

Correlación de Datos de Equilibrio Vapor-Líquido a Presión Constante Usando la Serie de Polinomios de Laguerre

Correlation of Constant Pressure Vapor-Liquid Equilibrium Data Using Laguerre's Polynomial Series

Tyrone Alcivar, Reyna^{1*}; Monteros, Gabriel ¹; Ramírez, Rubén ²

¹Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, Escuela Superior Politécnica del Litoral, ESPOL, Guayaquil, Ecuador.

²Laboratorio de Petróleo y Catálisis Aplicada, Escuela Ingeniería Química, Universidad de Los Andes, Mérida, Venezuela

*talcivar@espol.edu.ec

Resumen

La presente investigación consiste en correlacionar los datos de equilibrio vapor-líquido (EVL) de sistemas binarios usando la serie de polinomios de Laguerre. El procedimiento consistió en recolectar datos experimentales T-xy a presión constante de la bibliografía para luego, obtener los coeficientes de la serie de polinomios de Laguerre que ajusta la curva T-x. A partir de esta, se halla el punto azeotrópico de la mezcla binaria si la presenta. Seguidamente se ajusta un modelo de energía de Gibbs en exceso usando la serie de polinomios de Laguerre para calcular los coeficientes de actividad, la consistencia termodinámica. La herramienta computacional utilizada es Solver de Excel. Los resultados indican que la serie de polinomios de Laguerre ajusta satisfactoriamente los datos de Equilibrio Vapor- Líquido de sistemas binarios.

Palabras Claves: EVL Equilibrio Vapor-Líquido, Series de Polinomios de Laguerre, Azeótropo.

Abstract

The present investigation consists of correlating the vapor-liquid equilibrium (VLE) data of binary systems using the Laguerre polynomial series. The procedure consisted of collecting experimental T-xy data at constant pressure from the literature and then obtaining the coefficients of the Laguerre polynomial series that fit the T-x curve. From this, the azeotropic point of the binary mixture is found if it is present. Next, an excess Gibbs energy model is fitted using the Laguerre polynomial series to calculate the activity coefficients, the thermodynamic consistency. The computational tool used is Excel's Solver. The results indicate that Laguerre's polynomial series successfully adjusts the Vapor-Liquid Equilibrium data of binary systems.

Key words: EVL Vapor-Liquid Equilibrium, Laguerre Polynomial Series, Azeotropic

Introducción

El equilibrio vapor-líquido (EVL) es de suma importancia en aplicaciones tales como destilación, modelado ambiental y proceso general de diseño de ingeniería química. La comprensión de las interacciones de los componentes en una mezcla es muy importante en el diseño, operación y análisis de tales separadores. El coeficiente de actividad es una excelente herramienta para relacionarse con las interacciones moleculares a la composición de la mezcla. Los valores de γ_i pueden ser igual a 1 se dice, que la solución es ideal, si $\gamma_i < 1$ o $\gamma_i > 1$ se dice que la solución es no ideal y representa desviaciones negativas y desviaciones positivas (Fredenslund y col., 1975).

La destilación se basa en la diferencia de volatilidades entre los distintos componentes de la mezcla (Judson 1980). Así, durante un proceso de destilación convencional la mezcla se divide en dos fases que están en equilibrio vapor-líquido (EVL), con composiciones claramente diferenciadas: una de las fases se encuentra en estado vapor y es rica en los compuestos más volátiles, mientras que la otra fase es líquida, donde predominan los compuestos con temperaturas de ebullición más elevadas. La separación final se alcanza gracias a la diferencia de composiciones entre ambas fases, resultantes de vaporización parcial de una mezcla líquida o la condensación parcial de una mezcla en estado vapor. Resulta evidente que la separación viene marcada por el EVL de la mezcla.

Por medio de la representación del diagrama de equilibrio (EVL) se consigue dos casos en los que es imposible separar completamente mezclas binarias mediante un proceso de destilación convencional (Mc Cabe y col., 2005). El primero de ellos es cuando los dos componentes poseen valores de la temperatura de ebullición muy próximos entre sí. En este caso, el alto número de etapas teóricas y el caudal de reflujo requeridos para llevar a cabo la separación son tan elevados que hacen económicamente inviable el proceso.

