



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MÉXICO**

**FACULTAD DE QUÍMICA**

**ESTUDIO DEL MODELO BONYADI – ROSTAMI PARA LA  
PREDICCIÓN DE LA VISCOSIDAD EN COMPUESTOS  
PARAFÍNICOS**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERO QUÍMICO**

**PRESENTA:  
URIEL PÉREZ CHÁVEZ**

**TUTOR:  
JOSÉ FERNANDO BARRAGÁN AROCHE**



**CIUDAD UNIVERSITARIA, CDMX. 2023**



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

**JURADO ASIGNADO:**

Presidente: José Fernando Barragán Aroche

Secretario: José Luis López Cervantes

Vocal: Leticia Valle Arizmendi

1<sup>er</sup> suplente: Eduardo Vivaldo Lima

2<sup>do</sup> suplente: Simón López Ramirez

Lugar donde se realizó la tesis: Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, UNAM.

**TUTOR DE TESIS:**

DR. JOSÉ FERNANDO BARRAGÁN AROCHE

---

FIRMA

## DEDICATORIA

*A mi padre Hipólito, por todo tu esfuerzo y sacrificio por tantos años lejos de tu familia, el amigo incondicional que me enseñó a valorar todos los pequeños detalles de la vida y quien tuvo fe en mí siempre. Aunque hoy no pueda abrazarte físicamente, te abrazo con el alma y tu amor seguirá conmigo todos los días de mi vida.*

*A mi madre Inés, por su gran amor y apoyo incondicional, la persona que amo con todo mi corazón y que me enseñó a jamás rendirme y seguir luchando a pesar de las adversidades. Gracias por la paciencia que has tenido para enseñarme, el amor que me das, tu esfuerzo y sacrificio. A ti debo mis logros*

## **AGRADECIMIENTOS**

Al Programa Universitario México Nación Multicultural y del Sistema de Becas por la beca otorgada durante la realización de mis estudios de Licenciatura.

Al Dr. José Fernando Barragán Aroche por su tiempo y asesoría en la realización de este trabajo. Muchas gracias por siempre brindarme su apoyo y paciencia. Mi mayor admiración y respeto para usted.

A mi madre y mis hermanos, por todo el apoyo y la paciencia. Que a pesar de las adversidades han sido mi motivación para seguir adelante.

A la familia Escobar Montiel y a Mirelle Escobar, que me han brindado de su gran apoyo y me han insistido en continuar con lo proyectos que he tenido. Gracias por todo su apoyo y su amor hacia mi familia y a mí. Dios los bendiga siempre.

A mi Marco Aguilar, gracias por tantos años de amistad, el mejor amigo incondicional que me ha apoyado hasta en los momentos más difíciles.

A mis amigos de Universidad, Mauricio, Elías, Marisol, gracias por todos los buenos momentos que pasamos en los días como universitarios, por su cariño y su sincera amistad.

Al jurado asignado por su valioso tiempo y apoyo en la revisión de este trabajo.

A la Facultad de Química y la Universidad Nacional Autónoma de México, la casa en la que fue permitiéndome lograr mi formación académica y de la que estoy orgulloso de ser parte.

## INDICE

1.	INTRODUCCIÓN.....	1
2.	OBJETIVOS .....	4
2.1.	Objetivo general: .....	4
2.2.	Objetivos particulares: .....	4
3.	MARCO TEÓRICO.....	5
3.1.	Ecuaciones de estado .....	5
3.2.	Ecuaciones de estado cúbicas.....	6
3.2.1	Ecuación de estado de van de Waals (vdW EOS).....	9
3.2.2	Ecuación de estado de Redlich – Kwong (RK EOS).....	10
3.2.3	Ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK EOS).....	11
3.2.4	Ecuación de Peng – Robinson (PR EOS) .....	12
3.3.	Modelos de viscosidad .....	13
3.3.1	Definición de la viscosidad como propiedad de transporte.....	13
3.3.2	Teoría cinética de Chapman-Enskog .....	14
3.3.3	Teoría de Estados Correspondientes.....	16
3.3.4	Teoría de la Fricción.....	17
3.4.	Modelo de viscosidad cúbicas.....	17
3.4.1	Analogía $P - v - T$ y $T - \mu - P$ .....	17
3.4.2	Modelo Lawal et al.....	19
3.4.3	Modelo Wang-Guo .....	20
3.4.4	Modelo Guo et al. ....	21
3.4.5	Modelo Bonyadi – Rostami .....	22
4.	METODOLOGÍA:.....	24
4.1.	Programa de computo .....	24
4.1.1.	Descripción del programa .....	24
4.1.2.	Datos de entrada para el algoritmo .....	25
4.1.3.	Programación del modelo Bonyadi-Rostami.....	25
4.2.	Recolección de base de datos .....	25
4.2.1	Recolección de base de datos para valores de saturación.....	27
4.3.	Validación del algoritmo de cálculo .....	28
4.3.1	Cálculo de viscosidad para metano .....	28
4.4.	Evaluación del modelo Bonyadi-Rostami.....	29
4.4.1	Cálculos de viscosidad para gases ligeros .....	29
4.4.2	Cálculo de viscosidad etano y butano.....	30
4.4.3	Análisis gráfico .....	30
4.4.4	Cálculo de envolventes de fase líquido-vapor .....	31
5.	ANÁLISIS DE RESULTADOS.....	34

5.1.	Verificación de los resultados del programa .....	34
5.2.	Viscosidad de gases ligeros .....	38
5.3.	Viscosidad etano y butano. ....	40
5.4.	Resultados del análisis gráfico .....	42
5.5.	Resultados envolventes de fase .....	50
6.	CONCLUSIONES.....	56
7.	Bibliografía.....	57
8.	ANEXOS.....	60

## INDICE DE GRÁFICAS

Gráfica 3.1.	Datos experimentales de viscosidad fase líquida tomados de la base de datos DIPPR para metano, n-butano y n-heptano.....	19
Gráfica 3.1.	Datos experimentales de viscosidad fase vapor tomados de la base de datos DIPPR para metano, n-butano, n-heptano.....	19
Gráfica 5.1.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 50 bar.....	37
Gráfica 5.2.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 1 atm. ....	37
Gráfica 5.3.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 273.15K. ....	43
Gráfica 5.4.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 323.15K. ....	43
Gráfica 5.5.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 348.15K. ....	43
Gráfica 5.6.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 377.15K. ....	44
Gráfica 5.7.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 410.93K. ....	44
Gráfica 5.8.	Comportamiento de la viscosidad para metano a 444.26K. ....	44
Gráfica 5.9.	Comportamiento de la viscosidad para etano a 312.15K.....	45
Gráfica 5.10.	Comportamiento de la viscosidad para etano a 323.15K.....	46
Gráfica 5.11.	Comportamiento de la viscosidad para etano a 373.15K.....	46
Gráfica 5.12.	Comportamiento de la viscosidad para etano a 423.15K.....	46
Gráfica 5.13.	Comportamiento de la viscosidad para etano a 473.93K.....	47
Gráfica 5.14.	Comportamiento de la viscosidad para etano a 523.26K.....	47
Gráfica 5.15.	Comportamiento de la viscosidad para butano a 423.59K.....	48
Gráfica 5.16.	Comportamiento de la viscosidad para butano a 444.59K.....	48
Gráfica 5.17.	Comportamiento de la viscosidad para butano a 460.93K.....	49
Gráfica 5.18.	Comportamiento de la viscosidad para butano a 510.93K.....	49
Gráfica 5.19.	Envolventes de fase para Metano en el plano P - $\mu$ .....	50
Gráfica 5.20.	Envolventes de fase para Etano en el plano P - $\mu$ . ....	51
Gráfica 5.21.	Envolventes de fase para Propano en el plano P - $\mu$ . ....	51
Gráfica 5.22.	Envolventes de fase para Butano en el plano P - $\mu$ . ....	52
Gráfica 5.23.	Envolventes de fase para Pentano en el plano P - $\mu$ . ....	52
Gráfica 5.24.	Envolventes de fase para Hexano en el plano P - $\mu$ . ....	53
Gráfica 5.25.	Envolventes de fase para Heptano en el plano P - $\mu$ . ....	53
Gráfica 5.26.	Envolventes de fase para Octano en el plano P - $\mu$ . ....	54

