

# Nuevo modelo simple y generalizado para estimar la presión de vapor de hidrocarburos ligeros

## New simple and generalized model to estimate the vapor pressure of light hydrocarbons

*Luis Fernando Cardona Palacio\**

### RESUMEN

Una nueva ecuación es propuesta para el cálculo de la presión de vapor de hidrocarburos ligeros, aplicable en un amplio rango de temperatura. Se utilizaron datos de equilibrio líquido-vapor de 19 hidrocarburos de bajo peso molecular y mediante el algoritmo de Ladson, el cual minimiza la suma de los cuadrados de las desviaciones relativas de la presión de vapor, se determinaron parámetros y constantes propias del nuevo modelo y a partir del factor acéntrico se generaliza para cualquier sustancia pura. Para validar el nuevo modelo se efectuó su validación en 54 sustancias puras entre alcoholes, hidrocarburos, refrigerantes, gases nobles y sustancias inorgánicas, generando porcentajes de desviación relativas promedio de 1.504%. En el presente artículo se comparan los resultados obtenidos con otros modelos para el cálculo de la presión de vapor, los cuales indicaron que la nueva ecuación propuesta genera la menor desviación.

**Palabras clave:** Presión de vapor, sustancias puras, hidrocarburos.

### ABSTRACT

A new equation for light hydrocarbon is proposed for the estimation of vapor pressure, applicable in wide temperature range. Was used equilibrium liquid-vapor data with 19 low molecular weight hydrocarbons and using Lasdon et al., algorithm which minimize the sum of the squares of the relative deviation in liquid-vapour pressure were determined the parameters and constants characteristics of the new equation and generalized for any pure substance using the acentric factor. To validate the new model, vapour pressure predictions were made for 54 pure substances between alcohols, hydrocarbons, refrigerants, noble gases and inorganic substances, generated percent relative average deviation of 1.504%. The results were compared with other equations and the comparison indicates that the proposed method provide more accurate results than other methods used in this work.

**Keywords:** Vapor pressure, pure substances, hydrocarbons.

Como citar este artículo:

L. F. Cardona Palacio, "Nuevo modelo simple y generalizado para estimar la presión de vapor de hidrocarburos ligeros". *Ingeniare*, N<sup>o</sup>. 20, pp. 63-74, 2016.

\* Magíster en Ingeniería y Magíster en Matemáticas Aplicadas. Docente investigador. Grupo de Investigación SISCO. Fundación Universitaria Luis Amigó. Medellín Colombia, [luis.cardonapa@amigo.edu.co](mailto:luis.cardonapa@amigo.edu.co)

## 1. INTRODUCCIÓN

La estimación de la presión de vapor es esencial en la industria petroquímica debido a que se requiere para cálculos de equilibrios de fase en sistemas multicomponentes [1]. Por otro lado, su conocimiento es esencial en el diseño de diferentes equipos de ingeniería como refrigeradores, compresores, aire acondicionado, entre otros [2]. Es así como la presión de vapor juega un papel importante en las simulaciones numéricas de procesos de combustión, en los que cambios significativos de esta propiedad dan como resultado cambios en la atomización de combustible, velocidad de evaporación, procesos de formación de emisiones de contaminantes, entre otros [3]. Por tal motivo, existe un gran interés en la ingeniería sobre la medición y correlación de los valores de esta propiedad.

Diferentes ecuaciones para el cálculo de la presión de vapor están reportados en la literatura científica; dentro de los más conocidos se encuentran: Clausius, Antoine, Frost–Kalkwarf, Cox, Gomez–Thodos, Lemmon–Goodwin, Lee–Kesler, Wagner, Ambrose–Walton, Riedel, Lemmon–Goodwin [4], Sanjari [3], Sanjari et al., Mejbri- Bellagi [4].

La ecuación más común es la de Antoine de tres parámetros; sin embargo, es válida en un rango limitado de temperatura. Las ecuaciones de Gomez-Thodos y Lee-Kesler dependen de las propiedades de la sustancia como temperatura crítica, presión crítica y factor acéntrico, no obstante, no se describe la región cercana al punto crítico [5]. Por otro lado, la ecuación de Wagner con cuatro parámetros y dependiente de la presión crítica y temperatura crítica es considerada una gran contribución en los modelos de presión de vapor, porque representa con una gran precisión los datos experimentales de un gran número de sustancias, en el rango de coexistencia líquido-vapor desde el punto triple hasta el punto crítico [6], mientras que [3] y [7], son ecuaciones que dependen de un gran número de constantes por sustancia y carecen de generalización.

