

Modelo simple y generalizado para estimar la entalpía de vaporización de sustancias puras¹

A simple and generalized model to estimate the vaporization enthalpy of pure substances

Modelo simples e generalizado para estimar a entalpia da vaporização das substâncias puras

L. F. Cardona

Recibido: mayo 16 de 2016 - Aceptado: mayo 31 de 2017

Resumen— El calor de vaporización de sustancias puras en su temperatura normal de ebullición es una propiedad utilizada en diferentes aplicaciones en la industria de procesos. En el presente trabajo, una nueva ecuación generalizada para predecir la entalpía de vaporización es propuesta para sustancias puras. A partir de valores de presión crítica, temperatura crítica, temperatura normal de ebullición y datos experimentales de entalpía de vaporización de 300 sustancias puras y mediante el algoritmo de Lasdon et al., el cual minimiza la suma de los cuadrados de las desviaciones relativas de la entalpía de vaporización, se determinó las constantes características de la nueva ecuación. Para validar el modelo propuesto obtenido, se evaluó en 227 sustancias puras, generando porcentajes de desviación relativas promedio de 0.0821%. Se comparan los resultados con modelos predictivos para el cálculo de la entalpía de vaporización, como son las ecuaciones de: Riedel, Chen, Trouton, Zhao et al., Vetere, Liu, Mehmandoust et al., Morgan, Carruth y Kobayashi y los resultados indican que la nueva ecuación propuesta genera una mejor precisión.

Palabras clave— Entalpía de vaporización, sustancias puras, modelo.

Abstract— The heat of vaporization of a pure substance at its normal boiling temperature is a very important property in many chemical processes. In this work, a new generalized model was developed to predict vaporization enthalpy of

pure substances. From values of critical pressure, critical temperature, normal boiling temperature and experimental data of vaporization enthalpy for 300 pure substances and using Lasdon et al., algorithm which minimize the sum of the squares of the relative deviation in vaporization enthalpy were determined the constants characteristics of the new equation. To validate the new model it was evaluated for 227 pure substances and generated percent relative average deviation of 0.0821%. The results were compared with Riedel, Chen, Trouton, Zhao et al., Vetere, Liu, Mehmandoust et al., Morgan, Carruth and Kobayashi equations and the comparison indicates that the proposed method provide more accurate results than other methods used in this work.

Key words— vaporization enthalpy, pure substances, model.

Resumo— O calor de vaporização de substâncias puras em sua temperatura normal de ebulição é uma propriedade utilizada em diferentes aplicações na indústria de processos. No presente trabalho, uma nova equação generalizada para prever a entalpia de vaporização é proposta para substâncias puras. A partir de valores de pressão crítica, temperatura crítica, temperatura normal de ebulição e dados experimentais da entalpia de evaporação de 300 substâncias puras e mediante o algoritmo de Lasdon et al., o qual minimiza a soma dos quadrados dos desvios relativos da entalpia de vaporização, foram determinadas as constantes características da nova equação. Para validar o modelo proposto obtido, foram avaliadas 227 substâncias puras, gerando percentuais de desvio relativo de 0.0821%. Os resultados foram comparados com modelos preditivos para o cálculo da entalpia da vaporização, como são as equações de: Riedel, Chen, Trouton, Zhao et al., Vetere, Liu, Mehmandoust et al., Morgan, Carruth e Kobayashi e os resultados indicam que a nova equação proposta gera uma melhor precisão.

Palavras chave— entalpia de evaporação, substâncias puras, modelo.

¹Producto derivado del proyecto de investigación “Modelo simple y generalizado para estimar la entalpía de vaporización de sustancias puras”. Presentado por el Grupo de Investigación SISCO, de la Universidad Católica Luis Amigó.

L. F. Cardona docente en el Departamento de Ciencias Básicas, de la Fundación Universitaria Luis Amigó, Medellín (Colombia); email: luis.cardonapa@amigo.edu.co

I. INTRODUCCIÓN

La entalpía de vaporización se define como la diferencia entre las entalpías de fase de vapor y líquido a la misma temperatura y presión, por otro lado la entalpía de vaporización (ΔH_{vp}) es la cantidad de energía que es requerida para transformar un material a una temperatura especificada desde la fase líquida a la fase de vapor [1].

