

"2010, Año de la Patria. Bicentenario del Inicio de la Independencia
y Centenario del Inicio de la Revolución"



SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR
DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR TECNOLÓGICA
INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CELAYA

SECRETARÍA DE
EDUCACIÓN PÚBLICA

SEP

Celaya, Gto., 2010-JUNIO-03

DEPTO. DE INGENIERÍA QUÍMICA
Oficio No. 146/2010

Asunto: Aprobación de Impresión
Tesis de MAESTRIA

DR. GUILLERMO GONZÁLEZ ALATORRE

JEFE DE DEPARTAMENTO DE ING. QUÍMICA
PRESENTE

De acuerdo con la convocatoria hecha por esa Jefatura a su cargo, con el fin de determinar la
Aprobación de Impresión del Proyecto de MAESTRIA, titulado:

**"MODELOS DE PREDICCIÓN DE LA TEMPERATURA DEL PUNTO FLASH PARA
COMPONENTES PUROS"**

El (la) **C. EDNA MELISSA VALENZUELA ACOSTA**, comunica a usted que esta Comisión
Revisora de Tesis ha tenido a bien aprobar la impresión de este trabajo.

Lo anterior, para los efectos consiguientes.

Atentamente
"La Técnica por un México Mejor"

Dr. Richard Vázquez Román
Presidente

Dr. Vicente Rico Ramírez
Secretario

Dr. Alejandro Estrada Baltazar
Vocal



SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA
DIRECCIÓN GENERAL DE
INSTITUTOS TECNOLÓGICOS
DEPTO. DE ING. QUÍMICA
TECNOLÓGICO DE CELAYA.



Av. Tecnológico y A. García Cubas S/N A.P. 57 C.P. 38010 Celaya, Gto.
Conmutador: 01 (461) 611 75 75 Fax: 611 79 79 e-mail: lince@itc.mx
www.itc.mx





INSTITUTO TECNOLÓGICO DE CELAYA

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“MODELOS DE PREDICCIÓN DE LA TEMPERATURA
DEL PUNTO *FLASH* PARA COMPONENTES PUROS”**

POR

EDNA MELISSA VALENZUELA ACOSTA

**TESIS PRESENTADA AL DEPARTAMENTO DE
INGENIERÍA QUÍMICA COMO REQUISITO
PARCIAL PARA OBTENER EL GRADO DE:**

**MAESTRO EN CIENCIAS
EN INGENIERÍA QUÍMICA**

CELAYA, GTO. JUNIO 2010

MODELOS DE PREDICCIÓN DE LA TEMPERATURA DEL PUNTO *FLASH* PARA COMPONENTES PUROS

Por:

Edna Melissa Valenzuela Acosta

Resumen

Los métodos de medición experimentales más comunes para determinar el punto *flash* son clasificados en copa abierta y copa cerrada, siendo la predicción del sistema de copa abierta unos pocos grados más altos que el sistema en copa cerrada. Debido a que no ha sido posible desarrollar una predicción teórica, los modelos existentes se basan en el ajuste de la información experimental. En este trabajo se ha propuesto la inclusión del calor de evaporación y el calor de reacción normales. Los modelos propuestos, considerando términos adimensionales en su expresión, han permitido reducir el error en la predicción de la temperatura del punto *flash* para componentes puros. Primeramente se observó que la relación entre la temperatura en el punto *flash* y la de ebullición tiende a ser una constante estimada para alcanos como 0.71 y 0.75 para otros componentes puros, produciendo errores absolutos promedio de 1.5% y 3.3%, para compuestos puros de cualquier tipo. Al incorporar las energías de evaporación y reacción se obtuvieron errores absolutos promedio para alcanos de 1.5% y, 1.8% para otros compuestos puros. Adicionalmente, se realizó una estimación por el método de contribución de grupos combinada con los modelos adimensionales para reducir el error en la predicción de la temperatura del punto *flash*, sólo para alcanos, a 1.4% sin usar las energías y 1.6% cuando se usaron los calores de evaporación y reacción. Se demuestra también que las propiedades requeridas en las ecuaciones propuestas pueden estimarse usando las ecuaciones de estado con algún simulador de procesos como ASPEN.

Dirigida por:

Dr. Richart Vázquez Román

Dedicatorias

A mis padres.

*Aarón Valenzuela Pulgarín
Ma. del Socorro Acosta Astorga*

A mis hermanos.

Aarón, Alonso, Omar, Jonathan

A mis tíos y primos.

*Nena, Sonia, María, Delia, Pancho, Jesús, Canuto, Angélica, Blanca, Nery, Uriel, Velia,
Anai, Maribel, Marisol, Fela, Josúe, Jairo, Adriana, Felipa*

A mi abuelo.

Francisco

A mi novio.

Enrique

A mis cuñadas

Celica y Gaby

A mis amigas y amigos de Durango.

*Adilene, Adriana, Bety, Yuri, Karla, Fatima, Saraí, Iris, Manuel, Issac, Crispin, Daniel
Adán, Pasiano, Gera*

A mis compañeros de grupo.

Cleme, Julio, Antíoco, Cristian, Juan, Efraín

Agradecimientos

A mi asesor Richart Vázquez Román, que fue parte esencial de este trabajo y de mi formación académica.

A mis sinodales, Vicente Rico y Alejandro Estrada, por el seguimiento de mi trabajo de tesis así como guías en mi carrera académica.

A Suhani Patel y M. Sam Mannan quienes fueron parte importante de este trabajo.

A los profesores del departamento de Ingeniería Química en la trayectoria de mis estudios de posgrado.

A Claudia, por su gran apoyo y desempeño administrativo.

A Texas A&M University por su apoyo en este trabajo.

A CONACyT por su apoyo económico.

Contenido

Resumen	ii
Dedicatorias	iii
Agradecimientos	iv
Contenido	v
Lista de figuras	vii
Lista de tablas	viii
1 Introducción	1
1.1 Antecedentes.....	1
1.2 Justificación.....	6
1.3 Objetivos.....	7
1.3.1 Objetivo general.....	7
1.3.2 Objetivos específicos.....	7
1.4 Descripción de la tesis.....	7
2 Antecedentes Teóricos	9
2.1 Proceso de combustión.....	9
2.2 Inflamabilidad.....	11
2.3 Límites de inflamabilidad.....	12
2.3.1 Limite de inflamabilidad dependiente de la Temperatura.....	13
2.3.2 Limite de inflamabilidad dependiente de la Presión.....	14

2.3.3 Mezclas de vapor.....	15
2.4 Determinación de punto <i>flash</i>	16
2.5 Estimación del punto <i>flash</i> a partir de correlaciones.....	20
2.5.1 Estimación del punto <i>flash</i> para componentes puros.....	22
2.5.2 Estimación del punto <i>flash</i> para alcanos.....	24
3 Predicción del punto <i>flash</i> para alcanos	28
3.1 Descripción de los modelos propuestos.....	28
3.2 Datos utilizados para análisis en este trabajo... ..	30
3.3 Modelos propuestos basados en correlaciones directas.....	33
3.4 Modelos propuestos basados en el método de contribución de grupos.....	40
3.5 Comparación de los modelos propuestos con modelos anteriores.....	47
3.5.1 Comparación de los modelos basados en correlaciones directas.....	47
3.5.2 Comparación de los modelos basados en el método de contribución de grupo.....	49
4 Predicción del punto <i>flash</i> para componentes puros	56
4.1 Descripción de los modelos propuestos aplicados a componentes puros.....	56
4.2 Modelos basados en correlaciones directas aplicados a componentes puros.....	58
4.3 Comparación de los modelos aplicados a componentes puros con modelos anteriores.....	85
5 Conclusiones	93
Trabajo futuro.....	95
Referencias	96

Lista de figuras

Figura 2.1: Triángulo de fuego.....	10
Figura 2.2: Relación entre diversas propiedades de inflamabilidad.....	14
Figura 2.3: Condiciones de las pruebas de vaso abierto y vaso cerrado.....	16
Figura 2.4: <i>Tag closed tester</i>	18
Figura 2.5: <i>Tag open-cup</i>	19
Figura 2.6: <i>Pensky-Martens closed</i>	19
Figura 2.7: <i>Cleveland open-cup tester</i>	20
Figura 3.1: Simulación en AspenPlus.....	31
Figura 3.2: (a) Comportamiento de T_f/T_b , (b) comportamiento respecto al peso molecular.....	33
Figura 3.3: Predicción de punto <i>flash</i> de 82 alcanos comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	36
Figura 3.4: Predicción de punto <i>flash</i> de 19 alcanos comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	38
Figura 3.5: Predicción de punto <i>flash</i> de 48 alcanos comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	39

Figura 3.6: Predicción de punto <i>flash</i> de 82 alcanos comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	43
Figura 3.7: Predicción de punto <i>flash</i> de 19 alcanos comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	45
Figura 3.8: Predicción de punto <i>flash</i> de 48 alcanos comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	46
Figura 4.1: Predicción de punto <i>flash</i> de 611 componentes puros comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	69
Figura 4.2: Predicción de punto <i>flash</i> con los datos ajustados para los 611 componentes puros comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	81
Figura 4.3: Predicción de punto <i>flash</i> de 58 componentes puros comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	83
Figura 4.4: Predicción de punto <i>flash</i> con los datos ajustados para 58 componentes puros comparada con punto <i>flash</i> experimentales.....	83

Lista de tablas

Tabla 2.1: Límites de inflamabilidad, auto ignición y punto <i>flash</i>	13
Tabla 2.2. Probadores de acuerdo a la ASTM.....	18
Tabla 2.3: Constantes para la ecuación 2.6.....	23

Tabla 2.4: Grupos funcionales en las moléculas de alcanos.....	24
Tabla 2.5: Predicción de punto <i>flash</i> para 15 alcanos.....	25
Tabla 2.6: Grupos funcionales de 44 alcanos.....	26
Tabla 2.7: Predicción de punto <i>flash</i> para 44 alcanos.....	26
Tabla 2.8: Grupos funcionales y Temperaturas efectivas para cada grupo.....	27
Tabla 3.1: Datos de los 48 alcanos.....	32
Tabla 3.2: Predicción de punto <i>flash</i> para 82 alcanos.....	34
Tabla 3.3: Predicción de punto <i>flash</i> para 19 alcanos.....	37
Tabla 3.4: Predicción de punto <i>flash</i> para 48 alcanos.....	38
Tabla 3.5: Grupos funcionales y parámetros para los 82 alcanos.....	41
Tabla 3.6: Predicción de punto <i>flash</i> para 82 alcanos.....	41
Tabla 3.7: Grupos funcionales y parámetros para los 19 alcanos.....	44
Tabla 3.8: Predicción de punto <i>flash</i> para 19 alcanos.....	44
Tabla 3.9: Predicción de punto <i>flash</i> para 48 alcanos.....	45
Tabla 3.10: Comparación de la temperatura de punto <i>flash</i> para 82 alcanos.....	47
Tabla 3.11: Comparación de la temperatura de punto <i>flash</i> para 48 alcanos.....	49

Tabla 3.12: Comparación de punto <i>flash</i> para 13 alcanos, con la ecuación (3.5) y el trabajo (Yong <i>et al.</i> , 2007b).....	50
Tabla 3.13: Comparación de punto <i>flash</i> para 6 alcanos, con la ecuación (3.5) y el trabajo (Yong <i>et al.</i> , 2007a).....	50
Tabla 3.14: Comparación de punto <i>flash</i> para 9 alcanos con la ecuación (3.6) y el trabajo (Yong <i>et al.</i> , 2007b).....	51
Tabla 3.15: Comparación de punto <i>flash</i> para 6 alcanos con la ecuación (3.6) y el trabajo (Yong <i>et al.</i> , 2007a).....	51
Tabla 3.16: Comparación de punto <i>flash</i> para 82 alcanos.....	51
Tabla 3.17: Comparación de punto <i>flash</i> para 48 alcanos.....	53
Tabla 3.18: Comparación de los cuatro modelos propuestos con ecuaciones anteriores....	54
Tabla 3.19: Comparación de los cuatro modelos propuestos con valores obtenidos en Aspen	55
Tabla 4.1: Datos para 58 componentes puros.....	57
Tabla 4.2: Predicción de punto <i>flash</i> para 611 componentes puros.....	59
Tabla 4.3: Predicción de punto <i>flash</i> con el ajuste de datos para 611 componentes puros..	70
Tabla 4.4: Predicción de punto <i>flash</i> para 58 componentes puros.....	82
Tabla 4.5: Predicción de punto <i>flash</i> con los datos ajustados para 58 componentes puros..	84

Tabla 4.6: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de alcoholes con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	85
Tabla 4.7: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de aminas con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	86
Tabla 4.8: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de ácidos con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	87
Tabla 4.9: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de éteres con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	88
Tabla 4.10: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de esterres con el modelo (3.3) y la correlación(2.6).....	89
Tabla 4.11: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de sulfuros con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	89
Tabla 4.12: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de cetonas con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	89
Tabla 4.13: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de halógenos con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	89
Tabla 4.14: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia de aldehídos con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	90
Tabla 4.15: Comparación de punto <i>flash</i> de la familia compuestos con nitrógeno con el modelo (3.3) y la correlación (2.6).....	90

Tabla 4.16: Comparación de punto <i>flash</i> por grupos con el modelo (3.4) y la correlación (2.6).....	91
--	----

Capítulo 1

Introducción

En este capítulo se describe el estado del arte sobre la predicción del punto *flash*, indicándose los métodos y ecuaciones existentes para su predicción en compuestos químicos puros y mezclas. Además, se describe la justificación para realizar esta investigación, describiendo los objetivos generales y específicos.

1.1 Antecedentes

El punto *flash* de un líquido inflamable es la temperatura a la que la presión de vapor del líquido es tal que produce una concentración de vapor en el aire que corresponde al límite inferior de inflamabilidad (LFL) (Lees, 1996). El punto *flash* se refiere a la condición de temperatura más baja en que se produce una combustión espontánea del compuesto en presencia de una fuente de ignición, aunque la combustión no se sostenga. Sin embargo, el sistema a estas condiciones puede llegar a iniciar un incendio o explosión por lo cual delimita las condiciones del proceso de combustión. Una mezcla no se quema cuando la composición es menor a la indicada por el límite inferior de inflamabilidad (LFL). Además, la mezcla tampoco se quema cuando la composición es muy alta lo que conlleva a otro límite denominado límite superior de inflamabilidad (UFL). Así, una mezcla es inflamable sólo cuando la composición está entre el LFL y el UFL (Crowl y Louvar, 2002a).

El punto *flash* es una propiedad que se obtiene mediante diferentes métodos, algunos experimentales y otros teóricos. La predicción del punto *flash* se realiza para componentes puros y mezclas. El punto *flash* experimental para varios componentes puros se encuentra reportado en la literatura. De igual manera, el punto *flash* experimental para mezclas

también se encuentra reportado en la literatura pero en un número más reducido de datos. En la determinación experimental del punto *flash* se utilizan aparatos en donde se realizan pruebas a vaso abierto y vaso cerrado. Estos aparatos tienen que estar aprobados por ciertas normas. Si se cuenta con la posibilidad de tener un aparato de éstos, la determinación del punto *flash* es relativamente fácil; en caso contrario, se tiene que estimar el punto *flash* haciendo uso de modelos teóricos o pseudoteóricos. En la determinación del punto *flash* con aparatos la lectura varía dependiendo de qué aparato sea. Las pruebas de vaso abierto reportan una lectura de algunos grados más arriba que las de vaso cerrado (Mannan *et al.*, 2005).

Una metodología para realizar las pruebas experimentales ha sido usada extensivamente desde hace varios años (Lance *et al.*, 1979). El aparato Seta-flash de vaso cerrado se utilizó para determinar experimentalmente el punto *flash* para 33 productos químicos y 3 productos derivados del petróleo (Kashiki, 1991). Dentro de los aparatos utilizados para la determinación de punto *flash*, se ha utilizado uno en particular llamado “Equilibrium closed bomb” en el cual se puede usar aire o bien oxígeno puro (Kong *et al.*, 2003). Es evidente que la medición del punto *flash* invariablemente contendrá errores experimentales. Debido a esto, la literatura reporta repeticiones en la medición para varios compuestos y mezclas. Por ejemplo, la medición reciente del punto *flash* del n-decanol indica que los valores reportados anteriormente tenían demasiado error lo cual podría ocasionar incidentes graves (Kwon *et al.*, 2008).

En general, el conocimiento del punto *flash* en diferentes áreas puede usarse como indicador del grado de seguridad en un proceso. Un caso de aplicación muy específica de la determinación del punto *flash* para mezclas es la predicción para combustible de aviación (Li *et al.*, 2009). Por otra parte, la medición del punto *flash* en equipos de vaso cerrado ha sido usada para determinar los parámetros binarios de los modelos de solución Wilson, NRTL, y UNIQUAC (Noorollahy *et al.*, 2010).

Dentro de los métodos teóricos con que se obtiene el punto *flash* existen varios trabajos realizados. Algunos de estos métodos consisten en ecuaciones empíricas propuestas para un

ajuste de la información experimental tanto para componentes puros como para mezclas. Así, el desarrollo de los métodos teóricos termina basándose en datos experimentales. Uno de estos trabajos propone una ecuación que ajusta los datos de la temperatura del punto *flash* con la temperatura de ebullición para 1221 componentes orgánicos y fracciones de petróleo (Satyanarayana y Rao, 1992). Un ajuste basado en datos experimentales para 1171 componentes con una ecuación multilineal conteniendo seis parámetros ha incluido información de la estructura molecular en la estimación del punto *flash* (Gharagheizi, 2009). La estimación de punto *flash* ha permitido verificar errores en los datos reportados como se indica en la reevaluación de los puntos *flash* de ciertos componentes orgánicos (Jones y Godefroy, 2002).

Dentro de los métodos de estimación de punto *flash* se encuentra la predicción con el método de estructura cuantitativa (QSPR). Este método de ajuste se aplicó para 271 componentes usando datos experimentales de temperaturas de ebullición (Katritzky *et al.*, 2001). Posteriormente se publicó una actualización donde se amplió la lista de componentes a 758 componentes orgánicos; además, se desarrolló un modelo no lineal basado en redes neuronales (Katritzky *et al.*, 2007). Otro trabajo reportado utilizando QSPR fue desarrollado para 1030 componentes en donde se obtuvo una ecuación utilizando descriptores moleculares (Gharagheizi y Alamdari, 2008).

Algunas investigaciones se han desarrollado para familias de compuestos como el caso de los alcanos. Por ejemplo, se analizaron 44 alcanos donde se utilizó contribución de grupos y redes neuronales para la predicción de punto *flash* (Yong *et al.*, 2007a). En este estudio se proponen 16 grupos funcionales. Además, en el mismo año se desarrolló un estudio para la predicción del punto *flash* para 92 alcanos en donde se combinó el QSPR usando contribución de grupos con redes neuronales (Yong *et al.*, 2007b). Posteriormente se publicó un estudio para la predicción de punto *flash* donde se utilizaron 79 grupos funcionales para 1378 componentes puros en donde se aplican también redes neuronales (Gharagheizi *et al.*, 2008). Por otro lado, se desarrolló un trabajo para la predicción de punto *flash* en alcanos basado principalmente en el número de carbonos del compuesto y en la temperatura de ebullición (Mathieu, 2010).

Una revisión de ecuaciones y métodos para estimar el punto *flash* concluye que las ecuaciones reportadas son válidas solo en las condiciones que se especifique en la correlación y es necesario tomar en cuenta los fenómenos de equilibrio termodinámico de vaporización (Vidal *et al.*, 2004). Comparando algunas ecuaciones reportadas en artículos anteriores para la predicción del punto *flash*, se observa que las ecuaciones dependen de temperaturas de ebullición, calor de combustión y de la familia que pertenece cada componente (Shebeko *et al.*, 1984).

En el caso de mezclas, es considerado que se pueden formar mezclas de solventes inflamables, mezclas en medio acuoso, mezclas parcialmente miscibles en las que se presentan dos fases líquidas y mezclas ideales. La predicción del punto *flash* depende de la concentración de la mezcla y de las condiciones en las que se encuentre la mezcla. Algunos trabajos han analizado experimentalmente soluciones acuosas-orgánicas como las mezclas agua+1-butanol; agua+2-butanol; agua+isobutanol; agua+1-pentanol; y agua+octano (Liaw *et al.*, 2008b). Los resultados de esta investigación revelan que no se debe ignorar la inmiscibilidad en dos fases líquidas para la predicción del punto *flash*.

Un modelo matemático se obtuvo para la estimación del punto *flash* que se aplicó a soluciones binarias ideales y no ideales utilizando puntos *flash* de los componentes individuales (Liaw *et al.*, 2002). Posteriormente se reporta un modelo matemático para soluciones binarias acuosa-orgánica en donde se utiliza el punto *flash* de los componentes inflamables de la solución (Liaw y Chiu, 2003). Considerando que la estimación de punto *flash* es muy importante para las medidas de seguridad de procesos industriales, se desarrolló un modelo para la predicción de punto *flash* para mezclas binarias de líquidos basándose métodos de análisis estadístico multivariado a través de mínimos cuadrados parciales (Kim y Lee, 2009).

Un modelo descrito por Liaw y Chiu, fue aplicado para mezclas miscibles ternarias acuosa-orgánica, agua + metanol + etanol obteniendo el punto *flash* a partir de los puntos *flash* de los componentes individuales (Liaw y Chiu, 2006). En mezclas parcialmente miscibles de

solventes inflamables se desarrolló un modelo para la predicción de puntos *flash* para las mezclas metanol + octano, metanol + decano, acetona + decano; metanol + 2,2,4-trimetilpentano y etanol + tetradecano (Liaw *et al.*, 2008c). Los resultados revelan que la inmiscibilidad en las dos fases líquidas no debe ser ignorada para predicción de punto *flash*.

En mezclas binarias un estudio para la predicción de punto *flash* muestra que el comportamiento mínimo de punto *flash* se manifiesta cuando el punto *flash* de la mezcla se encuentra por debajo del punto *flash* de los componentes individuales (Vidal. *et al.*, 2006). Para este estudio se aplicaron los métodos de cálculo cuántico químico (COSMO-RS), así como métodos teóricos tales como UNIFAC. Otro trabajo sobre el estudio del comportamiento mínimo de punto *flash* se reportó años atrás (Liaw *et al.*, 2003). Posteriormente, se desarrolló un trabajo en donde se estudia la eliminación del comportamiento mínimo del punto *flash* adicionando un tercer componente (Liaw *et al.*, 2008a). Por otra parte, un estudio demostró la existencia de comportamiento máximo de punto *flash* en soluciones binarias en donde se muestra que el valor de punto *flash* es mayor que el punto *flash* de cualquiera de los componentes individuales (Liaw y Lin, 2007). En este estudio se proponen ecuaciones para la predicción del máximo punto *flash* en soluciones binarias.

El punto *flash* se puede relacionar con diferentes estudios de mezclas binarias, como es el caso de un estudio de la volatilidad y punto *flash* de una mezcla pseudo-binaria de biodiesel + metilciclohexano a partir de girasol (Guo *et al.*, 2009). Otro estudio que relaciona el punto *flash* con la presión de vapor fue realizado para una mezcla binaria de triciclododecano y dimetil carbonato, en donde la determinación del punto *flash* se hizo con pruebas de vaso cerrado (Xing *et al.*, 2009). Por otro lado, se ha propuesto un modelo no lineal de predicción de punto *flash* para incluir el efecto de la disolución de sal en mezclas de solventes debido a que la adición de sales a un líquido puede reducir el riesgo de incendio y explosión (Liaw y Wang, 2007).

La estimación de punto *flash* ha sido estudiada desde hace varios años, los reportes encontrados son desde el año de 1979, como se describió anteriormente. Así como los

trabajos ya descritos, existen varios más que se enfocan en el estudio de la estimación y predicción de punto *flash* como los métodos teóricos y métodos experimentales. La estimación de punto *flash* es un tema de investigación que se puede estudiar más a fondo y aportar nuevas propuestas para su estimación y predicción. A continuación se describe la justificación de este trabajo.

1.2 Justificación

La medición del punto *flash* se lleva a cabo en condiciones ambientales ya que la mayoría de los incidentes que han surgido se presentan a condiciones ambientales. Es decir, los incidentes permiten que el material emitido entre en contacto con el aire ambiental. Algunos incendios y explosiones de líquidos relacionados con el punto *flash* han sido documentados. Por ejemplo, una explosión ocurrió en una columna de destilación donde se separaban líquidos de alto punto de ebullición cuyos puntos *flash* eran desde los 80°C hacia arriba (Kletz, 1975). Una serie de sucesos provocó que uno de los componentes de la mezcla llegara al punto *flash* generando la mezcla explosiva. Otro incidente en donde la mezcla manejada llegó a su punto *flash* ocasionando un incendio fue durante una demolición de tuberías. Al realizar los cortes de los tubos, la temperatura se elevó haciendo que los residuos contenidos en las tuberías se evaporaran hasta alcanzar la temperatura del punto *flash*, provocando un incendio y ocasionando quemaduras en el personal que se encontraba cerca (Kletz, 1975). Así como estos sucesos existen varios que han sido provocados a causa de la falta de conocimiento del punto *flash* los cuales también se encuentran documentados. Desafortunadamente, no todos los incidentes a causa del punto *flash* se encuentran reportados.

Así, la importancia de la predicción del punto *flash* es innegable por lo que surge el interés para desarrollar este proyecto. En este trabajo se aplica una estrategia de estimación del punto “*flash*” en componentes puros a partir de datos experimentales reportados en la literatura y algunos estimados con el simulador de procesos AspenPlus. El interés es estimar el punto *flash* para componentes puros y así tener datos que sean de utilidad para el manejo y control de las sustancias químicas en los procesos industriales. Una variable importante a controlar es la inflamabilidad de las sustancias químicas y para determinar su

límite inferior se utiliza el concepto del punto *flash*. Se considera que al obtener datos de punto *flash* para componentes puros podemos prevenir accidentes como son incendios y explosiones. El punto *flash* se encuentra normalmente reportado en la hoja técnica del componente químico y en manuales de uso de sustancias químicas, siendo de gran importancia en la seguridad en las industrias de procesos químicos.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

- Estimar el punto *flash* en componentes puros.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Definir las propiedades más convenientes a incluirse en los modelos de la predicción del punto *flash*.
- Desarrollar ecuaciones para la predicción de punto *flash* de alcanos con base a datos experimentales.
- Estimar el punto *flash* para alcanos utilizando el método de contribución de grupos añadiéndolo a los modelos propuestos.
- Extender los modelos propuestos al caso general.

1.4 Descripción de Tesis

El tema de investigación propuesto es de importancia dado que se utiliza en la mayoría de las industrias donde se ven involucradas sustancias químicas. Enseguida se describe el contenido de cada capítulo de la tesis realizada.

En el capítulo 1 describimos la introducción al tema de investigación, su justificación y especificamos los objetivos a desarrollar. Posteriormente, en el capítulo 2 de antecedentes teóricos se describen los temas de combustión, inflamabilidad, límites de inflamabilidad, determinación de punto *flash* con métodos experimentales y con métodos teóricos. En el capítulo 3 se describe la estimación de punto *flash* para alcanos por medio de diferentes

métodos y se proponen ecuaciones para la estimación de punto *flash* utilizando la temperatura de ebullición, el calor de reacción y el calor de vaporización, además, del método de contribución de grupos. En el capítulo 4 se describe la estimación de punto *flash* para componentes puros utilizando los modelos propuestos basados en correlaciones directas. En el capítulo 5 se describen las conclusiones a las que se llegó en este trabajo de investigación. Como una sección adicional se describe el trabajo futuro que se puede realizar a partir de este trabajo.

Capítulo 2

Antecedentes Teóricos

En este capítulo se revisan los antecedentes teóricos referentes al punto *flash*. Se describen los métodos experimentales para la determinación de punto *flash* así como los métodos teóricos para la predicción de punto *flash*, ambos para componentes puros y mezclas. Además, se mencionan investigaciones sobre la predicción de punto *flash* para la familia de los alcanos.

2.1 El proceso de combustión

La importancia de la seguridad en las industrias de procesos químicos se manifiesta de diversas formas como puede ser en el mantenimiento de los equipos de procesos, el entrenamiento de los empleados, una buena distribución de la planta de las instalaciones de la empresa o, una parte muy importante, en el manejo de sus materias primas y de las sustancias químicas que se utilizan para que se realice el proceso. En el manejo de las sustancias químicas utilizadas surgen diferentes sustancias las cuales se clasifican de diferentes formas como, por ejemplo, debido a su uso o a propiedades especiales como la corrosión. Un dato muy relevante para el manejo y almacenamiento de las sustancias es la inflamabilidad. En particular, una variable muy importante para determinar la inflamabilidad es el punto *flash* el cual fue definido en el capítulo anterior. El punto *flash* es una parte esencial del proceso de combustión y se presenta de manera instantánea al inicio de la combustión.

La combustión (o incendio) es una reacción química en la cual una sustancia se combina con el oxígeno liberando calor. Normalmente, el fuego se produce cuando una fuente de calor entra en contacto con un material combustible. Si un combustible líquido o sólido al

calentarse produce vapor con una concentración suficientemente alta en el aire, se forma una mezcla inflamable. Si la mezcla inflamable se calienta hasta un nivel de por lo menos su punto de ignición, la combustión comienza. En otras palabras, un gas combustible se quema si se calienta hasta alcanzar una temperatura suficientemente alta (Lees, 1996).

Hay tres condiciones esenciales para producir un incendio: (1) combustible, (2) oxígeno y (3) calor. Estas tres condiciones son representadas por el triángulo del fuego que se muestra en la Figura 2.1. Si una de las condiciones falta, el fuego no se produce; además, si uno de las condiciones se extrae, entonces el fuego se extingue.

Normalmente, el calor requerido es inicialmente suministrado por una fuente externa y luego producido por el proceso de combustión en sí mismo. La cantidad de calor necesaria para provocar la ignición depende de la forma de la sustancia. Un gas o vapor puede empezarse a quemar mediante una chispa o llama pequeña, mientras que un sólido puede requerir una fuente de calor más intenso (Lees, 1996).



Figura 2.1: Triángulo de fuego

2.2 Inflamabilidad

La Inflamabilidad es la medida de la facilidad que presenta un gas, líquido o sólido para encenderse y de la rapidez con que, una vez encendido, se diseminarán sus llamas. Cuanto más rápida sea la ignición, más inflamable será el material. Los líquidos inflamables no lo son por sí mismos en la condición líquida sino que lo son debido a que su vapor es combustible. Hay dos propiedades físicas de los materiales que indican su inflamabilidad: el punto *flash* y la volatilidad (determinada por el punto de ebullición). Enseguida se describe la información que se debe tener en cuenta para el etiquetado, manejo y almacenamiento de sustancias inflamables.

Las sustancias inflamables son etiquetadas previamente lo cual es necesario para su manejo y almacenamiento. La información necesaria de las sustancias inflamables se encuentra en las hojas de datos de seguridad de cada sustancia; ver, por ejemplo (Crowl y Louvar, 2002b). La información sobre la inflamabilidad de las sustancias se especifica en la sección de propiedades físicas donde aparece por ejemplo el punto de ebullición y el punto *flash*, entre otras.

El almacenamiento de las sustancias inflamables se encuentra relacionado con la parte de seguridad, la cual es una de las más importantes para los procesos en el sector industrial. Las medidas que se deben de tomar en cuenta para el almacenamiento de las sustancias inflamables se mencionan a continuación. Las sustancias inflamables no deben almacenarse cerca de ácidos. Las áreas de almacenamiento deben estar suficientemente frías para evitar que se llegue a su punto de ignición, esto en el caso de vapores que se mezclan con el aire. Las áreas deben estar bien ventiladas para evitar la acumulación de vapores. En las áreas de almacenamiento se debe tener material de limpieza en caso de que se presenten derrames y deben contar con equipo adecuado para incendios. Se deben revisar periódicamente estas áreas para detectar deficiencias y se recomienda almacenar las sustancias inflamables en cantidades mínimas. Las sustancias inflamables deben separarse en categorías dependiendo de su punto de ignición y su punto *flash* tomando en cuenta las especificaciones que se definen en la hoja de seguridad.

2.3 Límites de inflamabilidad

La quema de gas inflamable en el aire se encuentra sólo en un rango limitado de composiciones. Por debajo de una cierta concentración de gas inflamable, el límite inferior de inflamabilidad (LFL), la mezcla inflamable es demasiado “pobre”, mientras que por encima de una determinada concentración, el límite superior de inflamabilidad (UFL), la mezcla es demasiado “rica”. Las concentraciones entre estos límites constituyen el rango de inflamabilidad.

Los límites de inflamabilidad se ven afectados por la presión, la temperatura, dirección de propagación de la llama, el campo gravitacional y el entorno. Los límites son determinados experimentalmente. Las variaciones normales de la presión atmosférica no tienen ningún incremento apreciable sobre los límites de inflamabilidad. El efecto del mayor cambio de presión no es sencillo ni uniforme sino que es específico para cada mezcla. Una disminución en la presión por debajo de la atmosférica reduce el rango de inflamabilidad debido a que se eleva el LFL y reduce la UFL pudiendo llegar hasta la coincidencia donde la mezcla se convierte en no inflamable. Por otro lado, un aumento de la presión superior a la atmosférica puede ampliar el rango de inflamabilidad debido a que reduce el LFL y aumenta el UFL. Cabe señalar que el efecto es más marcado en el UFL que en el LFL. Sin embargo, un aumento de la presión no siempre amplía el rango de inflamabilidad pues en algunos casos puede reducirla. Por otro lado, los límites de inflamabilidad también se ven afectados por la temperatura. Un aumento de la temperatura tiende a ampliar el rango de inflamabilidad. Algunos valores de LFL y UFL se muestran en la Tabla 2.1 (Lees, 1996).

En la Figura 2.2 se muestra un dibujo de la concentración contra la temperatura indicando cómo están relacionadas varias de las definiciones anteriores. La curva con forma exponencial representa la curva de saturación de presión de vapor para el material líquido. El LFL teóricamente se intercepta con la curva de saturación de presión de vapor en el punto *flash*, aunque los datos experimentales no siempre concuerdan con esto. La temperatura de auto ignición es en realidad la temperatura más baja de la región de auto-ignición. El punto *flash* y los límites de inflamabilidad no son propiedades fundamentales sino que se definen sólo experimentalmente (Crowl y Louvar, 2002a).

Tabla 2.1: Límites de inflamabilidad, auto ignición y punto *flash* (Lees, 1996).