El otro tipo de mezclas cuya separación por destilación convencional no es posible es aquel donde sus componentes forman azeótropo. El término azeótropo (Benedict y col., 1945) se refiere a aquellas mezclas cuya composición no varía a pesar de estar en ebullición. Sin embargo, las composiciones sí se modifican cuando la presión cambia. Actualmente, se sabe que las mezclas azeotrópicas alcanzan un punto a una determinada temperatura (cuyo valor será el mínimo o máximo del intervalo de temperaturas de equilibrio de la mezcla) donde las composiciones de las fases en equilibrio son idénticas. Cuando se produce esta situación, la fase vapor no se ve enriquecida por el componente más volátil, lo que limita la separación de los componentes de la mezcla, a diferencia de lo que sí ocurre en la destilación convencional.

Existen una variedad de modelos que se han utilizado para ajustar los datos de equilibrio vapor-líquido (EVL). Entre ellos tenemos los modelos termodinámicos de composición local: Wilson (Wilson, 1964), NRTL (Renon y Prausnitz,

1968) y UNIQUAC (Abrams y Prausnitz, 1975). En lo que respecta a la determinación de datos EVL, es posible encontrar una cantidad considerable de métodos y equipos de medida en la bibliografía (Hala E, Pick J, Fried V, Villim O, 1967, Williamson 1975, Abbott 1978, Marsh 1978, Malanowski 1982, Olson 1989, Baba-Ahmed A, Guilbot P, Richon D, 1999, Valtz A, Coquelet C, Baba-Ahmed A, Richon D, 2002, Freitag J, Kosuge H, Schmelzer J, Kato S, 2015).

En la presente investigación se ajusta datos de equilibrio Txy usando las series de polinomios Laguerre. A partir de esta correlación, se obtiene la energía de exceso de Gibbs, los coeficientes de actividad de las mezclas estudiadas y sus respectivas representaciones. Los parámetros de la serie se obtienen minimizando una función objetivo (FO) y la herramienta computacional utilizada es el Solver de Excel.

2 Fundamentos Teóricos

2.1 Polinomios de Laguerre

Los polinomios de Laguerre (Taekyun, 2016) son una familia de polinomios ortogonales $\{L_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ en el intervalo $[0, h)$ con respecto al producto escalar definido por el peso $p(x) = e^{-x}$. A partir de la fórmula de Rodrigues, podemos definir los polinomios de Laguerre mediante la expresión

$$L_n(x) = e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) \quad (1)$$

Según la solución de la ecuación anterior, observamos que los primeros polinomios de Laguerre son de la forma siguiente:

$$L_0(x) = 1 \quad (2)$$

$$L_1(x) = -x + 1 \quad (3)$$

$$L_2(x) = x^2 - 4x + 2 \quad (4)$$

$$L_3(x) = -x^3 + 9x^2 - 18x + 6 \quad (5)$$

$$L_4(x) = x^4 - 16x^3 + 72x^2 - 96x + 24 \quad (6)$$

Que en forma general,

$$L_{n+1}(x) = (2n + 1 - x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x) \quad (7)$$

La derivada de los polinomios de Laguerre se puede obtener por la siguiente ecuación

$$L'_n(x) = nL'_{n-1}(x) - nL_{n-1}(x) \quad (8)$$

2.2 Series de los polinomios de Laguerre

Esta serie (Sánchez y col., 2003) se define de la siguiente manera

$$f(x) = \sum_{k=0}^n A_k L_k(x) \quad (9)$$

$$f(x) = A_0 L_0(x) + A_1 L_1(x) + A_2 L_2(x) + \dots + A_n L_n(x) \quad (10)$$

Para $n=3$ podemos hallar un polinomio de la forma siguiente

$$f(x) = A_0 + A_1(-x + 1) + A_2(x^2 - 4x + 2) + A_3(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6) \quad (11)$$

2.3 Datos de equilibrio vapor-líquido

En la termodinámica química, el equilibrio vapor-líquido (VLE) describe la distribución de una especie química entre la fase de vapor y una fase líquida. Existen dos conceptos importantes que se observa en los datos y su representación

como son el punto de burbuja y el punto de rocío. El punto de burbuja, se refiere a la temperatura y presión a las que en una mezcla líquida se ha formado la primera partícula de vapor, es decir, empieza a hervir. Además el punto del cambio de fase en el que existe la mayor presión. Mientras que, el punto de rocío, se conoce como punto de rocío a la temperatura y presión a la cual la mezcla de vapor empezará a condensar. Además, es el punto de menor presión durante el cambio de fase.

En una mezcla binaria de equilibrio vapor-líquido se puede determinar las composiciones molares tanto de la fase gaseosa como de la fase líquida en función de la presión o de la temperatura, cuando se grafican estos datos obtenidos experimentalmente, se obtienen diagramas de fases como los mostrados en la figura 1.