El conocimiento de la entalpía de vaporización es de gran importancia en ingeniería ya que permite simular, diseñar y optimizar procesos que involucren cambios de fase líquido-vapor como destilación, evaporación o secado [2], [3]. Para mejorar las simulaciones numéricas es necesario el uso de correlaciones termodinámicas precisas, es el caso del calor de vaporización en la predicción de equilibrios líquido-vapor en múltiples etapas de sistemas multicomponentes, ya que éste controla la temperatura y los perfiles de líquido y vapor en una columna [4]. Por tal motivo, existe un gran interés en ingeniería en la medición y correlación de los valores de esta propiedad [5].

La entalpía de vaporización de fluidos puros se puede calcular utilizando ecuaciones de estado o de una manera más simple por medio de correlaciones empíricas, algunas de estas solo requieren las propiedades del fluido como temperatura crítica, presión crítica, temperatura normal de ebullición, peso molecular, factor acéntrico, entre otros [2].

Diferentes ecuaciones para el cálculo de la entalpía normal de vaporización están reportados en la literatura científica, los más conocidos son: Riedel [6], Chen [7], Trouton [8], Zhao et al. [9], Vetere [10], Liu [11], Mehmndoust et al. [5], Morgan, Carruth y Kobayashi [12], Sivaraman et al., Faúndez et al. [2].

Vetere desarrolló una correlación empírica para el cálculo de la entalpía de vaporización para hidrocarburos y alcoholes que depende de dos variables: el peso molecular y la temperatura, con desviaciones menores al 2.08% [10], mientras que la ecuación de Chen depende de la temperatura normal de ebullición, temperatura crítica, presión crítica con desviaciones promedio del 1.82% [7], por otro lado el modelo propuesto por Mehmndoust et al., depende de tres variables: presión crítica, temperatura crítica, temperatura normal de ebullición con 10 constantes y desviaciones promedio del 2.74% [5].

Se propone en este estudio un nuevo modelo simple y generalizado para el cálculo de la entalpía de vaporización de sustancias puras a partir del conocimiento de la temperatura normal de ebullición y de las propiedades críticas: temperatura crítica y presión crítica. Finalmente, la ecuación generalizada se compara con diferentes modelos reportados en la literatura científica.

II. NUEVA ECUACIÓN PROPUESTA Y FUNCIÓN OBJETIVO

La ecuación (1) representa el modelo empírico propuesto para el cálculo del calor de vaporización.

$$\Delta H_{vp} = \frac{RT_b T_{br} \left(0.16217 T_{br}^{1.8485} - 0.613 + 2.1882 (\ln P_c)^{1.2473} \right)}{0.9217 - T_{br}^{3.1457}} \quad (1)$$

Donde ΔH_{vp} es la entalpía de vaporización, R es la constante universal de los gases ($8.3145 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$), T_b es la temperatura normal de ebullición en K, T_c es la temperatura crítica en K, T_{br} es la temperatura normal de ebullición reducida, calculada como $T_{br} = T_b/T_c$ y P_c es la presión crítica en bar.

Se realiza una búsqueda de los valores de presión crítica, temperatura crítica, factor acéntrico, temperatura normal de ebullición y datos experimentales del calor de vaporización de 527 sustancias puras que se analizarán en la presente investigación [13-18]. Se determinaron las constantes de la ecuación (1), utilizando el algoritmo propuesto por Lasdon et al. [19], y la función objetivo dada por la ecuación (2) para 300 sustancias puras.

$$F.O. = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\Delta H_{vpi,exp} - \Delta H_{vpi,calc}}{\Delta H_{vpi,exp}} \right)^2 \quad (2)$$

La función objetivo a minimizar representa la suma de los cuadrados de las diferencias entre los valores experimentales y los valores del nuevo modelo, donde N es el número de compuestos, $\Delta H_{vpi,exp}$ es el calor de vaporización experimental y $\Delta H_{vpi,calc}$ son los valores calculados por el modelo.

