentran en el apartado de modelos de actividad.

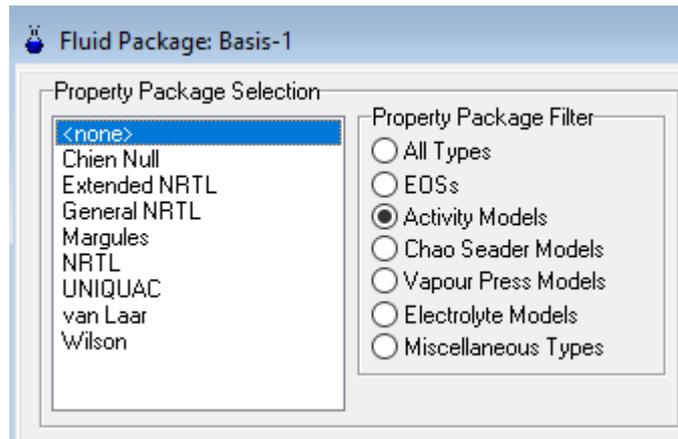


Ilustración 7: Modelos de actividad en Unisim

La simulación explicada anteriormente es compatible con estos tres paquetes y los cálculos convergen rápidamente. Se habló en el apartado anterior de 8 simulaciones en total. Entonces, se debe repetir el cálculo 8 veces para cada modelo termodinámico, obteniendo en total 24 tablas de ELV.

Se ha de comparar cada tabla obtenida con los datos reportados por Yim et al (2021).

Tabla 9: total de tablas de ELV a generar

Modelo	Mezcla 1				Mezcla 2			
	Presión (kPa)				Presión (kPa)			
	40	60	80	101	40	60	80	101
Wilson	1	1	1	1	1	1	1	1
NRTL	1	1	1	1	1	1	1	1
UNIQUAC	1	1	1	1	1	1	1	1

Por defecto, los modelos utilizan un modelo de vapor ideal, una estimación de temperatura UNIFAC de 25°C y utilizan también la corrección de *Poynting*. Esta corrección está relacionada con la presión de saturación de las sustancias en función de la temperatura (Harvey, 2017).

Las simulaciones se harán en principio con estos parámetros por defecto. De ser posible, y para cumplir con todos los objetivos del trabajo, se podrán modificar los parámetros para buscar un mejor ajuste (apartado 4 de este capítulo).

Para el caso del modelo de vapor, sabemos que al trabajar con presiones bastante bajas (entre 40 y 101 kPa), el modelo de vapor ideal debería acercarse al valor real y no se espera que el hecho de utilizar otro modelo para el vapor mejore el ajuste.

4.3. Comparación de los resultados obtenidos

4.3.1. Comparación gráfica

Para decidir qué modelo se ajusta mejor a los datos experimentales, lo primero que se hará es construir las curvas de rocío y burbuja. Se trazarán en el mismo gráfico las curvas reales y las teóricas. En este punto, las curvas simuladas tendrán la ventaja de poder generar cualquier cantidad de puntos. Hemos elegido 51 puntos para graficar entre 0 y 1, como se puede apreciar en la siguiente captura de pantalla.

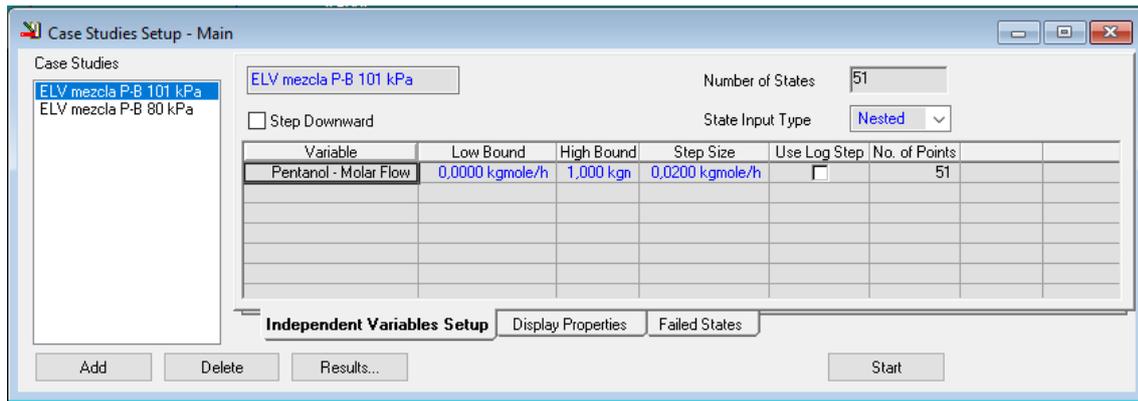


Ilustración 8. Variación del flujo molar en el estudio de caso

Como se observa, la variable independiente en el estudio de caso es el flujo molar del clave ligero (en el diagrama se ha abrevió como el nombre como “pentanol” en lugar de 2-metil-1-pentanol). Se divide el rango entre 0 y 1 kgmol/h en 50 saltos de 0,02 kgmol/h, obteniéndose en total 51 puntos para la gráfica.

Esto no es directamente una variación de la composición. Sin embargo, la simulación se ha diseñado para que el flujo molar total en la corriente Z (ilustración 6) sea igual a 1 kgmol/h. De esta manera, la variación de la composición seguirá en la misma proporción a la variación del flujo molar. Luego, las variables dependientes del estudio son: la temperatura en la corriente Mezcla y las composiciones del clave ligero en el vapor y el líquido saturados.

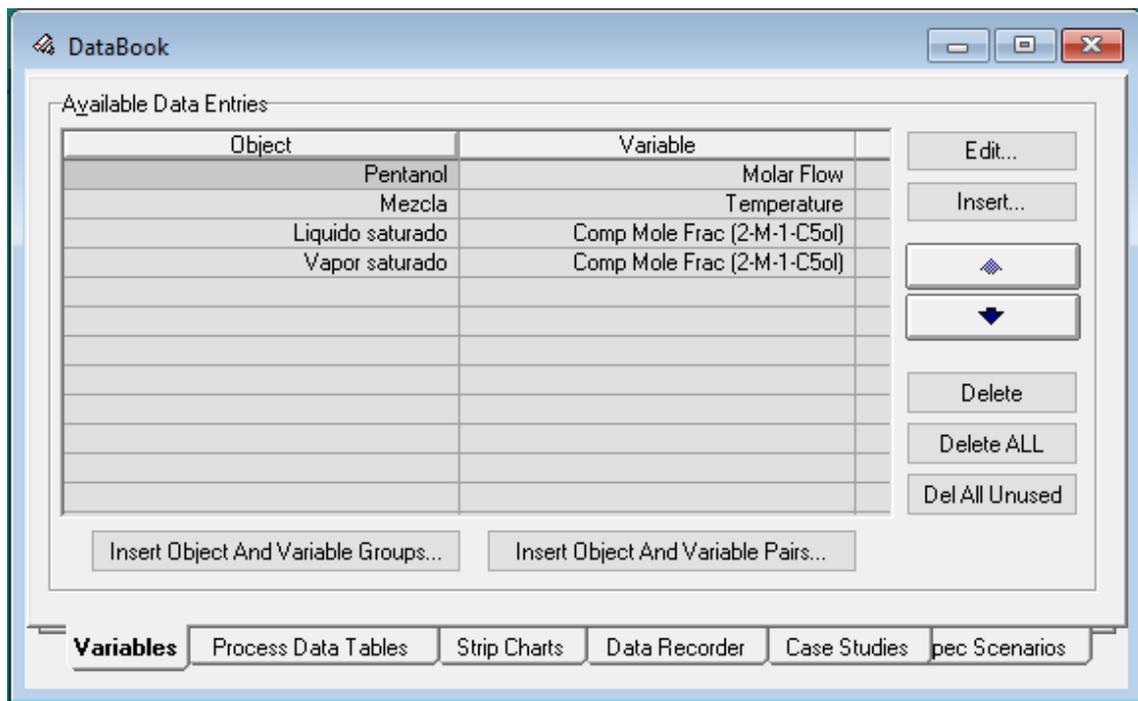


Ilustración 9: Variables dependiente e independientes

4.3.2. Comparación analítica

La comparación gráfica nos dará una idea de cuál es el mejor ajuste. Ahora, para obtener una comparación analítica, calcularemos desviaciones por punto y promedio para cada modelo y cada presión. El cálculo será similar al utilizado por Antón et al (2016).

$$\Delta y = \frac{y_{real} - y_{simulado}}{y_{real}}$$

Ecuación 27: Desviación porcentual en composición

Luego, la desviación promedio será:

$$\Delta \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_i^n \Delta y_i$$

Ecuación 28: Desviación porcentual en composición promedio

De igual manera, Yim et al (2021) han realizado una comparación entre los datos experimentales obtenidos por ellos mismos y una serie de datos simulados (mediante NRTL y UNISIM). Los resultados se observan en las siguientes tablas:

Tabla 10: Comparación de datos experimentales vs simulados hecha por Yim et al (2021)

Vapor-liquid equilibrium data correlated with NRTL, UNIQUAC for 2-methyl-1-pentanol + 2,3-butanediol at P = 101, 80, 60, 40 kPa.						Vapor-liquid equilibrium data correlated with NRTL, UNIQUAC for 3-methyl-1-butanol + 2,3-butanediol at P = 101, 80, 60, 40 kPa.					
Experimental Data		NRTL		UNIQUAC		Experimental Data		NRTL		UNIQUAC	
x ₁	y ₁	y ₁	Δy ₁	y ₁	Δy ₁	x ₁	y ₁	y ₁	Δy ₁	y ₁	Δy ₁
P = 101 kPa						P = 101 kPa					
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0161	0.0534	0.0616	0.0082	0.0618	0.0084	0.0250	0.1264	0.1271	0.0007	0.1264	0.0000
0.0577	0.1615	0.1855	0.0240	0.1854	0.0239	0.0531	0.2425	0.2436	0.0011	0.2428	0.0003
0.1344	0.3092	0.3395	0.0303	0.3384	0.0292	0.1277	0.4673	0.4649	-0.0024	0.4646	-0.0027
0.2081	0.4220	0.4442	0.0222	0.4432	0.0212	0.1873	0.5820	0.5860	0.0040	0.5858	0.0038
0.3697	0.5995	0.6132	0.0137	0.6139	0.0144	0.3001	0.7211	0.7406	0.0195	0.7397	0.0186
0.5024	0.7204	0.7226	0.0022	0.7238	0.0034	0.4082	0.8263	0.8341	0.0078	0.8321	0.0058
0.6312	0.8105	0.8110	0.0005	0.8120	0.0015	0.4857	0.8822	0.8810	-0.0012	0.8786	-0.0036
0.7434	0.8730	0.8776	0.0046	0.8781	0.0051	0.5367	0.8934	0.9046	0.0112	0.9022	0.0088
0.8475	0.9305	0.9318	0.0013	0.9319	0.0014	0.6135	0.9209	0.9319	0.0110	0.9298	0.0089
0.9443	0.9768	0.9765	-0.0003	0.9765	-0.0003	0.6828	0.9505	0.9495	-0.0010	0.9482	-0.0023
1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.8388	0.9603	0.9715	0.0112	0.9722	0.0119
P = 80 kPa						P = 80 kPa					
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0164	0.0545	0.0566	0.0021	0.0564	0.0019	0.0175	0.099	0.0984	-0.0006	0.0978	-0.0012
0.0547	0.1723	0.1713	-0.0010	0.1713	-0.0010	0.0569	0.2729	0.2719	-0.0010	0.2708	-0.0021
0.1325	0.3470	0.3472	0.0002	0.3478	0.0008	0.1029	0.4195	0.4190	-0.0005	0.4182	-0.0013
0.2156	0.4787	0.4803	0.0016	0.4808	0.0021	0.1644	0.5555	0.5595	0.0040	0.5592	0.0037
0.3263	0.6074	0.6077	0.0003	0.6074	0.0000	0.2749	0.7174	0.7232	0.0058	0.7230	0.0056
0.4994	0.7533	0.7465	-0.0068	0.7455	-0.0078	0.3819	0.8152	0.8221	0.0069	0.8210	0.0058
0.5896	0.8129	0.8030	-0.0099	0.8020	-0.0109	0.4482	0.8706	0.8654	-0.0052	0.8639	-0.0067
0.7609	0.9024	0.8932	-0.0092	0.8928	-0.0096	0.5344	0.9028	0.9074	0.0046	0.9057	0.0029
0.8456	0.9434	0.9327	-0.0107	0.9327	-0.0107	0.5988	0.9263	0.9304	0.0041	0.9288	0.0025
0.9499	0.9858	0.9786	-0.0072	0.9787	-0.0071	0.6939	0.9368	0.9546	0.0178	0.9536	0.0168
1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.8142	0.9605	0.9718	0.0113	0.9722	0.0117
P = 60 kPa						P = 60 kPa					
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0510	0.1771	0.1805	0.0034	0.1799	0.0028	0.0188	0.1074	0.1035	-0.0039	0.0988	-0.0086
0.0864	0.2714	0.2731	0.0017	0.2730	0.0016	0.0715	0.3176	0.3193	0.0017	0.3120	-0.0056
0.1345	0.3676	0.3727	-0.0049	0.3731	-0.0045	0.1252	0.4775	0.4711	-0.0064	0.4656	-0.0119
0.2133	0.4746	0.4954	0.0108	0.4960	0.0114	0.1882	0.6042	0.5996	-0.0046	0.5967	-0.0075
0.3074	0.5797	0.6037	0.0040	0.6038	0.0041	0.3034	0.7534	0.7554	0.0020	0.7540	0.0006
0.4774	0.7552	0.7438	-0.0114	0.7433	-0.0119	0.3958	0.8430	0.8356	-0.0074	0.8340	-0.0090
0.5916	0.8233	0.8151	-0.0082	0.8145	-0.0088	0.4434	0.8682	0.8678	-0.0004	0.8658	-0.0024
0.7312	0.8883	0.8873	-0.0010	0.8871	-0.0012	0.5199	0.9031	0.9071	0.0040	0.9048	0.0017
0.8243	0.9280	0.9294	0.0014	0.9294	0.0014	0.6090	0.9333	0.9400	0.0067	0.9376	0.0043
0.9461	0.9783	0.9793	0.0010	0.9794	0.0011	0.6921	0.9630	0.9602	-0.0028	0.9582	-0.0048
1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.8316	0.9744	0.9787	0.0043	0.9781	0.0037
P = 40 kPa						P = 40 kPa					
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0174	0.0702	0.0716	0.0014	0.0769	0.0067	0.0207	0.1365	0.1347	-0.0018	0.1419	0.0054
0.0540	0.2064	0.2023	-0.0041	0.2049	-0.0015	0.0617	0.3133	0.3217	0.0084	0.3286	0.0153
0.1375	0.4106	0.4080	-0.0026	0.3991	-0.0115	0.1190	0.4867	0.4896	0.0029	0.4896	0.0029
0.2135	0.5266	0.5231	-0.0035	0.5168	-0.0098	0.1771	0.5991	0.6035	0.0044	0.5978	-0.0013
0.3509	0.6615	0.6584	-0.0031	0.6660	0.0045	0.2824	0.7433	0.7382	-0.0051	0.7277	-0.0156
0.4812	0.7547	0.7550	0.0003	0.7684	0.0137	0.3642	0.8197	0.8081	-0.0116	0.7973	-0.0224
0.6279	0.8477	0.8472	-0.0005	0.8568	0.0091	0.4523	0.8856	0.8629	-0.0227	0.8532	-0.0324
0.7360	0.9010	0.9050	0.0040	0.9088	0.0078	0.5489	0.9262	0.9070	-0.0192	0.8995	-0.0267
0.8240	0.9387	0.9444	0.0057	0.9444	0.0057	0.6140	0.9508	0.9305	-0.0203	0.9242	-0.0266
0.9365	0.9852	0.9835	-0.0017	0.9822	-0.0030	0.6794	0.9594	0.9490	-0.0104	0.9442	-0.0152
1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.8268	0.9728	0.9785	0.0057	0.9767	0.0039
						1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000

Para poder hacer esta comparación punto a punto, no se pueden utilizar los mismos del apartado anterior (comparación gráfica), pues los puntos experimentales no fueron generados con equidistancia entre sí. De tal manera que, para obtener cada punto, se utilizará el mismo diagrama mostrado en la ilustración 6, pero forzando la condición de la composición del clave ligero en el líquido saturado y se obtendrá la composición del clave ligero en el vapor saturado (x_1). Se obtendrá una tabla muy similar, pero con los resultados obtenidos mediante el simulador UNISIM y agregando además el modelo de Wilson. En nuestro caso, se hará la misma comparación, es decir, tomando x_1 como referencia y calculando la diferencia entre los valores simulados de y_1 . También se compararán los valores simulados obtenidos por Yim et al (2021) con los nuestros.

En vista de que los coeficientes de actividad también son reportados por Yim et al (2021), se hará una comparación similar:

$$\Delta\gamma_i = \frac{\gamma_{real} - \gamma_{simulado}}{\gamma_{real}}$$

Ecuación 29: Desviación en coeficiente de actividad

$$\Delta\bar{\gamma}_i = \frac{1}{n} \sum_j^n \Delta\gamma$$

Ecuación 30: Desviación en coeficiente de actividad promedio

Donde i hace referencia al componente en la mezcla y j a la temperatura correspondiente a dicha desviación.

Los valores de los coeficientes de actividad de ambos componentes γ_1 y γ_2 no pueden ser medidos experimentalmente, pues no existe un equipo que lo permita. De acuerdo con lo explicado en el apartado 8.3 del marco teórico, estos coeficientes son una medida de cuán alejado está el comportamiento de la idealidad (escenario en el cual el coeficiente vale uno). Yim et al (2021) explican que los valores han sido obtenidos mediante el modelo UNIQUAC.

$$\ln(\gamma_i) = l_i - \frac{V_i}{x_i} \sum_j x_j l_j + \ln\left(\frac{V_i}{l_i}\right) + \frac{Z}{2} q_i \ln\left(\frac{F_i}{V_i}\right) + q_i \left(1 - \sum_j \frac{F_j \tau_{ij}}{\sum_k F_k \tau_{kj}} - \ln \sum_j F_j \tau_{ji} \right)$$

Ecuación 31: Coeficientes de actividad mediante UNIQUAC

Donde:

$$l_i = \frac{Z}{2}(r_i - q_i) - (r_i - 1), \tau_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T} + c_{ij} \ln(T) + d_{ij} T, V_i = \frac{x_i r_i}{\sum x_i r_i}, F_i = \frac{x_i q_i}{\sum x_i q_i}, Z = 10$$

Al ser datos obtenidos indirectamente, en este trabajo se les considerará como datos experimentales, pero no se le dará prioridad a la hora de hacer una comparación. En nuestro caso, nos valdremos de la *ecuación 4* para calcular los coeficientes de actividad, asumiendo el valor $\phi_i=0$ en todos los casos. Esto debido a que se está trabajando a presiones bastante bajas y las interacciones intermoleculares no deben influir en gran medida (esto se explicó en el apartado 8.3 del marco teórico).

Con la finalidad de utilizar la *ecuación 4*, hace falta también las presiones de vapor a cada temperatura. Para esto utilizaremos también el simulado. Se empleará un *case study* en UNISIM que nos permita obtener para cada temperatura, la presión de vapor de las 3 especies involucradas

Como se puede observar en la siguiente captura de pantalla, el programa incluye los coeficientes de Antoine para cada componente. Sin embargo, desconocemos la expresión explícita que utiliza el programa para los cálculos. Por este motivo, no se calculará

directamente utilizando la ecuación, sino mediante el simulador.

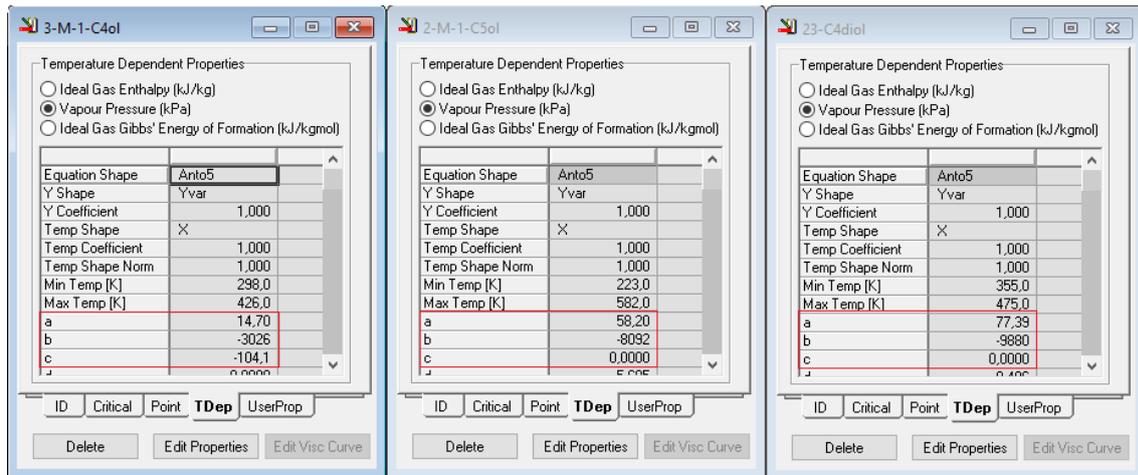


Ilustración 10: Constantes de Antoine en UNISIM

4.3.3. Posibles mejoras para el modelo

Una vez se hayan comparado los resultados, si algunos de ellos estuvieran en cierta medida alejados del valor experimental, se intentará modificar algunos parámetros en el simulador UNISIM para repetir la simulación y conseguir un mejor ajuste. La idea es conocer la manera en la que el simulador trabaja con las distintas sustancias.

En la siguiente figura, se muestran algunos parámetros modificables y sus valores por defecto:

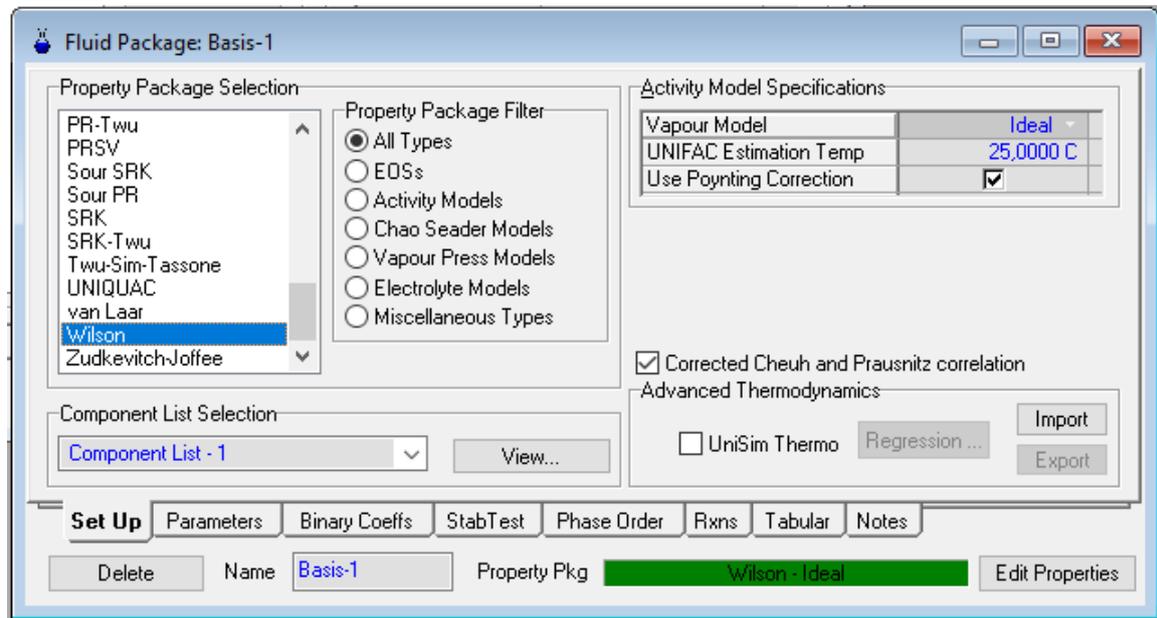


Ilustración 11: Algunos elementos modificables en UNISIM

De aquí, se pueden resaltar las especificaciones del modelo de actividad: Temperatura de estimación UNIFAC y Corrección de *Poynting*. También se puede elegir qué tipo de modelo se utilizará para el vapor (las opciones son ideal, Redlich-Kwong, Virial, Peng-Robinson y Soave-Redlich-Kwong). Otra opción modificable es la de aplicar la corrección de la correlación de Cheuh-Prausnitz.

También es posible acceder a la base de datos del programa para modificar las propiedades de las sustancias puras. La siguiente figura la manera de acceder y modificar dichos datos.

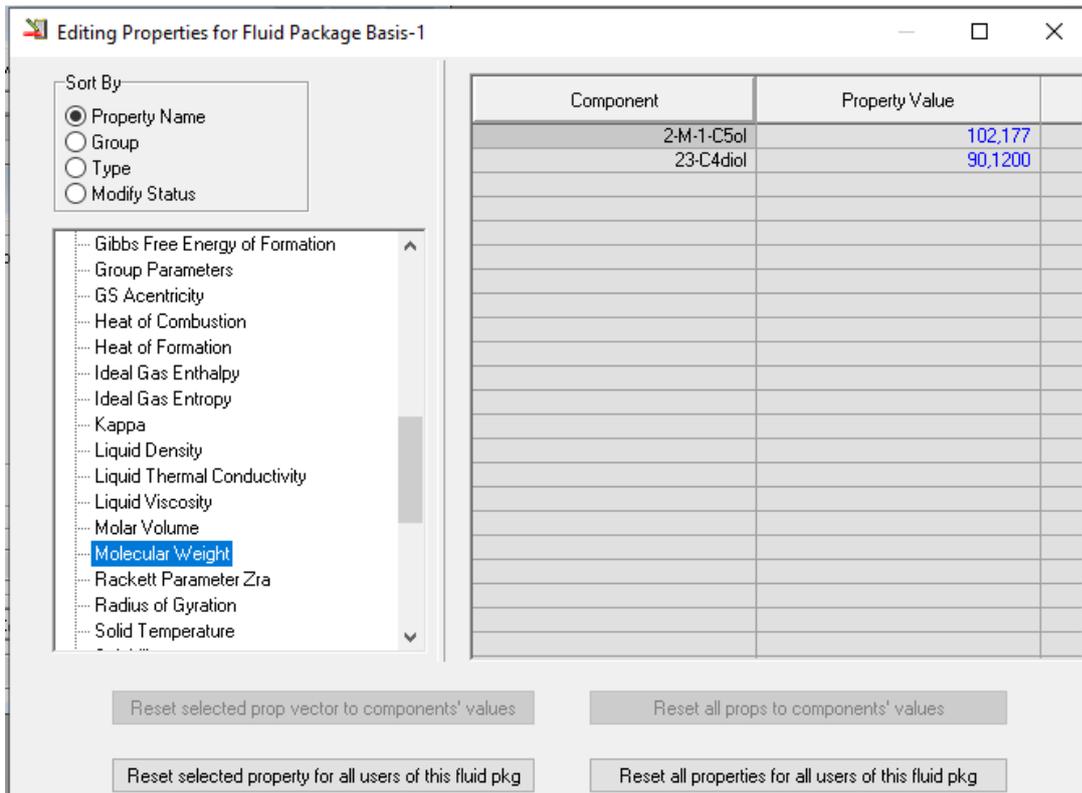


Ilustración 12: Propiedades de las sustancias puras en UNISIM

Una posible mejora es reemplazar los datos de estos campos por otros más exactos reportados en la literatura, por ejemplo, en el Handbook de ingeniería química de Perry u otra fuente.

Se trata de un trabajo complejo, pues son muchas simulaciones realizadas y muchas posibles combinaciones en los cambios. El objetivo es intentar que las gráficas obtenidas mediante la simulación se asemejen más a las reales. En caso de que haya algún tipo de sesgo (por ejemplo, una gráfica sistemáticamente por encima de la otra), se intentará modificar los parámetros para desplazar la gráfica, manteniendo la simulación.

Finalmente, se intentará conseguir una modificación uniforme que logre mejorar todos los ajustes. Es decir, que la mejora se aplique a todas las presiones y a ambas mezclas.

5. RESULTADOS Y ANÁLISIS

A continuación, se muestran los resultados obtenidos mediante la simulación realizada en UNISIM y se comparan con los datos experimentales según lo explicado en el apartado anterior. Se agrupan los resultados primero por mezcla y por presión.

5.1. Comparación gráfica

5.1.1. Mezcla 1

A 101 kPa, los resultados obtenidos fueron los siguientes:

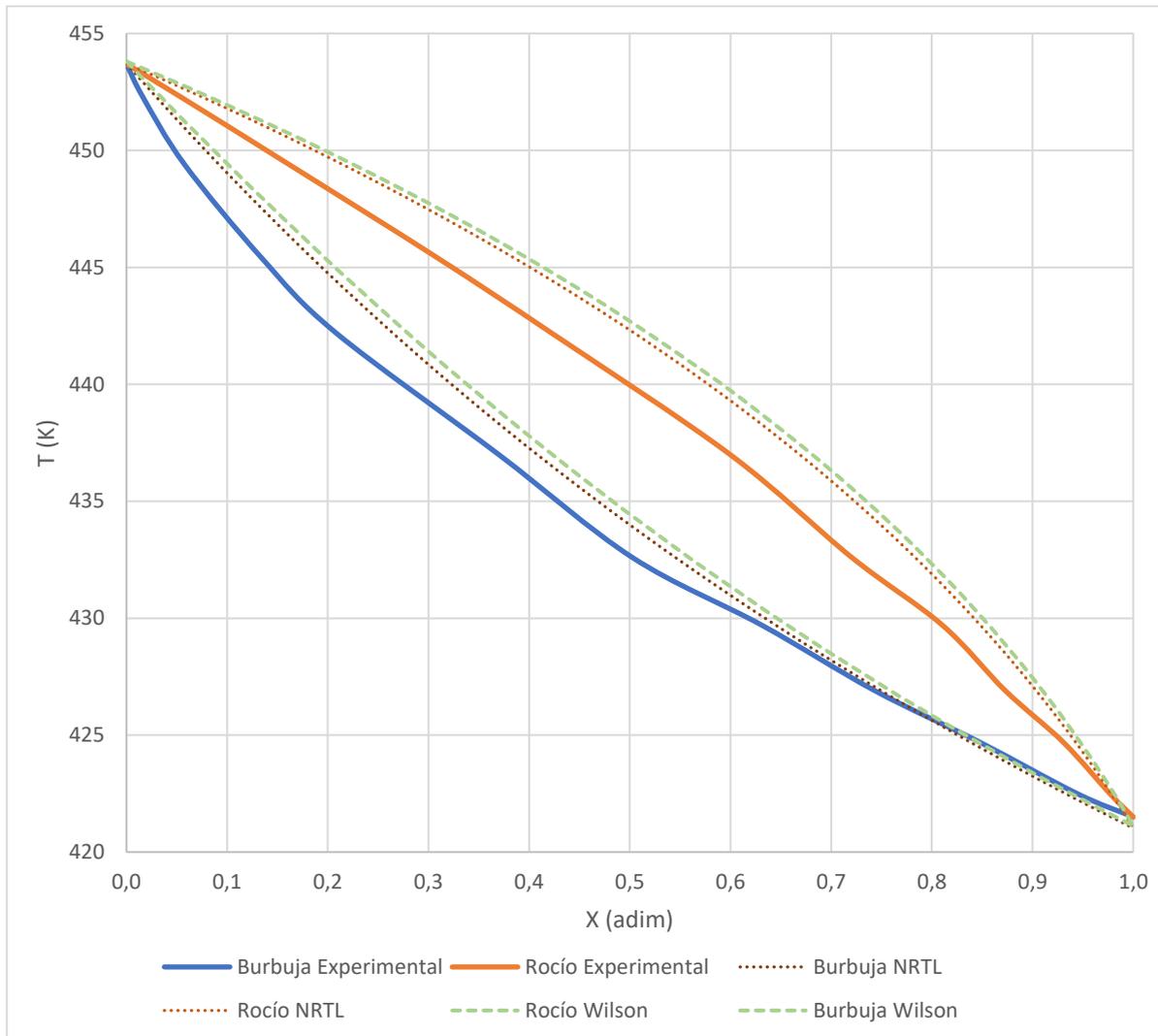


Ilustración 13 Comparación mezcla 1 a 101 kPa

Una primera observación es clara: el modelo UNIQUAC no está en el gráfico. Esto se debe a que las curvas de rocío y burbuja obtenidas mediante UNIQUAC y NRTL son demasiado similares para apreciar la diferencia a esta escala. Al graficar ambas, es imposible distinguirlas y por este motivo se decidió graficar únicamente NRTL. Este comportamiento se repite en el resto de las gráficas, por lo que únicamente estarán Wilson y NRTL, asumiendo que las curvas de UNIQUAC son prácticamente las mismas que las de NRTL. Los datos se pueden encontrar precisamente en las tablas 10, 11 y 12 (anexos).

En términos generales, el comportamiento obtenido es consistente con lo esperado. Las cuatro curvas parten de la composición cero (0) a la temperatura de saturación del clave pesado a 101 kPa y llegan a la composición uno (1) a la misma temperatura de

saturación del clave ligero, a la misma presión.

En el caso de la curva de rocío, es evidente que ambas curvas simuladas están sistemáticamente por encima de la curva real, llegando a existir una diferencia de temperatura de cerca de 2,5 °C en $X=0,5$.

En el caso de la curva de burbuja, el comportamiento es similar; la curva real está por debajo de ambas curvas simuladas en todos los puntos. Sin embargo, la diferencia en general es menor y la mayor diferencia a simple vista parece ser de 2,5 °C alrededor de $X=0,2$. Esto a excepción de $X=0,65$ en adelante, donde el ajuste es casi perfecto (ligeramente mejor el de NRTL).

Comparando ambas curvas simuladas, el modelo que mejor se ajusta a los datos reales es NRTL (al igual que UNIQUAC). Las curvas de rocío y burbuja obtenidas por NRTL están más cerca de las curvas reales a lo largo de todo el rango de composiciones.

Otro detalle que resaltar es el hecho de que las curvas reales no presentan una tendencia de curvas suaves. Esto concuerda con lo esperado por dos motivos:

- La curva real está construida con 12 puntos (frente a los 51 de la simulación).
- Las curvas simuladas están generadas a partir de una ecuación, por lo que la gráfica es perfectamente curva, siguiendo la forma de un polinomio. En el caso de las curvas reales, la tendencia es un poco más errática.

A 80 kPa, se obtuvo el siguiente gráfico:

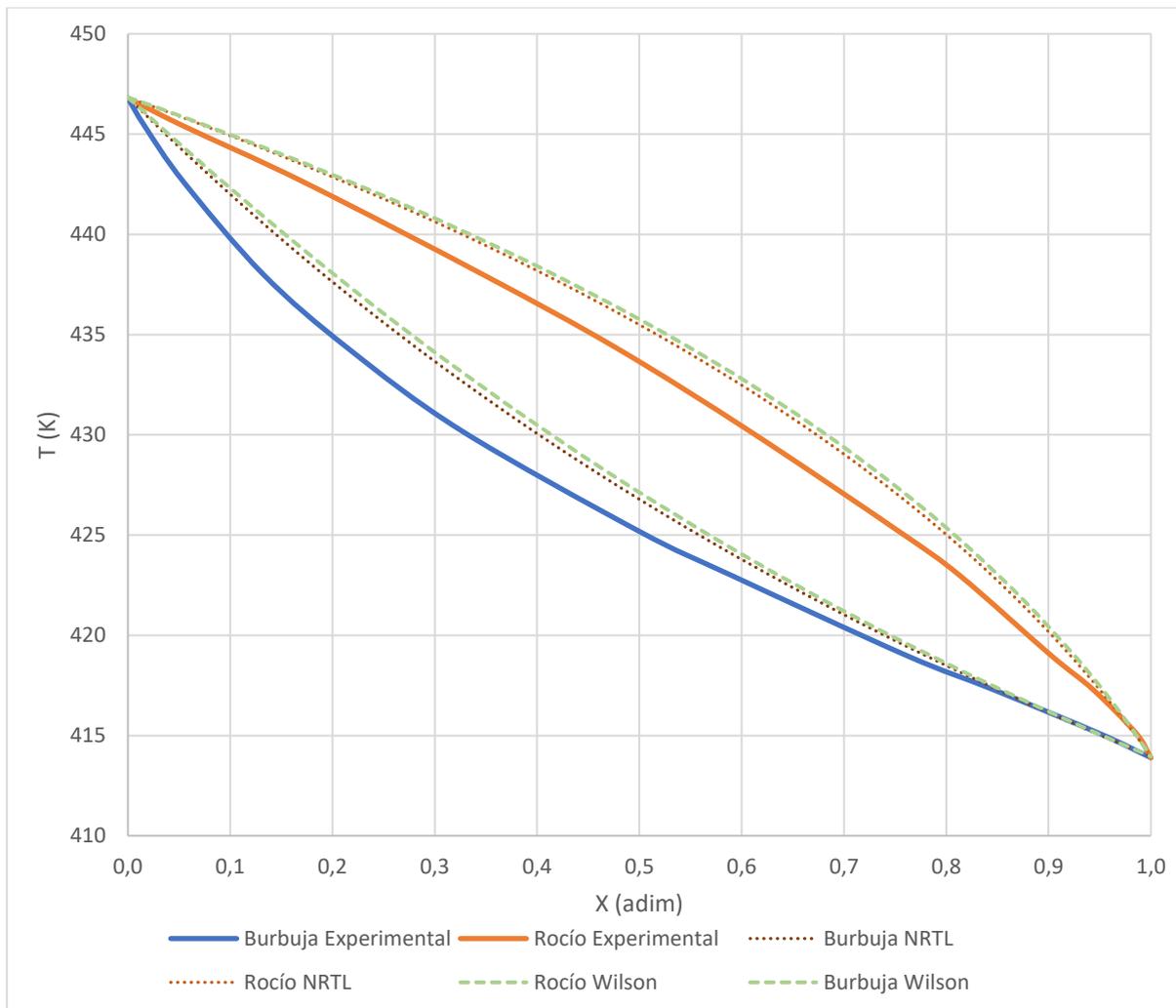


Ilustración 14: Comparación mezcla 1 a 80 kPa

Se observan resultados similares a los anteriores. El comportamiento de las curvas de rocío y burbuja simuladas coinciden con lo esperado. A simple vista, las curvas simuladas parten del punto correcto, llegan al punto correcto y siguen la tendencia de los valores reales. Se podría afirmar que el ajuste tanto por Wilson como por NRTL es un poco mejor que el caso de los 101 kPa.