Se propuso un nuevo modelo para el cálculo de la presión de vapor de hidrocarburos de bajo peso molecular. A partir de datos experimentales de la línea de saturación líquido-vapor de 19 hidrocarburos y mediante el algoritmo de [8], el cual minimiza la suma de los cuadrados de las desviaciones relativas de la presión de vapor, se determina parámetros y constantes propias del modelo y se generaliza utilizando el factor acéntrico. Se comparan los resultados con las ecuaciones de [6], [9], [3], [7], [9] y [10].

## 2. NUEVA ECUACIÓN PROPUESTA PARA LA PREDICCIÓN DE LA PRESIÓN DE VAPOR Y FUNCIÓN OBJETIVO

Un nuevo modelo para el cálculo de la presión de vapor de hidrocarburos ligeros es propuesto en la ecuación 1.

$$\ln P_{vpr} = \frac{A\tau + B\tau^3 + C\tau^5}{1 - \tau} \quad (1)$$

Donde  $P_{vpr}$  es la presión de vapor reducida, calculada como  $P_r = P/P_c$ ,  $\tau = 1 - T_r$ , donde  $T_r$  es la temperatura reducida que se calcula como  $T_r = T/T_c$  y los coeficientes A, B y C son parámetros.

Se realiza una búsqueda de los valores de presión crítica, temperatura crítica, factor acéntrico [6] y datos experimentales del equilibrio líquido-vapor de 19 hidrocarburos de bajo peso molecular [11]. Posteriormente, utilizando la ecuación 1 y el algoritmo propuesto por Ladson et al. [8], con la función objetivo a minimizar dada por la ecuación 2, se obtuvo los coeficientes A, B y C para 19 hidrocarburos analizados en la Tabla 1.

$$F.O(A, B, C) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{P_{i,exp} - P_{i,calc}}{P_{i,exp}} \right)^2 \quad (2)$$

Donde N es el número de datos experimentales,  $P_{i,exp}$  es la presión de vapor experimental [11] y  $P_{i,cal}$  son los valores calculados por la ecuación 1, para un valor de temperatura.

Tabla 1. Propiedades fisicoquímicas y constantes A, B y C de la ecuación 1 para 19 hidrocarburos

Sustancia	Tc (K)	Pc (kPa)	$\omega$	Rango de Tr experimental	A	B	C
Metano	190.56	4599.2	0.01142	0.4759-1.000	-5.4690	0.8528	-2.8620
Eteno	282.35	5041.7	0.089	0.3683-1.000	-5.8497	0.3639	-2.9379
Etano	305.33	4871.8	0.0993	0.2959-1.000	-5.9000	0.2990	-2.9574
Ciclo propano	398.3	5568.9	0.13	0.6854-1.000	-6.0497	0.1054	-3.0284
Propeno	365.57	4664.6	0.144	0.2735-1.000	-6.1178	0.0171	-3.0673
Propano	369.82	4247.7	0.1524	0.2311-1.000	-6.1587	-0.0358	-3.0926
Butano	425.13	3796	0.201	0.3173-1.000	-6.3943	-0.3424	-3.2675
2,2-Dimetil propano	433.74	3196.3	0.197	0.5916-1.000	-6.3749	-0.3172	-3.2513
2-Metil butano	460.35	3375.7	0.227	0.2447-1.000	-6.5199	-0.5065	-3.3812
Benceno	562.05	4901.2	0.212	0.4959-1.000	-6.4474	-0.4118	-3.3139
Pentano	469.7	3371	0.251	0.3055-1.000	-6.6355	-0.6579	-3.4986
Metilbenceno	591.75	4126.4	0.263	0.3008-1.000	-6.6932	-0.7337	-3.5618
2-Metil pentano	497.7	3042.6	0.278	0.2403-1.000	-6.7653	-0.8284	-3.6449
Hexano	507.82	3042.9	0.299	0.3502-1.000	-6.8660	-0.9610	-3.7692
Heptano	540.13	2731.1	0.349	0.3380-1.000	-7.1050	-1.2768	-4.1018
Octano	569.32	2497.8	0.398	0.3800-1.000	-7.3380	-1.5864	-4.4780
Nonano	594.55	2282	0.445	0.3695-1.000	-7.5605	-1.8835	-4.8856
Decano	617.7	2101.4	0.489	0.3942-1.000	-7.7678	-2.1618	-5.3086
Dodecano	658.1	1817.6	0.575	0.4005-1.000	-8.1704	-2.7060	-6.2513