Gráfica 5.27. Envolventes de fase para Nonano en el plano P - $\mu$ .	54
Gráfica 5.28. Envolventes de fase para Decano en el plano P - $\mu$ .	55

## INDICE DE TABLAS

Tabla 3.1 Parámetros para diferentes ecuaciones de estado	6
Tabla 3.2 Correlaciones $\alpha(T)$ para algunos modelos	8
Tabla 3.3 Propiedades críticas de componentes puros	9
Tabla 3.4 Las Ecuaciones de Estado Cúbicas más importantes y la forma clásica de estimación de sus parámetros	13
Tabla 3.5 Parámetros de Lennard-Jones	15
Tabla 3.6 Expresiones para el cálculo de $\sigma$ y $\epsilon\kappa$	15
Tabla 3.7 Valores de la integral de colisión $\Omega\mu$ con respecto a la temperatura adimensional	16
Tabla 4.1 Fuentes utilizadas como base de datos para propiedades de los componentes puros	26
Tabla 4.2 Comparación del promedio de porcentajes de desviación obtenidos	29
Tabla 4.3 Comparación del promedio de porcentajes de error obtenidos	30
Tabla 4.4 Comparación del promedio de porcentajes de error para etano y butano	30
Tabla 4.5 Porcentaje de desviación con respecto al análisis gráfico de puntos sobre la Figura 1	31
Tabla 5.1 Tabla de propiedades para componentes puros	34
Tabla 5.2 Comparación de viscosidad para metano a 50 bar y % desviación relativa	35
Tabla 5.3 Resultados de viscosidad para metano a 1 atm	36
Tabla 5.4 Comparación de desviación relativa para metano	36
Tabla 5.5 Viscosidades calculadas a las condiciones de la referencia	38
Tabla 5.6 Viscosidades calculadas a las condiciones de la referencia	39
Tabla 5.7 Datos de viscosidad para etano y butano a 50 bar y 1 atm	40
Tabla 5.8 Comparación de resultados para etano y butano	41
Tabla 5.9 Comparación de resultados del análisis gráfico para metano	42
Tabla 5.10 Comparación de resultados del análisis gráfico para etano	45
Tabla 5.11 Comparación de resultados del análisis gráfico para etano	48

## INDICE DE FIGURAS

Figura 3.1 Relación P-V de un componente puro a temperaturas Subcríticas, críticas y supercríticas [6]	7
Figura 3.2 Gráfica $P - v - T$ [27]	18
Figura 4.1 Simulación de separador Flash en Aspen Plus®	27
Figura 4.3 Isotermas calculadas con el programa Viscosidad BR.nb para el caso de Metano	32
Figura 4.4 Isoterma 155°C calculada con el programa Viscosidad BR.nb	33
Figura 4.5 Diagrama P- $\mu$ para la región de equilibrio líquido-vapor	33

## NOMENCLATURA

$a$	Parámetro de atracción de la ecuación de estado	$v$	Volumen molar
API	America Petroleum Institute	$v_c$	Volumen crítico
AARD	Promedio de desviación relativa absoluta	$\tilde{v}_b$	Volumen molar de líquido saturado en el punto de ebullición normal
ARD	Promedio de desviación relativa	$\tilde{v}_m$	Volumen molar de sólido en el punto de fusión
$b$	Parámetro de repulsión de la ecuación de estado	$x_i$	Fracción molar del líquido
BR	Bonyadi-Rostami model	$y_i$	Fracción molar del vapor
DIPPR	Design Institute for Physical Properties	$Z$	Factor de compresibilidad
EOS	Ecuación de estado	$Z_c$	Factor de compresibilidad crítica
$f$	Fugacidad		
$f_i$	Fugacidad del componente i	$\alpha$	Parámetro de caracterización de la función de densidad de probabilidad
$k_{ij}$	Parámetro de interacción binaria	$\alpha(T)$	Parámetro alfa función de la temperatura de la ecuación de estado
MMb	Millones de barriles	$\beta$	Parámetro de caracterización de la función de densidad de probabilidad
MMbpe	Millones de barriles de petróleo crudo equivalente	$\varepsilon$	Energía característica
$M_w$	Masa molar	$k$	Constante de Boltzman
$n_i$	Moles del componente i	$\sigma$	Diámetro de colisión
NBP	Punto normal de ebullición	$\mu$	Viscosidad (Pa.s)
$P$	Presión	$\hat{\mu}_i$	Potencial químico del componente i
$P_c$	Presión crítica	$\omega$	Factor acéntrico
$P_r$	Presión reducida	$\Omega_\mu$	Integral de colisión
$PvT$	Presión-volumen-temperatura	$\eta$	Viscosidad cinemática
$P_{sat}$	Presión de saturación		Superíndices
$R$	Constante universal de los gases ideales	$L$	Líquido
RD	Desviación relativa	$V$	Vapor
SRK	Soave-Redlich-Kwong		
$T$	Temperatura		
$T_c$	Temperatura crítica		
$T_r$	Temperatura reducida		
$T_m$	Punto de fusión normal (1 atm)		
TPT	Temperatura de punto triple		

## 1. INTRODUCCIÓN

Dentro de la industria de los hidrocarburos existe un extenso campo de aplicación en la que la viscosidad resulta ser una propiedad imprescindible: simulación de yacimientos, producción y procesamiento de petróleo, flujo en tuberías, diseño de equipos de separación, entre otras no menos importantes.

La viscosidad es una propiedad que exhibe cambios importantes, la cual puede alcanzar valores del orden de miles de centipoise que van desde condiciones de superficie hasta condiciones de yacimiento, especialmente en el caso de crudos pesados. Hace algunos años, los crudos pesados y extrapesados se habían dejado de lado como recursos energéticos debido a las dificultades técnicas y costos asociados a su extracción del subsuelo. Sin embargo, esto cambió con el agotamiento de los grandes pozos de crudo convencional, de tal forma que actualmente en el mundo hay una creciente necesidad de conocimiento en este tema, especialmente en crudos pesados. Considerando que los crudos pesados son de importancia estratégica para México, debido a que el volumen de crudos ligeros es menor que el volumen de crudos pesados en las reservas. Por lo que es igualmente importante el desarrollo de metodologías confiables y precisas para la caracterización de la viscosidad de estos fluidos para el rango completo de condiciones a los que se someten en las operaciones de explotación y transformación industrial [1].

En el mundo, la mayor parte de recursos de petróleo corresponde a hidrocarburos viscosos y pesados [2]. Como dato, en México las reservas totales de hidrocarburos al 1 de enero de 2020 se estimaron en 17,962 millones de barriles de petróleo crudo equivalente (MMbpce). De éstas, 13,518 MMb (75.26%) correspondió a reservas de petróleo crudo, en las que 40.67% correspondieron a reservas probadas, 32.51% a reservas probables y 26.82% a reservas posibles [3].

En términos de la explotación, cuanto más viscoso es el petróleo más difícil resultará producirlo, debido a esto es muy importante calcular de manera adecuada las propiedades termodinámicas, propiedades de transporte, comportamiento de fases y especialmente la viscosidad. Los modelos que conectan a la densidad másica o API y la viscosidad no permiten la predicción de la totalidad de los aceites disponibles en los yacimientos. Más aún, los términos pesados y viscoso tienden a utilizarse en forma indistinta para describir el comportamiento de los hidrocarburos, la razón es porque los aceites pesados tienden a ser más viscosos que los convencionales. La viscosidad de los aceites convencionales se encuentra en el rango de 1 centipoise (cP) [0.001 Pa.s] (similar a la viscosidad del agua) a aproximadamente 10 cP [0.01 Pa.s]. Por otro lado, la viscosidad de los hidrocarburos pesados y extrapesados puede fluctuar entre menos de 20 cP y más de 1,000,000 cP [1].

Una de las complejidades de los hidrocarburos pesados radica, como ya se mencionó, en la dificultad para extraerlos, producirlos y refinarlos, ya que poseen altas concentraciones de metales y otros componentes que modifican su comportamiento reológico. Entre los elementos que mayor importancia tienen en la composición se encuentran las parafinas y los asfaltenos. Sin embargo, hay muchos otros hidrocarburos, como los saturados y aromáticos que también afectan las propiedades del flujo de los crudos, lo cual exige más esfuerzos e inversión para la refinación.