Se evalúa la generalización del modelo propuesto por medio del porcentaje de error promedio estándar ($AARD\%$), porcentaje de desviación relativa ($ARD\%$), y la desviación de la raíz cuadrada media ($RMSD$) [20].

$$AARD\% = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\Delta H_{p,i,exp} - \Delta H_{p,i,calc}}{\Delta H_{p,i,exp}} \right| \times 100 \quad (3)$$

$$ARD\% = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\Delta H_{p,i,exp} - \Delta H_{p,i,calc}}{\Delta H_{p,i,exp}} \right) \times 100 \quad (4)$$

$$RMSD = \frac{1}{N} \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\Delta H_{p,i,exp} - \Delta H_{p,i,calc}}{\Delta H_{p,i,exp}} \right)^2} \times 100 \quad (5)$$

III. COMPARACIÓN DE DIFERENTES MODELOS PARA EL CÁLCULO DE LA ENTLPIA DE VAPORIZACIÓN

Se compararon los resultados obtenidos con ecuaciones para el cálculo de la entalpía de vaporización, entre las que se destacan:

a. Modelo de Riedel [6]:

$$\Delta H_{vp} = \frac{1.093RT_b (\ln P_c - 1.013)}{0.93 - T_b/T_c} \quad (6)$$

Donde ΔH_{vp} es la entalpía de vaporización, R es la constante universal de los gases ($8.3145 \text{ Jmol}^{-1}\text{K}^{-1}$), T_b es la temperatura normal de ebullición en K, T_c es la temperatura crítica en K y P_c es la presión crítica en bar.

b. Ecuación de Chen [7]:

$$\Delta H_{vp} = \frac{RT_b (3.978(T_b/T_c) - 3.958 + 1.555 \ln P_c)}{1.07 - T_b/T_c} \quad (7)$$

c. Regla de Trouton [8]:

$$\Delta H_{vp} = 88T_b \quad (8)$$

d. Modelo de Zhao et al. [9]:

$$\Delta H_{vp} = T_b (36.6 + 8.314 \ln T_b) \quad (9)$$

e. Ecuación de Vetere [10]:

Para hidrocarburos:

$$\Delta H_{vp} = 4.1868T_b \left(9.08 + 4.36 \log_{10} T_b + \frac{0.0068T_b}{M} + \frac{0.0009T_b^2}{M} \right) \quad (10)$$

Para alcoholes:

$$\Delta H_{vp} = 4.1868T_b \left(18.82 + 3.34 \log_{10} T_b - \frac{6.37T_b}{M} + \frac{0.036T_b^2}{M} - \frac{5.2 \times 10^{-5} T_b^3}{M} \right) \quad (11)$$

Donde M es el peso molecular en kgkmol^{-1} .

f. Ecuación de Liu [11]:

$$\Delta H_{vp} = RT_b \left(\frac{T_b}{220} \right)^{0.0627} \times \frac{(1 - T_b/T_c)^{0.38} \ln(P_c/P_a)}{1 - T_b/T_c + 0.38(T_b/T_c) \ln(T_b/T_c)} \quad (12)$$

Donde P_a es la presión atmosférica en bar.

g. Ecuación de Mehmandoust et al. [5]:

$$\Delta H_{vp} = RT_b (A + BT_{br} + CT_{br}^2 + DT_{br}^3) \quad (13)$$

$$B = b_1 + b_2 P_c + b_3 \ln P_c \quad (14)$$

$$C = c_1 + c_2 P_c + c_3 \ln P_c \quad (15)$$

$$D = d_1 + d_2 P_c + d_3 \ln P_c \quad (16)$$

Las constantes A , b_1 , b_2 , b_3 , c_1 , c_2 , c_3 , d_1 , d_2 , d_3 están reportadas en la Tabla I.

TABLA I

CONSTANTES DEL MODELO DE MEHMANDOUST ET AL.