En el caso de la curva de rocío, se observa que la mayor desviación en todo el rango de valores no llega a los 2,5°C como en el caso anterior. Está cerca de la composición $X=0,6$ (en eso coinciden).

En el caso de la curva de burbuja, el ajuste mejora con los tres modelos a medida que la composición aumenta. La mayor desviación está entre $X=0,2$ y $0,3$. El ajuste es prácticamente perfecto para composiciones mayores a $0,8$.

Comparando los tres ajustes entre sí, en esta ocasión las curvas de NRTL y Wilson están más cerca la una a la otra que en la gráfica de 101 kPa. Sigue siendo ligeramente mejor NRTL (UNIQUAC) que Wilson.

Una diferencia importante por mencionar también es que ambas curvas simuladas están por encima de los valores reales en todo el rango de composiciones.

A 60 kPa, los resultados fueron:

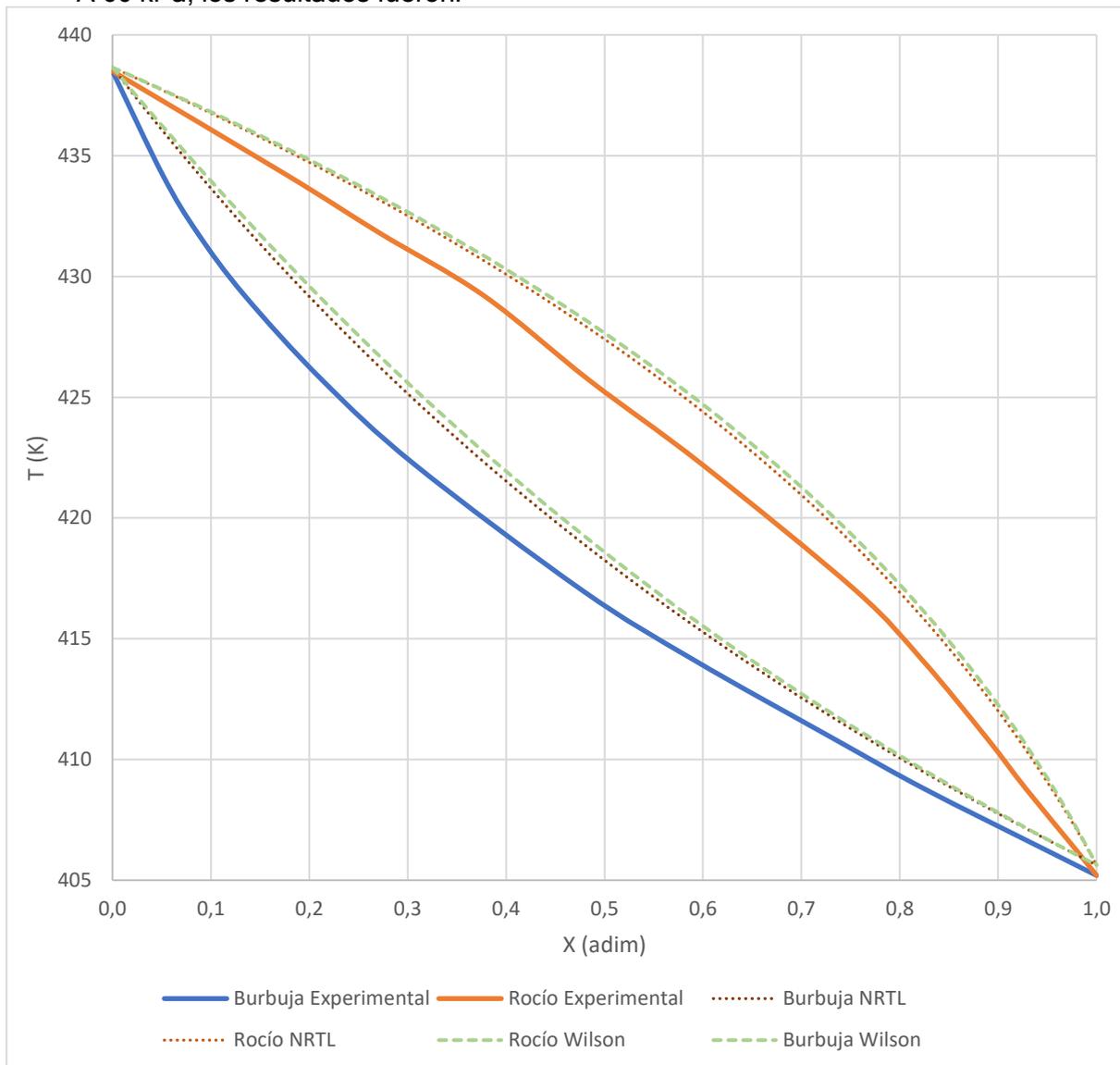


Ilustración 15 Comparación mezcla 1 a 60 kPa

A simple vista se podría afirmar que el ajuste es peor que el caso de 80 kPa. El comportamiento se asemeja al encontrado para 101kPa.

Ambas curvas simuladas se encuentran muy cerca y se solapan en algunos rangos de valores. Una vez más, el mejor ajuste es NRTL (UNIQUAC), pero las dos curvas se asemejan bastante.

Para la curva de rocío, se obtuvo la mayor desviación entre la composición 0,4 y 0,6 (cerca de 2°C). En la mayor parte del rango de composiciones, la diferencia de temperatura de saturación es de más de un grado centígrado.

En el caso de la curva de burbuja, la tendencia es similar. Se observa la mayor desviación en la composición 0,2 (mayor que en los casos anteriores, cerca de 3 °C).

Comparando ambas curvas simuladas, se puede ver que se solapan en varios intervalos de composición y la diferencia entre ambas es de sólo unas décimas de grado centígrado.

A 40 kPa, se obtuvo:

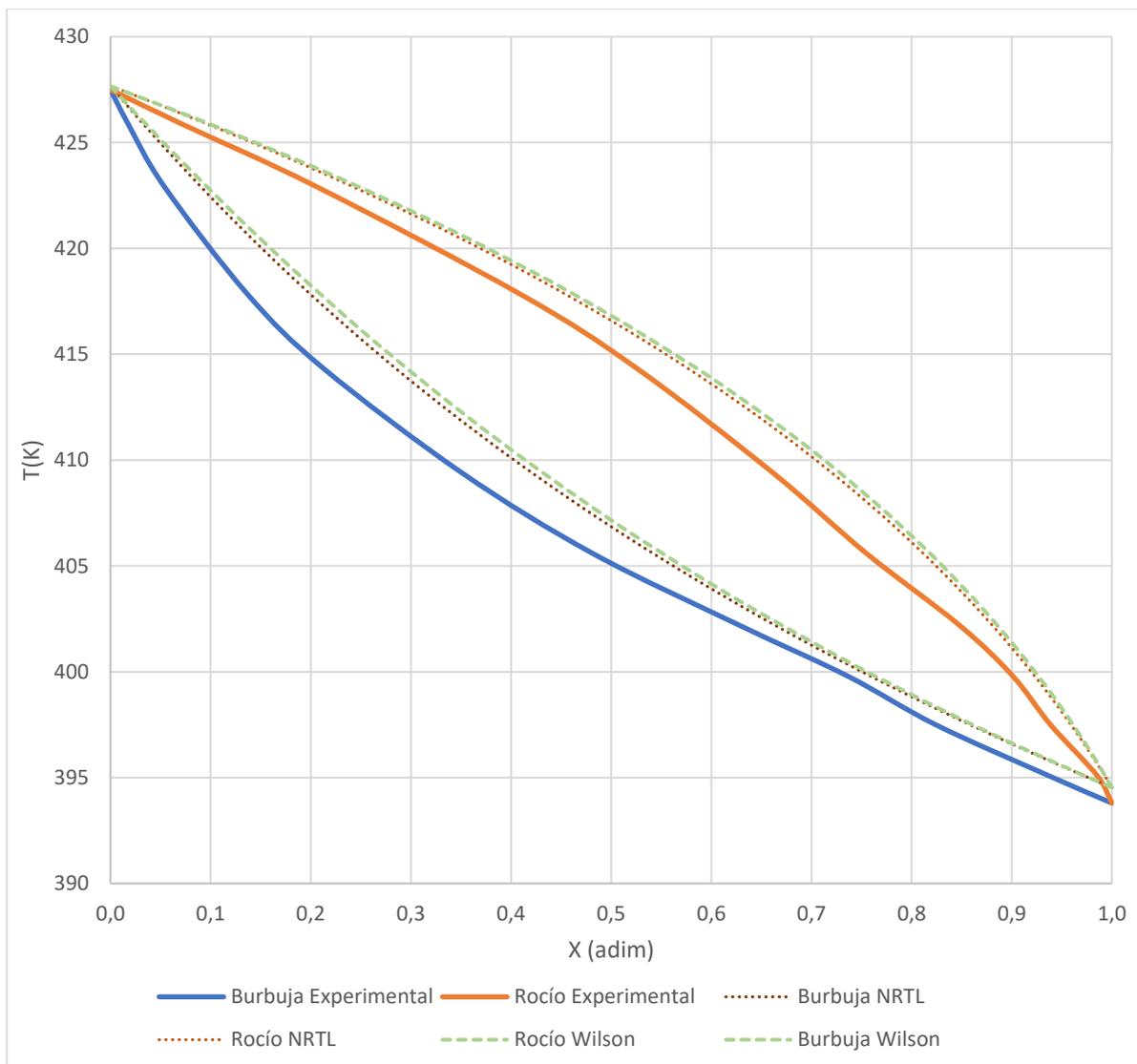


Ilustración 16: Comparación mezcla 1 a 40 kPa

Los resultados obtenidos son muy similares a las gráficas de las demás presiones. Se observan ambas curvas simuladas por encima de los valores reales en todo el rango.

Las curvas de rocío lucen un ajuste ligeramente mejor que en el caso de los 60 kPa.

La mayor desviación observada se encuentra entre $X=0,7$ y $0,8$. El ajuste es bastante bueno para las composiciones bajas, hasta $X=0,45$, donde las curvas se alejan entre sí.

Las curvas de rocío lucen un buen ajuste sólo a partir de $X=0,65$ en adelante. La mayor desviación se tiene nuevamente en la composición $0,2$, de unos $2,8$ °C aproximadamente.

5.1.2. Mezcla 2

Se obtuvieron los resultados siguientes a 101 kPa:

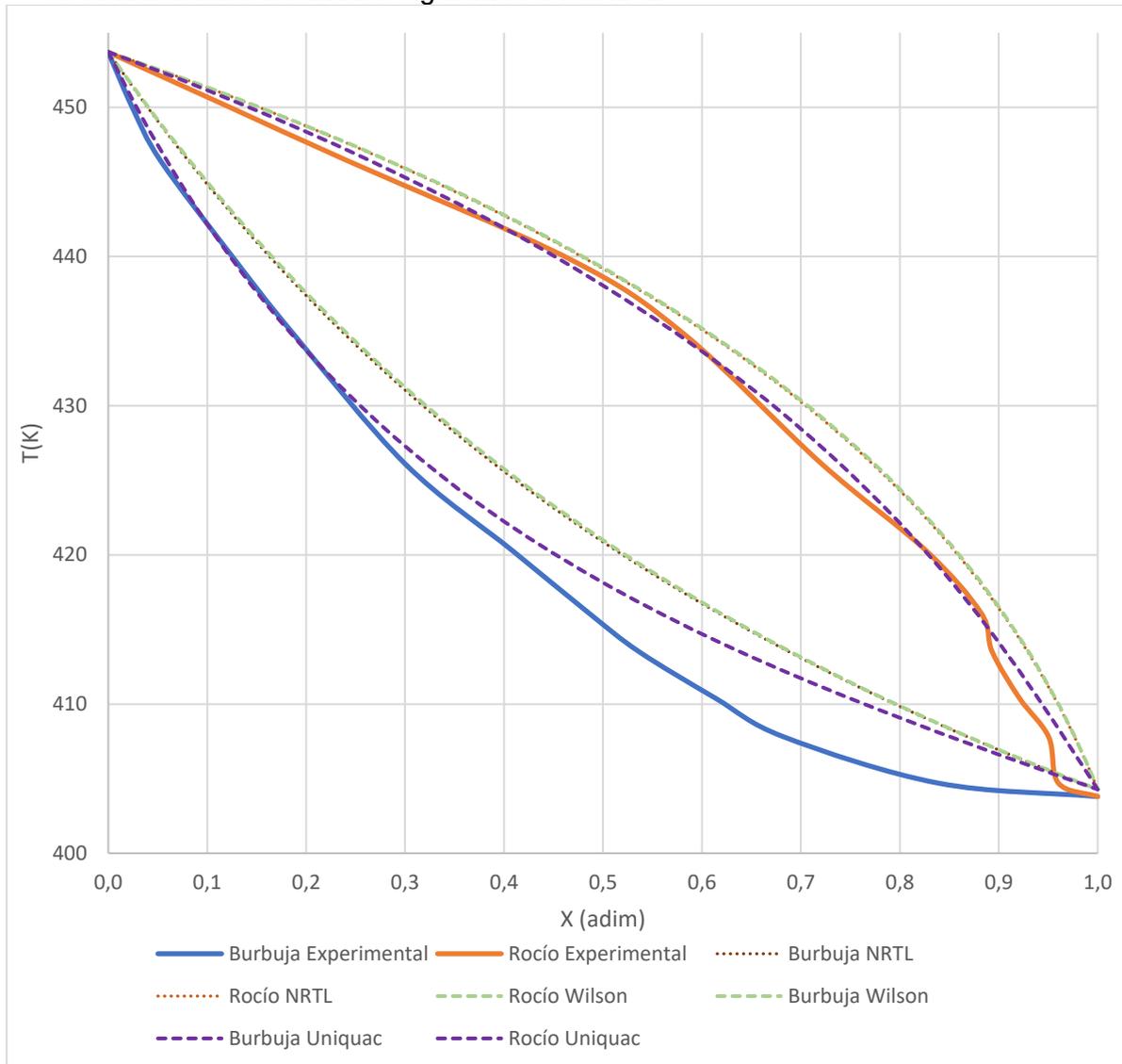


Ilustración 17: Comparación mezcla 2 a 101 kPa

En esta oportunidad, se decidió graficar los tres modelos a todas las presiones, ya que la similitud no ocurre de la misma manera que con la mezcla 1. En algunas ocasiones se solapan, pero en otras no. Para el caso de los 101 kPa, los modelos Wilson y NRTL coinciden por completo, de forma que no se distinguen con la resolución utilizada (al hacer mucho *zoom*, se aprecia la diferencia)

A primera vista, se puede asegurar que el modelo UNIQUAC se asemeja mucho más al comportamiento real que los otros dos. En el caso de la curva de rocío, el ajuste es excelente a lo largo de la curva. Además, algunos puntos están por encima y otros por debajo de la curva de rocío real, cruzándose en cuatro ocasiones. La mayor desviación se puede identificar cerca de $X=1$, pues la curva real presenta dos cambios de concavidad muy bruscos. Esto podría estar relacionado con errores de medición de los valores experimentales.

La curva de burbuja obtenida mediante UNIQUAC no es tan ajustada como la de rocío (aunque sí es mejor que las de NRTL y Wilson). El comportamiento de la curva es idéntico a la real entre $X=0$ y $0,25$. A partir de ahí, la curva simulada se sitúa por encima de la real, llegando a una desviación máxima de unos $5\text{ }^{\circ}\text{C}$, alrededor de $x=0,7$.

Tanto para NRTL como para Wilson, el ajuste para la curva de rocío es mejor que para la de burbuja. En ambos casos, las curvas simuladas están por encima que las reales de manera sistemática y a lo largo de todo el rango de composiciones (similar a lo observado en la mayoría de los casos de la mezcla 1).

La curva de burbuja simulada se encuentra bastante por encima de la real, con una desviación de unos 5 grados a lo largo de prácticamente la mitad del rango.

Una observación general importante es que las curvas simuladas llegan a una temperatura ligeramente mayor a la real cuando la mezcla es completamente el clave pesado ($X=1$). Esto sucede también con otros de los gráficos anteriores, pero esta vez es más evidente y también la escala de la temperatura tiene saltos de 10 en lugar de $5\text{ }^{\circ}\text{C}$ como en la mezcla 1. Probablemente al corregir esto, mejore el ajuste en todo el rango.

A 80 kPa , los resultados fueron:

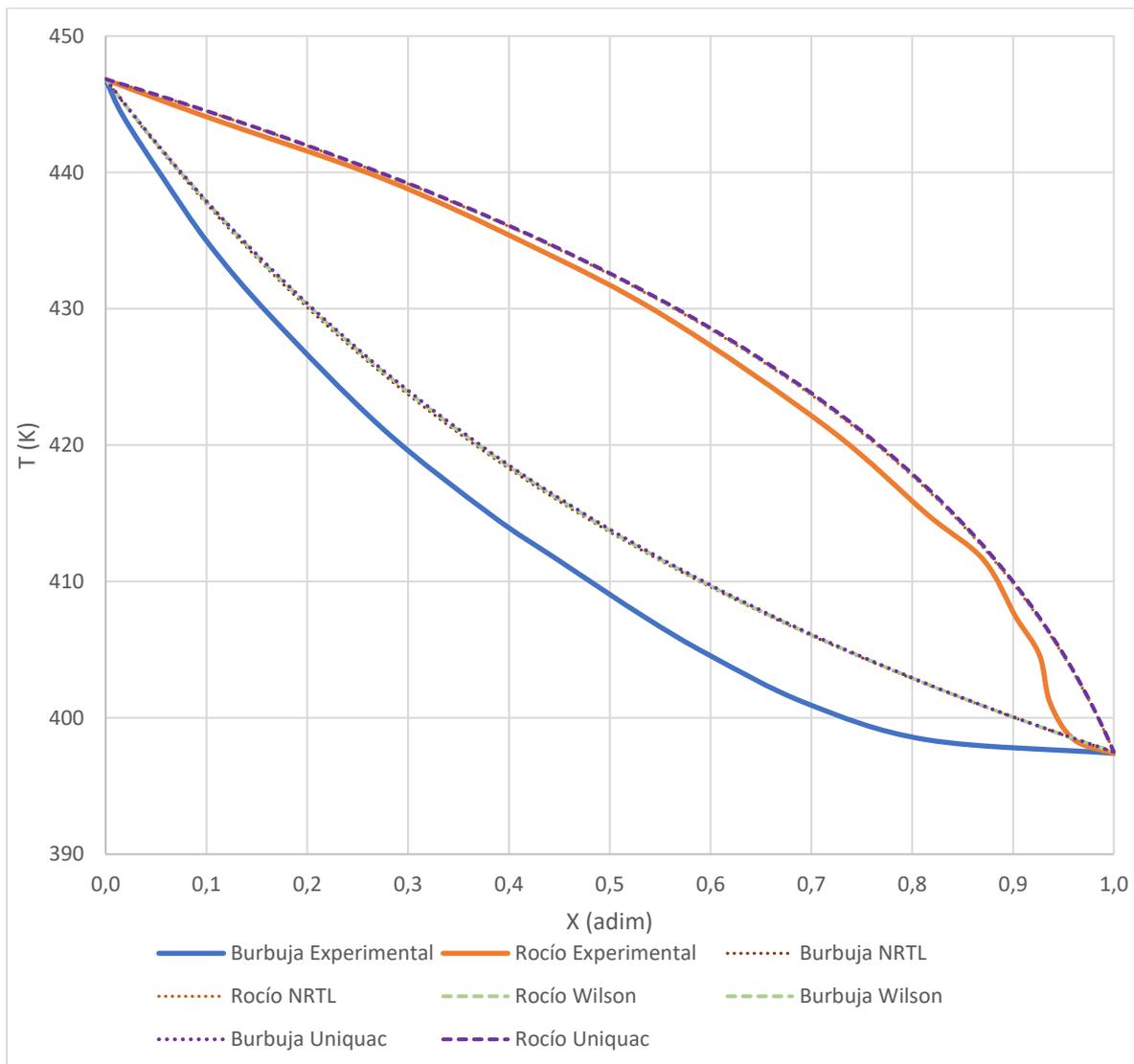


Ilustración 18: Comparación mezcla 2 a 80 kPa

A diferencia del caso anterior, las 3 simulaciones de la mezcla 2 a 80 kPa son tan similares, que no es posible distinguirlas en el gráfico. Por este motivo, para este gráfico,

se hablará únicamente de curvas reales y simuladas. Los datos se pueden encontrar en detalle en los anexos, tablas 13, 14 y 15.

Las curvas de rocío simuladas se ajustan bastante bien a la real, cruzándose en dos puntos (en $X=0,73$ y $X=0,97$ aproximadamente). El ajuste es perfecto entre $X=0$ y $X=0,3$. La mayor desviación se observa en $X=0,95$. Sin embargo, al igual que en el caso anterior, la curva real presenta una tendencia caótica, con varios cambios de concavidad. Al haber obtenido la misma tendencia en dos ocasiones, puede que el comportamiento real es un poco caótico al acercarse a $X=1$. A pesar de ser un buen ajuste, no llegan a cruzarse las curvas, como ocurrió con UNIQUAC a 101 kPa.

Las curvas de burbuja presentan el mismo tipo de desviación que el que se observó en el caso de 101 kPa usando Wilson y NRTL. Esta vez, el modelo UNIQUAC produjo un ajuste igual de malo que los otros dos modelos, con desviaciones de 5 °C en la mayor parte del intervalo total de composiciones.

Los resultados para la mezcla 2 a 40 kPa fueron:

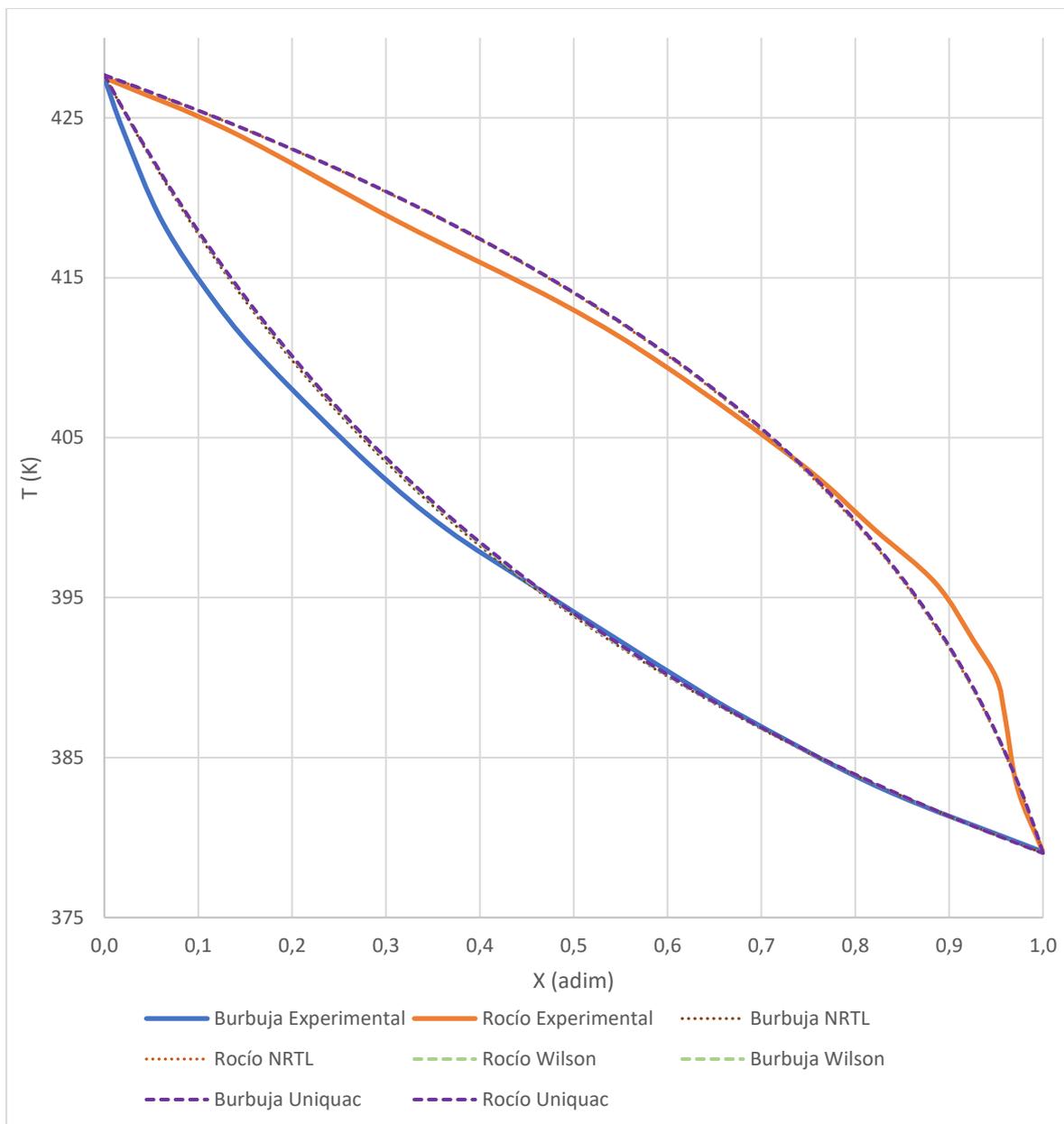


Ilustración 19: Comparación mezcla 2 a 40 kPa

En esta ocasión, se obtuvo una situación similar a la anterior: las tres curvas simuladas

son tan similares que es imposible distinguirlas. En los tres casos se podría decir que se trata de la mejor simulación hasta ahora.

Las curvas de rocío simuladas están tan ajustadas a la real como en el gráfico anterior. Las curvas se cruzan en dos puntos y la desviación es menor a 1 °C a lo largo de todo el rango de composiciones, a excepción de la cercanía a $X=0,9$, donde la curva real tiene un comportamiento caótico (se repite esta particularidad evidenciada en gráficos anteriores de la mezcla 2).

En el caso de las curvas de burbuja, es prácticamente imposible distinguirlas en más de la mitad del rango total (entre $X=0,4$ hasta 1). En el resto, el ajuste es también bastante bueno, obteniéndose una desviación máxima de unos 2,5 °C cerca de $X=0,1$.

Finalmente, a 60 kPa, se obtuvo:

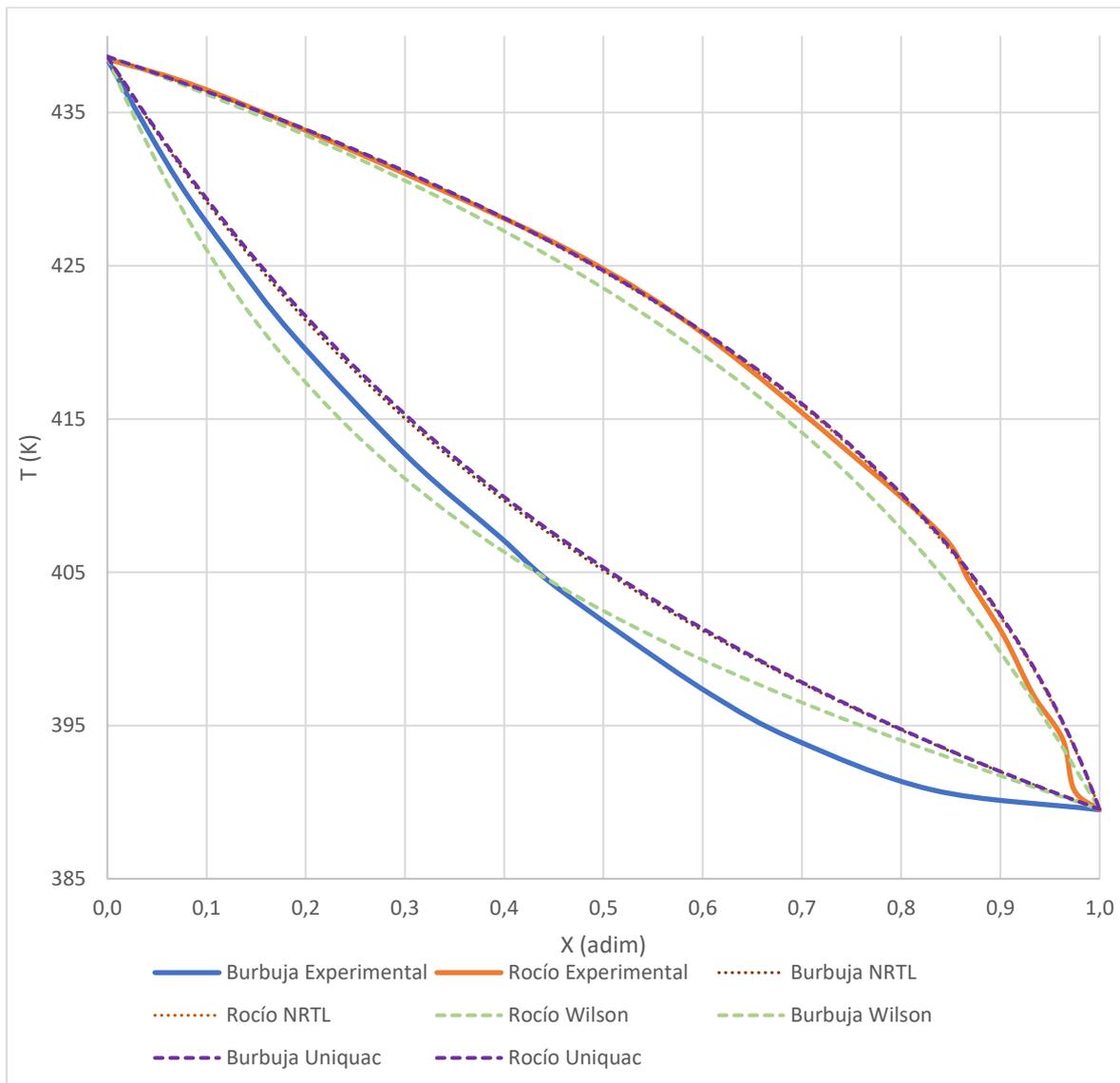


Ilustración 20: Comparación mezcla 2 a 60 kPa

En esta oportunidad, los modelos NRTL y UNIQUAC coinciden por completo, mientras que el de Wilson sí se puede apreciar a esta escala.

En el caso de las curvas de burbuja, el modelo de Wilson parece funcionar mejor que los otros dos. Prácticamente la mitad de la curva está por encima de la real y la otra mitad por debajo, con una desviación relativamente pequeña (siendo la máxima alrededor de $X=0,8$ de unos 3 °C).

Las curvas de burbuja obtenidas mediante UNIQUAC y NRTL están sostenidamente por encima de la real, con una desviación más o menos constante de unos 3 °C a lo largo de la mayor parte del gráfico.

Con respecto a las curvas de rocío, Wilson no presenta un ajuste tan bueno como el de la curva de burbuja. De hecho, en esta oportunidad NRTL y UNIQUAC son mejores. Wilson se encuentra por debajo de la curva real (a diferencia de la mayoría de las curvas obtenidas en este trabajo).

Las curvas de rocío obtenidas mediante NRTL y UNIQUAC se ajustan de una manera casi perfecta a la real, con varios puntos de intersección y una mínima diferencia a nivel visual en todo el rango de composiciones.

5.2. Comparación analítica

La siguiente tabla contiene los resultados obtenidos para ambas mezclas, utilizando los tres modelos termodinámicos.

Los datos en detalle se pueden encontrar en las tablas 17 a la 40 en los anexos. Los mismos fueron generados con las ecuaciones 27, 28, 29 y 30.

Mezcla	P (kPa)	Desviación porcentual promedio								
		Wilson			NRTL			UNIQUAC		
		y1	Y1	Y2	y1	Y1	Y2	y1	Y1	Y2
1	101	-2,6	-3,1	-65,3	-1,7	-1,4	-65,1	-2,0	-1,8	-65,0
	80	-7,6	-10,5	-64,0	-4,7	-6,7	-63,8	-4,8	-6,9	-63,9
	60	-5,9	-10,9	-66,9	-5,1	-9,4	-66,6	-5,1	-9,7	-66,7
	40	-6,9	-12,3	-67,3	-6,0	-10,9	-67,1	-6,1	-11,2	-67,2
2	101	-6,8	-17,6	-75,0	-6,1	-15,2	-75,6	-0,9	-2,4	-74,2
	80	-7,4	-16,2	-75,5	-7,1	-16,4	-75,7	-1,5	-8,2	-74,5
	60	-5,8	-13,0	-74,0	-5,8	-13,2	-74,6	0,3	0,6	-72,9
	40	-5,9	-8,9	-76,1	-6,1	-8,9	-75,0	-0,2	5,3	-74,4

Al observar los valores de la desviación obtenidos para los coeficientes de actividad, estos son bastante elevados (sobre todo para el clave pesado en ambas mezclas). Al haber seguido la metodología establecida por Yim et al (2021), se realizó un estudio similar al de la comparación gráfica. La diferencia es que se partió de la composición obtenida en el líquido saturado (x) experimentalmente y a partir de ella se calculó la composición en el vapor saturado (y).

Como se comentó anteriormente, los valores reportados en el artículo para los coeficientes de actividad se obtuvieron a través de un cálculo. Por este motivo, es lógico que las desviaciones entre los valores calculados mediante la ecuación 4 y la ecuación 31 sean grandes. Tal vez debió utilizarse el mismo método, pues la aproximación de asumir $\phi=0$ no parece haber buena en este caso, a pesar de tratarse de presiones bastante bajas.

5.2.1. Mezcla 1

Con respecto a las composiciones del clave ligero en el vapor saturado, se puede observar que todos los valores son menores a 10% para todas las presiones y utilizando los 3 modelos termodinámicos.

Los modelos NRTL y UNIQUAC presentan prácticamente los mismos valores para todas las presiones, con diferencias apenas observables. Esto es lógico, pues, como se mencionó previamente, al graficar estas curvas en la mezcla 1, es imposible distinguirlas. El ajuste de ambos es mejor que el de Wilson, al obtener la mayor desviación de -6% para P = 40kPa.

El ajuste de Wilson igualmente es bueno, con una desviación máxima de -7,6% para $P = 80$ kPa y la mínima de -7,6%.

Se puede notar también que todos los valores obtenidos son negativos. Esto indica un sesgo en los valores obtenidos que quizás pueda ser corregido. Sin embargo, concuerda con lo observado en las gráficas del apartado anterior. En las gráficas de la mezcla 1, todas las curvas simuladas están por encima de las reales en todo el rango de composiciones.

Los valores de los coeficientes de γ_1 están hasta cierto punto ajustados a los experimentales, con la mayoría de ellos por debajo de 5%. En el caso de Wilson, se obtuvo el peor ajuste, con desviaciones de hasta 12%.

Los valores de γ_2 son extremadamente altos en todos los casos, con diferencias mínimas de 60%. Estas diferencias se mantienen constantes en todos los modelos, por lo que se puede afirmar que no es una buena aproximación. Recordemos que los coeficientes de actividad muestran qué tanto se acerca el comportamiento a uno ideal (mientras más cercano a 1 sea el valor). En las tablas 17 a la 40 de los anexos, se puede ver el detalle del valor de γ_2 para cada presión y con cada modelo. Los valores son por lo general muy bajos, cercanos al orden de 0,3 a 0,4. Esta diferencia tan grande indica que no fue una buena aproximación considerar el coeficiente de fugacidad $\phi=0$.

5.2.2. Mezcla 2

En términos generales, los resultados son muy similares a los anteriores. Sin embargo, esta vez sí hay una diferencia apreciable entre las simulaciones hechas con NRTL y UNIQUAC.

UNIQUAC muestra un ajuste casi perfecto, con una desviación máxima de 1,5% a 80 kPa y menor al 1% en el resto de los casos.

Wilson y NRTL muestran valores muy similares, en todos los casos menores a 10%, pero mayores a 5%

Una vez más, todas las desviaciones son negativas, lo que podría indicar un sesgo, o error sistemático hacia el mismo lado. Este tipo de errores son corregibles en los casos de Wilson y UNIQUAC.

Al analizar los valores de los coeficientes de actividad, una vez más se repite la tendencia observada en la mezcla 1: los valores son demasiado altos. A excepción del modelo UNIQUAC a 60 kPa, que muestra una desviación de 0,6% para γ_1 .

Casi todas las desviaciones de los coeficientes de actividad son negativas. Poco se puede analizar en este caso, más allá de afirmar que la aproximación no fue buena (al igual que con la mezcla 1).

5.2.3. Comparación de simulaciones

En vista de que Yim et al (2021) han realizado una simulación y se ha comparado con sus valores experimentales (con la finalidad de contrastar sus resultados), hemos hecho una comparación entre sus simulaciones hechas con UNIQUAC y NRTL, con las realizadas en el presente trabajo. Los resultados se muestran a continuación:

Tabla 11: Comparación de las simulaciones con las de Yim et al (202)

Mezcla	Presión (kPa)	Desviación porcentual promedio			
		NRTL		UNIQUAC	
		Y1	Y1*	Y1	Y1*
1	101	-1,7	4,0	-2,0	4,1
	80	-4,7	-0,1	-4,8	-0,1
	60	-5,1	0,1	-5,1	0,1
	40	-6,0	-0,1	-6,1	0,7
2	101	-6,1	0,6	-0,9	0,5
	80	-7,1	0,4	-1,5	0,2
	60	-5,8	-0,3	0,3	-1,1
	40	-6,1	-0,5	-0,2	-0,5

Donde Y* es la composición del clave ligero en el vapor saturado obtenido mediante la simulación de Yim et al (2021).