Fuente: Elaboración de los autores

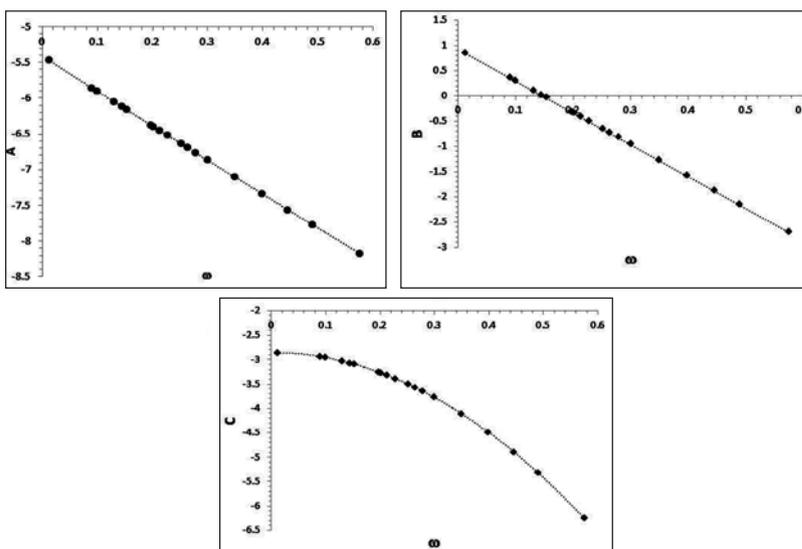
De la Tabla 1, los parámetros A, B y C se correlacionaron utilizando el factor acéntrico ( $\omega$ ), tal como se muestra en las ecuaciones 3, 4 y 5, de esta manera se logra generalizar para ser utilizado en cualquier sustancia pura.

$$A = 0.2336\omega^2 - 4.9304\omega - 5.4127 \quad (3)$$

$$B = -0.0273\omega^2 - 6.2985\omega + 0.9247 \quad (4)$$

$$C = -10.36\omega^2 + 0.0613\omega - 2.8613 \quad (5)$$

Las ecuaciones 3, 4 y 5 son ilustradas en la Figura 1. Los coeficientes de correlación de los parámetros A, B y C son de 0.995, 0.999, 0.9999 respectivamente.



**Figura 1. Constantes A, B y C de la ecuación 1, en función del factor acéntrico de 19 hidrocarburos (—valores de la Tabla 1, —valores de las ecuaciones 3, 4 y 5)**

Fuente: Elaboración de los autores

Se evalúa el modelo propuesto por la ecuación 1 y las constantes dadas por las ecuaciones 3, 4 y 5 en 54 sustancias puras, las cuales no participaron en el proceso de minimización y utilizando el criterio de comparación con los datos experimentales del *webbook* de la NIST [11] por medio del porcentaje de error promedio estándar (AARD%), porcentaje de desviación relativa absoluta (ARD%), y la desviación de la raíz cuadrada media (RMSD), y se calculan de acuerdo con las ecuaciones 6, 7 y 8 [3].

$$AARD\% = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{P_{i,exp} - P_{i,calc}}{P_{i,exp}} \right| \times 100 \quad (6)$$

$$ARD\% = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{P_{i,exp} - P_{i,calc}}{P_{i,exp}} \right) \times 100 \quad (7)$$

$$RMSD = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^N \left( \frac{P_{i,exp} - P_{i,calc}}{P_{i,exp}} \right)^2} \times 100 \quad (8)$$

Se compara con ecuaciones para el cálculo de presión de vapor como: [6], [9], [3], [7], [9] y [10], determinando el porcentaje de error promedio estándar (AARD%).

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A partir de las propiedades de cada sustancia como la temperatura crítica, presión crítica, factor acéntrico y las constantes obtenidas del proceso de minimización de los 19 hidrocarburos reportados en la Tabla 1, se correlacionó con el factor acéntrico generando las ecuaciones 3, 4 y 5; de esta manera se logra generalizar para ser utilizado en cualquier sustancia pura. Con el fin de realizar una validación al modelo generalizado, se evaluó en 54 sustancias puras entre las que se destacan hidrocarburos, alcoholes, refrigerantes, sustancias inorgánicas y gases nobles. Los datos experimentales y propiedades fisicoquímicas de las 54 sustancias puras que no participaron en el proceso de minimización fueron obtenidos de la literatura científica [6], [11].

Los resultados se evidencian en la Tabla 2, en la que se presenta el rango de temperatura reducida trabajada en la investigación [11] y las constantes A, B y C correlacionadas por las ecuaciones 3, 4 y 5.