Coefficientes	Valores
A	0.01290
b_1	0.00086
b_2	-0.00206
b_3	0.01150
c_1	-0.01983
c_2	0.00632
c_3	-0.04279
d_1	0.02086
d_2	-0.00459
d_3	0.03544

h. Ecuación de Morgan [12]:

$$\Delta H_{vp} = d_1 (1 - T_{br})^{(d_2 + d_3 T_{br} + d_4 T_{br}^2)} \quad (17)$$

$$d_1 = RT_c (7.8149 + 11.409\omega + 2.1674\omega^2 - 0.65342\omega^3) \quad (18)$$

$$d_2 = 0.81892 - 0.67637\omega + 1.2798\omega^2 - 0.47594\omega^3 \quad (19)$$

$$d_3 = -0.84408 + 1.8297\omega - 3.2435\omega^2 + 1.1449\omega^3 \quad (20)$$

$$d_4 = 0.41923 - 1.0892\omega + 1.9138\omega^2 - 0.65758\omega^3 \quad (21)$$

Donde ω es el factor acéntrico.

i. Ecuación de Carruth y Kobayashi [12]:

$$\Delta H_{vp} = RT_c \left[(1 - T_{br})^{0.354} + 10.95\omega(1 - T_{br})^{0.456} \right] \quad (22)$$

IV. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A partir del conocimiento de la temperatura normal de ebullición, temperatura crítica y presión crítica de 300 sustancias puras, se determinaron las constantes de la nueva ecuación utilizando el algoritmo de Lasdon et al., el cual minimiza la suma de los cuadrados de las desviaciones relativas de la entalpía de vaporización.

En la Tabla II, se presenta un resumen estadístico de las 300 sustancias puras sometidas al proceso de minimización por medio del porcentaje de error promedio estándar ($AARD\%$), porcentaje de desviación relativa absoluta ($ARD\%$), y la desviación de la raíz cuadrada media ($RMSD$).

TABLA II
PARÁMETROS ESTADÍSTICOS EVALUADOS EN 300 SUSTANCIAS PURAS EN COMPARACIÓN CON OTROS MODELOS

	AARD%	ARD%	RMSD
Nuevo Modelo	0.1059%	0.0033%	0.0041
Riedel	0.9776%	0.6235%	0.0579
Chen	0.5227%	-0.2334%	0.0084
Trouton	7.2017%	0.4897%	0.1450
Zhao et al.	6.4356%	-3.0795%	0.0848
Vetere	13.7068%	13.9984%	0.0858
Liu	2.1062%	-0.9235%	0.0235
Mehmandoust et al.	3.1377%	-3.0958%	0.6340
Morgan	3.8542%	4.8187%	0.0326
Carruth y Kobayashi	1.4814%	-1.7180%	0.0113

De la Tabla II la ecuación propuesta en la investigación presenta el menor porcentaje de error relativo ($AARD\%$) del 0.1059%, en comparación con otros modelos evaluados en el presente artículo. También se observa que la magnitud global de los valores de $RMSD$ es de relativo bajo orden de magnitud (≤ 0.0041), por lo cual se establece que los resultados simulados utilizando el modelo propuesto se ajustan razonablemente a los valores encontrados experimentalmente, validándose así dicho modelo.

La ecuación de Vetere genera porcentajes de desviación relativa del 13.7068%, resultados que están conformes a lo reportado por Tatar et al., quienes reportan desviaciones del 69.70% [3], mientras que la ecuación de Trouton en el presente trabajo generó desviaciones del 7.2017%, resultado que ésta de acuerdo a lo reportado por Mehmandoust et al. [5].

En la Tabla III, se muestra el porcentaje de error promedio estándar ($AARD\%$) del modelo propuesto y diferentes ecuaciones para el cálculo de la entalpía de vaporización.