Con el incremento de la demanda de energía en la sociedad actual y la declinación de la producción de muchos de los yacimientos de petróleo convencionales, la atención de la industria en muchos lugares del mundo comienza a desplazarse hacia la explotación de petróleo pesado.

Aunque la densidad del petróleo es importante para evaluar el valor del recurso y estimar el rendimiento y los costos de refinación, la propiedad del fluido que más afecta a la producción y la recuperación es la viscosidad, pues como se dijo, cuanto más viscoso más difícil resulta su producción [4].

Para poder tener un panorama más amplio de lo que representa la viscosidad, es necesario comenzar a comprender lo que es un fluido de yacimiento, los tipos que existen y el comportamiento de la viscosidad en estos ante cambios en las condiciones a las que se someten.

Un fluido es cualquier sustancia que puede ser deformada y que no busca reestablecer su forma original, pueden ser líquidos y/o gases. Aquellos fluidos que siguen la ley de Newton son llamados Fluidos Newtonianos. En esta categoría se pueden encontrar todos los gases y líquidos simples tales como el agua e hidrocarburos ligeros. La viscosidad de estos fluidos es independiente de los esfuerzos y velocidad de corte, pero son dependientes de la presión, volumen y temperatura. Aquellos fluidos que no obedecen la Ley de Newton son denominados, Fluidos No Newtonianos y en este caso, la viscosidad es función de los esfuerzos y velocidad de corte, así como de las condiciones de presión, volumen y temperatura; estos fluidos a su vez pueden clasificarse en plásticos de Bingham, dilatantes y pseudoplásticos. En este trabajo los fluidos que se estudiaron se consideraron bajo un comportamiento Newtoniano [5].

Los hidrocarburos en los yacimientos se encuentran en dos fases, líquido y gas y éstas están en equilibrio, también se encuentra muchas veces una tercera fase que corresponde al acuífero.

Estos hidrocarburos son clasificados en las siguientes clases: parafinas, naftenos, aromáticos y heterocompuestos. Las parafinas son hidrocarburos saturados con cadenas continuas o divididas. Los átomos de carbono en las parafinas están enlazados con un solo enlace covalente.

Los naftenos son cicloparafinas; estas moléculas contienen una estructura de anillo saturada. El anillo saturado puede tener cinco, seis, ocasionalmente 7 átomos de carbono. Muchos naftenos en el petróleo tienen un lado de cadenas parafínicas y pueden tener más de un anillo en la molécula.

Los aromáticos son compuestos de hidrocarburos con al menos un anillo de benceno. Los aromáticos son clasificados por el número de anillos que tienen en su molécula; por ejemplo, mono-aromáticos, di-aromáticos y tri-aromáticos. Los aromáticos en el petróleo comúnmente cuentan con cadenas parafínicas y pueden incluir anillos de naftenos [1].

Los yacimientos de petróleo contienen fluidos que son mezclas con infinidad de especies químicas como hidrocarburos, materia orgánica, nitrógeno, oxígeno, sulfuros, no hidrocarburos y trazas de constituyentes metálicos como el níquel, vanadio y hierro; y con las técnicas de separación actuales resulta muy costoso identificar los cientos o

miles de componentes que se encuentran en una mezcla de crudo; incluso si se pudiera realizar una separación exacta, las propiedades críticas y otros parámetros que son necesarios para el modelado termodinámico y de propiedades de transporte no se tienen disponibles para los componentes más pesados de la mezcla, por ejemplo, en la base de datos de DIPPR Data Compilation la parafina más pesada disponible no supera los 40 carbonos [6].

Por tal motivo, las propiedades físicas de la fase líquida y gaseosa de los fluidos petroleros son fundamentales para los procesos de modelado, para decidir los mejores métodos de extracción, producción y procesamiento de un campo. Un paso crítico en la determinación del mejor método de recuperación de petróleo pesado es la caracterización de las propiedades de los fluidos de yacimiento. Al final de la clasificación de reservas y la selección de los intervalos de muestreo, las compañías recurren a las mediciones de las propiedades de los fluidos de pozo, especialmente la viscosidad. El conocimiento de la viscosidad en todo el yacimiento es fundamental para el modelado de la predicción y diseño de la producción en los procesos de recuperación de reservas.

En muchos casos se recurre al uso de simuladores que permiten obtener los diagramas de equilibrio de fase y otras herramientas termodinámicas para sistemas con compuestos puros y sus mezclas, calculados mediante el uso de ecuaciones de estado. Así mismo estos simuladores caracterizan y realizan cálculos sobre las propiedades de los fluidos (principalmente viscosidad), la cual es la principal ventaja de estos ya que no se requiere información experimental de todos los intervalos de temperatura, presión y composición [1].

En particular, la viscosidad presenta grandes variaciones en algunos casos incluso dentro del mismo yacimiento. También es utilizada en las ecuaciones de flujo de Navier-Stokes o en el modelo de Darcy para la predicción en los modelos de flujo dentro del dominio del yacimiento.

Como consecuencia del incremento del interés comercial por crudos pesados se deben desarrollar modelos confiables y precisos para la estimación de la viscosidad en fluidos de yacimiento en ambas fases, líquida y gaseosa.

Aunque numerosas representaciones gráficas y correlaciones para la viscosidad (empíricas o semi-empíricas) están disponibles en la literatura, hay tres inconvenientes en sus aplicaciones:

1. Los rangos y exactitud de aplicación son limitados.
2. Como la viscosidad de la fase líquida y la fase gas son calculados usando diferentes diagramas o correlaciones, no se puede registrar una transición suave cercana a la zona crítica.
3. La densidad es, en general, involucrada en la evaluación de la viscosidad del fluido y, por lo tanto, es preferible separar a la densidad de la correlación.

Las mayores ventajas del desarrollo de un modelo de viscosidad basado en una ecuación de estado (EOS) son:

1. La viscosidad de ambas fases líquido y gas pueden ser descritas por un modelo singular, logrando una transición suave de la viscosidad líquido/gas cerca de la zona crítica.
2. Ambos conjuntos de datos, de alta y baja presión, pueden ser correlacionadas y no se requiere la densidad para la evaluación de la viscosidad del fluido.
3. Correlaciones  $P$ - $v$ - $T$ ,  $V$ - $L$ - $E$  y cálculos de viscosidad de fluidos pueden ser representados usando un único modelo de EOS y así la consistencia termodinámica en la simulación numérica del yacimiento se mejora.

Desde la ecuación de estado de Patel-Teja (PT EOS) de dos parámetros propuestos por Patel y Teja [7], la ecuación de estado Soave-Redlich-Kwong (SRK EOS) con dos parámetros propuestos por Soave, Redlich y Kwong [8]; y la ecuación de estado Peng-Robinson (PR EOS) de tres parámetros propuestos por Peng y Robinson [9], son sistemáticamente usadas en la simulación de procesos y en cálculos de simulación numérica de yacimientos. Por otra parte, Mohammad Bonyadi y Mina Rostami [10] desarrollaron un modelo basado en la estructura de la ecuación de estado para el cálculo de viscosidad, en particular el modelo SRK como punto de partida.

Este nuevo modelo se propuso para representar las propiedades de hidrocarburos ligeros,  $\text{CO}_2$  y  $\text{N}_2$  para ambas fases líquido y gas, para bajas y altas presión y temperatura. Este modelo se ha comparado por los autores con los propuestos por Guo et al [11], Fan-Wang [12] y Lohrenz- Bray-Clark [13]. Además, los resultados de los cálculos realizados a 17 componentes puros, 38 mezclas binarias, 10 simples y 20 mezclas complejas, proporcionaron valores que muestran la superioridad de su modelo comparado con otros modelos de viscosidad.

Por esta razón, en este trabajo se busca construir un procedimiento de cálculo de la viscosidad aplicando el modelo propuesto por Bonyadi y Rostami a una serie de parafinas y en su caso, recomendarlo como referencia para el cálculo en simulación numérica de yacimientos.