A rasgos generales, la simulación reportada en el artículo es mejor. Sus desviaciones porcentuales son menores al 1 % en la mayoría de los casos. En el caso de NRTL, la simulación hecha por los autores es cercana a cero, a excepción de la mezcla 1 a 101 kPa. La lista completa de valores se puede apreciar también en los anexos, se han incluido estas simulaciones en las tablas referentes a los modelos de UNIQUAC y NRTL.

En la tabla anterior se evidenció que la mejor simulación de las realizadas en este trabajo fue la de UNIQUAC en la mezcla 2. La simulación es incluso mayor que la reportada en el artículo.

A pesar de que el artículo escogido no explica cómo fueron realizadas las simulaciones, ni cuál fue el software utilizado, es evidente que sus resultados fueron mucho más ajustados en casi todos los casos. Lo que se puede inferir de esto, es que las simulaciones podrían ser mejores. Recordemos que hasta ahora se han utilizado los valores por defecto del simulador, pero hay algunos parámetros que se podrían modificar para intentar mejorar el ajuste. Al tener la gran mayoría de los datos por encima de las curvas reales, como se ha podido observar en las gráficas, se podría de alguna manera desplazar o “bajar” las curvas para que se asemejen a las reales (cumpliendo así el último objetivo del presente trabajo).

5.3. Mejoras para el ajuste

Inicialmente, se intentó ver qué impacto tendría modificar los siguientes parámetros:

- Corrección de *poyniting* (activa o inactiva)
- Temperatura de estimación UNIQUAC
- Modelo de vapor
- Correlación corregida de Cheuh-Prausnitz

El impacto que tuvo modificar estos valores es prácticamente nulo o inconsistente en las diferentes presiones y las mezclas. Por este motivo, se optó por cambiar otro parámetro.

Para intentar lograr un mejor ajuste siguiendo algún criterio lógico, lo primero que se intentó fue acceder a la base de datos de UNISIM para ver las propiedades de las sustancias puras. En algunas de las gráficas, se observa una pequeña diferencia de temperatura para la composición X=1. En la mayoría de los casos, las curvas simuladas llegan a la temperatura de saturación del clave pesado por encima de la temperatura real.

Al observar los valores del simulador, y comparando con las temperaturas de ebullición normal de la tabla 7, se tiene:

Tabla 12: Propiedades del simulador vs literatura

Compuesto	Temperatura de ebullición normal (°C)	
	Literatura	UNISIM
2,3-butanodiol	177,0	182,498
3-metil-1-butanol	131,1	132,050
2-metil-1-pentanol	149,0	147,998

Los datos del simulador tienen mayor precisión, pero están alejados de los encontrados en el Handbook. Sobre todo, en el caso del 2,3-butanodiol, que es el clave pesado.

Entonces, entre otras modificaciones, se intentó reemplazar estas temperaturas de ebullición normal en el simulador.

5.3.1. Mezcla 1

La siguiente ilustración muestra el ejemplo del modelo Wilson para la mezcla 1 a 101 kPa:

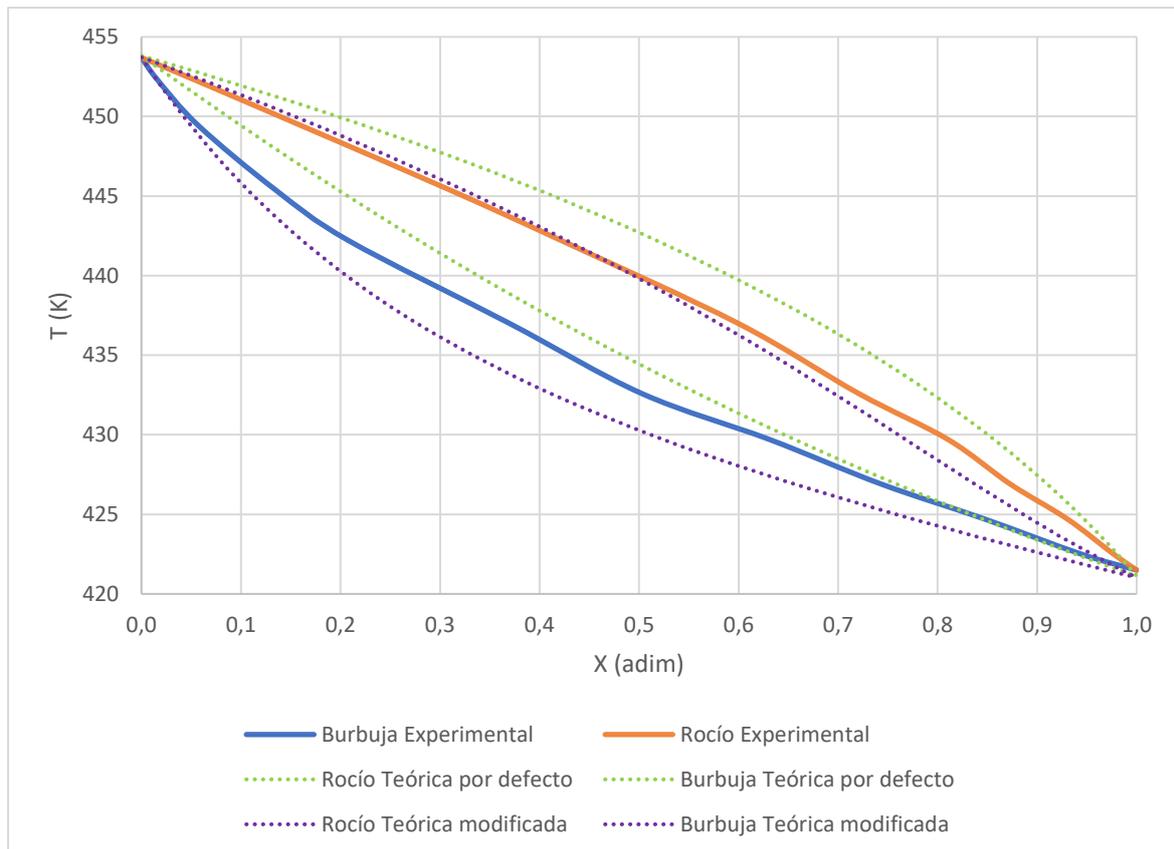


Ilustración 21: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 101 kPa

Es evidente que las curvas han sido desplazadas hacia abajo, lo que en efecto se buscaba. Al observar la curva de rocío obtenida mediante esta simulación modificada, la mejoría es notable. La curva se ajusta casi perfectamente a la real. Sin embargo, este no es el caso de la curva de burbuja, pues se ha alejado de la real por debajo.

La siguiente figura contiene la misma simulación, pero para los 80 kPa:

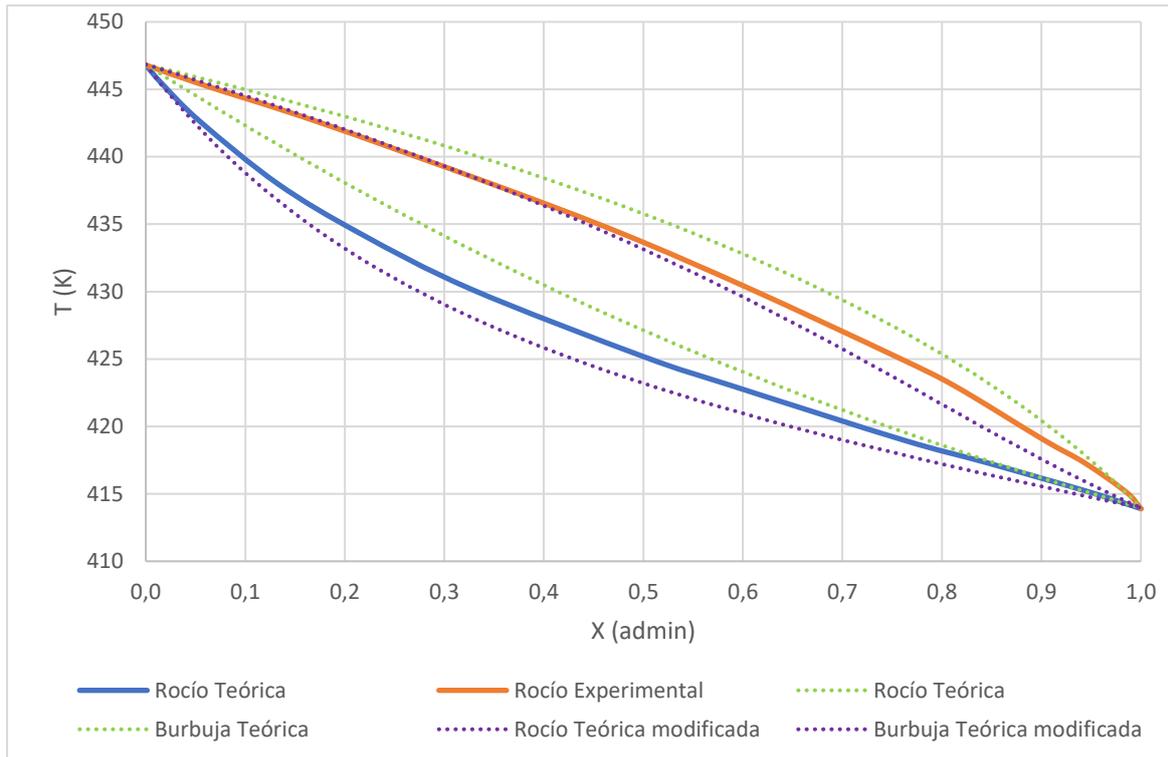


Ilustración 22: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 80 kPa

El cambio es similar al caso anterior. Se mantiene una mejoría notable en la curva de rocío, con un ajuste prácticamente perfecto entre $X=0$ y $X=0,5$. A partir de ahí, se aleja un poco de la curva real, pero sigue siendo mejor que la primera simulación.

La curva de burbuja se ha desplazado hacia debajo de la real, pero se encuentra más cerca que la primera simulación. Ambas curvas son mejores en este caso.

A 60 kPa mediante Wilson se obtuvo:

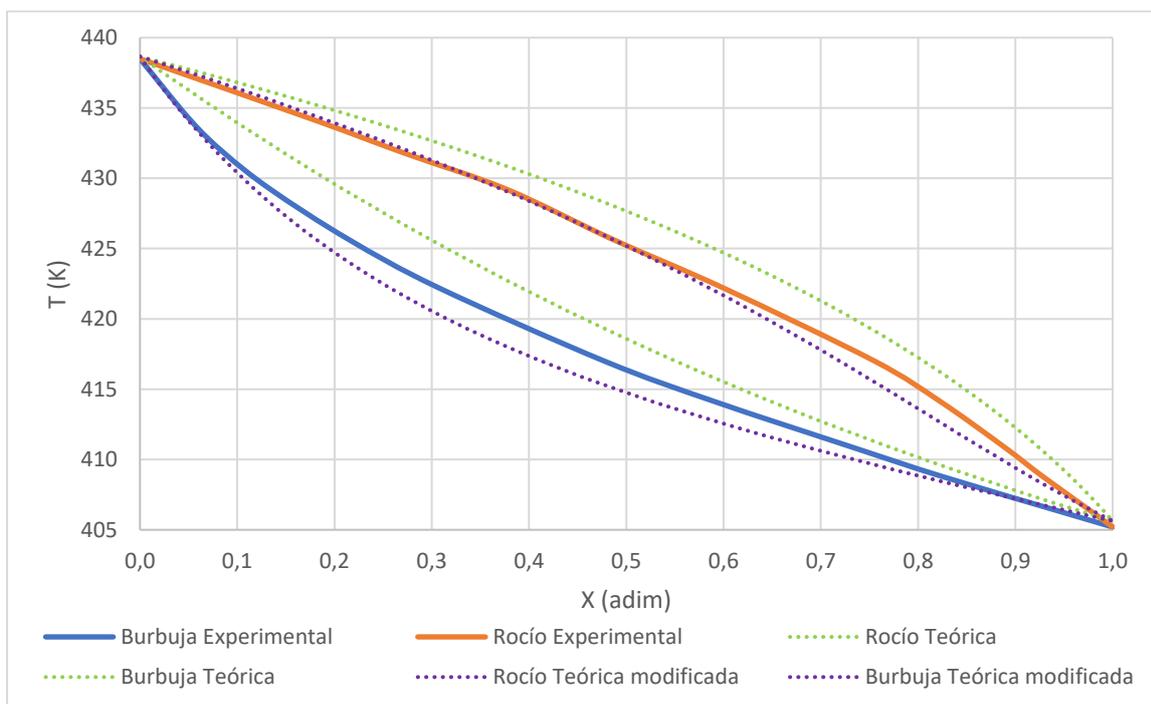


Ilustración 23: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 60 kPa

Una vez más la curva de rocío mejoró notablemente, mientras que curva de burbuja es ligeramente mejor que la primera simulación, pero esta vez está por debajo de la curva real.

A 40 kPa, mediante Wilson, se obtuvo:

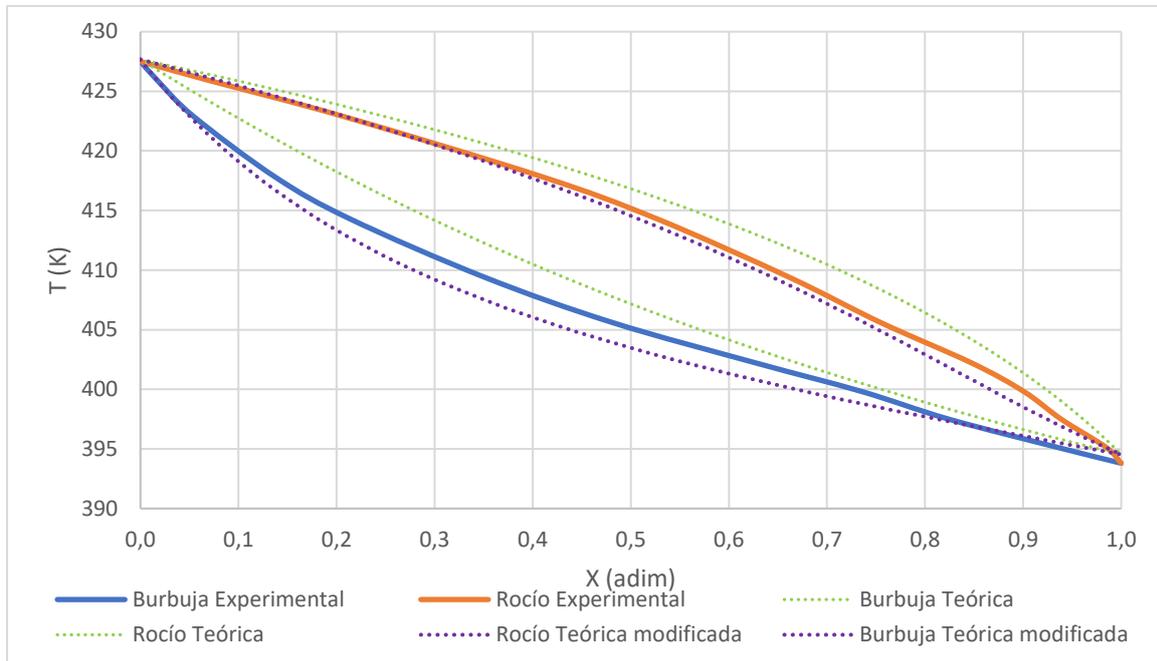


Ilustración 24: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo Wilson a 40 kPa

Prácticamente el mismo resultado que los dos casos anteriores: 60 y 80 kPa: la curva de rocío con un ajuste muy bueno, mucho mejor que la primera simulación y la de burbuja ligeramente mejor, pero esta vez por debajo de la curva real.

En el caso del modelo NRTL para mezcla 1, se obtuvo:

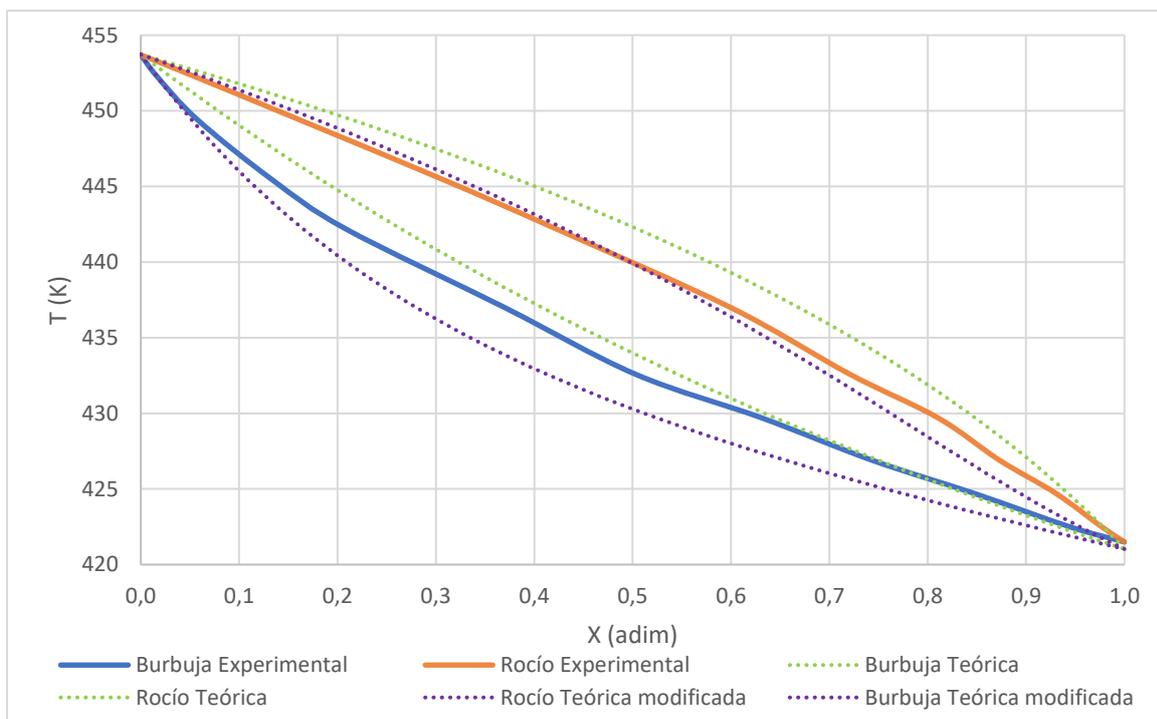


Ilustración 25: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 101 kPa

Se repite el comportamiento observado para el modelo Wilson. El nuevo ajuste con NRTL es muy bueno para la curva de rocío en todo el rango de composiciones. Las curvas llegan a cruzarse sin alejarse mucho.

La curva de burbuja ha bajado demasiado en la gráfica y ahora está más lejos que la simulación inicial.

A 80 kPa, se llegó a:

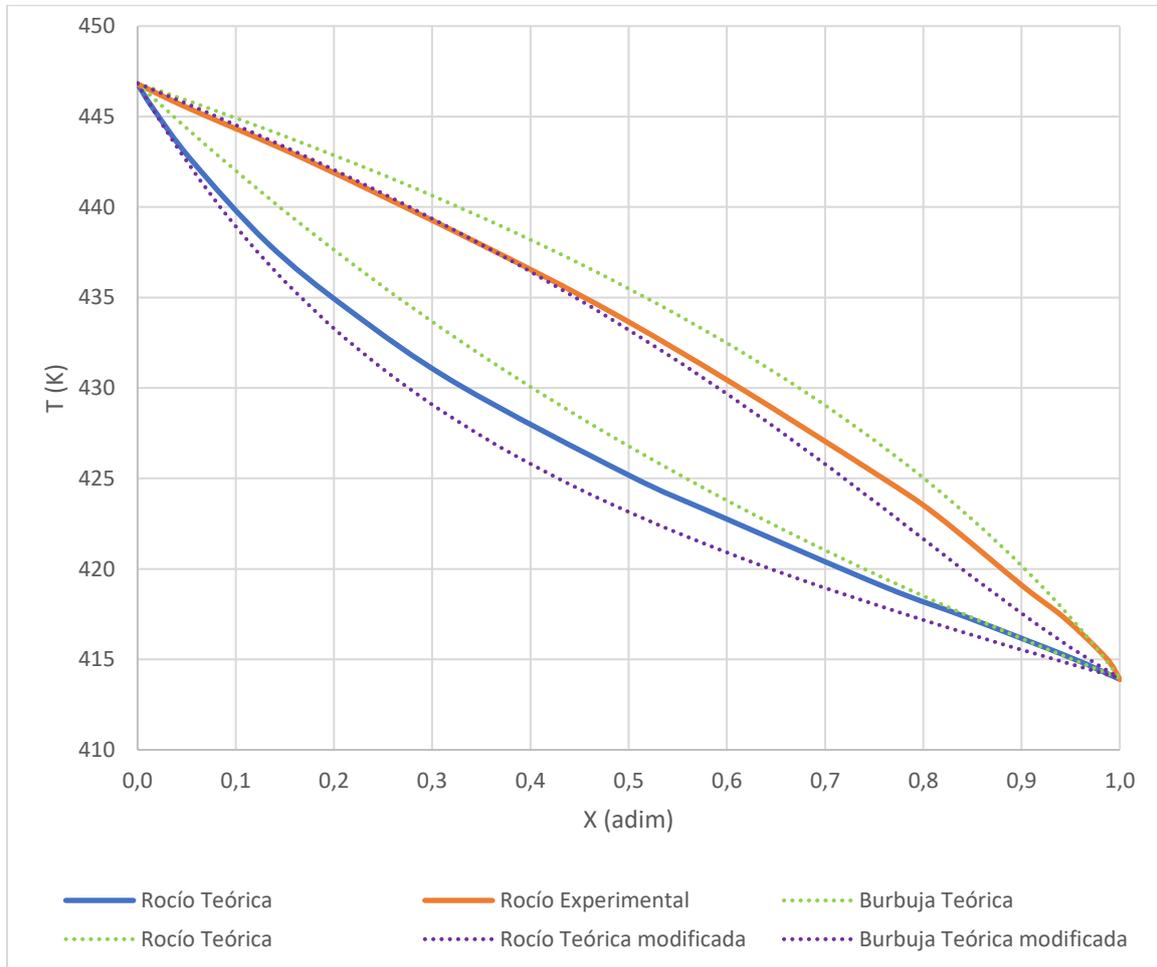


Ilustración 26: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 80 kPa

Nuevamente el ajuste mejora bastante para la curva de rocío, aunque se aleja un poco de la real entre $X=0,7$ y $X=1$.

Es difícil decir cuál de las curvas de rocío simuladas se asemeja más a la real en este caso, pues parecen estar igual de alejadas, pero una por encima y la otra por debajo.

El gráfico obtenido mediante NRTL a 60 kPa es el siguiente:

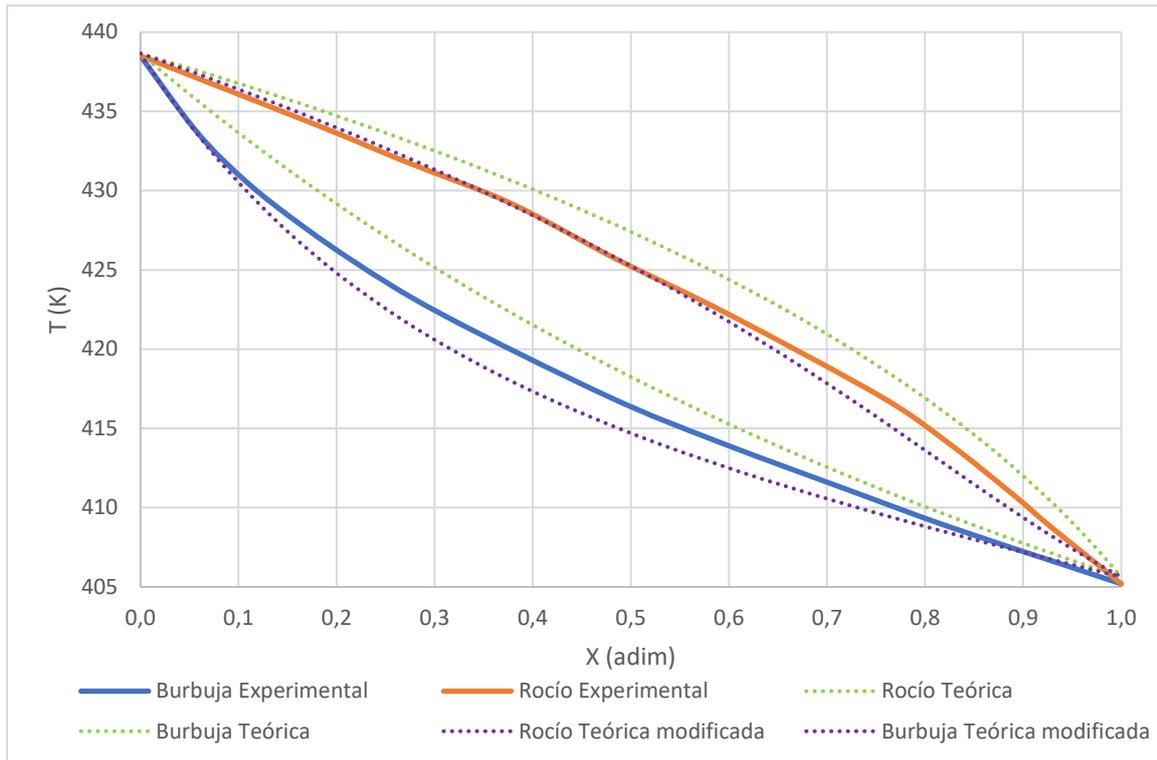


Ilustración 27: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 60 kPa

Prácticamente el mismo comportamiento en ambas gráficas que en el caso anterior. Sin embargo, esta vez la nueva curva de burbuja se ajusta un poco mejor que la primera simulación.

NRTL a 40 kPa arrojó:

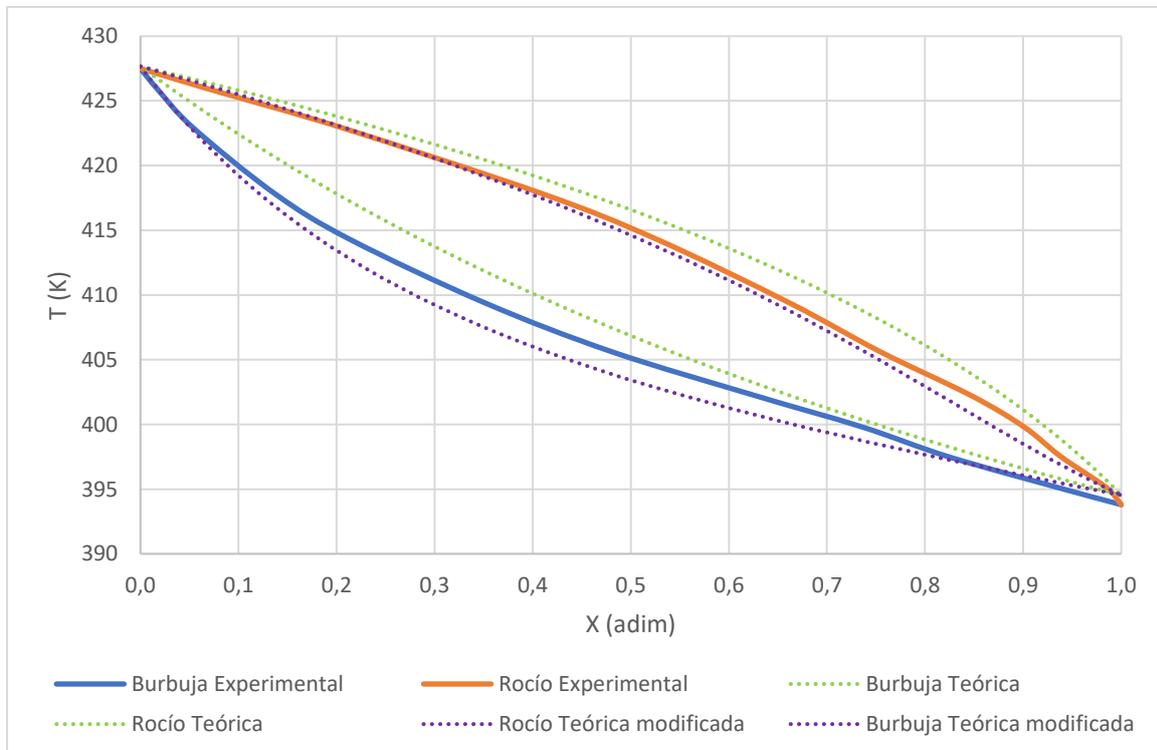


Ilustración 28: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo NRTL a 40 kPa

Se trata de una gráfica muy similar a la anterior, con el mismo comportamiento en ambas curvas (rocío y burbuja).

Ahora, utilizando el modelo UNIQUAC, se obtuvo a 101 kPa:

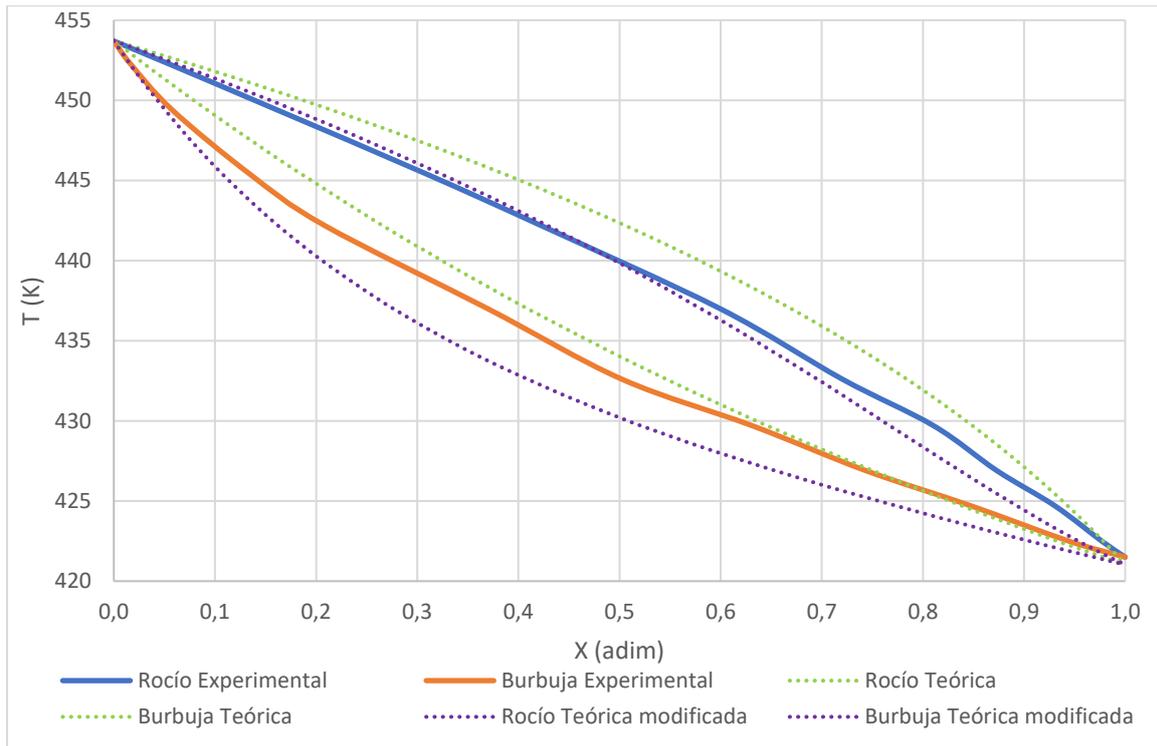


Ilustración 29: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 101 kPa

La tendencia se repite para este modelo: las gráficas se han desplazado hacia abajo, logrando un ajuste mucho mejor para la curva de rocío, pero peor para la de burbuja.

A 80 kPa:

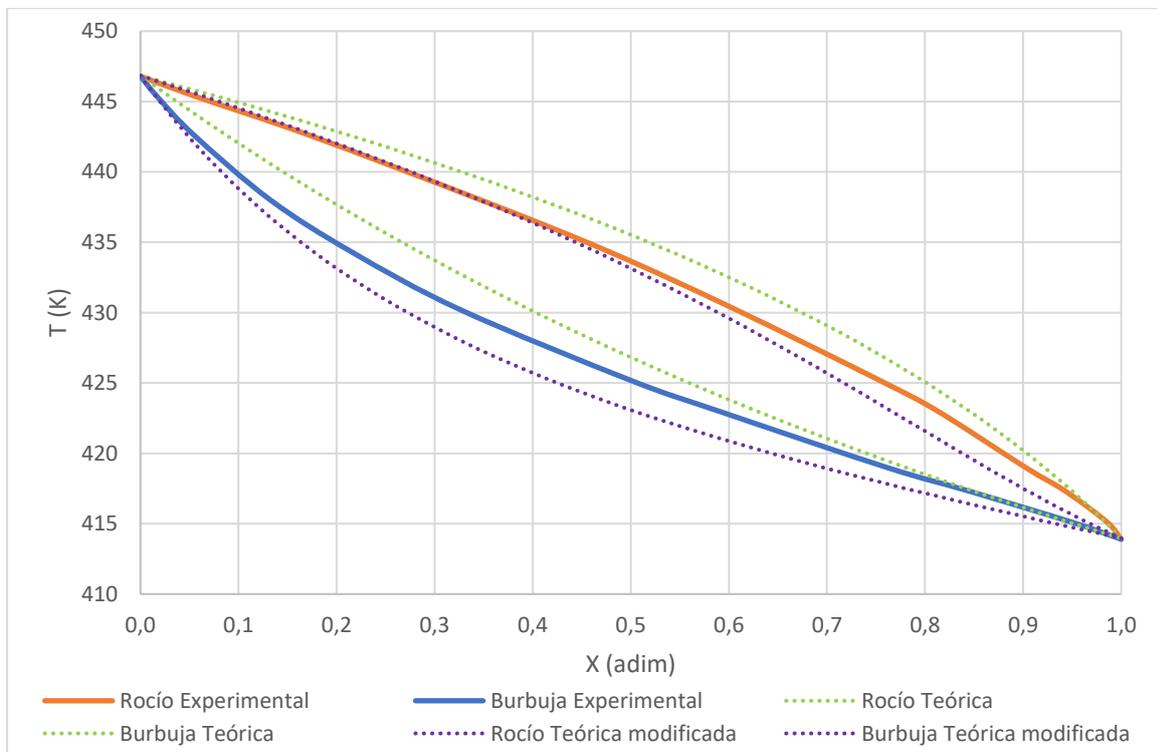


Ilustración 30: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 80 kPa

Nuevamente se observa una tendencia similar a las anteriores. En este caso el ajuste

de la curva de rocío es mejor que el caso de los 101 kPa.

A 60 kPa:

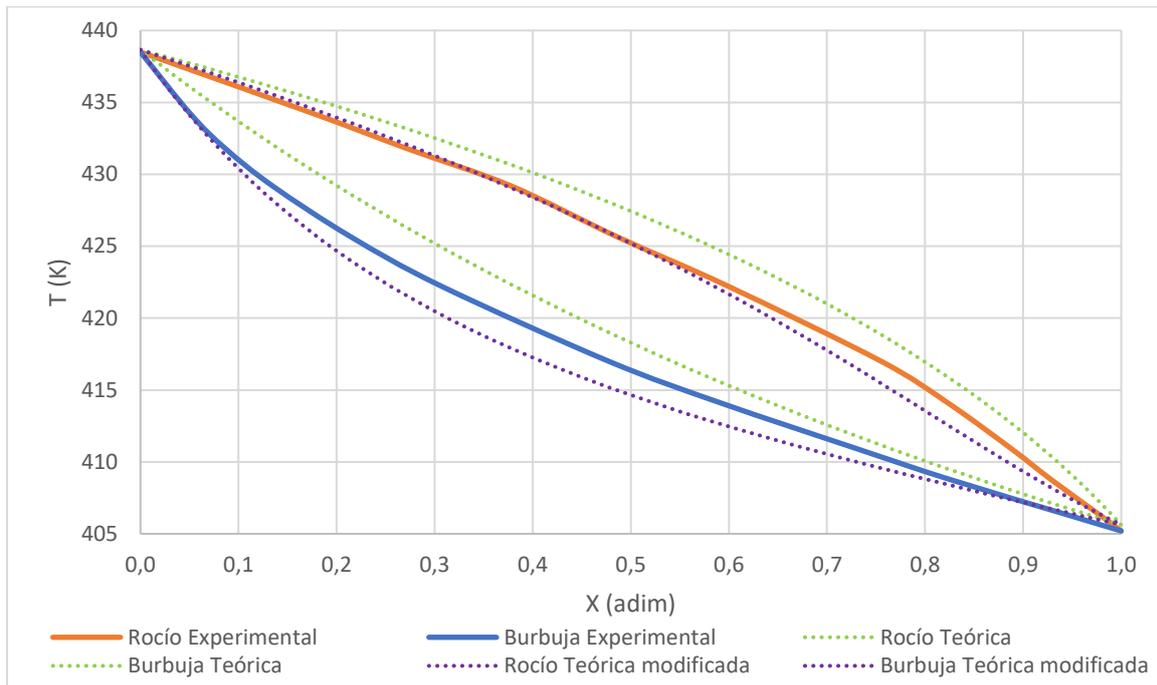


Ilustración 31: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 60 kPa

La gráfica es muy similar a la anterior, se repiten las tendencias. Se podría afirmar que, en el caso de las curvas de burbuja, el ajuste mejora a medida que disminuye la presión. Este comportamiento se observado en la mezcla 1 utilizando los 3 modelos.