TABLA III.
PORCENTAJE DE ERROR PROMEDIO ESTÁNDAR (*AARD%*) DE LOS VALORES OBTENIDOS POR LA NUEVA ECUACIÓN,
EN COMPARACIÓN CON OTROS MODELOS DE ENTALPÍA DE VAPORIZACIÓN

	Número de Compuestos	Nuevo Modelo	Riedel	Chen	Trouton	Zhao et al.	Vetere	Liu	Mehmandoust et al.	Morgan	Carruth y Kobayashi
Alcanos	10	0.215%	1.265%	0.634%	9.037%	2.529%	15.891%	1.625%	3.949%	4.016%	1.511%
Alquenos	31	0.018%	0.403%	0.231%	7.005%	2.377%	15.264%	0.904%	2.790%	1.989%	0.969%
Alquinos	4	0.008%	0.797%	0.525%	2.801%	5.819%	13.910%	1.600%	1.065%	2.147%	0.660%
Hidrocarburos cíclicos	7	0.012%	0.629%	0.388%	4.666%	1.108%	14.489%	1.383%	1.519%	1.845%	0.614%
Aromáticos	29	0.015%	0.792%	0.321%	2.835%	4.227%	13.047%	1.169%	1.136%	3.178%	1.202%
Alcoholes y éteres	33	0.079%	1.612%	0.794%	12.138%	13.888%	10.924%	4.103%	5.242%	7.291%	2.350%
Aldehídos y cetonas	20	0.021%	0.818%	0.380%	3.102%	5.001%	13.252%	1.428%	1.408%	3.514%	1.566%
Esteres	8	0.017%	0.897%	0.400%	3.831%	5.585%	13.108%	1.769%	2.635%	5.130%	2.187%
Hidrocarburos halogenados	95	0.020%	0.672%	0.378%	3.898%	3.980%	13.947%	1.598%	1.673%	3.099%	1.247%
Compuestos azufrados	6	1.764%	4.520%	1.462%	31.890%	28.800%	19.494%	9.611%	6.671%	10.142%	2.991%
Compuestos nitrogenados	9	0.081%	0.920%	0.572%	8.984%	9.199%	12.768%	2.402%	2.713%	3.714%	1.325%
Gases Nobles	6	0.111%	1.035%	0.903	18.201%	1.750%	17.363%	2.627%	6.422%	1.779%	1.589%
Compuestos inorgánicos	19	0.576%	1.781%	1.903%	16.748%	10.900%	14.749%	3.704%	107.602%	3.428%	1.801%
Ácidos orgánicos	23	0.028%	1.221%	0.509%	7.654%	9.477%	12.037%	2.493%	4.041%	5.579%	2.036%
Promedio	300	0.2104%	1.2175%	0.635%	9.508%	7.496%	14.306%	2.550%	3.704%	4.035%	1.546%

A partir de la Tabla III el *AARD%* muestra que el nuevo modelo representa un buen ajuste para todos los tipos de compuestos analizados, a excepción de los compuestos azufrados con desviaciones menores al 1.764%.

La Fig. 1 muestra la comparación de las entalpías de vaporización experimental y los predichos por el nuevo modelo, donde éste presenta una gran predicción de los datos experimentales con un coeficiente de correlación del 0.9995.

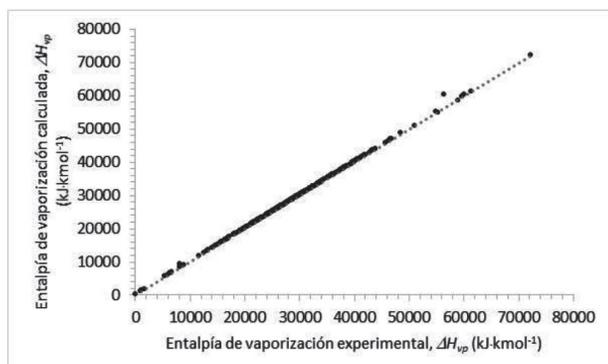


Fig. 1. Exactitud del nuevo modelo propuesto frente a los datos experimentales de 300 sustancias puras.

En la Fig. 2 se evidencia el porcentaje de desviación relativa absoluta (*ARD%*) frente a la entalpía de vaporización calculada por el nuevo modelo y se concluye que las desviaciones se encuentran entre -0.40% y 1.6% demostrando así la precisión en describir los datos experimentales.