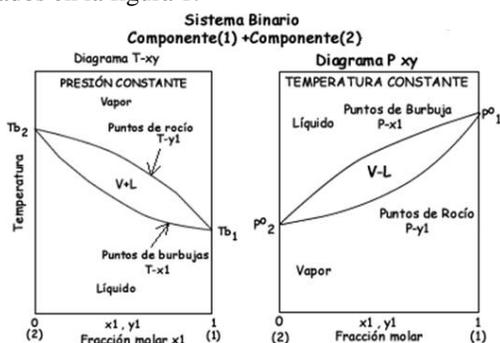


Figura 1. Diagrama de fases vapor-líquido

Generalmente, los datos EVL se modelan por ecuaciones termodinámicas clásicos que pueden funcionar razonablemente para los sistemas binarios como por ejemplo Van Laar, Margules, Wilson, UNIQUAC (Universal Quasi Chemical Theory), NRTL (Non-random Two Liquid) y UNIFAC (Universal Functional Activity Coefficient) como modelos para la predicción, requieren de una gran cantidad de parámetros, siendo su determinación, el principal problema para el correcto modelado de los datos de un sistema de mezcla binarios.

3. Procedimiento

3.1 Recopilación de datos EVL a partir de la Bibliografía

Los datos EVL se tomaron de diferentes fuentes bibliográficas en la Tabla 1 se muestran, todos esos datos son del tipo Txy donde la presión permanece constante.

Tabla 1. Referencia de los Datos EVL Txy a presión constante.

Mezcla Binaria	
Ciclopentano (1) + THF (2) a P=101,3 kPa	Yumei Li (2014)
2-Metil-1-Butanol(1) + Etilbenceno (2) a P=101,33 kPa	Xue G (2013)
Fenol (1) + Tetralin (2) a P= 26,6 kPa y 101,1 kPa	Ashraf S (1997)

3.2 Determinación de errores no sistemáticos

Para determinar la presencia de errores no sistemáticos se representó la volatilidad relativa (α_{12}) en función de las

composiciones de la fase líquida (x_1), siendo el componente más volátil de la mezcla binaria. La volatilidad se calculó a partir de los datos experimentales por la ecuación (12). Los puntos que no se encontraron sobre la curva se eliminaron con el objetivo de evitar errores en el ajuste de los datos por series de polinomios de Laguerre.

$$\alpha_{12} = \frac{y_1 x_2}{y_2 x_1} \tag{12}$$

3.3 Ajuste de los datos $T_{x_1 y_1}$ de equilibrio vapor-líquido

Los datos $T_{x_1 y_1}$ se correlacionan usando las series de polinomios de Laguerre como se muestra a continuación:

$$T = \sum_{i=1}^2 x_i T_i^0 + x_1 x_2 \sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) \tag{13}$$

Para hallar los valores de A_k que minimizan el error entre la temperatura experimental (T_{exp}) y la temperatura calculada (T_{cal}), se define la función objetivo de error o de coste para el modelo propuesto, ver ecuación 14.

$$FO = \min = (T_{exp} - T_{cal})^2 \tag{14}$$

Además se calcula por medio de las ecuaciones 15 y 16, la raíz del error cuadrático medio (rmsd) y el error relativo (AAD) de la temperatura

$$rmsd = \frac{1}{N} \left(\sum (T_{exp} - T_{cal})^2 \right)^{1/2} \tag{15}$$

$$AADT = \sum \left| \frac{T_{exp} - T_{cal}}{T_{exp}} \right| \tag{16}$$

Si los datos $T_{x_1 y_1}$ al representarlo gráficamente presenta un azeótropo. El procedimiento para hallar este punto se muestra a continuación:

1 Se obtiene la función $T(x_1)$:

$$T = x_1 T_1^0 + (1 - x_1) T_2^0 + x_1 (1 - x_1) \sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) \tag{17}$$

2 Se obtiene la primera derivada con respecto a x_1 y se iguala a cero para encontrar el punto crítico:

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = 0 \Rightarrow x_{1az} = ? \quad T_{az} = ?$$

$$\frac{\partial T}{\partial x_1} = T_1^0 - T_2^0 + (1 - 2x_1) \sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) + x_1 (1 - x_1) \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) \right] \tag{18}$$

3 Para saber si es un máximo o mínimo se obtiene la segunda derivada con respecto a x_1 y se evalúa el valor de x_1 encontrado en el paso 2.