## **2. OBJETIVOS**

### **2.1. Objetivo general:**

Estudiar el modelo Boyandi - Rostami, basado en la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK); mediante el cálculo de viscosidades en compuestos parafínicos para observar la fiabilidad de sus resultados y establecer si este modelo es adecuado para aplicaciones en el cálculo de viscosidades en fluidos de yacimiento.

### **2.2. Objetivos particulares:**

-Programar el modelo presentado para el cálculo de las viscosidades, haciendo uso de la herramienta Wolfram Mathematica.

- Calcular la viscosidad para una serie de parafinas en diferentes condiciones de presión y temperatura, y comparar sus resultados con fuentes bibliográficas, así como fuentes experimentales.
- Obtener resultados de viscosidad a condiciones de saturación y verificar el comportamiento fenomenológico de las sustancias parafínicas.
- Concluir si el modelo propuesto puede ser utilizado como referencia para cálculo de la viscosidad en fluidos de yacimiento, en simulación de procesos y simulación numérica de yacimiento.

### 3. MARCO TEÓRICO

#### 3.1. Ecuaciones de estado

Una ecuación de estado (EOS) es una relación algebraica entre Presión, Volumen y Temperatura. Estos describen el comportamiento volumétrico y de fase para componentes puro y en mezclas, donde sólo se requieren las propiedades críticas y el factor acéntrico de cada componente [14], en el caso de mezclas, también son requeridos los parámetros de interacción binaria  $K_{ij}$ .

El comportamiento volumétrico se calcula resolviendo una ecuación cúbica simple, usualmente expresado en términos del factor de compresibilidad  $Z = Pv/RT$ .

$$Z^3 + A_2Z^2 + A_1Z + A_0 = 0 \quad (3.1)$$

Donde las constantes  $A_0, A_1$  y  $A_2$  son funciones de presión, temperatura y composición de fase.

El equilibrio de fase se calcula con la ecuación de estado al satisfacer la condición de equilibrio térmico y mecánico. Para un sistema de dos fases (liquido-vapor), el potencial químico de la fase líquida  $\hat{\mu}_i^L$  debe ser igual al potencial químico de la fase vapor  $\hat{\mu}_i^V$  ambas para un mismo componente del sistema y de igual forma para cada uno de los componentes, es decir:

$$\hat{\mu}_i^L = \hat{\mu}_i^V \quad (3.2)$$

El potencial químico usualmente es expresado en términos de la fugacidad  $f_i$ .

$$\hat{\mu}_i = \mu_i^0 + RT \ln \left( \frac{\hat{f}_i}{f_{0_i}} \right) \quad (3.3)$$

El término  $\mu_i^0$  representa el potencial químico del componente  $i$  puro como gas ideal a la temperatura del sistema y la presión de referencia  $P_0$ . El término  $f_{0_i}$  es la fugacidad del componente  $i$  puro en las mismas condiciones de presión y temperatura. Al sustituir la ecuación (3.3) en la condición de equilibrio se cumple la igualdad:

$$\hat{f}_i^L = \hat{f}_i^V \quad (3.4)$$

Los coeficientes de fugacidad  $\hat{\Phi}_i^L$  y  $\hat{\Phi}_i^V$  del componente  $i$  en la mezcla están dados por las siguientes ecuaciones:

$$\ln \hat{\Phi}_i^L = \ln \frac{f_i^L}{x_i P} = \frac{1}{RT} \int_v^\infty \left( \left( \frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,v,n_{j \neq 1}} - \frac{RT}{v} \right) dv - \ln Z_i^L \quad (3.5)$$

$$\ln \hat{\Phi}_i^V = \ln \frac{f_i^V}{y_i P} = \frac{1}{RT} \int_v^\infty \left( \left( \frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,v,n_{j \neq 1}} - \frac{RT}{v} \right) dv - \ln Z_i^V \quad (3.6)$$

### 3.2. Ecuaciones de estado cúbicas

Ahora bien, si la ecuación de estado representa el comportamiento  $PVT$  para líquidos y vapores, debe abarcar un amplio intervalo de temperaturas y presiones. Pero a pesar de ello, no debe ser tan compleja como para presentar grandes dificultades numéricas o analíticas para su aplicación. Las ecuaciones cúbicas en el volumen molar ofrecen una fiabilidad entre la generalidad y la simplicidad adecuadas para muchos fines. En realidad, las ecuaciones cúbicas son las más sencillas, pero capaces de representar el comportamiento tanto del líquido como del vapor.

Desde la introducción de la ecuación de estado de J.D. van der Waals en 1873, algunas ecuaciones de estado cúbicas han sido propuestas, por ejemplo, la ecuación de estado de Redlich y Kwong en 1949, Peng y Robinson en 1976 y Martin en 1979, por mencionar algunos. La mayoría de estas ecuaciones conservan el término repulsivo original de van der Waals  $RT/(v - b)$ , modificando sólo el denominador en el término atractivo. La ecuación de Redlich y Kwong ha sido la base más popular para el desarrollo de nuevas ecuaciones de estado [14].

La mayoría de las aplicaciones de ingeniería petrolera confían en la PR EOS o en la modificación de la RK EOS. Varias de estas ecuaciones modificadas han encontrado aceptación con la modificación de Soave (SRK EOS), siendo el más simple y ampliamente utilizado.

Todas las propuestas de ecuaciones de estado cúbicas son casos especiales de la ecuación cúbica genérica (3.7) [15], cada una se obtiene al dar un valor específico a los parámetros  $u$  y  $w$ ; La tabla (3.1) muestra un ejemplo para tres modelos distintos.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2+ubv+wb^2} \quad (3.7)$$

Tabla 3.1 Parámetros para diferentes ecuaciones de estado.

EOS	$u$	$w$	$\Omega_a$	$\Omega_b$
van der Waals	0	0	27/64	1/8
Redlich - Kwong	1	0	0.42747	0.08664
Peng - Robinson	2	-1	0.45757	0.7780

La variable  $v$  es el volumen molar,  $R$  la constante universal de los gases, los parámetros  $a$  (*de atracción*) y  $b$  (*de repulsión*) de la ecuación (3.7) se determinan por medio de estimaciones adecuadas provenientes de las constantes críticas  $T_c$ ,  $P_c$ , aplicando la condición de van der Waals de que la primera y la segunda derivada de la presión con respecto al volumen son cero en el punto crítico, ecuación (3.8). Ya que la isoterma crítica exhibe una inflexión horizontal en el punto crítico, tal como se muestra en la figura (3.1)

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T, P_c, T_c, v_c} = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_{T, P_c, T_c, v_c} = 0 \quad (3.8)$$

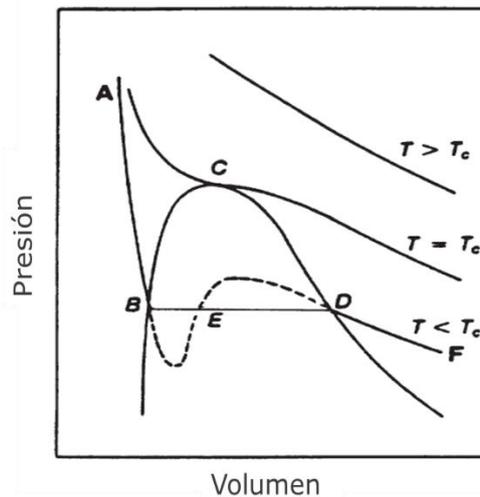


Figura 3.1 Relación P-V de un componente puro a temperaturas Subcríticas, críticas y supercríticas [6].

De esta condición matemática, al evaluar la EOS se obtiene el parámetro  $a$  en su forma generalizada:

$$a = \Omega_a \frac{(RT_c)^2}{P_c} \alpha(T) \quad (3.9)$$

El término  $\Omega_a$  es una constante característica de la ecuación de estado empleada.

Para el parámetro  $b$  al evaluar la EOS se obtiene su forma generalizada:

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \quad (3.10)$$

Donde  $\Omega_b$  es una constante característica de la ecuación de estado empleada; la tabla (3.1) muestra algunos ejemplos de esta cantidad. El parámetro  $\alpha(T)$  es una expresión empírica específica para cada ecuación y considera la dependencia de la temperatura, para este parámetro se tienen diferentes correlaciones reportadas, tal como se muestra en la tabla (3.2).