	Límites de Inflamabilidad (% v/v)		Temperatura Auto- ignición (° C)	Punto <i>Flash</i> (° C)	
	Menor	Mayor		Vaso cerrado	Vaso abierto
Acetona	2.6	13	465	-18	-9
Acetileno	2.5	100	305	-	-
Amoníaco	15	28	651	-	-
Benceno	1.4	8.0	562	-11	-
Butano	1.8	8.4	405	-60	-
Disulfuro de carbono	1.3	50	90	-30	-
Monóxido de Carbono	12.5	74	-		
Ciclohexano	1.3	7.8	245	-20	-
Etano	3	12.4	515	-135	-
Etileno	2.7	36	490	-121	-
Cloruro de etileno	6.2	15.9	413	13	18
Óxido de etileno	3	100	429	-	-20
Hidrógeno	4.0	75	400	-	-
Metano	5.0	15.0	540	-	-
Propano	2.1	9.5	450	<-104	-
Propileno	2.4	11	460	-108	-
Estireno	1.1	6.1	490	32	38
Tolueno	1.3	7.0	536	4	7
Cloruro de vinilo	4	22	472	-	-78

2.3.1 Limite de inflamabilidad dependiente de la temperatura

En general, el rango de inflamabilidad aumenta con la temperatura. Las siguientes dos ecuaciones se utilizan para obtener el límite inferior de inflamabilidad, dependiente de la temperatura (LFL_T), y el límite superior de inflamabilidad, dependiente de la temperatura (UFL_T), las cuales son aplicadas para hidrocarburos (Maloney, 2008).

$$LFL_T = LFL_{25} - \frac{0.75}{\Delta H_c} [T - 25] \quad (2.1)$$

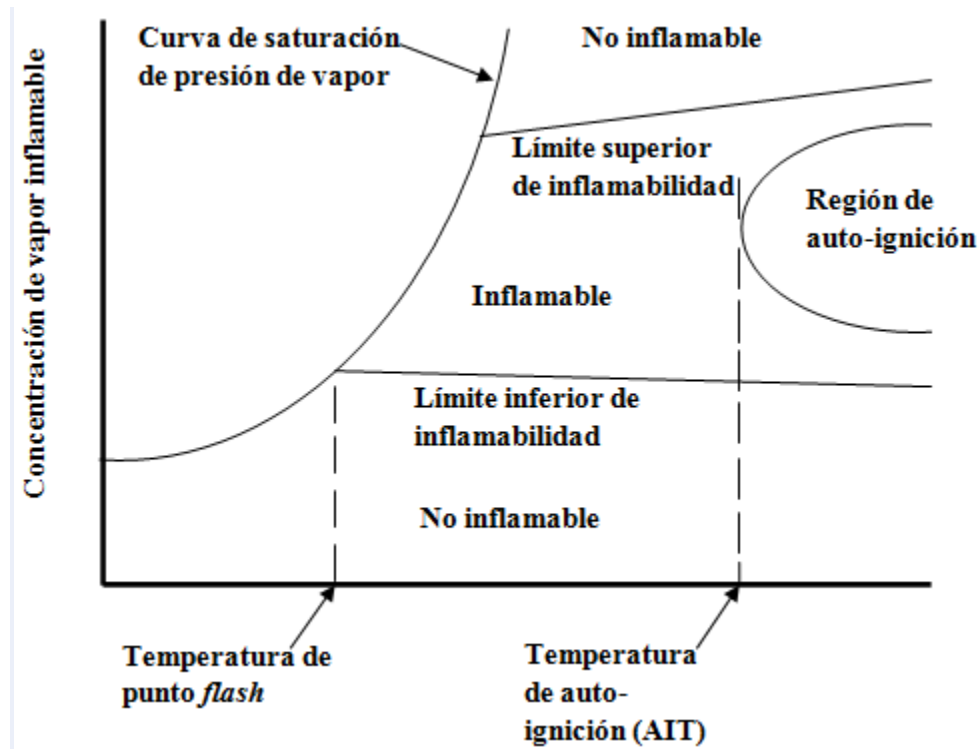


Figura 2.2: Relación entre diversas propiedades de inflamabilidad (Crowl y Louvar, 2002a).

$$UFL_T = LFL_{25} + \frac{0.75}{\Delta H_c} (T - 25) \quad (2.2)$$

donde ΔH_c es el calor neto de combustión y T es la temperatura.

2.3.2 Límite de inflamabilidad dependiente de la presión

La presión tiene poco efecto sobre el LFL excepto a presiones muy bajas (< 50 mm de Hg de presión absoluta), donde las llamas no se propagan. El UFL aumenta considerablemente a medida que la presión aumenta, ampliando el rango de inflamabilidad. Una expresión empírica para el UFL para vapores de hidrocarburos en función de la presión es (Maloney, 2008):

$$UFL_p = UFL + 20.6 \log P + 1 \quad (2.3)$$

donde P es la presión y UFL es el límite superior de inflamabilidad.

2.3.3 Mezclas de vapor

Con frecuencia, los datos de inflamabilidad son necesarios para las mezclas de vapor. Los límites de inflamabilidad de la mezcla se estiman utilizando la regla de Le Chatelier (Maloney, 2008):

$$LFL_{mix} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{LFL_i}} \quad (2.4)$$

donde LFL_i es límite inferior de inflamabilidad para el componente i , y_i es fracción molar de componente i sobre una base de combustible y n es el número de especies de combustibles.

Para UFL la ecuación es:

$$UFL_{mix} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{UFL_i}} \quad (2.5)$$

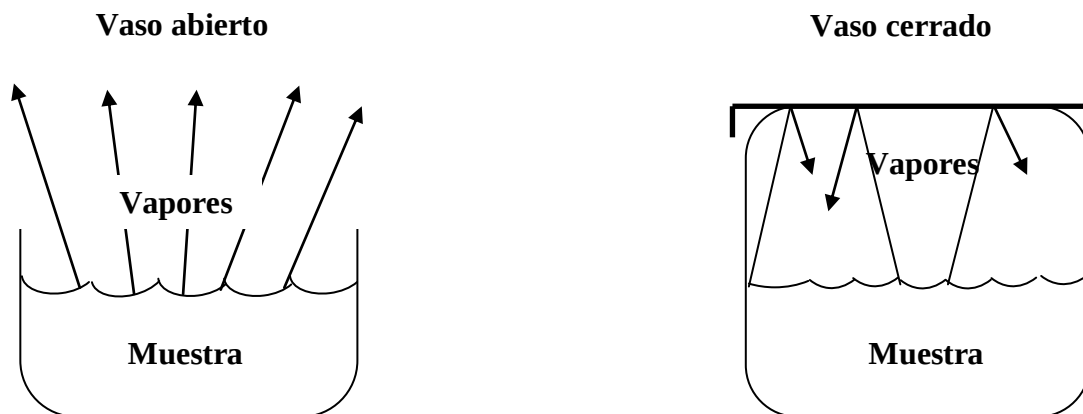


Figura 2.3: Condiciones de las pruebas de vaso abierto y vaso cerrado (Lance *et al.*, 1979).

2.4 Determinación de punto *flash*

La temperatura de punto *flash* es una de las cantidades mayormente utilizadas para caracterizar el fuego y el riesgo de explosión en los líquidos. La temperatura de punto *flash* se determina por medio de las técnicas denominadas como prueba de vaso abierto y prueba de vaso cerrado (Figura 2.3). En la técnica de vaso abierto la muestra se calienta en un recipiente abierto a una temperatura seleccionada. Una fuente de ignición es introducida en la superficie de la muestra y se observa si produce la inflamación. Si no se produce la inflamación, se eleva la temperatura y se repite el proceso hasta que ocurra la inflamación. Una desventaja de las pruebas de vaso abierto es que los componentes de bajo punto de ebullición de la mezcla pueden perderse al estar en contacto con la atmósfera antes de aplicarle la fuente de ignición; como consecuencia puede obtenerse un valor alto de punto *flash* y este no es representativo para la muestra (Lance *et al.*, 1979). Debe tenerse en cuenta que, en la temperatura del punto *flash*, la combustión sólo es momentánea y produce una llama breve. Una temperatura más alta, llamada la temperatura del punto de fuego, es necesaria para producir una llama continua.

En la técnica de vaso cerrado la muestra es separada de la atmósfera por una barrera física, previniendo la pérdida de los componentes de bajo punto de ebullición. Además, se forma un equilibrio entre el vapor de la mezcla y el aire que se encuentra en el espacio cerrado. A una temperatura seleccionada se quita la barrera física y se introduce una fuente de ignición y se observa si se produce la inflamación. Si no se produce la inflamación, la temperatura

se eleva y se repite el proceso hasta que ocurra la inflamación. Los valores del punto *flash* dependen sustancialmente de la técnica que se utilice y del aparato que se use.

Los parámetros que afectan los valores del punto *flash* son: configuración del probador, tamaño de la muestra, fuente de ignición, temperatura de control, presión ambiental, homogeneidad de la muestra, corrientes y el sesgo del operador. El valor del punto *flash* puede diferir dependiendo del diseño de cada aparato con que se mide (Lance *et al.*, 1979).

EL uso de los aparatos y procedimientos para la determinación de punto *flash* se rigen por determinadas estándares. En Estados Unidos de América, la Sociedad Americana para pruebas de materiales (ASTM) ha estado vigente durante años. En 1973, se formó el Comité de Coordinación de ASTM para punto *flash* y propiedades relacionadas. El objetivo principal del comité es la preparación de información sobre el punto *flash*. Se consideró que una compilación de los métodos de punto *flash* y las regulaciones del gobierno sería beneficiosa para el público. El Comité autorizó un manual de métodos de ensayo, incluidos los emitidos por la ASTM y otras organizaciones de estándares. El manual fue la incorporación de reglamentos nacionales e internacionales y códigos en punto *flash* que se utiliza para definir los riesgos de inflamabilidad de los líquidos (Wray, 1992).

Algunos aparatos comúnmente utilizados para la predicción de punto *flash* emitidos por la ASTM se describen a continuación. El aparato *tag closed tester* se utiliza para medir el punto *flash* de líquidos que se encuentran por debajo de 200 °F y es ampliamente utilizado en las industrias de suministro de disolventes a base de petróleo (Figura 2.4). Otro probador utilizado para una variedad de líquidos donde su punto *flash* se encuentra por debajo de 325 °F es el *tag open-cup tester* utilizado en la industria de pintura y barnices (Figura 2.5). El *Pensky-Martens closed* se utiliza principalmente para la evaluación de combustible, aceites lubricantes, suspensiones, ceras y disolventes (Figura 2.6). Un probador que se utiliza para determinar el punto *flash* de líquidos viscosos y productos derivados del petróleo es el *cleveland open-cup tester* (Figura 2.7) (Lance *et al.*, 1979). La Tabla 2.2 muestra el tipo de prueba realizada y el tipo de sistema al cual se aplica.

Tabla 2.2. Probadores de acuerdo a la ASTM (Lance *et al.*, 1979)

Nombre	Designación	Muestras
<i>Tag closed tester</i>	ASTM D56	Líquidos con punto <i>flash</i> por debajo de 200°F (93.3 °C)
<i>Tag open-cup tester</i>	ASTM D1310	Líquidos con punto <i>flash</i> por debajo de 325 °F
<i>Pensky-Martens closed tester</i>	ASTM D93	Líquidos y suspensiones con punto <i>flash</i> por debajo de 700°F (369°C)
<i>Cleveland open-cup tester</i>	ASTM D92	Líquidos y suspensiones punto <i>flash</i> de 175-760 °F (77-445 °C)
<i>Setaflash closed tester</i>	ASTM D3278	Líquidos con punto <i>flash</i> por debajo de 230 °F (110 °C)

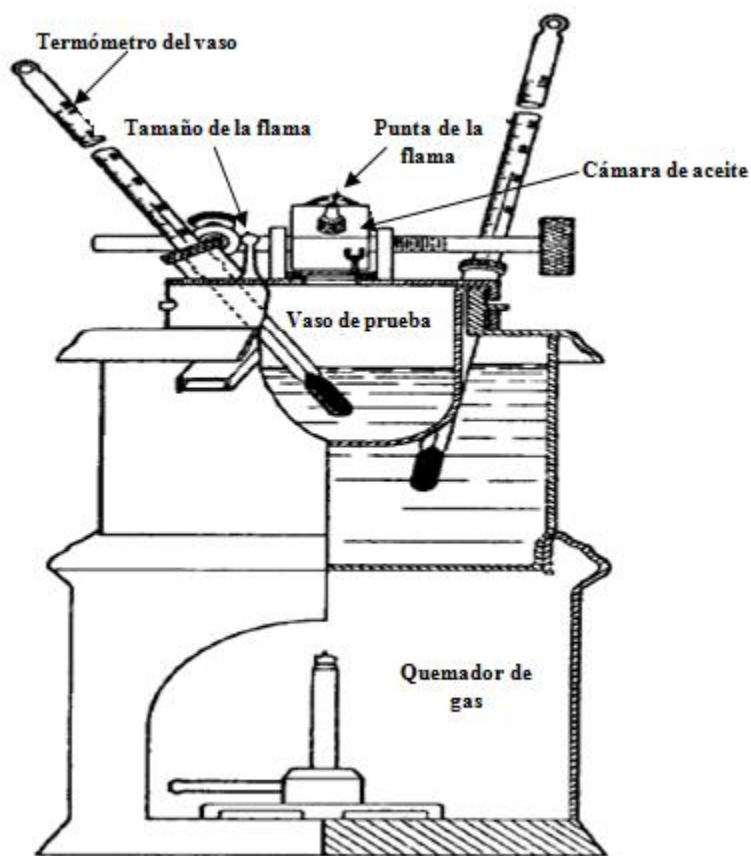


Figura 2.4: *Tag closed tester* (Lance *et al.*, 1979).

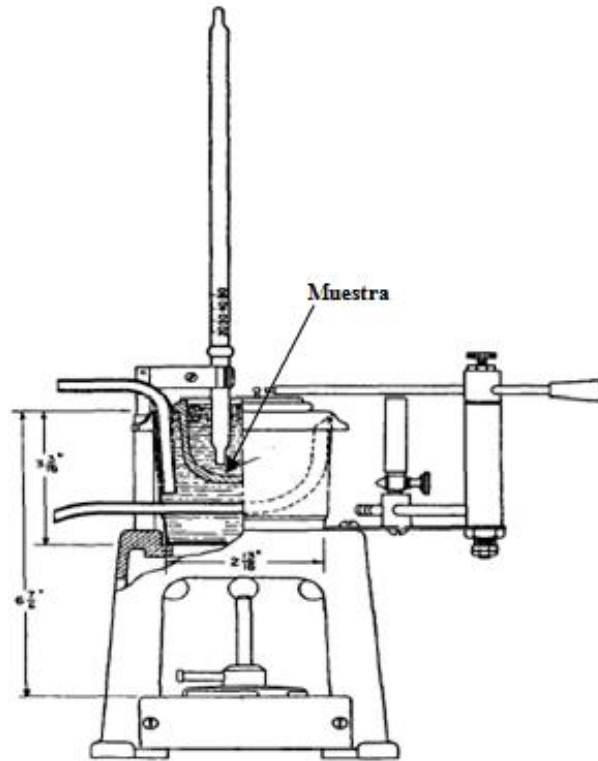


Figura 2.5: *Tag open-cup* (Lance et al., 1979).

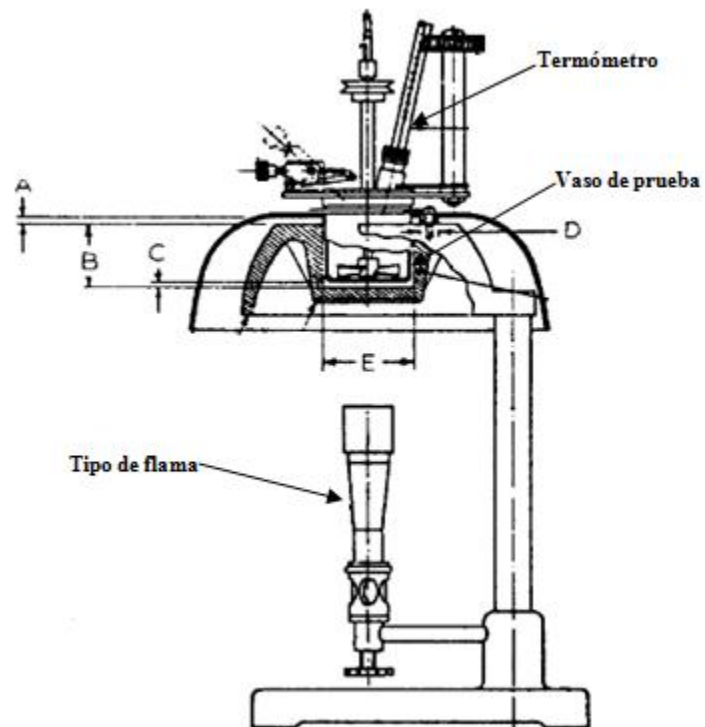


Figura 2.6: *Pensky-Martens closed* (Lance et al., 1979).

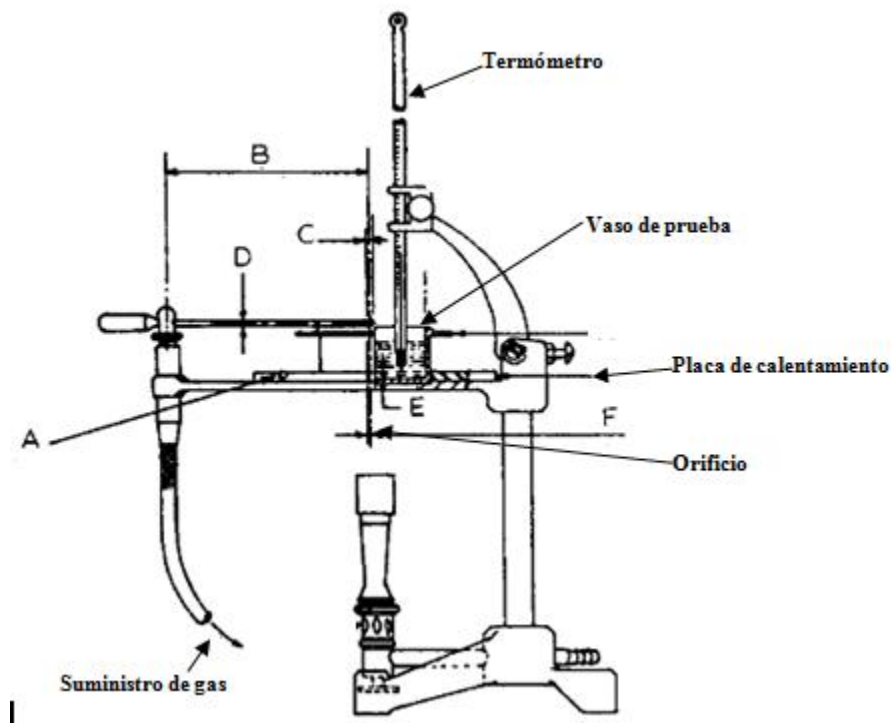


Figura 2.7: *Cleveland open-cup tester* (Lance et al., 1979).

2.5 Estimación del punto *flash* a partir de correlaciones

El punto *flash* se determina por métodos experimentales como se mencionó anteriormente. Por otro lado, también se obtiene mediante predicciones desarrollando métodos teóricos con base en datos experimentales. Cabe señalar que no existe algún método completamente teórico en donde no se utilicen datos experimentales para la predicción de punto *flash*. Sin embargo, se encuentran reportadas investigaciones en donde los valores de punto *flash* que resultan de las predicciones son cercanos a los datos experimentales ya reportados. Por otro lado, existen trabajos que reportan desviaciones altas y contienen un porcentaje de error elevado. La estimación numérica del punto *flash* se desarrolla para componentes puros y mezclas. En la literatura se han reportado modelos para estimar el punto *flash* para cierto tipo de componentes puros como por ejemplo la predicción de punto *flash* para la familia de los alcanos. Asimismo se tienen reportados modelos cuya aplicación se limita a cierto tipo de mezclas, según sea el caso de estudio.

El método de contribución de grupos es muy utilizado para estimar y predecir propiedades termodinámicas a partir de su estructura molecular (Constantinou *et al.*, 1995; Abildskov *et al.*, 1996; Harper *et al.*, 1999; Marrero y Gani, 2001; d'Anterrosches y Gani, 2005a; d'Anterrosches y Gani, 2005b; Liaw *et al.*, 2008b; Ceriani *et al.*, 2009a; Ceriani *et al.*, 2009b; Gálvez *et al.*, 2009; Satyanarayana *et al.*, 2009). Este método es basado en que la contribución de un grupo determinado es la misma en moléculas diferentes y las propiedades de los componentes son consideradas como una contribución adicional de los grupos que constituyen los componentes. El método de contribución de grupos funciona bien para un gran número de compuestos; sin embargo, se pueden presentar dificultades en la descomposición de algunas estructuras. Varios factores de corrección son necesarios para algunas interacciones moleculares. Para este método se debe tomar en cuenta la contribución de los grupos en la molécula así como la interacción entre los grupos y los enlaces químicos (Yong *et al.*, 2007b).

El método de contribución de grupos toma en cuenta la propiedad del grupo y la conectividad en las moléculas analizadas, por lo que puede tener una gran capacidad para la identificación de isómeros (Yong *et al.*, 2007a). Éste método se obtiene mediante datos experimentales de los componentes puros. Algunas consideraciones que se deben de tomar en cuenta para la aplicación del método de contribución de grupos son las siguientes:

1. Evaluación de los datos experimentales disponibles y eliminación de datos erróneos.
2. Construcción de los grupos.
3. Búsqueda de propiedades adicionales simples y de fácil acceso que puedan ser usadas para correlacionar la suma de las contribuciones de los grupos con las propiedades examinadas.
4. Encontrar una ecuación matemática simple y buena para la relación de la suma de la contribución del grupo con la propiedad deseada.
5. Formación de la contribución de grupo.

La certeza en el método de contribución de grupo se basa en la validez de los datos usados para su desarrollo, además que los datos puedan ser utilizados para todos los grupos. La lista de datos utilizados pueden ser pocos; sin embargo, se obtienen resultados precisos para el modelo aplicado. Un inconveniente es que pueden surgir errores si el modelo se aplica a otros sistemas en los cuales no se basó el desarrollo del modelo.

2.5.1 Estimación del punto *flash* para componentes puros

En la estimación de punto *flash* algunas de las ecuaciones reportadas para componentes puros dependen de la temperatura de ebullición, presión de vapor y calor de combustión. Dentro de las ecuaciones reportadas para la estimación del punto *flash* para componentes puros existe una correlación muy utilizada: la correlación de Satyanarayana y Rao (Satyanarayana y Rao, 1992). En esta correlación se mostró que las temperaturas de punto *flash* de materiales puros se correlacionan bien con el punto de ebullición del líquido. Las temperaturas de ebullición fueron capaces de ajustarse al punto *flash* para 1200 componentes con un error absoluto de menos del 1% utilizando:

$$T_f = a + \frac{b \left(\frac{c}{T_b} \right)^2 e^{-\frac{c}{T_b}}}{\left(1 - e^{-\frac{c}{T_b}} \right)^2} \quad (2.6)$$

donde T_f es la temperatura de punto *flash*, a , b y c son constantes que se encuentran en la Tabla 2.3 y T_b es la temperatura de ebullición del material.

Otro ejemplo de ajuste de datos experimentales para la obtención de una ecuación para la estimación de punto *flash* para componentes puros que en éste caso solo se utiliza la temperatura de ebullición para su ajuste y se obtiene (Shebeko *et al.*, 1984):

$$T_f = 57.6 + 0.64T_b \quad (2.7)$$

donde T_b es la temperatura de ebullición del componente puro.

Tabla 2.3: Constantes para la ecuación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Grupo Químico	a	b	c
Hidrocarburos	225.1	537.6	2217
Alcoholes	230.8	390.5	1780
Aminas	222.4	416.6	1900
Ácidos	323.2	600.1	2970
Éteres	275.9	700.0	2879
Sulfuros	238.0	577.9	2297
Ésteres	260.8	449.2	2217
Cetonas	260.5	296.0	1908
Halógenos	262.1	414.0	2154
Aldehídos	264.5	293.0	1970
Contienen fósforo	201.7	416.1	1666
Contienen nitrógeno	185.7	432.0	1645
Fracciones de petróleo	237.9	334.4	1807

Por otro lado, una ecuación para la predicción de punto *flash* donde se utiliza la temperatura de ebullición combinándola con un método de contribución de grupos se estructura como (Shebeko *et al.*, 1984):

$$Tf = a_0 + a_1 Tb + \sum_{j=2}^l a_j l_j \quad (2.8)$$

donde Tb es la temperatura de ebullición del componente puro, a_0 y a_1 son coeficientes empíricos, a_j son coeficientes empíricos y l_j es el número de grupos de tipo j en la molécula.

Dentro de las ecuaciones para la predicción de punto *flash* para componentes puros se encontró una ecuación donde además de utilizar la temperatura de ebullición hacen uso del calor de combustión de componentes puros (Shebeko *et al.*, 1984):

$$Tf = aTb - b|\Delta H_{com}| \quad (2.9)$$

donde Tb es la temperatura de ebullición de componente puro, a y b son constantes y $|\Delta H_{com}|$ es el calor de combustión del componente puro.

Las ecuaciones anteriores muestran que la predicción de punto *flash* depende indudablemente de la temperatura de ebullición. Sin embargo, la hipótesis manejada en este trabajo es que la predicción de punto *flash* depende de más parámetros como por ejemplo el calor de combustión y el calor de vaporización.

2.5.2 Estimación del punto *flash* para alcanos

En particular, la estimación de punto *flash* para la familia de alcanos es un caso que se maneja en este trabajo como referente. A la fecha la predicción se ha desarrollado por medio de métodos teóricos con base en datos experimentales. La predicción de punto *flash* para una lista de 92 alcanos se analizó aplicando QSPR usando contribución de grupos y redes neuronales (ANN), en donde se obtuvieron 9 grupos funcionales que se muestran en la Tabla 2.4 (Yong *et al.*, 2007b). En ese estudio se aplicó un método de regresión múltiple (MLR) utilizando descriptores moleculares. Para esto se utilizaron los grupos funcionales mostrados en la Tabla 2.4. El modelo obtenido fue:

$$FP = 175.234 + 9.180x_1 + 11.232x_2 + 0.796x_3 + 17.194x_4 + 18.802x_5 + 20.685x_6 + 20.660x_7 + 24.413x_8 + 29.851x_9 \quad (2.10)$$

Tabla 2.4: Grupos funcionales en las moléculas de alcanos (Yong *et al.*, 2007b).

No.	Grupo	No.	Grupo	No.	Grupo
1	CH ₃ -CH ₂ -	4	-CH ₂ -CH ₂ -	7	=CH-CH=
2	CH ₂ -CH=	5	-CH ₂ -CH=	8	=CH-C≡
3	CH ₃ -C≡	6	-CH ₂ -C≡	9	≡C-C≡

Tabla 2.5: Predicción de punto *flash* para 15 alcanos (Yong *et al.*, 2007b).

No.	Componente	Punto <i>flash</i> experimental (K)	Punto <i>flash</i> predicho (K)	
			ANN	MLR
1	2-Metilpropano	186	204.3	208.9
2	3-Metilpentano	241	240.6	242.4
3	2,3-Dimetilpentano	258	256.3	257.6
4	3-Metilhexano	258	259.6	259.6
5	2,2,3-Trimetilbutano	247	255.7	251.5
6	Octano	286	283.2	279.6
7	2,2,3,3-Tetrametilbutano	273	269.2	263.9
8	2,3,4-Trimetilpentano	273	271.8	272.7
9	3,4-Dimetilhexano	277	273.6	274.3
10	3-Etil-4-metilhexano	288	290.3	291.1
11	2,2,4-Trimetilhexano	288	283.3	283.3
12	2,7-Dimetiloctano	314	311.6	309.3
13	2,2,3,4-Tetrametilhexano	304	302.9	300.1
14	Tridecano	352	365.6	365.5
15	Pentadecano	388	393.9	399.9
Desviación media absoluta (K)			4.8	6.1
RMS			6.86	8.46

Con el modelo anterior se calculó el punto *flash* para 15 alcanos. Posteriormente, se comparan los resultados de la predicción de punto *flash* con datos experimentales reportados y se muestran en la Tabla 2.5.

Otro estudio relacionado a la predicción de punto *flash* para alcanos fue desarrollado para 44 alcanos. En este estudio se aplicó la contribución de grupos haciendo uso de redes neuronales y se obtuvieron 16 grupos funcionales. Los grupos funcionales se muestran en la Tabla 2.6 (Yong *et al.*, 2007a). Los resultados del estudio se muestran en la Tabla 2.7 donde se comparan con los datos de punto *flash* experimentales y se obtiene el porcentaje de error absoluto.

Los ejemplos descritos para la predicción de punto *flash* para la familia de alcanos son solo algunas de las investigaciones actualmente reportadas. En la predicción de punto *flash* para la familia de los alcanos se utilizaron diferentes métodos teóricos, los cuales se compararon para ver el porcentaje de error que tiene cada uno con respecto a los datos experimentales.

Tabla 2.6: Grupos funcionales de 44 alcanos(Yong *et al.*, 2007a).

No.	Grupo	No.	Grupo	No.	Grupo	No.	Grupo
1	CH ₃ -CH ₃	5	-CH ₂ -CH ₂ -	9	=CH-C≡	13	(-CH ₂ -C≡) _C
2	CH ₃ -CH ₂ -	6	-CH ₂ -CH=	10	≡C-C≡	14	(=CH-CH=) _C
3	CH ₃ -CH=	7	-CH ₂ -C≡	11	(-CH ₂ -CH ₂ -) _C	15	(=CH-C≡) _C
4	CH ₃ -C≡	8	=CH-CH=	12	(-CH ₂ -CH=) _C	16	(≡C-C≡) _C

 Tabla 2.7: Predicción de punto *flash* para 44 alcanos(Yong *et al.*, 2007a).

Ejemplo	Componente Orgánico	Punto <i>flash</i> experimental (K)	(Yong <i>et al.</i> , 2007a)	
			Predicción punto <i>flash</i>	Error relativo %
1	2-Metilbutano	217	222.60	2.58
2	Hexano	251	244.97	-2.40
3	2,3-Dimetilbutano	244	234.97	-3.89
4	Octano	295	282.28	-4.31
5	Dodecano	347	350.61	1.04
6	Pentadecano	405	395.22	-2.16
7	Metilciclopentano	250	251.22	0.89
8	Ciclohexano	253	262.62	3.02
9	Etilciclopentano	288	282.95	-1.53
10	Propilciclohexano	308	313.87	1.07
Promedio absoluto de error relativo %				2.29

Recientemente se ha enviado a revisión un trabajo para la predicción de punto *flash* en alcanos (Mathieu, 2010), donde se propone una ecuación basada en el número de carbonos del compuesto, se aplica el método de contribución de grupos y se obtienen 4 grupos funcionales como se muestra en la Tabla 2.8. La expresión para ajustar los valores experimentales tiene el formato:

$$T_*^2 = \sum_{k=1}^4 n_k T_k^2 \quad (2.11)$$

Tabla 2.8: Grupos funcionales y Temperaturas efectivas para cada grupo (Mathieu, 2010).

n_k	Grupo	Tk
1	CH ₃ –	101.9
2	–CH ₂ –	100.3
3	=CH–	84.9
4	=C=	58.8

donde T^* es la temperatura de punto *flash*, n_k es el número de grupos funcionales, T_k es la temperatura efectiva asociada para cada grupo funcional de la Tabla 2.8. Desafortunadamente, este trabajo en los resultados que reporta se observó que no permite diferenciar el valor calculado entre isómeros con los mismos grupos funcionales.

En el siguiente capítulo se describe el desarrollo de los modelos propuestos para la predicción de la temperatura de punto *flash*. Además, los modelos propuestos se aplican para estimar el punto *flash* en la familia de los alcanos.

Capítulo 3

Predicción del punto *flash* para alcanos

En este capítulo se describe el desarrollo del modelo para la predicción de punto *flash* de los alcanos. Además, se indica el método que se utilizó para su solución y las consideraciones que se aplicaron a los modelos propuestos. Posteriormente, se aplican los modelos propuestos para la predicción de punto *flash* en alcanos.

3.1 Descripción de los modelos propuestos

En el análisis de la predicción de punto *flash* para los alcanos se han incluido los métodos teóricos descritos en el capítulo anterior (Yong *et al.*, 2007b; Yong *et al.*, 2007a). Sin embargo, estos métodos se basan en redes neuronales cuya extensión fuera del rango de componentes analizado resulta muy incierta. A continuación, se describen las propiedades para la predicción de punto *flash* en los alcanos que se utilizan en los modelos propuestos en este capítulo.

En el desarrollo de los modelos propuestos para la predicción de punto *flash* en alcanos, las propiedades utilizadas son seleccionadas con base al fenómeno que ocurre cuando se presenta la temperatura de punto *flash*. El fenómeno de combustión se lleva a cabo cuando se alcanza la temperatura de punto *flash* de un líquido inflamable a presión atmosférica y en un medio abierto por lo cual, en ocasiones, no se tiene control alguno de lo que ocurre alrededor. El proceso de aparición de la temperatura de punto *flash* se observa cuando un líquido inflamable al tener cerca una fuente de ignición provoca que la temperatura del

líquido inflamable circundante tienda a elevarse y puede producir suficiente vapor que, al mezclarse con el oxígeno del aire, resulte en una mezcla inflamable. La temperatura se eleva hasta el punto donde se presenta una llama o un flamazo que es momentáneo lo que significa que se llegó a la temperatura mínima en la que el componente puede empezar a quemarse. En ese momento se dice que se encuentra en la temperatura de punto *flash*. Por lo tanto, las propiedades que se ven involucradas en el punto *flash* son el calor de vaporización, el calor de combustión y la temperatura correspondiente. Si un compuesto requiere poca energía para cambiarlo de fase líquida a vapor, entonces su punto *flash* tendrá una temperatura baja ya que la reacción ocurre siempre en fase gaseosa. Por otro lado, si la energía que se libera es muy alta entonces un número mayor de moléculas pasarían a la fase vapor produciendo el mismo resultado anterior. Finalmente, la temperatura de ebullición parece ser un referente práctico importante, ya que la temperatura del punto *flash* no debiera ser superior al punto de ebullición donde la condición física de potenciar la reacción estaría claramente alcanzada.

Así, para la predicción de punto *flash* consideramos que se encuentran involucradas tanto la parte física como la parte química. En la parte física, las propiedades de mayor influencia son la temperatura normal de ebullición y su calor de vaporización. Este último determina la formación del vapor suficiente que, al mezclarse con oxígeno, produce un flamazo o chispa. En la parte química se incluye el calor de combustión o calor de reacción. Esta propiedad es la que permite que el vapor del líquido inflamable, al estar en contacto con el oxígeno, reaccione y se produzca la llama liberando energía al ambiente y transfiriéndose parte de esta energía a la evaporación del líquido inflamable para mantener el ciclo de combustión. Habiendo mencionado lo anterior, se consideran relevantes las siguientes propiedades para correlacionar las ecuaciones propuestas de la temperatura de punto *flash*: la temperatura de ebullición, el calor de vaporización, y el calor de reacción.