Para culminar con la mezcla 1, a 40 kPa, mediante UNIQUAC, se logró la siguiente mejora:

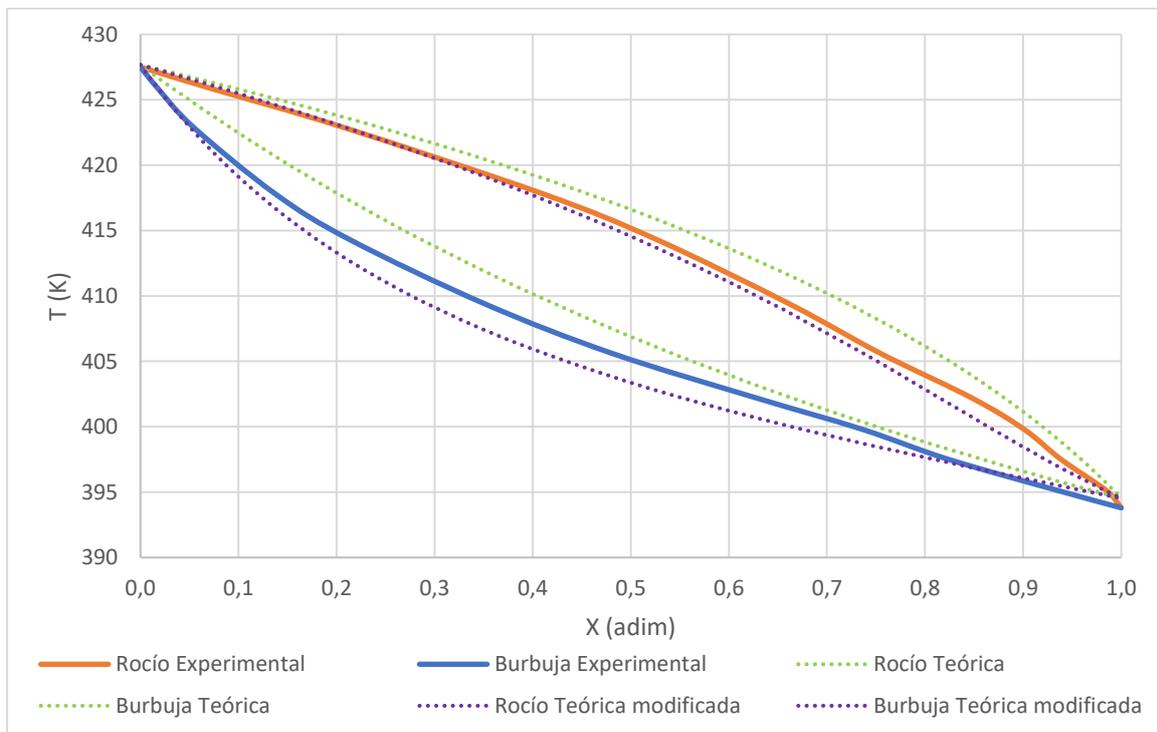


Ilustración 32: Simulación modificada. Mezcla 1, modelo UNIQUAC a 40 kPa

Las tendencias se mantienen. En lo que respecta a la mezcla 1, se ha observado que

todos los modelos termodinámicos mejoran notablemente en representar la curva de rocío. No siento éste el caso de la curva de burbuja: el ajuste comienza siendo peor que el primero a 101 kPa y mejora al disminuir la presión (superando a la simulación con los parámetros por defecto).

5.3.2. Mezcla 2

Ahora, consideremos la mezcla 2. A 101 kPa y mediante Wilson, se obtuvo:

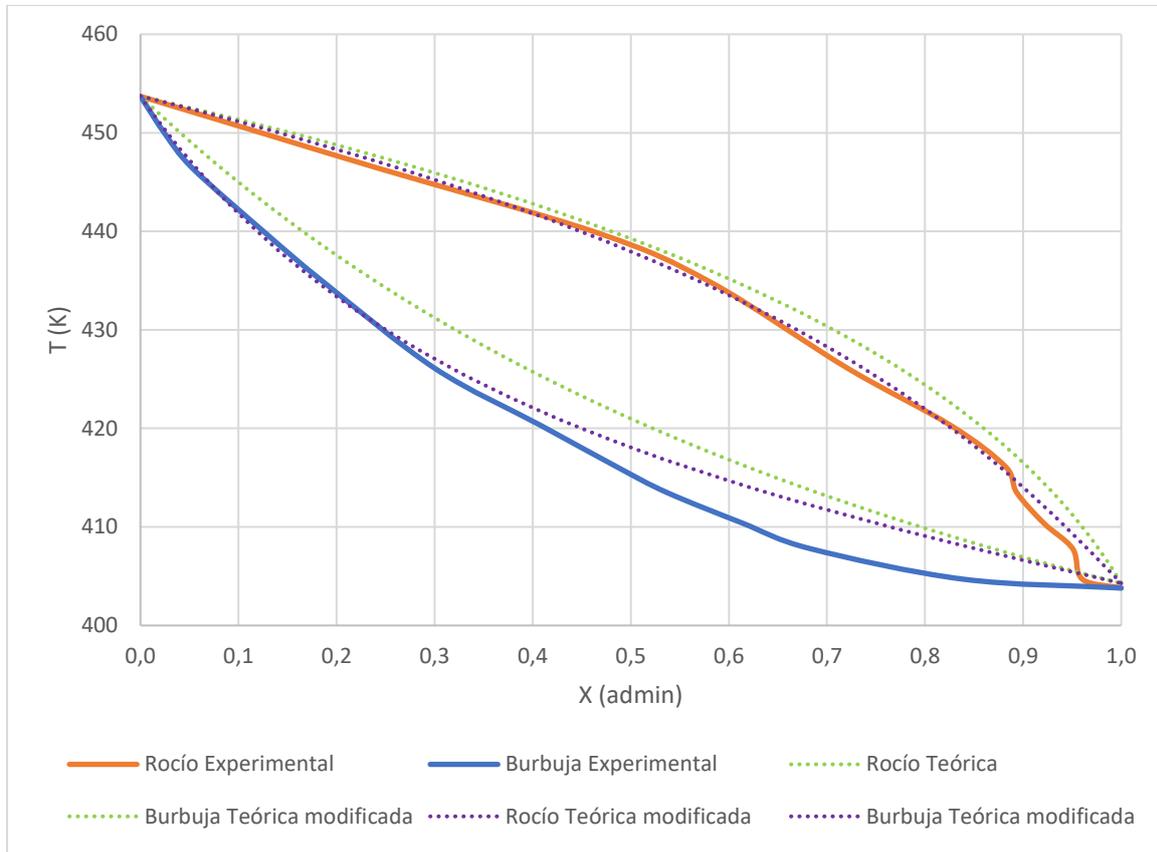


Ilustración 33: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 101 kPa

Se puede observar una tendencia similar a la observada con la mezcla 1. La curva de rocío es notablemente mejor, con muy poca distancia hacia la real y con varios puntos de intersección.

El caso de la curva de burbuja es un poco distinto al de la mezcla 1. El ajuste comienza siendo perfecto desde $X=0$ hasta $X=0,3$. A partir de ahí, se aleja por encima de la curva real, pero más cerca que la curva de burbuja verde. Se logró desplazar las curvas hacia como se deseaba, pero a diferencia de la mezcla 1, la curva de burbuja no sobrepasó la real.

El modelo Wilson para la gráfica a 80 kPa arrojó lo siguiente:

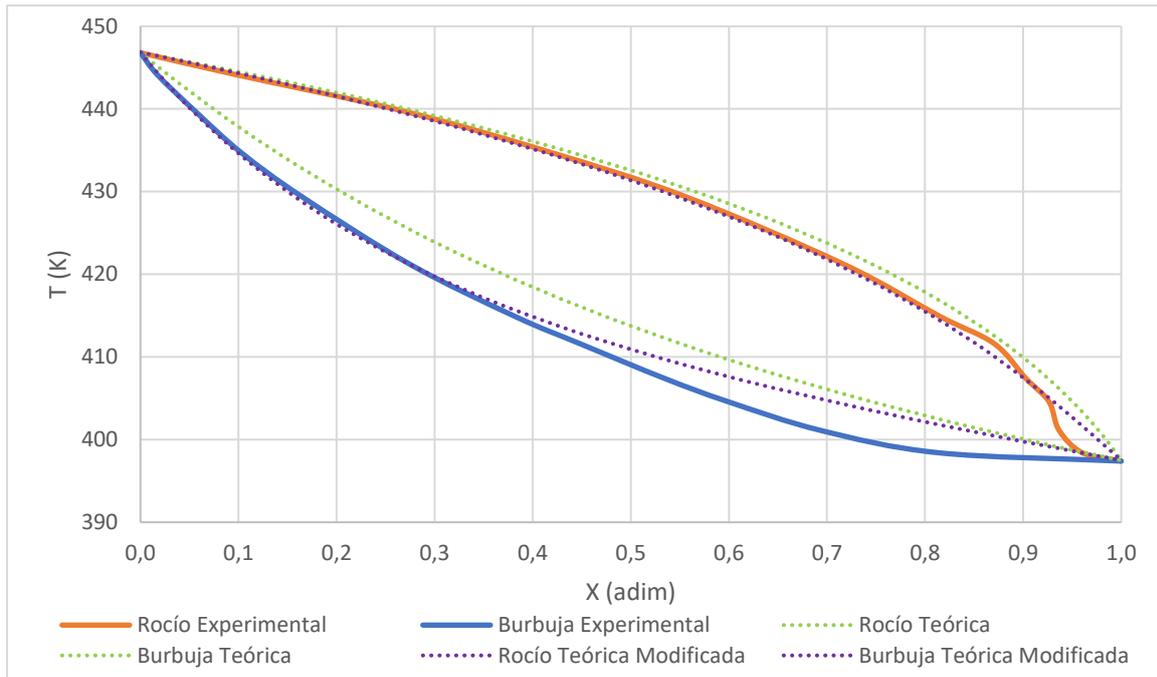


Ilustración 34: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 80 kPa

Se mantiene lo ocurrido a 101 kPa, pero en esta ocasión, el ajuste de la curva de burbuja es excelente hasta $X=0,4$. A partir de ahí, la curva violeta está siempre más cerca de la azul por arriba.

A 60 kPa:

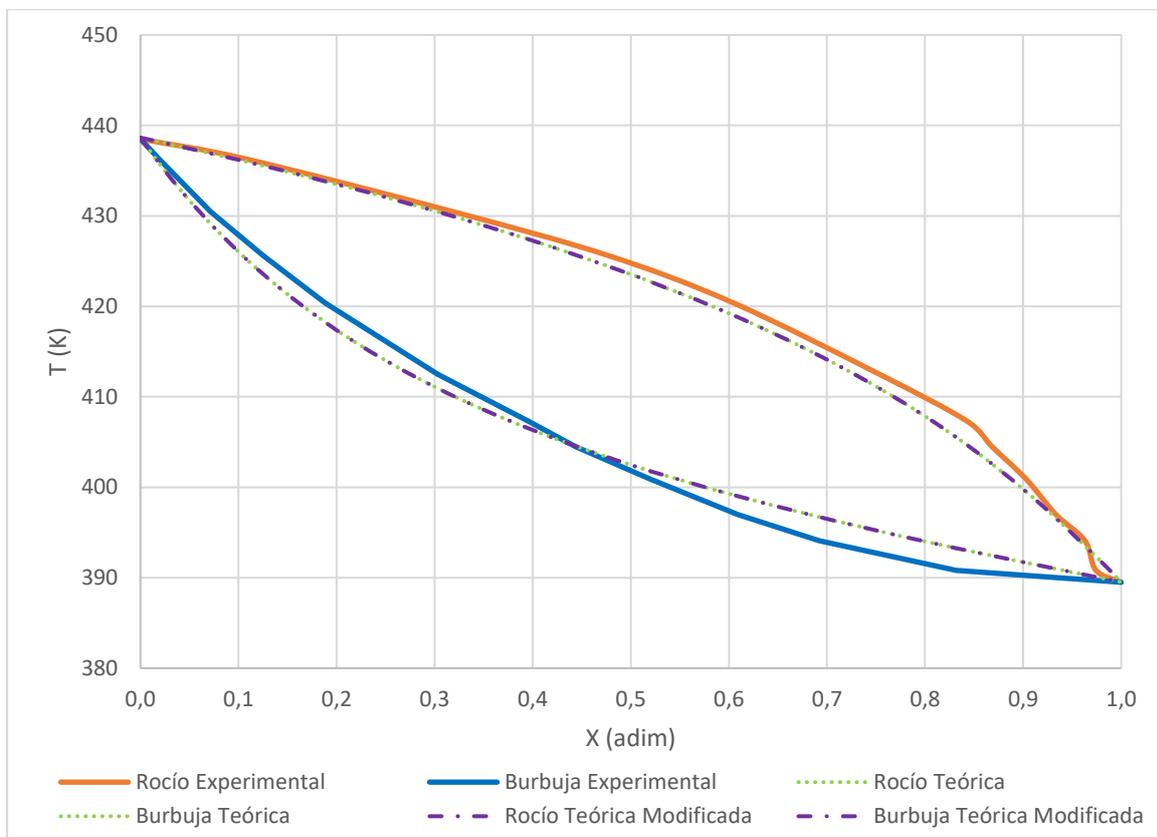


Ilustración 35: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 60 kPa

Esta gráfica es curiosa, pues no muestra ninguna diferencia entre la simulación original

y la que fue modificada. Se repitió el cálculo varias veces y puede que se trata de un error del simulador, pues los datos generados son exactamente los mismos. Se pueden observar los datos en detalle en las tablas 18 y 48 (anexos).

Wilson a 40 kPa proporciona lo siguiente:

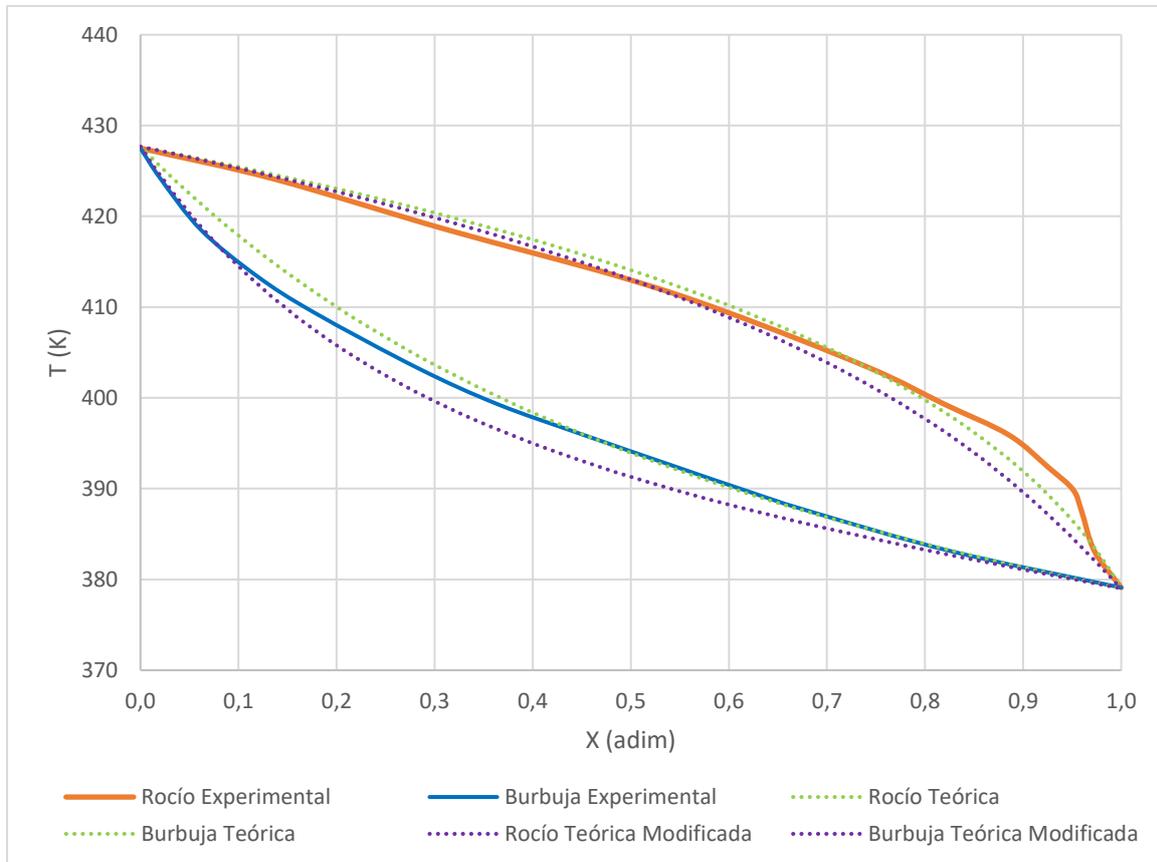


Ilustración 36: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo Wilson a 40 kPa

En esta ocasión, por primera vez la simulación no mejoró, pues la original ya estaba bastante ajustada a la realidad. Los ajustes son ambos excelentes para la curva de rocío entre 0 y 0,7. Sin embargo, es difícil afirmar a simple vista cuál se ajuste mejor en este rango. A partir de allí, la nueva curva se aleja por debajo de la real, más que la original.

En el caso de la curva de burbuja, el ajuste es mejor únicamente entre $X=0$ y $X=0,2$. A partir de esta composición, la curva simulada originalmente es mejor.

Mediante el modelo NRTL, a 101 kPa, se obtuvo:

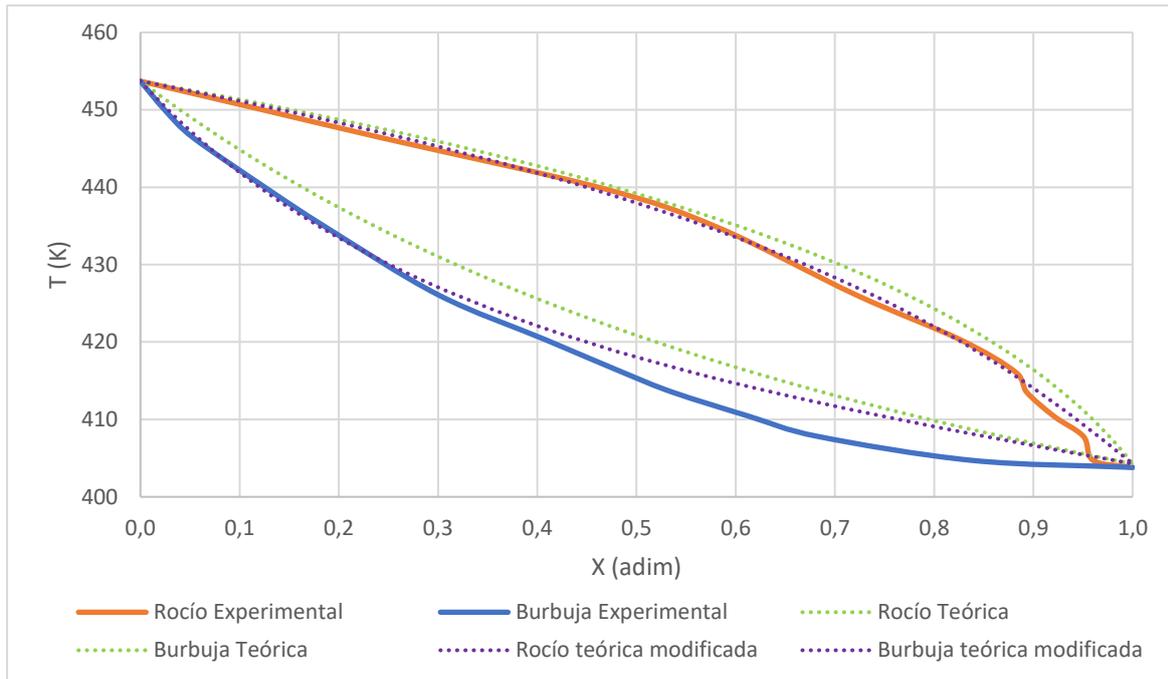


Ilustración 37: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 101 kPa

Se repite la tendencia de Wilson: ligera mejora en la curva de rocío (que ya era un muy buen ajuste) y notable mejora en la curva de burbuja.

La nueva curva obtenida a 80 kPa es:

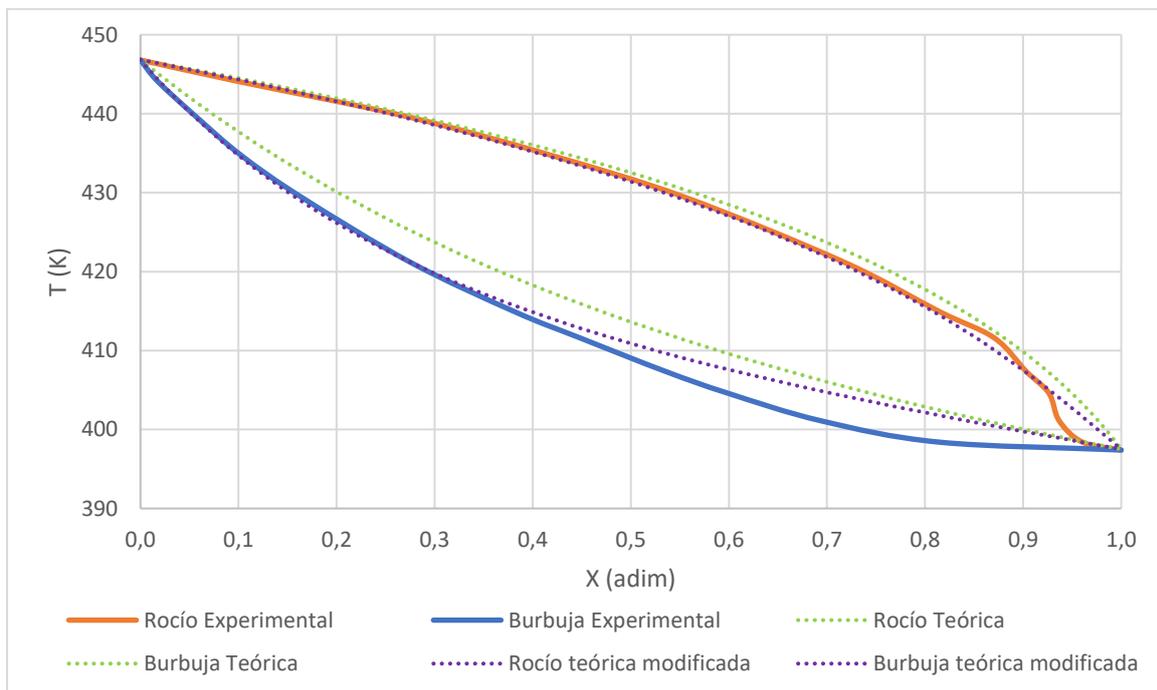


Ilustración 38: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 80 kPa

Se tiene la misma tendencia del caso anterior.

A 60 kPa:

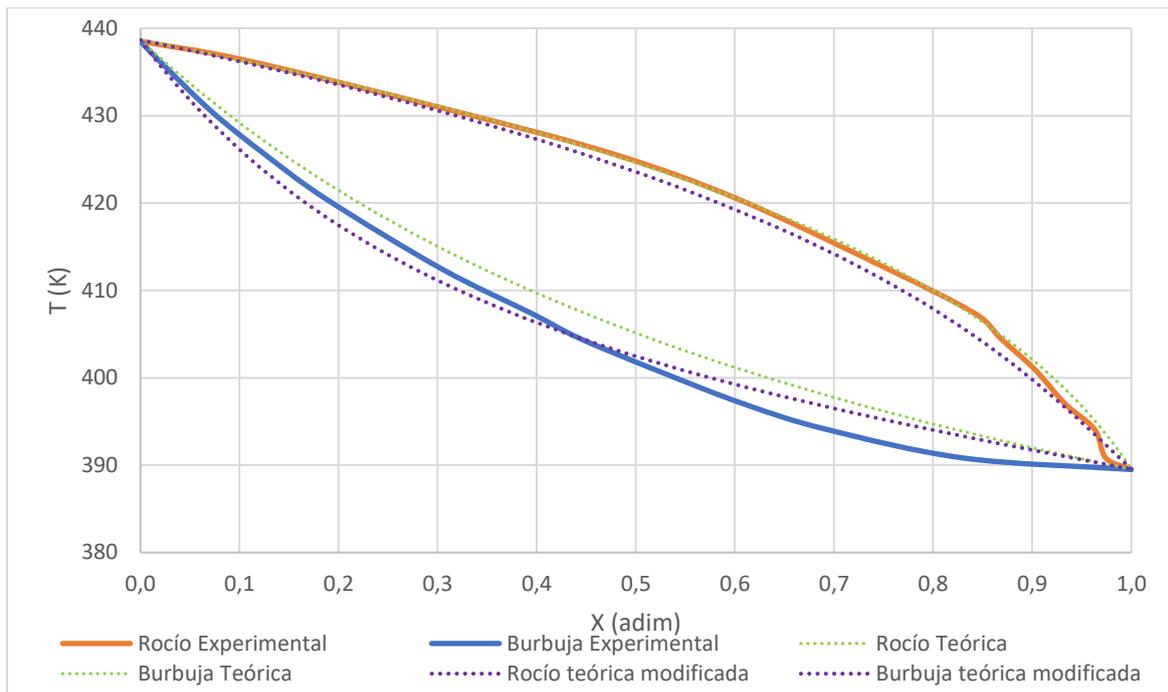


Ilustración 39: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 60 kPa

En esta oportunidad, la curva de rocío modificada no es mejor que la simulación original (que tiene un ajuste casi perfecto). La curva se ha desplazado hacia abajo demasiado.

La curva de burbuja sí muestra una mejoría, con un punto de cruce con la curva real y poca desviación en todo el rango.

NRTL a 40 kPa:

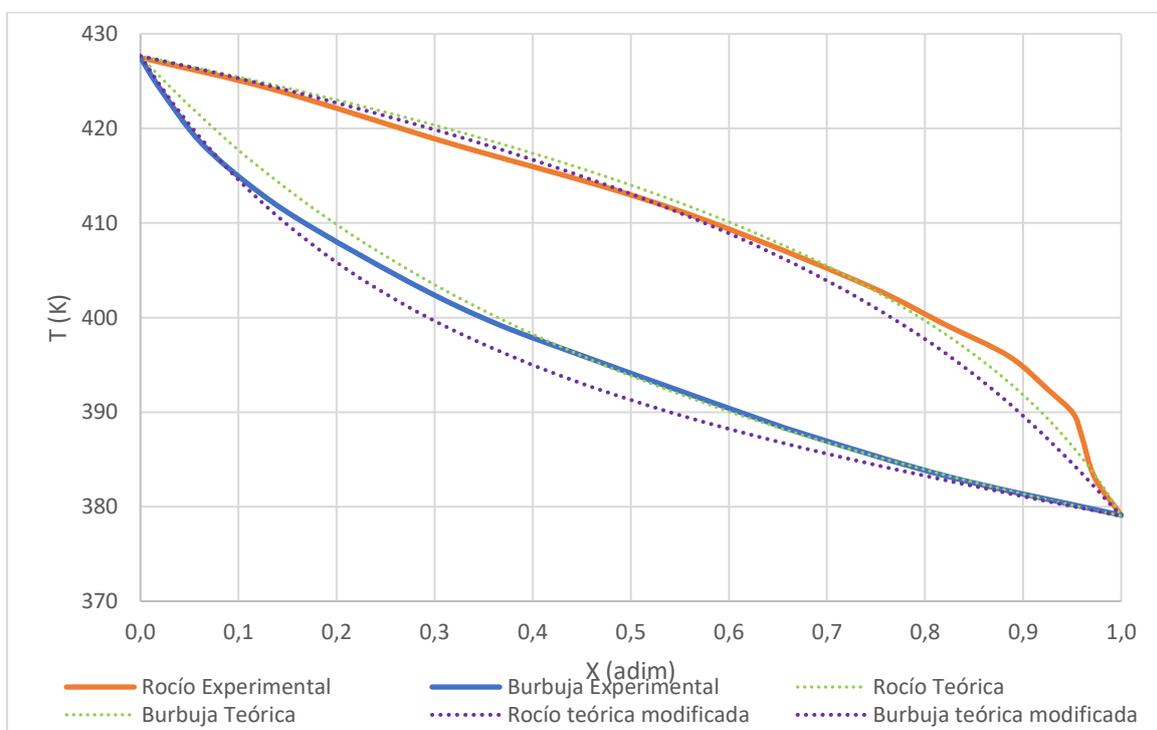


Ilustración 40: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo NRTL a 40 kPa

En este gráfico, no se logró una mejoría en la simulación. La curva de rocío modificada está cerca de la real, pero no más que la original. La curva de rocío se desplazó hacia

debajo de la real, mientras la original tiene un ajuste casi perfecto.

Nuevamente, cabe acotar que esta simulación fue de las mejores que se lograron con los parámetros por defecto, por lo que era de esperarse que una modificación empeorara el ajuste en lugar de mejorarlo.

Los resultados obtenidos mediante UNIQUAC a 101 kPa son los siguientes:

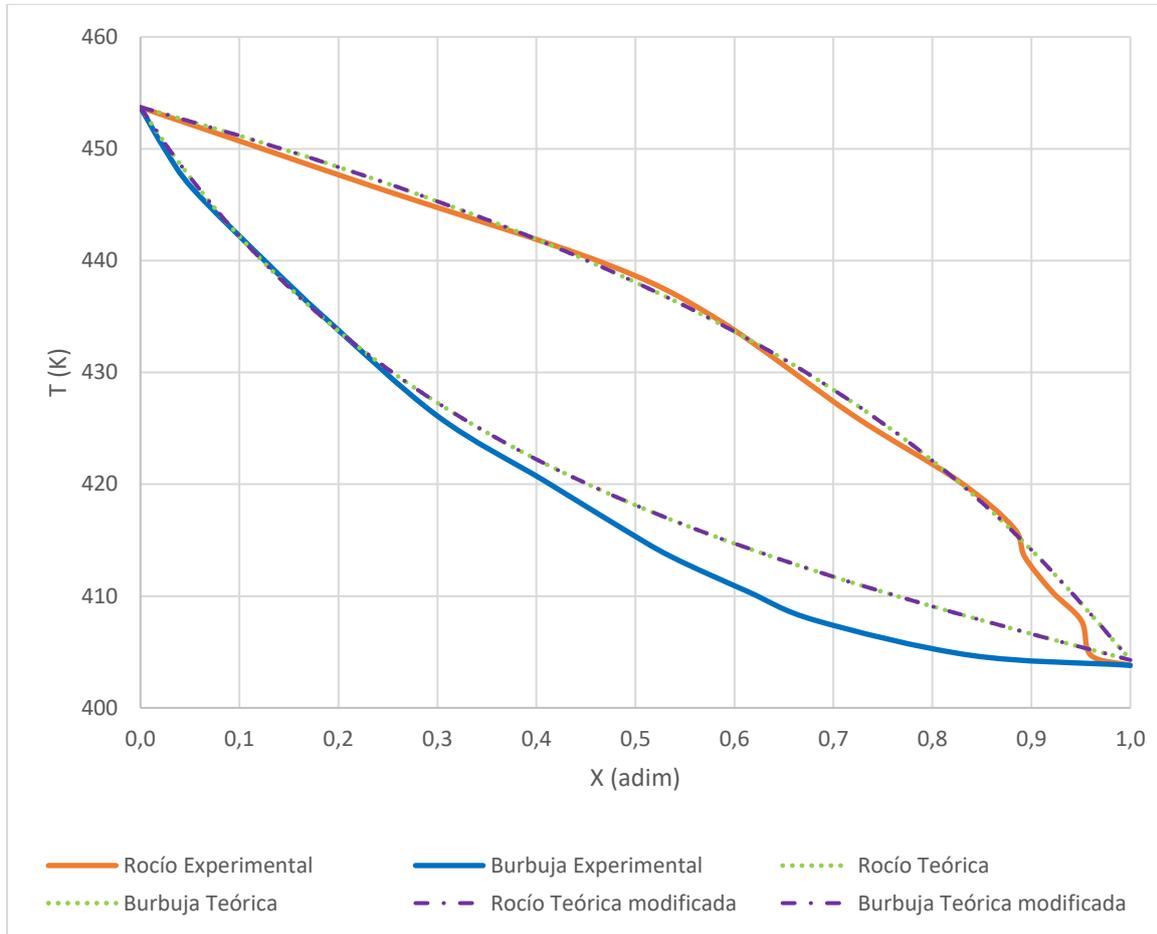


Ilustración 41: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 101 kPa

Se tiene un caso similar al de la ilustración 35. La simulación no muestra ninguna diferencia luego de haber modificado la temperatura de ebullición del 2,3-butanodiol. Son los únicos dos casos en los que no se observa ninguna diferencia, lo que parece indicar un fallo del simulador.

A 80 kPa se obtuvo:

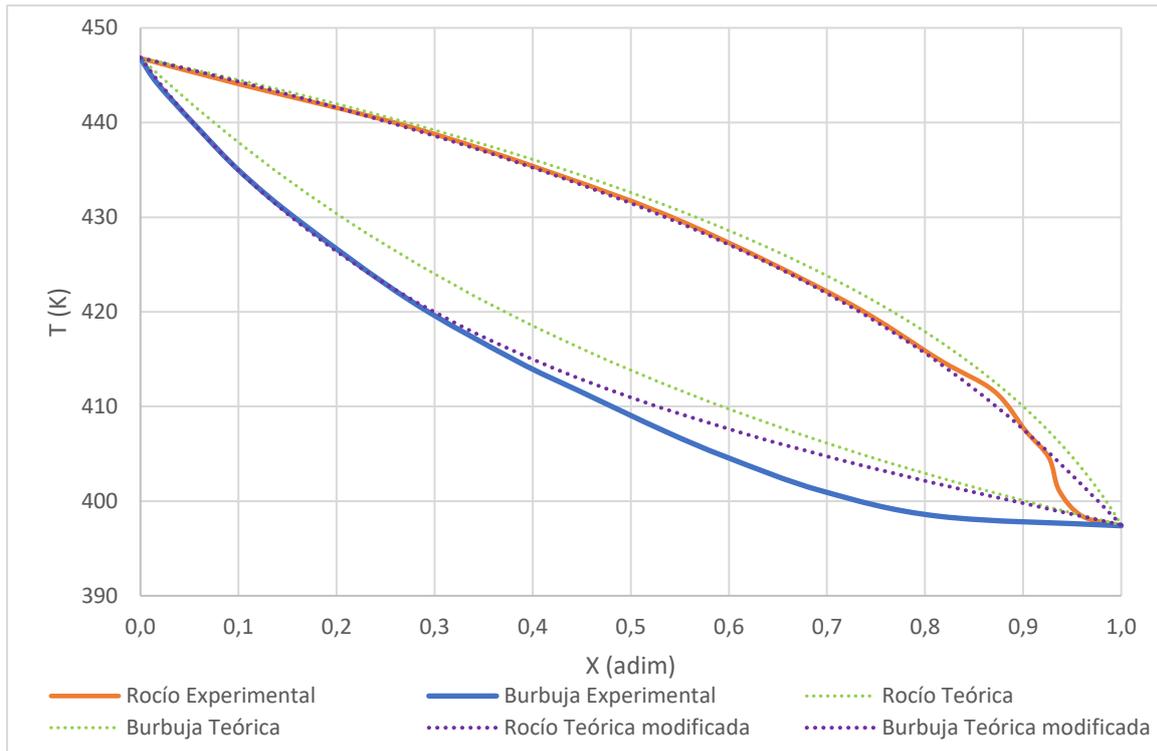


Ilustración 42: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 80 kPa

Se puede observar una mejora en ambos casos. La nueva curva de rocío es prácticamente perfecta en todo el rango y la de burbuja lo es hasta $X=0,4$. A partir de este punto comienza a alejarse de la real, pero siempre más cerca que la curva de burbuja simulada inicialmente.

A 6 kPa, el modelo UNIQUAC arrojó los siguientes datos:

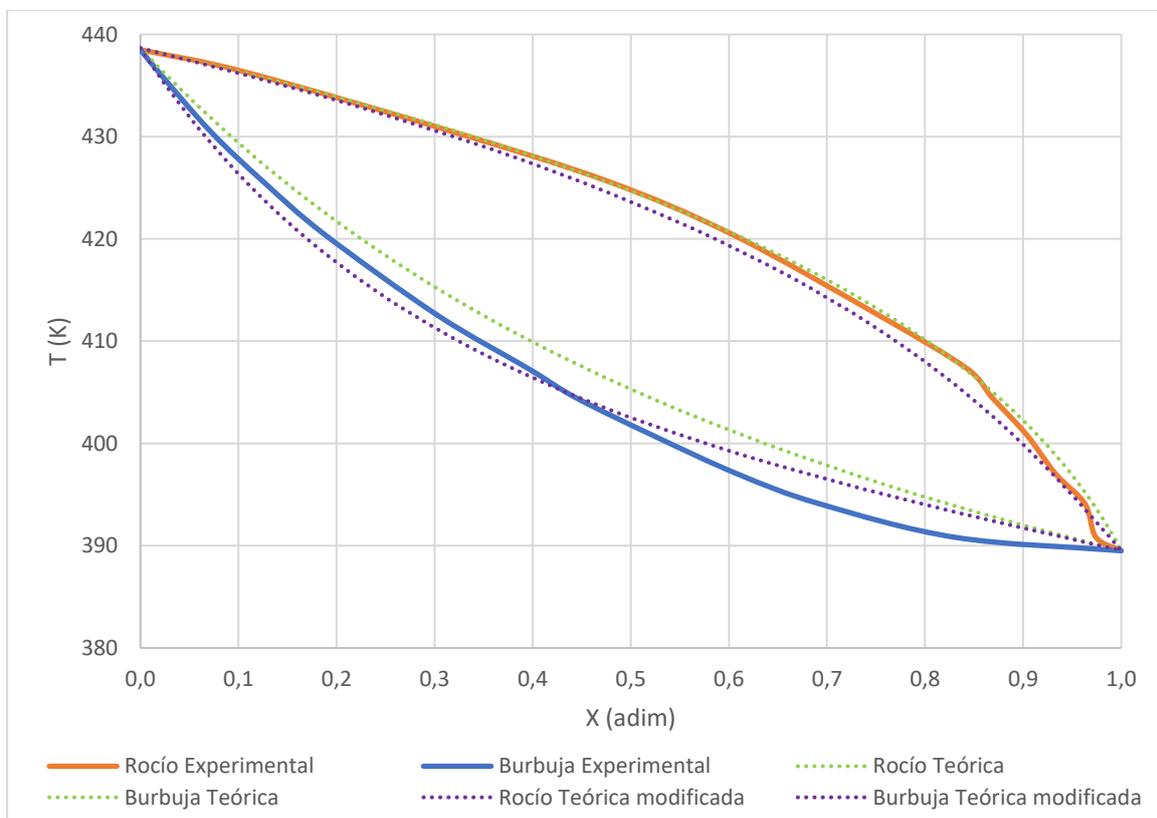


Ilustración 43: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 60 kPa

En esta oportunidad, los puntos de rocío de la simulación modificada están más alejados que los originales (aunque sigue siendo un buen ajuste). La curva resultante está por debajo de la real.