La ecuación (3.7) también puede ser escrita en términos del factor de compresibilidad  $Z$ :

$$Z^3 + (Bu - B - 1)Z^2 + (B^2w - B^2u - Bu + A)Z - (B^3w + B^2w + AB) = 0 \quad (3.11)$$

Donde:

$$Z = \frac{Pv}{RT} \quad (3.12)$$

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad (3.13)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (3.14)$$

Los valores críticos y de factor acéntrico ( $T_c$ ,  $P_c$ ,  $v_c$ ,  $\omega$ ) que se emplearon para los componentes puros fueron tomados de la base de datos del simulador de procesos ASPEN-HYSIS® V10, y son presentados en la tabla (3.3).

Tabla 3.2 Correlaciones  $\alpha(T)$  para algunos modelos.

	<b>T &lt; T<sub>c</sub></b>	<b>T &gt; T<sub>c</sub></b>	<b>Parámetros</b>
<b>Soave [8]</b>	$\alpha^{1/2} = 1 + m(1 - \sqrt{T_r})$ $m = 0.48508 + 1.55171\omega - 0.151613\omega^2$	La misma	--
<b>Peng and Robinson [9]</b>	$\alpha^{1/2} = 1 + m(1 - \sqrt{T_r})$ $m = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$	La misma	--
<b>Mathias [16]</b>	$\alpha^{1/2} = 1 + m(1 - \sqrt{T_r}) - A(1 - T_r)(0.7 - T_r)$ $m = 0.48508 + 1.55191\omega - 0.15613\omega^2$	$\alpha = \exp\left[\left(\frac{c-1}{c}\right)(1 - T_r^c)\right]$ $c = 1 + \frac{m}{2} + 0.3A$	A
<b>Stryjek and Vera [17]</b>	$\alpha^{1/2} = 1 + \kappa_0(1 - \sqrt{T_r}) - \kappa_1(1 - T_r)(0.7 - T_r)$ $\kappa_0 = 0.378893 + 1.4897153\omega - 0.17131848\omega^2 + 0.0196554\omega^3$	$\alpha^{1/2} = 1 + \kappa_0(1 - \sqrt{T_r})$	A
<b>ASPEN - HYSYS [15]</b>	$\alpha^{1/2} = 1 + k(1 - \sqrt{T_r})$ $k = k_0 + [k_1 + (k_2 - k_3T_r)(1 - T_r^{k_4})] [(1 + \sqrt{T_r})(0.7 - T_r)]T^{k_5}$ $k_0 = A + B\omega + C\omega^2 + D\omega^3$	La misma	$k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, A, B, C, D$

Tabla 3.3 Propiedades críticas de componentes puros.

COMPONENTE	$T_c$ [K]	$P_c$ [bar]	$\omega$
N <sub>2</sub>	126.1940	33.9437	0.0400
NH <sub>3</sub>	405.5490	112.7690	0.2550
CO <sub>2</sub>	304.1000	73.7000	0.2389
Metano	190.6990	46.4068	0.0115
Etano	305.4280	48.8385	0.0986
Propano	369.8980	42.5666	0.1524
n-Butano	425.1990	37.9662	0.2010
n-Pentano	469.6000	33.7512	0.2539
n-Hexano	507.8980	30.3162	0.3007
n-Heptano	540.1580	27.3678	0.3498
n-Octano	568.5980	24.9662	0.4018
n-Nonano	594.5980	23.0007	0.4455
n-Decano	617.5980	21.0755	0.4885

Para las mezclas multi-componentes, los parámetros  $a$  y  $b$  se calculan utilizando las siguientes reglas de mezclado de van der Waals:

$$a = \sum_j^m \sum_j^m x_i x_j a_{ij} \quad (3.15)$$

$$a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij}) \quad (3.16)$$

$$b = \sum_j^m x_i b_i \quad (3.17)$$

Donde el término  $k_{ij}$  son los parámetros de interacción binarios y son determinados a partir de datos de equilibrio líquido-vapor de sistemas binarios. Para ciertas mezclas de hidrocarburos existen reportados en la literatura y en las bases de datos de los simuladores de proceso valores para estos parámetros.

### 3.2.1 Ecuación de estado de van de Waals (vdW EOS)

La primera ecuación de estado cúbica que se considera práctica fue propuesta por Johannes Diderik van der Waals (1837-1923) en 1873. La ecuación ofrece una simple y cualitativa relación precisa entre presión, temperatura y volumen molar [18].

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \quad (3.18)$$

Donde las constantes de  $a$  y  $b$  están dadas por las expresiones:

$$a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (3.19)$$

$$b = \frac{1}{8} \frac{RT_c}{P_c} \quad (3.20)$$

Aunque con estas ecuaciones no se obtienen los mejores resultados posibles, si proporcionan valores razonables que casi siempre se puede determinar, ya que las temperaturas y presiones críticas con frecuencia son conocidas o se calculan de manera fiable.

El volumen crítico está dado por  $v_c = (3/8)(RT_c/P_c)$  y al sustituirse en la ecuación del factor de compresibilidad la reduce inmediatamente a:

$$Z_c = \frac{P_c v_c}{RT_c} = \frac{3}{8} \quad (3.21)$$

La ecuación de van der Waals también puede ser escrita en términos del factor de compresibilidad  $Z$ .

$$Z^3 + (B + 1)Z^2 + AZ - AB = 0 \quad (3.22)$$

Donde A y B están dados por las ecuaciones:

$$A = a \frac{P}{(RT)^2} = \frac{27}{64} \frac{P_r}{T_c^2} \quad (3.23)$$

$$B = b \frac{P}{RT} = \frac{1}{8} \frac{P_r}{T_r} \quad (3.23)$$

Los términos  $P_r$  y  $T_r$  son los valores de presión reducida y temperatura reducida, respectivamente, y son calculados por  $P_r = P/P_c$  y  $T_r = T/T_c$ .

### 3.2.2 Ecuación de estado de Redlich – Kwong (RK EOS)

El desarrollo moderno de las ecuaciones de estado cúbicas se inició en 1949 con la publicación de la ecuación de Redlich/Kwong (RK) [19]:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)\sqrt{T_r}} \quad (3.24)$$

Donde  $a$  y  $b$  también están relacionadas con las propiedades críticas por las ecuaciones:

$$a = \frac{0.42748R^2T_c^{2.5}}{P_c} \quad (3.25)$$

$$b = \frac{0.08664RT_c}{P_c} \quad (3.26)$$

Y en términos del factor  $Z$ , la ecuación cúbica se representa por:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B^2 - B)Z - AB = 0 \quad (3.27)$$

Donde A y B están dadas por las ecuaciones:

$$A^2 = \frac{0.42748T_c^{2.5}}{P_c T^{2.5}} \quad (3.28)$$

$$B = \frac{0.086647T_c}{P_c T} \quad (3.29)$$

En este caso el valor de  $Z_c = 1/3$  y el coeficiente de fugacidad para un componente puro puede ser estimado por:

$$\ln \Phi = \int_0^P \frac{Z-1}{P} dP = Z - 1 - \ln(Z - B) - \frac{A^2}{B} \ln \left( 1 + \frac{B}{Z} \right) \quad (3.30)$$

Para mezclas multicomponentes, de igual forma se usan las reglas de mezclado de las ecuaciones (3.15), (3.16) y (3.17).

### 3.2.3 Ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK EOS)

La ecuación de Soave-Redlich-Kwong [8] es la propuesta de modificación a la RK EOS más ampliamente usada hasta la fecha. Ésta es una excelente herramienta de predicción para sistemas que requieren de una precisión en razonable del equilibrio líquido-vapor y propiedades de vapor.