**Tabla 2. Constantes de la ecuación 1 en 54 sustancias puras**

Sustancia	Tc (K)	Pc (kPa)	$\omega$	Rango de Tr experimental	A	B	C
Hidrógeno	33.145	1296.5	-0.219	0.4211-1.0000	-4.3217	2.3028	-3.3716
Oxígeno	154.58	5042.8	0.025	0.3517 -1.0000	-5.5358	0.7672	-2.8662
Nitrógeno	126.19	3395.8	0.039	0.5004-1.0000	-5.6046	0.6790	-2.8747
Monóxido de carbono	132.86	3498.2	0.066	0.5130 -1.0000	-5.7371	0.5089	-2.9024
2,2-Dimetil propano	433.74	3196.3	0.197	0.5916 -1.0000	-6.3749	-0.3172	-3.2513
Azano	405.4	11339	0.25	0.4822 -1.0000	-6.6307	-0.6516	-3.4935
Agua	647.1	22064	0.344	0.6000 -1.0000	-7.0811	-1.2452	-4.0662
Metanol	512.6	8104	0.5625	0.5600 -1.0000	-8.1121	-2.6268	-6.1048
Tetrafluorometano	227.51	3775.8	0.1785	0.4349 -1.0000	-6.2853	-0.2005	-3.1805
1,1,1,3,3-Pentafluoropropano	427.2	3636.6	0.3724	0.4682 -1.0000	-7.2164	-1.4246	-4.2752
Tricloromonofluorometano	471.11	4407.6	0.18875	0.3453 -1.0000	-6.3350	-0.2651	-3.2188
Diclorodifluorometano	385.12	4136.2	0.17948	0.3015 -1.0000	-6.2901	-0.2066	-3.1840
Clorotrifluorometano	302	3879	0.1723	0.3046 -1.0000	-6.2553	-0.1613	-3.1583
Dicloromonofluorometano	451.48	5184.2	0.2061	0.4430 -1.0000	-6.4189	-0.3746	-3.2887
Clorodifluorometano	369.3	4990	0.22082	0.3134 -1.0000	-6.4900	-0.4675	-3.3529

(Continúa)

Sustancia	Tc (K)	Pc (kPa)	$\omega$	Rango de Tr experimental	A	B	C
Trifluorometano	299.29	4831.7	0.263	0.3943 -1.0000	-6.6932	-0.7337	-3.5618
Difluorometano	351.25	5782.6	0.263	0.3882 -1.0000	-6.6932	-0.7337	-3.5618
Fluorometano	317.28	5897	0.2012	0.5516-1.0000	-6.3952	-0.3437	-3.2684
1,1,2-Tricloro-1,2,2-trifluoroetano	487.21	3392.3	0.25253	0.4863 -1.0000	-6.6429	-0.6676	-3.5065
1,2 Dicloro-1,1,2,2-tetrafluoroetano	418.83	3251.6	0.2523	0.6522 -1.0000	-6.6418	-0.6661	-3.5053
Cloropentafluoretano	418.83	3251.6	0.252	0.4149 -1.0000	-6.6403	-0.6643	-3.5038
Hexafluoretano	293.03	3047.7	0.257	0.5907 -1.0000	-6.6644	-0.6958	-3.5298
1,1,1- Trifluoro 2,2- dicloroetano	456.83	3661.9	0.28192	0.3634 -1.0000	-6.7841	-0.8531	-3.6674
1-Cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetano	395.43	3624.3	0.2881	0.3035 -1.0000	-6.8138	-0.8922	-3.7035
Pentafluoroetano	339.17	3617.9	0.3052	0.5087 -1.0000	-6.8957	-1.0001	-3.8076
1,1,1,2-Tetrafluoroetano	374.21	4059.1	0.32684	0.4539 -1.0000	-6.9992	-1.1368	-3.9480
1,1-Dicloro-1-fluoroetano	477.5	4211.7	0.22	0.3554 -1.0000	-6.4861	-0.4623	-3.3492
1-Cloro-1, 1-difluoroetano	410.26	4054.8	0.232	0.3479 -1.0000	-6.5440	-0.5380	-3.4047
1,1,1-Trifluor etano	345.86	3761.8	0.2615	0.4665 -1.0000	-6.6860	-0.7242	-3.5537
1,1,-Difluoroetano	386.41	4516.8	0.27521	0.4000 -1.0000	-6.7519	-0.8108	-3.6291
Octafluoropropano	345.02	2640.2	0.317	0.3636 -1.0000	-6.9522	-1.0747	-3.8829
1,1,1,2,3,3,3- Heptafluoropropano	375.95	2999.1	0.354	0.3893 -1.0000	-7.1288	-1.3084	-4.1379
1,1,1,3,3,3-Hexafluoro propano	398.07	3200	0.37721	0.4510 -1.0000	-7.2393	-1.4550	-4.3123
1,1,1,2,3,3-Hexafluoropropano	412.44	3356.4	0.3794	0.3893 -1.0000	-7.2497	-1.4689	-4.3293
1,1,2,2,3-Pentafluoropropano	447.57	3927.6	0.3536	0.4469 -1.0000	-7.1269	-1.3059	-4.1350
Octafluorociclobutano	388.38	2778	0.3553	0.6008 -1.0000	-7.1350	-1.3166	-4.1473
Para Hidrógeno	32.938	1283.8	-0.218	0.4190 -1.0000	-4.3268	2.2965	-3.3670
Deuterio	38.34	1647.6	-0.175	0.4880 -1.0000	-4.5427	2.0261	-3.1893
Flúor	144.41	5239.4	0.0449	0.3703 -1.0000	-5.6336	0.6418	-2.8794
Óxido nitroso	309.52	7244.7	0.162	0.5891 -1.0000	-6.2053	-0.0964	-3.1233
Óxido de deuterio	643.89	21660	0.364	0.4302 -1.0000	-7.1764	-1.3716	-4.2116
Helio	5.1953	226.37	-0.382	0.4190 -1.0000	-3.4952	3.3267	-4.3965
Neón	44.492	2678.6	-0.0387	0.5521 -1.0000	-5.2215	1.1684	-2.8792
Argón	150.69	4863	-0.00219	0.5561 -1.0000	-5.4019	0.9385	-2.8615
Criptón	209.48	5525.5	-0.0009	0.5527 -1.0000	-5.4083	0.9304	-2.8614
Xenón	289.73	5842	0.00363	0.5571 -1.0000	-5.4306	0.9018	-2.8612
Trifluoruro de nitrógeno	234	4460.7	0.126	0.3632 -1.0000	-6.0302	0.1307	-3.0181
Decafluorobutano	386.33	2329	0.374	0.4892 -1.0000	-7.2240	-1.4348	-4.2875
Decafluoropentano	420.56	2036.8	0.423	0.4756 -1.0000	-7.4565	-1.7445	-4.6891
Dióxido de azufre	430.64	7875.3	0.2557	0.4591 -1.0000	-6.6581	-0.6876	-3.5230
Ácido sulfhídrico	373.1	8998.7	0.1	0.5031 -1.0000	-5.9034	0.2946	-2.9588
Hexafluoruro de azufre	318.73	3753.9	0.21	0.6977 -1.0000	-6.4378	-0.3992	-3.3053
Sulfuro de carbonilo	378.77	6368.8	0.0978	0.3546 -1.0000	-5.8927	0.3084	-2.9544
Ciclo Hexano	553.54	4075	0.212	0.5047-1.0000	-6.4474	-0.4118	-3.3139