La curva de rocío generada muestra un mejor ajuste en todo el rango, mostrando incluso un punto de intersección con la real cerca de $X=0,45$.

Finalmente, el último gráfico generado es el siguiente:

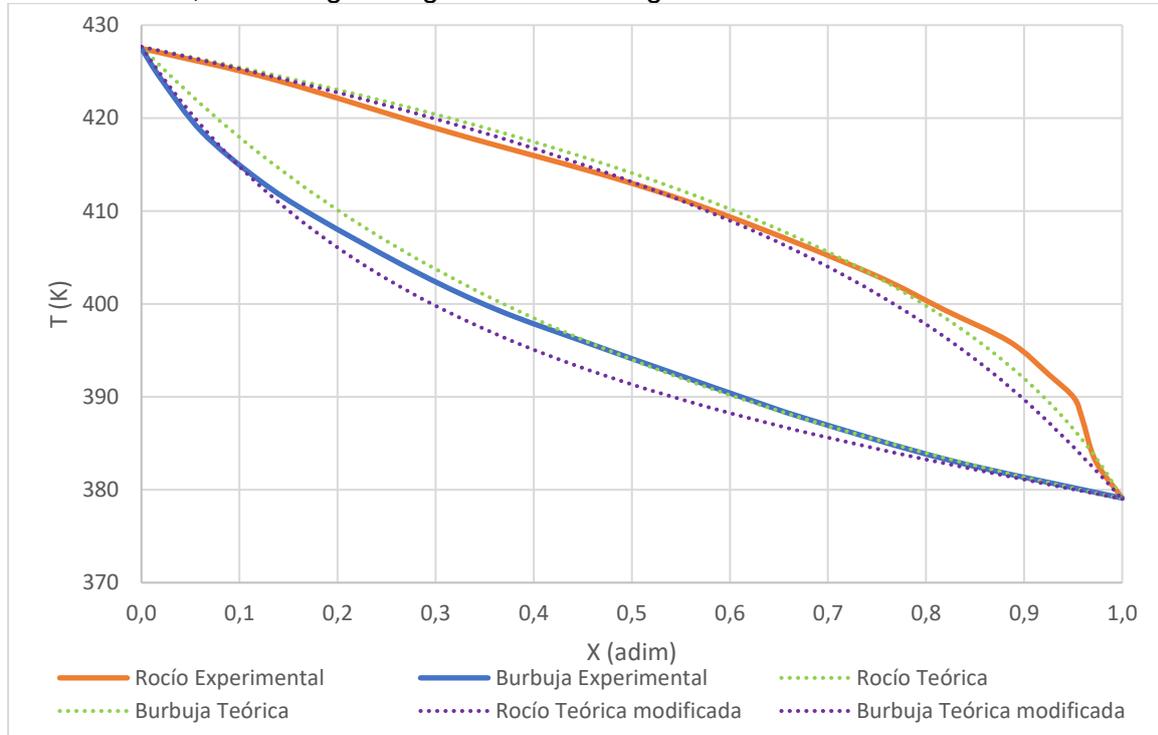


Ilustración 44: Simulación modificada. Mezcla 2, modelo UNIQUAC a 40 kPa

Al igual que en el caso de NRTL a 40 kPa, la simulación no mejoró en este caso. Se puede observar que las curvas originales ya tenían un ajuste excelente y las nuevas curvas generadas se alejan de las reales por debajo en ambos.

5.4. Comparación analítica para la simulación modificada

Se realizó un cálculo similar al del punto 5.2.3. Sólo que, en este caso, se compararán las simulaciones iniciales, con los parámetros por defecto del simulador, con las simulaciones obtenidas luego de modificar los valores mencionados.

Tabla 13: comparación de las simulaciones luego de modificar los parámetros

Mezcla	Presión (kPa)	Desviación porcentual promedio					
		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
		Y1	Y1**	Y1	Y1**	Y1	Y1**
1	101	-2,6	1,8	-1,7	1,3	-2,0	1,2
	80	-7,6	2,1	-4,7	4,5	-4,8	2,5
	60	-5,9	2,7	-5,1	4,9	-5,1	2,4
	40	-6,9	3,6	-6,0	6,1	-6,1	3,2
2	101	-6,8	3,5	-6,1	1,1	-0,9	-0,9
	80	-7,4	4,5	-7,1	2,1	-1,5	0,6
	60	-5,8	-5,8	-5,8	6,3	0,3	1,2
	40	-5,9	6,1	-6,1	7,1	-0,2	0,8

Donde Y^{**} es la composición del clave ligero en el vapor saturado obtenida con la simulación modificada.

Se evidencia una mejora en la desviación de todos los valores. Lo que se ha hecho mediante la modificación es desplazar las curvas hacia abajo. Se puede observar que algunos valores de desviación han cambiado de signo. Esto indica que la curva se ubica, en promedio, por debajo de la real. Sin embargo, los valores son más cercanos a cero.

Los modelos de Wilson y NRTL mejoraron notablemente. El modelo de UNIQUAC también, sin embargo, la simulación de la mezcla 2 era inicialmente excelente. En este caso, sigue siendo igual de buena.

Se puede afirmar que la corrección de las temperaturas de ebullición normal ha influido positivamente en los resultados obtenidos mediante las simulaciones en la mayoría de los casos para ambas mezclas.

Comparando los modelos entre sí, se observa que UNIQUAC es el que mejor se ajusta a los datos. NRTL y Wilson tienen ajustes similares. Todos los modelos muestran desviaciones de menos de 5 % y UNIQUAC incluso menores al 1% en el caso de la mezcla 2.

Sin embargo, la simulación en general no es tan buena como la reportada en el artículo del cual se han obtenido los datos. Posiblemente se pueda mejorar aún más el ajuste. Esto requeriría un estudio más a profundidad y más conocimiento del funcionamiento de UNISIM. También se podría intentar otro simulador que pueda mejorar los resultados.

CONCLUSIONES / CONCLUSIONS

Conclusiones

Se logró utilizar el simulador UNISIM para generar las curvas de ELV para las dos mezclas seleccionadas: el sistema 2-metil-1-pentanol / 2,3-butanodiol (mezcla 1) y el sistema 3-metil-1-butanol / 2,3-butanodiol (mezcla 2).

Los criterios de selección de los modelos termodinámicos permitieron utilizar 3 modelos adecuados para las dos mezclas: Wilson, UNIQUAC y NRTL.

Utilizando los parámetros por defecto del simulador, se procedió a comparar las curvas reales con las generadas a partir de las simulaciones. A grandes rasgos, las curvas generadas tienen el comportamiento adecuado, con cierta desviación con respecto a los valores reales. Dichas desviaciones son, en la mayoría de los casos, positivas (las curvas simuladas se encuentran por encima de las curvas reales).

Luego de observar las curvas, se procedió a un estudio analítico para comparar los modelos termodinámicos.

En lo que respecta a los coeficientes de actividad, se hizo una suposición para facilitar los cálculos: un coeficiente de fugacidad igual a uno. Los valores obtenidos distan mucho de los reportados como reales por Yim et al (2021), por lo que se puede afirmar que la suposición no fue buena. A pesar de tener presiones bajas, de una atmósfera o menos, el comportamiento de las mezclas está alejado de la idealidad.

Para la mezcla 1, los modelos UNIQUAC y NRTL presentan prácticamente los mismos valores y el ajuste es mejor que el de Wilson. Las desviaciones promedio se encuentran por debajo del 10%.

Para la mezcla 2, el modelo UNIQUAC es notablemente superior a todas las presiones, con desviaciones menores al 1% en varios casos. Wilson y NRTL muestran desviaciones menores al 10% pero mayores al 5%.

Se compararon los valores obtenidos mediante las simulaciones hechas en este trabajo con las que fueron reportadas por Yim et al (2021), cuyas desviaciones son en la mayoría de los casos menores al 1%. Estas últimas son notablemente mejores a las obtenidas mediante UNISIM utilizando sus parámetros por defecto. Esto a excepción del modelo UNIQUAC, que es mejor para la mezcla 2.

Una vez identificada una posible mejora, al encontrarse la mayoría de las curvas por encima de las reales, se encontró en el simulador UNISIM una diferencia entre las temperaturas de ebullición normal de las sustancias puras y los valores encontrados en la literatura. Esto hizo posible un desplazamiento de las curvas hacia abajo que mejoró notablemente el ajuste en casi todos los casos.

Las desviaciones siguen siendo mayores que las mostradas en el artículo del cual se tomaron los datos experimentales, lo cual indica que es posible mejorar aún más el ajuste. Para ello hace falta una mayor experticia en el uso del simulador UNISIM, o tal vez otro simulador.

Conclusions

The UNISIM simulator was successfully used to generate the VLE curves for both selected mixtures: 2-methyl-1-pentanol / 2,3-butanediol (mixture 1) and 3-methyl-1-butanol / 2,3-butanediol (mixture 2).

The criteria to select the thermodynamics models allowed to choose 3 models that are adequate for the two mixtures: Wilson, UNIQUAC and NRTL.

Using the default parameters in UNISIM, we proceeded to compare the real curves with the ones generated from the simulation. In general terms, the generated curves have an accurate behavior, with certain deviation from the real values. These deviations are, in most cases, positive (the simulated curves are above the real ones).

After observing the curves, we proceeded to perform an analytic study to compare the thermodynamic models.

Regarding the activity coefficients, we made a supposition to make the calculation easier: the fugacity coefficients equal to one. The results are far away from the real values reported by Yim et al (2021), so we can affirm that this assumption was not good. Despite having low pressures, the behavior of the mixtures is far from ideality.

For mixture 1, the models UNIQUAC and NRTL present practically the same values and their fitting is better than Wilson's. The mean deviations are below 10%.

For mixture 2, the model UNIQUAC is noticeably superior at every pressure, with deviations lower than 1% in multiple cases. Wilson and NRTL present deviations lower than 10%, but greater than 5%.

We compared the values obtained by the simulations done for this work, with the ones reported by Yim et al (2021). Their deviations are in most cases lower than 1%. These are remarkably better than the ones we obtained using the default parameters, except for the case of UNIQUAC for mixture 2.

Once a possible improvement was identified, being most of the curves above the real values, we found a difference between the normal boiling point of the pure substances in the UNISIM simulator, compared to the ones found in the books. This allowed to move the curves, which generated an improvement of all cases.

The deviations are still greater than the ones reported in the article from which the experimental data was taken, and this indicates that it is still possible to improve the data fitting. In order to achieve that, a better knowledge on the UNISIM simulator is required, or maybe another simulator.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Smith, J. M., Van Ness, H. C., Abbott, M. M., & García, C. R. (2007). *Introducción a la termodinámica en ingeniería química* (No. 660.296 9 S724i 2003.). McGraw-Hill.
- [2] Durán-García, M. E., & Ruiz-Navas, R. A. (2020). *Simulador de propiedades termodinámicas en la conversión de la biomasa forestal de aserrín de pino*. Maderas. Ciencia y tecnología, 22(3), 347-364.
- [3] Aldana Rivera, J. J. (2015). *Estudio experimental del equilibrio líquido-vapor de una mezcla de Propan-2-OL y Tolueno a 101.32 kPa*.
- [4] Carlier Nieto, R., González Fernández, C., López Paniagua, I., Jiménez Álvaro, A. & Rodríguez Marín, J. (2016). *Termodinámica para ingenieros químicos*. Dextra Editorial.
- [5] Lu, Y., Guo, L., Zhang, X., & Yan, Q. (2007). *Thermodynamic modeling and analysis of biomass gasification for hydrogen production in supercritical water*. Chemical Engineering Journal, 131(1-3), 233-244.
- [6] Simoni, L. D., Lin, Y., Brennecke, J. F., & Stadtherr, M. A. (2008). *Modeling liquid-liquid equilibrium of ionic liquid systems with NRTL, electrolyte-NRTL, and UNIQUAC*. Industrial & engineering chemistry research, 47(1), 256-272.
- [7] Cidre, E., Freedman, P., Gómez, D., & Kichic, L. (2009). *Metodología para la selección de correlaciones termodinámicas para el equilibrio de fases aplicada al simulador Hysys*. Facultad de Ingeniería UBA, Argentina.
- [8] Renon, H., & Prausnitz, J. M. (1968). *Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures*. AIChE journal, 14(1), 135-144.
- [9] Blackburn, T. R. (1969). *Equilibrium: a chemistry of solutions*. New York: Holt, Rinehart, and Winston.
- [10] Dimian, A. C., Bildea, C. S., & Kiss, A. A. (2014). *Integrated design and simulation of chemical processes*. Elsevier.
- [11] Yim, J. H., Kim, H. J., Oh, J. J., Lim, J. S., & Choi, K. Y. (2021). *Isobaric vapor-liquid equilibria for two binary systems (2-methyl-1-pentanol+ 2, 3-butanediol and 3-methyl-1-butanol+ 2, 3-butanediol) at (40, 60, 80, and 101) kPa*. Fluid Phase Equilibria, 530, 112897.
- [12] Perry, R. H., & Green, D. W. *Perry's Chemical Engineering Handbook*, 1997.
- [13] Antón, V., Martín, S., Lafuente, C., & Gascón, I. (2016). *Experimental and predicted vapour-liquid equilibrium of the binary mixtures n-heptane+ chlorobutane isomers*. Fluid Phase Equilibria, 409, 72-77.
- [14] Castillo-Borja, F., Vázquez-Román, R., & Bravo-Sánchez, U. I. (2013). *Simulación molecular del equilibrio líquido-vapor de la mezcla n2-nc5 por simulaciones Monte Carlo*. Avances en Ciencias e Ingeniería, 4(4), 105-115.
- [15] Kehiaian, H. V. (1985). *Thermodynamics of binary liquid organic mixtures*. Pure and Applied Chemistry, 57(1), 15-30.
- [16] Yue, Q., Zhu, J. W., Wu, Y. Y., Yuan, X. Q., & Ma, L. (2009). *Liquid-liquid equilibria and vapor-liquid equilibria for the binary system of epichlorohydrin and water*. Fluid phase equilibria, 283(1-2), 12-16.
- [17] Moreau, A., Martín, M. C., Chamorro, C. R., & Segovia, J. J. (2012). *Thermodynamic characterization of second generation biofuels: Vapour-liquid equilibria and excess enthalpies of the binary mixtures 1-pentanol and cyclohexane or toluene*. Fluid phase equilibria, 317, 127-131.

- [18] Das, S., Ghosh, S., Shinde, A. S., Mahajani, S. M., & Seethamraju, S. (2020). *Vapor-Liquid Equilibrium Analysis for a Binary System of Acetophenone with 2-Phenylethanol*. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 65(11), 5129-5136.
- [19] Jiang, S., Gao, J., Li, R., Xu, D., Zhang, L., & Wang, Y. (2018). *Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium Measurements for Separation of Azeotrope (Methanol+ Methyl Acetate)*. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 64(1), 296-302.
- [20] Wang, Y., Zhang, H., Zhang, W., Liu, Y., Cui, P., Yang, J., ... & Xu, D. (2019). *Vapor-liquid equilibrium for binary of 1-butanol+ n, n-dimethylacetamide and methyl isobutyl ketone+ n, n-dimethylacetamide at 101.3 kPa*. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 64(9), 4142-4147.
- [21] Harvey, A. H. (2017). *Accuracy of approximations to the poynting correction for ice and liquid water*. *Journal of research of the National Institute of Standards and Technology*, 122, 1.
- [22] Hosseinpour, F., & Hajihosseini, H. (2009). *Importance of simulation in manufacturing*. *World Academy of Science, Engineering and Technology*, 51(3), 292-295.
- [26] Montes-Valencia, N. (2015). *La industria química: importancia y retos*. *Lámpsakos*, (14), 72-85.

ANEXOS

Tabla 14: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante NRTL para graficar

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁
453,7	0,000	0,000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,2	0,011	0,029	446,3	0,0108	0,0292	438,1	0,0104	0,0296	427,1	0,0098	0,0302
452,6	0,023	0,057	445,7	0,0218	0,0582	437,6	0,0210	0,0590	426,6	0,0199	0,0601
452,1	0,034	0,086	445,2	0,0331	0,0869	437,0	0,0319	0,0881	426,0	0,0303	0,0897
451,5	0,046	0,114	444,6	0,0447	0,1153	436,4	0,0431	0,1169	425,4	0,0409	0,1191
450,9	0,058	0,142	444,0	0,0565	0,1435	435,9	0,0545	0,1455	424,9	0,0519	0,1481
450,4	0,071	0,169	443,5	0,0686	0,1714	435,3	0,0663	0,1737	424,3	0,0631	0,1769
449,8	0,083	0,197	442,9	0,0810	0,1990	434,7	0,0783	0,2017	423,7	0,0746	0,2054
449,2	0,096	0,224	442,3	0,0937	0,2263	434,1	0,0906	0,2293	423,1	0,0865	0,2335
448,6	0,110	0,250	441,7	0,1067	0,2533	433,5	0,1033	0,2567	422,5	0,0987	0,2613
448,0	0,123	0,277	441,1	0,1200	0,2800	432,9	0,1163	0,2837	421,9	0,1112	0,2888
447,4	0,137	0,303	440,5	0,1337	0,3063	432,3	0,1296	0,3104	421,3	0,1241	0,3158
446,8	0,151	0,329	439,9	0,1476	0,3323	431,6	0,1433	0,3367	420,6	0,1374	0,3426
446,2	0,166	0,354	439,2	0,1620	0,3580	431,0	0,1573	0,3626	420,0	0,1510	0,3690
445,6	0,181	0,379	438,6	0,1766	0,3833	430,4	0,1717	0,3882	419,4	0,1651	0,3949
444,9	0,196	0,404	438,0	0,1917	0,4083	429,7	0,1865	0,4134	418,7	0,1795	0,4205
444,3	0,212	0,428	437,3	0,2071	0,4329	429,1	0,2017	0,4382	418,1	0,1944	0,4456
443,6	0,228	0,452	436,7	0,2229	0,4570	428,4	0,2173	0,4626	417,4	0,2097	0,4703
443,0	0,244	0,476	436,0	0,2391	0,4809	427,8	0,2333	0,4866	416,7	0,2254	0,4946
442,3	0,261	0,499	435,4	0,2557	0,5043	427,1	0,2498	0,5102	416,1	0,2416	0,5184
441,7	0,278	0,522	434,7	0,2728	0,5272	426,4	0,2666	0,5333	415,4	0,2582	0,5417
441,0	0,295	0,545	434,0	0,2902	0,5498	425,8	0,2840	0,5560	414,7	0,2754	0,5646
440,3	0,313	0,567	433,4	0,3081	0,5719	425,1	0,3017	0,5783	414,0	0,2930	0,5869
439,7	0,332	0,588	432,7	0,3264	0,5936	424,4	0,3200	0,6000	413,3	0,3111	0,6088
439,0	0,351	0,609	432,0	0,3452	0,6148	423,7	0,3387	0,6213	412,6	0,3298	0,6302
438,3	0,370	0,630	431,3	0,3644	0,6356	423,0	0,3579	0,6421	411,9	0,3490	0,6510
437,6	0,390	0,650	430,6	0,3841	0,6559	422,3	0,3776	0,6624	411,2	0,3687	0,6713
436,9	0,410	0,670	429,9	0,4043	0,6757	421,6	0,3978	0,6822	410,5	0,3889	0,6911
436,2	0,430	0,690	429,2	0,4250	0,6951	420,9	0,4185	0,7015	409,8	0,4097	0,7104
435,6	0,451	0,709	428,5	0,4461	0,7140	420,2	0,4397	0,7203	409,1	0,4310	0,7291
434,9	0,473	0,727	427,8	0,4677	0,7323	419,5	0,4614	0,7386	408,3	0,4528	0,7472
434,2	0,495	0,745	427,1	0,4898	0,7502	418,8	0,4836	0,7564	407,6	0,4752	0,7648
433,5	0,517	0,763	426,4	0,5124	0,7677	418,1	0,5064	0,7736	406,9	0,4982	0,7818
432,7	0,540	0,780	425,7	0,5354	0,7846	417,3	0,5297	0,7904	406,2	0,5217	0,7983
432,0	0,564	0,796	425,0	0,5590	0,8010	416,6	0,5534	0,8066	405,5	0,5458	0,8142
431,3	0,588	0,812	424,3	0,5831	0,8169	415,9	0,5777	0,8223	404,8	0,5704	0,8296
430,6	0,612	0,828	423,6	0,6077	0,8324	415,2	0,6025	0,8375	404,0	0,5956	0,8444
429,9	0,637	0,843	422,9	0,6327	0,8473	414,5	0,6278	0,8522	403,3	0,6213	0,8587
429,2	0,662	0,858	422,2	0,6582	0,8618	413,8	0,6537	0,8663	402,6	0,6475	0,8725
428,5	0,688	0,872	421,5	0,6842	0,8758	413,1	0,6800	0,8800	401,9	0,6743	0,8857
427,8	0,714	0,886	420,8	0,7107	0,8893	412,4	0,7068	0,8932	401,2	0,7016	0,8985
427,1	0,741	0,899	420,1	0,7377	0,9023	411,7	0,7341	0,9059	400,5	0,7293	0,9107
426,4	0,768	0,912	419,4	0,7651	0,9149	411,0	0,7619	0,9181	399,8	0,7576	0,9224
425,7	0,795	0,925	418,7	0,7930	0,9270	410,3	0,7901	0,9299	399,1	0,7864	0,9336
425,1	0,823	0,937	418,0	0,8213	0,9387	409,6	0,8188	0,9412	398,5	0,8156	0,9444
424,4	0,852	0,948	417,3	0,8500	0,9500	408,9	0,8480	0,9520	397,8	0,8453	0,9547
423,7	0,881	0,959	416,6	0,8792	0,9608	408,3	0,8776	0,9624	397,1	0,8754	0,9646
423,0	0,910	0,970	415,9	0,9088	0,9712	407,6	0,9076	0,9724	396,5	0,9059	0,9741
422,4	0,940	0,980	415,3	0,9388	0,9812	406,9	0,9380	0,9820	395,8	0,9369	0,9831
421,7	0,970	0,990	414,6	0,9692	0,9908	406,3	0,9688	0,9912	395,2	0,9683	0,9917
421,0	1,000	1,000	414,0	1,0000	1,0000	405,6	1,0000	1,0000	394,5	1,0000	1,0000

Tabla 15: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante Wilson para graficar

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁
453,8	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,3	0,0284	0,0116	446,3	0,0288	0,0112	438,1	0,0292	0,0108	427,1	0,0298	0,0102
452,8	0,0567	0,0233	445,8	0,0574	0,0226	437,6	0,0582	0,0218	426,6	0,0593	0,0207
452,2	0,0847	0,0353	445,3	0,0857	0,0343	437,1	0,0869	0,0331	426,1	0,0886	0,0314
451,7	0,1125	0,0475	444,7	0,1138	0,0462	436,5	0,1155	0,0445	425,5	0,1176	0,0424
451,2	0,1400	0,0600	444,2	0,1417	0,0583	436,0	0,1437	0,0563	425,0	0,1464	0,0536
450,6	0,1673	0,0727	443,6	0,1693	0,0707	435,4	0,1717	0,0683	424,4	0,1749	0,0651
450,0	0,1944	0,0856	443,0	0,1967	0,0833	434,8	0,1995	0,0805	423,8	0,2032	0,0768
449,5	0,2212	0,0988	442,5	0,2238	0,0962	434,3	0,2269	0,0931	423,3	0,2311	0,0889
448,9	0,2478	0,1122	441,9	0,2507	0,1093	433,7	0,2541	0,1059	422,7	0,2587	0,1013
448,3	0,2740	0,1260	441,3	0,2772	0,1228	433,1	0,2810	0,1190	422,1	0,2860	0,1140
447,7	0,3000	0,1400	440,7	0,3035	0,1365	432,5	0,3075	0,1325	421,5	0,3130	0,1270
447,2	0,3257	0,1543	440,1	0,3294	0,1506	431,9	0,3338	0,1462	420,9	0,3397	0,1403
446,6	0,3511	0,1689	439,5	0,3550	0,1650	431,3	0,3597	0,1603	420,3	0,3660	0,1540
445,9	0,3762	0,1838	438,9	0,3803	0,1797	430,7	0,3852	0,1748	419,6	0,3919	0,1681
445,3	0,4010	0,1990	438,3	0,4053	0,1947	430,0	0,4104	0,1896	419,0	0,4174	0,1826
444,7	0,4254	0,2146	437,7	0,4299	0,2101	429,4	0,4353	0,2047	418,4	0,4426	0,1974
444,1	0,4495	0,2305	437,0	0,4542	0,2258	428,8	0,4598	0,2202	417,7	0,4674	0,2126
443,4	0,4732	0,2468	436,4	0,4781	0,2419	428,1	0,4838	0,2362	417,0	0,4917	0,2283
442,8	0,4966	0,2634	435,7	0,5015	0,2584	427,5	0,5075	0,2525	416,4	0,5156	0,2444
442,1	0,5196	0,2804	435,1	0,5247	0,2753	426,8	0,5308	0,2692	415,7	0,5391	0,2609
441,5	0,5422	0,2978	434,4	0,5474	0,2926	426,1	0,5536	0,2864	415,0	0,5621	0,2779
440,8	0,5644	0,3156	433,7	0,5697	0,3103	425,4	0,5760	0,3040	414,4	0,5846	0,2954
440,2	0,5862	0,3338	433,1	0,5916	0,3284	424,8	0,5980	0,3220	413,7	0,6067	0,3133
439,5	0,6076	0,3524	432,4	0,6130	0,3470	424,1	0,6194	0,3405	413,0	0,6282	0,3317
438,8	0,6286	0,3714	431,7	0,6340	0,3660	423,4	0,6405	0,3595	412,3	0,6493	0,3507
438,1	0,6491	0,3909	431,0	0,6545	0,3854	422,7	0,6610	0,3790	411,6	0,6699	0,3701
437,4	0,6692	0,4108	430,3	0,6746	0,4053	422,0	0,6810	0,3989	410,8	0,6899	0,3901
436,7	0,6889	0,4312	429,6	0,6943	0,4258	421,3	0,7006	0,4194	410,1	0,7094	0,4106
436,0	0,7081	0,4520	428,9	0,7134	0,4467	420,5	0,7197	0,4403	409,4	0,7283	0,4317
435,3	0,7268	0,4732	428,2	0,7320	0,4680	419,8	0,7382	0,4618	408,7	0,7467	0,4533
434,6	0,7450	0,4950	427,5	0,7502	0,4899	419,1	0,7562	0,4838	408,0	0,7645	0,4755
433,9	0,7628	0,5172	426,7	0,7678	0,5122	418,4	0,7737	0,5063	407,2	0,7818	0,4982
433,2	0,7801	0,5399	426,0	0,7849	0,5351	417,7	0,7907	0,5294	406,5	0,7985	0,5215
432,5	0,7969	0,5631	425,3	0,8015	0,5585	416,9	0,8071	0,5529	405,8	0,8146	0,5454
431,7	0,8132	0,5868	424,6	0,8177	0,5823	416,2	0,8230	0,5770	405,0	0,8302	0,5698
431,0	0,8290	0,6110	423,9	0,8333	0,6067	415,5	0,8384	0,6017	404,3	0,8452	0,5948
430,3	0,8443	0,6357	423,1	0,8484	0,6316	414,7	0,8532	0,6268	403,6	0,8597	0,6203
429,6	0,8591	0,6609	422,4	0,8630	0,6571	414,0	0,8675	0,6525	402,8	0,8735	0,6465
428,9	0,8735	0,6865	421,7	0,8770	0,6830	413,3	0,8812	0,6788	402,1	0,8869	0,6731
428,1	0,8873	0,7127	421,0	0,8906	0,7094	412,6	0,8945	0,7056	401,4	0,8997	0,7004
427,4	0,9007	0,7393	420,2	0,9037	0,7363	411,9	0,9072	0,7328	400,7	0,9119	0,7281
426,7	0,9136	0,7665	419,5	0,9162	0,7638	411,1	0,9194	0,7606	400,0	0,9236	0,7564
426,0	0,9260	0,7940	418,8	0,9283	0,7917	410,4	0,9311	0,7889	399,3	0,9348	0,7852
425,3	0,9379	0,8221	418,1	0,9399	0,8201	409,7	0,9423	0,8177	398,6	0,9456	0,8145
424,6	0,9493	0,8507	417,4	0,9511	0,8490	409,0	0,9531	0,8469	397,9	0,9558	0,8442
423,9	0,9603	0,8797	416,7	0,9617	0,8783	408,3	0,9633	0,8767	397,2	0,9655	0,8745
423,2	0,9709	0,9091	416,0	0,9719	0,9081	407,6	0,9732	0,9068	396,5	0,9748	0,9052
422,5	0,9810	0,9390	415,3	0,9817	0,9383	407,0	0,9825	0,9375	395,8	0,9836	0,9364
421,8	0,9907	0,9693	414,6	0,9911	0,9689	406,3	0,9915	0,9685	395,2	0,9920	0,9680
421,1	1,0000	1,0000	414,0	1,0000	1,0000	405,6	1,0000	1,0000	394,5	1,0000	1,0000

Tabla 16: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante UNIQUAC para graficar

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
	T (K)	X ₁		Y ₁	T (K)		X ₁	Y ₁		T (K)	X ₁
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,2	0,0288	0,0112	446,3	0,0292	0,0108	438,1	0,0296	0,0104	427,1	0,0099	0,0301
452,6	0,0574	0,0226	445,7	0,0581	0,0219	437,6	0,0589	0,0211	426,6	0,0200	0,0600
452,1	0,0857	0,0343	445,2	0,0868	0,0332	437,0	0,0880	0,0320	426,0	0,0304	0,0896
451,5	0,1138	0,0462	444,6	0,1152	0,0448	436,4	0,1168	0,0432	425,4	0,0411	0,1189
451,0	0,1416	0,0584	444,1	0,1433	0,0567	435,9	0,1453	0,0547	424,9	0,0520	0,1480
450,4	0,1692	0,0708	443,5	0,1712	0,0688	435,3	0,1735	0,0665	424,3	0,0633	0,1767
449,8	0,1965	0,0835	442,9	0,1987	0,0812	434,7	0,2015	0,0785	423,7	0,0749	0,2051
449,2	0,2235	0,0965	442,3	0,2260	0,0940	434,1	0,2291	0,0909	423,1	0,0868	0,2332
448,6	0,2502	0,1098	441,7	0,2530	0,1070	433,5	0,2564	0,1036	422,5	0,0990	0,2610
448,0	0,2766	0,1234	441,1	0,2797	0,1203	432,9	0,2834	0,1166	421,9	0,1115	0,2885
447,4	0,3026	0,1373	440,5	0,3060	0,1340	432,3	0,3101	0,1299	421,3	0,1244	0,3156
446,8	0,3284	0,1516	439,9	0,3320	0,1480	431,7	0,3364	0,1436	420,7	0,1377	0,3423
446,2	0,3539	0,1661	439,3	0,3577	0,1623	431,0	0,3623	0,1576	420,0	0,1514	0,3686
445,6	0,3789	0,1811	438,6	0,3830	0,1770	430,4	0,3879	0,1721	419,4	0,1654	0,3946
445,0	0,4037	0,1963	438,0	0,4080	0,1920	429,8	0,4131	0,1869	418,7	0,1798	0,4201
444,3	0,4281	0,2119	437,4	0,4325	0,2074	429,1	0,4379	0,2020	418,1	0,1947	0,4453
443,7	0,4521	0,2279	436,7	0,4567	0,2232	428,5	0,4623	0,2176	417,4	0,2100	0,4700
443,0	0,4757	0,2443	436,1	0,4806	0,2394	427,8	0,4863	0,2336	416,8	0,2257	0,4942
442,4	0,4990	0,2610	435,4	0,5040	0,2560	427,1	0,5099	0,2500	416,1	0,2419	0,5181
441,7	0,5218	0,2781	434,7	0,5269	0,2730	426,5	0,5330	0,2669	415,4	0,2585	0,5414
441,1	0,5443	0,2957	434,1	0,5495	0,2905	425,8	0,5557	0,2842	414,7	0,2757	0,5643
440,4	0,5664	0,3136	433,4	0,5717	0,3083	425,1	0,5780	0,3020	414,0	0,2933	0,5867
439,7	0,5880	0,3320	432,7	0,5933	0,3266	424,4	0,5998	0,3202	413,4	0,3114	0,6086
439,0	0,6092	0,3508	432,0	0,6146	0,3454	423,7	0,6211	0,3389	412,7	0,3300	0,6299
438,4	0,6300	0,3700	431,3	0,6354	0,3646	423,0	0,6419	0,3581	411,9	0,3492	0,6508
437,7	0,6503	0,3897	430,7	0,6557	0,3843	422,3	0,6622	0,3777	411,2	0,3688	0,6712
437,0	0,6702	0,4098	430,0	0,6755	0,4044	421,6	0,6821	0,3980	410,5	0,3890	0,6910
436,3	0,6896	0,4304	429,3	0,6950	0,4251	420,9	0,7014	0,4186	409,8	0,4098	0,7102
435,6	0,7086	0,4514	428,6	0,7139	0,4462	420,2	0,7202	0,4398	409,1	0,4311	0,7290
434,9	0,7271	0,4730	427,9	0,7323	0,4677	419,5	0,7386	0,4615	408,4	0,4529	0,7471
434,2	0,7451	0,4949	427,1	0,7502	0,4898	418,8	0,7564	0,4837	407,7	0,4753	0,7647
433,5	0,7627	0,5174	426,4	0,7677	0,5124	418,1	0,7736	0,5064	406,9	0,4982	0,7818
432,8	0,7798	0,5402	425,7	0,7846	0,5354	417,4	0,7904	0,5296	406,2	0,5217	0,7983
432,1	0,7964	0,5636	425,0	0,8010	0,5590	416,7	0,8066	0,5534	405,5	0,5458	0,8142
431,4	0,8125	0,5875	424,3	0,8170	0,5830	415,9	0,8223	0,5777	404,8	0,5704	0,8296
430,7	0,8282	0,6118	423,6	0,8325	0,6076	415,2	0,8376	0,6025	404,1	0,5955	0,8445
430,0	0,8434	0,6366	422,9	0,8474	0,6326	414,5	0,8522	0,6278	403,4	0,6212	0,8588
429,3	0,8581	0,6619	422,2	0,8619	0,6581	413,8	0,8664	0,6536	402,6	0,6474	0,8726
428,6	0,8724	0,6876	421,5	0,8759	0,6841	413,1	0,8801	0,6799	401,9	0,6742	0,8859
427,9	0,8862	0,7138	420,8	0,8894	0,7106	412,4	0,8933	0,7067	401,2	0,7014	0,8986
427,2	0,8995	0,7405	420,1	0,9025	0,7375	411,7	0,9060	0,7340	400,5	0,7292	0,9108
426,5	0,9124	0,7676	419,4	0,9150	0,7650	411,0	0,9182	0,7618	399,8	0,7575	0,9225
425,8	0,9248	0,7952	418,7	0,9272	0,7928	410,3	0,9300	0,7900	399,2	0,7862	0,9338
425,1	0,9368	0,8232	418,0	0,9389	0,8212	409,6	0,9413	0,8187	398,5	0,8155	0,9445
424,4	0,9484	0,8516	417,3	0,9501	0,8499	408,9	0,9521	0,8479	397,8	0,8451	0,9549
423,7	0,9595	0,8805	416,6	0,9609	0,8791	408,3	0,9625	0,8775	397,1	0,8753	0,9647
423,0	0,9702	0,9098	416,0	0,9713	0,9087	407,6	0,9725	0,9075	396,5	0,9058	0,9742
422,4	0,9805	0,9395	415,3	0,9812	0,9388	406,9	0,9821	0,9379	395,8	0,9368	0,9832
421,7	0,9905	0,9695	414,6	0,9908	0,9692	406,3	0,9912	0,9688	395,2	0,9682	0,9918
421,0	1,0000	1,0000	414,0	1,0000	1,0000	405,6	1,0000	1,0000	394,5	1,0000	1,0000

Tabla 17: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante NRTL para graficar