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x_1^2} = \begin{cases} < 0, \text{máximo} & \text{Punto } (x_1^{az}, T_{az}) \\ > 0, \text{mínimo} & \text{Punto } (x_1^{az}, T_{az}) \end{cases}$$

$$\frac{\partial^2 T}{x_1^2} = -2 \sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) + 2(1-2x_1) \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) \right) + x_1(1-x_1) \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \left(\sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) \right) \quad (19)$$

3.4 Reducción de datos de equilibrio vapor-líquido

La energía de exceso de Gibbs se modela por una serie de polinomios de Laguerre y a partir de esta se obtiene los coeficientes de actividad, la presión la composición y_1 .

Energía de Exceso de Gibbs:

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 x_2 \sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) = Q \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{G^E}{RT} \right) = (1-2x_1) \sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) + x_1(1-x_1) \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\sum_{k=0}^n A_k L_k(x_1) \right) \quad (21)$$

Coefficientes de actividad:

$$\gamma_1 = \exp \left(\frac{G^E}{RT} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{G^E}{RT} \right) \right) \quad (22)$$

$$\gamma_2 = \exp \left(\frac{G^E}{RT} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{G^E}{RT} \right) \right) \quad (23)$$

Calculo de la Presión:

$$P = x_1 \exp \left(\frac{G^E}{RT} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{G^E}{RT} \right) \right) P_1^0 + x_2 \exp \left(\frac{G^E}{RT} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{G^E}{RT} \right) \right) P_2^0 \quad (24)$$

Calculo de la composición vapor y_1 :

$$y_1 = x_1 P_1^0 \exp \left(\frac{G^E}{RT} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{G^E}{RT} \right) \right) / P \quad (25)$$

Función Objetivo:

$$FO = \min = \sum_i \left(\frac{P_{exp} - P_{cal}}{P_{exp}} \right)^2 + (y_{1,exp} - y_{1,cal})^2 \quad (26)$$

Los datos EVL de los sistemas binarios estudiados se correlacionaron para $n=3$ y las funciones con respecto a la serie de polinomios de Laguerre queda de la siguiente manera:

La energía de exceso de Gibbs con tres parámetros (A_0 , A_1 y A_2):

$$Q = \frac{G^E}{RT} = x_1(1-x_1)[A_0 + A_1(-x_1 + 1) + A_2(x_1^2 - 4x_1 + 2)] \quad (27)$$

Derivamos,

$$\frac{\partial Q}{\partial x_1} = (1-2x_1)[A_0 + A_1(-x_1 + 1) + A_2(x_1^2 - 4x_1 + 2)] + x_1(1-x_1)[A_1(-1) + A_2(2x_1 - 4)] \quad (28)$$

Los coeficientes de actividad se obtienen

$$\gamma_1 = \exp \left(Q + x_2 \frac{\partial Q}{\partial x_1} \right) \quad (29)$$

$$\gamma_2 = \exp \left(Q - x_1 \frac{\partial Q}{\partial x_1} \right) \quad (30)$$

Consistencia termodinámica

La relación $\ln \gamma_1/\gamma_2$ representa la prueba de Herington para un sistema binario a presión constante, si se grafica $\ln \gamma_1/\gamma_2$ contra x_1 las áreas generadas por encima y por debajo de $y=0$ permite evaluar los parámetros D y J según Smith y col. (2001).

$$\ln \frac{\gamma_1}{\gamma_2} = \frac{\partial Q}{\partial x_1} \quad (31)$$

$$D = \frac{\int_0^1 \ln |\gamma_1/\gamma_2| dx_1}{\left| \int_0^1 \ln \gamma_1/\gamma_2 dx_1 \right|} = \frac{A_1 - |A_2|}{A_1 + |A_2|} \quad (32)$$

$$J = 150 \frac{T_{max} - T_{min}}{T_{min}} \quad (33)$$

Donde $T_{m\acute{a}x}$ y $T_{m\acute{i}n}$ son las temperaturas máximas y mínimas de ebullición de la mezcla en unidades de Kelvin (K). Si $D < J$, los datos son termodinámicamente consistentes, pero si $D > J$, pero $|D-J| < 10$, los datos son probablemente consistentes.

4 Resultados

Los cálculos EVL de los sistemas binarios se llevaron a cabo por las series de polinomios de Laguerre. Se evaluaron 6 casos de sistemas binarios.