Así, las ecuaciones de punto *flash* para alcanos se proponen con base en datos experimentales de punto *flash*, temperatura de ebullición, calor de vaporización y calor de reacción. Los métodos propuestos en este trabajo se clasifican en dos tipos: basados en correlaciones directas (de propiedades termodinámicas) y basados en contribuciones de

grupos. Adicionalmente, en la estructura de los modelos se consideró conveniente expresarlos de forma adimensional. Así, la temperatura de punto *flash* se divide por la temperatura de ebullición mientras que el calor de reacción se divide por el calor de vaporización:

$$\frac{T_f}{T_b} \quad (3.1)$$

$$\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \quad (3.2)$$

Con las expresiones anteriores se proponen varias ecuaciones para analizar el comportamiento de las propiedades. Las siguientes secciones contienen las propuestas de los modelos y los resultados obtenidos. La metodología empleada consiste en correlacionar los datos experimentales con las ecuaciones propuestas a través del método clásico de mínimos cuadrados. Este trabajo se realiza con el resolutor implementado en Excel. Los resultados se representan en forma porcentual, mostrados con base a los promedios absolutos del error de cada componente obtenido con respecto a su valor experimental del punto *flash*. Los datos utilizados son en su mayoría experimentales; sin embargo, no se lograron obtener los datos experimentales para todos los compuestos de los cuales se tenía información experimental de la temperatura en el punto *flash*. Por esta razón, se presenta la siguiente sección para indicar los datos usados y como se estimaron los complementos a la información experimental.

3.2 Datos utilizados para análisis en este trabajo

Los datos que son utilizados para análisis en los modelos propuestos son datos en su mayoría obtenidos por métodos experimentales. Inicialmente la lista es de 82 alcanos para los cuales se tienen datos experimentales de temperatura de ebullición, temperatura de punto *flash* y peso molecular el cual es usado sólo como referente al tamaño de la molécula. La lista de 82 alcanos se reduce a 48 que incluyen el calor de vaporización experimental. A partir de los calores de formación reportados en la literatura y usando valores estimados con el simulador de procesos AspenPlus, se completó la lista de 48 alcanos con el calor de

reacción, Tabla 3.1. Para realizar la simulación en AspenPlus, la reacción debe calcularse en fase vapor por lo cual primeramente se realiza un cálculo flash teniendo una alimentación de aire con un exceso del compuesto a analizar. Así, la corriente vaporizada del flash se convierte en una mezcla saturada con el compuesto a analizar en fase gaseosa. Posteriormente se alimenta a un reactor estequiométrico para forzar a una reacción total y calcular los calores de reacción, Figura 3.1. En las predicciones con el simulador se utiliza la temperatura de punto *flash* experimental y la ecuación de estado Peng-Robinson como método de estimación. Las siguientes secciones contienen la descripción y resultados para los modelos propuestos.

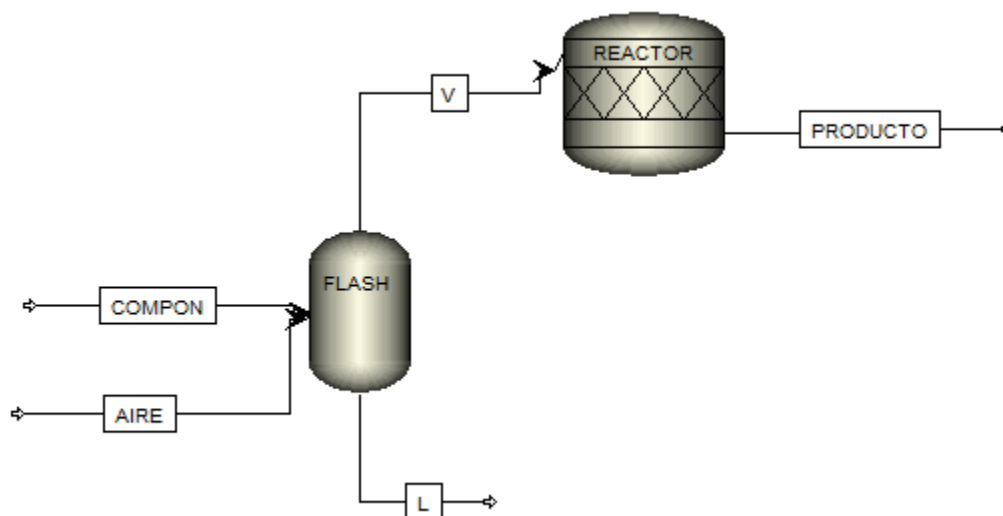


Figura 3.1: Simulación en AspenPlus

Tabla 3.1: Datos de los 48 alcanos.

No.	Compuesto	Tf ¹ (K)	Tb (K)	ΔHv (BTU/lb)	ΔHr (BTU/lb)	PM
1	Butano	213	272.63 ³	165.99 ³	-19700 ⁴	58.1
2	Heptano	269	371.57 ³	137.60 ³	-19200 ⁴	100.2
3	Hexano	250	341.88 ³	144.85 ³	-19200 ⁴	86.2
4	Octano	286	398.82 ³	131.73 ³	-20500 ⁴	114.2
5	Pentano	224	309.21 ³	153.67 ³	-19400 ⁴	72.2
6	Propano	169	231.06 ³	183.01 ³	-19962 ⁵	44.1
7	2,2-dimetilbutano	225	322.88 ³	131.79 ³	-19323 ⁵	86.2
8	2,3-dimetilbutano	244	331.41 ³	137.13 ³	-19135 ⁶	86.2
9	2-metilpentano	250	333.41 ³	139.40 ³	-19157 ⁶	86.2
10	2,4-dimetilpentano	261	353.65 ³	127.84 ³	-19263 ⁵	100.2
11	3-metilhexano	258	365.00 ³	133.82 ³	-19310 ⁵	100.2
12	2,3-dimetilhexano	283	388.75 ³	124.88 ³	-19241 ⁵	114.2
13	2,4-dimetilhexano	283	382.58 ³	122.23 ³	-19220 ⁵	114.2
14	2,2,4-trimetilpentano	261	372.39 ³	116.75 ³	-19057 ⁶	114.2
15	2,2-dimetilheptano	297	405.84 ³	115.98 ³	-19155 ⁵	128.3
16	2,6-dimetilheptano	299	408.36 ³	117.66 ³	-19166 ⁵	128.3
17	N-nonano	304	423.96 ³	124.36 ³	-19100 ⁶	128.3
18	2,2,5-trimetilhexano	286	397.24 ³	112.57 ³	-19134 ⁵	128.3
19	N-decano	319	447.30 ³	119.65 ³	-19073 ⁶	142.3
20	2-metilnonano	314	440.15 ³	116.64 ³	-19152 ⁵	142.3
21	N-undecano	333	468.63 ³	116.95 ³	-19048 ⁶	156.3
22	N-dodecano	344	489.47 ³	112.26 ³	-19027 ⁶	170.3
23	N-tridecano	352	508.61 ³	107.96 ³	-19006 ⁶	184.4
24	N-tetradecano	372	526.72 ³	102.82 ³	-18991 ⁶	198.4
25	3-etilpentano	255	366.62 ³	133.04 ³	-19339 ⁵	100.0
26	2,2-dimetilpentano	250	352.34 ³	125.55 ³	-19269 ⁵	100.0
27	2,2,3-trimetilpentano	270	382.99 ³	121.03 ³	-19242 ⁵	114.0
28	3-etilhexano	278	391.7 ³	126.80 ³	-19276 ⁵	114.0
29	3-metilheptano	279	392 ³	128.11 ³	-19268 ⁵	114.0
30	3,3-dimetilhexano	272	385.12 ³	122.84 ³	-19243 ⁵	114.0
31	2,5-dimetilhexano	271	382.26 ³	123.19 ³	-19232 ⁵	114.0
32	3-metiloctano	297	417.37 ³	122.02 ³	-19236 ⁵	128.0
33	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	406.16 ³	109.89 ³	-19234 ⁵	128.0
34	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	395.43 ³	109.07 ³	-19211 ⁵	128.0
35	2,2,3-trimetilhexano	288	406.75 ³	114.97 ³	-19219 ⁵	128.0
36	Hexadecano	408	560 ³	99.72 ³	-18999 ⁶	226.0
37	2-metilbutano	216	301 ²	174.79 ⁵	-19168 ⁶	72.0
38	2,3,3-trimetilpentano	273	387.9 ²	121.94 ³	-19126 ⁶	114.0
39	2-metilheptano	277	390.8 ²	125.84 ³	-19275 ⁵	114.0
40	2,2-dimetilhexano	269	380 ²	121.82 ³	-19242 ⁵	114.0
41	5-metilnonano	312	438.1 ⁵	115.43 ³	-19197 ⁵	142.0
42	3-metilpentano	241	336.4 ²	143.77 ³	-19422 ⁵	86.0
43	2,3-dimetilpentano	258	362.9 ²	130.83 ³	-19159 ⁶	100.0
44	2,2,3-trimetilbutano	247	354 ²	124.33 ³	-19295 ⁵	100.0
45	2,3,4-trimetilpentano	273	386.6 ²	122.78 ³	-19268 ⁵	114.0
46	3,4-dimetilhexano	277	390.9 ²	125.37 ³	-19285 ⁵	114.0
47	2,2,4-trimetilhexano	288	399.7 ²	112.63 ³	-19212 ⁵	128.0
48	Pentadecano	388	543.8 ²	104.00 ³	-19013 ⁶	212.0

1 (Yong et al., 2007b)

2 (Reid et al., 1987)

3 (Barrufet, 2010)

4 (AIChE, 1994)

5 AspenPlus

6 (Maloney, 2008)

3.3 Modelos propuestos basados en correlaciones directas

La primera ecuación propuesta para la predicción de punto *flash* en alcanos contiene solo la primera relación adimensional, i.e. la temperatura de ebullición y la temperatura de punto *flash*. Usando datos experimentales para los 82 alcanos el comportamiento de este grupo adimensional pareciera comportarse como una constante, nombrada como β_0 , donde el valor obtenido es 0.7124 (ver Figura 3.2a. En las correlaciones lineales publicadas anteriormente, como se indica en el capítulo anterior, se han propuesto expresiones lineales donde siempre se ha incorporado un valor numérico en el término independiente. Sin embargo, el comportamiento mostrado hace viable la hipótesis nula de que el término independiente sea significativamente igual a cero. Al graficar el comportamiento de estas variables en función del peso molecular se aprecia el efecto de la isomería de las moléculas y se ratifica la viabilidad de dependencia lineal con término independiente cero (ver Figura 3.2b).

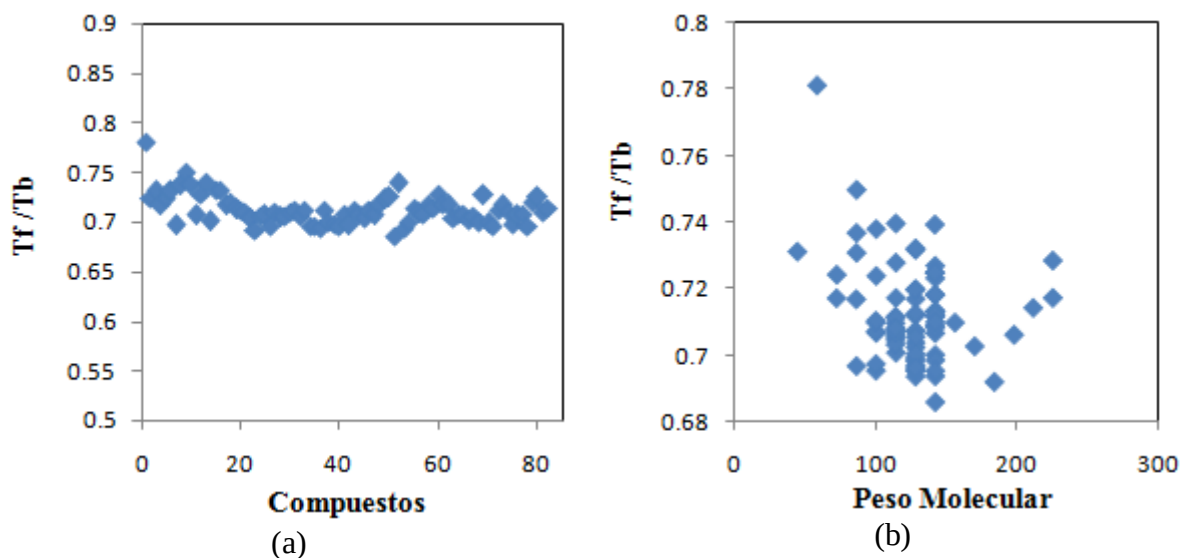


Figura 3.2: (a) Comportamiento de T_f/T_b , (b) comportamiento respecto al peso molecular.

Dicho de otra manera, la evidencia experimental justifica el construir el modelo lineal adimensional siguiente:

$$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 \quad (3.3)$$

donde T_f es la temperatura de punto *flash* experimental, T_b la temperatura de ebullición y β_0 constante.

Analizando la lista de 82 alcanos se predice el punto *flash* con la ecuación descrita donde se obtiene un promedio absoluto del error de 1.52% y un promedio absoluto de la desviación de 4.25 K. La Tabla 3.2 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* para los 82 alcanos. Además, se observa la desviación de los valores de punto *flash* obtenidos por la predicción con respecto a los datos experimentales. La Figura 3.3 muestra gráficamente el comportamiento de las predicciones de punto *flash* obtenidas por este modelo con respecto a los datos experimentales de punto *flash*.

Tabla 3.2: Predicción de punto *flash* para 82 alcanos.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación(K)
1	Propano	169	164.62	-4.38
2	Butano	213	194.24	-18.76
3	Pentano	224	220.30	-3.70
4	Hexano	250	243.57	-6.43
5	Heptano	269	264.73	-4.27
6	Octano	286	284.14	-1.86
7	2,2-dimetilbutano	225	230.04	5.04
8	2,3-dimetilbutano	244	236.11	-7.89
9	2-metilpentano	250	237.54	-12.46
10	2,4-dimetilpentano	261	251.96	-9.04
11	3-metilhexano	258	260.05	2.05
12	2,3-dimetilhexano	283	276.97	-6.03
13	2,4-dimetilhexano	283	272.57	-10.43
14	2,2,4-trimetilpentano	261	265.31	4.31
15	2,2-dimetilheptano	297	289.14	-7.86
16	2,6-dimetilheptano	299	290.94	-8.06
17	N-nonano	304	302.05	-1.95
18	2,2,5-trimetilhexano	286	283.01	-2.99
19	N-decano	319	318.68	-0.32
20	2-metilnonano	314	313.59	-0.41
21	N-undecano	333	333.88	0.88
22	N-dodecano	344	348.73	4.73
23	N-tridecano	352	362.36	10.36
24	N-tetradecano	372	375.26	3.26
25	3,3-dimetilpentano	254	255.92	1.92
26	3-etilpentano	255	261.20	6.20

Continuación.

27	2,2-dimetilpentano	250	251.03	1.03
28	2,2,3-trimetilpentano	270	272.86	2.86
29	3-metil-3-etilpentano	276	278.86	2.86
30	3-etilhexano	278	279.07	1.07
31	3-metilheptano	279	279.28	0.28
32	3,3-dimetilhexano	272	274.38	2.38
33	2,5-dimetilhexano	271	272.34	1.34
34	3,4-dimetilheptano	288	294.81	6.81
35	2,3-dimetilheptano	288	295.06	7.06
36	2,3-dimetil-3-etilpentano	288	295.78	7.78
37	3-metiloctano	297	297.36	0.36
38	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	289.37	5.37
39	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	281.73	5.73
40	4-etilheptano	288	295.06	7.06
41	2,4-dimetilheptano	288	290.08	2.08
42	2,3,4-trimetilhexano	288	294.35	6.35
43	2,3,5-trimetilhexano	288	287.94	-0.06
44	2,2,3-trimetilhexano	288	289.79	1.79
45	3,5-dimetilheptano	288	291.50	3.50
46	4-etiloctano	314	314.30	0.30
47	2,4,5-trimetilheptano	304	306.46	2.46
48	2,3-dimetiloctano	314	311.45	-2.55
49	3,3-dimetiloctano	314	309.31	-4.69
50	2,6-dimetiloctano	314	308.60	-5.40
51	3,3,4,4-tetrametilhexano	304	315.72	11.72
52	2,2,5,5-tetrametilhexano	304	292.57	-11.43
53	2,3,3,4-tetrametilhexano	304	312.16	8.16
54	2,3,4,5-tetrametilhexano	304	309.31	5.31
55	2,2,4,4-tetrametilhexano	304	303.61	-0.39
56	3,3,5-trimetilheptano	304	305.50	1.50
57	2,3,5-trimetilheptano	304	305.75	1.75
58	3-etil-3-metilheptano	314	311.45	-2.55
59	4-etil-3-metilheptano	314	313.59	-0.41
60	Hexadecano	408	398.97	-9.03
61	2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano	368	365.49	-2.51
62	2-metilbutano	216	214.45	-1.55
63	2,3,3-trimetilpentano	273	276.36	3.36
64	2-metilheptano	277	278.43	1.43
65	2,2-dimetilhexano	269	270.73	1.73
66	3-etil-2,2-dimetilpentano	286	290.08	4.08
67	4,4-dimetilheptano	288	290.79	2.79
68	2,3,3-trimetilhexano	288	292.93	4.93
69	2,4,6-trimetilheptano	304	297.91	-6.09
70	2,3,4,4-tetrametilhexano	304	310.02	6.02
71	3,4,5-trimetilheptano	304	311.45	7.45
72	5-metilnonano	312	312.16	0.16
73	3-metilpentano	241	239.67	-1.33
74	2,3-dimetilpentano	258	258.55	0.55
75	2,2,3-trimetilbutano	247	252.21	5.21
76	2,3,4-trimetilpentano	273	275.43	2.43
77	3,4-dimetilhexano	277	278.50	1.50
78	3-etil-4-metilhexano	288	294.67	6.67
79	2,2,4-trimetilhexano	288	284.77	-3.23
80	2,7-dimetiloctano	314	308.51	-5.49
81	2,2,3,4-tetrametilhexano	304	305.04	1.04
82	Pentadecano	388	387.43	-0.57

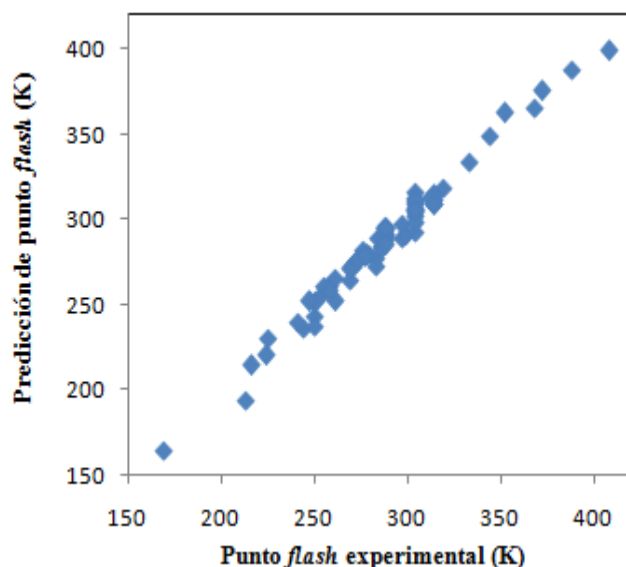


Figura 3.3: Predicción de punto *flash* de 82 alcanos comparada con punto *flash* experimentales.

El comportamiento de la primera relación adimensional indica ser constante y los resultados son buenos comparados con los datos experimentales. Sin embargo, el modelo aún tiene errores altos para algunos compuestos. Así, se propuso un modelo que incorporara los aspectos químicos de la reacción. Para este segundo modelo se analizaron datos experimentales para 19 alcanos y se utilizaron las dos relaciones adimensionales descritas anteriormente. El modelo usa al primer modelo como base al cual se le añade una constante más pero multiplicada por la segunda relación adimensional. Así, conseguimos que contenga las propiedades que se consideran relevantes en la temperatura de punto *flash*:

$$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \right) \quad (3.4)$$

donde ΔH_r es el calor de reacción, ΔH_v el calor de vaporización y β_0 , β_1 son constantes.

El modelo propuesto se aplica a la lista de 19 alcanos y se obtienen las constantes β_0 y β_1 sus valores son 0.7259 y -0.00007149, respectivamente. Además, se obtiene un promedio absoluto del error de 1.73% y un promedio absoluto de la desviación de 4.8 K. En ésta

ecuación al añadir el término adimensional del calor de reacción y el calor de vaporización la desviación de la temperatura de punto *flash* de varios compuestos disminuye, mejorando la predicción respecto al primer modelo que solo depende de la temperatura de ebullición. La Tabla 3.3 muestra los resultados para los 19 alcanos de la predicción de punto *flash* donde se obtiene la desviación con respecto a los valores de punto *flash* obtenidos por métodos experimentales. La Figura 3.4 muestra gráficamente los resultados obtenidos de la predicción de punto *flash* comparados con los datos de punto *flash* experimentales. Posteriormente a la lista de 19 alcanos se le añadieron 29 alcanos, para estos se tiene el calor de vaporización experimental y se estimó para los 29 alcanos el calor de reacción haciendo uso del simulador AspenPlus implementando la ecuación de estado Peng-Robinson. Así, se completó una lista de 48 alcanos, se predice el punto *flash* usando las constantes resultantes de la predicción de los 19 alcanos obteniendo un promedio absoluto del error de 1.54% y un promedio absoluto de la desviación de 4.19 K. La Tabla 3.4 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* para la lista de 48 y la Figura 3.5 muestra gráficamente los resultados obtenidos de la predicción de punto *flash* comparados con los datos de punto *flash* experimentales.

Tabla 3.3: Predicción de punto *flash* para 19 alcanos.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación(K)
1	Butano	213	200.22	-12.78
2	Heptano	269	273.48	4.48
3	Hexano	250	251.44	1.44
4	Octano	286	294.02	8.02
5	Pentano	224	227.25	3.25
6	2,3-dimetilbutano	244	237.27	-6.73
7	2-metilpentano	250	238.75	-11.25
8	2,2,4-trimetilpentano	261	265.98	4.98
9	N-nonano	304	303.11	-0.89
10	N-decano	319	319.61	0.61
11	N-undecano	333	334.73	1.73
12	N-dodecano	344	349.39	5.39
13	N-tridecano	352	362.81	10.81
14	N-tetradecano	372	375.40	3.40
15	Hexadecano	408	398.89	-9.11
16	2-metilbutano	216	216.15	0.15
17	2,3,3-trimetilpentano	273	277.23	4.23
18	2,3-dimetilpentano	258	259.64	1.64
19	Pentadecano	388	387.65	-0.35

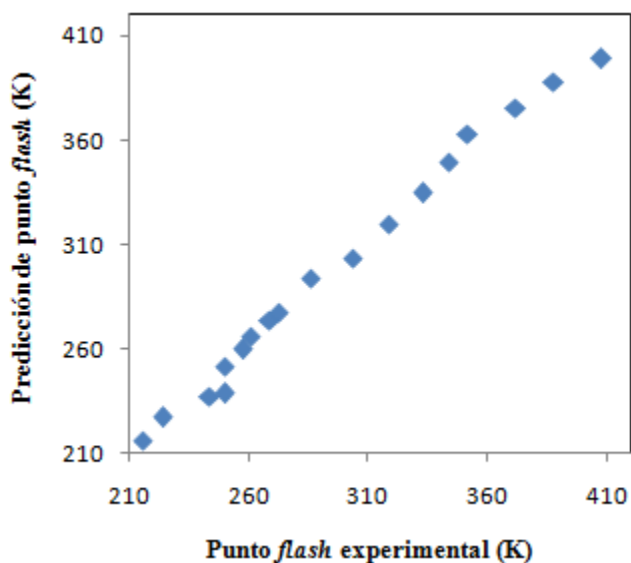


Figura 3.4: Predicción de punto *flash* de 19 alcanos comparada con punto *flash* experimentales.

Tabla 3.4: Predicción de punto *flash* para 48 alcanos.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación(K)
1	Butano	213	200.22	-12.78
2	Heptano	269	273.48	4.48
3	Hexano	250	251.44	1.44
4	Octano	286	294.02	8.02
5	Pentano	224	227.25	3.25
6	Propano	169	165.93	-3.07
7	2,2-dimetilbutano	225	231.00	6.00
8	2,3-dimetilbutano	244	237.27	-6.73
9	2-metilpentano	250	238.75	-11.25
10	2,4-dimetilpentano	261	252.91	-8.09
11	3-metilhexano	258	261.19	3.19
12	2,3-dimetilhexano	283	277.92	-5.08
13	2,4-dimetilhexano	283	273.42	-9.58
14	2,2,4-trimetilpentano	261	265.98	4.98
15	2,2-dimetilheptano	297	289.81	-7.19
16	2,6-dimetilheptano	299	291.68	-7.32
17	N-nonano	304	303.11	-0.89
18	2,2,5-trimetilhexano	286	283.54	-2.46
19	N-decano	319	319.61	0.61
20	2-metilnonano	314	314.35	0.35
21	N-undecano	333	334.73	1.73
22	N-dodecano	344	349.39	5.39
23	N-tridecano	352	362.81	10.81
24	N-tetradecano	372	375.40	3.40

Continuación.

25	3-etilpentano	255	262.33	7.33
26	2,2-dimetilpentano	250	251.90	1.90
27	2,2,3-trimetilpentano	270	273.67	3.67
28	3-etilhexano	278	280.09	2.09
29	3-metilheptano	279	280.34	1.34
30	3,3-dimetilhexano	272	275.25	3.25
31	2,5-dimetilhexano	271	273.22	2.22
32	3-metiloctano	297	298.27	1.27
33	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	289.76	5.76
34	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	282.07	6.07
35	2,2,3-trimetilhexano	288	290.41	2.41
36	Hexadecano	408	398.89	-9.11
37	2-metilbutano	216	216.15	0.15
38	2,3,3-trimetilpentano	273	277.23	4.23
39	2-metilheptano	277	279.41	2.41
40	2,2-dimetilhexano	269	271.56	2.56
41	5-metilnonano	312	312.85	0.85
42	3-metilpentano	241	240.95	-0.05
43	2,3-dimetilpentano	258	259.64	1.64
44	2,2,3-trimetilbutano	247	253.05	6.05
45	2,3,4-trimetilpentano	273	276.30	3.30
46	3,4-dimetilhexano	277	279.46	2.46
47	2,2,4-trimetilhexano	288	285.28	-2.72
48	Pentadecano	388	387.65	-0.35

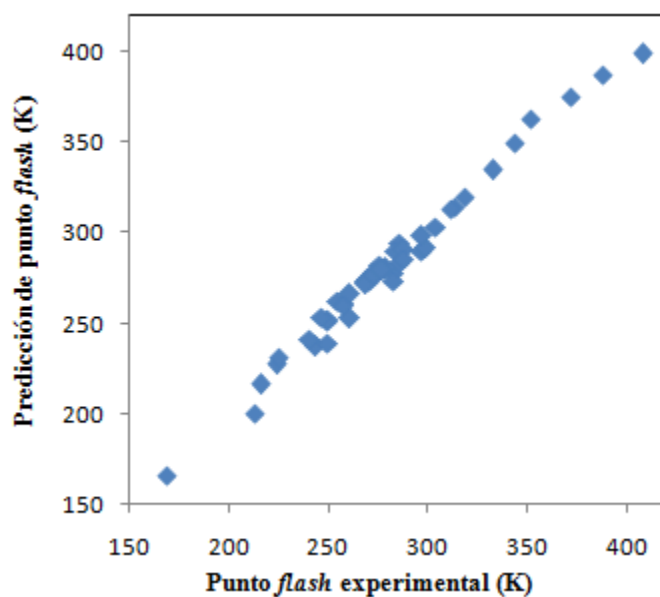


Figura 3.5: Predicción de punto *flash* de 48 alcanos comparada con punto *flash* experimentales

3.4 Modelos propuestos basados en el método de contribución de grupos

El método de contribución de grupos es también utilizado en este trabajo para la predicción de punto *flash* en alcanos. Este método, usado en su primer orden, presenta dificultades para diferenciar entre los isómeros debido a que tienen los mismos grupos funcionales y en la misma cantidad, ej. el 2-metil-hexano y 3-metil-hexano. En estos casos el método de primer orden predice el mismo valor de la propiedad para cada componente. La solución clásica consiste en desarrollar un orden mayor en los grupos funcionales que consiste básicamente en detectar el tipo de grupo vecino y/o el vecino del vecino (Constantinou *et al.*, 1995; Harper *et al.*, 1999; Marrero y Gani, 2001; d'Anterrosches y Gani, 2005a; d'Anterrosches y Gani, 2005b; Ceriani *et al.*, 2009a; Ceriani *et al.*, 2009b; Gálvez *et al.*, 2009; Satyanarayana *et al.*, 2009). Desafortunadamente la complejidad se incrementa sustancialmente y no existen datos suficientes para realizar una correlación suficientemente aceptable para diferenciar el valor de las propiedades para estos isómeros. En consecuencia, en este trabajo se propone una combinación del esquema de contribución de grupos con la propuesta convencional de ecuaciones empíricas como las indicadas en la sección anterior. Así, se proponen dos modelos donde se toma en cuenta la relación adimensional de la temperatura de ebullición y la temperatura de punto *flash*, así como la relación del calor de reacción y el calor de vaporización. El análisis de los modelos propuestos continúa basándose en los datos experimentales de las temperaturas de punto *flash* de los alcanos. El tercer modelo propuesto contiene la relación adimensional de la temperatura de ebullición, la temperatura de punto *flash* y se añade la parte de contribución de grupos. Para este modelo se usaron los datos experimentales de la lista de 82 alcanos y se generaron cuatro grupos funcionales para esta lista de alcanos (ver Tabla 3.4). La expresión propuesta es:

$$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \alpha_1 \sum n_1 + \alpha_2 \sum n_2 + \alpha_3 \sum n_3 + \alpha_4 \sum n_4 \quad (3.5)$$

donde β_0 es un parámetro a ajustar, n_1, n_2, n_3, n_4 son los grupos funcionales indicados en la Tabla 3.4, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ son los parámetros basados en el ajuste que se indica en la misma Tabla 3.4.

Los datos de la lista de 82 alcanos son ajustados a la ecuación (3.5) usando el resolutor implementado en Excel y se obtiene el valor de la constante $\beta_0 = 0.7605$ y el valor de los parámetros α como se indica en la Tabla 3.5. El promedio absoluto del error es de 1.4% y el promedio absoluto de la desviación de 4 K. La Tabla 3.6 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* y la Figura 3.6 muestra los resultados gráficamente comparados con respecto a los datos de punto *flash* obtenidos por métodos experimentales.

Tabla 3.5: Grupos funcionales y parámetros para los 82 alcanos.

n_i	Grupo	α_i	n_i	Grupo	α_i
1	CH ₃ –	-0.01628898	3	=CH=	0.00954548
2	–CH ₂ –	-0.0013957	4	–C≡	0.02400142

Tabla 3.6: Predicción de punto *flash* para 82 alcanos.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)
1	Propano	169	167.87	-1.13
2	Butano	213	197.69	-15.31
3	Pentano	224	223.79	-0.21
4	Hexano	250	246.95	-3.05
5	Heptano	269	267.88	-1.12
6	Octano	286	286.97	0.97
7	2,2-dimetilbutano	225	231.81	6.81
8	2,3-dimetilbutano	244	237.94	-6.06
9	2-metilpentano	250	239.52	-10.48
10	2,4-dimetilpentano	261	252.17	-8.83
11	3-metilhexano	258	261.70	3.70
12	2,3-dimetilhexano	283	276.65	-6.35
13	2,4-dimetilhexano	283	278.32	-4.68
14	2,2,4-trimetilpentano	261	264.85	3.85
15	2,2-dimetilheptano	297	289.67	-7.33
16	2,6-dimetilheptano	299	292.22	-6.78
17	N-nonano	304	304.47	0.47
18	2,2,5-trimetilhexano	286	284.09	-1.91
19	N-decano	319	320.61	1.61
20	2-metilnonano	314	313.74	-0.26
21	N-undecano	333	335.24	2.24
22	N-dodecano	344	349.47	5.47
23	N-tridecano	352	362.42	10.42
24	N-tetradecano	372	374.59	2.59
25	3,3-dimetilpentano	254	257.39	3.39
26	3-etilpentano	255	262.86	7.86
27	2,2-dimetilpentano	250	252.47	2.47
28	2,2,3-trimetilpentano	270	272.38	2.38

Continuación.

29	3-metil-3-etilpentano	276	280.47	4.47
30	3-etilhexano	278	280.30	2.30
31	3-metilheptano	279	280.51	1.51
32	3,3-dimetilhexano	272	275.42	3.42
33	2,5-dimetilhexano	271	272.03	1.03
34	3,4-dimetilheptano	288	293.90	5.90
35	2,3-dimetilheptano	288	294.73	6.73
36	2,3-dimetil-3-etilpentano	288	294.68	6.68
37	3-metiloctano	297	298.09	1.09
38	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	286.69	2.69
39	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	280.51	4.51
40	4-etilheptano	288	295.79	7.79
41	2,4-dimetilheptano	288	289.18	1.18
42	2,3,4-trimetilhexano	288	291.81	3.81
43	2,3,5-trimetilhexano	288	285.45	-2.55
44	2,2,3-trimetilhexano	288	288.72	0.72
45	3,5-dimetilheptano	288	290.60	2.60
46	4-etiloctano	314	314.45	0.45
47	2,4,5-trimetilheptano	304	303.21	-0.79
48	2,3-dimetiloctano	314	309.87	-4.13
49	3,3-dimetiloctano	314	309.27	-4.73
50	2,6-dimetiloctano	314	307.04	-6.96
51	3,3,4,4-tetrametilhexano	304	313.74	9.74
52	2,2,5,5-tetrametilhexano	304	290.73	-13.27
53	2,3,3,4-tetrametilhexano	304	308.66	4.66
54	2,3,4,5-tetrametilhexano	304	304.32	0.32
55	2,2,4,4-tetrametilhexano	304	301.70	-2.30
56	3,3,5-trimetilheptano	304	303.77	-0.23
57	2,3,5-trimetilheptano	304	302.51	-1.49
58	3-etil-3-metilheptano	314	311.41	-2.59
59	4-etil-3-metilheptano	314	312.62	-1.38
60	Hexadecano	408	396.69	-11.31
61	2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano	368	355.33	-12.67
62	2-metilbutano	216	216.65	0.65
63	2,3,3-trimetilpentano	273	275.88	2.88
64	2-metilheptano	277	279.65	2.65
65	2,2-dimetilhexano	269	271.76	2.76
66	3-etil-2,2-dimetilpentano	286	289.00	3.00
67	4,4-dimetilheptano	288	291.32	3.32
68	2,3,3-trimetilhexano	288	291.84	3.84
69	2,4,6-trimetilheptano	304	294.75	-9.25
70	2,3,4,4-tetrametilhexano	304	306.55	2.55
71	3,4,5-trimetilheptano	304	308.15	4.15
72	5-metilnonano	312	312.32	0.32
73	3-metilpentano	241	241.67	0.67
74	2,3-dimetilpentano	258	258.76	0.76
75	2,2,3-trimetilbutano	247	252.26	5.26
76	2,3,4-trimetilpentano	273	273.59	0.59
77	3,4-dimetilhexano	277	278.18	1.18
78	3-etil-4-metilhexano	288	293.76	5.76
79	2,2,4-trimetilhexano	288	283.71	-4.29
80	2,7-dimetiloctano	314	306.95	-7.05
81	2,2,3,4-tetrametilhexano	304	301.62	-2.38
82	Pentadecano	388	385.98	-2.02

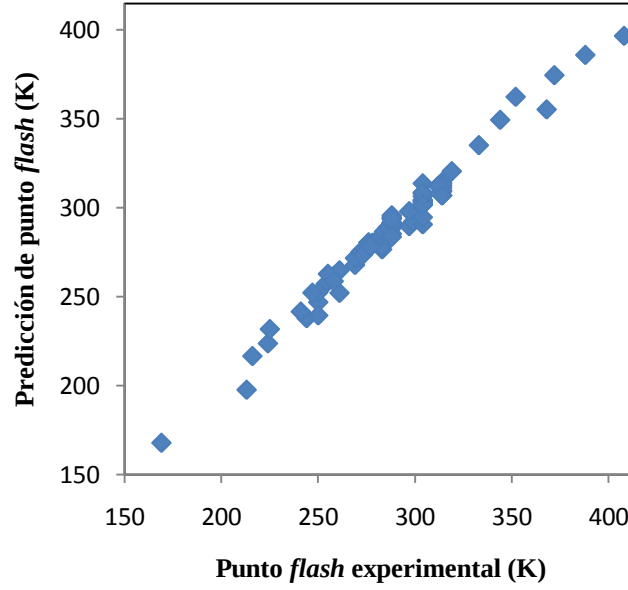


Figura 3.6: Predicción de punto *flash* de 82 alcanos comparada con punto *flash* experimentales.