Su modelo y variables se presentan en las siguientes ecuaciones:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)} \quad (3.31)$$

O en términos del factor Z:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B^2 - B)Z - AB = 0 \quad (3.32)$$

Con  $Z_c = 1/3$ . Además, con la ecuación de estado, las constantes  $a$  y  $b$  se definen como:

$$a = 0.42748 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha(T_r) \quad (3.33)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (3.34)$$

$$A = 0.42748 \frac{P_r}{T_r^2} \alpha(T_r) \quad (3.35)$$

$$B = 0.08664 \frac{P_r}{T_r} \quad (3.36)$$

La expresión de fugacidad de un componente puro es:

$$\ln \frac{f}{P} = \ln \Phi = Z - 1 - \ln(Z - B) - \frac{A}{B} \ln \left( 1 - \frac{B}{Z} \right) \quad (3.37)$$

El término  $\alpha(T_r)$  es una corrección al parámetro  $a$ , propuesto por Soave [20] y está representado por la siguiente ecuación:

$$\alpha(T_r) = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (3.38)$$

Donde el parámetro  $m$  es calculado usando el factor acéntrico  $\omega$  del componente como:

$$m = 0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (3.39)$$

### 3.2.4 Ecuación de estado de Peng – Robinson (PR EOS)

En 1976, Peng y Robinson propusieron una ecuación de dos constantes que creó grandes expectativas de mejorar las predicciones de ecuación de estado y en particular, mejorar la predicción de la densidad de líquidos [9]. La PR EOS está dada por:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)+b(v-b)} \quad (3.40)$$

Escrita en términos del factor  $Z$ :

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad (3.41)$$

En este caso, el valor de  $Z_c = 0.3074$  y las constantes  $a, b$ , el parámetro de corrección  $\alpha(T_r)$  y el parámetro  $m$  son representadas por las siguientes ecuaciones:

$$a = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha(T_r) \quad (3.42)$$

$$b = 0.07780 \frac{RT_c}{P_c} \quad (3.43)$$

$$\alpha(T_r) = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2 \quad (3.44)$$

$$m = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2 \quad (3.45)$$

Cuando  $\omega > 0.49$  se utiliza la siguiente corrección para componentes pesados [21].

$$m = 0.3796 + 1.485\omega - 0.1644\omega^2 + 0.01667\omega^3 \quad (3.46)$$

La expresión para el cálculo de la fugacidad de un componente puro y para mezclas está dada por las ecuaciones (3.47) y (3.48):

$$\ln \frac{f}{P} = \ln \Phi = Z - 1 - \ln(Z - B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \ln \left[ \frac{Z+(1+\sqrt{2})B}{Z-(1-\sqrt{2})B} \right] \quad (3.47)$$

$$\ln \frac{f_i}{y_i P} = \ln \Phi_i = \frac{B_i}{B} (Z - 1) - \ln(Z - B) - \frac{A}{2\sqrt{2}B} \left( \frac{B_i}{B} - \frac{2}{A} \sum_{j=1}^N y_j A_{ij} \right) \ln \left[ \frac{Z+(1+\sqrt{2})B}{Z-(1-\sqrt{2})B} \right] \quad (3.48)$$

En la siguiente tabla se presenta un resumen de las ecuaciones cúbicas más utilizadas para la predicción de propiedades.

Tabla 3.4 Las Ecuaciones de Estado Cúbicas más importantes y la forma clásica de estimación de sus parámetros .

EoS	Equation	Parameters	Critical Compressibility factor
van der Waals (vdW) [18]	$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2}$	$a = \frac{27}{64} \frac{R^2 T_c^2}{P_c}$ $b = \frac{1}{8} \frac{RT_c}{P_c}$	$Z_c = 3/8$
Redlich - Kwong (RK) [19]	$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)\sqrt{T_r}}$	$a = \frac{0.42748R^2 T_c^{2.5}}{P_c}$ $b = \frac{0.08664RT_c}{P_c}$	$Z_c = 1/3$
Soave-Redlich-Kwong (SRK)	$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)}$	$a = 0.42748 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha(T_r)$ $b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c}$ $\alpha(T_r) = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2$ $m = 0.480 + 1.574\omega - 0.176\omega^2$	$Z_c = 1/3$
Soave [8]			
Peng - Robinson (PR)	$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b) + b(v-b)}$	$a = 0.45724 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \alpha(T_r)$ $b = 0.07780 \frac{RT_c}{P_c}$ $\alpha(T_r) = [1 + m(1 - T_r^{0.5})]^2$ $m = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$ $\omega > 0.49$ $m = 0.3796 + 1.485\omega - 0.1644\omega^2 + 0.01667\omega^3$	$Z_c = 0.3070$
Peng - Robinson [9]			

### 3.3. Modelos de viscosidad

#### 3.3.1 Definición de la viscosidad como propiedad de transporte

La viscosidad es la propiedad física que caracteriza la resistencia al flujo de los fluidos, como resultado de un esfuerzo de corte [5]. La viscosidad es función de la temperatura y la presión, un incremento en la temperatura causa una disminución en la viscosidad, así como también un decremento en la presión causa una disminución, porque la distancia molecular promedio se incrementa y por lo tanto la disipación viscosa disminuye, este fenómeno puede observarse usualmente en líquidos, aunque para gases a baja densidad la viscosidad incrementa con el incremento de temperatura [5].

Existen tres tipos de viscosidad:

1. Viscosidad dinámica o absoluta, denominada  $\mu$  y definida con la ley de newton de la viscosidad.
2. Viscosidad aparente, se define como el cociente entre el esfuerzo cortante y la velocidad de deformación. Éste término es el que se utiliza al hablar de viscosidad para fluidos no newtonianos.

3. Viscosidad cinemática, denotada como  $\eta$  relaciona la viscosidad dinámica con la densidad del fluido utilizado.  $\eta = \mu/\rho$

Como se comentó anteriormente, la viscosidad es una función dependiente de la presión y temperatura, por lo que en el cálculo del comportamiento de fases fluidas y el cálculo de las composiciones en el equilibrio de una mezcla multi-componente a condiciones específicas de presión y temperatura, se requiere de un modelo termodinámico que relacione dichas variables y que pueda describir de manera confiable el sistema de estudio.

Existen muchos modelos disponibles para la estimación de viscosidad de hidrocarburos, pero ninguna se ha usado como un método estándar en la industria petrolera. Debido a que la composición de los fluidos de yacimiento es muy compleja y en ocasiones indefinida. Estos modelos son clasificados en tres principales grupos: modelos teóricos, semi-teóricos y empíricos [22]. Los modelos de Eyring y de Chapman Enskog son considerados como modelos teóricos ya que su fundamento se encuentra en mecánica estática. Estos modelos son usados para gases de hidrocarburos, pero muy poco usados para hidrocarburos en fase líquida ya que sus resultados no son satisfactorios.

Por su parte, los modelos semi-teóricos tienen su fundamento en teorías como el principio de estados correspondientes, la teoría de fricción (F-Theory) o el cociente de reacción de Eyring. La última categoría es la de los modelos empíricos, éstos son derivados de datos experimentales y la relación existente de la viscosidad de líquidos o gases a la presión, temperatura y/o densidad del fluido [22].

### 3.3.2 Teoría cinética de Chapman-Enskog

La "teoría cinética de los gases" fue desarrollada de forma independiente por Sydney Chapman en Inglaterra y por David Enskog en Suiza entre 1910 y 1920 [23]. Este modelo asume cuatro suposiciones: (1) el gas se encuentra suficientemente diluido para que solo ocurran colisiones binarias; (2) el movimiento de las moléculas durante la colisión puede ser descrita por la mecánica clásica; (3) sólo ocurren colisiones elásticas; (4) las fuerzas intramoleculares actúan sólo entre centros fijos de las moléculas, por ejemplo, la función de potencial intramolecular es esféricamente simétrica. Con estas restricciones, el modelo de gas ideal resulta aplicable para altas temperaturas y bajas presiones.

El modelo Chapman-Enskog también ofrece expresiones para las propiedades de transporte en términos de la *función de energía potencial*  $\varphi(r)$ , donde  $r$  es la distancia entre un par de moléculas que experimentan una colisión. La forma exacta de la función  $\varphi(r)$  no es conocida, pero se han desarrollado diversos modelos para describir esta interacción, aunque una de las más satisfactorias expresiones empíricas es la Lennard-Jones, dada por:

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3.49)$$

Donde  $\sigma$  es el diámetro característico de las moléculas, comúnmente llamado *diámetro de colisión* y  $\varepsilon$  es la energía de atracción máxima entre el par de moléculas, ésta suele dividirse entre la constante de Boltzman  $\kappa$  [5].