4.1 Determinación de errores no sistemáticos

En la Figura 1 se ilustra el comportamiento de la volatilidad relativa (α_{12}) contra x_1 para los diferentes sistemas de mezcla binaria estudiada. Para el sistema binario 2-metil-1- Butanol (1) + Etilbenceno (2) se observa que existen datos que no se encuentra sobre la tendencia global.

Los puntos resaltados en rojo son los que se encuentran, como se aprecia, fuera de la tendencia global. Estos valores deben desecharse para que el modelo de series de polinomios de Laguerre no genere errores.

Por medio de esta técnica permitió reducir los datos experimentales de una manera evitar errores en el modelo termodinámico presentado por series de polinomios de Laguerre.

La volatilidad relativa obtenida es mayor de 1, el cual nos permite decir que estas mezclas se pueden separar y observar que dos mezclas estudiadas presentan un azeótropo. En este punto la volatilidad relativa cae por debajo de 1 indicando que la separación no es fácil de realizarla.

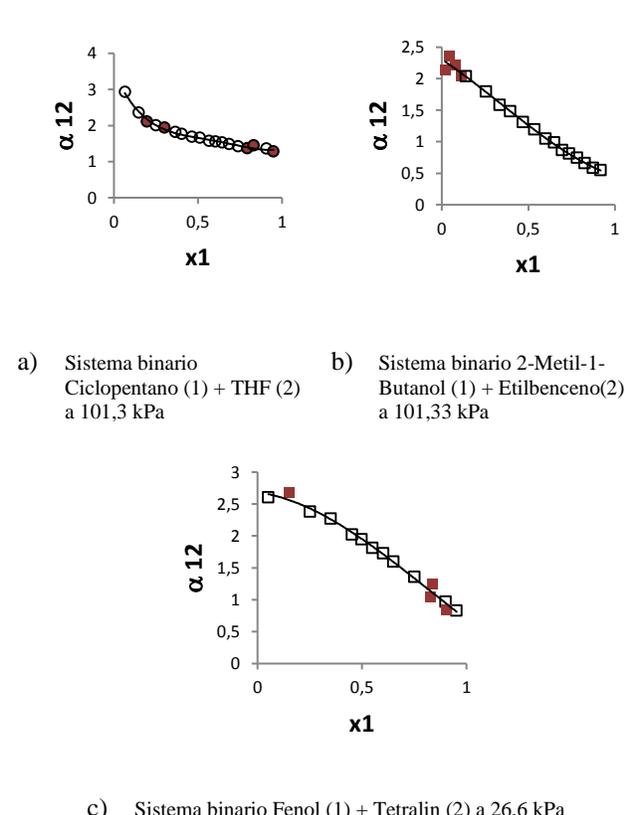


Figura 2. Gráfico de la volatilidad relativa (α_{12}) contra x_1 para las diferentes binarias estudiadas.

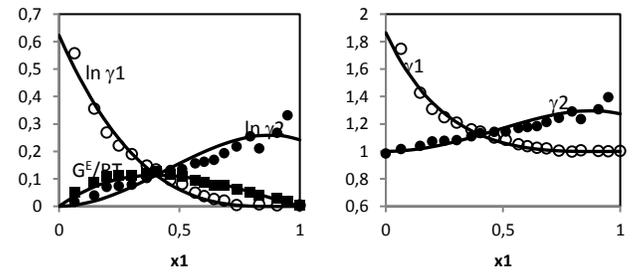
4.2 Correlación de Datos

El ajuste de los datos EVL por la serie de polinomios de Laguerre se dividió en tres casos. Para cada caso se presenta la correlación de la energía de Gibbs en exceso, coeficientes de actividad, la curva Tx_1y_1 , la curva xy y la consistencia termodinámica.

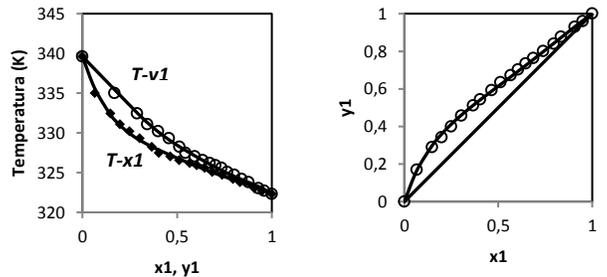
Caso de estudio 1. Sistema binario Ciclopentano + Tetrahydrofurano(THF) a 101,3 kPa

La figura 3 se representa los resultados de la correlación con la serie de polinomios de Laguerre. Este sistema se observa que no presenta un punto de azeótropo.