Fuente: Elaboración de los autores

Posteriormente, se realiza una comparación de diferentes modelos para el cálculo de la presión de vapor como las ecuaciones de [6], [9], [3], [7], [9] y [10], determinando el porcentaje de error promedio estándar (AARD%) [11], tal como se muestra en la Tabla 3.

**Tabla 3. Porcentaje de error promedio estándar (AARD%) de los valores obtenidos por la ecuación 1 de 73 sustancias puras, en comparación con otros modelos**

Sustancia	Lee-Kesler	Riedel	Sanjari	Wagner	Ambrose-Walton	Sanjari et al.	Ecuación 1
Helio	6.22	4.87	0.47	2.16	8.84	———	3.19
Hidrógeno	0.06	2.14	0.04	1.46	1.86	———	2.40
para-Hidrógeno	0.29	1.11	0.05	1.77	1.61	———	2.29
Deuterio	2.77	2.21	1.1	2.48	3.52	———	1.16
Neón	0.41	0.62	0.04	0.18	0.1	———	1.40
Argón	0.17	0.2	0.03	0.32	0.25	———	1.14
Kriptón	0.2	0.35	0.04	0.25	0.12	———	1.17
Xenón	0.14	1.07	0.04	0.29	0.19	———	1.18
Metano	0.73	0.71	0.04	0.22	0.08	———	1.26
Oxígeno	1.44	1.04	0.05	0.62	0.64	———	1.86
Nitrógeno	0.64	0.48	0.23	0.4	0.29	———	0.79
Flúor	2.38	0.78	1.33	4.36	3.36	———	2.14
Monóxido de carbono	3.33	0.39	0.14	2.58	3.03	———	2.38
Eteno	1.05	1.57	0.05	1.72	0.78	———	1.09
Sulfuro de carbonilo	1.06	1.62	0.09	2.49	0.78	———	1.67
Etano	1.79	1.71	0.06	0.6	1.48	———	1.98
Ácido sulfhídrico	0.36	0.36	0.03	0.8	0.16	———	1.06
Trifluoruro de nitrógeno	1.49	0.78	0.1	1.03	1.01	———	0.60
Ciclo propano	0.08	0.9	0.2	0.11	0.16	———	1.02
Propeno	2.34	3.87	0.22	1.35	2.01	———	1.11
Propano	3.62	7.35	0.18	1.35	2.38	———	1.73
Óxido nitroso	0.14	0.18	0.04	0.43	0.16	———	0.84
Clorotrifluorometano	2.27	4.18	0.07	3.66	0.65	0.66	1.10
Tetrafluorometano	2.14	3.63	0.11	2.36	1.05	1.27	1.78
Diclorodifluorometano	1.65	1.34	0.68	1.06	1.16	0.49	1.04
Triclorofluorometano	1.21	1.95	1.21	2.02	0.78	0.53	1.66
2,2-Dimetil propano	0.24	0.16	0.05	0.3	0.24	———	0.71
Fluorometano	2.72	1.63	0.05	0.43	3.3	0.88	1.60
n-Butano	1.54	1.46	0.06	0.8	1.2	———	1.79
Dicloromonofluorometano	0.19	0.63	0.16	1.85	0.35	1.22	1.73
Hexafluoruro de azufre	0.53	0.18	0.04	0.39	0.32	———	1.38
Ciclo Hexano	0.7	0.28	0.03	0.83	0.54	———	0.86