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
	T (K)	X ₁		Y ₁	T (K)		X ₁	Y ₁		T (K)	X ₁
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,0	0,0078	0,0322	446,1	0,0075	0,0325	437,9	0,0071	0,0329	426,9	0,0065	0,0335
452,2	0,0158	0,0642	445,3	0,0152	0,0648	437,2	0,0144	0,0656	426,2	0,0133	0,0667
451,4	0,0241	0,0959	444,6	0,0231	0,0969	436,4	0,0219	0,0981	425,5	0,0203	0,0997
450,6	0,0327	0,1273	443,8	0,0313	0,1287	435,6	0,0298	0,1302	424,7	0,0276	0,1324
449,8	0,0415	0,1585	443,0	0,0399	0,1601	434,8	0,0379	0,1621	423,9	0,0352	0,1648
449,0	0,0507	0,1893	442,2	0,0487	0,1913	434,0	0,0463	0,1937	423,1	0,0430	0,1970
448,2	0,0601	0,2199	441,3	0,0578	0,2222	433,2	0,0550	0,2250	422,3	0,0512	0,2288
447,4	0,0699	0,2501	440,5	0,0673	0,2527	432,4	0,0641	0,2559	421,4	0,0597	0,2602
446,5	0,0801	0,2799	439,6	0,0771	0,2829	431,5	0,0735	0,2865	420,6	0,0686	0,2914
445,6	0,0906	0,3094	438,8	0,0873	0,3127	430,6	0,0833	0,3166	419,7	0,0779	0,3221
444,7	0,1015	0,3385	437,9	0,0979	0,3421	429,7	0,0935	0,3465	418,8	0,0876	0,3524
443,8	0,1128	0,3672	437,0	0,1089	0,3711	428,8	0,1042	0,3758	417,9	0,0976	0,3823
442,9	0,1246	0,3954	436,0	0,1204	0,3996	427,9	0,1152	0,4047	417,0	0,1082	0,4118
442,0	0,1368	0,4232	435,1	0,1323	0,4277	427,0	0,1268	0,4332	416,1	0,1193	0,4407
441,0	0,1494	0,4505	434,1	0,1446	0,4553	426,0	0,1388	0,4612	415,1	0,1308	0,4691
440,0	0,1626	0,4774	433,2	0,1575	0,4824	425,0	0,1513	0,4886	414,1	0,1429	0,4970
439,0	0,1763	0,5037	432,2	0,1709	0,5090	424,0	0,1644	0,5156	413,1	0,1556	0,5244
438,0	0,1905	0,5295	431,2	0,1849	0,5350	423,0	0,1781	0,5419	412,1	0,1689	0,5510
437,0	0,2053	0,5547	430,1	0,1995	0,5605	422,0	0,1924	0,5676	411,1	0,1829	0,5770
436,0	0,2206	0,5794	429,1	0,2146	0,5854	420,9	0,2073	0,5927	410,0	0,1975	0,6024
434,9	0,2366	0,6034	428,0	0,2304	0,6095	419,9	0,2229	0,6171	408,9	0,2129	0,6271
433,9	0,2532	0,6268	427,0	0,2468	0,6331	418,8	0,2392	0,6408	407,9	0,2289	0,6510
432,8	0,2704	0,6495	425,9	0,2640	0,6560	417,7	0,2562	0,6638	406,8	0,2458	0,6742
431,7	0,2884	0,6716	424,8	0,2818	0,6782	416,6	0,2740	0,6860	405,6	0,2635	0,6965
430,6	0,3070	0,6930	423,7	0,3004	0,6996	415,5	0,2925	0,7075	404,5	0,2820	0,7179
429,5	0,3263	0,7137	422,6	0,3197	0,7203	414,4	0,3118	0,7281	403,4	0,3014	0,7386
428,4	0,3464	0,7336	421,5	0,3398	0,7402	413,2	0,3320	0,7480	402,3	0,3216	0,7584
427,3	0,3671	0,7528	420,3	0,3607	0,7594	412,1	0,3530	0,7671	401,1	0,3427	0,7773
426,2	0,3887	0,7713	419,2	0,3823	0,7777	410,9	0,3747	0,7853	400,0	0,3647	0,7953
425,0	0,4110	0,7890	418,1	0,4048	0,7953	409,8	0,3974	0,8026	398,8	0,3876	0,8124
423,9	0,4341	0,8060	416,9	0,4280	0,8120	408,7	0,4208	0,8192	397,7	0,4114	0,8286
422,8	0,4579	0,8221	415,8	0,4520	0,8280	407,5	0,4452	0,8349	396,6	0,4361	0,8439
421,6	0,4825	0,8375	414,7	0,4769	0,8431	406,4	0,4703	0,8497	395,4	0,4617	0,8584
420,5	0,5079	0,8521	413,5	0,5025	0,8575	405,3	0,4963	0,8638	394,3	0,4881	0,8720
419,4	0,5340	0,8660	412,4	0,5289	0,8711	404,2	0,5230	0,8770	393,2	0,5153	0,8847
418,3	0,5608	0,8792	411,3	0,5561	0,8840	403,1	0,5505	0,8895	392,1	0,5434	0,8967
417,2	0,5883	0,8917	410,2	0,5839	0,8961	402,0	0,5788	0,9012	391,1	0,5721	0,9079
416,1	0,6166	0,9034	409,1	0,6125	0,9075	400,9	0,6078	0,9123	390,0	0,6017	0,9183
415,0	0,6455	0,9145	408,1	0,6418	0,9183	399,8	0,6375	0,9226	389,0	0,6319	0,9281
414,0	0,6751	0,9250	407,0	0,6717	0,9283	398,8	0,6678	0,9322	388,0	0,6628	0,9372
412,9	0,7052	0,9348	406,0	0,7022	0,9378	397,8	0,6987	0,9413	387,0	0,6943	0,9457
411,9	0,7360	0,9440	404,9	0,7333	0,9467	396,8	0,7303	0,9497	386,0	0,7264	0,9536
410,9	0,7673	0,9527	403,9	0,7650	0,9550	395,8	0,7624	0,9576	385,0	0,7591	0,9609
409,9	0,7992	0,9608	403,0	0,7972	0,9628	394,8	0,7950	0,9650	384,1	0,7922	0,9678
408,9	0,8316	0,9685	402,0	0,8299	0,9701	393,9	0,8281	0,9719	383,2	0,8258	0,9742
407,9	0,8644	0,9756	401,1	0,8631	0,9769	393,0	0,8617	0,9783	382,3	0,8599	0,9801
407,0	0,8977	0,9823	400,1	0,8968	0,9832	392,1	0,8957	0,9843	381,5	0,8944	0,9856
406,1	0,9314	0,9886	399,2	0,9308	0,9892	391,2	0,9301	0,9899	380,6	0,9293	0,9907
405,2	0,9655	0,9945	398,4	0,9652	0,9948	390,4	0,9649	0,9951	379,8	0,9645	0,9955
404,3	1,0000	1,0000	397,5	1,0000	1,0000	389,5	1,0000	1,0000	379,0	1,0000	1,0000

Tabla 18: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante Wilson Para graficar

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁	T (K)	X ₁	Y ₁
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,0	0,0321	0,0079	446,1	0,0076	0,0324	437,8	0,0054	0,0346	426,9	0,0066	0,0334
452,2	0,0640	0,0160	445,3	0,0153	0,0647	437,0	0,0111	0,0689	426,2	0,0135	0,0665
451,5	0,0956	0,0244	444,6	0,0234	0,0966	436,1	0,0170	0,1030	425,5	0,0206	0,0994
450,7	0,1270	0,0330	443,8	0,0317	0,1283	435,2	0,0233	0,1367	424,7	0,0279	0,1321
449,9	0,1580	0,0420	443,0	0,0403	0,1597	434,3	0,0298	0,1702	423,9	0,0356	0,1644
449,1	0,1888	0,0512	442,2	0,0492	0,1908	433,4	0,0367	0,2033	423,1	0,0435	0,1965
448,2	0,2192	0,0608	441,4	0,0584	0,2216	432,5	0,0439	0,2361	422,3	0,0518	0,2282
447,4	0,2494	0,0706	440,6	0,0680	0,2520	431,5	0,0515	0,2685	421,5	0,0604	0,2596
446,6	0,2792	0,0808	439,7	0,0779	0,2821	430,5	0,0595	0,3005	420,6	0,0693	0,2907
445,7	0,3086	0,0914	438,8	0,0881	0,3119	429,5	0,0679	0,3320	419,8	0,0787	0,3213
444,8	0,3376	0,1024	437,9	0,0988	0,3412	428,5	0,0769	0,3631	418,9	0,0884	0,3516
443,9	0,3662	0,1138	437,0	0,1098	0,3702	427,5	0,0863	0,3937	418,0	0,0985	0,3814
443,0	0,3945	0,1255	436,1	0,1213	0,3986	426,4	0,0963	0,4237	417,1	0,1091	0,4109
442,0	0,4222	0,1378	435,2	0,1332	0,4268	425,3	0,1068	0,4532	416,1	0,1202	0,4398
441,1	0,4495	0,1504	434,2	0,1457	0,4543	424,2	0,1180	0,4820	415,2	0,1318	0,4682
440,1	0,4763	0,1636	433,3	0,1585	0,4814	423,1	0,1298	0,5102	414,2	0,1439	0,4960
439,2	0,5027	0,1773	432,3	0,1720	0,5080	422,0	0,1424	0,5376	413,2	0,1567	0,5233
438,2	0,5285	0,1915	431,3	0,1859	0,5340	420,8	0,1557	0,5643	412,2	0,1699	0,5500
437,1	0,5537	0,2063	430,3	0,2005	0,5595	419,7	0,1698	0,5902	411,2	0,1839	0,5760
436,1	0,5784	0,2216	429,2	0,2156	0,5844	418,5	0,1848	0,6152	410,1	0,1985	0,6014
435,1	0,6025	0,2375	428,2	0,2314	0,6086	417,3	0,2006	0,6393	409,1	0,2138	0,6261
434,0	0,6259	0,2541	427,1	0,2478	0,6322	416,2	0,2174	0,6626	408,0	0,2299	0,6500
433,0	0,6487	0,2713	426,0	0,2649	0,6551	415,0	0,2351	0,6848	406,9	0,2467	0,6733
431,9	0,6708	0,2892	424,9	0,2826	0,6773	413,8	0,2538	0,7062	405,8	0,2643	0,6956
430,8	0,6923	0,3077	423,8	0,3011	0,6989	412,6	0,2735	0,7265	404,7	0,2828	0,7172
429,7	0,7130	0,3269	422,7	0,3203	0,7196	411,4	0,2942	0,7459	403,5	0,3021	0,7379
428,6	0,7330	0,3470	421,6	0,3404	0,7396	410,3	0,3159	0,7642	402,4	0,3222	0,7578
427,4	0,7523	0,3677	420,5	0,3612	0,7589	409,1	0,3385	0,7815	401,2	0,3433	0,7768
426,3	0,7709	0,3892	419,3	0,3828	0,7773	408,0	0,3621	0,7979	400,1	0,3652	0,7948
425,2	0,7887	0,4114	418,2	0,4051	0,7949	406,9	0,3866	0,8134	399,0	0,3880	0,8120
424,0	0,8057	0,4344	417,0	0,4283	0,8117	405,8	0,4120	0,8280	397,8	0,4118	0,8283
422,9	0,8219	0,4581	415,9	0,4523	0,8278	404,8	0,4383	0,8417	396,7	0,4363	0,8437
421,8	0,8374	0,4826	414,8	0,4770	0,8430	403,7	0,4654	0,8546	395,5	0,4618	0,8582
420,6	0,8521	0,5079	413,6	0,5025	0,8575	402,7	0,4932	0,8668	394,4	0,4881	0,8719
419,5	0,8661	0,5339	412,5	0,5289	0,8711	401,7	0,5217	0,8783	393,3	0,5153	0,8847
418,4	0,8793	0,5607	411,4	0,5560	0,8841	400,8	0,5509	0,8891	392,2	0,5433	0,8968
417,3	0,8918	0,5882	410,3	0,5838	0,8963	399,9	0,5806	0,8994	391,1	0,5720	0,9080
416,2	0,9036	0,6164	409,2	0,6123	0,9077	399,0	0,6110	0,9091	390,1	0,6015	0,9185
415,1	0,9148	0,6453	408,1	0,6416	0,9185	398,1	0,6417	0,9183	389,0	0,6317	0,9283
414,0	0,9252	0,6748	407,1	0,6714	0,9286	397,2	0,6730	0,9271	388,0	0,6626	0,9374
413,0	0,9351	0,7050	406,0	0,7019	0,9381	396,4	0,7046	0,9355	387,0	0,6941	0,9459
411,9	0,9443	0,7357	405,0	0,7330	0,9470	395,6	0,7365	0,9435	386,0	0,7262	0,9538
410,9	0,9530	0,7670	404,0	0,7648	0,9553	394,8	0,7688	0,9512	385,1	0,7588	0,9612
409,9	0,9611	0,7989	403,0	0,7970	0,9630	394,0	0,8013	0,9587	384,1	0,7920	0,9680
408,9	0,9687	0,8313	402,0	0,8297	0,9703	393,2	0,8340	0,9660	383,2	0,8256	0,9744
408,0	0,9758	0,8642	401,1	0,8629	0,9771	392,5	0,8670	0,9730	382,3	0,8597	0,9803
407,0	0,9825	0,8975	400,2	0,8966	0,9834	391,7	0,9001	0,9799	381,5	0,8942	0,9858
406,1	0,9887	0,9313	399,2	0,9307	0,9893	391,0	0,9333	0,9867	380,6	0,9292	0,9908
405,2	0,9946	0,9654	398,4	0,9652	0,9948	390,3	0,9666	0,9934	379,8	0,9644	0,9956
404,3	1,0000	1,0000	397,5	1,0000	1,0000	389,5	1,0000	1,0000	379,0	1,0000	1,0000

Tabla 19: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante UNIQUAC Para graficar

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
	T (K)	X ₁		Y ₁	T (K)		X ₁	Y ₁		T (K)	X ₁
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
452,9	0,0063	0,0337	446,1	0,0076	0,0324	437,9	0,0072	0,0328	426,9	0,0067	0,0333
452,0	0,0128	0,0672	445,4	0,0154	0,0646	437,2	0,0146	0,0654	426,2	0,0135	0,0665
451,1	0,0196	0,1004	444,6	0,0235	0,0965	436,4	0,0223	0,0977	425,5	0,0207	0,0993
450,3	0,0266	0,1333	443,8	0,0319	0,1281	435,7	0,0303	0,1297	424,7	0,0281	0,1319
449,3	0,0340	0,1660	443,0	0,0405	0,1595	434,9	0,0385	0,1615	423,9	0,0358	0,1642
448,4	0,0418	0,1982	442,2	0,0494	0,1905	434,1	0,0470	0,1930	423,1	0,0437	0,1963
447,5	0,0499	0,2301	441,4	0,0587	0,2213	433,3	0,0559	0,2241	422,3	0,0520	0,2280
446,5	0,0583	0,2616	440,6	0,0683	0,2517	432,4	0,0651	0,2549	421,5	0,0606	0,2593
445,5	0,0672	0,2928	439,7	0,0782	0,2818	431,6	0,0746	0,2854	420,7	0,0696	0,2904
444,5	0,0765	0,3235	438,9	0,0885	0,3115	430,7	0,0845	0,3155	419,8	0,0790	0,3210
443,5	0,0863	0,3537	438,0	0,0992	0,3408	429,8	0,0948	0,3452	418,9	0,0887	0,3513
442,5	0,0966	0,3834	437,1	0,1103	0,3697	428,9	0,1055	0,3745	418,0	0,0989	0,3810
441,4	0,1074	0,4126	436,2	0,1218	0,3982	428,0	0,1166	0,4034	417,1	0,1096	0,4104
440,4	0,1187	0,4412	435,2	0,1337	0,4263	427,1	0,1282	0,4318	416,2	0,1207	0,4393
439,3	0,1307	0,4693	434,3	0,1461	0,4539	426,1	0,1402	0,4597	415,2	0,1323	0,4677
438,2	0,1432	0,4968	433,3	0,1590	0,4809	425,2	0,1528	0,4871	414,2	0,1444	0,4955
437,1	0,1565	0,5235	432,3	0,1725	0,5075	424,2	0,1659	0,5140	413,3	0,1572	0,5228
436,0	0,1704	0,5496	431,3	0,1865	0,5335	423,2	0,1796	0,5404	412,2	0,1705	0,5495
434,8	0,1850	0,5750	430,3	0,2010	0,5590	422,1	0,1939	0,5661	411,2	0,1844	0,5755
433,7	0,2004	0,5996	429,3	0,2162	0,5838	421,1	0,2088	0,5912	410,2	0,1991	0,6009
432,5	0,2166	0,6234	428,2	0,2319	0,6081	420,0	0,2244	0,6156	409,1	0,2144	0,6256
431,4	0,2336	0,6464	427,2	0,2483	0,6317	419,0	0,2406	0,6393	408,0	0,2304	0,6495
430,2	0,2515	0,6685	426,1	0,2654	0,6546	417,9	0,2576	0,6624	406,9	0,2473	0,6727
429,0	0,2702	0,6898	425,0	0,2831	0,6768	416,8	0,2753	0,6847	405,8	0,2648	0,6951
427,9	0,2898	0,7103	423,9	0,3016	0,6984	415,7	0,2937	0,7062	404,7	0,2833	0,7167
426,7	0,3102	0,7298	422,8	0,3208	0,7191	414,6	0,3130	0,7270	403,6	0,3026	0,7374
425,6	0,3316	0,7485	421,7	0,3408	0,7392	413,4	0,3330	0,7469	402,5	0,3227	0,7573
424,4	0,3538	0,7662	420,5	0,3616	0,7584	412,3	0,3539	0,7661	401,3	0,3437	0,7764
423,3	0,3769	0,7831	419,4	0,3832	0,7769	411,1	0,3756	0,7845	400,2	0,3656	0,7945
422,2	0,4009	0,7991	418,3	0,4055	0,7946	410,0	0,3981	0,8019	399,0	0,3884	0,8117
421,1	0,4257	0,8143	417,1	0,4286	0,8114	408,9	0,4214	0,8186	397,9	0,4121	0,8280
420,0	0,4513	0,8287	416,0	0,4525	0,8275	407,7	0,4456	0,8344	396,7	0,4366	0,8435
419,0	0,4777	0,8423	414,8	0,4772	0,8428	406,6	0,4706	0,8494	395,6	0,4620	0,8580
418,0	0,5048	0,8552	413,7	0,5027	0,8573	405,5	0,4965	0,8636	394,5	0,4883	0,8717
417,0	0,5326	0,8675	412,6	0,5290	0,8710	404,3	0,5231	0,8769	393,4	0,5154	0,8846
416,0	0,5609	0,8791	411,5	0,5560	0,8840	403,2	0,5505	0,8895	392,3	0,5434	0,8967
415,0	0,5899	0,8901	410,4	0,5838	0,8962	402,1	0,5787	0,9013	391,2	0,5721	0,9080
414,1	0,6195	0,9005	409,3	0,6123	0,9077	401,0	0,6076	0,9124	390,1	0,6015	0,9185
413,2	0,6495	0,9105	408,2	0,6415	0,9185	400,0	0,6372	0,9228	389,1	0,6317	0,9283
412,3	0,6800	0,9200	407,1	0,6713	0,9287	398,9	0,6675	0,9326	388,1	0,6625	0,9375
411,4	0,7109	0,9291	406,1	0,7018	0,9382	397,9	0,6984	0,9416	387,1	0,6940	0,9460
410,6	0,7421	0,9379	405,0	0,7329	0,9471	396,9	0,7299	0,9501	386,1	0,7261	0,9540
409,8	0,7737	0,9463	404,0	0,7646	0,9554	395,9	0,7620	0,9580	385,1	0,7587	0,9613
408,9	0,8055	0,9545	403,0	0,7968	0,9632	394,9	0,7947	0,9654	384,2	0,7919	0,9682
408,1	0,8375	0,9625	402,1	0,8296	0,9704	394,0	0,8278	0,9722	383,3	0,8255	0,9745
407,3	0,8698	0,9702	401,1	0,8628	0,9772	393,0	0,8614	0,9786	382,4	0,8596	0,9804
406,6	0,9022	0,9778	400,2	0,8965	0,9835	392,1	0,8954	0,9846	381,5	0,8942	0,9858
405,8	0,9347	0,9853	399,3	0,9306	0,9894	391,2	0,9299	0,9901	380,6	0,9291	0,9909
405,0	0,9673	0,9927	398,4	0,9651	0,9949	390,4	0,9648	0,9952	379,8	0,9644	0,9956
404,3	1,0000	1,0000	397,5	1,0000	1,0000	389,5	1,0000	1,0000	379,0	1,0000	1,0000

Tabla 20: Estudio analítico. Mezcla 1 a 101 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	101											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	y1*	Y1	y1*	y1	y2
453,7	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
453,0	0,0161	0,0534	1,2317	1,0738	0,0413	0,9935	0,3774	0,0616	-22,7	15,4	-19,3	-64,9
451,0	0,0577	0,1615	1,1316	1,0934	0,1408	0,9980	0,3729	0,1855	-12,8	14,9	-11,8	-65,9
447,6	0,1344	0,3092	1,0478	1,1222	0,2981	0,9965	0,3643	0,3395	-3,6	9,8	-4,9	-67,5
444,5	0,2081	0,4220	1,0174	1,1453	0,4231	0,9967	0,3571	0,4442	0,3	5,3	-2,0	-68,8
438,4	0,3697	0,5995	0,9551	1,1959	0,6301	0,9964	0,3431	0,6132	5,1	2,3	4,3	-71,3
434,0	0,5024	0,7204	0,9702	1,2380	0,7511	0,9960	0,3332	0,7226	4,3	0,3	2,7	-73,1
430,1	0,6312	0,8105	0,9534	1,2583	0,8400	0,9981	0,3254	0,8110	3,6	0,1	4,7	-74,1
427,1	0,7434	0,8730	0,9549	1,3442	0,9007	0,9973	0,3185	0,8776	3,2	0,5	4,4	-76,3
424,5	0,8475	0,9305	0,9597	1,3440	0,9465	0,9976	0,3134	0,9318	1,7	0,1	4,0	-76,7
422,3	0,9443	0,9768	0,9726	1,3350	0,9821	0,9966	0,3079	0,9765	0,5	0,0	2,5	-76,9
421,5	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

NRTL* se refiere a la simulación hecha por Yim et al (2021) y reportada en la tabla 10.

Tabla 21: Estudio analítico. Mezcla 1 a 101 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	101									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2
453,7	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
452,3	0,0161	0,0534	1,2317	1,0738	0,0777	1,9051	0,3700	45,5	54,7	-65,5
449,4	0,0577	0,1615	1,1316	1,0934	0,2213	1,6389	0,3532	37,0	44,8	-67,7
445,4	0,1344	0,3092	1,0478	1,1222	0,3949	1,4041	0,3341	27,7	34,0	-70,2
442,2	0,2081	0,4220	1,0174	1,1453	0,5139	1,2929	0,3213	21,8	27,1	-71,9
437,0	0,3697	0,5995	0,9551	1,1959	0,6791	1,1191	0,3101	13,3	17,2	-74,1
432,6	0,5024	0,7204	0,9702	1,2380	0,7928	1,0967	0,2894	10,0	13,0	-76,6
429,7	0,6312	0,8105	0,9534	1,2583	0,8555	1,0292	0,2974	5,6	8,0	-76,4
426,9	0,7434	0,8730	0,9549	1,3442	0,7562	0,8425	0,7870	-13,4	-11,8	-41,5
424,7	0,8475	0,9305	0,9597	1,3440	0,9465	0,9914	0,3112	1,7	3,3	-76,8
422,5	0,9443	0,9768	0,9726	1,3350	0,9352	0,9430	1,1075	-4,3	-3,0	-17,0
421,5	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 22: Estudio analítico. Mezcla 1 a 101 kPa, mediante UNIQUAC

P (kPa)	101											
	Real				Simulación UNIQUAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
453,7	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
453,0	0,0161	0,0534	1,2317	1,0738	0,0411	0,9887	0,3775	0,0618	-23,0	15,7	-19,7	-64,8
451,0	0,0577	0,1615	1,1316	1,0934	0,1357	0,9619	0,3751	0,1854	-16,0	14,8	-15,0	-65,7
447,7	0,1344	0,3092	1,0478	1,1222	0,2972	0,9908	0,3638	0,3384	-3,9	9,4	-5,4	-67,6
444,5	0,2081	0,4220	1,0174	1,1453	0,4222	0,9946	0,3577	0,4432	0,0	5,0	-2,2	-68,8
438,4	0,3697	0,5995	0,9551	1,1959	0,6297	0,9957	0,3434	0,6139	5,0	2,4	4,3	-71,3
434,0	0,5024	0,7204	0,9702	1,2380	0,7510	0,9959	0,3334	0,7238	4,2	0,5	2,6	-73,1
430,2	0,6312	0,8105	0,9534	1,2583	0,8402	0,9953	0,3241	0,8120	3,7	0,2	4,4	-74,2
427,1	0,7434	0,8730	0,9549	1,3442	0,9009	0,9975	0,3179	0,8781	3,2	0,6	4,5	-76,4
424,5	0,8475	0,9305	0,9597	1,3440	0,9467	0,9979	0,3122	0,9319	1,7	0,2	4,0	-76,8
422,3	0,9443	0,9768	0,9726	1,3350	0,9819	0,9964	0,3114	0,9765	0,5	0,0	2,4	-76,7
421,5	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

NRTL* se refiere a la simulación hecha por Yim et al (2021) y reportada en la tabla 10.

Tabla 23: Estudio analítico. Mezcla 1 a 80 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	80											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
446,8	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
446,1	0,0164	0,0545	1,1988	1,0706	0,0440	0,9958	0,3607	0,0566	-19,3	3,9	-16,9	-66,3
444,2	0,0547	0,1723	1,2367	1,0733	0,1393	0,9973	0,3566	0,1713	-19,2	-0,6	-19,4	-66,8
440,6	0,1325	0,347	1,1843	1,0832	0,3041	0,9967	0,3484	0,3472	-12,4	0,1	-15,8	-67,8
437,0	0,2156	0,4787	1,1274	1,0909	0,4460	0,9982	0,3408	0,4803	-6,8	0,3	-11,5	-68,8
432,7	0,3263	0,6074	1,0772	1,1099	0,5935	0,9982	0,3311	0,6077	-2,3	0,0	-7,3	-70,2
426,9	0,4994	0,7533	1,0272	1,1297	0,7578	0,9955	0,3174	0,7465	0,6	-0,9	-3,1	-71,9
424,1	0,5896	0,8129	1,0099	1,1356	0,8211	0,9980	0,3124	0,8030	1,0	-1,2	-1,2	-72,5
419,5	0,7609	0,9024	0,9936	1,1853	0,9131	0,9972	0,3020	0,8932	1,2	-1,0	0,4	-74,5
417,5	0,8456	0,9434	0,9904	1,1372	0,9483	0,9951	0,2971	0,9327	0,5	-1,1	0,5	-73,9
415,1	0,9499	0,9858	0,9936	0,9587	0,9847	0,9962	0,2935	0,9786	-0,1	-0,7	0,3	-69,4
413,9	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 24: Estudio analítico. Mezcla 1 a 80 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	80									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X ₁	Y ₁	γ ₁	γ ₂	Y ₁	γ ₁	γ ₂	Y ₁	γ ₁	γ ₂
446,8	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
445,4	0,0164	0,0545	1,1988	1,0706	0,0313	0,7236	0,3728	-42,5	-39,6	-65,2
442,6	0,0547	0,1723	1,2367	1,0733	0,0929	0,6963	0,3934	-46,1	-43,7	-63,3
438,0	0,1325	0,347	1,1843	1,0832	0,2023	0,7155	0,4308	-41,7	-39,6	-60,2
434,3	0,2156	0,4787	1,1274	1,0909	0,2948	0,7150	0,4702	-38,4	-36,6	-56,9
430,2	0,3263	0,6074	1,0772	1,1099	0,4079	0,7403	0,5206	-32,8	-31,3	-53,1
425,2	0,4994	0,7533	1,0272	1,1297	0,5614	0,7780	0,6063	-25,5	-24,3	-46,3
423,0	0,5896	0,8129	1,0099	1,1356	0,6379	0,8030	0,6548	-21,5	-20,5	-42,3
419,0	0,7609	0,9024	0,9936	1,1853	0,7847	0,8711	0,7607	-13,0	-12,3	-35,8
417,3	0,8456	0,9434	0,9904	1,1372	0,8526	0,9006	0,8528	-9,6	-9,1	-25,0
415,1	0,9499	0,9858	0,9936	0,9587	0,9459	0,9570	1,0377	-4,0	-3,7	8,2
413,9	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 25: Estudio analítico. Mezcla 1 a 80 kPa, mediante UNIQUAC

P (kPa)	80											
	Real				Simulación UNIQUAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X ₁	Y ₁	γ ₁	γ ₂	Y ₁	γ ₁	γ ₂	Y ₁ *	Y ₁	Y ₁ *	γ ₁	γ ₂
446,8	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0		0,0
446,1	0,0164	0,0545	1,1988	1,0706	0,0438	0,9912	0,3608	0,0564	-19,6	3,5	-17,3	-66,3
444,2	0,0547	0,1723	1,2367	1,0733	0,1385	0,9916	0,3569	0,1713	-19,6	-0,6	-19,8	-66,7
440,6	0,1325	0,347	1,1843	1,0832	0,3033	0,9941	0,3488	0,3478	-12,6	0,2	-16,1	-67,8
437,1	0,2156	0,4787	1,1274	1,0909	0,4452	0,9935	0,3403	0,4808	-7,0	0,4	-11,9	-68,8
432,8	0,3263	0,6074	1,0772	1,1099	0,5929	0,9942	0,3306	0,6074	-2,4	0,0	-7,7	-70,2
426,9	0,4994	0,7533	1,0272	1,1297	0,7578	0,9954	0,3175	0,7455	0,6	-1,0	-3,1	-71,9
424,2	0,5896	0,8129	1,0099	1,1356	0,8212	0,9949	0,3112	0,8020	1,0	-1,3	-1,5	-72,6
419,5	0,7609	0,9024	0,9936	1,1853	0,9133	0,9974	0,3013	0,8928	1,2	-1,1	0,4	-74,6
417,5	0,8456	0,9434	0,9904	1,1372	0,9484	0,9952	0,2966	0,9327	0,5	-1,1	0,5	-73,9
415,1	0,9499	0,9858	0,9936	0,9587	0,9848	0,9963	0,2916	0,9787	-0,1	-0,7	0,3	-69,6
413,9	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 26: Estudio analítico. Mezcla 1 a 60 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	60											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
438,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
436,1	0,0510	0,1771	1,3267	1,0714	0,1367	0,9963	0,3381	0,1805	-22,8	1,9	-24,9	-68,4
434,3	0,0864	0,2714	1,2952	1,0746	0,2200	0,9987	0,3349	0,2731	-18,9	0,6	-22,9	-68,8
432,1	0,1345	0,3776	1,2584	1,0656	0,3199	0,9969	0,3294	0,3727	-15,3	-1,3	-20,8	-69,1
428,7	0,2133	0,4846	1,1414	1,1055	0,4565	0,9957	0,3214	0,4954	-5,8	2,2	-12,8	-70,9
424,9	0,3074	0,5997	1,1007	1,1131	0,5852	0,9975	0,3138	0,6037	-2,4	0,7	-9,4	-71,8
419,0	0,4774	0,7552	1,0641	1,1027	0,7515	0,9973	0,3012	0,7438	-0,5	-1,5	-6,3	-72,7
415,6	0,5916	0,8233	1,0345	1,1419	0,8309	0,9955	0,2935	0,8151	0,9	-1,0	-3,8	-74,3
411,8	0,7312	0,8883	1,0101	1,2466	0,9046	0,9968	0,2860	0,8873	1,8	-0,1	-1,3	-77,1
409,5	0,8243	0,928	1,0084	1,3387	0,9433	0,9978	0,2814	0,9294	1,6	0,2	-1,0	-79,0
406,3	0,9461	0,9783	1,0130	1,4575	0,9845	1,0145	0,2804	0,9793	0,6	0,1	0,1	-80,8
405,2	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 27: Estudio analítico. Mezcla 1 a 60 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	60									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1	Y1	Y2
438,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
434,2	0,0510	0,1771	1,3267	1,0714	0,0947	0,7303	0,3753	-46,5	-45,0	-65,0
431,8	0,0864	0,2714	1,2952	1,0746	0,1497	0,7331	0,3937	-44,8	-43,4	-63,4
429,2	0,1345	0,3776	1,2584	1,0656	0,2086	0,7103	0,4189	-44,8	-43,6	-60,7
425,7	0,2133	0,4846	1,1414	1,1055	0,2973	0,7122	0,4564	-38,6	-37,6	-58,7
422,2	0,3074	0,5997	1,1007	1,1131	0,3914	0,7271	0,5019	-34,7	-33,9	-54,9
417,0	0,4774	0,7552	1,0641	1,1027	0,5500	0,7795	0,5827	-27,2	-26,7	-47,2
414,1	0,5916	0,8233	1,0345	1,1419	0,6493	0,8181	0,6400	-21,1	-20,9	-44,0
410,9	0,7312	0,8883	1,0101	1,2466	0,7712	0,8763	0,7074	-13,2	-13,2	-43,3
408,8	0,8243	0,928	1,0084	1,3387	0,8543	0,9259	0,7406	-7,9	-8,2	-44,7
406,3	0,9461	0,9783	1,0130	1,4575	0,9685	0,9980	0,5693	-1,0	-1,5	-60,9
405,2	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 28: Estudio analítico. Mezcla 1 a 60 kPa, mediante UNIQAC

P (kPa)	60											
	Real				Simulación UNIQAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
438,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0	0,0	0,0		0,0
436,1	0,0510	0,1771	1,3267	1,0714	0,1364	0,9941	0,3382	0,1799	-23,0	1,6	-25,1	-68,4
434,4	0,0864	0,2714	1,2952	1,0746	0,2192	0,9921	0,3342	0,273	-19,2	0,6	-23,4	-68,9
432,1	0,1345	0,3776	1,2584	1,0656	0,3191	0,9944	0,3298	0,3731	-15,5	-1,2	-21,0	-69,1
428,7	0,2133	0,4846	1,1414	1,1055	0,4557	0,9939	0,3219	0,496	-6,0	2,4	-12,9	-70,9
425,0	0,3074	0,5997	1,1007	1,1131	0,5846	0,9934	0,3133	0,6038	-2,5	0,7	-9,8	-71,9
419,1	0,4774	0,7552	1,0641	1,1027	0,7514	0,9939	0,3004	0,7433	-0,5	-1,6	-6,6	-72,8
415,6	0,5916	0,8233	1,0345	1,1419	0,8310	0,9957	0,2933	0,8145	0,9	-1,1	-3,8	-74,3
411,8	0,7312	0,8883	1,0101	1,2466	0,9048	0,9971	0,2854	0,8871	1,9	-0,1	-1,3	-77,1
409,5	0,8243	0,928	1,0084	1,3387	0,9434	0,9979	0,2809	0,9294	1,7	0,2	-1,0	-79,0
406,8	0,9461	0,9783	1,0130	1,4575	0,9845	0,9968	0,2755	0,9794	0,6	0,1	-1,6	-81,1
405,2	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1	0,0	0,0	0,0	

Tabla 29: Estudio analítico. Mezcla 1 a 40 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	40											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
427,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
426,8	0,0174	0,0702	1,3425	1,0565	0,0526	0,9947	0,3173	0,0716	-25,1	2,0	-25,9	-70,0
424,8	0,0540	0,2064	1,4045	1,0488	0,1537	0,9971	0,3135	0,2023	-25,6	-2,0	-29,0	-70,1
420,7	0,1375	0,4106	1,3030	1,0395	0,3429	0,9965	0,3044	0,4080	-16,5	-0,6	-23,5	-70,7
417,3	0,2135	0,5266	1,2139	1,0507	0,4763	0,9964	0,2974	0,5231	-9,6	-0,7	-17,9	-71,7
411,9	0,3509	0,6615	1,1019	1,1083	0,6531	0,9964	0,2861	0,6584	-1,3	-0,5	-9,6	-74,2
407,5	0,4812	0,7547	1,0505	1,1747	0,7692	0,9961	0,2772	0,7550	1,9	0,0	-5,2	-76,4
403,2	0,6279	0,8477	1,0237	1,1725	0,8623	0,9965	0,2685	0,8472	1,7	-0,1	-2,7	-77,1
400,4	0,7360	0,9010	1,0144	1,1897	0,9135	0,9966	0,2631	0,9050	1,4	0,4	-1,8	-77,9
398,3	0,8240	0,9387	1,0289	1,2200	0,9474	0,9971	0,2592	0,9444	0,9	0,6	-3,1	-78,8
395,1	0,9365	0,9852	1,0405	0,9064	0,9830	1,0256	0,2616	0,9835	-0,2	-0,2	-1,4	-71,1
393,8	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 30: Estudio analítico. Mezcla 1 a 40 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	40									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X ₁	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁	y ₁	y ₂
427,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
425,9	0,0174	0,0702	1,3425	1,0565	0,0341	0,6637	0,3327	-51,4	-50,6	-68,5
422,9	0,054	0,2064	1,4045	1,0488	0,0966	0,6660	0,3555	-53,2	-52,6	-66,1
417,8	0,1375	0,4106	1,3030	1,0395	0,2107	0,6732	0,4020	-48,7	-48,3	-61,3
414,3	0,2135	0,5266	1,2139	1,0507	0,2954	0,6828	0,4422	-43,9	-43,8	-57,9
409,4	0,3509	0,6615	1,1019	1,1083	0,4317	0,7177	0,5107	-34,7	-34,9	-53,9
405,6	0,4812	0,7547	1,0505	1,1747	0,5514	0,7634	0,5760	-26,9	-27,3	-51,0
402,2	0,6279	0,8477	1,0237	1,1725	0,8836	1,0585	0,2353	4,2	3,4	-79,9
399,8	0,736	0,9010	1,0144	1,1897	0,7635	0,8514	0,7351	-15,3	-16,1	-38,2
397,5	0,824	0,9387	1,0289	1,2200	0,8593	0,9316	0,7141	-8,5	-9,5	-41,5
395,1	0,9365	0,9852	1,0405	0,9064	0,9930	1,0361	0,1073	0,8	-0,4	-88,2
393,8	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 31: Estudio analítico. Mezcla 1 a 40 kPa, mediante UNIQUAC