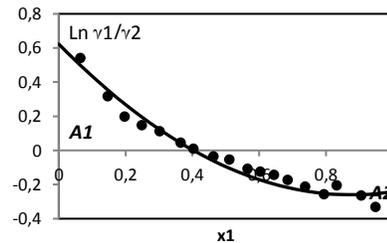
Los valores de desviación obtenidos rmsd de 0,0001 y AADT/K 0,0023. Estos valores son indicativos que los datos experimentales se ajustaron adecuadamente por el polinomio.



a) Energía de exceso de Gibbs y Coeficientes de actividad
b) Coeficientes de actividad



c) Temperatura contra x_1 y y_1
d) diagrama x_1 contra y_1



e) Consistencia termodinámica

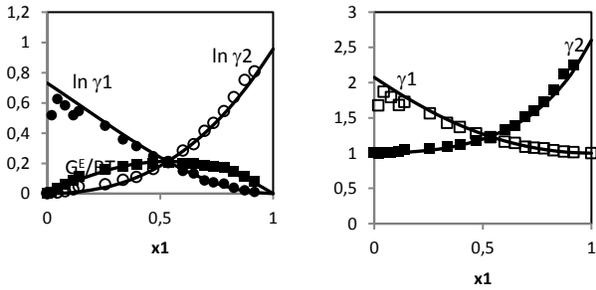
Figura 3. Gráfico de los datos Txy a 101,3 kPa del sistema binario Ciclopentano(1)+THF(2). Datos tomados de Yumei Li (2014).

Caso de estudio 2. Sistema binario 2-Metil-1-Butanol + Etilbenceno a 101,3 kPa

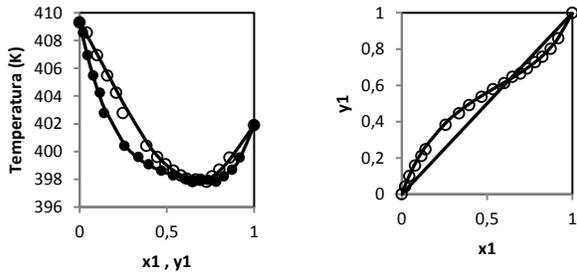
La figura 4 se presenta los resultados para el sistema binario 2-Metil-1-Butanol + Etilbenceno. Los datos experimentales muestran un buen ajuste y se obtiene un rmsd de 0,0023 y un AADT/K de 0,0034.

Este sistema presenta un azeótropo mínimo, el ajuste fue bueno para determinar su punto.

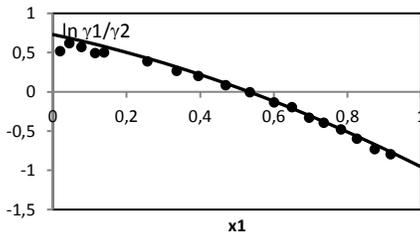
Los datos experimentales pasan la consistencia termodinámica.



a) Energía de exceso de Gibbs y Coeficientes de actividad
b) Coeficientes de actividad



c) Temperatura contra x_1 y y_1
d) diagrama x_1 contra y_1



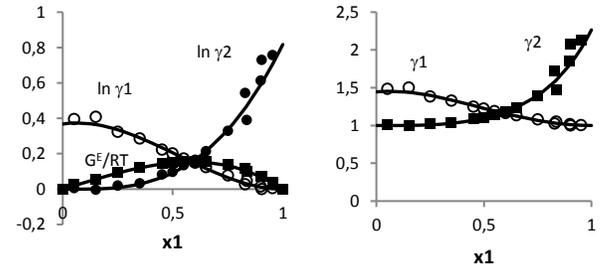
e) Consistencia termodinámica

Figura 4. Gráfico de los datos Txy a 101,3 kPa del sistema binario 2-Metil-2-Butanol (1)+Etilbenzeno(2). Datos tomados Xue G (2013)

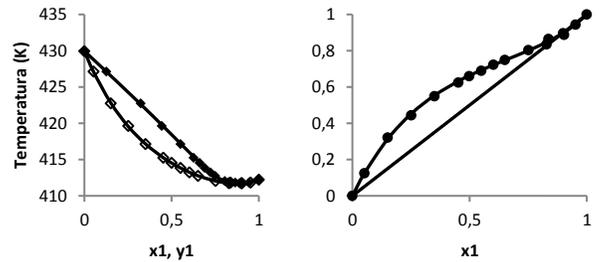
Caso de estudio 3. Sistema binario Fenol + Tetralin a 101,1 kPa

La figura 5 representan los resultados del sistema Fenol + Tetralin. El ajuste por la serie de polinomios de Laguerre es adecuado. Los valores de rmsd fueron de 0,00034 y AADT/K de 0,0056.