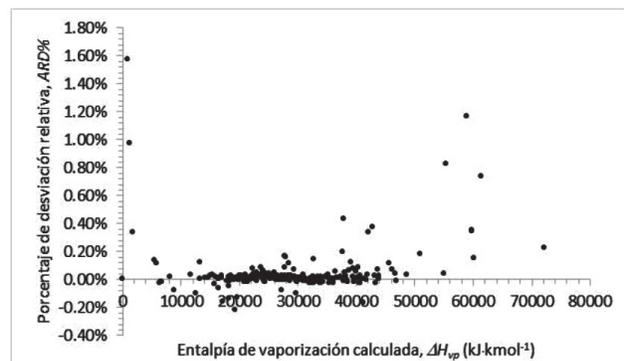


Fig. 2. Porcentaje de desviación relativa Vs. la entalpía de vaporización calculada por el nuevo modelo de 300 sustancias puras.

Con el fin de validar el modelo propuesto se evaluaron 227 sustancias, puras, las cuales no participaron en la minimización. Los valores de temperatura crítica, presión crítica, temperatura normal de ebullición y factor acéntrico, son tomados de la literatura científica [13-16].

En la Tabla IV se presenta un resumen estadístico de las 227 sustancias puras que no fueron sometidas al proceso de minimización, entre las que se destacan compuestos azufrados, cetonas, esterres, alcoholes, hidrocarburos halogenados, alcanos, alquenos, ácidos orgánicos, alquinos, hidrocarburos cíclicos, aromáticos, aldehídos, compuestos nitrogenados, compuestos inorgánicos.

TABLA IV
PARÁMETROS ESTADÍSTICOS EVALUADOS EN 227 SUSTANCIAS PURAS EN
COMPARACIÓN CON OTROS MODELOS.

	AARD%	ARD%	RMSD
Nuevo Modelo	0.0821%	0.0351%	0.00096
Riedel	0.9442%	0.9430%	0.00833
Chen	0.6116%	-0.6030%	0.00488
Trouton	5.1653%	-1.1842%	0.04174
Zhao et al.	4.5431%	-2.3011%	0.03874
Vetere	14.0812%	14.0812%	0.09402
Liu	1.8406%	-1.2723%	0.01586
Mehmandoust et al.	2.8550%	-0.6645%	0.02314
Morgan	5.9337%	5.9337%	0.04452
Carruth y Kobayashi	2.4455%	-2.4455%	0.01692

Los resultados presentados en la Tabla IV están conformes a lo reportado por Tatar et al. [3], Mehmandoust et al. [5], Kikic y Vetere [21], Sanjari et al. [12], Cachadiña y Mulero [2].

Los resultados demuestran la superioridad en la predicción que tiene el nuevo modelo desarrollado para el cálculo de la entalpía de vaporización en comparación con ecuaciones reportadas en la literatura científica con desviaciones promedio del 0.0821%. De la Tabla IV el valor de *RMSD* es de relativo bajo orden de magnitud (≤ 0.00096) y se establece que los resultados simulados, utilizando el modelo propuesto, se ajustan a los valores encontrados experimentalmente, validándose de nuevo el modelo.

La Fig. 3 muestra la comparación de las entalpías de vaporización experimental y los predichos por el nuevo modelo y se concluye que éste presenta gran precisión en la predicción de los datos experimentales, con un coeficiente de correlación de 0.9999.

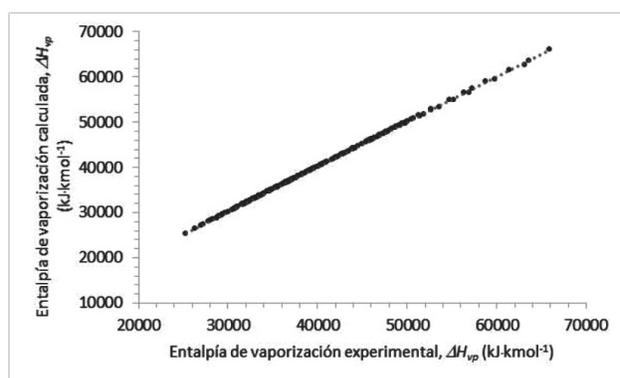


Fig. 3. Exactitud del nuevo modelo, frente a los datos experimentales de 227 sustancias puras.