P (kPa)	40											
	Real				Simulación UNIQUAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X ₁	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁ *	Y ₁	Y ₁ *	y ₁	y ₂
427,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
426,5	0,0174	0,0702	1,3425	1,0565	0,0522	0,9965	0,3204	0,0769	-25,6	9,5	-25,8	-69,7
424,8	0,0540	0,2064	1,4045	1,0488	0,1530	0,9929	0,3138	0,2049	-25,9	-0,7	-29,3	-70,1
420,7	0,1375	0,4106	1,3030	1,0395	0,3419	0,9936	0,3049	0,3991	-16,7	-2,8	-23,7	-70,7
417,3	0,2135	0,5266	1,2139	1,0507	0,4755	0,9947	0,2978	0,5168	-9,7	-1,9	-18,1	-71,7
411,9	0,3509	0,6615	1,1019	1,1083	0,6527	0,9958	0,2864	0,6660	-1,3	0,7	-9,6	-74,2
407,5	0,4812	0,7547	1,0505	1,1747	0,7692	0,9961	0,2772	0,7684	1,9	1,8	-5,2	-76,4
403,2	0,6279	0,8477	1,0237	1,1725	0,8624	0,9966	0,2683	0,8568	1,7	1,1	-2,6	-77,1
400,4	0,7360	0,9010	1,0144	1,1897	0,9137	0,9968	0,2625	0,9088	1,4	0,9	-1,7	-77,9
398,3	0,8240	0,9387	1,0289	1,2200	0,9476	0,9973	0,2582	0,9444	0,9	0,6	-3,1	-78,8
395,9	0,9365	0,9852	1,0405	0,9064	0,9831	0,9954	0,2523	0,9822	-0,2	-0,3	-4,3	-72,2
393,8	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 32: Estudio analítico. Mezcla 2 a 101 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	101											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
453,7	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0	0,0	0		0,0
451,4	0,0250	0,1264	1,3241	1,0828	0,0994	0,9986	0,2320	0,1271	-21,4	0,6	-24,6	-78,6
448,9	0,0531	0,2425	1,3071	1,0873	0,1973	0,9963	0,2273	0,2436	-18,6	0,5	-23,8	-79,1
442,7	0,1277	0,4673	1,2451	1,0416	0,4026	0,9973	0,2166	0,4649	-13,8	-0,5	-19,9	-79,2
438,3	0,1873	0,5820	1,2112	1,0470	0,5239	0,9978	0,2090	0,586	-10,0	0,7	-17,6	-80,0
431,1	0,3001	0,7211	1,1995	1,1151	0,6853	0,9969	0,1963	0,7406	-5,0	2,7	-16,9	-82,4
425,2	0,4082	0,8263	1,2014	1,0234	0,7869	0,9980	0,1864	0,8341	-4,8	0,9	-16,9	-81,8
421,6	0,4857	0,8822	1,2271	0,9403	0,8395	0,9957	0,1798	0,881	-4,8	-0,1	-18,9	-80,9
419,3	0,5367	0,8934	1,2208	1,0469	0,8675	0,9982	0,1766	0,9046	-2,9	1,3	-18,2	-83,1
410,4	0,6135	0,9209	1,2163	1,0546	0,9568	1,2730	0,0912	0,9319	3,9	1,2	4,7	-91,4
413,7	0,6828	0,9505	1,2284	0,8940	0,9276	0,9981	0,1677	0,9495	-2,4	-0,1	-18,8	-81,2
408,7	0,8388	0,9603	1,1207	1,6039	0,9701	0,9975	0,1600	0,9715	1,0	1,2	-11,0	-90,0
403,8	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1	0,0	0	0,0	

Tabla 33: Estudio analítico. Mezcla 2 a 101 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	60									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1	Y1	Y2
438,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
436,3	0,0188	0,1074	1,2694	1,0427	0,1018	1,2131	0,2170	-5,2	-4,4	-79,2
430,5	0,0715	0,3176	1,1603	1,0383	0,3233	1,1929	0,2064	1,8	2,8	-80,1
425,6	0,1252	0,4775	1,1478	1,0116	0,4740	1,1508	0,1947	-0,7	0,3	-80,7
420,4	0,1882	0,6042	1,1285	1,0060	0,6070	1,1445	0,1832	0,5	1,4	-81,8
412,5	0,3034	0,7534	1,1169	0,9958	0,7619	1,1384	0,1612	1,1	1,9	-83,8
407,3	0,3958	0,843	1,1352	0,9027	0,8385	1,1364	0,1440	-0,5	0,1	-84,0
404,5	0,4434	0,8682	1,1464	0,9238	0,8738	1,1601	0,1325	0,6	1,2	-85,7
400,9	0,5199	0,9031	1,1507	0,9164	0,9134	1,1687	0,1131	1,1	1,6	-87,7
397,0	0,609	0,9333	1,1646	0,9159	0,9429	1,1797	0,0972	1,0	1,3	-89,4
394,1	0,6921	0,963	1,1739	0,7326	0,9704	1,1845	0,0660	0,8	0,9	-91,0
390,8	0,8316	0,9744	1,1164	1,0734	0,9926	1,1370	0,0268	1,9	1,8	-97,5
389,5	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 34: Estudio analítico. Mezcla 2 a 101 kPa, mediante UNIQUAC

P (kPa)	101											
	Real				Simulación UNIQUAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	γ1	γ2	Y1	γ1	γ2	Y1*	Y1	Y1*	γ1	γ2
453,7	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
450,5	0,0250	0,1264	1,3241	1,0828	0,1259	1,2948	0,2305	0,1264	-0,4	0,0	-2,2	-78,7
447,2	0,0531	0,2425	1,3071	1,0873	0,2425	1,2807	0,2243	0,2428	0,0	0,1	-2,0	-79,4
439,6	0,1277	0,4673	1,2451	1,0416	0,4625	1,2466	0,2121	0,4646	-1,0	-0,6	0,1	-79,6
434,7	0,1873	0,5820	1,2112	1,0470	0,5787	1,2182	0,2044	0,5858	-0,6	0,7	0,6	-80,5
427,3	0,3001	0,7211	1,1995	1,1151	0,7203	1,1688	0,1946	0,7397	-0,1	2,6	-2,6	-82,5
421,9	0,4082	0,8263	0,8037	1,0234	0,8263	1,1557	0,1676	0,8321	0,0	0,7	43,8	-83,6
418,7	0,4857	0,8822	1,2271	0,9403	0,8463	1,0960	0,1880	0,8786	-4,1	-0,4	10,7	-80,0
416,9	0,5367	0,8934	1,2208	1,0469	0,8693	1,0767	0,1876	0,9022	-2,7	1,0	11,8	-82,1
414,3	0,6135	0,9209	1,2163	1,0546	0,8985	1,0558	0,1893	0,9298	-2,4	1,0	13,2	-82,0
414,3	0,6828	0,9505	1,2284	0,8940	0,9505	1,0036	0,1125	0,9482	0,0	-0,2	18,3	-87,4
408,2	0,8388	0,9603	1,1207	1,6039	0,9628	1,0063	0,2023	0,9722	0,3	1,2	10,2	-87,4
403,8	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 35: Estudio analítico. Mezcla 2 a 80 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	80											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	γ1	γ2	Y1	γ1	γ2	Y1*	Y1	Y1*	γ1	γ2
446,8	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
445,2	0,0175	0,0990	1,3610	1,0677	0,0743	0,9946	0,2207	0,0984	-24,9	-0,6	-26,9	-79,3
441,2	0,0569	0,2729	1,2995	1,0489	0,2192	1,0053	0,2161	0,2719	-19,7	-0,4	-22,6	-79,4
437,5	0,1029	0,4195	1,2622	1,0471	0,3554	0,9976	0,2076	0,4190	-15,3	-0,1	-21,0	-80,2
432,7	0,1644	0,5555	1,2144	1,0433	0,4963	0,9973	0,1992	0,5595	-10,7	0,7	-17,9	-80,9
424,3	0,2749	0,7174	1,1938	1,0398	0,6698	1,0260	0,1918	0,7232	-6,6	0,8	-14,1	-81,6
419,3	0,3819	0,8152	1,1861	1,0193	0,7774	0,9958	0,1762	0,8221	-4,6	0,8	-16,0	-82,7
416,0	0,4482	0,8706	1,1992	0,9119	0,8255	0,9973	0,1712	0,8654	-5,2	-0,6	-16,8	-81,2
412,2	0,5344	0,9028	1,1966	0,9630	0,8738	0,9979	0,1654	0,9074	-3,2	0,5	-16,6	-82,8
409,7	0,5988	0,9263	1,2035	0,9516	0,9022	0,9964	0,1612	0,9304	-2,6	0,4	-17,2	-83,1
406,3	0,6939	0,9368	1,1842	1,2394	0,9353	0,9964	0,1563	0,9546	-0,2	1,9	-15,9	-87,4
402,5	0,8142	0,9605	1,1373	1,4325	0,9666	0,9969	0,1510	0,9718	0,6	1,2	-12,3	-89,5
397,4	1,0000	1,0000	1,0002		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 36: Estudio analítico. Mezcla 2 a 80 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	80									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X ₁	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁	Y ₁	Y ₂	Y ₁	Y ₁	Y ₂
446,8	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
444,1	0,0175	0,099	1,3610	1,0677	0,1164	1,6052	0,2170	17,6	17,9	-79,7
439,6	0,0569	0,2729	1,2995	1,0489	0,2858	1,3695	0,2064	4,7	5,4	-80,3
434,7	0,1029	0,4195	1,2622	1,0471	0,4406	1,3372	0,1947	5,0	5,9	-81,4
429,4	0,1644	0,5555	1,2144	1,0433	0,5782	1,2768	0,1832	4,1	5,1	-82,4
421,2	0,2749	0,7174	1,1938	1,0398	0,7469	1,2549	0,1612	4,1	5,1	-84,5
414,9	0,3819	0,8152	1,1861	1,0193	0,8411	1,2342	0,1440	3,2	4,1	-85,9
411,6	0,4482	0,8706	1,1992	0,9119	0,8825	1,2249	0,1325	1,4	2,1	-85,5
407,4	0,5344	0,9028	1,1966	0,9630	0,9261	1,2354	0,1131	2,6	3,2	-88,3
404,6	0,5988	0,9263	1,2035	0,9516	0,9501	1,2413	0,0972	2,6	3,1	-89,8
401,1	0,6939	0,9368	1,1842	1,2394	0,9771	1,2403	0,0660	4,3	4,7	-94,7
398,4	0,8142	0,9605	1,1373	1,4325	0,9948	1,1817	0,0268	3,6	3,9	-98,1
397,4	1,0000	1,0000	1,0002		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 37: Estudio analítico. Mezcla 2 a 80 kPa, mediante UNIQUAC

P (kPa)	80											
	Real				Simulación UNIQUAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X ₁	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁ *	Y ₁	Y ₁ *	y ₁	y ₂
446,8	0,0000	0,0000		0,9984	0,0000		1,0000	0	0,0	0,0		0,2
444,5	0,0175	0,0990	1,3610	1,0677	0,0955	1,3026	0,2198	0,098	-3,5	-1,2	-4,3	-79,4
439,6	0,0569	0,2729	1,2995	1,0489	0,2684	1,2860	0,2115	0,271	-1,6	-0,8	-1,0	-79,8
439,6	0,1029	0,4195	1,2622	1,0471	0,4195	1,1114	0,1764	0,418	0,0	-0,3	-11,9	-83,2
429,4	0,1644	0,5555	1,2144	1,0433	0,5553	1,2262	0,1932	0,559	0,0	0,7	1,0	-81,5
429,2	0,2749	0,7174	1,1938	1,0398	0,7174	0,9528	0,1423	0,723	0,0	0,8	-20,2	-86,3
415,9	0,3819	0,8152	1,1861	1,0193	0,7978	1,1347	0,1777	0,821	-2,1	0,7	-4,3	-82,6
413,0	0,4482	0,8706	1,1992	0,9119	0,8365	1,1103	0,1763	0,864	-3,9	-0,8	-7,4	-80,7
409,8	0,5344	0,9028	1,1966	0,9630	0,8756	1,0800	0,1761	0,906	-3,0	0,3	-9,7	-81,7
407,7	0,5988	0,9263	1,2035	0,9516	0,8994	1,0602	0,1770	0,929	-2,9	0,3	-11,9	-81,4
401,1	0,6939	0,9368	1,1842	1,2394	0,9285	1,1787	0,2058	0,954	-0,9	1,8	-0,5	-83,4
404,9	0,8142	0,9605	1,1373	1,4325	0,9592	0,9124	0,1701	0,972	-0,1	1,2	-19,8	-88,1
397,4	1,0000	1,0000	1,0002		1,0000	1,0000		1	0,0	0,0	0,0	

Tabla 38: Estudio analítico. Mezcla 2 a 60 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	60											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
438,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
436,8	0,0188	0,1074	1,2694	1,0427	0,0848	0,9964	0,2060	0,1035	-21,0	-3,6	-21,5	-80,2
431,7	0,0715	0,3176	1,1603	1,0383	0,2800	0,9983	0,1977	0,3193	-11,8	0,5	-14,0	-81,0
427,1	0,1252	0,4775	1,1478	1,0116	0,4294	0,9979	0,1898	0,4711	-10,1	-1,3	-13,1	-81,2
422,3	0,1882	0,6042	1,1285	1,0060	0,5603	0,9977	0,1815	0,5996	-7,3	-0,8	-11,6	-82,0
414,3	0,3034	0,7534	1,1169	0,9958	0,7298	1,0302	0,1661	0,7554	-3,1	0,3	-7,8	-83,3
409,9	0,3958	0,843	1,1352	0,9027	0,8015	0,9979	0,1619	0,8356	-4,9	-0,9	-12,1	-82,1
407,7	0,4434	0,8682	1,1464	0,9238	0,8338	0,9955	0,1581	0,8678	-4,0	0,0	-13,2	-82,9
404,3	0,5199	0,9031	1,1507	0,9164	0,8755	0,9980	0,1537	0,9071	-3,1	0,4	-13,3	-83,2
400,6	0,6090	0,9333	1,1646	0,9159	0,9162	1,0111	0,1440	0,9400	-1,8	0,7	-13,2	-84,3
398,1	0,6921	0,963	1,1739	0,7326	0,9394	0,9949	0,1443	0,9602	-2,5	-0,3	-15,2	-80,3
393,9	0,8316	0,9744	1,1164	1,0734	0,9726	0,9952	0,1384	0,9787	-0,2	0,4	-10,9	-87,1
389,5	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 39: Estudio analítico. Mezcla 2 a 60 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	60									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1	Y1	Y2
438,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
436,3	0,0188	0,1074	1,2694	1,0427	0,1018	1,2131	0,2170	-5,2	-4,4	-79,2
430,5	0,0715	0,3176	1,1603	1,0383	0,3233	1,1929	0,2064	1,8	2,8	-80,1
425,6	0,1252	0,4775	1,1478	1,0116	0,4740	1,1508	0,1947	-0,7	0,3	-80,7
420,4	0,1882	0,6042	1,1285	1,0060	0,6070	1,1445	0,1832	0,5	1,4	-81,8
412,5	0,3034	0,7534	1,1169	0,9958	0,7619	1,1384	0,1612	1,1	1,9	-83,8
407,3	0,3958	0,843	1,1352	0,9027	0,8385	1,1364	0,1440	-0,5	0,1	-84,0
404,5	0,4434	0,8682	1,1464	0,9238	0,8738	1,1601	0,1325	0,6	1,2	-85,7
400,9	0,5199	0,9031	1,1507	0,9164	0,9134	1,1687	0,1131	1,1	1,6	-87,7
397,0	0,609	0,9333	1,1646	0,9159	0,9429	1,1797	0,0972	1,0	1,3	-89,4
394,1	0,6921	0,963	1,1739	0,7326	0,9704	1,1845	0,0660	0,8	0,9	-91,0
390,8	0,8316	0,9744	1,1164	1,0734	0,9926	1,1370	0,0268	1,9	1,8	-97,5
389,5	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 40: Estudio analítico. Mezcla 2 a 60 kPa, mediante UNIQUAC

P (kPa)	60											
	Real				Simulación UNIQUAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
438,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
436,0	0,0188	0,1074	1,2694	1,0427	0,1090	1,3095	0,2198	0,0988	1,5	-8,0	3,2	-78,9
429,5	0,0715	0,3176	1,1603	1,0383	0,3379	1,2830	0,2115	0,3120	6,4	-1,8	10,6	-79,6
423,9	0,1252	0,4775	1,1478	1,0116	0,4935	1,2596	0,1764	0,4656	3,4	-2,5	9,7	-82,6
418,6	0,1882	0,6042	1,1285	1,0060	0,6166	1,2280	0,1932	0,5967	2,1	-1,2	8,8	-80,8
410,1	0,3034	0,7534	1,1169	0,9958	0,7695	1,2418	0,1423	0,7540	2,1	0,1	11,2	-85,7
406,7	0,3958	0,843	1,1352	0,9027	0,8191	1,1323	0,1777	0,8340	-2,8	-1,1	-0,3	-80,3
404,7	0,4434	0,8682	1,1464	0,9238	0,8449	1,1143	0,1763	0,8658	-2,7	-0,3	-2,8	-80,9
401,9	0,5199	0,9031	1,1507	0,9164	0,8785	1,0862	0,1761	0,9048	-2,7	0,2	-5,6	-80,8
397,0	0,6090	0,9333	1,1646	0,9159	0,9094	1,1376	0,1770	0,9376	-2,6	0,5	-2,3	-80,7
399,0	0,6921	0,963	1,1739	0,7326	0,9630	0,9884	0,2058	0,9582	0,0	-0,5	-15,8	-71,9
393,3	0,8316	0,9744	1,1164	1,0734	0,9657	1,0097	0,1701	0,9781	-0,9	0,4	-9,6	-84,2
389,5	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 41: Estudio analítico. Mezcla 2 a 40 kPa, mediante NRTL

P (kPa)	40											
	Real				Simulación NRTL			NRTL*	Desviación porcentual			
T (K)	X1	Y1	y1	y2	Y1	y1	y2	Y1*	Y1	Y1*	y1	y2
427,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
425,5	0,0207	0,1365	1,3828	1,0534	0,1014	0,9956	0,1865	0,1419	-25,7	4,0	-28,0	-82,3
421,3	0,0617	0,3133	1,2611	1,0834	0,2672	0,9970	0,1798	0,3286	-14,7	4,9	-20,9	-83,4
416,1	0,1190	0,4867	1,1917	1,0541	0,4405	0,9990	0,1714	0,4896	-9,5	0,6	-16,2	-83,7
411,5	0,1771	0,5991	1,1216	1,0354	0,5665	0,9981	0,1644	0,5978	-5,4	-0,2	-11,0	-84,1
404,6	0,2824	0,7433	1,0702	0,9783	0,7185	0,9951	0,1535	0,7277	-3,3	-2,1	-7,0	-84,3
400,1	0,3642	0,8197	1,0511	0,9191	0,7949	0,9949	0,1471	0,7973	-3,0	-2,7	-5,3	-84,0
395,9	0,4523	0,8856	1,0318	0,7844	0,8532	0,9962	0,1415	0,8532	-3,7	-3,7	-3,5	-82,0
392,0	0,5489	0,9262	1,0138	0,7201	0,8989	0,9952	0,1362	0,8995	-2,9	-2,9	-1,8	-81,1
389,6	0,6140	0,9508	1,0173	0,6248	0,9224	0,9973	0,1335	0,9242	-3,0	-2,8	-2,0	-78,6
387,5	0,6794	0,9594	1,0121	0,6891	0,9418	0,9954	0,1304	0,9442	-1,8	-1,6	-1,6	-81,1
383,1	0,8268	0,9728	1,0040	1,0525	0,9743	1,0013	0,1261	0,9767	0,2	0,4	-0,3	-88,0
379,1	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 42: Estudio analítico. Mezcla 2 a 40 kPa, mediante Wilson

P (kPa)	40									
	Real				Simulación Wilson			Desviación porcentual		
T (K)	X ₁	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁	Y ₁	Y ₂	Y ₁	Y ₁	Y ₂
427,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0		0,0
424,1	0,0207	0,1365	1,3828	1,0534	0,1563	1,5996	0,1825	14,5	15,7	-82,7
418,5	0,0617	0,3133	1,2611	1,0834	0,3666	1,4892	0,1692	17,0	18,1	-84,4
413,4	0,119	0,4867	1,1917	1,0541	0,5166	1,2751	0,1612	6,1	7,0	-84,7
409,4	0,1771	0,5991	1,1216	1,0354	0,6185	1,1660	0,1548	3,2	4,0	-85,0
403,3	0,2824	0,7433	1,0702	0,9783	0,7404	1,0715	0,1478	-0,4	0,1	-84,9
399,3	0,3642	0,8197	1,0511	0,9191	0,8078	1,0395	0,1417	-1,4	-1,1	-84,6
395,9	0,4523	0,8856	1,0318	0,7844	0,8547	0,9979	0,1401	-3,5	-3,3	-82,1
392,3	0,5489	0,9262	1,0138	0,7201	0,8959	0,9811	0,1387	-3,3	-3,2	-80,7
389,9	0,614	0,9508	1,0173	0,6248	0,9203	0,9840	0,1356	-3,2	-3,3	-78,3
387,6	0,6794	0,9594	1,0121	0,6891	0,9405	0,9903	0,1328	-2,0	-2,2	-80,7
383,1	0,8268	0,9728	1,0040	1,0525	0,9753	1,0023	0,1213	0,3	-0,2	-88,5
379,1	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		0,0	0,0	

Tabla 43: Estudio analítico. Mezcla 2 a 40 kPa, mediante UNIQUAC

P (kPa)	40											
	Real				Simulación UNIQUAC			UNI*	Desviación porcentual			
T (K)	X ₁	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁	y ₁	y ₂	Y ₁ *	Y ₁	Y ₁ *	y ₁	y ₂
427,5	0,0000	0,0000		1,0000	0,0000		1,0000	0,0000	0,0	0,0		0,0
424,6	0,0207	0,1365	1,3828	1,0534	0,1309	1,3197	0,1852	0,1419	-4,1	4,0	-4,6	-82,4
419,2	0,0617	0,3133	1,2611	1,0834	0,3263	1,2974	0,1761	0,3286	4,1	4,9	2,9	-83,7
412,9	0,1190	0,4867	1,1917	1,0541	0,5069	1,2712	0,1670	0,4896	4,2	0,6	6,7	-84,2
407,8	0,1771	0,5991	1,1216	1,0354	0,6255	1,2425	0,1601	0,5978	4,4	-0,2	10,8	-84,5
400,8	0,2824	0,7433	1,0702	0,9783	0,7552	1,1900	0,1518	0,7277	1,6	-2,1	11,2	-84,5
396,7	0,3642	0,8197	1,0511	0,9191	0,8165	1,1508	0,1482	0,7973	-0,4	-2,7	9,5	-83,9
393,0	0,4523	0,8856	1,0318	0,7844	0,8626	1,1176	0,1470	0,8532	-2,6	-3,7	8,3	-81,3
389,8	0,5489	0,9262	1,0138	0,7201	0,8993	1,0796	0,1471	0,8995	-2,9	-2,9	6,5	-79,6
387,9	0,6140	0,9508	1,0173	0,6248	0,9190	1,0587	0,1484	0,9242	-3,3	-2,8	4,1	-76,2
386,2	0,6794	0,9594	1,0121	0,6891	0,9359	1,0391	0,1508	0,9442	-2,4	-1,6	2,7	-78,1
382,7	0,8268	0,9728	1,0040	1,0525	0,9678	1,0103	0,1605	0,9767	-0,5	0,4	0,6	-84,8
379,1	1,0000	1,0000	1,0000		1,0000	1,0000		1,0000	0,0	0,0	0,0	

Tabla 44: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante NRTL para la gráfica modificada

Simulación NRTL											
P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
T (K)	X1	Y1	T (K)	X1	Y1	T (K)	X1	Y1	T (K)	X1	Y1
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,2	0,0111	0,0289	446,3	0,0108	0,0292	438,1	0,0104	0,0296	427,1	0,0098	0,0302
452,6	0,0225	0,0575	445,7	0,0218	0,0582	437,6	0,0210	0,0590	426,6	0,0199	0,0601
452,1	0,0341	0,0859	445,2	0,0331	0,0869	437,0	0,0319	0,0881	426,0	0,0303	0,0897
451,5	0,0460	0,1140	444,6	0,0447	0,1153	436,4	0,0431	0,1169	425,4	0,0409	0,1191
450,9	0,0582	0,1418	444,0	0,0565	0,1435	435,9	0,0545	0,1455	424,9	0,0519	0,1481
450,4	0,0706	0,1694	443,5	0,0686	0,1714	435,3	0,0663	0,1737	424,3	0,0631	0,1769
449,8	0,0833	0,1967	442,9	0,0810	0,1990	434,7	0,0783	0,2017	423,7	0,0746	0,2054
449,2	0,0963	0,2237	442,3	0,0937	0,2263	434,1	0,0906	0,2293	423,1	0,0865	0,2335
448,6	0,1096	0,2504	441,7	0,1067	0,2533	433,5	0,1033	0,2567	422,5	0,0987	0,2613
448,0	0,1231	0,2769	441,1	0,1200	0,2800	432,9	0,1163	0,2837	421,9	0,1112	0,2888
447,4	0,1370	0,3029	440,5	0,1337	0,3063	432,3	0,1296	0,3104	421,3	0,1241	0,3158
446,8	0,1513	0,3287	439,9	0,1476	0,3323	431,6	0,1433	0,3367	420,6	0,1374	0,3426
446,2	0,1658	0,3542	439,2	0,1620	0,3580	431,0	0,1573	0,3626	420,0	0,1510	0,3690
445,6	0,1807	0,3793	438,6	0,1766	0,3833	430,4	0,1717	0,3882	419,4	0,1651	0,3949
444,9	0,1960	0,4040	438,0	0,1917	0,4083	429,7	0,1865	0,4134	418,7	0,1795	0,4205
444,3	0,2116	0,4284	437,3	0,2071	0,4329	429,1	0,2017	0,4382	418,1	0,1944	0,4456
443,6	0,2276	0,4524	436,7	0,2229	0,4570	428,4	0,2173	0,4626	417,4	0,2097	0,4703
443,0	0,2440	0,4760	436,0	0,2391	0,4809	427,8	0,2333	0,4866	416,7	0,2254	0,4946
442,3	0,2607	0,4993	435,4	0,2557	0,5043	427,1	0,2498	0,5102	416,1	0,2416	0,5184
441,7	0,2778	0,5221	434,7	0,2728	0,5272	426,4	0,2666	0,5333	415,4	0,2582	0,5417
441,0	0,2954	0,5446	434,0	0,2902	0,5498	425,8	0,2840	0,5560	414,7	0,2754	0,5646
440,3	0,3134	0,5666	433,4	0,3081	0,5719	425,1	0,3017	0,5783	414,0	0,2930	0,5869
439,7	0,3317	0,5882	432,7	0,3264	0,5936	424,4	0,3200	0,6000	413,3	0,3111	0,6088
439,0	0,3506	0,6094	432,0	0,3452	0,6148	423,7	0,3387	0,6213	412,6	0,3298	0,6302
438,3	0,3698	0,6301	431,3	0,3644	0,6356	423,0	0,3579	0,6421	411,9	0,3490	0,6510
437,6	0,3895	0,6504	430,6	0,3841	0,6559	422,3	0,3776	0,6624	411,2	0,3687	0,6713
436,9	0,4097	0,6703	429,9	0,4043	0,6757	421,6	0,3978	0,6822	410,5	0,3889	0,6911
436,2	0,4303	0,6897	429,2	0,4250	0,6951	420,9	0,4185	0,7015	409,8	0,4097	0,7104
435,6	0,4514	0,7087	428,5	0,4461	0,7140	420,2	0,4397	0,7203	409,1	0,4310	0,7291
434,9	0,4729	0,7271	427,8	0,4677	0,7323	419,5	0,4614	0,7386	408,3	0,4528	0,7472
434,2	0,4949	0,7451	427,1	0,4898	0,7502	418,8	0,4836	0,7564	407,6	0,4752	0,7648
433,5	0,5174	0,7627	426,4	0,5124	0,7677	418,1	0,5064	0,7736	406,9	0,4982	0,7818
432,7	0,5403	0,7797	425,7	0,5354	0,7846	417,3	0,5297	0,7904	406,2	0,5217	0,7983
432,0	0,5637	0,7963	425,0	0,5590	0,8010	416,6	0,5534	0,8066	405,5	0,5458	0,8142
431,3	0,5876	0,8124	424,3	0,5831	0,8169	415,9	0,5777	0,8223	404,8	0,5704	0,8296
430,6	0,6119	0,8281	423,6	0,6077	0,8324	415,2	0,6025	0,8375	404,0	0,5956	0,8444
429,9	0,6367	0,8433	422,9	0,6327	0,8473	414,5	0,6278	0,8522	403,3	0,6213	0,8587
429,2	0,6620	0,8580	422,2	0,6582	0,8618	413,8	0,6537	0,8663	402,6	0,6475	0,8725
428,5	0,6878	0,8722	421,5	0,6842	0,8758	413,1	0,6800	0,8800	401,9	0,6743	0,8857
427,8	0,7140	0,8860	420,8	0,7107	0,8893	412,4	0,7068	0,8932	401,2	0,7016	0,8985
427,1	0,7407	0,8993	420,1	0,7377	0,9023	411,7	0,7341	0,9059	400,5	0,7293	0,9107
426,4	0,7678	0,9122	419,4	0,7651	0,9149	411,0	0,7619	0,9181	399,8	0,7576	0,9224
425,7	0,7953	0,9247	418,7	0,7930	0,9270	410,3	0,7901	0,9299	399,1	0,7864	0,9336
425,1	0,8233	0,9367	418,0	0,8213	0,9387	409,6	0,8188	0,9412	398,5	0,8156	0,9444
424,4	0,8518	0,9482	417,3	0,8500	0,9500	408,9	0,8480	0,9520	397,8	0,8453	0,9547
423,7	0,8806	0,9594	416,6	0,8792	0,9608	408,3	0,8776	0,9624	397,1	0,8754	0,9646
423,0	0,9099	0,9701	415,9	0,9088	0,9712	407,6	0,9076	0,9724	396,5	0,9059	0,9741
422,4	0,9395	0,9805	415,3	0,9388	0,9812	406,9	0,9380	0,9820	395,8	0,9369	0,9831
421,7	0,9696	0,9904	414,6	0,9692	0,9908	406,3	0,9688	0,9912	395,2	0,9683	0,9917
421,0	1,0000	1,0000	414,0	1,0000	1,0000	405,6	1,0000	1,0000	394,5	1,0000	1,0000

Tabla 45: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante Wilson para la gráfica modificada

101			80			60			40		
P (kPa)	X1	Y1									
T (K)			T (K)			T (K)			T (K)		
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,0	0,0321	0,0079	446,1	0,0076	0,0324	437,9	0,0073	0,0327	427,0	0,0068	0,0332
452,2	0,0638	0,0162	445,4	0,0156	0,0644	437,2	0,0149	0,0651	426,2	0,0139	0,0661
451,5	0,0952	0,0248	444,6	0,0239	0,0961	436,5	0,0228	0,0972	425,5	0,0214	0,0986
450,7	0,1262	0,0338	443,9	0,0327	0,1273	435,7	0,0312	0,1288	424,8	0,0292	0,1308
449,9	0,1567	0,0433	443,1	0,0418	0,1582	434,9	0,0399	0,1601	424,0	0,0374	0,1626
449,2	0,1869	0,0531	442,3	0,0514	0,1886	434,2	0,0491	0,1909	423,3	0,0461	0,1939
448,4	0,2165	0,0635	441,5	0,0614	0,2186	433,4	0,0588	0,2212	422,5	0,0552	0,2248
447,6	0,2457	0,0743	440,7	0,0719	0,2480	432,6	0,0689	0,2511	421,7	0,0648	0,2552
446,8	0,2744	0,0856	440,0	0,0830	0,2770	431,8	0,0795	0,2805	420,9	0,0749	0,2851
446,0	0,3025	0,0975	439,2	0,0945	0,3055	431,0	0,0907	0,3093	420,1	0,0855	0,3145
445,2	0,3301	0,1099	438,4	0,1067	0,3333	430,2	0,1024	0,3376	419,3	0,0967	0,3433
444,4	0,3571	0,1229	437,6	0,1193	0,3606	429,4	0,1147	0,3653	418,5	0,1085	0,3715
443,6	0,3835	0,1365	436,8	0,1327	0,3873	428,6	0,1277	0,3923	417,7	0,1209	0,3991
442,8	0,4093	0,1507	436,0	0,1466	0,4134	427,8	0,1413	0,4187	416,9	0,1340	0,4260
442,0	0,4344	0,1656	435,1	0,1612	0,4388	427,0	0,1555	0,4445	416,1	0,1478	0,4522
441,2	0,4589	0,1811	434,4	0,1764	0,4635	426,2	0,1704	0,4696	415,3	0,1623	0,4777
440,4	0,4827	0,1972	433,6	0,1924	0,4876	425,4	0,1861	0,4939	414,5	0,1775	0,5025
439,6	0,5059	0,2141	432,8	0,2090	0,5110	424,6	0,2024	0,5176	413,7	0,1934	0,5266
438,8	0,5284	0,2316	432,0	0,2263	0,5337	423,8	0,2195	0,5405	412,9	0,2102	0,5498
438,1	0,5502	0,2498	431,2	0,2443	0,5556	423,0	0,2373	0,5627	412,1	0,2277	0,5723
437,3	0,5713	0,2687	430,4	0,2631	0,5769	422,3	0,2558	0,5842	411,3	0,2460	0,5940
436,6	0,5918	0,2882	429,7	0,2825	0,5975	421,5	0,2751	0,6049	410,5	0,2651	0,6149
435,8	0,6116	0,3085	429,0	0,3026	0,6174	420,7	0,2952	0,6249	409,8	0,2850	0,6351
435,1	0,6307	0,3293	428,2	0,3234	0,6366	420,0	0,3159	0,6441	409,0	0,3056	0,6544
434,4	0,6492	0,3508	427,5	0,3448	0,6552	419,3	0,3373	0,6627	408,3	0,3269	0,6731
433,7	0,6671	0,3729	426,8	0,3669	0,6731	418,6	0,3594	0,6806	407,6	0,3491	0,6910
433,0	0,6844	0,3956	426,1	0,3896	0,6904	417,9	0,3821	0,6979	406,8	0,3719	0,7082
432,4	0,7012	0,4188	425,5	0,4129	0,7071	417,2	0,4055	0,7145	406,2	0,3954	0,7247
431,7	0,7175	0,4425	424,8	0,4367	0,7233	416,5	0,4294	0,7306	405,5	0,4195	0,7406
431,1	0,7332	0,4668	424,2	0,4610	0,7390	415,9	0,4539	0,7461	404,8	0,4442	0,7558
430,5	0,7485	0,4915	423,5	0,4858	0,7542	415,3	0,4789	0,7611	404,2	0,4694	0,7706
429,9	0,7634	0,5166	422,9	0,5111	0,7689	414,6	0,5044	0,7756	403,6	0,4952	0,7848
429,3	0,7779	0,5421	422,3	0,5368	0,7832	414,1	0,5303	0,7897	403,0	0,5214	0,7986
428,7	0,7921	0,5679	421,8	0,5628	0,7972	413,5	0,5566	0,8034	402,4	0,5481	0,8119
428,2	0,8059	0,5941	421,2	0,5891	0,8109	412,9	0,5833	0,8168	401,8	0,5752	0,8248
427,6	0,8195	0,6205	420,6	0,6158	0,8242	412,3	0,6102	0,8298	401,3	0,6026	0,8374
427,1	0,8329	0,6471	420,1	0,6427	0,8373	411,8	0,6374	0,8426	400,7	0,6303	0,8497
426,6	0,8460	0,6740	419,6	0,6698	0,8502	411,3	0,6649	0,8551	400,2	0,6582	0,8618
426,0	0,8590	0,7010	419,1	0,6971	0,8629	410,8	0,6926	0,8674	399,7	0,6864	0,8736
425,5	0,8718	0,7282	418,6	0,7245	0,8755	410,2	0,7204	0,8796	399,2	0,7147	0,8853
425,1	0,8846	0,7554	418,1	0,7521	0,8879	409,7	0,7483	0,8917	398,7	0,7432	0,8968
424,6	0,8973	0,7827	417,6	0,7797	0,9003	409,3	0,7764	0,9036	398,2	0,7718	0,9082
424,1	0,9099	0,8101	417,1	0,8074	0,9126	408,8	0,8045	0,9156	397,7	0,8004	0,9196
423,6	0,9226	0,8375	416,6	0,8351	0,9249	408,3	0,8326	0,9274	397,2	0,8291	0,9309
423,2	0,9352	0,8648	416,2	0,8628	0,9372	407,8	0,8607	0,9393	396,8	0,8578	0,9422
422,7	0,9480	0,8920	415,7	0,8904	0,9496	407,4	0,8887	0,9513	396,3	0,8864	0,9536
422,3	0,9608	0,9192	415,3	0,9180	0,9620	406,9	0,9167	0,9633	395,8	0,9150	0,9650
421,9	0,9737	0,9463	414,8	0,9455	0,9745	406,5	0,9446	0,9754	395,4	0,9435	0,9765
421,4	0,9868	0,9732	414,4	0,9728	0,9872	406,1	0,9724	0,9876	395,0	0,9718	0,9882
421,0	1,0000	1,0000	414,0	1,0000	1,0000	405,6	1,0000	1,0000	394,5	1,0000	1,0000

Tabla 46: Datos de la mezcla 1 obtenidos mediante UNIQUAC para la gráfica modificada