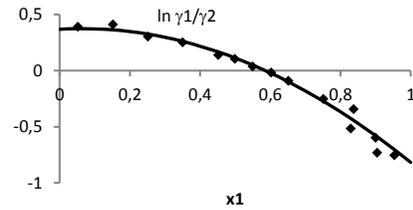
Los datos experimentales pasaron la consistencia termodinámica. Este sistema presenta un azeotropo.



a) Energía de exceso de Gibbs y Coeficientes de actividad
b) Coeficientes de actividad



c) Temperatura contra x_1 y y_1
d) Diagrama x_1 contra y_1



e) Consistencia termodinámica

Figura 5. Gráfico de los datos Txy a 101,3 kPa del sistema binario Fenol (1)+Tetralin(2). Datos tomados de Ashraf S (1997)

La Tabla 2 muestra los coeficientes del diagrama T- x_1 para los diferentes sistemas estudiados, se puede observar que la serie de polinomios de Laguerre se ajusta adecuadamente a los datos experimentales.

En la Tabla 3 muestra los resultados de los parámetros del modelo termodinámico propuesto a base de la serie de polinomios de Laguerre. Con respecto, a la consistencia termodinámica los valores obtenidos a partir del test de área de Herington fueron 0,2030, 0,4123 y -0,007, respectivamente, el cual indica que los datos experimentales fueron termodinámicamente consistentes.

El sistema ciclopentano(1) + THF(2) no presenta un punto azeotrópico, mientras que, los dos sistemas siguientes si presenta un azeotropo mínimo. En la Tabla 4 se presenta los resultados obtenidos por este procedimiento.

Tabla 2. Coeficientes de la ecuación de T x_1 para los sistemas estudiados.

Sistema Binario	Coeficientes de la serie de Polinomios de Laguerre			
	A0	A1	A2	A3
Ciclopentano(1)+THF(2)	261,313	-1034,861	635,385	-92,305
2-Metil-2-Butanol (1)+Etilbenceno(2)	-236,901	625,365	-311,289	30,407
Fenol (1)+Tetralin(2)	-34,682	-0,639	14,555	-5,798

Tabla 3. Coeficientes del modelo termodinámico de energía de exceso de Gibbs

Sistema Binario	Coeficientes de la serie de Polinomios de Laguerre		
	A0	A1	A2
Ciclopentano(1)+THF(2)	0,2349	0,4026	-0,0073
2-Metil-2-Butanol (1)+Etilbenceno(2)	0,9470	-0,1983	-0,0094
Fenol (1)+Tetralin(2)	0,8069	-0,4179	-0,0105

Tabla 4. Puntos azeotrópicos

Sistema Binario	x^{az}	T^{az}/K
Ciclopentano(1)+THF(2)	-	-
2-Metil-2-Butanol (1)+Etilbenceno(2)	0,6466	397,87
Fenol (1)+Tetralin(2)	0,7769	411,93

5 Conclusiones

En el presente estudio se investigó el ajuste de datos Txy de sistemas binarios usando las series de los polinomios de Laguerre, los cuales arrojaron una buena aproximación con el modelo de series de polinomios de Laguerre.

Se obtuvieron los parámetros de la ecuación T-xy que representa los sistemas binarios a partir de los datos experimentales de sistemas en equilibrio vapor-líquido.

Se obtuvieron los parámetros para las ecuaciones de energía de Gibbs en exceso, los coeficientes de actividad y la composición de vapor y_i .

Se obtuvo los puntos azeotrópico de la mezcla binaria estudiada.

Se determinó la consistencia termodinámica de los datos de equilibrio vapor-líquido de la mezcla binaria.

Referencias

Abrams D, Prausnitz J, 1975, Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures: A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly or Completely Miscible Systems. *AIChE Journal*, vol. 21(1), pp. 116-128.

Ashraf S, 1997, Vapor-Liquid equilibrium in the binary systems formed by phenol and ortho-cresol with tetralin at 101,1 and 26,6 kPa. *Fluid Phase Equilibria*, 129, pp. 165-174.

Baba-Ahmed A, Guilbot P, Richon D, 1999, New Equipment Using a Static Analytic Method for the Study of Vapour-Liquid Equilibria at Temperatures Down to 77K. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 166(2), pp. 225-236.