En la Fig. 4 se evidencia el porcentaje de desviación relativa absoluta (*ARD%*), frente a la entalpía de vaporización calculada por el nuevo modelo para las 227 sustancias que no participaron en la minimización, en donde las desviaciones varían desde -0.03% a 0.98%.

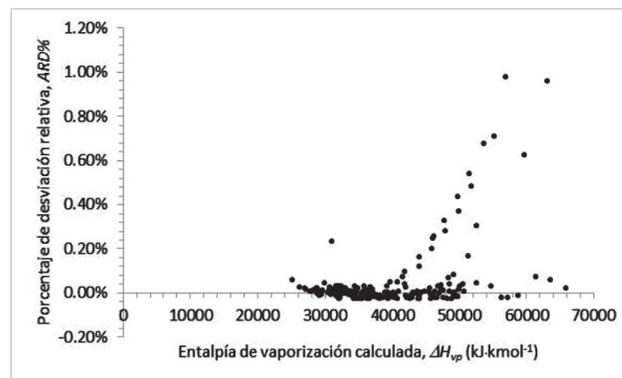


Fig. 4. Porcentaje de desviación relativa versus la entalpía de vaporización calculada por el nuevo modelo de 227 sustancias puras.

El modelo desarrollado en la presente investigación se empleará en diferentes procesos industriales [2], [3] y [22] y en educación en ciencias básicas [23], [24].

V. CONCLUSIONES

El nuevo modelo generalizado objeto de estudio en el presente artículo, calcula la entalpía de vaporización y presenta porcentajes de error promedio estándar para 300 sustancias puras de 0.1059% y porcentajes de desviación relativa absoluta entre -0.40% a 1.60%, mientras que para 227 sustancias que no participaron en el proceso de minimización genera porcentajes de error promedio estándar de 0.0821% y porcentaje de desviación relativa absoluta entre -0.03% a 0.98%.

Diferentes métodos para predecir la entalpía de vaporización fueron comparados y evaluados para una sustancia en particular. Se encuentran errores de predicción aceptables, usando las ecuaciones de Riedel, Chen, Trouton, Zhao et al., Vetere, Liu, Mehmandoust et al., Morgan, Carruth y Kobayashi, sin embargo, la nueva ecuación propuesta genera la menor desviación del 0.0821% de las 527 sustancias puras analizadas en la presente investigación.

REFERENCIAS

- [1] H. Parhizgar, M. Reza, and A. Eftekhari, "Modeling of vaporization enthalpies of petroleum fractions and pure hydrocarbons using genetic programming," *J Pet Sci Eng*, vol. 112, pp. 97–104, 2013.
- [2] I. Cachadi and A. Mulero, "Evaluation of correlations for prediction of the normal boiling enthalpy," *Fluid Phase Equilibria*, vol. 240, pp. 173–178, 2006.
- [3] A. Tatar, A. Barati-harooni, and M. Partovi, "An accurate model for predictions of vaporization enthalpies of hydrocarbons and petroleum fractions," *Journal of Molecular Liquids*, vol. 220, pp. 192–199, 2016.
- [4] N. Gopinathan and D. N. Saraf, "Predict heat of vaporization of crudes and pure components Revised II," *Fluid Phase Equilibria*, vol. 179, pp. 277–284, 2001.
- [5] B. Mehmandoust, E. Sanjari, and M. Vatani, "An efficient reliable method to estimate the vaporization enthalpy of pure substances according to the normal boiling temperature and critical properties," *J Adv Res*, vol. 5, no. 2, pp. 261–269, 2014.
- [6] L. Riedel, Kritischer Koeffizient. "Dichte des gesättigten dampfes und verdampfungswärme. untersuchungen über eine erweiterung des theorems der übereinstimmenden zustände," *Teil III, Chem. Ing.*