En el caso de la viscosidad, la teoría cinética de Chapman-Enskog predice la siguiente ecuación para un gas a baja presión.

$$\mu = 2.6693 \times 10^{-5} \frac{\sqrt{MT}}{\sigma^2 \Omega_\mu} \quad (3.50)$$

Aquí,  $\Omega_\mu$  representa la integral de colisión y  $M$  el peso molecular.

La tabla siguiente muestra el valor de los parámetros de Lennard-Jones ( $\sigma$ ,  $\varepsilon/\kappa$ ) para algunas sustancias.

Tabla 3.5 Parámetros de Lennard-Jones [5].

Sustancia	$\sigma$	$\varepsilon/\kappa$	Sustancia	$\sigma$	$\varepsilon/\kappa$
	(Å)	(K)		(Å)	(K)
H <sub>2</sub>	2.915	38	CH <sub>4</sub>	3.780	154
He	2.576	10.2	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>	4.114	212
Ne	2.789	35.7	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	4.228	216
Ar	3.432	122.4	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	4.388	232
Kr	3.675	170	C <sub>3</sub> H <sub>4</sub>	4.742	261
Xe	4.009	234.7	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>	4.766	275
N <sub>2</sub>	3.667	99.8	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	4.934	273
O <sub>2</sub>	3.433	113	<i>n</i> -C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	5.604	305
CO	3.590	110	<i>i</i> -C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	5.393	295
CO <sub>2</sub>	3.996	190	<i>n</i> -C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	5.850	326
NO	3.470	119	<i>i</i> -C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	5.812	327
N <sub>2</sub> O	3.879	220	C(CH <sub>3</sub> ) <sub>4</sub>	5.759	312
SO <sub>2</sub>	4.026	363	<i>n</i> -C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	6.264	342
F <sub>2</sub>	3.653	112	<i>n</i> -C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	6.663	352
Cl <sub>2</sub>	4.115	357	<i>n</i> -C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	7.035	361
Br <sub>2</sub>	4.268	520	<i>n</i> -C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	7.463	351
I <sub>2</sub>	4.982	550	Benceno	5.443	387

Cuando  $\sigma$  y  $\varepsilon/\kappa$  no se conocen, pueden ser estimados a partir de propiedades del fluido en el punto crítico, en el punto normal de ebullición, en el punto de fusión por las siguientes expresiones:

Tabla 3.6 Expresiones para el cálculo de  $\sigma$  y  $\varepsilon/\kappa$  [5].

Parámetro	Punto crítico (preferible)	Punto crítico (alternativa)	Punto de ebullición	Punto de fusión
$\sigma$	$0.841v_c^{1/3}$	$2.44 \left(\frac{T_c}{P_c}\right)^{1/3}$	$1.166\tilde{v}_b^{1/3}$	$1.222\tilde{v}_m^{1/3}$
$\varepsilon/\kappa$	$0.77T_c$	$0.77T_c$	$0.115T_b$	$1.92T_m$

Y la integral de colisión  $\Omega_{\mu}$  puede ser consultada en la siguiente tabla como una función de la temperatura adimensional, definida como:

$$T^* = \frac{\kappa T}{\varepsilon} \quad (3.51)$$

Tabla 3.7 Valores de la integral de colisión  $\Omega_{\mu}$  con respecto a la temperatura adimensional [5].

$T^*$	$\Omega_{\mu}$	$T^*$	$\Omega_{\mu}$	$T^*$	$\Omega_{\mu}$	$T^*$	$\Omega_{\mu}$
0.25	3.0353	1.3	1.4	2.7	1.07	4.8	0.9326
0.3	2.8458	1.35	1.376	2.8	1.0591	4.9	0.9288
0.35	2.6791	1.4	1.3538	2.9	1.0489	5	0.9252
0.4	2.5316	1.45	1.3331	3	1.0394	6	0.8948
0.45	2.4003	1.5	1.3139	3.1	1.0304	7	0.8719
0.5	2.2831	1.55	1.2959	3.2	1.022	8	0.8535
0.55	2.1781	1.6	1.2791	3.3	1.0141	9	0.8382
0.6	2.0839	1.65	1.2633	3.4	1.0066	10	0.8249
0.65	1.9991	1.7	1.2486	3.5	0.9995	12	0.8026
0.7	1.9226	1.75	1.2347	3.6	0.9927	14	0.7844
0.75	1.8535	1.8	1.2216	3.7	0.9864	16	0.769
0.8	1.7909	1.85	1.2092	3.8	0.9803	18	0.7556
0.85	1.7341	1.9	1.1975	3.9	0.9745	20	0.7439
0.9	1.6825	1.95	1.1865	4	0.969	25	0.7196
0.95	1.6354	2	1.176	4.1	0.9637	30	0.7003
1	1.5925	2.1	1.1565	4.2	0.9587	35	0.6844
1.05	1.5533	2.2	1.1388	4.3	0.9539	40	0.671
1.1	1.5173	2.3	1.1227	4.4	0.9493	50	0.6491
1.15	1.4843	2.4	1.1079	4.5	0.9448	75	0.6111
1.2	1.4539	2.5	1.0943	4.6	0.9406	100	0.5855
1.25	1.4259	2.6	1.0817	4.7	0.9365	150	0.5512

### 3.3.3 Teoría de Estados Correspondientes

De acuerdo al principio de estados correspondientes establecido por van der Waals, la propiedad adimensional de una sustancia es igual a la de otra sustancia de referencia cuando ambas son evaluadas a las mismas condiciones reducidas ( $T_r, P_r, v_r$ ). Ely y Hanley [24] en 1981 propusieron la versión extendida del modelo de estados correspondientes para el cálculo de viscosidad, dicha versión requería de la viscosidad de un fluido de referencia y correlaciones de densidad junto con propiedades críticas, factor acéntrico y masa molar.

Esta versión extendida de Ely y Hanley, que parte del principio de estados correspondientes, también ha sido utilizado por otros científicos como Baltau (1982), Johnson et al (1987), Pedersen et al (1984) [22].

En el caso de Petersen-Knudsen-Fredenslund [25], desarrollaron un modelo para predecir la viscosidad de fluidos de yacimiento con base en el principio de los estados

correspondientes tomando al metano y decano como componentes de referencia. Esta propuesta parte de que la viscosidad de un componente o una mezcla está determinada por las viscosidades reducidas de los componentes de referencia usando el peso molecular como un parámetro de interpolación.

### 3.3.4 Teoría de la Fricción

La teoría de fricción o teoría F desarrollada por Sergio Quiñones Cisneros [26], fue utilizada para la predicción de viscosidad de fluidos de yacimiento. Su teoría se basa en los conceptos de fricción de la mecánica clásica y de la teoría de van der Waals. En su propuesta, la viscosidad de los fluidos densos, que es caracterizada por un flujo cortante puro, es vista como una propiedad mecánica en lugar de una de transporte. Éste método separa la viscosidad en términos de gas disuelto y otro de fricción, estableciendo una relación entre la presión atractiva y repulsiva de van der Waals y la ley de fricción de Amontons-Coulomb.

### 3.4. Modelo de viscosidad cúbicas

Las ecuaciones cúbicas, como se habló de ellas en el apartado 3.2, son de los modelos más utilizados por distintas razones, uno de las principales es que la ecuación cúbica se resuelve analíticamente, por lo que, al obtener las raíces, éstas pueden representar tanto a la fase líquida como a la fase vapor. Dichos modelos han recibido una gran aceptación en la industria petrolera debido a la capacidad de predecir el comportamiento de fases en sistemas a diferentes presiones y temperaturas.

En los innumerables trabajos que se han realizado con anterioridad, para la creación de un modelo confiable para el cálculo de viscosidad, se han visto restringidos por tres características principales [27].

- Aplicables a una sola fase.
- Usados para ciertos compuestos específicos.
- Empleados normalmente en ciertas regiones de temperatura.

Es por esta razón que, los esfuerzos de la ciencia se han enfocado en formular nuevos modelos basados en ecuaciones de estado, permitiendo así, calcular la viscosidad como función de presión, temperatura y composición. Y, debido a que estos modelos están basados en principios teóricos, es de esperar que su rango de aplicación y precisión sean más amplios que los de las correlaciones empíricas. Por otro lado, estos modelos también ofrecen la ventaja de ser aplicados a la fase líquida y la fase vapor.