El cuarto modelo propuesto para la predicción de punto *flash* en los alcanos utiliza de igual manera el método de contribución de grupos. El modelo analiza los datos experimentales de la lista de 19 alcanos y posteriormente la lista que se completó anteriormente descrita de 48 alcanos. Este método contiene las dos relaciones adimensionales antes definidas y la parte de contribución de grupos. Añadiendo la relación adimensional del calor de reacción y el calor de vaporización en conjunto con la parte de contribución de grupos los resultados del análisis del modelo son más aceptables con respecto a los datos experimentales. El modelo propuesto es:

$$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \right) + \alpha_1 \sum n_1 + \alpha_2 \sum n_2 + \alpha_3 \sum n_3 + \alpha_4 \sum n_4 \quad (3.6)$$

donde β_0 , β_1 constantes, n_1 , n_2 , n_3 , n_4 son los grupos funcionales indicados en la Tabla 3.7, α_1 , α_2 , α_3 , α_4 son los parámetros basados en el ajuste que se indican en la misma Tabla 3.7.

Tabla 3.7: Grupos funcionales y parámetros para los 19 alcanos.

n_i	Grupo	α_i	n_i	Grupo	α_i
1	CH ₃ –	-0.0242924	3	=CH=	0.0071968
2	–CH ₂ –	-0.0072769	4	–C≡	0.0156201

Posteriormente, se aplica la ecuación (3.6) para ajustar los datos de los 19 alcanos para la predicción de punto *flash*. Se obtienen las dos constantes β_0 y β_1 sus valores son 0.8182 y -0.00004, respectivamente, obteniendo el promedio absoluto del error de 1.18% y el promedio absoluto de la desviación de 3.32 K. Así, también se predice el punto *flash* para la lista de 48 alcanos usando las mismas constantes del ajuste con los 19 alcanos obteniendo un promedio absoluto del error de 1.63% y el promedio absoluto de la desviación de 4.33K. La Tabla 3.8 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* para los 19 alcanos donde se observa la desviación con respecto a los valores de punto *flash* experimentales. La Figura 3.7 muestra gráficamente los resultados obtenidos de la predicción de punto *flash* para los 19 alcanos comparados con respecto a los datos de punto *flash* experimentales. Además, la Tabla 3.9 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* para los 48 alcanos y la Figura 3.8 muestra gráficamente los resultados obtenidos de la predicción de punto *flash* para los 48 alcanos comparados con respecto a los datos de punto *flash* experimentales.

Tabla 3.8: Predicción de punto *flash* para 19 alcanos.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación(K)
1	Butano	213	204.56	-8.44
2	Heptano	269	270.36	1.36
3	Hexano	250	251.35	1.35
4	Octano	286	287.01	1.01
5	Pentano	224	229.67	5.67
6	2,3-dimetilbutano	244	243.58	-0.42
7	2-metilpentano	250	247.89	-2.11
8	2,2,4-trimetilpentano	261	267.68	6.68
9	N-nonano	304	307.30	3.30
10	N-decano	319	321.07	2.07
11	N-undecano	333	333.04	0.04
12	N-dodecano	344	344.42	0.42
13	N-tridecano	352	354.31	2.31
14	N-tetradecano	372	363.28	-8.72

Continuación.

15	Hexadecano	408	402.47	-5.53
16	2-metilbutano	216	213.53	-2.47
17	2,3,3-trimetilpentano	273	279.24	6.24
18	2,3-dimetilpentano	258	258.46	0.46
19	Pentadecano	388	383.41	-4.59

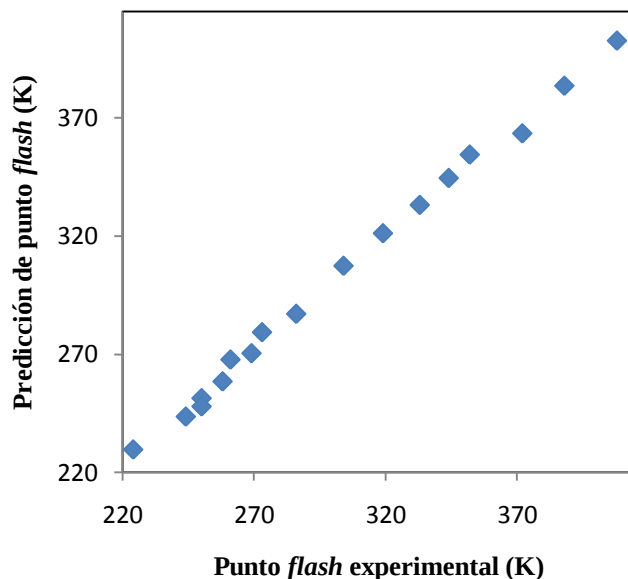


Figura 3.7: Predicción de punto *flash* de 19 alcanos comparada con punto *flash* experimentales.

Tabla 3.9: Predicción de punto *flash* para 48 alcanos.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación(K)
1	Butano	213	204.56	-8.44
2	Heptano	269	270.36	1.36
3	Hexano	250	251.35	1.35
4	Octano	286	287.01	1.01
5	Pentano	224	229.67	5.67
6	Propano	169	177.16	8.16
7	2,2-dimetilbutano	225	237.40	12.40
8	2,3-dimetilbutano	244	243.58	-0.42
9	2-metilpentano	250	247.89	-2.11
10	2,4-dimetilpentano	261	259.65	-1.35
11	3-metilhexano	258	268.82	10.82
12	2,3-dimetilhexano	283	282.64	-0.36
13	2,4-dimetilhexano	283	284.21	1.21
14	2,2,4-trimetilpentano	261	267.68	6.68
15	2,2-dimetilheptano	297	289.84	-7.16
16	2,6-dimetilheptano	299	298.08	-0.92
17	N-nonano	304	307.30	3.30
18	2,2,5-trimetilhexano	286	286.66	0.66
19	N-decano	319	321.07	2.07

Continuación.

20	2-metilnonano	314	314.90	0.90
21	N-undecano	333	333.04	0.04
22	N-dodecano	344	344.42	0.42
23	N-tridecano	352	354.31	2.31
24	N-tetradecano	372	363.28	-8.72
25	3-etilpentano	255	270.02	15.02
26	2,2-dimetilpentano	250	256.59	6.59
27	2,2,3-trimetilpentano	270	275.24	5.24
28	3-etilhexano	278	285.75	7.75
29	3-metilheptano	279	285.94	6.94
30	3,3-dimetilhexano	272	277.71	5.71
31	2,5-dimetilhexano	271	277.95	6.95
32	3-metiloctano	297	300.47	3.47
33	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	295.64	11.64
34	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	281.57	5.57
35	2,2,3-trimetilhexano	288	294.02	6.02
36	Hexadecano	408	402.47	-5.53
37	2-metilbutano	216	213.53	-2.47
38	2,3,3-trimetilpentano	273	279.24	6.24
39	2-metilheptano	277	279.42	2.42
40	2,2-dimetilhexano	269	269.84	0.84
41	5-metilnonano	312	312.40	0.40
42	3-metilpentano	241	237.39	-3.61
43	2,3-dimetilpentano	258	258.46	0.46
44	2,2,3-trimetilbutano	247	246.16	-0.84
45	2,3,4-trimetilpentano	273	268.85	-4.15
46	3,4-dimetilhexano	277	274.16	-2.84
47	2,2,4-trimetilhexano	288	283.02	-4.98
48	Pentadecano	388	383.41	-4.59

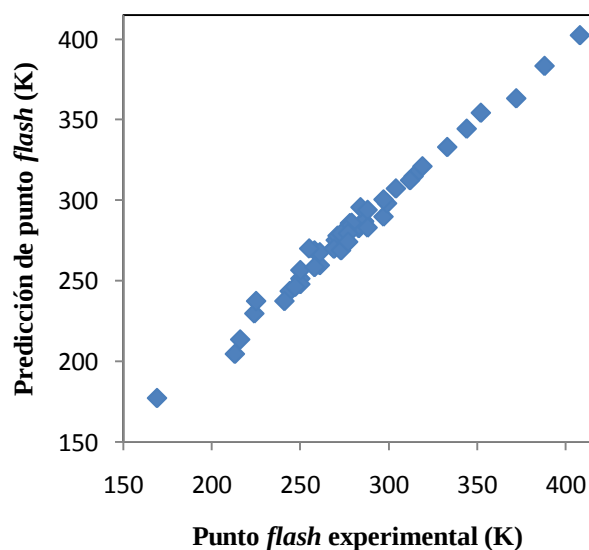


Figura 3.8: Predicción de punto *flash* de 48 alcanos comparada con punto *flash* experimentales.

3.5 Comparación de los modelos propuestos con modelos anteriores

Los modelos propuestos para la predicción de punto *flash* presentados en las secciones anteriores producen resultados aceptablemente cercanos a los valores experimentales. A continuación, los resultados con los modelos propuestos en este trabajo se comparan con los trabajos reportados anteriormente.

3.5.1 Comparación de los modelos basados en correlaciones directas

Los resultados de los modelos, ecuaciones (3.3) y (3.4) se comparan con trabajos anteriores y se observa que los valores de punto *flash* pueden llegar a ser más de 10° de diferencia con respecto a los datos obtenidos por métodos experimentales. La primera ecuación que se compara fue desarrollada por Satyanarayana y Rao (Satyanarayana y Rao, 1992), la cual predice la temperatura de punto *flash* por familia, en este caso solo se tomaron las constantes para predecir el punto *flash* para la familia de alcanos. Las Tablas 3.10 y 3.11 comparan los valores de punto *flash* obtenidos con la ecuación de Satyanarayana y Rao para la familia de alcanos y los resultados de las ecuaciones propuestas (3.3) y (3.4), respectivamente.

Tabla 3.10: Comparación de la temperatura de punto *flash* para 82 alcanos.

No.	Compuesto	Tf exp (K)	Tf (K)predicción Ec. (3.3)	Desviación (K)	Tf	
					(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación (K)
1	Propano	169	164.62	-4.38	228.47	59.47
2	Butano	213	194.24	-18.76	235.56	22.56
3	Pentano	224	220.30	-3.70	246.40	22.40
4	Hexano	250	243.57	-6.43	259.72	9.72
5	Heptano	269	264.73	-4.27	274.40	5.40
6	Octano	286	284.14	-1.86	289.60	3.60
7	2,2-dimetilbutano	225	230.04	5.04	251.57	26.57
8	2,3-dimetilbutano	244	236.11	-7.89	255.10	11.10
9	2-metilpentano	250	237.54	-12.46	255.96	5.96
10	2,4-dimetilpentano	261	251.96	-9.04	265.27	4.27
11	3-metilhexano	258	260.05	2.05	270.97	12.97
12	2,3-dimetilhexano	283	276.97	-6.03	283.82	0.82
13	2,4-dimetilhexano	283	272.57	-10.43	280.37	-2.63
14	2,2,4-trimetilpentano	261	265.31	4.31	274.84	13.84
15	2,2-dimetilheptano	297	289.14	-7.86	293.73	-3.27
16	2,6-dimetilheptano	299	290.94	-8.06	295.23	-3.77
17	N-nonano	304	302.05	-1.95	304.71	0.71
18	2,2,5-trimetilhexano	286	283.01	-2.99	288.69	2.69
19	N-decano	319	318.68	-0.32	319.37	0.37
20	2-metilnonano	314	313.59	-0.41	314.83	0.83
21	N-undecano	333	333.88	0.88	333.11	0.11
22	N-dodecano	344	348.73	4.73	346.68	2.68
23	N-tridecano	352	362.36	10.36	359.17	7.17

Continuación.

24	N-tetradecano	372	375.26	3.26	370.93	-1.07
25	3,3-dimetilpentano	254	255.92	1.92	268.02	14.02
26	3-etilpentano	255	261.20	6.20	271.81	16.81
27	2,2-dimetilpentano	250	251.03	1.03	264.64	14.64
28	2,2,3-trimetilpentano	270	272.86	2.86	280.60	10.60
29	3-metil-3-etilpentano	276	278.86	2.86	285.33	9.33
30	3-etilhexano	278	279.07	1.07	285.50	7.50
31	3-metilheptano	279	279.28	0.28	285.67	6.67
32	3,3-dimetilhexano	272	274.38	2.38	281.79	9.79
33	2,5-dimetilhexano	271	272.34	1.34	280.20	9.20
34	3,4-dimetilheptano	288	294.81	6.81	298.50	10.50
35	2,3-dimetilheptano	288	295.06	7.06	298.71	10.71
36	2,3-dimetil-3-etilpentano	288	295.78	7.78	299.32	11.32
37	3-metiloctano	297	297.36	0.36	300.67	3.67
38	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	289.37	5.37	293.92	9.92
39	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	281.73	5.73	287.64	11.64
40	4-etilheptano	288	295.06	7.06	298.71	10.71
41	2,4-dimetilheptano	288	290.08	2.08	294.51	6.51
42	2,3,4-trimetilhexano	288	294.35	6.35	298.11	10.11
43	2,3,5-trimetilhexano	288	287.94	-0.06	292.73	4.73
44	2,2,3-trimetilhexano	288	289.79	1.79	294.27	6.27
45	3,5-dimetilheptano	288	291.50	3.50	295.71	7.71
46	4-etiloctano	314	314.30	0.30	315.46	1.46
47	2,4,5-trimetilheptano	304	306.46	2.46	308.55	4.55
48	2,3-dimetiloctano	314	311.45	-2.55	312.94	-1.06
49	3,3-dimetiloctano	314	309.31	-4.69	311.05	-2.95
50	2,6-dimetiloctano	314	308.60	-5.40	310.42	-3.58
51	3,3,4,4-tetrametilhexano	304	315.72	11.72	316.73	12.73
52	2,2,5,5-tetrametilhexano	304	292.57	-11.43	296.60	-7.40
53	2,3,3,4-tetrametilhexano	304	312.16	8.16	313.57	9.57
54	2,3,4,5-tetrametilhexano	304	309.31	5.31	311.05	7.05
55	2,2,4,4-tetrametilhexano	304	303.61	-0.39	306.06	2.06
56	3,3,5-trimetilheptano	304	305.50	1.50	307.71	3.71
57	2,3,5-trimetilheptano	304	305.75	1.75	307.93	3.93
58	3-etil-3-metilheptano	314	311.45	-2.55	312.94	-1.06
59	4-etil-3-metilheptano	314	313.59	-0.41	314.83	0.83
60	Hexadecano	408	398.97	-9.03	392.21	-15.79
61	2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano	368	365.49	-2.51	362.03	-5.97
62	2-metilbutano	216	214.45	-1.55	243.58	27.58
63	2,3,3-trimetilpentano	273	276.36	3.36	283.34	10.34
64	2-metilheptano	277	278.43	1.43	284.99	7.99
65	2,2-dimetilhexano	269	270.73	1.73	278.95	9.95
66	3-etil-2,2-dimetilpentano	286	290.08	4.08	294.51	8.51
67	4,4-dimetilheptano	288	290.79	2.79	295.11	7.11
68	2,3,3-trimetilhexano	288	292.93	4.93	296.90	8.90
69	2,4,6-trimetilheptano	304	297.91	-6.09	301.14	-2.86
70	2,3,4,4-tetrametilhexano	304	310.02	6.02	311.68	7.68
71	3,4,5-trimetilheptano	304	311.45	7.45	312.94	8.94
72	5-metilnonano	312	312.16	0.16	313.57	1.57
73	3-metilpentano	241	239.67	-1.33	257.26	16.26
74	2,3-dimetilpentano	258	258.55	0.55	269.89	11.89
75	2,2,3-trimetilbutano	247	252.21	5.21	265.44	18.44
76	2,3,4-trimetilpentano	273	275.43	2.43	282.61	9.61
77	3,4-dimetilhexano	277	278.50	1.50	285.04	8.04
78	3-etil-4-metilhexano	288	294.67	6.67	298.38	10.38
79	2,2,4-trimetilhexano	288	284.77	-3.23	290.12	2.12
80	2,7-dimetiloctano	314	308.51	-5.49	310.34	-3.66
81	2,2,3,4-tetrametilhexano	304	305.04	1.04	307.30	3.30
82	Pentadecano	388	387.43	-0.57	381.92	-6.08

Tabla 3.11: Comparación de la temperatura de punto *flash* para 48 alcanos.

No.	Compuesto	Tf exp(K)	Tf (K)predicción	Desviación	Tf (K)(Satyanarayana y	Desviación
			Ec. 3.4	(K)	Rao, 1992)	(K)
1	Butano	213	200.22	-12.78	235.56	22.56
2	Heptano	269	273.48	4.48	274.40	5.40
3	Hexano	250	251.44	1.44	259.72	9.72
4	Octano	286	294.02	8.02	289.60	3.60
5	Pentano	224	227.25	3.25	246.40	22.40
6	Propano	169	165.93	-3.07	228.47	59.47
7	2,2-dimetilbutano	225	231.00	6.00	251.57	26.57
8	2,3-dimetilbutano	244	237.27	-6.73	255.10	11.10
9	2-metilpentano	250	238.75	-11.25	255.96	5.96
10	2,4-dimetilpentano	261	252.91	-8.09	265.27	4.27
11	3-metilhexano	258	261.19	3.19	270.97	12.97
12	2,3-dimetilhexano	283	277.92	-5.08	283.82	0.82
13	2,4-dimetilhexano	283	273.42	-9.58	280.37	-2.63
14	2,2,4-trimetilpentano	261	265.98	4.98	274.84	13.84
15	2,2-dimetilheptano	297	289.81	-7.19	293.73	-3.27
16	2,6-dimetilheptano	299	291.68	-7.32	295.23	-3.77
17	N-nonano	304	303.11	-0.89	304.71	0.71
18	2,2,5-trimetilhexano	286	283.54	-2.46	288.69	2.69
19	N-decano	319	319.61	0.61	319.37	0.37
20	2-metilnonano	314	314.35	0.35	314.83	0.83
21	N-undecano	333	334.73	1.73	333.11	0.11
22	N-dodecano	344	349.39	5.39	346.68	2.68
23	N-tridecano	352	362.81	10.81	359.17	7.17
24	N-tetradecano	372	375.40	3.40	370.93	-1.07
25	3-etilpentano	255	262.33	7.33	271.81	16.81
26	2,2-dimetilpentano	250	251.90	1.90	264.64	14.64
27	2,2,3-trimetilpentano	270	273.67	3.67	280.60	10.60
28	3-etilhexano	278	280.09	2.09	285.50	7.50
29	3-metilheptano	279	280.34	1.34	285.67	6.67
30	3,3-dimetilhexano	272	275.25	3.25	281.79	9.79
31	2,5-dimetilhexano	271	273.22	2.22	280.20	9.20
32	3-metiloctano	297	298.27	1.27	300.67	3.67
33	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	289.76	5.76	293.92	9.92
34	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	282.07	6.07	287.64	11.64
35	2,2,3-trimetilhexano	288	290.41	2.41	294.27	6.27
36	Hexadecano	408	398.89	-9.11	392.21	-15.79
37	2-metilbutano	216	216.15	0.15	243.58	27.58
38	2,3,3-trimetilpentano	273	277.23	4.23	283.34	10.34
39	2-metilheptano	277	279.41	2.41	284.99	7.99
40	2,2-dimetilhexano	269	271.56	2.56	278.95	9.95
41	5-metilnonano	312	312.85	0.85	313.57	1.57
42	3-metilpentano	241	240.95	-0.05	257.26	16.26
43	2,3-dimetilpentano	258	259.64	1.64	269.89	11.89
44	2,2,3-trimetilbutano	247	253.05	6.05	265.44	18.44
45	2,3,4-trimetilpentano	273	276.30	3.30	282.61	9.61
46	3,4-dimetilhexano	277	279.46	2.46	285.04	8.04
47	2,2,4-trimetilhexano	288	285.28	-2.72	290.12	2.12
48	Pentadecano	388	387.65	-0.35	381.92	-6.08

3.5.2 Comparación de los modelos basados en el método de contribución de grupos

En la predicción de punto *flash* para alcanos se aplican los modelos propuestos, ecuaciones (3.5) y (3.6) a la lista de 82 y 48 alcanos, respectivamente. Las Tablas 3.12 y 3.13 presentan

los resultados de las temperaturas de punto *flash* obtenidas por el modelo propuesto (3.5) comparados con trabajos anteriores que estudian a los alcanos, donde se utiliza el método de redes neuronales y el método de contribución de grupos (Yong *et al.*, 2007b; Yong *et al.*, 2007a).

Tabla 3.12: Comparación de punto *flash* para 13 alcanos, con la ecuación (3.5) y el trabajo (Yong *et al.*, 2007b).

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)	Tf (Yong <i>et al.</i> , 2007b)	Desviación (K)
1	3-Metilpentano	241	241.67	0.67	242.40	1.4
2	2,3-Dimetilpentano	258	258.76	0.76	257.60	-0.4
3	3-Metilhexano	258	261.70	3.70	259.60	1.6
4	2,2,3-Trimetilbutano	247	252.26	5.26	251.50	4.5
5	Octano	286	286.97	0.97	279.60	-6.4
6	2,3,4-Trimetilpentano	273	273.59	0.59	272.70	-0.3
7	3,4-Dimetilhexano	277	278.18	1.18	274.30	-2.7
8	3-Etil-4-metilhexano	288	293.76	5.76	291.10	3.1
9	2,2,4-Trimetilhexano	288	283.71	-4.29	283.30	-4.7
10	2,7-Dimetiloctano	314	306.95	-7.05	309.03	-4.97
11	2,2,3,4-Tetrametilhexano	304	301.62	-2.38	300.10	-3.9
12	Tridecano	352	362.42	10.42	365.50	13.5
13	Pentadecano	388	385.98	-2.02	399.90	11.9

Tabla 3.13: Comparación de punto *flash* para 6 alcanos, con la ecuación (3.5) y el trabajo (Yong *et al.*, 2007a).

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)	Tf (Yong <i>et al.</i> , 2007a)	Desviación (K)
1	2-Metilbutano	216	216.65	0.65	222.60	6.60
2	Hexano	250	246.95	-3.05	244.97	-5.03
3	2,3-Dimetilbutano	244	237.94	-6.06	234.50	-9.50
4	Octano	286	286.97	0.97	282.28	-3.72
5	Dodecano	344	349.47	5.47	350.61	6.61
6	Pentadecano	388	385.98	-2.02	395.22	7.22

Por otro lado, los resultados del modelo propuesto, ecuación (3.6) se comparan de igual forma con los mismos trabajos mencionados (ver Tablas 3.14 y 3.15) (Yong *et al.*, 2007b; Yong *et al.*, 2007a). Además, los resultados de las predicciones de la temperatura de punto *flash* obtenidos con las ecuaciones propuestas (3.5) y (3.6) se comparan con el trabajo recientemente aceptado para publicación que utiliza como base el método de contribución

de grupos y utiliza los mismos componentes para su ajuste que los utilizados en este trabajo (Mathieu, 2010). Las Tablas 3.16 y 3.17 muestran la desviación de la temperatura de punto *flash* obtenida con las ecuaciones propuestas (3.5) y (3.6) con respecto al valor experimental y presenta la comparación con el trabajo mencionado.

Tabla 3.14: Comparación de punto *flash* para 9 alcanos con la ecuación (3.6) y el trabajo (Yong *et al.*, 2007b).

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)	Tf (Yong <i>et al.</i> , 2007b)	Desviación (K)
1	2,3-Dimetilpentano	258	258.46	0.46	257.60	-0.4
2	3-Metilhexano	258	268.82	10.82	259.60	1.6
3	Octano	286	287.01	1.01	279.60	-6.4
4	3,4-Dimetilhexano	277	274.16	-2.84	274.30	-2.7
5	2,2,4-Trimetilhexano	288	283.02	-4.98	283.30	-4.7
6	Tridecano	352	354.31	2.31	365.50	13.5
7	Pentadecano	388	383.41	-4.59	399.90	11.9

Tabla 3.15: Comparación de punto *flash* para 6 alcanos con la ecuación (3.6) y el trabajo (Yong *et al.*, 2007a).

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)	Tf (Yong <i>et al.</i> , 2007a)	Desviación (K)
1	2-Metilbutano	216	213.53	-2.47	222.60	6.60
2	Hexano	250	251.35	12.51	244.97	-5.03
3	2,3-Dimetilbutano	244	243.58	-0.42	234.50	-9.50
4	Octano	286	287.01	1.01	282.28	-3.72
5	Dodecano	344	344.42	0.42	350.61	6.61
6	Pentadecano	388	383.41	-4.59	395.22	7.22

Tabla 3.16: Comparación de punto *flash* para 82 alcanos.

No.	Compuesto	Tf exp(K)	Tf (K)predicción Ec. 3.5	Desviación (K)	Tf (K)(Mathieu, 2010)	Desviación (K)
1	Butano	213	197.69	-15.31	202	-10.8
2	Heptano	269	267.88	-1.12	267	-2.4
3	Hexano	250	246.95	-3.05	247	-3
4	Octano	286	286.97	0.97	285	-1.2
5	Pentano	224	223.79	-0.21	226	1.7
6	Propano	169	167.87	-1.13	176	6.5
7	2,2-dimetilbutano	225	231.81	6.81	235	9.6
8	2,3-dimetilbutano	244	237.94	-6.06	236	-7.5
9	2-metilpentano	250	239.52	-10.48	242	-8.2
10	2,4-dimetilpentano	261	252.17	-8.83	257	-4.1
11	3-metilhexano	258	261.70	3.70	262	3.8
12	2,3-dimetilhexano	283	276.65	-6.35	276	-7.2
13	2,4-dimetilhexano	283	278.32	-4.68	276	-7.2
14	2,2,4-trimetilpentano	261	264.85	3.85	269	8.5
15	2,2-dimetilheptano	297	289.67	-7.33	292	-5.1
16	2,6-dimetilheptano	299	292.22	-6.78	293	-5.6
17	N-nonano	304	304.47	0.47	302	-2.0
18	2,2,5-trimetilhexano	286	284.09	-1.91	288	1.5
19	N-decano	319	320.61	1.61	318	-0.8

Continuación.

20	2-metilnonano	314	313.74	-0.26	314	0.2
21	N-undecano	333	335.24	2.24	334	0.6
22	N-dodecano	344	349.47	5.47	348	4.4
23	N-tridecano	352	362.42	10.42	363	10.5
24	N-tetradecano	372	374.59	2.59	376	4.1
25	3,3-dimetilpentano	254	257.39	3.39	255	1.1
26	3-etilpentano	255	262.86	7.86	262	6.8
27	2,2-dimetilpentano	250	252.47	2.47	255	5.1
28	2,2,3-trimetilpentano	270	272.38	2.38	269	-0.5
29	3-metil-3-etilpentano	276	280.47	4.47	274	-1.9
30	3-etilhexano	278	280.30	2.30	280	2.3
31	3-metilheptano	279	280.51	1.51	280	1.3
32	3,3-dimetilhexano	272	275.42	3.42	274	2.1
33	2,5-dimetilhexano	271	272.03	1.03	276	4.8
34	3,4-dimetilheptano	288	293.90	5.90	293	5.4
35	2,3-dimetilheptano	288	294.73	6.73	293	5.4
36	2,3-dimetil-3-etilpentano	288	294.68	6.68	288	-0.5
37	3-metiloctano	297	298.09	1.09	298	0.7
38	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	286.69	2.69	283	-0.9
39	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	280.51	4.51	281	5.5
40	4-etilheptano	288	295.79	7.79	298	9.7
41	2,4-dimetilheptano	288	289.18	1.18	293	5.4
42	2,3,4-trimetilhexano	288	291.81	3.81	289	1.1
43	2,3,5-trimetilhexano	288	285.45	-2.55	289	1.1
44	2,2,3-trimetilhexano	288	288.72	0.72	288	-0.5
45	3,5-dimetilheptano	288	290.60	2.60	293	5.4
46	4-etiloctano	314	314.45	0.45	314	0.2
47	2,4,5-trimetilheptano	304	303.21	-0.79	306	2
48	2,3-dimetiloctano	314	309.87	-4.13	310	-3.9
49	3,3-dimetiloctano	314	309.27	-4.73	309	-5.3
50	2,6-dimetiloctano	314	307.04	-6.96	310	-3.9
51	3,3,4,4-tetrametilhexano	304	313.74	9.74	299	-5.2
52	2,2,5,5-tetrametilhexano	304	290.73	-13.27	299	-5.2
53	2,3,3,4-tetrametilhexano	304	308.66	4.66	300	-3.7
54	2,3,4,5-tetrametilhexano	304	304.32	0.32	302	-2.2
55	2,2,4,4-tetrametilhexano	304	301.70	-2.30	299	-5.2
56	3,3,5-trimetilheptano	304	303.77	-0.23	305	0.5
57	2,3,5-trimetilheptano	304	302.51	-1.49	306	2
58	3-etil-3-metilheptano	314	311.41	-2.59	309	-5.3
59	4-etil-3-metilheptano	314	312.62	-1.38	310	-3.9
60	Hexadecano	408	396.69	-11.31	402	-6
61	2,2,4,4,6,8,8-heptametilnonano	368	355.33	-12.67	376	4.1
62	2-metilbutano	216	216.65	0.65	220	4
63	2,3,3-trimetilpentano	273	275.88	2.88	269	-3.5
64	2-metilheptano	277	279.65	2.65	280	3.3
65	2,2-dimetilhexano	269	271.76	2.76	274	5.1
66	3-etil-2,2-dimetilpentano	286	289.00	3.00	288	1.5
67	4,4-dimetilheptano	288	291.32	3.32	292	3.9
68	2,3,3-trimetilhexano	288	291.84	3.84	288	-0.5
69	2,4,6-trimetilheptano	304	294.75	-9.25	306	2
70	2,3,4,4-tetrametilhexano	304	306.55	2.55	300	-3.7
71	3,4,5-trimetilheptano	304	308.15	4.15	306	2
72	5-metilnonano	312	312.32	0.32	314	2.2
73	3-metilpentano	241	241.67	0.67	242	0.8
74	2,3-dimetilpentano	258	258.76	0.76	257	-1.1
75	2,2,3-trimetilbutano	247	252.26	5.26	250	3.1
76	2,3,4-trimetilpentano	273	273.59	0.59	271	-1.9
77	3,4-dimetilhexano	277	278.18	1.18	276	-1.2
78	3-etil-4-metilhexano	288	293.76	5.76	293	5.4
79	2,2,4-trimetilhexano	288	283.71	-4.29	288	-0.5

Continuación.

80	2,7-dimetiloctano	314	306.95	-7.05	310	-3.9
81	2,2,3,4-tetrametilhexano	304	301.62	-2.38	300	-3.7
82	Pentadecano	388	385.98	-2.02	389	1.3

Tabla 3.17: Comparación de punto *flash* para 48 alcanos.

No.	Compuesto	Tf exp(K)	Tf (K)predicción Ec.	Desviación (K)	Tf (K)(Mathieu,	Desviación (K)
			3.6		2010)	
1	Butano	213	204.56	-8.44	202	-10.8
2	Heptano	269	270.36	1.36	267	-2.4
3	Hexano	250	251.35	1.35	247	-3
4	Octano	286	287.01	1.01	285	-1.2
5	Pentano	224	229.67	5.67	226	1.7
6	Propano	169	177.16	8.16	176	6.5
7	2,2-dimetilbutano	225	237.40	12.40	235	9.6
8	2,3-dimetilbutano	244	243.58	-0.42	236	-7.5
9	2-metilpentano	250	247.89	-2.11	242	-8.2
10	2,4-dimetilpentano	261	259.65	-1.35	257	-4.1
11	3-metilhexano	258	268.82	10.82	262	3.8
12	2,3-dimetilhexano	283	282.64	-0.36	276	-7.2
13	2,4-dimetilhexano	283	284.21	1.21	276	-7.2
14	2,2,4-trimetilpentano	261	267.68	6.68	269	8.5
15	2,2-dimetilheptano	297	289.84	-7.16	292	-5.1
16	2,6-dimetilheptano	299	298.08	-0.92	293	-5.6
17	N-nonano	304	307.30	3.30	302	-2
18	2,2,5-trimetilhexano	286	286.66	0.66	288	1.5
19	N-decano	319	321.07	2.07	318	-0.8
20	2-metilnonano	314	314.90	0.90	314	0.2
21	N-undecano	333	333.04	0.04	334	0.6
22	N-dodecano	344	344.42	0.42	348	4.4
23	N-tridecano	352	354.31	2.31	363	10.5
24	N-tetradecano	372	363.28	-8.72	376	4.1
25	3-etilpentano	255	270.02	15.02	262	6.8
26	2,2-dimetilpentano	250	256.59	6.59	255	5.1
27	2,2,3-trimetilpentano	270	275.24	5.24	269	-0.5
28	3-etilhexano	278	285.75	7.75	280	2.3
29	3-metilheptano	279	285.94	6.94	280	1.3
30	3,3-dimetilhexano	272	277.71	5.71	274	2.1
31	2,5-dimetilhexano	271	277.95	6.95	276	4.8
32	3-metiloctano	297	300.47	3.47	298	0.7
33	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	295.64	11.64	283	-0.9
34	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	281.57	5.57	281	5.5
35	2,2,3-trimetilhexano	288	294.02	6.02	288	-0.5
36	Hexadecano	408	402.47	-5.53	402	-6
37	2-metilbutano	216	213.53	-2.47	220	4
38	2,3,3-trimetilpentano	273	279.24	6.24	269	-3.5
39	2-metilheptano	277	279.42	2.42	280	3.3
40	2,2-dimetilhexano	269	269.84	0.84	274	5.1
41	5-metilnonano	312	312.40	0.40	314	2.2
42	3-metilpentano	241	237.39	-3.61	242	0.8
43	2,3-dimetilpentano	258	258.46	0.46	257	-1.1
44	2,2,3-trimetilbutano	247	246.16	-0.84	250	3.1
45	2,3,4-trimetilpentano	273	268.85	-4.15	271	-1.9
46	3,4-dimetilhexano	277	274.16	-2.84	276	-1.2
47	2,2,4-trimetilhexano	288	283.02	-4.98	288	-0.5
48	Pentadecano	388	383.41	-4.59	389	1.3

La Tabla 3.18 muestra los promedios absolutos de la desviación de los modelos propuestos de este trabajo en comparación con las ecuaciones descritas en el capítulo anterior. El primer modelo con el que se compara se utilizó solo para la predicción de punto *flash* referente a los alcanos. Los dos últimos modelos son trabajos que se enfocan solo en la predicción de punto *flash* para alcanos los cuales utilizan los mismos componentes para su análisis que los utilizados en este trabajo.