(Continúa)

Sustancia	Lee-Kesler	Riedel	Sanjari	Wagner	Ambrose-Walton	Sanjari et al.	Ecuación 1
Benceno	0.5	0.86	0.15	0.95	0.32	—	1.08
1,1-Dicloro-1-fluoroetano	1.68	3.28	0.17	3.68	0.91	1.2	3.39
Clorodifluorometano	1.81	3.19	0.08	1.64	1.89	0.91	1.41
2-Metil Butano	4.39	7.7	0.64	1.33	3.41	—	0.86
1-Cloro-1, 1-difluoroetano	1.4	1.94	0.05	1.74	1.33	1.2	1.66
Dióxido de carbono	1.51	1.76	0.03	1.71	1.77	—	1.08
Azano	2.05	1.72	0.08	1.11	1.69	—	1.68
Cloropentafluorometano	2.47	2.31	0.05	0.53	3.76	0.53	1.22
n-Pentano	2.92	1.18	0.05	0.23	2.64	—	0.92
1,2 Dicloro-1,1,2,2-tetrafluoroetano	0.21	0.17	0.16	0.16	0.23	0.27	0.80
1,1,2-Tricloro-1,2,2-trifluoroetano	0.68	0.35	0.04	0.84	0.35	1.01	0.98
Dióxido de azufre	1.08	0.48	0.1	0.75	0.78	—	0.83
Hexafluorometano	0.53	0.43	0.06	0.16	0.27	0.32	0.93
1,1,1,2-Tetrafluoroetano	2.4	1.47	0.04	0.8	2	0.69	1.78
Trifluorometano	3.59	1.68	0.05	1.4	3.48	3.61	1.52
Tolueno	2.66	5.67	—	2.28	2.34	—	2.15
1,1-Difluoroetano	3.82	1.91	0.05	1.68	3.69	1.61	2.60
Difluorometano	3.27	3.23	0.05	2.42	3.4	3.61	2.61
2-Metil pentano	4.95	14.19	0.18	1.48	3.97	—	1.23
1,1,1- Trifluoro 2,2- dicloroetano	1.26	2.49	0.04	2.27	0.75	2.4	2.34
1-Cloro-1,2,2,2-tetrafluoroetano	2.26	5.42	0.08	2.46	1.74	2.19	2.41
n-Hexano	2.58	1.18	0.32	0.64	3.27	—	1.11
Pentafluoroetano	0.8	0.3	0.04	0.48	0.57	—	0.72
Octafluoropropano	1.38	1.39	0.1	1.13	1.88	—	1.35
1,1,1,2- Tetrafluoroetano	1.7	0.6	0.04	0.09	1.49	0.69	0.82
Agua	7.32	4.22	0.08	5.62	7.18	—	1.80
n-Heptano	1.81	2.65	0.18	0.49	2.97	—	0.86
1,1,2,2,3-Pentafluoropropano	1.83	0.64	0.07	0.18	1.62	0.32	0.94
1,1,1,2,3,3,3- Heptafluoropropano	1.26	2.04	0.07	1.53	1.07	0.86	1.94
Octafluorociclobutano	0.13	0.23	0.07	0.49	0.24	0.58	0.63
1,1,1,2,3,3,3-Hexafluoropropano	3.33	0.76	4.16	3.34	3.49	0.28	2.72
Óxido de deuterio	6.25	3.3	0.07	4.53	5.91	—	1.97
1,1,1,3,3,3-Pentafluoropropano	0.3	2.07	0.09	1.64	0.32	0.32	1.57
Decafluorobutano	0.42	0.92	0.24	1.3	0.45	—	1.27
1,1,1,3,3,3-Hexafluoro Propano	0.57	0.79	0.16	1.18	0.42	1.12	1.54
n-Octano	1.88	1.26	0.1	0.53	2.82	—	0.83
Decafluoropentano	8.13	3.96	0.41	9.28	7.82	—	3.99
n-Nonano	1.96	1.84	0.15	0.68	3.04	—	1.12

(Continúa)