- Tech*, 26 pp. 679–683, 1954
- [7] N. H. Chen, “Generalized Correlation for latent Heat of Vaporization,” *J. Chem. Eng. Data*, no. 3, pp. 207–210, 1965.
- [8] L. K. Nash, “Trouton and T-H-E rule,” *J. Chem. Educ.*, vol. 61, no. 11, pp. 981–984, 1984.
- [9] L. Zhao, N. Ni, and S. H. Yalkowsky, “A Modification of Trouton’s Rule by Simple Molecular Parameters for Hydrocarbon Compounds,” *Ind. Eng. Chem. Res.*, pp. 324–327, 1999.
- [10] A. Vetere, “A new correlations for predicting vaporization enthalpies of pure compounds,” *The Chemical Engineering Journal*, pp. 157–162, 1979.
- [11] Z. Liu, “Estimation of heat of vaporization of pure liquid at its normal boiling temperature,” *Chemical Engineering Communications*, pp. 221–228, 2000.
- [12] E. Sanjari, M. Honarmand, N. Afshar, and R. S. Esfahani, “A new general correlation for the prediction of the boiling vaporization enthalpy of hydrocarbons,” *Thermochim Acta*, vol. 556, pp. 30–33, 2013.
- [13] J. S. Chickos and W. E. Acree, “Enthalpies of Vaporization of Organic and Organometallic Compounds,” *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, pp. 1880–2002, 2003.
- [14] F. Gharagheizi, “Determination of normal boiling vaporization enthalpy using a new molecular-based model,” *Fluid Phase Equilibria*, vol. 317, pp. 43–51, 2012.
- [15] R.C. Reid, J.M. Prausnitz, B.E. Poling, *The Properties of Gases and Liquids*, 4th ed. New York: McGraw-Hill, 1987.
- [16] D. Wagman, W. Evans, V. Parker, R. Schumm, I. Halow, S. Bailey, K. Churney and R. Nuttall, “The NBS tables of chemical thermodynamic properties,” *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, vol. 11, pp. 2-392, 1982.
- [17] L. A. Forero G. and J. A. Velásquez J., “Wagner liquid–vapour pressure equation constants from a simple methodology,” *J Chem Thermodyn*, vol. 43, no. 8, pp. 1235–1251, Aug. 2011.
- [18] D. W. Scott, “Correlation of the chemical thermodynamic properties of hydrocarbons and related substances: Properties of the alkane hydrocarbons, C₁ through C₁₀ in the ideal gas state from 0 to 1500K”, US Bureau of Mines, Bulletin 666, 1974. [Online]. Available: http://digital.library.unt.edu/ark:/67531/metadc12811/m2/1/high_res_d/Bulletin0666.pdf
- [19] L.S. Lasdon, A.D. Waren, A. Jain and M. Ratner. “Design and Testing of a Generalized Reduced Gradient Code for Nonlinear Programming”, *ACM Trans. Math. Softw.* pp. 1-45, 1976.
- [20] E. Sanjari, “A new simple method for accurate calculation of saturated vapor pressure,” *Thermochim Acta*, vol. 560, pp. 12–16, 2013.
- [21] I. Kikic and A. Vetere, “Evaluation of several literature equations to predict the vaporization enthalpies at the normal boiling point,” *Fluid Phase Equilib*, vol. 309, no. 2, pp. 151–154, 2011.
- [22] H. Reyes, “Determination of thermodynamic parameters and design of a hydrogen fuel cell level pilot plant,” *Entre Ciencia e Ingeniería*, vol. 8, no. 16, pp. 83-89, 2014.
- [23] M. E. Murcia and J. C. Henao, “Educación matemática en Colombia, una perspectiva evolucionaria,” *Entre Ciencia e Ingeniería*, vol. 9, no. 18, pp. 23-30, 2015.
- [24] J. C. H. López and J. L. A. Vargas, “Resultados de un Proceso de Intervención en la Enseñanza de las Matemáticas en Educación Básica Secundaria” *Entre Ciencia e Ingeniería*, vol. 6, no. 11, pp. 131-148, 2012.



Luis Fernando Cardona Palacio, nació en Medellín, Colombia el 18 de abril de 1988. Se graduó de Ingeniero Químico en la Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín (Colombia) en 2011. Es Magister en Ingeniería en la Universidad Pontificia Bolivariana, Medellín (Colombia), Magister en Matemáticas Aplicadas en la Universidad EAFIT, Medellín (Colombia).