Tabla 3.18: Comparación de los cuatro modelos propuestos con ecuaciones anteriores.

Modelos Propuestos		Modelos anteriores	
	Prom. Abs. De Desv. (K)		Prom. Abs. De Desv. (K)
$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0$	4.25 Máx. 18.76	$T_f = a + \frac{b \left(\frac{c}{T_b} \right)^2 e^{-\frac{c}{T_b}}}{\left(1 - e^{-\frac{c}{T_b}} \right)^2}$	8.55
$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \right)$	4.19 Máx. 12.77	$FP = 175.234 + 9.180x_1 + 11.232x_2 + 0.796x_3 + 17.194x_4 + 18.802x_5 + 20.685x_6 + 20.660x_7 + 24.413x_8 + 29.851x_9$	6.1 Máx. 18.3
$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \alpha_1 \sum n_1 + \alpha_2 \sum n_2 + \alpha_3 \sum n_3 + \alpha_4 \sum n_4$	4.01 Máx. 15.31	$T_*^2 = \sum_{k=1}^4 n_k T_k^2$	4.54 Máx. 10.8
$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \right) + \alpha_1 \sum n_1 + \alpha_2 \sum n_2 + \alpha_3 \sum n_3 + \alpha_4 \sum n_4$	4.33 Máx. 15.02		

Tabla 3.19: Comparación de los cuatro modelos propuestos con valores obtenidos en Aspen

Compuesto	Tf exp(K)	Tf pred Ec.1 (K)	Tf pred Ec.2 (K)	Tf pred Ec.3 (K)	Tf pred Ec.4 (K)	Tf API (K)	Tf PM (K)	Tf Tag (K)
Propano	169	164.61	165.93	167.87	177.16	149.43	169.15	171.89
Pentano	224	220.29	227.25	223.79	229.67	215.51	222.14	225.45
Hexano	250	243.57	251.44	246.95	251.35	243.14	244.02	247.56
Heptano	269	264.72	273.48	267.88	270.36	268.07	264.2	267.91
Octano	286	284.14	294.02	286.97	287.01	289.96	283.26	287.02
N-nonano	304	302.05	303.11	304.47	307.3	309.17	299.99	304
N-decano	319	318.68	319.61	320.61	321.07	326.01	315.75	319.88
N-undecano	333	333.97	334.73	335.24	333.04	340.77	330.66	334.9
N-dodecano	344	348.72	349.39	349.47	344.42	353.71	343.05	347.41
Pentadecano	388	387.43	387.65	385.98	383.41	383.73	381.38	385.99
Hexadecano	408	398.97	398.89	396.69	402.47	391.38	392.11	396.8

La Tabla 3.19 muestra los valores de la predicción de punto *flash* para algunos compuestos obtenidos con los cuatro modelos propuestos en este trabajo y los valores de punto *flash* obtenidos por AspenPlus. En esta comparación se observa que los valores de punto *flash* obtenidos en Aspen si varía dependiendo del método que se elija, además los valores obtenidos por los cuatro modelos son aceptables comparados con los obtenidos en AspenPlus y con los reportados en la literatura. El siguiente capítulo describe los modelos propuestos en este trabajo para sistemas distintos a los alcanos.

Capítulo 4

Predicción del punto *flash* para componentes puros

En este capítulo se extiende la aplicación de los modelos propuestos en el capítulo anterior para la predicción de punto *flash* en cualquier tipo de componente puro. Además, se comparan los resultados obtenidos por la predicción con respecto a modelos propuestos en trabajos anteriores.

4.1 Descripción de los modelos propuestos aplicados a componentes puros

En éste trabajo se utiliza el método teórico basado en datos experimentales de la temperatura de punto *flash*. En la predicción de la temperatura de punto *flash* se han desarrollado trabajos basados en métodos experimentales y otros basados en métodos con fundamentos teóricos. Los métodos experimentales son usados con más fiabilidad para la determinación de punto *flash* (Lance *et al.*, 1979; Kong *et al.*, 2003; Kwon *et al.*, 2008; Li *et al.*, 2009). Sin embargo, los métodos con fundamentos teóricos son muy utilizados para la estimación de la temperatura de punto *flash*, tanto para componentes puros como es el caso de aplicación de correlaciones como para mezclas binarias en donde son usados modelos matemáticos más complejos. En los métodos con fundamentos teóricos no se debe olvidar que las bases de su desarrollo son ajustes de valores experimentales (Shebeko *et al.*, 1984; Satyanarayana y Rao, 1992; Liaw *et al.*, 2002; Liaw y Chiu, 2003; Liaw *et al.*, 2003; Liaw y Chiu, 2006; Katritzky *et al.*, 2007; Liaw y Lin, 2007; Liaw y Wang, 2007; Yong *et al.*, 2007b; Yong *et al.*, 2007a; Gharagheizi *et al.*, 2008; Gharagheizia y Alamdari, 2008; Liaw *et al.*, 2008a; Liaw *et al.*, 2008b; Liaw *et al.*, 2008c).

En los modelos propuestos, descritos en el capítulo anterior aplicados a la predicción del punto *flash* en alcanos, se observó que los resultados de las predicciones son aceptables con respecto a los valores experimentales. En consecuencia natural, los modelos propuestos basados en correlaciones directas se extienden para aplicarlos en la estimación de punto *flash* para cualquier componente puro. Para la aplicación de los modelos propuestos se tiene una lista de 611 componentes puros con los datos experimentales de punto *flash* y temperatura normal de ebullición. El modelo propuesto, ecuación (3.3) se aplica a la lista de 611 componentes puros. En la aplicación del modelo (3.4) la lista inicial de 611 componentes puros se reduce a 58, que incluye el calor de vaporización experimental y el calor de reacción experimental (ver Tabla 4.1). En la sección siguiente se aplican los modelos propuestos para la predicción de punto *flash* en componentes puros.

Tabla 4.1: Datos para 58 componentes puros.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tb (K)	ΔH_v (BTU/lb)	ΔH_r (BTU/lb)
1	Acetaldehído	235.37 ⁴	293.71 ⁴	245.09 ⁵	10500 ⁴
2	Ácido acético	312.59 ⁴	390.93 ⁴	174.14 ⁵	5600 ⁴
3	Acetona	253.15 ⁴	329.26 ⁴	222.30 ⁵	12300 ⁴
4	Acetonitrilo	278.71 ⁴	354.82 ⁴	312.60 ⁵	12600 ⁴
5	Acroleína	247.04 ⁴	325.92 ⁴	222.6 ⁴	11800 ⁴
6	Anilina	343.15 ⁴	457.59 ⁴	186.61 ⁵	15000 ⁴
7	Benzaldehído	337.59 ⁴	452.03 ⁴	155.65 ⁴	13700 ⁴
8	Benceno	262.04 ⁴	353.15 ⁴	169.22 ²	17300 ⁴
9	Alcohol bencílico	366.48 ⁴	479.26 ⁴	202.09 ⁵	13800 ⁴
10	O-bromo tolueno	352.04 ⁴	454.81 ⁴	103.67 ⁵	8500 ⁴
11	1,3-butadieno	197.04 ⁴	268.71 ⁴	178.59 ²	19200 ⁴
12	1-butanol	302.04 ⁴	390.37 ⁴	251.09 ²	14300 ⁴
13	Acetato de butilo	295.37 ⁴	399.75 ⁴	132.87 ²	12200 ⁴
14	Acrilato de butilo	312.59 ⁴	422.03 ⁴	158.69 ²	14200 ⁴
15	N-butilamina	260.93 ⁴	320.37 ⁴	186.99 ²	16300 ⁴
16	Disulfuro de carbono	243.15 ⁴	319.26 ⁴	160.82 ⁵	6100 ⁴
17	Ciclohexano	253.15 ⁴	354.81 ⁴	152.68 ³	18700 ⁴
18	Ciclohexanol	340.93 ⁴	434.26 ⁴	194.78 ⁵	15000 ⁴
19	Dietilamina	245.37 ⁴	328.70 ⁴	163.82 ⁵	16500 ⁴
20	Dietil carbonato	298.15 ⁴	399.15 ⁴	131.57 ⁵	9100 ⁴
21	Dietil éter	228.15 ⁴	307.59 ⁴	157.11 ³	14500 ⁴
22	2,2-dimetil-1-propanol	309.82 ⁴	387.04 ⁴	201.68 ³	14800 ⁴
23	1,4-dioxano	285.37 ⁴	374.26 ⁴	166.69 ⁵	10500 ⁴
24	Acetato de etilo	268.71 ⁴	350.37 ⁴	183.77 ⁵	10100 ⁴
25	Alcohol etílico	285.93 ⁴	351.48 ⁴	367.64 ⁵	11500 ⁴
26	Etil benceno	294.26 ⁴	409.26 ⁴	145.79 ⁵	17600 ⁴
27	Etil benzoato	360.93 ⁴	485.37 ⁴	116.09 ⁵	12200 ⁴
28	Etil butirato	297.04 ⁴	393.15 ⁴	134.41 ⁵	12200 ⁴
29	Cloruro de etilo	223.15 ⁴	285.37 ⁴	166.40 ⁵	8200 ⁴
30	Etil éter	228.154	307.594	150.925	144004
31	Formiato de etilo	253.154	327.594	174.915	87004
32	Furano	255.374	304.264	171.152	126004
33	Isopropanol	284.824	355.934	285.233	131004
34	Isopropil acetato	274.264	363.154	135.663	112004

Continuación.

35	Isopropilamina	247.04 ⁴	307.04 ⁴	205.31 ³	15500 ⁴
36	Metil acetato	263.15 ⁴	333.15 ⁴	177.66 ³	8500 ⁴
37	Metil alcohol	284.26 ⁴	337.04 ⁴	472.99 ⁵	8600 ⁴
38	Metilciclohexano	269.26 ⁴	374.26 ⁴	139.34 ³	19000 ⁴
39	Metil etil cetona	264.26 ⁴	353.15 ⁴	190.66 ⁵	13500 ⁴
40	Formiato de metilo	248.71 ⁴	304.82 ⁴	202.22 ⁵	6400 ⁴
41	Metil isobutil cetona	290.93 ⁴	389.82 ⁴	153.74 ³	16600 ⁴
42	Monoetanolamina	358.15 ⁴	443.71 ⁴	362.72 ³	9600 ⁴
43	Naftaleno	352.04 ⁴	490.93 ⁴	135.87 ⁵	16700 ⁴
44	Nitrobenceno	360.93 ⁴	483.71 ⁴	142.33 ⁵	10400 ⁴
45	Nitrometano	308.15 ⁴	373.71 ⁴	242.95 ⁵	5000 ⁴
46	Fenol	352.59 ⁴	454.26 ⁴	216.14 ³	13400 ⁴
47	Propil acetato	285.93 ⁴	374.82 ⁴	144.48 ⁵	11200 ⁴
48	Alcohol propílico	296.48 ⁴	370.37 ⁴	295.83 ⁵	12400 ⁴
49	Propilamina	235.93 ⁴	322.04 ⁴	214.92 ²	15800 ⁴
50	Propilbenceno	303.15 ⁴	432.59 ⁴	148.89 ⁵	17300 ⁴
51	Propileno	165.37 ⁴	225.37 ⁴	188.19 ²	19700 ⁴
52	Piridina	293.15 ⁴	388.71 ⁴	193.23 ⁵	5900 ⁴
53	Estireno	304.26 ⁴	418.15 ⁴	151.18 ³	17400 ⁴
54	Tolueno	277.59 ⁴	384.26 ⁴	156.23 ⁵	17400 ⁴
55	Trietanolamina	452.04 ⁴	616.48 ⁴	203.70 ³	10100 ⁴
56	Vinil acetato	265.37 ⁴	345.93 ⁴	156.75 ³	9700 ⁴
57	Cloruro de vinilo	195.37 ⁴	259.26 ⁴	157.00 ³	8000 ⁴
58	P-xileno	298.15 ⁴	410.37 ⁴	146.15 ³	17600 ⁴
1 (Yong et al., 2007b)		4 (AIChE, 1994)			
2 (Reid et al., 1987)		5 (Maloney, 2008)			
3 (Barrufet, 2010)					

4.2 Modelos basados en correlaciones directas aplicados a componentes puros

En la aplicación de los modelos propuestos basados en correlaciones directas de propiedades termodinámicas, para validar la predicción del punto *flash* que se extiende para componentes puros de cualquier tipo, se utilizaron primero las constantes resultantes del ajuste que se realizó para la familia de alcanos mostrada en el capítulo anterior para los dos modelos. Posteriormente, se ajustaron los datos para los dos modelos obteniendo nuevos valores para las constantes de cada modelo y un promedio del error absoluto menor al obtenido solamente sustituyendo las constantes que se utilizaron primero. Así, con los modelos propuestos que se extienden para ajustar los datos experimentales de los componentes puros, los resultados de la predicción de punto *flash* son aceptables comparados con los valores experimentales.

El primer modelo propuesto, ecuación (3.3), se emplea para analizar los datos experimentales de 611 componentes puros, a manera de validación se utiliza la constante

resultante del ajuste de los alcanos obtenida en el capítulo anterior $\beta_0=0.7124$. Se obtiene un promedio absoluto del error de 5.81%. La Tabla 4.2 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* de los 611 componentes puros. La Figura 4.1 muestra gráficamente los resultados obtenidos comparados con respecto a los datos de punto *flash* experimentales. Posteriormente se ajustan los datos para obtener un nuevo valor para la constante $\beta_0=0.7568$ y un promedio absoluto del error que se reduce a 3.34%. La Tabla 4.3 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* con el ajuste de los datos para los 611 componentes puros. La Figura 4.2 muestra gráficamente los resultados obtenidos comparados con respecto a los datos de punto *flash* experimentales.

Tabla 4.2: Predicción de punto *flash* para 611 componentes puros.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)
1	Acetaldehído	235.37	209.25	-26.12
2	Ácido acético	312.59	278.52	-34.08
3	Acetona	253.15	234.58	-18.57
4	Acetonitrilo	278.71	252.79	-25.92
5	Acroleína	247.04	232.20	-14.84
6	Ácido acrílico	324.26	295.14	-29.12
7	Acroilonitrilo	273.15	249.62	-23.53
8	Alcohol alílico	295.37	263.87	-31.50
9	Alilamina	253.15	232.60	-20.55
10	Bromuro de alilo	270.93	245.27	-25.66
11	Cloruro alílico	244.26	226.67	-17.59
12	Éter alílico	266.48	262.29	-4.19
13	Nitrato amílico	320.93	302.90	-18.03
14	Anilina	343.15	326.01	-17.14
15	Benzaldehído	337.59	322.05	-15.54
16	Benceno	262.04	251.60	-10.44
17	Ácido benzoico	394.26	372.72	-21.54
18	Acetato de bencilo	363.71	346.99	-16.72
19	Alcohol de bencilo	366.48	341.45	-25.03
20	Cloruro de bencilo	345.37	335.12	-10.26
21	Bisfenol A	352.59	351.35	-1.25
22	Bromobenceno	324.26	305.83	-18.43
23	O-Bromo-Tolueno	352.04	324.03	-28.01
24	1,3-Butadieno	197.04	191.44	-5.60
25	1-Butanol	302.04	278.12	-23.92
26	Acetato de butilo	295.37	284.80	-10.57
27	Acrilato de butilo	312.59	300.68	-11.92
28	N-Butilamina	260.93	228.25	-32.68
29	Bromuro de butilo	291.48	267.03	-24.45
30	Cloruro de butilo	263.71	249.22	-14.48
31	Óxido de 2,3-Butileno	258.15	240.92	-17.23
32	Éter butílico	306.48	295.93	-10.55
33	Nitrato de butilo	309.26	291.58	-17.68
34	Peróxido de T-butilo	290.93	251.60	-39.32
35	Disulfuro de carbono	243.15	227.46	-15.69
36	Clorobenceno	302.04	288.81	-13.23
37	1-Cloro 1-Nitroetano	329.26	318.10	-11.16
38	O-Clorofenol	337.04	319.21	-17.82
39	2-Cloropropano	240.93	219.54	-21.39

Continuación.

40	Cloroestireno	347.04	329.17	-17.86
41	Cumeno	308.71	303.06	-5.65
42	Cianamida	414.26	379.84	-34.42
43	Ciclohexano	253.15	252.79	-0.36
44	Ciclohexanol	340.93	309.39	-31.54
45	Diclorobenceno	339.26	323.24	-16.02
46	1,3-Dicloropropano	308.15	268.62	-39.53
47	2,3-Dicloropropano	288.15	261.49	-26.66
48	Dietilamina	245.37	234.18	-11.19
49	M-Dietil benceno	329.26	323.64	-5.62
50	Dietil carbonato	298.15	284.38	-13.77
51	Dietilenglicol	397.04	368.76	-28.28
52	Éter dietílico	228.15	219.15	-9.00
53	Diisobutileno	268.15	266.64	-1.51
54	Diisopropil benceno	349.82	340.66	-9.16
55	2,2-Dimetil-1-Propanol	309.82	275.75	-34.07
56	1,2-Dinitrobenceno	423.15	421.80	-1.35
57	1,4-Dioxano	285.37	266.64	-18.73
58	Dioxolano	274.82	247.25	-27.57
59	Óxido difenil	388.15	378.26	-9.89
60	Dipropilenglicol	394.26	359.66	-34.60
61	Peróxido de di-ter-Butilo	291.48	273.37	-18.11
62	Divinilbenceno	342.59	337.10	-5.50
63	Epiclorhidrina	304.26	277.33	-26.93
64	Etanolamina	358.15	316.12	-42.03
65	Acetato de etilo	268.71	249.62	-19.08
66	Acrilato de etilo	282.04	265.46	-16.58
67	Alcohol etílico	285.93	250.42	-35.51
68	Etilbenceno	294.26	291.58	-2.68
69	Benzoato de etilo	360.93	345.81	-15.12
70	Etilbutilamina	290.93	273.77	-17.16
71	Etil butilcarbonato	323.15	290.79	-32.36
72	Butirato etílico	297.04	280.10	-16.94
73	Cloruro de etilo	223.15	203.31	-19.84
74	Cloroformiato de etilo	289.26	262.29	-26.97
75	Etilendiamina	316.48	276.54	-39.94
76	Dicloruro de etileno	286.48	253.58	-32.90
77	Etilenglicol	384.26	335.12	-49.14
78	Etilenglicol dimetil eter	271.48	250.81	-20.67
79	Etilenimina	262.04	235.37	-26.66
80	Éter etílico	228.15	219.15	-9.00
81	Formiato de etilo	253.15	233.40	-19.75
82	2-Etilheanol	317.59	310.58	-7.02
83	Dicloruro de 1,1-Etilideno	256.48	235.37	-21.11
84	Nitrato etílico	283.15	257.14	-26.01
85	Fluorobenceno	258.15	255.17	-2.98
86	Furano	255.37	216.77	-38.60
87	Gasolina	230.37	221.52	-8.85
88	Hexanal	305.37	288.02	-17.35
89	Hidrazina (Anhidro)	310.93	275.35	-35.58
90	Cianuro de hidrógeno	255.37	213.21	-42.16
91	Acrilato de 2-hidroxietilo	374.26	344.22	-30.04
92	Hidroxipropil acrilato	370.37	344.22	-26.15
93	Alcohol de isobutilo	300.93	271.00	-29.93
94	Isopreno	219.26	218.75	-0.51
95	Isopropanol	284.82	253.58	-31.23
96	Acetato isopropílico	274.26	258.73	-15.53
97	Isopropilamina	247.04	218.75	-28.29
98	Cloruro isopropílico	240.93	219.54	-21.39
99	Éter isopropílico	245.37	243.69	-1.69

Continuación.

100	Anhídrido maleico	374.82	338.28	-36.53
101	Ácido metacrílico	350.37	310.58	-39.79
102	Acetato de metilo	263.15	237.35	-25.80
103	Alcohol metílico	284.26	240.12	-44.14
104	Metil amil cetona	312.04	301.47	-10.56
105	Carbonato de metilo	292.04	257.94	-34.10
106	Cloroacetato de metilo	330.37	287.23	-43.15
107	Metilciclohexano	269.26	266.64	-2.62
108	Metil etil cetona	264.26	251.60	-12.66
109	Formato de metilo	248.71	217.17	-31.54
110	Metil hidracina	267.04	257.14	-9.89
111	Metil isobutil cetona	290.93	277.73	-13.20
112	Metil metacrilato	283.15	266.25	-16.90
113	2-metilpropenal	274.82	242.90	-31.92
114	Metil vinil cetona	266.48	252.79	-13.69
115	Aceite mineral	466.48	451.09	-15.39
116	Monoclorobenceno	302.04	288.81	-13.23
117	Monoetanolamina	358.15	316.12	-42.03
118	Naftaleno	352.04	349.76	-2.28
119	Nitrobenceno	360.93	344.62	-16.31
120	Nitroetano	300.93	275.75	-25.18
121	Nitrometano	308.15	266.25	-41.90
122	P-nitrotolueno	379.26	364.01	-15.25
123	Óxido de pentametileno	253.15	248.44	-4.71
124	Ácido paracético	313.71	269.41	-44.29
125	Fenol	352.59	323.64	-28.95
126	2-picolina	312.04	285.64	-26.40
127	Propanol	243.15	229.44	-13.71
128	1,3-propanodiamina	297.04	291.18	-5.86
129	Bromuro propargílico	283.15	257.94	-25.21
130	Nitrilo propiónico	275.37	263.87	-11.50
131	Acetato de propilo	285.93	267.04	-18.89
132	Alcohol propílico	296.48	263.87	-32.61
133	Propilamina	235.93	229.44	-6.49
134	Propilbenceno	303.15	308.20	5.05
135	Propileno	165.37	160.57	-4.80
136	Dicloruro de propileno	288.71	263.08	-25.62
137	Propilenglicol	372.04	328.39	-43.65
138	Óxido de propileno	235.93	219.15	-16.78
139	N-propil éter	294.26	258.73	-35.53
140	N-propil nitrato	293.15	272.98	-20.17
141	Piridina	293.15	276.93	-16.22
142	Estireno	304.26	297.91	-6.35
143	Tolueno	277.59	273.77	-3.83
144	Tolueno 2,4-diisocianato	405.37	373.51	-31.86
145	1,2,4-triclorobenceno	378.71	346.20	-32.50
146	1,2,3-tricloropropano	344.26	305.83	-38.43
147	Trietanolamina	452.04	439.22	-12.82
148	Trietilamina	264.26	258.33	-5.93
149	Trietilenglicol	449.82	398.05	-51.76
150	Tripropilamina	313.71	305.83	-7.88
151	Acetato de vinilo	265.37	246.46	-18.91
152	Vinil butil éter	263.71	261.89	-1.81
153	Cloruro de vinilo	195.37	184.71	-10.66
154	4-Vinil ciclohexano	289.26	287.23	-2.04
155	Tolueno de vinilo	324.82	314.14	-10.68
156	P-xileno	298.15	292.37	-5.78
157	Metil triclorosilano	258.15	241.91	-16.24
158	Metil diclorosilano	240.93	224.21	-16.72
159	Metano	85.37	79.55	-5.82

Continuación.

160	Tricloroacetaldehído	305.93	264.21	-41.71
161	1,1-dicloroetileno	254.82	217.09	-37.72
162	cis-1,2-dicloroetileno	277.04	237.71	-39.33
163	Ácido dicloroacético	383.15	332.82	-50.33
164	Metil cloroformiato	285.37	245.08	-40.29
165	Metil isocianato	265.93	222.29	-43.64
166	Etileno	137.04	120.74	-16.30
167	1,1-dicloroetano	260.93	235.43	-25.50
168	1,2-dicloroetano	286.48	254.05	-32.43
169	2-cloroetanol	313.71	286.23	-27.48
170	Dimetil sulfóxido	360.93	329.26	-31.67
171	Dimetil sulfato	355.93	329.12	-26.81
172	Dimetil sulfuro	239.26	221.20	-18.06
173	Dimetil disulfuro	279.82	272.80	-7.02
174	Malonitrilo	385.37	350.17	-35.20
175	Alcohol propargílico	309.26	275.54	-33.72
176	beta-propiolactona	347.04	310.02	-37.01
177	Ácido pirúvico	357.04	312.16	-44.88
178	3-cloropropeno	240.93	226.64	-14.29
179	alfa-epiclorhidrina	304.26	277.33	-26.93
180	Hidracrilonitrilo	402.59	352.06	-50.54
181	Lactonitrilo	350.37	325.59	-24.78
182	1,1-dicloropropano	294.26	257.37	-36.89
183	1,2-dicloropropano	288.71	263.27	-25.44
184	1,3-dicloropropano	294.26	280.39	-13.88
185	Metil vinil éter	217.04	198.53	-18.51
186	n-propionaldehído	243.15	228.80	-14.35
187	1,2-óxido de propileno	235.93	218.76	-17.17
188	Ácido propiónico	328.15	295.19	-32.96
189	Ácido 3-mercaptopropiónico	365.93	356.94	-8.99
190	Trioxano	318.15	276.18	-41.97
191	Cloruro de propilo	242.04	227.75	-14.29
192	Propilenimina	263.15	237.96	-25.19
193	N,N-dimetilformamida	330.93	303.61	-27.32
194	N-metilacetamida	380.93	340.66	-40.27
195	1-nitropropano	309.26	288.06	-21.20
196	2-nitropropano	297.04	280.28	-16.76
197	Metil etil éter	235.93	199.84	-36.08
198	2-metoxietanol	312.04	283.24	-28.80
199	Metilal	255.37	224.42	-30.95
200	1,2-propilenglicol	372.04	328.26	-43.78
201	n-propilmercaptano	253.15	242.86	-10.29
202	Isopropil mercaptano	238.15	232.05	-6.10
203	1-amino-2-propanol	347.04	308.22	-38.82
204	3-amino-1-propanol	352.59	328.19	-24.40
205	Metiletanolamina	345.37	307.17	-38.20
206	1,2-propanodiamina	305.93	279.60	-26.33
207	Succionitrilo	405.37	384.83	-20.54
208	Diketeno	307.04	284.41	-22.63
209	Tiofeno	272.04	254.57	-17.47
210	Cloropreno	253.15	236.93	-16.22
211	Metacrilonitrilo	285.93	258.94	-26.99
212	Pirrol	312.04	287.12	-24.92
213	Vinilacetónitrilo	295.93	279.05	-16.88
214	Cianoacetato de metilo	383.15	340.72	-42.43
215	1,3-dicloro-trans-2-buteno	300.37	286.41	-13.97
216	1,4-dicloro-cis-2-buteno	328.15	303.26	-24.89
217	3,4-dicloro-1-buteno	300.93	276.43	-24.50
218	trans-crotonaldehído	285.93	268.77	-17.15
219	2,5-dihidrofurano	257.04	241.52	-15.52

Continuación.

220	Divinil éter	225.93	214.77	-11.16
221	Metacoleína	275.37	243.05	-32.32
222	gamma-butirolactona	371.48	339.95	-31.54
223	Ácido trans-crotónico	367.59	326.41	-41.18
224	Ácido tartárico	483.15	470.22	-12.93
225	N-butironitrilo	299.26	278.39	-20.87
226	Isobutironitrilo	281.48	268.42	-13.06
227	3-metoxipropionitrilo	338.15	312.77	-25.38
228	2-pirrolidona	402.59	369.16	-33.44
229	1-butano	194.26	190.15	-4.11
230	cis-2-butano	199.82	197.26	-2.56
231	trans-2-butano	199.82	195.23	-4.58
232	Isobutano	197.04	189.69	-7.35
233	1,4-diclorobutano	325.37	304.25	-21.12
234	n-butiraldehído	266.48	247.90	-18.59
235	Isobutiraldehído	265.93	240.27	-25.65
236	1,2-epoxybutano	258.15	239.79	-18.36
237	Etil vinil éter	227.59	219.93	-7.66
238	Tetrahidrofurano	258.71	240.81	-17.90
239	cis-2-butano-1,4-diol	400.93	362.03	-38.89
240	Ácido isobutírico	349.82	304.82	-44.99
241	n-ácido butírico	344.82	310.93	-33.89
242	Propionato de metilo	270.93	251.21	-19.72
243	n-propil formiato	270.37	252.19	-18.18
244	Sulfolano	449.82	397.66	-52.16
245	Tetrahidrotiofeno	291.48	280.90	-10.58
246	1-bromobutano	290.93	266.99	-23.94
247	2-bromobutano	294.26	259.60	-34.66
248	cloruro de sec-butilo	244.26	243.12	-1.14
249	cloruro de tert-butilo	268.15	230.66	-37.49
250	Pirrolidina	275.93	256.29	-19.64
251	N,N-dimetilacetamida	335.93	312.95	-22.98
252	Morfolina	310.93	285.80	-25.13
253	sec-butanol	297.04	265.53	-31.51
254	tert-butanol	284.26	253.33	-30.93
255	Isobutanol	300.93	271.31	-29.62
256	1,3-butanodiol	382.04	342.08	-39.95
257	1,4-butanodiol	407.04	357.05	-49.99
258	2,3-butanodiol	358.15	323.35	-34.80
259	Hidropéroxido de t-butilo	299.82	288.90	-10.92
260	1,2-dimetoxietano	271.48	254.49	-16.99
261	2-etoxietanol	316.48	290.79	-25.70
262	Dietil sulfato	377.04	344.12	-32.92
263	n-butil mercaptano	274.82	264.76	-10.06
264	Isobutil mercaptano	264.26	257.65	-6.61
265	sec-butil mercaptano	250.37	255.15	4.78
266	tert-butil mercaptano	247.04	240.36	-6.68
267	Dietil sulfuro	263.15	260.22	-2.93
268	Isobutilamina	255.37	242.86	-12.51
269	sec-butilamina	244.26	239.49	-4.77
270	tert-butilamina	264.26	226.24	-38.02
271	Dimetiletanolamina	314.26	290.08	-24.19
272	N-aminoetil etanolamina	374.82	368.34	-6.48
273	Tetraetilsilano	245.93	213.59	-32.33
274	Dietilenop triamina	372.04	342.16	-29.88
275	Furfural	333.15	310.06	-23.09
276	Furfural alcohol	338.15	315.72	-22.43
277	N-metilpirrol	288.15	274.93	-13.22
278	Etil cianoacetato	383.15	341.37	-41.78
279	Ciclopentano	244.26	226.12	-18.14

Continuación.

280	1-pentino	239.26	223.23	-16.03
281	Ciclopentanona	299.26	287.69	-11.57
282	Metil isopropenil cetona	294.26	264.43	-29.83
283	Acetilacetona	307.04	294.64	-12.40
284	Acetato alílico	295.37	268.70	-26.67
285	Propionato de vinilo	274.26	259.58	-14.68
286	Acetoacetato de metilo	349.82	316.93	-32.88
287	N-metil-2-pirrolidona	368.71	338.52	-30.18
288	1-pentino	255.37	215.95	-39.42
289	2-pentanona	280.37	267.50	-12.87
290	Dietil cetona	285.93	267.27	-18.66
291	Valeraldehído	285.37	267.99	-17.38
292	Formiato de n-butilo	290.93	270.20	-20.73
293	Propionato de etilo	285.37	265.21	-20.16
294	Metil n-butirato	287.04	267.81	-19.23
295	Ácido valérico	369.26	326.77	-42.49
296	Tetrahidrofurfural alcohol	357.04	321.42	-35.62
297	Lactato de etilo	319.26	304.68	-14.58
298	1-cloropentano	285.93	271.83	-14.10
299	N-metilpirrolidina	259.26	251.00	-8.26
300	Piperidina	275.93	270.41	-5.52
301	tert-butylformamida	368.15	338.52	-29.63
302	Neopentano	208.15	201.37	-6.78
303	2-metil-1-butanol	323.15	286.30	-36.85
304	2-metil-2-butanol	313.71	267.28	-46.43
305	3-metil-1-butanol	315.93	288.08	-27.85
306	3-metil-2-butanol	312.59	274.05	-38.55
307	1-pentanol	305.93	292.78	-13.15
308	2-pentanol	307.59	279.39	-28.21
309	3-pentanol	313.71	276.75	-36.95
310	Metil tert-butil éter	245.37	233.93	-11.44
311	Etilenglicol éter monopropil	322.04	302.44	-19.60
312	1,5-pentanodiol	402.59	364.88	-37.71
313	2-(2-metoxietoxi) etanol	369.26	332.54	-36.72
314	n-pentil mercaptano	290.93	284.83	-6.10
315	n-pentilamina	280.37	269.06	-11.31
316	Metil dietanolamina	399.82	370.58	-29.23
317	Hexafluorobenceno	283.15	251.79	-31.36
318	1-cloro-2,4-dinitrobenceno	467.04	418.92	-48.12
319	m-dibromobenceno	365.93	349.92	-16.01
320	m-cloronitrobenceno	400.37	362.46	-37.91
321	o-cloronitrobenceno	400.37	369.76	-30.61
322	p-cloronitrobenceno	400.37	367.02	-33.35
323	m-diclorobenceno	344.82	317.92	-26.90
324	o-diclorobenceno	339.26	323.15	-16.11
325	p-diclorobenceno	339.26	318.62	-20.64
326	m-dinitrobenceno	423.15	408.24	-14.91
327	o-dinitrobenceno	423.15	421.77	-1.38
328	p-clorofenol	389.26	351.32	-37.94
329	3,4-dicloroanilina	439.26	388.29	-50.97
330	o-cloroanilina	363.71	343.39	-20.31
331	p-cloroanilina	385.93	358.83	-27.10
332	o-nitroanilina	440.93	397.55	-43.38
333	p-nitroanilina	472.04	433.99	-38.05
334	1,2-bencenodiol	399.82	369.51	-30.30
335	1,3-bencenodiol	399.82	391.60	-8.22
336	p-hidroquinona	438.15	397.66	-40.49
337	Fenil mercaptano	345.93	315.11	-30.82
338	2-metilpiridina	312.04	286.80	-25.24
339	4-metilpiridina	330.37	298.16	-32.21

Continuación.