Sustancia	Lee-Kesler	Riedel	Sanjari	Wagner	Ambrose-Walton	Sanjari et al.	Ecuación 1
n-Decano	1.56	1.31	0.15	0.69	2.38	—	0.86
Metanol	19.56	17.06	0.25	19.3	20.21	—	2.29
n-Dodecano	1.37	3.32	0.11	0.85	1.45	—	0.86
Promedio	2.10	2.21	0.22	1.70	2.08	1.11	1.50

Fuente: Elaboración de los autores

De la Tabla 2 el rango de temperatura reducida está aproximadamente desde 0.3 hasta 1.0, lo que demuestra que la nueva ecuación propuesta modela las regiones cercanas al punto crítico con una gran precisión. Por otro lado, en la Tabla 3 se muestra los valores de AARD% para los modelos evaluados en la presente investigación, donde la nueva ecuación propuesta representa un buen ajuste para todas las sustancias con desviaciones menores al 3.39%.

En la Tabla 4 se presenta un resumen estadístico de las 73 sustancias analizadas en el presente artículo.

**Tabla 4. Resumen estadístico de la ecuación 1 y otros modelos para el cálculo de la presión de vapor**

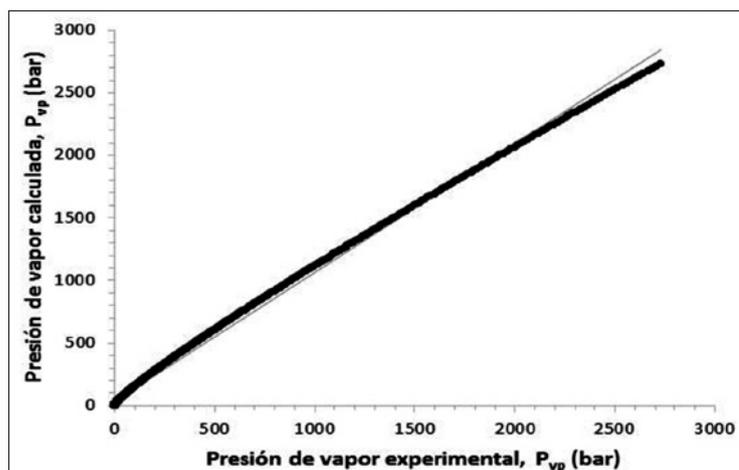
	AARD %	ARD %	RMSD
Ecuación 1	1.5041%	-0.4161%	0.0119
Ecuación de Wagner	1.4317%	-0.3193%	0.0151
Método de Lee-Kesler	2.8103%	0.7493%	0.0140
Ecuación de Sanjari	0.2541%	-0.0269%	0.0009
Ecuación de Riedel	2.2062%	-1.1622%	0.0171
Ecuación de Ambrose-Walton	1.9434%	0.9385%	0.03259
Ecuación de Sanjari et al.	0.9949%	-0.0110%	0.0062

Fuente: Elaboración de los autores

De la Tabla 4, la ecuación de Sanjari presentan el menor porcentaje de error relativo en comparación con otros modelos evaluados en el presente artículo, sin embargo, es una ecuación que presentan un gran número de constantes por sustancia y no se realiza generalización, de igual manera la ecuación de Sanjari que es aplicable a sustancias refrigerantes. Por otro lado, la ecuación de Wagner con cuatro parámetros se aplicó utilizando los valores reportados por [6] y presenta desviaciones relativas promedio del 1.4317%, en comparación con la ecuación 1 propuesta en la presente investigación de tres parámetros A, B y C que dependen del factor acéntrico y presenta desviaciones relativas promedio del 1.5041%, siendo un modelo aplicable no solo para hidrocarburos de bajo peso molecular sino también para cualquier sustancia pura.

A partir de la Tabla 4 se observa que la magnitud global de los valores de RMSD es de relativo bajo orden de magnitud ( $\leq 0.0119$ ), y se establece que los resultados simulados, utilizando el nuevo modelo propuesto, se ajustan a los valores encontrados experimentalmente, validándose así dicho modelo.

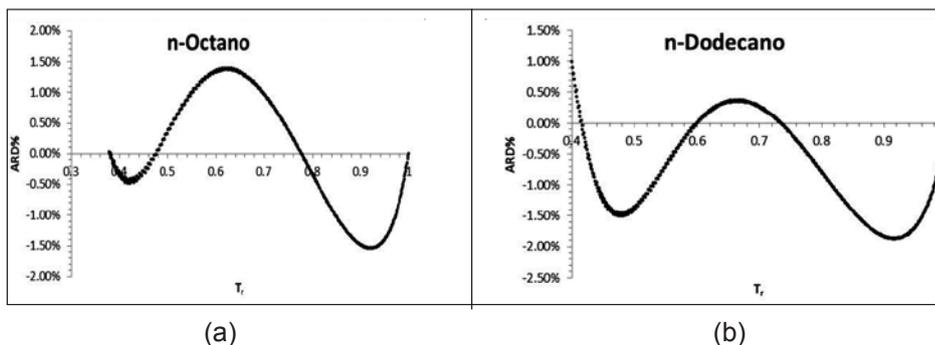
La Figura 2 muestra la comparación de las presiones de vapor experimental y los predichos por el nuevo modelo para el n-heptano, en donde este presenta una gran predicción de los datos experimentales con un coeficiente de correlación del 0.9985.