P (kPa)											
101			80			60			40		
T (K)	X1	Y1									
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
453,0	0,0320	0,0080	446,1	0,0323	0,0077	437,9	0,0327	0,0073	427,0	0,0332	0,0068
452,2	0,0637	0,0163	445,4	0,0643	0,0157	437,2	0,0651	0,0149	426,2	0,0660	0,0140
451,5	0,0950	0,0250	444,6	0,0960	0,0240	436,5	0,0971	0,0229	425,5	0,0985	0,0215
450,7	0,1259	0,0341	443,9	0,1272	0,0328	435,7	0,1287	0,0313	424,8	0,1307	0,0293
450,0	0,1565	0,0435	443,1	0,1581	0,0419	434,9	0,1599	0,0401	424,0	0,1624	0,0376
449,2	0,1866	0,0534	442,3	0,1885	0,0515	434,2	0,1908	0,0492	423,3	0,1938	0,0462
448,4	0,2162	0,0638	441,5	0,2185	0,0615	433,4	0,2211	0,0589	422,5	0,2247	0,0553
447,6	0,2454	0,0746	440,8	0,2480	0,0720	432,6	0,2510	0,0690	421,7	0,2551	0,0649
446,8	0,2741	0,0859	440,0	0,2770	0,0830	431,8	0,2804	0,0796	420,9	0,2850	0,0750
446,0	0,3022	0,0978	439,2	0,3054	0,0946	431,0	0,3093	0,0907	420,1	0,3144	0,0856
445,2	0,3298	0,1102	438,4	0,3334	0,1066	430,2	0,3376	0,1024	419,3	0,3432	0,0967
444,4	0,3569	0,1231	437,6	0,3607	0,1193	429,4	0,3653	0,1147	418,5	0,3715	0,1085
443,6	0,3833	0,1367	436,8	0,3875	0,1325	428,6	0,3924	0,1275	417,7	0,3992	0,1208
442,8	0,4092	0,1508	436,0	0,4136	0,1464	427,8	0,4189	0,1410	416,9	0,4261	0,1339
442,0	0,4344	0,1656	435,1	0,4391	0,1609	427,0	0,4448	0,1552	416,1	0,4524	0,1475
441,2	0,4590	0,1810	434,3	0,4640	0,1760	426,2	0,4699	0,1700	415,3	0,4780	0,1620
440,4	0,4829	0,1971	433,5	0,4881	0,1918	425,4	0,4944	0,1856	414,5	0,5029	0,1771
439,6	0,5062	0,2138	432,7	0,5116	0,2084	424,6	0,5181	0,2018	413,7	0,5270	0,1930
438,9	0,5287	0,2313	432,0	0,5344	0,2256	423,8	0,5411	0,2188	412,8	0,5504	0,2096
438,1	0,5506	0,2493	431,2	0,5565	0,2436	423,0	0,5634	0,2365	412,1	0,5730	0,2270
437,3	0,5718	0,2682	430,4	0,5778	0,2622	422,2	0,5850	0,2550	411,3	0,5948	0,2453
436,6	0,5924	0,2876	429,6	0,5984	0,2816	421,4	0,6058	0,2742	410,5	0,6158	0,2643
435,8	0,6123	0,3078	428,9	0,6184	0,3016	420,7	0,6258	0,2942	409,7	0,6360	0,2841
435,1	0,6314	0,3285	428,2	0,6376	0,3224	419,9	0,6451	0,3149	409,0	0,6554	0,3046
434,4	0,6500	0,3500	427,4	0,6562	0,3438	419,2	0,6638	0,3363	408,2	0,6740	0,3260
433,7	0,6679	0,3720	426,7	0,6742	0,3659	418,5	0,6817	0,3583	407,5	0,6920	0,3481
433,0	0,6853	0,3947	426,0	0,6915	0,3885	417,8	0,6989	0,3811	406,8	0,7092	0,3708
432,3	0,7021	0,4179	425,4	0,7082	0,4118	417,1	0,7156	0,4045	406,1	0,7257	0,3944
431,7	0,7183	0,4417	424,7	0,7243	0,4357	416,5	0,7316	0,4284	405,4	0,7415	0,4185
431,1	0,7341	0,4660	424,1	0,7399	0,4601	415,8	0,7470	0,4530	404,8	0,7568	0,4432
430,4	0,7493	0,4907	423,4	0,7551	0,4849	415,2	0,7620	0,4780	404,1	0,7714	0,4686
429,8	0,7642	0,5158	422,8	0,7697	0,5103	414,6	0,7764	0,5036	403,5	0,7856	0,4944
429,2	0,7786	0,5414	422,2	0,7840	0,5360	414,0	0,7904	0,5296	402,9	0,7992	0,5208
428,7	0,7927	0,5673	421,7	0,7979	0,5622	413,4	0,8040	0,5560	402,3	0,8125	0,5475
428,1	0,8065	0,5935	421,1	0,8114	0,5886	412,8	0,8173	0,5828	401,7	0,8253	0,5747
427,6	0,8200	0,6200	420,5	0,8246	0,6154	412,3	0,8302	0,6098	401,2	0,8378	0,6022
427,0	0,8332	0,6468	420,0	0,8376	0,6424	411,7	0,8428	0,6372	400,6	0,8500	0,6300
426,5	0,8462	0,6738	419,5	0,8503	0,6697	411,2	0,8553	0,6648	400,1	0,8619	0,6581
426,0	0,8591	0,7009	419,0	0,8629	0,6971	410,7	0,8675	0,6925	399,6	0,8737	0,6864
425,5	0,8719	0,7281	418,5	0,8754	0,7246	410,2	0,8795	0,7205	399,1	0,8852	0,7148
425,0	0,8846	0,7555	418,0	0,8877	0,7523	409,7	0,8915	0,7485	398,6	0,8966	0,7434
424,5	0,8972	0,7828	417,5	0,9000	0,7800	409,2	0,9034	0,7766	398,1	0,9080	0,7720
424,1	0,9098	0,8103	417,0	0,9122	0,8078	408,7	0,9152	0,8048	397,6	0,9193	0,8007
423,6	0,9224	0,8376	416,6	0,9245	0,8355	408,3	0,9271	0,8329	397,2	0,9306	0,8294
423,2	0,9350	0,8650	416,1	0,9368	0,8632	407,8	0,9390	0,8610	396,7	0,9419	0,8581
422,7	0,9477	0,8923	415,7	0,9492	0,8908	407,4	0,9509	0,8891	396,3	0,9533	0,8867
422,3	0,9606	0,9194	415,2	0,9617	0,9183	406,9	0,9630	0,9170	395,8	0,9647	0,9153
421,9	0,9735	0,9465	414,8	0,9743	0,9457	406,5	0,9751	0,9449	395,4	0,9763	0,9437
421,4	0,9867	0,9733	414,4	0,9870	0,9730	406,1	0,9875	0,9725	395,0	0,9881	0,9719
421,0	1,0000	1,0000	414,0	1,0000	1,0000	405,6	1,0000	1,0000	394,5	1,0000	1,0000

Tabla 47: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante NRTL para la gráfica modificada

P (kPa) 101			P (kPa) 80			P (kPa) 60			P (kPa) 40		
T (K)	X1	Y1	T (K)	X1	Y1	T (K)	X1	Y1	T (K)	X1	Y1
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
452,9	0,0061	0,0339	446,0	0,0058	0,0342	437,8	0,0055	0,0345	426,9	0,0050	0,0350
452,0	0,0125	0,0675	445,1	0,0119	0,0681	437,0	0,0112	0,0688	426,0	0,0103	0,0697
451,1	0,0192	0,1008	444,3	0,0183	0,1017	436,1	0,0172	0,1028	425,2	0,0158	0,1042
450,2	0,0261	0,1339	443,4	0,0249	0,1351	435,2	0,0235	0,1365	424,3	0,0216	0,1384
449,3	0,0334	0,1666	442,5	0,0319	0,1681	434,4	0,0301	0,1699	423,5	0,0276	0,1724
448,4	0,0410	0,1990	441,5	0,0392	0,2008	433,4	0,0370	0,2030	422,6	0,0340	0,2060
447,4	0,0490	0,2310	440,6	0,0468	0,2332	432,5	0,0442	0,2358	421,6	0,0407	0,2393
446,4	0,0574	0,2626	439,6	0,0549	0,2651	431,5	0,0519	0,2681	420,7	0,0478	0,2722
445,5	0,0662	0,2938	438,7	0,0633	0,2967	430,6	0,0599	0,3001	419,7	0,0553	0,3047
444,5	0,0754	0,3246	437,7	0,0722	0,3277	429,6	0,0684	0,3316	418,7	0,0632	0,3368
443,4	0,0851	0,3549	436,6	0,0816	0,3584	428,6	0,0773	0,3627	417,7	0,0716	0,3684
442,4	0,0953	0,3847	435,6	0,0914	0,3885	427,5	0,0867	0,3933	416,7	0,0805	0,3995
441,3	0,1060	0,4139	434,5	0,1018	0,4181	426,5	0,0967	0,4233	415,7	0,0899	0,4301
440,3	0,1174	0,4426	433,5	0,1128	0,4471	425,4	0,1073	0,4527	414,6	0,0999	0,4601
439,2	0,1293	0,4707	432,4	0,1244	0,4756	424,3	0,1184	0,4815	413,5	0,1105	0,4894
438,1	0,1418	0,4982	431,3	0,1366	0,5033	423,2	0,1303	0,5097	412,4	0,1219	0,5181
436,9	0,1551	0,5249	430,1	0,1495	0,5305	422,0	0,1428	0,5372	411,2	0,1339	0,5461
435,8	0,1690	0,5510	429,0	0,1632	0,5568	420,9	0,1561	0,5639	410,1	0,1467	0,5732
434,7	0,1837	0,5763	427,8	0,1776	0,5824	419,7	0,1702	0,5898	408,9	0,1604	0,5996
433,5	0,1992	0,6008	426,7	0,1928	0,6072	418,6	0,1851	0,6149	407,7	0,1750	0,6250
432,4	0,2154	0,6246	425,5	0,2088	0,6312	417,4	0,2009	0,6391	406,6	0,1904	0,6496
431,2	0,2325	0,6475	424,3	0,2257	0,6543	416,2	0,2177	0,6624	405,4	0,2069	0,6731
430,0	0,2505	0,6695	423,1	0,2435	0,6765	415,0	0,2353	0,6847	404,2	0,2243	0,6957
428,9	0,2693	0,6907	422,0	0,2623	0,6978	413,8	0,2539	0,7061	403,0	0,2428	0,7172
427,7	0,2890	0,7110	420,8	0,2819	0,7181	412,6	0,2735	0,7264	401,8	0,2624	0,7376
426,6	0,3096	0,7304	419,6	0,3025	0,7375	411,5	0,2942	0,7459	400,6	0,2831	0,7570
425,4	0,3311	0,7489	418,5	0,3240	0,7560	410,3	0,3158	0,7643	399,4	0,3048	0,7753
424,3	0,3535	0,7666	417,3	0,3465	0,7735	409,1	0,3383	0,7817	398,2	0,3275	0,7925
423,2	0,3767	0,7833	416,2	0,3699	0,7901	408,0	0,3619	0,7981	397,1	0,3513	0,8088
422,1	0,4009	0,7992	415,1	0,3942	0,8058	406,9	0,3863	0,8137	396,0	0,3761	0,8240
421,0	0,4258	0,8143	414,0	0,4193	0,8207	405,8	0,4118	0,8283	394,9	0,4018	0,8382
419,9	0,4515	0,8286	413,0	0,4453	0,8348	404,8	0,4380	0,8420	393,8	0,4285	0,8516
418,9	0,4779	0,8421	411,9	0,4720	0,8480	403,7	0,4650	0,8550	392,8	0,4560	0,8640
417,9	0,5051	0,8549	410,9	0,4994	0,8606	402,7	0,4929	0,8672	391,8	0,4843	0,8757
416,9	0,5330	0,8671	409,9	0,5276	0,8724	401,7	0,5214	0,8786	390,8	0,5134	0,8867
415,9	0,5614	0,8786	409,0	0,5564	0,8836	400,8	0,5506	0,8894	389,9	0,5430	0,8970
415,0	0,5904	0,8896	408,0	0,5858	0,8942	399,8	0,5804	0,8996	389,0	0,5734	0,9066
414,0	0,6200	0,9000	407,1	0,6157	0,9043	398,9	0,6107	0,9093	388,1	0,6043	0,9157
413,1	0,6500	0,9100	406,2	0,6461	0,9139	398,1	0,6415	0,9185	387,3	0,6357	0,9244
412,3	0,6805	0,9195	405,3	0,6769	0,9231	397,2	0,6728	0,9272	386,4	0,6675	0,9325
411,4	0,7114	0,9287	404,5	0,7081	0,9319	396,4	0,7044	0,9356	385,6	0,6997	0,9403
410,6	0,7425	0,9375	403,7	0,7397	0,9403	395,6	0,7364	0,9436	384,8	0,7322	0,9478
409,7	0,7740	0,9460	402,9	0,7715	0,9485	394,8	0,7687	0,9513	384,1	0,7651	0,9549
408,9	0,8058	0,9542	402,1	0,8037	0,9563	394,0	0,8013	0,9587	383,3	0,7982	0,9618
408,1	0,8378	0,9622	401,3	0,8360	0,9640	393,2	0,8340	0,9660	382,6	0,8315	0,9685
407,3	0,8700	0,9700	400,5	0,8686	0,9714	392,5	0,8670	0,9730	381,8	0,8650	0,9750
406,6	0,9023	0,9777	399,7	0,9013	0,9787	391,7	0,9001	0,9799	381,1	0,8986	0,9814
405,8	0,9348	0,9852	399,0	0,9341	0,9859	391,0	0,9333	0,9867	380,4	0,9323	0,9877
405,0	0,9674	0,9926	398,2	0,9670	0,9930	390,3	0,9666	0,9934	379,7	0,9661	0,9939
404,3	1,0000	1,0000	397,5	1,0000	1,0000	389,5	1,0000	1,0000	379,0	1,0000	1,0000

Tabla 48: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante Wilson para la gráfica modificada

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
	T (K)	X1		Y1	T (K)		X1	Y1		T (K)	X1
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
452,9	0,0339	0,0061	446,0	0,0342	0,0058	437,8	0,0346	0,0054	426,9	0,0350	0,0050
452,0	0,0676	0,0124	445,1	0,0682	0,0118	437,0	0,0689	0,0111	426,0	0,0698	0,0102
451,1	0,1010	0,0190	444,3	0,1019	0,0181	436,1	0,1030	0,0170	425,2	0,1044	0,0156
450,2	0,1341	0,0259	443,4	0,1353	0,0247	435,2	0,1367	0,0233	424,3	0,1386	0,0214
449,3	0,1669	0,0331	442,5	0,1684	0,0316	434,3	0,1702	0,0298	423,4	0,1726	0,0274
448,3	0,1993	0,0407	441,5	0,2011	0,0389	433,4	0,2033	0,0367	422,5	0,2063	0,0337
447,4	0,2314	0,0486	440,6	0,2335	0,0465	432,5	0,2361	0,0439	421,6	0,2396	0,0404
446,4	0,2630	0,0570	439,6	0,2655	0,0545	431,5	0,2685	0,0515	420,7	0,2725	0,0475
445,4	0,2943	0,0657	438,6	0,2971	0,0629	430,5	0,3005	0,0595	419,7	0,3051	0,0549
444,4	0,3250	0,0749	437,6	0,3282	0,0718	429,5	0,3320	0,0679	418,7	0,3372	0,0628
443,4	0,3554	0,0846	436,6	0,3588	0,0811	428,5	0,3631	0,0769	417,7	0,3688	0,0712
442,3	0,3851	0,0948	435,6	0,3890	0,0910	427,5	0,3937	0,0863	416,7	0,4000	0,0800
441,3	0,4144	0,1056	434,5	0,4186	0,1014	426,4	0,4237	0,0963	415,6	0,4306	0,0894
440,2	0,4431	0,1169	433,4	0,4476	0,1123	425,3	0,4532	0,1068	414,5	0,4606	0,0994
439,1	0,4711	0,1288	432,3	0,4761	0,1239	424,2	0,4820	0,1180	413,5	0,4899	0,1101
438,0	0,4986	0,1414	431,2	0,5038	0,1362	423,1	0,5102	0,1298	412,3	0,5186	0,1214
436,9	0,5254	0,1546	430,1	0,5309	0,1491	422,0	0,5376	0,1424	411,2	0,5465	0,1335
435,8	0,5514	0,1686	428,9	0,5572	0,1628	420,8	0,5643	0,1557	410,0	0,5736	0,1463
434,6	0,5767	0,1833	427,8	0,5828	0,1772	419,7	0,5902	0,1698	408,9	0,5999	0,1601
433,5	0,6011	0,1989	426,6	0,6075	0,1925	418,5	0,6152	0,1848	407,7	0,6254	0,1746
432,3	0,6248	0,2151	425,5	0,6314	0,2086	417,3	0,6393	0,2006	406,5	0,6499	0,1902
431,1	0,6476	0,2323	424,3	0,6545	0,2255	416,2	0,6626	0,2174	405,3	0,6733	0,2067
430,0	0,6697	0,2503	423,1	0,6766	0,2434	415,0	0,6848	0,2351	404,1	0,6958	0,2242
428,8	0,6908	0,2692	421,9	0,6978	0,2622	413,8	0,7062	0,2538	402,9	0,7173	0,2427
427,7	0,7110	0,2890	420,8	0,7181	0,2819	412,6	0,7265	0,2735	401,7	0,7377	0,2624
426,5	0,7303	0,3097	419,6	0,7374	0,3026	411,4	0,7459	0,2942	400,5	0,7570	0,2831
425,4	0,7488	0,3313	418,5	0,7558	0,3242	410,3	0,7642	0,3159	399,4	0,7752	0,3048
424,3	0,7664	0,3537	417,3	0,7733	0,3467	409,1	0,7815	0,3385	398,2	0,7924	0,3276
423,1	0,7831	0,3770	416,2	0,7899	0,3702	408,0	0,7979	0,3621	397,1	0,8086	0,3515
422,0	0,7989	0,4011	415,1	0,8056	0,3944	406,9	0,8134	0,3866	396,0	0,8238	0,3763
421,0	0,8140	0,4261	414,0	0,8204	0,4196	405,8	0,8280	0,4120	394,9	0,8380	0,4021
419,9	0,8282	0,4518	413,0	0,8345	0,4456	404,8	0,8417	0,4383	393,8	0,8513	0,4288
418,9	0,8417	0,4783	411,9	0,8477	0,4724	403,7	0,8546	0,4654	392,8	0,8638	0,4563
417,9	0,8546	0,5055	410,9	0,8602	0,4998	402,7	0,8668	0,4932	391,8	0,8754	0,4846
416,9	0,8667	0,5333	409,9	0,8721	0,5280	401,7	0,8783	0,5217	390,9	0,8864	0,5136
415,9	0,8783	0,5618	409,0	0,8833	0,5567	400,8	0,8891	0,5509	389,9	0,8967	0,5433
415,0	0,8893	0,5907	408,0	0,8939	0,5861	399,9	0,8994	0,5806	389,0	0,9064	0,5736
414,1	0,8997	0,6203	407,1	0,9041	0,6160	399,0	0,9091	0,6110	388,1	0,9155	0,6045
413,2	0,9097	0,6503	406,2	0,9137	0,6463	398,1	0,9183	0,6417	387,3	0,9242	0,6359
412,3	0,9193	0,6807	405,4	0,9229	0,6771	397,2	0,9271	0,6730	386,4	0,9324	0,6676
411,4	0,9285	0,7115	404,5	0,9317	0,7083	396,4	0,9355	0,7046	385,6	0,9402	0,6998
410,6	0,9373	0,7427	403,7	0,9402	0,7398	395,6	0,9435	0,7365	384,8	0,9477	0,7323
409,7	0,9459	0,7741	402,9	0,9484	0,7716	394,8	0,9512	0,7688	384,1	0,9549	0,7651
408,9	0,9542	0,8059	402,1	0,9563	0,8037	394,0	0,9587	0,8013	383,3	0,9618	0,7982
408,1	0,9622	0,8378	401,3	0,9639	0,8361	393,2	0,9660	0,8340	382,6	0,9685	0,8315
407,3	0,9700	0,8700	400,5	0,9714	0,8686	392,5	0,9730	0,8670	381,8	0,9750	0,8650
406,6	0,9777	0,9023	399,7	0,9787	0,9013	391,7	0,9799	0,9001	381,1	0,9814	0,8986
405,8	0,9852	0,9348	399,0	0,9859	0,9341	391,0	0,9867	0,9333	380,4	0,9877	0,9323
405,0	0,9927	0,9673	398,2	0,9930	0,9670	390,3	0,9934	0,9666	379,7	0,9939	0,9661
404,3	1,0000	1,0000	397,5	1,0000	1,0000	389,5	1,0000	1,0000	379,0	1,0000	1,0000

Tabla 49: Datos de la mezcla 2 obtenidos mediante UNQUAC para la gráfica modificada

P (kPa)	101		P (kPa)	80		P (kPa)	60		P (kPa)	40	
	T (K)	X1		Y1	T (K)		X1	Y1		T (K)	X1
453,7	0,0000	0,0000	446,8	0,0000	0,0000	438,7	0,0000	0,0000	427,7	0,0000	0,0000
452,9	0,0063	0,0337	446,0	0,0060	0,0340	437,8	0,0056	0,0344	426,9	0,0051	0,0349
452,0	0,0128	0,0672	445,2	0,0122	0,0678	437,0	0,0114	0,0686	426,1	0,0105	0,0695
451,1	0,0196	0,1004	444,3	0,0186	0,1014	436,1	0,0176	0,1024	425,2	0,0161	0,1039
450,3	0,0266	0,1333	443,4	0,0254	0,1346	435,3	0,0239	0,1361	424,4	0,0220	0,1380
449,3	0,0340	0,1660	442,5	0,0325	0,1675	434,4	0,0306	0,1694	423,5	0,0281	0,1719
448,4	0,0418	0,1982	441,6	0,0399	0,2001	433,5	0,0376	0,2023	422,6	0,0346	0,2054
447,5	0,0499	0,2301	440,7	0,0477	0,2323	432,6	0,0450	0,2350	421,7	0,0414	0,2386
446,5	0,0583	0,2616	439,7	0,0558	0,2642	431,6	0,0527	0,2672	420,7	0,0486	0,2714
445,5	0,0672	0,2928	438,7	0,0643	0,2957	430,6	0,0609	0,2991	419,8	0,0562	0,3038
444,5	0,0765	0,3235	437,7	0,0733	0,3267	429,6	0,0694	0,3306	418,8	0,0642	0,3358
443,5	0,0863	0,3537	436,7	0,0827	0,3572	428,6	0,0784	0,3616	417,8	0,0726	0,3674
442,5	0,0966	0,3834	435,7	0,0927	0,3873	427,6	0,0879	0,3921	416,8	0,0815	0,3984
441,4	0,1074	0,4126	434,6	0,1031	0,4168	426,6	0,0980	0,4220	415,7	0,0910	0,4290
440,4	0,1187	0,4412	433,6	0,1141	0,4458	425,5	0,1085	0,4515	414,7	0,1011	0,4589
439,3	0,1307	0,4693	432,5	0,1257	0,4742	424,4	0,1197	0,4802	413,6	0,1117	0,4882
438,2	0,1432	0,4968	431,4	0,1380	0,5020	423,3	0,1316	0,5084	412,5	0,1231	0,5169
437,1	0,1565	0,5235	430,3	0,1509	0,5291	422,2	0,1441	0,5359	411,4	0,1351	0,5448
436,0	0,1704	0,5496	429,1	0,1645	0,5555	421,0	0,1574	0,5626	410,2	0,1480	0,5720
434,8	0,1850	0,5750	428,0	0,1789	0,5811	419,9	0,1715	0,5885	409,0	0,1616	0,5984
433,7	0,2004	0,5996	426,8	0,1940	0,6060	418,7	0,1863	0,6137	407,9	0,1762	0,6239
432,5	0,2166	0,6234	425,7	0,2100	0,6300	417,5	0,2021	0,6380	406,7	0,1916	0,6484
431,4	0,2336	0,6464	424,5	0,2268	0,6532	416,3	0,2188	0,6613	405,5	0,2079	0,6720
430,2	0,2515	0,6685	423,3	0,2446	0,6755	415,2	0,2363	0,6838	404,3	0,2253	0,6947
429,0	0,2702	0,6898	422,1	0,2632	0,6969	414,0	0,2548	0,7052	403,1	0,2437	0,7163
427,9	0,2898	0,7103	421,0	0,2827	0,7173	412,8	0,2743	0,7257	401,9	0,2632	0,7369
426,7	0,3102	0,7298	419,8	0,3031	0,7369	411,6	0,2948	0,7452	400,7	0,2837	0,7563
425,6	0,3316	0,7485	418,6	0,3245	0,7555	410,4	0,3163	0,7638	399,5	0,3053	0,7748
424,4	0,3538	0,7662	417,5	0,3469	0,7731	409,3	0,3387	0,7813	398,4	0,3279	0,7921
423,3	0,3769	0,7831	416,3	0,3701	0,7899	408,1	0,3621	0,7979	397,2	0,3516	0,8085
422,2	0,4009	0,7991	415,2	0,3942	0,8057	407,0	0,3864	0,8135	396,1	0,3763	0,8238
421,1	0,4257	0,8143	414,1	0,4193	0,8207	405,9	0,4118	0,8283	395,0	0,4019	0,8382
420,0	0,4513	0,8287	413,1	0,4451	0,8349	404,8	0,4379	0,8421	393,9	0,4284	0,8516
419,0	0,4777	0,8423	412,0	0,4718	0,8483	403,8	0,4649	0,8551	392,9	0,4559	0,8642
418,0	0,5048	0,8552	411,0	0,4991	0,8609	402,8	0,4926	0,8674	391,9	0,4841	0,8759
417,0	0,5326	0,8675	410,0	0,5272	0,8728	401,8	0,5211	0,8789	390,9	0,5130	0,8869
416,0	0,5609	0,8791	409,0	0,5560	0,8840	400,8	0,5502	0,8898	390,0	0,5427	0,8973
415,0	0,5899	0,8901	408,1	0,5853	0,8947	399,9	0,5800	0,9000	389,0	0,5730	0,9070
414,1	0,6195	0,9005	407,2	0,6152	0,9048	399,0	0,6103	0,9098	388,1	0,6039	0,9161
413,2	0,6495	0,9105	406,3	0,6456	0,9144	398,1	0,6411	0,9189	387,3	0,6353	0,9247
412,3	0,6800	0,9200	405,4	0,6764	0,9236	397,2	0,6724	0,9277	386,4	0,6671	0,9329
411,4	0,7109	0,9291	404,5	0,7077	0,9323	396,4	0,7040	0,9360	385,6	0,6993	0,9407
410,6	0,7421	0,9379	403,7	0,7393	0,9407	395,6	0,7360	0,9440	384,8	0,7319	0,9481
409,8	0,7737	0,9463	402,9	0,7712	0,9488	394,8	0,7684	0,9516	384,1	0,7648	0,9552
408,9	0,8055	0,9545	402,1	0,8034	0,9566	394,0	0,8010	0,9590	383,3	0,7980	0,9621
408,1	0,8375	0,9625	401,3	0,8358	0,9642	393,2	0,8338	0,9662	382,6	0,8313	0,9687
407,3	0,8698	0,9702	400,5	0,8684	0,9716	392,5	0,8668	0,9732	381,8	0,8648	0,9752
406,6	0,9022	0,9778	399,7	0,9012	0,9788	391,7	0,9000	0,9800	381,1	0,8985	0,9815
405,8	0,9347	0,9853	399,0	0,9340	0,9860	391,0	0,9333	0,9867	380,4	0,9323	0,9877
405,0	0,9673	0,9927	398,2	0,9670	0,9930	390,3	0,9666	0,9934	379,7	0,9661	0,9939
404,3	1,0000	1,0000	397,5	1,0000	1,0000	389,5	1,0000	1,0000	379,0	1,0000	1,0000

Tabla 50: Resumen de la simulación modificada para la mezcla 1

MECLA 1								
P (kPa)	101							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
453,7	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,0000	0,0	0,0000	0,0
453,0	0,0161	0,0534	0,0535	0,2	0,0546	2,2	0,0511	-4,3
451,2	0,0577	0,1615	0,1491	-7,7	0,1627	0,7	0,1457	-9,8
447,9	0,1344	0,3092	0,3038	-1,7	0,3104	0,4	0,3072	-0,6
444,9	0,2081	0,4220	0,4295	1,8	0,4232	0,3	0,4322	2,4
438,8	0,3697	0,5995	0,6409	6,9	0,6007	0,2	0,6397	6,7
434,3	0,5024	0,7204	0,7652	6,2	0,7216	0,2	0,7610	5,6
430,4	0,6312	0,8105	0,8556	5,6	0,8117	0,1	0,8502	4,9
427,3	0,7434	0,8730	0,9167	5,0	0,8742	0,1	0,9109	4,3
424,6	0,8475	0,9305	0,9621	3,4	0,9317	0,1	0,9567	2,8
422,5	0,9443	0,9768	0,9965	2,0	0,978	0,1	0,9919	1,5
421,5	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,0000	0,0	1,0000	0,0
MECLA 1								
P (kPa)	80							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
446,8	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,0000	0,0	0,0000	0,0
446,1	0,0164	0,0545	0,0600	10,1	0,0454	-16,7	0,0538	-1,3
444,4	0,0547	0,1723	0,1109	-35,6	0,1407	-18,3	0,1485	-13,8
441,0	0,1325	0,347	0,3138	-9,6	0,3055	12,0	0,3133	-9,7
437,5	0,2156	0,4787	0,4565	-4,6	0,4474	6,5	0,4552	-4,9
433,2	0,3263	0,6074	0,6071	0,0	0,5949	2,1	0,6029	-0,7
427,2	0,4994	0,7533	0,7758	3,0	0,7592	0,8	0,7678	1,9
424,4	0,5896	0,8129	0,8404	3,4	0,8225	1,2	0,8312	2,3
420,0	0,7609	0,9024	0,9329	3,4	0,9145	1,3	0,9233	2,3
417,5	0,8456	0,9434	0,9678	2,6	0,9497	0,7	0,9584	1,6
415,1	0,9499	0,9858	1,0033	1,8	0,9861	0,0	0,9948	0,9
413,9	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,0000	0,0	1,0000	0,0
MECLA 1								
P (kPa)	60							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
438,5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,0000	0,0	0,0000	0,0
436,3	0,0510	0,1771	0,1792	1,2	0,1492	-15,8	0,1514	-14,5
434,6	0,0864	0,2714	0,2604	-4,1	0,2325	-14,3	0,2342	-13,7
432,5	0,1345	0,3776	0,3593	-4,8	0,3324	-12,0	0,3341	-11,5
429,1	0,2133	0,4846	0,4969	2,5	0,4690	-3,2	0,4707	-2,9
425,4	0,3074	0,5997	0,6282	4,8	0,5977	-0,3	0,5996	0,0
419,4	0,4774	0,7552	0,7991	5,8	0,7640	1,2	0,7664	1,5
415,8	0,5916	0,8233	0,8802	6,9	0,8434	2,4	0,8460	2,8
412,0	0,7312	0,8883	0,9544	7,4	0,9171	3,2	0,9198	3,5
409,6	0,8243	0,928	0,9928	7,0	0,9558	3,0	0,9584	3,3
406,3	0,9461	0,9783	1,0331	5,6	0,9970	1,9	0,9995	2,2
405,2	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,0000	0,0	1,0000	0,0
MECLA 1								
P (kPa)	40							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
427,5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,0000	0,0	0,0000	0,0
426,8	0,0174	0,0702	0,0911	29,8	0,0676	-3,7	0,0672	-4,3
425,0	0,0540	0,2064	0,1885	-8,7	0,1687	-18,3	0,1680	-18,6
421,0	0,1375	0,4106	0,3751	-8,6	0,3579	-12,8	0,3569	-13,1
417,7	0,2135	0,5266	0,5097	-3,2	0,4913	-6,7	0,4905	-6,9
412,3	0,3509	0,6615	0,6906	4,4	0,6681	1,0	0,6677	0,9
407,8	0,4812	0,7547	0,8100	7,3	0,7842	3,9	0,7842	3,9
403,4	0,6279	0,8477	0,9048	6,7	0,8773	3,5	0,8774	3,5
400,5	0,7360	0,9010	0,9563	6,1	0,9285	3,1	0,9287	3,1
398,4	0,8240	0,9387	0,9899	5,5	0,9624	2,5	0,9626	2,5
395,1	0,9365	0,9852	1,0247	4,0	0,9980	1,3	0,9981	1,3
393,8	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,0000	0,0	1,0000	0,0

Tabla 51: Resumen de la simulación modificada para la mezcla 2

MECLA 2								
P (kPa)	101							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
453,7	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,000	0,0	0,0000	0,0
451,4	0,0250	0,1264	0,1240	-1,9	0,132	0,0	0,1319	4,4
448,9	0,0531	0,2425	0,2210	-8,9	0,249	-7,5	0,2485	2,5
442,7	0,1277	0,4673	0,4255	-8,9	0,469	-8,1	0,4685	0,3
438,3	0,1873	0,5820	0,5469	-6,0	0,585	-5,3	0,5847	0,5
431,1	0,3001	0,7211	0,7097	-1,6	0,726	-1,2	0,7263	0,7
425,2	0,4082	0,8263	0,8122	-1,7	0,832	-1,5	0,8323	0,7
421,6	0,4857	0,8822	0,8653	-1,9	0,852	-1,8	0,8523	-3,4
419,3	0,5367	0,8934	0,8935	0,0	0,875	0,1	0,8753	-2,0
410,4	0,6135	0,9209	0,9285	0,8	0,905	6,8	0,9045	-1,8
413,7	0,6828	0,9505	0,9540	0,4	0,957	0,4	0,9565	0,6
408,7	0,8388	0,9603	0,9964	3,8	0,969	3,8	0,9688	0,9
403,8	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,000	0,0	1,0000	0,0
MECLA 2								
P (kPa)	80							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
446,8	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,0000	0,0	0,0000	0,0
445,2	0,0175	0,0990	0,0973	-1,7	0,1003	1,3	0,0997	0,7
441,2	0,0569	0,2729	0,2405	-11,9	0,2452	-10,2	0,2726	-0,1
437,5	0,1029	0,4195	0,3762	-10,3	0,3814	-9,1	0,4237	1,0
432,7	0,1644	0,5555	0,5173	-6,9	0,5223	-6,0	0,5595	0,7
424,3	0,2749	0,7174	0,6919	-3,6	0,6958	-3,0	0,7216	0,6
419,3	0,3819	0,8152	0,8006	-1,8	0,8034	-1,4	0,8020	-1,6
416,0	0,4482	0,8706	0,8492	-2,5	0,8515	-2,2	0,8407	-3,4
412,2	0,5344	0,9028	0,8979	-0,5	0,8998	-0,3	0,8798	-2,5
409,7	0,5988	0,9263	0,9264	0,0	0,9282	0,2	0,9036	-2,5
406,3	0,6939	0,9368	0,9597	2,4	0,9513	1,5	0,9327	-0,4
402,5	0,8142	0,9605	0,9910	3,2	0,9726	1,3	0,9634	0,3
397,4	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,0000	0,0	1,0000	0,0
MECLA 2								
P (kPa)	60							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
438,5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,0000	0,0	0,0000	0,0
436,8	0,0188	0,1074	0,0956	-11,0	0,1028	-4,3	0,1120	4,3
431,7	0,0715	0,3176	0,2890	-9,0	0,2980	-6,2	0,3409	7,3
427,1	0,1252	0,4775	0,4383	-8,2	0,4474	-6,3	0,4965	4,0
422,3	0,1882	0,6042	0,5695	-5,7	0,5783	-4,3	0,6196	2,5
414,3	0,3034	0,7534	0,7298	-3,1	0,7478	-0,7	0,7725	2,5
409,9	0,3958	0,843	0,8128	-3,6	0,8195	-2,8	0,8221	-2,5
407,7	0,4434	0,8682	0,8454	-2,6	0,8518	-1,9	0,8479	-2,3
404,3	0,5199	0,9031	0,8876	-1,7	0,8935	-1,1	0,8815	-2,4
400,6	0,6090	0,9333	0,9250	-0,9	0,9342	0,1	0,9124	-2,2
398,1	0,6921	0,963	0,9517	-1,2	0,9574	-0,6	0,9660	0,3
393,9	0,8316	0,9744	0,9848	1,1	0,9906	1,7	0,9687	-0,6
389,5	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,0000	0,0	1,0000	0,0

Continuación tabla 51

MECLA 2								
P (kPa)	40							
	Real		Wilson		NRTL		UNIQUAC	
T (K)	X1	Y1	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**	Y1**	%Y1**
427,5	0,0000	0,0000	0,0000	0,0	0,0000	0,0	0,0000	0,0
425,5	0,0207	0,1365	0,1389	1,8	0,1244	-8,9	0,1329	-2,6
421,3	0,0617	0,3133	0,3033	-3,2	0,2902	-7,4	0,3283	4,8
416,1	0,1190	0,4867	0,4757	-2,3	0,4635	-4,8	0,5089	4,6
411,5	0,1771	0,5991	0,6026	0,6	0,5895	-1,6	0,6275	4,7
404,6	0,2824	0,7433	0,7558	1,7	0,7415	-0,2	0,7572	1,9
400,1	0,3642	0,8197	0,8331	1,6	0,8179	-0,2	0,8185	-0,1
395,9	0,4523	0,8856	0,8920	0,7	0,8762	-1,1	0,8646	-2,4
392,0	0,5489	0,9262	0,9381	1,3	0,9219	-0,5	0,9013	-2,7
389,6	0,6140	0,9508	0,9617	1,1	0,9454	-0,6	0,9210	-3,1
387,5	0,6794	0,9594	0,9811	2,3	0,9648	0,6	0,9379	-2,2
383,1	0,8268	0,9728	1,0143	4,3	0,9973	2,5	0,9698	-0,3
379,1	1,0000	1,0000	1,0000	0,0	1,0000	0,0	1,0000	0,0