340	m-fenilendiamina	410.93	398.97	-11.95
341	p-fenilendiamina	428.71	384.72	-43.98
342	Dimetil maleato	385.93	340.66	-45.27
343	Ciclohexeno	266.48	253.72	-12.76
344	2,3-dimetil-1,3-butadieno	250.93	243.61	-7.32
345	1,5-hexadieno	227.04	236.97	9.93
346	cis,trans-2,4-hexadieno	265.93	254.10	-11.83
347	trans,trans-2,4-hexadieno	265.93	252.96	-12.97
348	1-hexino	252.04	245.42	-6.61
349	2-hexino	262.04	254.82	-7.21
350	Ciclohexanona	317.04	305.57	-11.47
351	Óxido de mesitilo	301.48	287.08	-14.40
352	epsilon-caprolactana	382.04	366.20	-15.84
353	Etil metacrilato	294.26	277.96	-16.30
354	Etilacetoacetato	330.37	323.42	-6.95
355	Anhídrido propiónico	335.93	315.01	-20.92
356	Ácido adipico	435.93	435.31	-0.62
357	Etilenglicol diacetato	360.93	330.33	-30.60
358	Etilidieno acetato	339.26	315.01	-24.25
359	3,3-dimetil-1-buteno	244.82	224.00	-20.82
360	trans-3-hexeno	260.93	242.40	-18.52
361	Metilciclopentano	245.93	245.77	-0.16
362	3-metil-1-penteno	245.37	233.21	-12.17
363	Butil vinil éter	272.04	261.45	-10.59
364	2-hexanona	298.15	285.59	-12.56
365	3-hexanona	287.04	282.59	-4.44
366	sec-butil acetato	288.71	274.40	-14.30
367	tert-butil acetato	289.26	263.00	-26.26
368	Isobutirato de etilo	287.04	272.87	-14.17
369	Acetato de isobutilo	290.93	277.71	-13.21
370	Alcohol diacetona	319.82	314.19	-5.62
371	Ácido 2-etil butírico	359.82	332.68	-27.14
372	Ácido n-hexanoico	374.82	341.16	-33.66
373	2-etoxietil acetato	327.59	305.96	-21.63
374	Paraldehído	308.71	283.14	-25.56
375	Ciclohexilamina	304.26	290.43	-13.83
376	Hexametilenamina	310.37	288.44	-21.94
377	2,2-dimetilbutano	225.37	230.04	4.66
378	2,3-dimetilbutano	244.26	235.91	-8.35
379	2-metilpentano	238.15	237.54	-0.61
380	2-etil-1-butanol	330.37	298.98	-31.39
381	1-hexanol	335.93	306.46	-29.47
382	2-hexanol	314.26	294.27	-19.99
383	2-metil-1-pentanol	324.26	300.05	-24.21
384	4-metil-2-pentanol	314.26	288.44	-25.82
385	n-butil etil éter	277.04	260.29	-16.74
386	Diisopropil éter	245.37	243.27	-2.10
387	DI-n-propil éter	294.26	258.47	-35.79
388	2-butoxyetanol	342.59	316.67	-25.93
389	1,6-hexanodiol	372.04	367.73	-4.31
390	Hexilenglicol	365.93	335.32	-30.61
391	Di-n-propil sulfona	399.26	386.86	-12.40
392	Dietilenglicol dimetil éter	335.93	308.43	-27.50
393	2-(2-etoxietoxi)etanol	356.48	338.52	-17.96
394	Trimetilpropano	452.59	400.43	-52.17
395	Diisopropilamina	265.93	254.38	-11.55
396	DI-n-propilamina	290.37	272.16	-18.21
397	n-hexilamina	302.59	288.29	-14.30
398	Diisopropanolamina	397.04	371.83	-25.21
399	N-aminoetil piperazina	365.93	351.63	-14.30

Continuación.

400	Trietil fosfato	372.04	344.93	-27.10
401	Hexametilendiamina	366.48	338.44	-28.04
402	Hexametil fosformamida	378.71	360.61	-18.10
403	Trietilen tetramina	408.15	384.48	-23.67
404	Hexametildisiloxano	270.93	266.22	-4.70
405	Hexametilciclotrisiloxano	308.15	290.87	-17.28
406	Hexametildisilazano	280.93	284.38	3.45
407	Cloro-3-nitrobenzotrifloruro	374.26	352.77	-21.49
408	p-clorobenzotrifloruro	315.93	293.64	-22.29
409	3-nitrobenzotrifloruro	360.93	339.08	-21.85
410	Cloruro de bencilo	345.37	334.96	-10.41
411	Benzotrifloruro	285.37	267.31	-18.06
412	Benzonitrilo	348.15	330.69	-17.46
413	Fenil isocianato	328.71	312.59	-16.12
414	2,4-diclorotolueno	369.26	337.88	-31.38
415	3,4-dinitrotolueno	479.82	434.60	-45.22
416	Salicilaldehído	350.93	334.60	-16.32
417	p-bromotolueno	358.15	325.95	-32.20
418	o-clorotolueno	324.26	307.99	-16.27
419	p-clorotolueno	324.82	310.38	-14.44
420	m-nitrotolueno	374.82	359.79	-15.03
421	o-nitrotolueno	379.26	353.12	-26.14
422	Anisol	325.37	304.02	-21.35
423	m-cresol	367.59	338.72	-28.87
424	o-cresol	354.26	330.69	-23.58
425	p-cresol	367.59	338.51	-29.09
426	Guayacol	354.82	340.66	-14.16
427	p-metoxifenol	398.15	367.63	-30.52
428	Bencilamina	333.15	326.05	-7.10
429	2,6-dimetilpiridina	305.93	297.24	-8.69
430	N-metilanelina	350.93	334.16	-16.77
431	m-toluidina	359.26	339.52	-19.74
432	o-toluidina	358.15	337.38	-20.77
433	p-toluidina	359.82	337.28	-22.54
434	2-norborneno	258.15	262.65	4.50
435	Toluenodiamina	422.04	396.94	-25.10
436	Ciclohexil isocianato	322.04	315.01	-7.03
437	Acrilato de isobutilo	304.26	288.65	-15.61
438	Malonato de dietilo	365.93	336.31	-29.61
439	1-hepteno	273.15	261.32	-11.83
440	trans-2-hepteno	272.04	264.39	-7.65
441	trans-3-hepteno	267.04	262.77	-4.27
442	2-metil-1-hexeno	267.04	260.04	-7.00
443	3-metil-1-hexeno	267.04	254.38	-12.66
444	2,3,3-trimetil-1-butenol	255.93	250.10	-5.83
445	Diisopropil cetona	288.15	283.24	-4.91
446	2-heptanona	312.04	302.12	-9.92
447	1-heptanal	310.93	303.47	-7.46
448	5-metil-2-hexanona	309.26	297.77	-11.49
449	Propionato de n-butilo	305.37	299.05	-6.32
450	Isovalerato de etilo	308.15	290.29	-17.86
451	Isopentil acetato	298.15	295.85	-2.30
452	Acetato de n-pentilo	298.15	300.76	2.61
453	Etil-3-etoxipropionato	330.93	312.16	-18.77
454	N-metilciclohexilamina	302.04	300.66	-1.38
455	2,4-dimetilpentano	260.93	251.95	-8.98
456	2-metilhexano	269.26	258.76	-10.50
457	3-metilhexano	269.26	260.05	-9.22
458	1-heptanol	349.82	320.21	-29.60
459	2-heptanol	344.26	308.03	-36.23

Continuación.

460	n-heptil mercaptano	319.26	320.67	1.41
461	1-aminoheptano	328.15	306.39	-21.76
462	anhídrido ftálico	424.82	397.30	-27.52
463	Acetofenona	355.37	338.52	-16.85
464	Benzoato de metilo	355.93	336.74	-19.19
465	Salicilato de metilo	369.26	351.70	-17.56
466	Acetanilida	445.93	411.05	-34.88
467	m-xileno	298.15	293.72	-4.43
468	o-xileno	290.37	297.50	7.13
469	p-etilfenol	377.04	349.91	-27.13
470	2-feniletanol	369.26	350.56	-18.70
471	2,6-xilenol	358.71	337.86	-20.84
472	N,N-dimetilanilina	335.93	332.49	-3.43
473	o-etilanilina	370.37	343.87	-26.51
474	2,4,6-trimetilpiridina	330.37	316.33	-14.04
475	p-fenetidina	389.26	376.18	-13.09
476	1,5-ciclooctadieno	308.15	301.56	-6.59
477	Vinilciclohexeno	289.26	285.69	-3.57
478	Dietil maleato	365.93	354.91	-11.02
479	Metacrilato de n-butilo	325.37	309.20	-16.17
480	Anhídrido butírico	355.37	333.54	-21.84
481	Dietil Succionato	363.15	348.85	-14.30
482	Etilciclohexano	308.15	288.51	-19.64
483	1-octeno	294.26	281.02	-13.24
484	trans-2-octeno	294.26	283.66	-10.60
485	2-Etilhexanal	317.04	309.06	-7.98
486	1-octanal	324.82	318.57	-6.24
487	2-octanona	344.26	317.58	-26.68
488	n-butil n-butirato	326.48	312.16	-14.32
489	Acetato de n-hexil	332.04	316.79	-15.25
490	Isobutil isobutirato	310.93	299.69	-11.23
491	Dietilenglicol etil éter acetato	379.82	349.49	-30.32
492	2,3-dimetilhexano	278.71	276.97	-1.73
493	2,4-dimetilhexano	283.15	272.57	-10.58
494	2,2,4-trimetilpentano	260.93	265.31	4.38
495	Di-n-butil éter	298.15	294.56	-3.59
496	Di-sec-butil éter	288.15	280.85	-7.30
497	2-etil-1-hexanol	346.48	326.13	-20.36
498	1-octanol	354.26	333.68	-20.58
499	2-octanol	333.15	322.71	-10.44
500	Peróxido de di-t-butilo	290.93	273.69	-17.24
501	Sulfona di-n-butilo	415.93	401.90	-14.02
502	Dietilenglicol dietil éter	355.37	329.26	-26.11
503	Trietilenglicol dimetil éter	383.15	348.50	-34.65
504	Tetraetilenglicol	469.26	413.94	-55.33
505	Mercaptano de n-octilo	340.93	336.41	-4.52
506	tert-octil mercaptano	304.26	305.64	1.38
507	Di-n-butilamina	320.37	307.78	-12.59
508	Diisobutilamina	294.26	293.71	-0.55
509	n-octilamina	333.15	322.56	-10.59
510	Tetraetilenpentamina	435.93	431.85	-4.07
511	Octametilciclotetrasiloxano	330.37	319.29	-11.09
512	Diisocianato de tolueno	400.37	372.72	-27.65
513	Isoquinolina	380.37	367.91	-12.46
514	Quinolina	374.26	363.89	-10.38
515	Indano	323.15	321.40	-1.75
516	alpha-metilestireno	327.04	312.52	-14.52
517	m-metilestireno	324.26	316.86	-7.40
518	o-metilestireno	320.37	315.59	-4.78
519	p-metilestireno	319.26	317.70	-1.56

Continuación.

520	p-dimetilaminobenzaldehído	420.37	418.92	-1.45
521	Mesitileno	317.59	311.98	-5.62
522	1,2,3-trimetilbenceno	324.26	320.09	-4.18
523	1,2,4-trimetilbenceno	318.71	315.28	-3.43
524	Cumeno hidroperóxido	322.04	315.40	-6.64
525	Isoforona	357.04	347.93	-9.11
526	Triacetato de glicerilo	410.93	379.13	-31.80
527	Isopropilciclohexano	308.15	304.87	-3.28
528	Diisobutil cetona	322.04	314.48	-7.55
529	2,2-dimetilheptano	297.04	289.14	-7.90
530	2,6-dimetilheptano	299.26	290.94	-8.32
531	2,2,5-trimetilhexano	285.93	283.01	-2.91
532	1-nonanol	347.04	346.43	-0.61
533	2-nonanol	354.82	336.03	-18.79
534	n-nonil mercaptano	350.93	351.20	0.28
535	1-cloronaftaleno	394.26	379.35	-14.92
536	Dimetil ftalato	419.26	396.73	-22.53
537	Dimetil tereftalato	429.26	399.79	-29.47
538	1,2,3,4-tetrahidronaftaleno	344.26	342.53	-1.73
539	Anetol	362.04	362.25	0.21
540	n-butilbenceno	344.26	325.21	-19.05
541	sec-butilbenceno	325.37	318.09	-7.28
542	tert-butilbenceno	333.15	315.12	-18.03
543	p-cimeno	320.37	320.80	0.43
544	o-dietilbenceno	330.37	325.31	-5.06
545	p-dietilbenceno	329.82	325.55	-4.27
546	Isobutilbenceno	328.15	317.71	-10.44
547	1,2,3,5-tetrametilbenceno	336.48	335.67	-0.81
548	1,2,4,5-tetrametilbenceno	327.59	334.85	7.25
549	p-tert-butilfenol	385.93	365.40	-20.53
550	p-tert-butilcatecol	403.15	397.55	-5.60
551	N,N-dietilanilina	358.15	348.69	-9.46
552	Canfeno	309.26	308.96	-0.31
553	D-limoneno	318.15	320.35	2.20
554	beta-felandreno	322.04	318.57	-3.47
555	alpha-pineno	305.93	305.85	-0.08
556	beta-pineno	312.59	312.90	0.31
557	alpha-terpineno	319.26	320.85	1.59
558	gamma-terpineno	324.26	324.99	0.72
559	Alcanfor	338.71	342.39	3.68
560	cis-decahidronaftaleno	330.93	334.12	3.19
561	trans-decahidronaftaleno	330.93	328.06	-2.87
562	1-deceno	326.48	316.15	-10.33
563	1-decanal	358.15	347.78	-10.37
564	2-etilhexil acetato	360.93	336.10	-24.83
565	2-metilnonano	314.26	314.16	-0.10
566	3-metilnonano	310.93	309.18	-1.75
567	1-decanol	355.37	358.61	3.24
568	DI-n-pentil éter	330.37	327.66	-2.71
569	Isodecanol	377.59	351.24	-26.35
570	Tetraetilenglicol dimetiléter	414.26	391.10	-23.16
571	n-decilamina	372.04	351.70	-20.34
572	n-butil benzoato	379.26	372.72	-6.54
573	n-pentilbenceno	339.26	340.99	1.73
574	p-tert-amilfenol	384.26	381.27	-2.99
575	2-etilhexil acrilato	344.26	348.50	4.24
576	1-undeceno	344.26	331.88	-12.38
577	n-undecano	338.15	369.16	2.67
578	Bifenil	385.93	376.28	-9.65
579	Difenil éter	388.15	378.64	-9.51

Continuación.

580	Difenilamina	425.93	409.77	-16.16
581	p-aminodifenilamina	466.48	446.82	-19.67
582	1,2,3-trimetilindeno	359.26	362.64	3.38
583	Dietil ftalato	434.26	404.07	-30.19
584	Ciclohexilbenceno	372.04	365.68	-6.36
585	Dibutil maleato	413.15	394.09	-19.06
586	Diciclohexilamina	377.04	376.89	-0.15
587	DI-n-hexil éter	350.37	355.41	5.04
588	1-dodecanol	399.82	381.16	-18.65
589	Dietilenglicol di-n-butiléter	390.93	376.99	-13.93
590	n-dodecil mercaptano	400.93	390.25	-10.68
591	Tri-n-butil borato	365.93	360.96	-4.96
592	Tri-n-butilamina	359.26	347.07	-12.19
593	Difenilmetano	403.15	382.89	-20.26
594	n-heptilbenceno	368.15	369.94	1.79
595	1-tridecanol	394.26	389.82	-4.44
596	Fenantreno	444.26	437.05	-7.21
597	Bencil benzoato	428.15	425.09	-3.06
598	1,1-difeniletano	402.04	388.84	-13.20
599	1,2-difeniletano	403.15	394.45	-8.70
600	Dibencil éter	408.15	400.01	-8.14
601	n-octilbenceno	380.37	382.98	2.61
602	1-tetradeceno	383.15	373.50	-9.65
603	1-tetradecanol	414.26	399.08	-15.18
604	Difenilmetano-4,4-diisocianato	474.26	433.88	-40.38
605	1-heptadcanol	427.59	425.44	-2.15
606	o-terfenil	435.93	433.88	-2.04
607	p-terfenil	480.37	462.49	-17.88
608	Trifenilfosfina	453.15	489.21	-3.94
609	N,N-difenil-p-fenilenodiamina	505.37	490.17	-15.20
610	Sebecato de dibutilo	450.93	443.25	-7.67
611	Dihexil adipato	464.26	442.54	-21.72

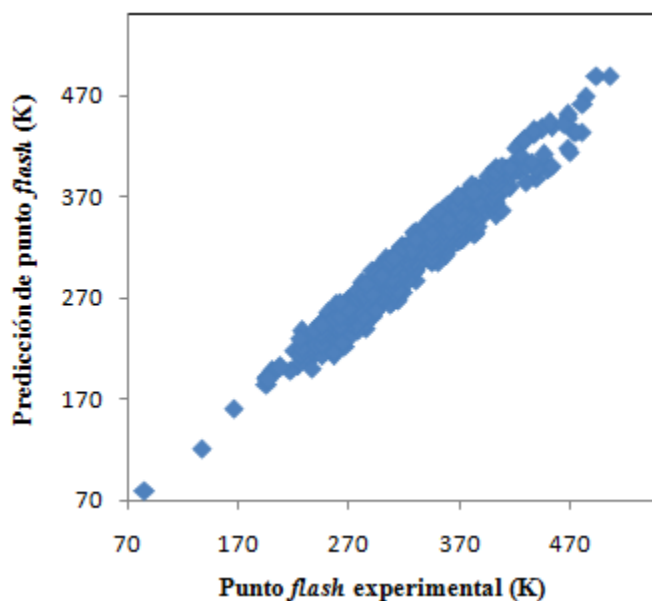


Figura 4.1: Predicción de punto *flash* de 611 componentes puros comparada con punto *flash* experimentales.

Tabla 4.3: Predicción de punto *flash* con el ajuste de datos para 611 componentes puros.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)
1	Acetaldehído	235.37	222.29	-13.09
2	Ácido acético	312.59	295.87	-16.73
3	Acetona	253.15	249.20	-3.95
4	Acetonitrilo	278.71	268.54	-10.17
5	Acroleína	247.04	246.67	-0.37
6	Ácido acrílico	324.26	313.53	-10.74
7	Acroilonitrilo	273.15	265.17	-7.98
8	Alcohol alílico	295.37	280.31	-15.06
9	Alilamina	253.15	247.09	-6.06
10	Bromuro de alilo	270.93	260.55	-10.38
11	Cloruro alílico	244.26	240.79	-3.47
12	Éter alílico	266.48	278.63	12.14
13	Nitrato amílico	320.93	321.77	0.84
14	Anilina	343.15	346.32	3.17
15	Benzaldehído	337.59	342.11	4.52
16	Benceno	262.04	267.28	5.24
17	Ácido benzoico	394.26	395.94	1.68
18	Acetato de bencilo	363.71	368.60	4.89
19	Alcohol de bencilo	366.48	362.72	-3.76
20	Cloruro de bencilo	345.37	355.99	10.62
21	Bisfenol A	352.59	373.23	20.64
22	Bromobenceno	324.26	324.88	0.62
23	O-Bromo-Tolueno	352.04	344.21	-7.82
24	1,3-Butadieno	197.04	203.37	6.33
25	1-Butanol	302.04	295.44	-6.59
26	Acetato de butilo	295.37	302.54	7.17
27	Acrilato de butilo	312.59	319.41	6.81
28	N-Butilamina	260.93	242.47	-18.46
29	Bromuro de butilo	291.48	283.67	-7.82
30	Cloruro de butilo	263.71	264.75	1.04
31	Óxido de 2,3-Butileno	258.15	255.92	-2.23
32	Éter butílico	306.48	314.37	7.88
33	Nitrato de butilo	309.26	309.74	0.48
34	Peróxido de T-butilo	290.93	267.28	-23.65
35	Disulfuro de carbono	243.15	241.63	-1.52
36	Clorobenceno	302.04	306.80	4.76
37	1-Cloro 1-Nitroetano	329.26	337.91	8.65
38	O-Clorofenol	337.04	339.10	2.06
39	2-Cloropropano	240.93	233.22	-7.71
40	Cloroestireno	347.04	349.68	2.64
41	Cumeno	308.71	321.93	13.23
42	Cianamida	414.26	403.51	-10.76
43	Ciclohexano	253.15	268.53	15.38
44	Ciclohexanol	340.93	328.66	-12.27
45	Diclorobenceno	339.26	343.37	4.11
46	1,3-Dicloropropano	308.15	285.35	-22.80
47	2,3-Dicloropropano	288.15	277.78	-10.37
48	Dietilamina	245.37	248.77	3.40
49	M-Dietil benceno	329.26	343.80	14.54
50	Dietil carbonato	298.15	302.09	3.94
51	Dietilenglicol	397.04	391.73	-5.31
52	Éter dietílico	228.15	232.80	4.65
53	Diisobutileno	268.15	283.25	15.10
54	Diisopropil benceno	349.82	361.88	12.06
55	2,2-Dimetil-1-Propanol	309.82	292.92	-16.89

Continuación.

56	1,2-Dinitrobenceno	423.15	448.07	24.92
57	1,4-Dioxano	285.37	283.25	-2.12
58	Dioxolano	274.82	262.65	-12.17
59	Óxido difenil	388.15	401.82	13.67
60	Dipropuleneglicol	394.26	382.06	-12.20
61	Peróxido de di-ter-Butilo	291.48	290.40	-1.08
62	Divinilbenceno	342.59	358.10	15.50
63	Epiclorhidrina	304.26	294.61	-9.66
64	Etanolamina	358.15	335.81	-22.34
65	Acetato de etilo	268.71	265.17	-3.53
66	Acrilato de etilo	282.04	281.99	-0.05
67	Alcohol etílico	285.93	266.01	-19.91
68	Etilbenceno	294.26	309.74	15.48
69	Benzoato de etilo	360.93	367.35	6.42
70	Etilbutilamina	290.93	290.82	-0.11
71	Etil butilcarbonato	323.15	308.90	-14.25
72	Butirato de etílico	297.04	297.55	0.51
73	Cloruro de etilo	223.15	215.98	-7.17
74	Cloroformiato de etilo	289.26	278.63	-10.63
75	Etilendiamina	316.48	293.76	-22.72
76	Dicloruro de etileno	286.48	269.38	-17.11
77	Etilenglicol	384.26	355.99	-28.27
78	Etilenglicol dimetil eter	271.48	266.43	-5.05
79	Etilenimina	262.04	250.04	-12.00
80	Éter etílico	228.15	232.80	4.65
81	Formiato de etilo	253.15	247.93	-5.22
82	2-Etilheanol	317.59	329.92	12.33
83	Dicloruro de 1,1-Etilideno	256.48	250.04	-6.45
84	Nitrato etílico	283.15	273.16	-9.99
85	Fluorobenceno	258.15	271.06	12.91
86	Furano	255.37	230.27	-25.10
87	Gasolina	230.37	235.32	4.95
88	Hexanal	305.37	305.96	0.59
89	Hidrazina (Anhidro)	310.93	292.50	-18.42
90	Cianuro de hidrógeno	255.37	226.49	-28.88
91	Acrilato de 2-hidroxietilo	374.26	365.66	-8.60
92	Hidroxipropil acrilato	370.37	365.66	-4.71
93	Alcohol de isobutilo	300.93	287.88	-13.05
94	Isopreno	219.26	232.38	13.12
95	Isopropanol	284.82	269.38	-15.44
96	Acetato isopropílico	274.26	274.84	0.58
97	Isopropilamina	247.04	232.38	-14.66
98	Cloruro isopropílico	240.93	233.22	-7.71
99	Éter isopropílico	245.37	258.87	13.49
100	Anhídrido maleico	374.82	359.36	-15.46
101	Ácido metacílico	350.37	329.92	-20.45
102	Acetato de metilo	263.15	252.14	-11.01
103	Alcohol metílico	284.26	255.08	-29.18
104	Metil amil cetona	312.04	320.25	8.21
105	Carbonato de metilo	292.04	274.00	-18.04
106	Cloroacetato de metilo	330.37	305.12	-25.26
107	Metilciclohexano	269.26	283.25	13.99
108	Metil etil cetona	264.26	267.28	3.01
109	Formato de metilo	248.71	230.70	-18.01
110	Metil hidracina	267.04	273.16	6.12
111	Metil isobutil cetona	290.93	295.03	4.10
112	Metil metacrilato	283.15	282.83	-0.32

Continuación.

113	2-metilpropenal	274.82	258.03	-16.79
114	Metil vinil cetona	266.48	268.54	2.05
115	Aceite mineral	466.48	479.19	12.71
116	Monoclorobenceno	302.04	306.80	4.76
117	Monoetanolamina	358.15	335.81	-22.34
118	Naftaleno	352.04	371.55	19.51
119	Nitrobenceno	360.93	366.08	5.16
120	Nitroetano	300.93	292.92	-8.00
121	Nitrometano	308.15	282.83	-25.32
122	P-nitrotolueno	379.26	386.69	7.43
123	Óxido de pentametileno	253.15	263.91	10.76
124	Ácido paracético	313.71	286.20	-27.51
125	Fenol	352.59	343.80	-8.79
126	2-picolina	312.04	303.44	-8.60
127	Propanol	243.15	243.73	0.58
128	1,3-propanodiamina	297.04	309.32	12.28
129	Bromuro propargílico	283.15	274.00	-9.15
130	Nitrilo propiónico	275.37	280.31	4.94
131	Acetato de propilo	285.93	283.67	-2.25
132	Alcohol propílico	296.48	280.31	-16.17
133	Propilamina	235.93	243.73	7.80
134	Propilbenceno	303.15	327.40	24.25
135	Propileno	165.37	170.57	5.20
136	Dicloruro de propileno	288.71	279.47	-9.24
137	Propilenglicol	372.04	348.85	-23.19
138	Óxido de propileno	235.93	232.80	-3.13
139	N-propil éter	294.26	274.84	-19.42
140	N-propil nitrate	293.15	289.98	-3.17
141	Piridina	293.15	294.18	1.03
142	Estireno	304.26	316.47	12.21
143	Tolueno	277.59	290.82	13.23
144	Tolueno 2,4-diisocianato	405.37	396.78	-8.59
145	1,2,4-triclorobenceno	378.71	367.77	-10.94
146	1,2,3-tricloropropano	344.26	324.88	-19.38
147	Trietanolamina	452.04	466.57	14.54
148	Trietilamina	264.26	274.42	10.16
149	Trietilenglicol	449.82	422.85	-26.97
150	Tripropilamina	313.71	324.88	11.17
151	Acetato de vinilo	265.37	261.81	-3.56
152	Vinil butil éter	263.71	278.21	14.50
153	Cloruro de vinilo	195.37	196.22	0.84
154	4-Vinil ciclohexano	289.26	305.12	15.86
155	Tolueno de vinilo	324.82	333.71	8.89
156	P-xileno	298.15	310.58	12.43
157	Metil triclorosilano	258.15	256.98	-1.17
158	Metil diclorosilano	240.93	238.18	-2.75
159	Metano	85.37	84.51	-0.86
160	Tricloroacetaldehído	305.93	280.67	-25.26
161	1,1-dicloroetileno	254.82	230.62	-24.20
162	cis-1,2-dicloroetileno	277.04	252.52	-24.52
163	Ácido dicloroacético	383.15	353.55	-29.60
164	Metil cloroformiato	285.37	260.35	-25.02
165	Metil isocianato	265.93	236.13	-29.80
166	Etileno	137.04	128.26	-8.78
167	1,1-dicloroetano	260.93	250.10	-10.83
168	1,2-dicloroetano	286.48	269.88	-16.61
169	2-cloroetanol	313.71	304.06	-9.65

Continuación.

170	Dimetil sulfóxido	360.93	349.77	-11.16
171	Dimetil sulfato	355.93	349.62	-6.31
172	Dimetil sulfuro	239.26	234.98	-4.28
173	Dimetil disulfuro	279.82	289.79	9.97
174	Malonitrilo	385.37	371.98	-13.39
175	Alcohol propargílico	309.26	292.70	-16.56
176	beta-propiolactona	347.04	329.34	-17.70
177	Ácido pirúvico	357.04	331.61	-25.43
178	3-cloropropeno	240.93	240.76	-0.17
179	alfa-epiclorhidrina	304.26	294.61	-9.66
180	Hidracrilonitrilo	402.59	373.99	-28.61
181	Lactonitrilo	350.37	345.87	-4.50
182	1,1-dicloropropano	294.26	273.41	-20.86
183	1,2-dicloropropano	288.71	279.67	-9.04
184	1,3-dicloropropano	294.26	297.85	3.59
185	Metil vinil éter	217.04	210.89	-6.15
186	n-propionaldehído	243.15	243.06	-0.09
187	1,2-óxido de propileno	235.93	232.39	-3.54
188	Ácido propiónico	328.15	313.57	-14.58
189	Ácido 3-mercaptopropiónico	365.93	379.17	13.25
190	Trioxano	318.15	293.39	-24.76
191	Cloruro de propilo	242.04	241.94	-0.10
192	Propilenimina	263.15	252.78	-10.37
193	N,N-dimetilformamida	330.93	322.52	-8.40
194	N-metilacetamida	380.93	361.88	-19.05
195	1-nitropropano	309.26	306.01	-3.25
196	2-nitropropano	297.04	297.74	0.70
197	Metil etil éter	235.93	212.29	-23.64
198	2-metoxietanol	312.04	300.88	-11.16
199	Metilal	255.37	238.40	-16.97
200	1,2-propilenglicol	372.04	348.71	-23.33
201	n-propilmercaptano	253.15	257.98	4.83
202	Isopropil mercaptano	238.15	246.51	8.36
203	1-amino-2-propanol	347.04	327.41	-19.62
204	3-amino-1-propanol	352.59	348.63	-3.96
205	Metiletanolamina	345.37	326.31	-19.06
206	1,2-propanodiamina	305.93	297.02	-8.91
207	Succionitrilo	405.37	408.80	3.43
208	Diketeno	307.04	302.13	-4.91
209	Tiofeno	272.04	270.42	-1.61
210	Cloropreno	253.15	251.68	-1.47
211	Metacrilonitrilo	285.93	275.07	-10.86
212	Pirrol	312.04	305.00	-7.04
213	Vinilacetónitrilo	295.93	296.43	0.50
214	Cianoacetato de metilo	383.15	361.95	-21.20
215	1,3-dicloro-trans-2-buteno	300.37	304.25	3.87
216	1,4-dicloro-cis-2-buteno	328.15	322.15	-6.00
217	3,4-dicloro-1-buteno	300.93	293.65	-7.28
218	trans-crotonaldehído	285.93	285.51	-0.41
219	2,5-dihidrofurano	257.04	256.57	-0.47
220	Divinil éter	225.93	228.15	2.22
221	Metacoleina	275.37	258.19	-17.18
222	gamma-butirolactona	371.48	361.12	-10.36
223	Ácido trans-crotónico	367.59	346.74	-20.85
224	Ácido tartárico	483.15	499.51	16.36
225	N-butironitrilo	299.26	295.73	-3.53
226	Isobutironitrilo	281.48	285.14	3.66

Continuación.

227	3-metoxipropionitrilo	338.15	332.25	-5.90
228	2-pirrolidona	402.59	392.15	-10.44
229	1-butano	194.26	202.00	7.74
230	cis-2-butano	199.82	209.55	9.73
231	trans-2-butano	199.82	207.39	7.58
232	Isobutano	197.04	201.51	4.47
233	1,4-diclorobutano	325.37	323.21	-2.17
234	n-butiraldehído	266.48	263.34	-3.14
235	Isobutiraldehído	265.93	255.24	-10.69
236	1,2-epoxybutano	258.15	254.73	-3.42
237	Etil vinil éter	227.59	233.63	6.04
238	Tetrahidrofurano	258.71	255.81	-2.90
239	cis-2-butano-1,4-diol	400.93	384.58	-16.34
240	Ácido isobutírico	349.82	323.81	-26.01
241	n-ácido butírico	344.82	330.30	-14.52
242	Propionato de metilo	270.93	266.86	-4.07
243	n-propil formiato	270.37	267.90	-2.47
244	Sulfolano	449.82	422.43	-27.39
245	Tetrahidrotiofeno	291.48	298.40	6.91
246	1-bromobutano	290.93	283.62	-7.30
247	2-bromobutano	294.26	275.77	-18.49
248	cloruro de sec-butilo	244.26	258.27	14.01
249	cloruro de tert-butilo	268.15	245.02	-23.13
250	Pirrolidina	275.93	272.25	-3.68
251	N,N-dimetilacetamida	335.93	332.44	-3.49
252	Morfolina	310.93	303.60	-7.32
253	sec-butanol	297.04	282.07	-14.97
254	tert-butanol	284.26	269.11	-15.15
255	Isobutanol	300.93	288.21	-12.72
256	1,3-butanodiol	382.04	363.39	-18.65
257	1,4-butanodiol	407.04	379.29	-27.75
258	2,3-butanodiol	358.15	343.49	-14.66
259	Hidroperóxido de t-butilo	299.82	306.90	7.08
260	1,2-dimetoxietano	271.48	270.34	-1.14
261	2-etoxietanol	316.48	308.90	-7.58
262	Dietil sulfato	377.04	365.55	-11.49
263	n-butil mercaptano	274.82	281.25	6.43
264	Isobutil mercaptano	264.26	273.70	9.44
265	sec-butil mercaptano	250.37	271.04	20.67
266	tert-butil mercaptano	247.04	255.33	8.30
267	Dietil sulfuro	263.15	276.43	13.28
268	Isobutilamina	255.37	257.99	2.62
269	sec-butilamina	244.26	254.41	10.15
270	tert-butilamina	264.26	240.33	-23.93
271	Dimetiletanolamina	314.26	308.14	-6.12
272	N-aminoetil etanolamina	374.82	391.28	16.47
273	Tetraetilsilano	245.93	226.90	-19.03
274	Dietilenop triamino	372.04	363.47	-8.57
275	Furfural	333.15	329.38	-3.77
276	Furfural alcohol	338.15	335.39	-2.76
277	N-metilpirrol	288.15	292.05	3.90
278	Etil cianoacetato	383.15	362.64	-20.51
279	Ciclopentano	244.26	240.20	-4.06
280	1-pentino	239.26	237.14	-2.12
281	Ciclopentanona	299.26	305.61	6.35
282	Metil isopropenil cetona	294.26	280.90	-13.36
283	Acetilacetona	307.04	312.99	5.95

Continuación.