**Figura 2. Exactitud del modelo propuesto en la ecuación 1, frente a los datos experimentales del n-Heptano**

Fuente: Elaboración de los autores

En la Figura 3 se muestra el porcentaje de desviación relativa (ARD%), en la predicción de las presiones de vapor descrita en la ecuación 1, con los datos experimentales para el n-Octano y n-Dodecano, donde se evidencia que la desviación relativa varía entre -1.20% a 0.40%.



**Figura 3. Comparación del porcentaje de desviación relativa (ARD%) y el modelo propuesto por la ecuación 1 para las sustancias (a) n-Octano y (b) n-Dodecano**

Fuente: Elaboración de los autores

#### 4. CONCLUSIONES

Un nuevo modelo es propuesto para el cálculo de la presión de vapor de hidrocarburos de bajo peso molecular aplicable en un amplio rango de temperatura. El nuevo modelo presenta tres parámetros, los cuales fueron determinados utilizando el algoritmo de Ladson, y se lograron correlacionar utilizando el factor acéntrico con el fin de generalizarlo para ser utilizado en cualquier sustancia pura, obteniendo porcentajes de error promedio estándar entre 0.6% a 3.99%.

Diferentes ecuaciones utilizadas en la literatura científica para estimar la presión de vapor fueron evaluadas, obteniendo errores de predicción aceptables usando los modelos de Lee-Kesler, Wagner, Sanjari, Sanjari et al., Riedel, Ambrose–Walton aplicados en un amplio rango de temperatura, no obstante, el modelo propuesto en el presente artículo genera una desviación del 1.5041% de las 73 sustancias que se analizaron en la investigación.

Se logró mostrar que el nuevo modelo propuesto en la investigación es aplicable en un amplio rango de temperatura, incluso modela la región cercana al punto crítico, no solo de hidrocarburos ligeros sino también en sustancias polares y no polares, con porcentajes de desviación relativa que varían entre -1.20% a 0.20%.

#### REFERENCIAS

- [1] H. An and W. Yang, "A new generalized correlation for accurate vapor pressure prediction," *Chem Phys Lett*, vol. 543, pp. 188-192, Ago. 2012.
- [2] A. Mohebbi, M. Taheri, and A. Soltani, "A neural network for predicting saturated liquid density using genetic algorithm for pure and mixed refrigerants," *Int J Refrig*, vol. 31, n° 8, pp. 1317-1327, Dic. 2008.
- [3] E. Sanjari, "A new simple method for accurate calculation of saturated vapor pressure," *Thermochim Acta*, vol. 560, pp. 12-16, May. 2013.
- [4] K. Mejbri and A. Bellagi, "Corresponding states correlation for the saturated vapor pressure of pure fluids," *Thermochim Acta*, vol. 436, n° 1–2, pp. 140-149, Oct. 2005.
- [5] E. D. Rogdakis and P. A. Lolos, "Simple generalized vapour pressure- and boiling point correlation for refrigerants," *Int J Refrig*, vol. 29, n° 4, pp. 632-644, Jun. 2006.
- [6] L. A. Forero G. and J. A. Velásquez J., "Wagner liquid–vapour pressure equation constants from a simple methodology," *J Chem Thermodyn*, vol. 43, n° 8, pp. 1235-1251, Ago. 2011.
- [7] E. Sanjari, M. Honarmand, H. Badihi, and A. Ghaheri, "An accurate generalized model for predict vapor pressure of refrigerants," *Int J Refrig*, vol. 36, n° 4, pp. 1327-1332, Jun. 2013.
- [8] L.S. Lasdon, A.D. Waren, A. Jain and M. Ratner, "Design and Testing of a Generalized Reduced Gradient Code for Nonlinear Programming", *ACM Trans. Math. Softw*, pp. 1-45, 1976.

- [9] R.C. Reid, J.M. Prausnitz and B.E. Poling, *The Properties of Gases and Liquids*. Nueva York, Estados Unidos de Norteamérica: McGraw-Hill, pp. 205-735, 1987.
- [10] L. Riedel, Kritischer Koeffizient, "Dichte des gesättigten dampfes und verdampfungswärme. unter-suchungen über eine erweiterung des theorems der übereinstimmenden zustände," *Teil III, Chem. Ing. Tech*, 26, pp. 679-683, 1954.
- [11] NIST Chemistry WebBook (2016). National Institute of Standards and Technology [en línea]. Dis-ponible en: <http://webbook.nist.gov>.