Benedict M, Rubin D, 1945, Extractive and Azeotropic Distillation I. Theoretical Aspects. *Transactions of the American Institute of Chemical Engineers*, vol 41, pp. 353-335.

Fredenslund A, Jones R, Parusnitz J, 1975, Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients in Non-ideal Liquid Mixture. *AIChE Journal*, vol. 21(6), pp. 1086-1099.

Freitag J, Kosuge H, Schmelzer J, Kato S, 2015, VLE Measurements Using a Static Cell Vapor Phase Manual Sampling Method Accompanied with an Empirical Data Consistency Test. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, vol. 80, pp. 92-101

Judson King, 1980, *Procesos de Separación*. Editorial Reverté, 2^{da} Edición, Cap 5, pp. 206-250.

Li Y., 2014, Measurement and Correlation of Isobaric Vapor-Liquid Equilibrium for the Binary System of Cyclopentane and Tetrahydrofuran. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, vol. 31, No. 03, pp 815-820.

Malanowski S, 1982, *Experimental Methods for Vapour-Liquid Equilibria. Part I. Circulation Methods. Fluid Phase Equilibria*, vol. 8(2), pp. 197-219.

Hala E, Pick J, Fried V, Villim O, 1958, *Vapor Liquid Equilibrium*. Oxford: Pergamon, pp. 15-30

Marsch K, 1978, *Chemical Thermodynamics*. London: The chemical Society, pp. 123-190.

Mc Cabe W, Smith J, Harriot P, 2005. *Unit Operations of Chemical Engineering*, Mc Graw Hill, cap7, pp.

Olson J, 1989, Measurement of Vapor-Liquid Equilibria by Ebulliometry. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 52, pp. 209-218.

Renon H, Prausnitz J, 1968, Local Compositions in Thermodynamic Excess Functions for liquid Mixtures. *AIChE Journal*, vol 14(1), pp. 135-144.

Sánchez Ruiz J, López P, Dehesa J, 2003, Expansions in series of varying Laguerre polynomials and some applications to molecular potentials. *Journal of computational and Applied Mathematics*, Vol. 153 (1-2), pp. 411-421.

Smith J, Van N, Abbot M, 2001, *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*, 6 ed, McGraw-Hill.

Taekyun K, Dae S, Kyung-Won H. 2016, Some identities of Laguerre polynomials arising from differential equations. *Advances in Difference Equations*, No. 159, pp. 1-9.

Valtz A, Coquelet C, Baba-Ahmed A, Richon D, 2002, Vapour Liquid Equilibrium Data for Propane + 1,1,1,2,3,3,3-Heptafluoropropane (R227a) System at Temperatures from 293.16 to 353.18 K and Pressures up to 3.4 Mpa. *Fluid Phase Equilibria*, vol. 202, pp. 29-47

Williamson A, 1975, *Experimental Thermodynamics*. London: Butterworth, pp. 10-150.

Wilson GM, 1964, Vapor-liquid equilibrium. XI. A New Expression for the Excess Free Energy of Mixing. *Journal of the American Chemical Society*, vol. 86(2), pp 127-130.

Xue G, Wan H, Wang L, Guan G, 2013, Vapor-Liquid Equilibrium for 2-Methyl-1-Butanol + Ethylbenzene + Xylene Isomers 101,33 kPa. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 58, p. 724-730.

Recibido: 10 de enero de 2020

Aceptado: 20 de junio de 2020

Alcivar, Tyrone: M.Sc en Ingeniería Química, ULA, Mérida, Venezuela. Ingeniero Químico. Docente en la Escuela Superior Politécnica del Litoral (ESPOL). Guayaquil, Ecuador.

Monteros, Gabriel: MSc en Ingeniería Química, ULA, Mérida, Venezuela. Ingeniero Químico. Investigador en el área de Tecnologías Químicas. Escuela Superior Politécnica del Litoral (ESPOL). Guayaquil, Ecuador. Correo electrónico: gmontero@espol.edu.ec

Ramírez, Rubén: Ingeniero Químico, ULA, Mérida, Venezuela. Realiza Posgrado en Química de Medicamentos (Laboratorio de Petróleo y Catálisis-Instituto de Investigación "Prof. Usubillaga". Se destaca en la Formulación de Productos Cosméticos y de Cuidado Personal a base de Productos Naturales. Correo electrónico: ramirezgruben@gmail.com