284	Acetato alílico	295.37	285.44	-9.93
285	Propionato de vinilo	274.26	275.75	1.49
286	Acetoacetato de metilo	349.82	336.68	-13.14
287	N-metil-2-pirrolidona	368.71	359.61	-9.10
288	1-penteno	255.37	229.40	-25.97
289	2-pentanona	280.37	284.16	3.79
290	Dietyl cetona	285.93	283.92	-2.01
291	Valeraldehído	285.37	284.68	-0.69
292	Formiato de n-butilo	290.93	287.03	-3.90
293	Propionato de etilo	285.37	281.73	-3.64
294	Metil n-butilato	287.04	284.49	-2.55
295	Ácido valérico	369.26	347.12	-22.14
296	Tetrahidrofurfural alcohol	357.04	341.44	-15.59
297	Lactato de etilo	319.26	323.66	4.40
298	1-cloropentano	285.93	288.76	2.83
299	N-metilpirrolidina	259.26	266.63	7.37
300	Piperidina	275.93	287.26	11.33
301	tert-butilformamida	368.15	359.61	-8.54
302	Neopentano	208.15	213.92	5.77
303	2-metil-1-butanol	323.15	304.13	-19.02
304	2-metil-2-butanol	313.71	283.93	-29.78
305	3-metil-1-butanol	315.93	306.03	-9.90
306	3-metil-2-butanol	312.59	291.12	-21.48
307	1-pentanol	305.93	311.02	5.09
308	2-pentanol	307.59	296.79	-10.80
309	3-pentanol	313.71	293.99	-19.71
310	Metil tert-butil éter	245.37	248.51	3.13
311	Etilenglicol éter monopropil	322.04	321.28	-0.76
312	1,5-pentanodiol	402.59	387.61	-14.98
313	2-(2-metoxietoxi) etanol	369.26	353.25	-16.01
314	n-pentil mercaptano	290.93	302.57	11.65
315	n-pentilamina	280.37	285.82	5.45
316	Metil dietanolamina	399.82	393.67	-6.15
317	Hexafluorobenceno	283.15	267.47	-15.68
318	1-cloro-2,4-dinitrobenceno	467.04	445.02	-22.02
319	m-dibromobenceno	365.93	371.72	5.79
320	m-cloronitrobenceno	400.37	385.04	-15.33
321	o-cloronitrobenceno	400.37	392.80	-7.58
322	p-cloronitrobenceno	400.37	389.88	-10.49
323	m-diclorobenceno	344.82	337.72	-7.10
324	o-diclorobenceno	339.26	343.28	4.02
325	p-diclorobenceno	339.26	338.46	-0.80
326	m-dinitrobenceno	423.15	433.66	10.51
327	o-dinitrobenceno	423.15	448.04	24.89
328	p-clorofenol	389.26	373.20	-16.06
329	3,4-dicloroanilina	439.26	412.47	-26.79
330	o-cloroanilina	363.71	364.78	1.08
331	p-cloroanilina	385.93	381.18	-4.75
332	o-nitroanilina	440.93	422.31	-18.62
333	p-nitroanilina	472.04	461.02	-11.01
334	1,2-bencenodiol	399.82	392.53	-7.29
335	1,3-bencenodiol	399.82	415.99	16.18
336	p-hidroquinona	438.15	422.43	-15.72
337	Fenil mercaptano	345.93	334.74	-11.19
338	2-metilpiridina	312.04	304.66	-7.38
339	4-metilpiridina	330.37	316.73	-13.64
340	m-fenilendiamina	410.93	423.83	12.90

Continuación.

341	p-fenilendiamina	428.71	408.69	-20.02
342	Dimetil maleato	385.93	361.88	-24.05
343	Ciclohexeno	266.48	269.52	3.04
344	2,3-dimetil-1,3-butadieno	250.93	258.78	7.85
345	1,5-hexadieno	227.04	251.73	24.69
346	cis,trans-2,4-hexadieno	265.93	269.92	4.00
347	trans,trans-2,4-hexadieno	265.93	268.71	2.79
348	1-hexino	252.04	260.71	8.67
349	2-hexino	262.04	270.70	8.66
350	Ciclohexanona	317.04	324.61	7.57
351	Óxido de mesitilo	301.48	304.97	3.48
352	epsilon-caprolactana	382.04	389.01	6.97
353	Etil metacrilato	294.26	295.28	1.02
354	Etilacetoacetato	330.37	343.56	13.19
355	Anhídrido propiónico	335.93	334.63	-1.29
356	Ácido adipico	435.93	462.42	26.50
357	Etilenglicol diacetato	360.93	350.91	-10.02
358	Etilidieno acetato	339.26	334.63	-4.63
359	3,3-dimetil-1-buteno	244.82	237.95	-6.87
360	trans-3-hexeno	260.93	257.50	-3.42
361	Metilciclopentano	245.93	261.08	15.15
362	3-metil-1-penteno	245.37	247.73	2.36
363	Butil vinil éter	272.04	277.74	5.70
364	2-hexanona	298.15	303.38	5.23
365	3-hexanona	287.04	300.20	13.16
366	sec-butil acetato	288.71	291.49	2.79
367	tert-butil acetato	289.26	279.38	-9.88
368	Isobutirato de etilo	287.04	289.87	2.83
369	Acetato de isobutilo	290.93	295.01	4.09
370	Alcohol diacetona	319.82	333.76	13.95
371	Ácido 2-etil butírico	359.82	353.40	-6.41
372	Ácido n-hexanoico	374.82	362.41	-12.41
373	2-etoxietil acetato	327.59	325.02	-2.57
374	Paraldehído	308.71	300.78	-7.93
375	Ciclohexilamina	304.26	308.52	4.26
376	Hexametenilamina	310.37	306.40	-3.97
377	2,2-dimetilbutano	225.37	244.36	18.99
378	2,3-dimetilbutano	244.26	250.61	6.35
379	2-metilpentano	238.15	252.34	14.19
380	2-etil-1-butanol	330.37	317.60	-12.77
381	1-hexanol	335.93	325.55	-10.38
382	2-hexanol	314.26	312.60	-1.66
383	2-metil-1-pentanol	324.26	318.74	-5.52
384	4-metil-2-pentanol	314.26	306.40	-7.86
385	n-butil etil éter	277.04	276.51	-0.53
386	Diisopropil éter	245.37	258.42	13.05
387	DI-n-propil éter	294.26	274.57	-19.69
388	2-butoxyetanol	342.59	336.39	-6.20
389	1,6-hexanodiol	372.04	390.64	18.60
390	Hexilenglicol	365.93	356.20	-9.72
391	Di-n-propil sulfona	399.26	410.96	11.70
392	Dietilenglicol dimetil éter	335.93	327.64	-8.29
393	2-(2-etoxietoxi)etanol	356.48	359.61	3.13
394	Trimetilpropano	452.59	425.37	-27.23
395	Diisopropilamina	265.93	270.23	4.30
396	DI-n-propilamina	290.37	289.11	-1.26
397	n-hexilamina	302.59	306.25	3.66

Continuación.

398	Diisopropanolamina	397.04	394.99	-2.05
399	N-aminoetil piperazina	365.93	373.53	7.61
400	Trietil fosfato	372.04	366.42	-5.62
401	Hexametildiamina	366.48	359.52	-6.96
402	Hexametil fosformamida	378.71	383.07	4.37
403	Trietilen tetramina	408.15	408.42	0.27
404	Hexametildisiloxano	270.93	282.81	11.88
405	Hexametildiclotrisiloxano	308.15	308.99	0.84
406	Hexametildisilazano	280.93	302.09	21.16
407	Cloro-3-nitrobenzotrifloruro	374.26	374.75	0.48
408	p-clorobenzotrifloruro	315.93	311.93	-4.00
409	3-nitrobenzotrifloruro	360.93	360.20	-0.73
410	Cloruro de bencilo	345.37	355.82	10.45
411	Benzotrifloruro	285.37	283.96	-1.41
412	Benzonitrilo	348.15	351.28	3.13
413	Fenil isocianato	328.71	332.06	3.35
414	2,4-diclorotolueno	369.26	358.93	-10.33
415	3,4-dinitrotolueno	479.82	461.67	-18.15
416	Salicilaldehído	350.93	355.45	4.52
417	p-bromotolueno	358.15	346.25	-11.90
418	o-clorotolueno	324.26	327.18	2.92
419	p-clorotolueno	324.82	329.71	4.90
420	m-nitrotolueno	374.82	382.20	7.38
421	o-nitrotolueno	379.26	375.12	-4.15
422	Anisol	325.37	322.96	-2.41
423	m-cresol	367.59	359.82	-7.78
424	o-cresol	354.26	351.28	-2.98
425	p-cresol	367.59	359.59	-8.00
426	Guayacol	354.82	361.88	7.06
427	p-metoxifenol	398.15	390.53	-7.62
428	Bencilamina	333.15	346.36	13.21
429	2,6-dimetilpiridina	305.93	315.75	9.82
430	N-metilanilina	350.93	354.97	4.04
431	m-toluidina	359.26	360.67	1.41
432	o-toluidina	358.15	358.40	0.25
433	p-toluidina	359.82	358.28	-1.53
434	2-norborneno	258.15	279.01	20.86
435	Toluenodiamina	422.04	421.67	-0.37
436	Ciclohexil isocianato	322.04	334.63	12.59
437	Acrilato de isobutilo	304.26	306.63	2.37
438	Malonato de dietilo	365.93	357.26	-8.67
439	1-hepteno	273.15	277.60	4.45
440	trans-2-hepteno	272.04	280.86	8.82
441	trans-3-hepteno	267.04	279.14	12.10
442	2-metil-1-hexeno	267.04	276.24	9.20
443	3-metil-1-hexeno	267.04	270.23	3.19
444	2,3,3-trimetil-1-butenos	255.93	265.68	9.75
445	Diisopropil cetona	288.15	300.88	12.73
446	2-heptanona	312.04	320.93	8.90
447	1-heptanal	310.93	322.37	11.44
448	5-metil-2-hexanona	309.26	316.32	7.06
449	Propionato de n-butilo	305.37	317.68	12.31
450	Isovalerato de etilo	308.15	308.37	0.22
451	Isopentil acetato	298.15	314.27	16.12
452	Acetato de n-pentilo	298.15	319.50	21.35
453	Etil-3-etoxipropionato	330.93	331.61	0.68
454	N-metilciclohexilamina	302.04	319.38	17.34

Continuación.

455	2,4-dimetilpentano	260.93	267.65	6.72
456	2-metilhexano	269.26	274.88	5.62
457	3-metilhexano	269.26	276.24	6.98
458	1-heptanol	349.82	340.16	-9.66
459	2-heptanol	344.26	327.22	-17.04
460	n-heptil mercaptano	319.26	340.64	21.38
461	1-aminoheptano	328.15	325.48	-2.67
462	anhídrido ftálico	424.82	422.05	-2.77
463	Acetofenona	355.37	359.61	4.24
464	Benzoato de metilo	355.93	357.72	1.79
465	Salicilato de metilo	369.26	373.61	4.35
466	Acetanilida	445.93	436.65	-9.27
467	m-xileno	298.15	312.02	13.87
468	o-xileno	290.37	316.04	25.66
469	p-etilfenol	377.04	371.71	-5.33
470	2-feniletanol	369.26	372.40	3.14
471	2,6-xilenol	358.71	358.91	0.20
472	N,N-dimetilanilina	335.93	353.21	17.28
473	o-etilanilina	370.37	365.29	-5.09
474	2,4,6-trimetilpiridina	330.37	336.03	5.66
475	p-fenetidina	389.26	399.61	10.35
476	1,5-ciclooctadieno	308.15	320.35	12.20
477	Vinilciclohexeno	289.26	303.49	14.23
478	Dietil maleato	365.93	377.02	11.09
479	Metacrilato de n-butilo	325.37	328.47	3.09
480	Anhídrido butírico	355.37	354.31	-1.06
481	Dietil Succionato	363.15	370.58	7.43
482	Etilciclohexano	308.15	306.48	-1.67
483	1-octeno	294.26	298.52	4.26
484	trans-2-octeno	294.26	301.33	7.07
485	2-Etilhexanal	317.04	328.31	11.27
486	1-octanal	324.82	338.42	13.60
487	2-octanona	344.26	337.36	-6.90
488	n-butil n-butirato	326.48	331.61	5.12
489	Acetato de n-hexil	332.04	336.53	4.49
490	Isobutil isobutirato	310.93	318.36	7.43
491	Dietilenglicol etil éter acetato	379.82	371.26	-8.55
492	2,3-dimetilhexano	278.71	294.23	15.52
493	2,4-dimetilhexano	283.15	289.55	6.40
494	2,2,4-trimetilpentano	260.93	281.84	20.91
495	Di-n-butil éter	298.15	312.90	14.75
496	Di-sec-butil éter	288.15	298.34	10.19
497	2-etil-1-hexanol	346.48	346.44	-0.04
498	1-octanol	354.26	354.46	0.20
499	2-octanol	333.15	342.81	9.66
500	Peróxido de di-t-butilo	290.93	290.74	-0.19
501	Sulfona di-n-butilo	415.93	426.94	11.01
502	Dietilenglicol dietil éter	355.37	349.77	-5.60
503	Trietilenglicol dimetil éter	383.15	370.20	-12.95
504	Tetraetilenglicol	469.26	439.72	-29.54
505	Mercaptano de n-octilo	340.93	357.37	16.44
506	tert-octil mercaptano	304.26	324.68	20.42
507	Di-n-butilamina	320.37	326.95	6.58
508	Diisobutilamina	294.26	312.00	17.74
509	n-octilamina	333.15	342.66	9.51
510	Tetraetilenpentamina	435.93	458.75	22.83
511	Octametilciclotetrasiloxano	330.37	339.17	8.80

Continuación.

512	Diisocianato de tolueno	400.37	395.94	-4.44
513	Isoquinolina	380.37	390.83	10.46
514	Quinolina	374.26	386.55	12.29
515	Indano	323.15	341.42	18.27
516	alpha-metilestireno	327.04	331.98	4.95
517	m-metilestireno	324.26	336.60	12.34
518	o-metilestireno	320.37	335.25	14.88
519	p-metilestireno	319.26	337.49	18.23
520	p-dimetilaminobenzaldehído	420.37	445.02	24.65
521	Mesitileno	317.59	331.41	13.81
522	1,2,3-trimetilbenceno	324.26	340.02	15.76
523	1,2,4-trimetilbenceno	318.71	334.92	16.21
524	Cumeno hidroperóxido	322.04	335.05	13.01
525	Isoforona	357.04	369.60	12.56
526	Triacetato de glicerilo	410.93	402.75	-8.18
527	Isopropilciclohexano	308.15	323.86	15.71
528	Diisobutil cetona	322.04	334.07	12.04
529	2,2-dimetilheptano	297.04	307.15	10.11
530	2,6-dimetilheptano	299.26	309.06	9.80
531	2,2,5-trimetilhexano	285.93	300.64	14.72
532	1-nonanol	347.04	368.01	20.97
533	2-nonanol	354.82	356.96	2.14
534	n-nonil mercaptano	350.93	373.08	22.15
535	1-cloronaftaleno	394.26	402.98	8.71
536	Dimetil ftalato	419.26	421.44	2.18
537	Dimetil tereftalato	429.26	424.70	-4.56
538	1,2,3,4-tetrahidronaftaleno	344.26	363.86	19.60
539	Anetol	362.04	384.81	22.77
540	n-butilbenceno	344.26	345.46	1.20
541	sec-butilbenceno	325.37	337.91	12.54
542	tert-butilbenceno	333.15	334.75	1.60
543	p-cimeno	320.37	340.78	20.41
544	o-dietilbenceno	330.37	345.58	15.21
545	p-dietilbenceno	329.82	345.83	16.01
546	Isobutilbenceno	328.15	337.50	9.35
547	1,2,3,5-tetrametilbenceno	336.48	356.58	20.10
548	1,2,4,5-tetrametilbenceno	327.59	355.70	28.11
549	p-tert-butilfenol	385.93	388.16	2.23
550	p-tert-butilcatecol	403.15	422.31	19.16
551	N,N-dietilanilina	358.15	370.41	12.26
552	Canfeno	309.26	328.20	18.94
553	D-limoneno	318.15	340.31	22.16
554	beta-felandreno	322.04	338.42	16.38
555	alpha-pineno	305.93	324.90	18.97
556	beta-pineno	312.59	332.39	19.80
557	alpha-terpineno	319.26	340.84	21.58
558	gamma-terpineno	324.26	345.23	20.97
559	Alcanfor	338.71	363.71	25.01
560	cis-decahidronaftaleno	330.93	354.93	24.01
561	trans-decahidronaftaleno	330.93	348.49	17.56
562	1-deceno	326.48	335.84	9.36
563	1-decanal	358.15	369.45	11.30
564	2-etilhexil acetato	360.93	357.04	-3.89
565	2-metilnonano	314.26	333.73	19.46
566	3-metilnonano	310.93	328.44	17.51
567	1-decanol	355.37	380.95	25.58
568	DI-n-pentil éter	330.37	348.07	17.69

Continuación.

569	Isodecanol	377.59	373.12	-4.48
570	Tetraetilenglicol dimetiléter	414.26	415.46	1.20
571	n-decilamina	372.04	373.61	1.57
572	n-butil benzoato	379.26	395.94	16.68
573	n-pentilbenceno	339.26	362.23	22.97
574	p-tert-amilfenol	384.26	405.02	20.76
575	2-etilhexil acrilato	344.26	370.20	25.94
576	1-undeceno	344.26	352.55	8.29
577	n-undecano	338.15	392.15	25.67
578	Bifenil	385.93	399.72	13.79
579	Difenil éter	388.15	402.23	14.08
580	Difenilamina	425.93	435.29	9.36
581	p-aminodifenilamina	466.48	474.65	8.16
582	1,2,3-trimetilindeno	359.26	385.23	25.97
583	Dietil ftalato	434.26	429.24	-5.02
584	Ciclohexilbenceno	372.04	388.46	16.42
585	Dibutil maleato	413.15	418.64	5.49
586	Diciclohexilamina	377.04	400.36	23.33
587	DI-n-hexil éter	350.37	377.55	27.17
588	1-dodecanol	399.82	404.91	5.09
589	Dietilenglicol di-n-butiléter	390.93	400.48	9.55
590	n-dodecil mercaptano	400.93	414.55	13.63
591	Tri-n-butil borato	365.93	383.45	17.52
592	Tri-n-butilamina	359.26	368.69	9.43
593	Difenilmetano	403.15	406.74	3.59
594	n-heptilbenceno	368.15	392.99	24.84
595	1-tridecanol	394.26	414.10	19.84
596	Fenantreno	444.26	464.28	20.02
597	Bencil benzoato	428.15	451.56	23.41
598	1,1-difeniletano	402.04	413.06	11.02
599	1,2-difeniletano	403.15	419.02	15.87
600	Dibencil éter	408.15	424.92	16.77
601	n-octilbenceno	380.37	406.84	26.46
602	1-tetradeceno	383.15	396.77	13.62
603	1-tetradecanol	414.26	423.94	9.68
604	Difenilmetano-4,4-diisocianato	474.26	460.91	-13.35
605	1-heptadcanol	427.59	451.94	24.35
606	o-terfenil	435.93	460.91	24.98
607	p-terfenil	480.37	491.30	10.93
608	Trifenilfosfina	453.15	519.68	26.53
609	N,N-difenil-p-fenilenodiamina	505.37	520.70	15.33
610	Sebecato de dibutilo	450.93	470.86	19.94
611	Dihexil adipato	464.26	470.11	5.85

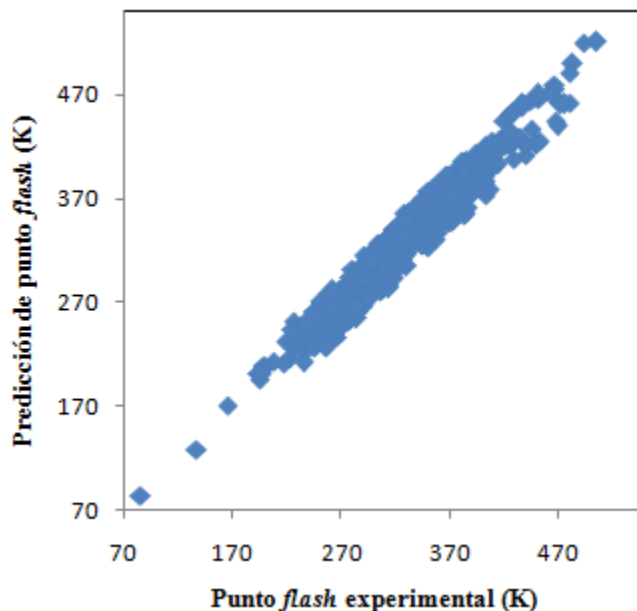


Figura 4.2: Predicción de punto *flash* con los datos ajustados para los 611 componentes puros comparada con punto *flash* experimentales.

A continuación, se aplica el modelo propuesto por la ecuación (3.4) a la lista de 58 componentes puros donde se tienen los datos de la temperatura de ebullición, el calor de vaporización, el calor de reacción y la temperatura de punto *flash* experimental. Como forma de validar los datos se utilizan las constantes resultantes del ajuste para los alcanos obtenidas en el capítulo anterior β_0 y β_1 que son 0.7259 y -0.0000714, respectivamente, se obtiene un promedio absoluto del error de 4.41%. La Tabla 4.4 muestra los resultados de la predicción de punto *flash* y la Figura 4.3 muestra gráficamente la comparación de los resultados obtenidos con respecto a los datos de punto *flash* experimentales. Posteriormente, se realiza un ajuste de los datos experimentales para obtener nuevas constantes para la lista de 58 componentes puros para este modelo, se obtienen los valores para las constantes β_0 y β_1 de 0.8185 y -0.0007476, respectivamente, y un promedio absoluto del error se reduce a 1.88%. La Tabla 4.5 muestra los resultados del ajuste de los datos para la predicción de punto *flash* y la Figura 4.4 muestra gráficamente la comparación de los resultados obtenidos del ajuste con respecto a los datos de punto *flash* experimentales.

Tabla 4.4: Predicción de punto *flash* para 58 componentes puros

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)
1	Acetaldehído	235.37	214.11	-21.27
2	Ácido acético	312.59	284.68	-27.91
3	Acetona	253.15	240.32	-12.83
4	Acetonitrilo	278.71	258.59	-20.12
5	Acroleína	247.04	237.83	-9.21
6	Anilina	343.15	334.80	-8.35
7	Benzaldehído	337.59	330.98	-6.61
8	Benceno	262.04	258.94	-3.10
9	Alcohol de bencilo	366.48	350.24	-16.24
10	O-bromo tolueno	352.04	332.82	-19.22
11	1,3-butadieno	197.04	197.13	0.09
12	1-butanol	302.04	284.97	-17.07
13	Acetato de butilo	295.37	292.81	-2.56
14	Acrilato de butilo	312.59	309.06	-3.54
15	N-butilamina	260.93	234.56	-26.37
16	Disulfuro de carbono	243.15	232.62	-10.53
17	Ciclohexano	253.15	260.67	7.52
18	Ciclohexanol	340.93	317.63	-23.30
19	Dietilamina	245.37	240.98	-4.40
20	Dietil carbonato	298.15	291.72	-6.43
21	Dietil éter	228.15	225.32	-2.83
22	2,2-dimetil-1-propanol	309.82	282.99	-26.83
23	1,4-dioxano	285.37	273.37	-12.00
24	Acetato de etilo	268.71	255.72	-12.99
25	Alcohol etílico	285.93	255.93	-29.99
26	Etil benceno	294.26	300.62	6.36
27	Etil benzoato	360.93	355.99	-4.94
28	Etil butirato	297.04	287.95	-9.09
29	Cloruro de etilo	223.15	208.16	-14.99
30	Etil éter	228.15	225.39	-2.76
31	Formiato de etilo	253.15	238.97	-14.18
32	Furano	255.37	222.47	-32.90
33	Isopropanol	284.82	259.54	-25.27
34	Isopropil acetato	274.26	265.76	-8.50
35	Isopropilamina	247.04	224.54	-22.50
36	Metil acetato	263.15	242.98	-20.17
37	Metil amil cetona	312.04	310.30	-1.74
38	Metilciclohexano	269.26	275.33	6.07
39	Metil etil cetona	264.26	258.15	-6.12
40	Formiato de metilo	248.71	221.96	-26.74
41	Metil isobutil cetona	290.93	285.98	-4.94
42	Monoetanolamina	358.15	322.93	-35.22
43	Naftaleno	352.04	360.69	8.65
44	Nitrobenceno	360.93	353.66	-7.27
45	Nitrometano	308.15	271.83	-36.32
46	Fenol	352.59	331.77	-20.82
47	Propil acetato	285.93	274.16	-11.76
48	Alcohol propílico	296.48	269.97	-26.51
49	Propilamina	235.93	235.47	-0.46
50	Propileno	165.37	165.29	-0.08
51	Piridina	293.15	283.02	-10.13
52	Estireno	304.26	306.98	2.72
53	Tolueno	277.59	282.00	4.41
54	Trietanolamina	452.04	449.70	-2.34
55	Trietilamina	264.26	266.72	2.46
56	Vinil acetato	265.37	252.65	-12.73
57	Cloruro de vinilo	195.37	189.15	-6.23
58	P-xileno	298.15	301.43	3.28

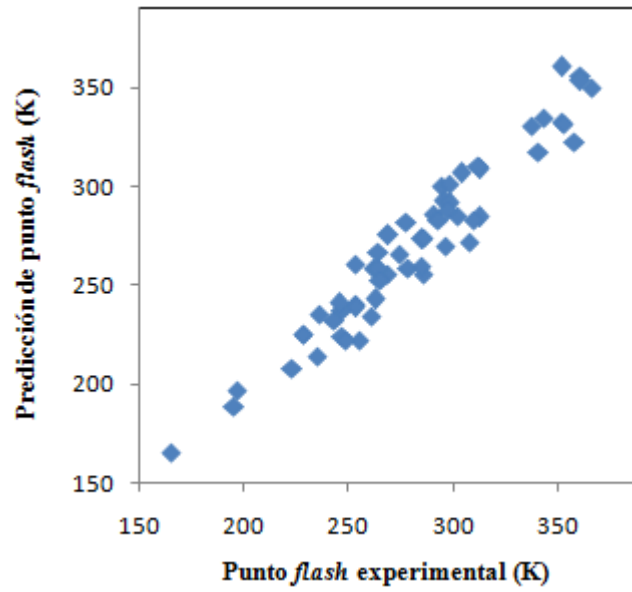


Figura 4.3: Predicción de punto *flash* de 58 componentes puros comparada con punto *flash* experimentales.

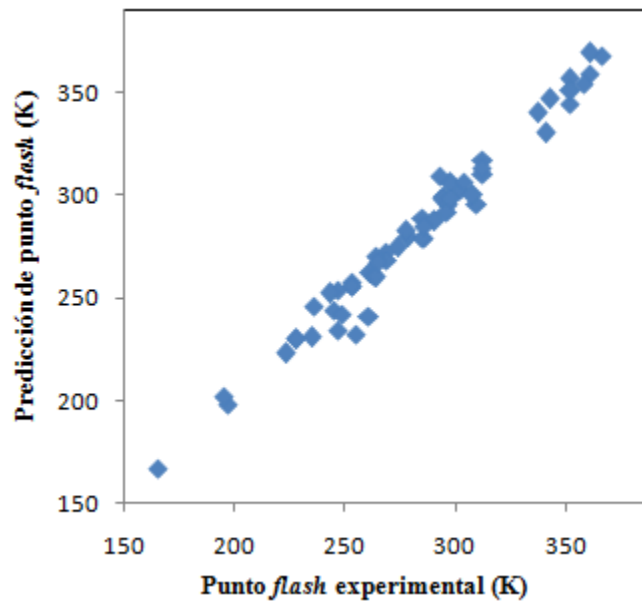


Figura 4.4: Predicción de punto *flash* con los datos ajustados para 58 componentes puros comparada con punto *flash* experimentales.

Tabla 4.5: Predicción de punto *flash* con los datos ajustados para 58 componentes puros.

No.	Compuesto	Tf experimental (K)	Tf predicción (K)	Desviación (K)
1	Acetaldehído	235.37	231.02	-4.35
2	Ácido acético	312.59	310.61	-1.98
3	Acetona	253.15	255.91	2.76
4	Acetonitrilo	278.71	279.76	1.05
5	Acroleína	247.04	253.88	6.84
6	Anilina	343.15	347.09	3.94
7	Benzaldehído	337.59	340.29	2.69
8	Benceno	262.04	262.10	0.06
9	Alcohol de bencilo	366.48	367.86	1.37
10	O-bromo tolueno	352.04	344.43	-7.61
11	1,3-butadieno	197.04	198.37	1.33
12	1-butanol	302.04	302.94	0.90
13	Acetato de butilo	295.37	299.79	4.42
14	Acrilato de butilo	312.59	317.24	4.65
15	N-butilamina	260.93	241.38	-19.55
16	Disulfuro de carbono	243.15	252.29	9.14
17	Ciclohexano	253.15	257.96	4.81
18	Ciclohexanol	340.93	330.48	-10.44
19	Dietilamina	245.37	244.32	-1.05
20	Dietil carbonato	298.15	306.11	7.96
21	Dietil éter	228.15	230.57	2.42
22	2,2-dimetil-1-propanol	309.82	295.60	-14.22
23	1,4-dioxano	285.37	288.75	3.37
24	Acetato de etilo	268.71	272.42	3.71
25	Alcohol etílico	285.93	279.50	-6.42
26	Etil benceno	294.26	298.09	3.82
27	Etil benzoato	360.93	359.19	-1.73
28	Etil butirato	297.04	295.16	-1.88
29	Cloruro de etilo	223.15	223.09	-0.06
30	Etil éter	228.15	229.86	1.71
31	Formiato de etilo	253.15	255.99	2.84
32	Furano	255.37	232.32	-23.05
33	Isopropanol	284.82	279.14	-5.68
34	Isopropil acetato	274.26	274.86	0.60
35	Isopropilamina	247.04	234.01	-13.03
36	Metil acetato	263.15	260.80	-2.35
37	Metil amil cetona	312.04	313.65	1.61
38	Metilciclohexano	269.26	268.22	-1.04
39	Metil etil cetona	264.26	270.39	6.13
40	Formiato de metilo	248.71	242.31	-6.40
41	Metil isobutil cetona	290.93	287.64	-3.29
42	Monoetanolamina	358.15	354.44	-3.71
43	Naftaleno	352.04	356.76	4.73
44	Nitrobenceno	360.93	369.54	8.61
45	Nitrometano	308.15	300.16	-7.99
46	Fenol	352.59	350.80	-1.79
47	Propil acetato	285.93	285.10	-0.83
48	Alcohol propílico	296.48	291.58	-4.90
49	Propilamina	235.93	245.92	9.99
50	Propileno	165.37	166.85	1.48
51	Piridina	293.15	309.32	16.17
52	Estireno	304.26	306.32	2.06
53	Tolueno	277.59	282.56	4.97
54	Trietanolamina	452.04	481.80	29.76
55	Trietilamina	264.26	260.20	-4.06
56	Vinil acetato	265.37	267.17	1.80
57	Cloruro de vinilo	195.37	202.35	6.98
58	P-xileno	298.15	298.99	0.84

4.3 Comparación de modelos aplicados a componentes puros con modelos anteriores

Los modelos propuestos, ecuaciones (3.3) y (3.4) que se extendieron a componentes puros y donde se ajustaron los datos para la predicción de punto *flash* se comparan con trabajos anteriores, la comparación de los resultados obtenidos es realizada por grupos de componentes. Las Tablas 4.6 a la 4.15 muestran la comparación de los resultados obtenidos por el modelo propuesto, ecuación (3.3) con la correlación (2.6) mencionada en el capítulo 2 (Satyanarayana y Rao, 1992), presentando el promedio del error en forma porcentual calculado por grupo. Los resultados del modelo propuesto, ecuación (3.3) presentados en las Tablas 4.6 a la 4.15, tienen en su mayoría un promedio absoluto del error menor comparado con los resultados de la correlación (2.6). De igual forma se comparan los resultados del modelo propuesto, ecuación (3.4) con los resultados de la correlación (2.6) (ver Tabla 4.16) y se observa que los modelos propuestos tienen un promedio absoluto del error menor en casi todas las predicciones de punto *flash* para los grupos de componentes puros.

Tabla 4.6: Comparación de punto *flash* de la familia de alcoholes con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K)Ec. (3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Alcohol alílico	295.37	280.30	-15.08	305.81	10.43
Alcohol bencílico	366.48	362.70	-3.78	368.76	2.28
Bisfenol A	352.59	373.22	20.62	376.27	23.68
1-butanol	302.04	295.43	-6.61	317.57	15.53
O-Clorofenol	337.04	339.08	2.05	351.29	14.25
Ciclohexanol	340.93	328.65	-12.28	343.35	2.42
Alcohol de isobutilo	300.93	287.87	-13.06	311.67	10.75
2,2-Dimetil-1-Propanol	309.82	292.91	-16.91	315.60	5.79
Isopropanol	284.82	269.37	-15.45	297.43	12.62
Alcohol etílico	285.93	266.00	-19.93	294.89	8.96
Alcohol metílico	284.26	255.07	-29.19	286.76	2.50
Fenol	352.59	343.78	-8.81	354.83	2.23
Alcohol propílico	296.48	280.30	-16.19	305.81	9.33
Alcohol propargílico	309.26	292.69	-16.57	315.43	6.17
2-metoxietanol	312.04	300.87	-11.17	321.81	9.77
1-amino-2-propanol	347.04	327.40	-19.64	342.39	-4.64
3-amino-1-propanol	352.59	348.62	-3.97	358.44	5.84
sec-butanol	297.04	282.06	-14.98	307.17	10.13
tert-butanol	284.26	269.10	-15.16	297.23	12.97
Isobutanol	300.93	288.20	-12.73	311.93	11.00
1,3-butanodiol	382.04	363.38	-18.66	369.25	-12.79
1,4-butanodiol	407.04	379.27	-27.77	380.51	-26.53
2,3-butanodiol	358.15	343.47	-14.68	354.60	-3.55
2-etoxietanol	316.48	308.89	-7.60	328.07	11.58

Continuación.

Furfural alcohol	338.15	335.38	-2.77	348.48	10.33
Tetrahidrofurfural alcohol	357.04	341.43	-15.61	353.06	-3.98
2-metil-1-butanol	323.15	304.12	-19.03	324.35	1.20
2-metil-2-butanol	313.71	283.91	-29.79	308.61	-5.10
3-metil-1-butanol	315.93	306.01	-9.92	325.82	9.90
3-metil-2-butanol	312.59	291.10	-21.49	314.19	1.60
1-pentanol	305.93	311.01	5.08	329.72	23.79
2-pentanol	307.59	296.78	-10.82	318.62	11.02
3-pentanol	313.71	293.98	-19.73	316.43	2.73
1,5-pentanodiol	402.59	387.60	-15.00	386.24	-16.36
2-(2-metoxietoxi) etanol	369.26	353.24	-16.02	361.85	-7.41
p-clorofenol	389.26	373.19	-16.07	376.25	-13.01
1,2-bencenodiol	399.82	392.51	-7.30	389.57	-10.25
1,3-bencenodiol	399.82	415.98	16.16	404.83	5.01
Alcohol diacetona	319.82	333.75	13.93	347.25	27.43
2-etil-1-butanol	330.37	317.59	-12.78	334.83	4.46
1-hexanol	335.93	325.54	-10.39	340.96	5.04
2-hexanol	314.26	312.59	-1.67	330.95	16.68
2-metil-1-pentanol	324.26	318.73	-5.53	335.71	11.45
4-metil-2-pentanol	314.26	306.39	-7.87	326.12	11.86
2-butoxyetanol	342.59	336.38	-6.22	349.24	6.65
1,6-hexanodiol	372.04	390.62	18.58	388.29	16.25
1-heptanol	349.82	340.14	-9.67	352.09	2.28
2-heptanol	344.26	327.20	-17.06	342.24	-2.02
p-etilfenol	377.04	371.69	-5.34	375.19	-1.84
2-feniletanol	369.26	372.38	3.12	375.68	6.42
2,6-xilenol	358.71	358.89	0.19	366.00	7.29
2-(2-etoxietoxi)etanol	356.48	359.59	3.11	366.51	10.02
2-etil-1-hexanol	346.48	346.43	-0.06	356.80	10.32
1-octanol	354.26	354.45	0.19	362.74	8.48
2-octanol	333.15	342.79	9.64	354.08	20.93
p-tert-butilfenol	385.93	388.15	2.22	386.61	0.69
p-tert-butilcatecol	403.15	422.29	19.14	408.76	5.61
1-decanol	355.37	380.94	25.56	381.67	26.29
Isodecanol	377.59	373.10	-4.49	376.19	-1.40
1-dodecanol	399.82	404.89	5.07	397.74	-2.08
1-tridecanol	394.26	414.08	19.82	403.63	9.37
1-tetradecanol	414.26	423.92	9.66	409.76	-4.50
1-heptadecanol	427.59	451.92	24.33	426.22	-1.37
Promedio absoluto del error %			3.69		2.66

Tabla 4.7: Comparación de punto *flash* de la familia de aminas con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K)		Tf(K)	Desviación(K)
		Ec(3.3)	Desviación(K)		
Anilina	343.15	339.02	3.15	346.30	-4.13
Alilamina	253.15	264.54	-6.07	247.08	11.39
N-butilamina	260.93	261.54	-18.47	242.46	0.61
Dietilamina	245.37	265.65	3.39	248.76	20.27
Etanolamina	358.15	330.90	-22.35	335.80	-27.25
Etilbutilamina	290.93	295.98	-0.12	290.81	5.06
Etilendiamina	316.48	298.24	-22.73	293.75	-18.25
Isopropilamina	247.04	255.30	-14.67	232.37	8.26
Monoetanolamina	358.15	330.90	-22.35	335.80	-27.25
1,3-propanodiamina	297.04	310.26	12.27	309.31	13.22
Propilamina	235.93	262.35	7.79	243.72	26.42
Trietanolamina	452.04	421.78	14.52	466.55	-30.26

Continuación.

Trietilamina	264.26	283.68	10.15	274.41	19.41
Tripropilamina	313.71	322.39	11.16	324.86	8.68
Metiletanolamina	345.37	323.50	-19.08	326.29	-21.87
1,2-propanodiamina	305.93	300.74	-8.92	297.01	-5.19
Isobutilamina	255.37	271.90	2.60	257.98	16.53
sec-butilamina	244.26	269.44	10.14	254.40	25.18
tert-butilamina	264.26	260.18	-23.94	240.32	-4.08
Dimetiletanolamina	314.26	309.35	-6.13	308.13	-4.91
N-aminoetil etanolamina	374.82	372.54	16.45	391.27	-2.28
Dietilenop triamina	372.04	352.08	-8.59	363.45	-19.96
n-pentilamina	280.37	292.18	5.43	285.81	11.81
Metil dietanolamina	399.82	374.24	-6.17	393.65	-25.57
3,4-dicloroanilina	439.26	387.36	-26.81	412.46	-51.90
o-cloroanilina	363.71	353.07	1.06	364.77	-10.63
p-cloroanilina	385.93	365.23	-4.77	381.16	-20.70
o-nitroanilina	440.93	394.00	-18.63	422.29	-46.93
p-nitroanilina	472.04	418.48	-11.03	461.00	-53.56
m-fenilendiamina	410.93	395.00	12.88	423.81	-15.92
p-fenilendiamina	428.71	384.77	-20.03	408.67	-43.94
Diisopropilamina	265.93	280.61	4.29	270.22	14.68
DI-n-propilamina	290.37	294.68	-1.27	289.10	4.31
n-hexilamina	302.59	307.88	3.64	306.24	5.28
Diisopropanolamina	397.04	375.18	-2.06	394.97	-21.85
Hexametilendiamina	366.48	349.11	-6.97	359.51	-17.38
Trietilen tetramina	408.15	384.59	0.26	408.41	-23.56
Bencilamina	333.15	339.05	13.20	346.35	5.90
N-metilnilina	350.93	345.65	4.03	354.96	-5.28
N-metilciclohexilamina	302.04	318.10	17.33	319.37	16.06
N,N-dimetilnilina	335.93	344.30	17.26	353.19	8.37
o-etilnilina	370.37	353.45	-5.10	365.27	-16.92
Toluenodiamina	422.04	393.57	-0.39	421.65	-28.47
N,N-dimetilnilina	335.93	344.30	17.26	353.19	8.37
o-etilnilina	370.37	353.45	-5.10	365.27	-16.92
Di-n-butilamina	320.37	324.01	6.57	326.94	3.63
Diisobutilamina	294.26	312.35	17.73	311.99	18.09
n-octilamina	333.15	336.20	9.49	342.64	3.05
Tetraetilenpentamina	435.93	417.12	22.81	458.73	-18.81
Tri-n-butilamina	359.26	356.00	9.41	368.68	-3.26
N,N-difenil-p-fenilenodiamina	505.37	451.16	15.31	520.68	-54.21
Diciclohexilamina	377.04	378.98	23.31	400.35	1.94
Promedio absoluto del error %			3.27		4.99

Tabla 4.8: Comparación de punto *flash* de la familia de ácidos con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Ácido acético	312.59	295.85	-16.74	340.60	28.00
Ácido acrílico	324.26	313.51	-10.75	346.98	22.72
Ácido benzoico	394.26	395.92	1.66	389.87	-4.39
Ácido metacrílico	350.37	329.91	-20.46	353.89	3.52
Ácido paracético	313.71	286.18	-27.52	337.58	23.88
Ácido dicloroacético	383.15	353.54	-29.61	365.39	-17.76
Ácido pirúvico	357.04	331.59	-25.45	354.65	-2.39
Ácido propiónico	328.15	313.56	-14.59	347.00	18.85
Ácido 3-mercaptopropiónico	365.93	379.16	13.23	379.67	13.74
Ácido trans-crotónico	367.59	346.73	-20.87	361.90	-5.70
Ácido tartárico	483.15	499.49	16.34	461.25	-21.90

Continuación.

Ácido isobutírico	349.82	323.80	-26.02	351.21	1.39
n-ácido butírico	344.82	330.28	-14.53	354.06	9.24
Ácido valérico	369.26	347.11	-22.15	362.09	-7.17
Ácido adípico	435.93	462.40	26.48	434.72	-1.21
Ácido 2-etil butírico	359.82	353.39	-6.43	365.31	5.49
Ácido n-hexanoico	374.82	362.39	-12.42	370.13	-4.69
Promedio absoluto del error %			4.97		3.11

Tabla 4.9: Comparación de punto *flash* de la familia de éteres con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Éter butílico	306.48	314.35	7.87	308.81	2.33
Éter dietílico	228.15	232.79	4.64	281.18	53.03
1,4-Dioxano	285.37	283.24	-2.13	294.82	9.44
Butirato etílico	297.04	297.54	0.50	300.72	3.68
Éter etílico	228.15	232.79	4.64	281.18	53.03
Éter alílico	266.48	278.62	12.13	293.10	26.62
Éter isopropílico	245.37	258.86	13.48	286.87	41.49
N-propil éter	294.26	274.83	-19.43	291.77	-2.49
Vinil butil éter	263.71	278.20	14.49	292.95	29.25
Metil vinil éter	217.04	210.88	-6.16	278.33	61.30
Metil etil éter	235.93	212.28	-23.65	278.47	42.54
Divinil éter	225.93	228.14	2.21	280.44	54.52
Etil vinil éter	227.59	233.62	6.03	281.32	53.73
Metil tert-butil éter	245.37	248.50	3.12	284.28	38.91
Etilenglicol éter monopropil	322.04	321.26	-0.78	312.49	-9.55
Butil vinil éter	272.04	277.72	5.69	292.78	20.75
n-butil etil éter	277.04	276.50	-0.54	292.35	15.31
Diisopropil éter	245.37	258.41	13.04	286.75	41.37
Dietilenglicol dimetil éter	335.93	327.63	-8.30	316.05	-19.88
Diisopropil éter	245.37	258.41	13.04	286.75	41.37
Dietilenglicol dimetil éter	335.93	327.63	-8.30	316.05	-19.88
DI-n-propil éter	294.26	274.56	-19.70	291.68	-2.58
Dietilenglicol etil éter acetato	379.82	371.25	-8.57	344.42	-35.39
Di-n-butil éter	298.15	312.89	14.74	308.06	9.91
Di-sec-butil éter	288.15	298.33	10.18	301.07	12.92
Dietilenglicol dietil éter	355.37	349.76	-5.62	329.63	-25.74
Trietilenglicol dimetil éter	383.15	370.19	-12.96	343.66	-39.49
DI-n-pentil éter	330.37	348.05	17.68	328.53	-1.85
Tetraetilenglicol dimetiléter	414.26	415.45	1.18	378.57	-35.69
Dietilenglicol di-n-butiléter	390.93	400.46	9.53	366.53	-24.39
Difenil éter	388.15	402.21	14.06	367.92	-20.23
DI-n-hexil éter	350.37	377.53	27.16	349.00	-1.37
Dibencil éter	408.15	424.91	16.76	386.35	-21.80
Promedio absoluto del error %			3.35		8.68

Tabla 4.10: Comparación de punto *flash* de la familia de esteres con el modelo (3.3) y la correlación(2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Acetato de butilo	295.37	302.53	7.16	315.15	19.78
Acrilato de butilo	312.59	319.39	6.80	326.33	13.73
Dietil carbonato	298.15	302.08	3.93	314.86	16.71
Acetato de etilo	268.71	265.16	-3.54	293.04	24.34
Benzoato de etilo	360.93	367.33	6.40	360.16	-0.77
Cloroformiato de etilo	289.26	278.62	-10.65	300.49	11.23
Formiato de etilo	253.15	247.92	-5.23	284.52	31.37
Acetato isopropílico	274.26	274.83	0.57	298.33	24.07
Acetato de metilo	263.15	252.13	-11.02	286.49	23.34
Formato de metilo	248.71	230.69	-18.02	277.31	28.61
Acetato de propilo	285.93	283.66	-2.27	303.45	17.52
Promedio absoluto del error %			2.47		6.49

Tabla 4.11: Comparación de punto *flash* de la familia de sulfuros con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Disulfuro de carbono	243.15	241.62	-1.53	260.48	17.33
Dimetil sulfato	355.93	349.60	-6.32	338.35	-17.57
Dimetil sulfuro	239.26	234.97	-4.29	257.39	18.13
Dimetil disulfuro	279.82	289.78	9.96	289.86	10.05
Promedio absoluto del error %			1.94		5.59

Tabla 4.12: Comparación de punto *flash* de la familia de cetonas con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Acetona	253.15	250.44	-2.71	290.93	37.78
Metil amil cetona	312.04	321.85	9.81	328.24	16.20
Metil etil cetona	264.26	268.61	4.34	299.77	35.51
Metil isobutil cetona	290.93	296.49	5.57	314.40	23.47
Metil vinil cetona	266.48	269.87	3.39	300.41	33.93
Metil isopropenil cetona	294.26	282.30	-11.96	306.83	12.57
Acetilacetona	307.04	314.55	7.51	324.23	17.19
Dietil cetona	285.93	285.33	-0.60	308.43	22.50
Diisopropil cetona	288.15	302.38	14.23	317.58	29.43
Diisobutil cetona	322.04	335.74	13.70	335.86	13.82
Promedio absoluto del error %			2.50		7.86

Tabla 4.13: Comparación de punto *flash* de la familia de halógenos con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Bromuro de alilo	270.93	264.39	-6.54	293.29	22.36
Cloruro alílico	244.26	244.34	0.08	283.92	39.66

Continuación.

Cloruro de bencilo	345.37	361.24	15.87	353.04	7.67
Bromobenceno	324.26	329.67	5.41	332.01	7.75
O-bromo tolueno	352.04	349.29	-2.74	345.02	-7.02
Bromuro de butilo	291.48	287.85	-3.63	306.03	14.55
Cloruro de butilo	263.71	268.65	4.95	295.48	31.77
Clorobenceno	302.04	311.32	9.29	320.23	18.19
Cloroestireno	347.04	354.84	7.80	348.74	1.70
Diclorobenceno	339.26	348.44	9.18	344.45	5.19
Dicloruro de etileno	286.48	273.35	-13.13	297.96	11.47
Cloruro de etilo	223.15	219.17	-3.98	274.55	51.40
Fluorobenceno	258.15	275.06	16.91	298.87	40.72
Monoclorobenceno	302.04	311.33	9.29	320.23	18.19
Bromuro propargílico	283.15	278.05	-5.10	300.50	17.35
Promedio absoluto del error %			2.56		6.60

Tabla 4.14: Comparación de punto *flash* de la familia de aldehídos con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Acetaldehído	235.37	222.28	-13.10	280.65	45.27
Acroleína	247.04	246.66	-0.38	290.00	42.96
Benzaldehído	337.59	342.10	4.50	337.61	0.01
Propanol	243.15	243.72	0.57	288.78	45.63
Tricloroacetaldehído	305.93	280.66	-25.27	305.68	-0.25
n-propionaldehído	243.15	243.05	-0.10	288.50	45.35
trans-crotonaldehído	285.93	285.50	-0.42	308.09	22.16
n-butiraldehído	266.48	263.33	-3.15	297.38	30.90
Isobutiraldehído	265.93	255.23	-10.70	293.71	27.78
Valeraldehído	285.37	284.67	-0.70	307.67	22.30
Salicilaldehído	350.93	355.43	4.50	344.62	-6.31
p-dimetilaminobenzaldehído	420.37	445.00	24.63	388.39	-31.99
Promedio absoluto del error %			2.36		8.91

Tabla 4.15: Comparación de punto *flash* de la familia compuestos con nitrógeno con el modelo (3.3) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec(3.3)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Acetonitrilo	278.71	268.52	-10.18	277.49	-1.22
Nitrato amílico	320.93	321.75	0.83	326.52	5.59
Nitrato de butilo	309.26	309.73	0.47	315.70	6.44
1-Cloro 1-Nitroetano	329.26	337.90	8.64	340.65	11.39
Cianamida	414.26	403.49	-10.77	392.13	-22.13
1,2-Dinitrobenceno	423.15	448.06	24.91	421.27	-1.88
Nitrato etílico	283.15	273.15	-10.00	281.81	-1.34
Nitrobenceno	360.93	366.07	5.14	364.00	3.07
Nitroetano	300.93	292.91	-8.02	300.23	-0.69
Nitrometano	308.15	282.82	-25.33	290.84	-17.31
P-nitrotolueno	379.26	386.67	7.41	379.90	0.64
2-picolina	312.04	303.42	-8.62	309.94	-2.10
Nitrilo propiónico	275.37	280.30	4.93	288.48	13.11

Continuación.

N-propil nitrato	293.15	289.97	-3.18	297.50	4.35
Piridina	293.15	294.17	1.02	301.40	8.25
Malonitrilo	385.37	371.97	-13.41	368.66	-16.72
Hidracrilonitrilo	402.59	373.97	-28.62	370.22	-32.37
Lactonitrilo	350.37	345.86	-4.51	347.43	-2.94
Succionitrilo	405.37	408.79	3.41	395.84	-9.54
Metacrilonitrilo	285.93	275.06	-10.87	283.59	-2.34
Vinilacetónitrilo	295.93	296.42	0.49	303.48	7.56
N-butironitrilo	299.26	295.72	-3.54	302.84	3.58
Isobutironitrilo	281.48	285.13	3.65	293.00	11.51
3-metoxipropionitrilo	338.15	332.24	-5.91	335.75	-2.40
Promedio absoluto del error %			2.49		2.35

 Tabla 4.16: Comparación de punto *flash* por grupos con el modelo (3.4) y la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Grupo	Compuesto	Tf exp (K)	Tf(K) Ec. (3.4)	Desviación(K)	Tf(K)(Satyanarayana y Rao, 1992)	Desviación(K)
Alcoholes	Alcohol bencílico	366.48	367.86	1.38	368.76	2.28
	1-butanol	302.04	302.94	0.90	317.57	15.53
	Ciclohexanol	340.93	330.48	-10.45	343.35	2.42
	2,2-Dimetil-1-Propanol	309.82	295.60	-14.22	315.60	5.79
	Isopropanol	284.82	279.14	-5.68	297.43	12.62
	Alcohol etílico	285.93	279.50	-6.43	294.89	8.96
	Fenol	352.59	350.80	-1.79	354.83	2.23
	Alcohol propílico	296.48	291.58	-4.90	305.81	9.33
Promedio absoluto del error%				1.84		2.38
Aminas	Anilina	343.15	347.09	3.94	339.02	-4.13
	N-butilamina	260.93	241.38	-19.55	261.54	0.61
	Dietilamina	245.37	244.32	-1.05	265.65	20.27
	Isopropilamina	247.04	234.01	-13.03	255.30	8.26
	Monoetanolamina	358.15	354.44	-3.71	330.90	-27.25
	Propilamina	235.93	245.92	9.99	262.35	26.42
	Trietanolamina	452.04	481.80	29.76	421.78	-30.26
	Trietilamina	264.26	260.20	-4.06	283.68	19.41
Promedio absoluto del error %				3.47		5.58
Ácidos	Ácido acético	312.59	310.61	-1.98	340.60	28.00
Éteres	Éter dietílico	228.15	230.57	2.42	281.18	53.03
	1,4-Dioxano	285.37	288.75	3.38	294.82	9.44
	Butirato etílico	297.04	295.16	-1.88	300.72	3.68
	Éter etílico	228.15	229.86	1.71	281.18	53.03
Promedio absoluto del error %				0.91		10.54

Continuación.

Sulfuros	Disulfuro de carbono	243.15	252.29	9.14	260.48	17.33
Ésteres	Acetato de butilo	295.37	299.79	4.42	315.15	19.78
	Acrilato de butilo	312.59	317.24	4.65	326.33	13.73
	Dietil carbonato	298.15	306.11	7.96	314.86	16.71
	Acetato de etilo	268.71	272.42	3.71	293.04	24.34
	Benzoato de etilo	360.93	359.19	-1.74	360.16	-0.77
	Formiato de etilo	253.15	255.99	2.84	284.52	31.37
	Acetato isopropílico	274.26	274.86	0.60	298.33	24.07
	Acetato de metilo	263.15	260.80	-2.35	286.49	23.34
	Formato de metilo	248.71	242.31	-6.40	277.31	28.61
	Acetato de propilo	285.93	285.10	-0.83	303.45	17.52
Promedio absoluto del error %				1.26		6.76
Cetonas	Acetona	253.15	255.91	2.76	290.93	37.78
	Metil amil cetona	312.04	313.65	1.61	328.24	16.20
	Metil etil cetona	264.26	270.39	6.13	299.77	35.51
	Metil isobutil cetona	290.93	287.64	-3.29	314.40	23.47
Promedio absoluto del error %				1.26		9.31
Halógenos	O-bromo tolueno	352.04	344.43	-7.61	345.02	-7.02
	Cloruro de etilo	223.15	223.09	-0.06	274.55	51.40
Promedio absoluto del error %				1.09		10.38
Aldehídos	Acetaldehído	235.37	231.02	-4.35	280.65	45.27
	Acroleína	247.04	253.88	6.84	290.00	42.96
	Benzaldehído	337.59	340.29	2.70	337.61	0.01
Promedio absoluto del error %				1.81		10.32
Compuestos con nitrógeno	Acetonitrilo	278.71	279.76	1.05	277.49	-1.22
	Nitrobenceno	360.93	369.54	8.61	364.00	3.07
	Nitrometano	308.15	300.16	-7.99	290.84	-17.31
	Piridina	293.15	309.32	16.17	301.40	8.25
Promedio absoluto del error %				2.72		2.49

Las Tablas 4.6 a la 4.15 muestran que en 7 de 10 grupos los resultados del modelo propuesto (3.3) presentan predicciones más cercanas a los valores experimentales que la correlación (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992). La Tabla 4.16 muestra que en 9 de 10 grupos los resultados del modelo propuesto (3.4) son mejores predicciones comparadas con la correlación (2.6), con respecto a los valores experimentales. El siguiente capítulo describe las conclusiones de éste trabajo de investigación.

Capítulo 5

Conclusiones

En este trabajo se han analizado los modelos que se utilizan en la predicción de punto *flash* para alcanos y componentes puros. Posteriormente, se propusieron nuevas correlaciones basadas en propiedades termodinámicas así como en el método de contribución de grupos. Al realizar este trabajo se llegó a las conclusiones que se describen enseguida.

Investigando lo referente a la determinación del punto *flash* se encontró información que reporta que los métodos experimentales, pruebas de vaso abierto y vaso cerrado descritos de manera sintetizada en este trabajo, determinan valores diferentes aún siendo ambos métodos experimentales. La prueba de vaso abierto determina la temperatura de punto *flash* unos grados más arriba que la prueba de vaso cerrado (Mannan *et al.*, 2005). Cabe señalar que también el valor del punto *flash* difiere dependiendo del aparato que se utilice para el experimento. Esto se debe a que cada aparato tiene diferentes condiciones de operación como lo son el tamaño de la muestra y el volumen del vaso donde se coloca la muestra (Lance *et al.*, 1979). La información experimental ha sido usada en la construcción de modelos empíricos cuyo alto error de predicción se ha justificado con el alto error experimental.

En este trabajo se realizó un ajuste de datos experimentales primeramente para alcanos y posteriormente para cualquier otro tipo de compuesto para el cual se tuviera información experimental. Se propuso la inclusión de dos propiedades, el calor de reacción y el calor de evaporación normales, que no han sido usadas. La adición de estas propiedades termodinámicas resultó favorable para la predicción ya que al agregarlas se incluye un efecto químico a los modelos existentes. Los resultados indican una mejor predicción de la temperatura del punto *flash* que la obtenida con los modelos existentes donde solo depende

en particular de la temperatura de ebullición del compuesto. Usando las ecuaciones (3.3) y (3.4) para la predicción de punto *flash* en alcanos produjo un promedio absoluto de la desviación de 4.25 K y 4.19 K, respectivamente. Estas predicciones son más cercanos a los valores experimentales que el modelo (2.6) (Satyanarayana y Rao, 1992).

Además, se incluyó un modelo basado en contribución de grupos combinado con la inclusión de las propiedades termodinámicas anteriores para evitar el problema clásico de isomería. La evidencia numérica indica una mejoría adicional a lo obtenido con los modelos propuestos. Los resultados de los modelos propuestos (3.5) y (3.6) aplicados para la predicción de punto *flash* en alcanos son aún más cercanos a los valores experimentales con un promedio absoluto de la desviación de 4.01 K y 4.33 K, respectivamente. Los resultados de los modelos (3.5) y (3.6) también superan a los obtenidos con el modelo (2.11) que corresponde a un trabajo aceptado para su publicación (Mathieu, 2010). Cabe señalar que el modelo (2.11) no permite diferenciar el valor calculado entre isómeros con los mismos grupos funcionales, estimando así el mismo valor para los que contienen el mismo número de grupos funcionales. Los modelos propuestos en este trabajo afortunadamente si predicen valores diferentes para cada componente aunque este tenga el mismo número de grupos funcionales siendo esto una gran ventaja con respecto a los demás modelos existentes. De igual forma se comparan los modelos propuestos (3.5) y (3.6) con trabajos reportados que utilizan el método de contribución de grupos y redes neuronales, los cuales tienen un promedio de desviación de 6.1 K (Yong *et al.*, 2007b) y 6.9 K (Yong *et al.*, 2007a), observando que la desviación es también mayor a los resultados que se presenta en este trabajo.

Finalmente, extendiendo los modelos para la predicción de punto *flash* a otros componentes puros diferentes de los alcanos se obtuvo la misma experiencia: los resultados con las ecuaciones (3.3) y (3.4) son mejores que con la correlación (2.6). Esta comparación ratifica que los modelos propuestos (3.3) y (3.4) predicen mejor la temperatura de punto *flash* resultando el promedio absoluto del error en la mayoría de los grupos menor que el estimado por dicha correlación (2.6). Así, los modelos propuestos en este trabajo de investigación superan a los métodos existentes. Finalmente, la falta de datos experimentales

para el uso de las ecuaciones propuestas puede suplirse con estimados a través de ecuaciones de estado como la ecuación de Peng-Robinson que fuera usada en este trabajo en la forma implementada en simulador AspenPlus.

Trabajo futuro

La investigación que se desarrolló en este trabajo tiene opción de crecimiento. Una opción de mejora es el rediseño de los modelos propuestos para analizar datos de punto *flash* para el caso de mezclas. Esto es de gran relevancia debido a que aportará datos de punto *flash* para mezclas que se utilicen en los procesos industriales, donde manejen sustancias químicas previniendo posibles incendios y/o explosiones. El desarrollo de nuevos modelos para la predicción de punto *flash* a mezclas propondría analizar nuevamente las condiciones del fenómeno de la combustión que es donde se presenta la temperatura de punto *flash*, considerando nuevas propiedades físicas y químicas involucradas en la determinación de la temperatura de punto *flash*. Desafortunadamente se requieren más datos experimentales para validar cualquier propuesta que se realice.

Referencias

- Abildskov, J., L. Constantinou y R. Gani (1996). "Towards the development of a second-order approximation in activity coefficient models based on group contributions." Fluid Phase Equilibria, **118**: 1-12.
- AIChE (1994). Down's Fire & Explosion Index Hazard Classification Guide. New York, American Institute of Chemical Engineers.
- Barrufet, M. A. (2010). "Pure Components " Retrieved 2/15/2010, from http://www.pe.tamu.edu/barrufet/public_html/PETE310/.
- Ceriani, R., R. Gani y A. J. A. Meirelles (2009a). "Prediction of heat capacities and heats of vaporization of organic liquids by group contribution methods " Fluid Phase Equilibria **283**(1-2,15): 49-55.
- Ceriani, R., R. Gani y A. J. A. Merirelles (2009b). "Prediction of heat capacities and heats of vaporization of organic liquids by group contribution methods." Fluid Phase Equilibria, **283**: 49-55.
- Constantinou, L., R. Gani y J. P. O'Connell (1995). "Estimation of the acentric factor and the liquid molar volume at 298 K using a new group contribution method." Fluid Phase Equilibria, **103**(1): 11-22.
- Crowl, D. A. y J. F. Louvar (2002a). Chemical Process Safety. New Jersey, Prentice Hall International series.
- Crowl, D. A. y J. F. Louvar (2002b). Chemical process safety, fundamentals with applications. New Jersey, Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences.
- d'Anterrosches, L. y R. Gani (2005a). "Group contribution based process flowsheet synthesis, design and modelling." Fluid Phase Equilibria, **228-229**: 141-146.
- d'Anterrosches, L. y R. Gani (2005b). "Novel group contribution based approach in process flowsheet synthesis, design and modelling." Computer Aided Chemical Engineering, **20**: 643-648.
- Gálvez, E. D., L. A. Cisternas, G. Herrera y R. Gani (2009). "A Group Contribution Method for Mineral Flotation Circuit Design." Computer Aided Chemical Engineering, **27**: 1065-1070.
- Gharagheizi, F. (2009). "A QSPR Model for Estimation of Lower Flammability Limit Temperature of Pure Compounds Based on Molecular Structure." Journal of Hazardous Materials, **169**: 217-220.
- Gharagheizi, F., R. F. Almadari y M. T. Angaji (2008). "A New Neural Network-Group Contribution Method for Estimation of Flash Point Temperature of Pure Components." Energy & Fuels, **22**: 1628-1635.
- Gharagheizi, F. y R. F. Alamdari (2008). "Prediction of Flash Point Temperature of Pure Components Using a Quantitative Structure – Property Relationship Model." QSAR Comb. Sci., **27**: 679-683.
- Guo, Y., F. Yang, D. L. Yan Xing, W. Fang y R. Lin (2009). "Study on Volatility and Flash Point of the Pseudo Binary Mixtures of Sunflower-Based Biodiesel + Methylcyclohexane." Fluid Phase Equilibria, **276**: 127-132.
- Harper, P. M., R. Gani, P. Kolar y T. Ishikawa (1999). "Computer-aided molecular design with combined molecular modeling and group contribution." Fluid Phase Equilibria, **158-160**: 337-347.
- Jones, J. C. y J. Godefroy (2002). "A Reappraisal of the Flash Point of Formic Acid." Journal Loss Prevention in the Process Industries, **15**: 245-247.

- Kashiki, K. H. a. K. (1991). "A Method for measuring upper flash point." Journal Loss Prevention in the Process Industries, **4**: 176-184.
- Katritzky, A. R., I. B. Stoyanova-Slavova, D. A. Dobchev y M. Karelson (2007). "QSPR Modeling of Flash Points: An Update." Journal of Molecular Graphics and Modeling, **26**: 529-536.
- Katritzky, A. R., R. Petrukhin, R. Jain y M. Karelson (2001). "QSPR Analysis of Flash Points." J. Chem. Inf. Comput.Sci., **41**: 1521-1530.
- Kim, S. Y. y B. Lee (2009). "A Prediction Model for the Flash Point of Binary Liquid Mixtures " Journal Loss Prevention in the Process Industries, **22**: 1-4.
- Kletz, T. A. (1975). "Some Fires and Explosions in Liquids of High Flash Point." Journal of Hazardous Materials, **1**: 165-170.
- Kong, D., D. J. a. Ende, S. J. Brenek y N. P. Weston (2003). "Determination of Flash Point in Air and Pure Oxygen Using an Equilibrium Closed Bomb Apparatus." Journal of Hazardous Materials, **102**: 155-165.
- Kwon, K., D. Lee, Y. Iwata y H. Koseki (2008). "Flash Points of n-decanol." Journal Loss Prevention in the Process Industries, **21**: 478-480.
- Lance, R. C., A. J. Barnard, Jr. y J. E. Hooyman (1979). "Measurement of Flash Point: Apparatus, Metodology, Applications." Journal of Hazardous Materials, **3**: 107-119.
- Lees, F. P. (1996). Loss Prevention in the Process Industries. Oxford, UK., Butterworth-Heinemann.
- Li, D., W. Fang, Y. Xing, Y. Guo y R. Lin (2009). "Effects of Dimethyl or Diethyl Carbonate as an Additive on Volatility and Flash Point of an Aviation Fuel." Journal of Hazardous Materials, **161**: 1193-1201.
- Liaw, H.-J., C.-T. Chen, C.-C. Cheng y Y.-T. Yang (2008a). "Elimination of Minimum Flash-Point Behavior by Addition of a Specified Third Component." Journal Loss Prevention in the Process Industries, **21**: 82-100.
- Liaw, H.-J., C.-T. Chen y V. Gerbaud (2008b). "Flash-Point Prediction for Binary Partially Miscible Aqueous-Organic Mixtures." Chemical Engineering Science, **63**: 4543-4554.
- Liaw, H.-J. y Y.-Y. Chiu (2003). "The Prediction of the Flash Point for Binary Aqueous-Organic Solutions." Journal of Hazardous Materials, **101**: 83-106.
- Liaw, H.-J. y Y.-Y. Chiu (2006). "A General Model for Predicting the Flash Point of Miscible Mixtures." Journal of Hazardous Materials, **137**: 38-46.
- Liaw, H.-J., Y.-H. Lee, C.-L. Tang, H.-H. Hsu y J.-H. Liu (2002). "A Mathematical Model for Predicting the Flash Point of Binary Solutions." Journal Loss Prevention in the Process Industries, **15**: 429-438.
- Liaw, H.-J. y S.-C. Lin (2007). "Binary Mixtures Exhibiting Maximum Flash-Point Behavior." Journal of Hazardous Materials, **140**: 155-164.
- Liaw, H.-J., W.-H. Lu, V. Gerbaud y C.-C. Chen (2008c). "Flash-Point Prediction for Binary Partially Miscible Mixtures of Flammable Solvents." Journal of Hazardous Materials, **153**: 1165-1175.
- Liaw, H.-J. y T.-A. Wang (2007). "A non-ideal Model for Predicting the Effect of Dissolved Salt on the Flash Point of Solvent Mixtures." Journal of Hazardous Materials, **141**: 193-201.
- Liaw, H. J., T.-P. Lee, J.-S. Tsai, W.-H. Hsiao, M.-H. Chen y T.-T. Hsu (2003). "Binary Liquid Solutions Exhibiting Minimum Flash-Point Behavior." Journal Loss Prevention in the Process Industries, **16**: 173-186.
- Maloney, J. O. (2008). Perry's Chemical Engineers' Handbook, McGraw-Hill.
- Mannan, S., PE y CSP (2005). Lee's Loss Prevention in the Process Industries.
- Marrero, J. y R. Gani (2001). "Group-contribution based estimation of pure component properties." Fluid Phase Equilibria, **183-184**: 183-208.
- Mathieu, D. (2010). "Inductive modeling of physico-chemical properties: Flash point of alkanes." Journal Hazardous Materials, doi:10.1016/j.jhazmat.2010.03.081.

- Noorollahy, M., A. Z. Moghadam y A. A. Ghasrodashti (2010). "Calculation of Mixture Equilibrium Binary Interaction Parameters Using Closed Cup Flash Point Measurements." Chemical Engineering Research and Design, **88**: 81-86.
- Reid, R. C., J. M. Prausnitz y B. E. Poling (1987). The Properties of Gases and Liquids.
- Satyanarayana, K. y P. G. Rao (1992). "Improved Equation to Estimate Flash Points of Organic Compounds." Journal of Hazardous Materials, **32**: 81-85.
- Satyanarayana, K. C., J. Abildskov y R. Gani (2009). "Computer-aided polymer design using group contribution plus property models." Computer & Chemical Engineering **33**(5,21): 1004-1013.
- Shebeko, Y. N., A. Y. Korol'chenko, A. V. Ivanov y E. N. Alekhina (1984). "Calculation of flash point and ignition temperatures of organic compounds." Sovietic Chemical Industry, **16**: 1371.
- Vidal, M., W. J. Rogers, J. C. Holste y M. S. Mannan (2004). "A Review of Estimation Methods for Flash Points and Flammability Limits." Process Safety Progress, **23**: 47-55.
- Vidal, M., W. J. Rogers y M. S. Mannan (2006). "Prediction of Minimum Flash Point Behaviour for Binary Mixture." Process Safety and Environmental Protection, **84**: 1-9.
- Wray, H. A. (1992). Manual on Flash Point Standards and Their Use. Pennsylvania, ASTM.
- Xing, Y., D. Shao, W. Fang, Y. Guo y R. Lin (2009). "Vapor Pressures and Flash Point for Binary Mixtures of Tricyclodecane and Dimethyl Carbonate." Fluid Phase Equilibria, **284**: 14-18.
- Yong, P., J. Juncheng y W. Zhirong (2007a). "Prediction of the Flash Points of Alkanes by Group Bond Contribution Method Using Artificial Neural Network." Front. Chem. Eng. China, **1**: 390-394.
- Yong, P., J. Juncheng y W. Zhirong (2007b). "Quantitative Structure -Property Relationship Studies for Predicting Flash Points of Alkanes Using Group Bond Contribution Method with Back-Propagation Neural Network." Journal of Hazardous Materials, **147**: 424-430.