#### 3.4.1 Analogía $P - v - T$ y $T - \mu - P$

En 1912, Philips observó la analogía topológica de las gráficas  $P - v - T$  mostrada en la figura (3.2) y la gráfica  $T - \mu - P$  mostrada en la figura (3.3).

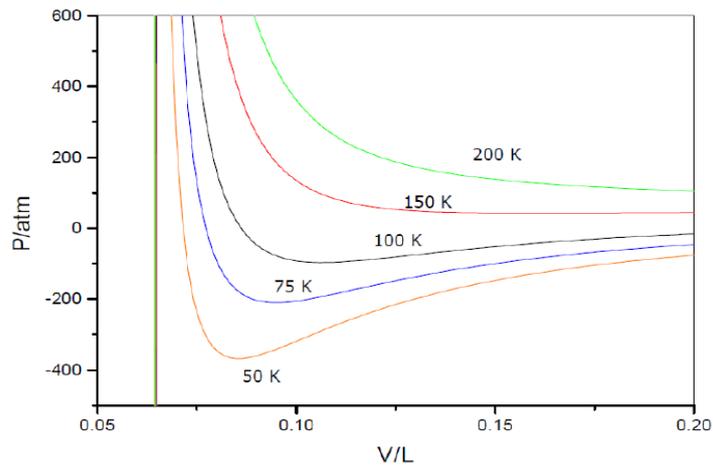


Figura 3.2 Gráfica  $P - v - T$  [27]

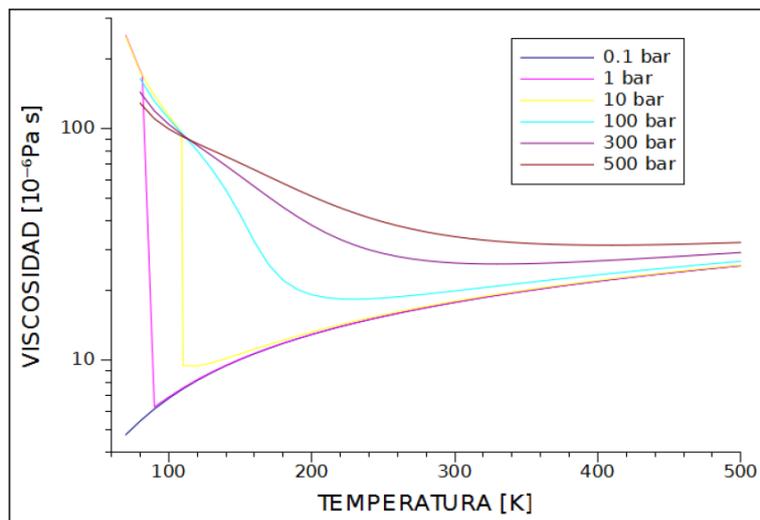
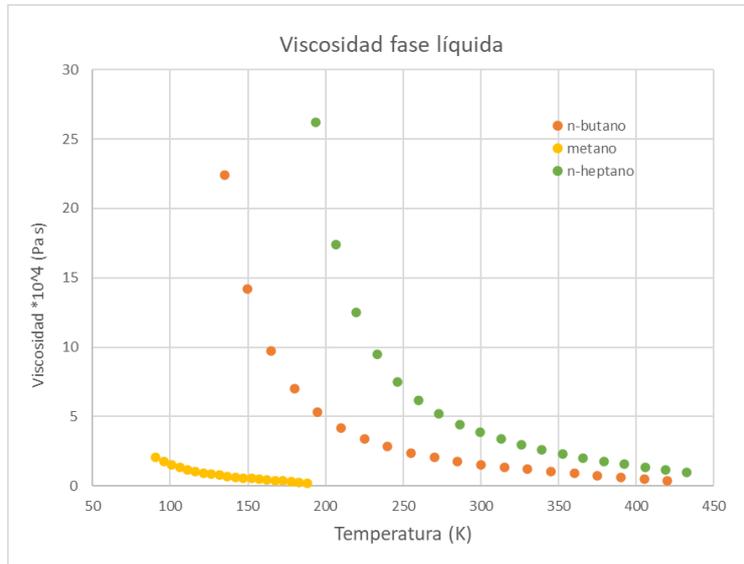


Figura 3.3 Gráfica  $T - \mu - P$  [27]

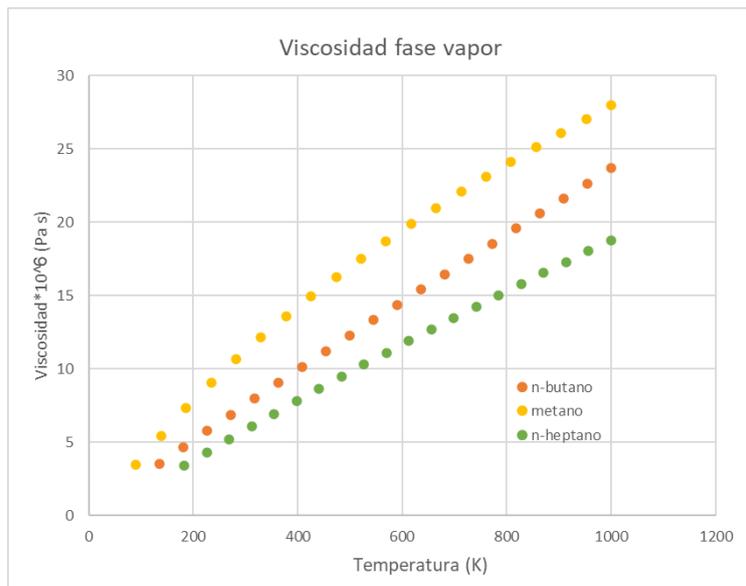
Basándose en esta analogía, en 1968 Little y Kennedy [28] propusieron un modelo que tomaba como base la ecuación de estado de van der Waals encontrando así, el primer modelo basado en una EOS que abarcara ambas fases de manera simultánea, en la que se intercambiaron las posiciones de  $T$  y  $P$ , se reemplazó  $v$  por  $\mu$ , y la constante de los gases  $R$  se reemplazó por una análoga  $r$ . Desafortunadamente, los seis coeficientes involucrados en el modelo no fueron generalizados, ni han sido probados adecuadamente a mezcla de fluidos.

En la analogía de la figura 3.3 podemos observar la definición de viscosidad que se plantea en el apartado 3.3.1. pues se pueden notar secciones en las que la viscosidad disminuye con el aumento de la temperatura y otras secciones en las que la viscosidad sufre un incremento cuando la temperatura aumenta. Para este trabajo consideramos que los compuestos parafínicos siguen el comportamiento planteado anteriormente para la fase líquida, en la que la viscosidad disminuye con el aumento de la temperatura. Esto puede observarse en los trabajos realizados por *Guo et al.* [29], *Patel-Teja* [7], *Pedersen-Fredenslund* [25], *Lawal* [30] entre otros, quienes realizaron el estudio a compuestos parafínicos tales como metano, propano, butano, heptano, decano, obteniendo datos experimentales en los que se muestra que la viscosidad de dichos compuestos siguen el comportamiento esperado.

De igual forma podemos observar éste comportamiento en las gráficas 3.1 y 3.2 las cuales muestran los datos experimentales obtenidos de la base de datos DIPPR® [31] para metano, butano y heptano.



Gráfica 3.1. Datos experimentales de viscosidad fase líquida tomados de la base de datos DIPPR [31] para metano, n-butano y n-heptano.



Gráfica 3.1. Datos experimentales de viscosidad fase vapor tomados de la base de datos DIPPR [31] para metano, n-butano, n-heptano.

### 3.4.2 Modelo Lawal et al

En 1986 Lawal [30] propuso un modelo de viscosidad basado en la ecuación de estado de Lawal-Lake-Silberberg, de cuatro parámetros, la cual es aplicable a hidrocarburos puros y sus mezclas, dicha EOS es la siguiente:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2 + av - \beta b^2} \quad (3.52)$$

Donde  $a, b, \alpha$  y  $\beta$  son los parámetros característicos de la ecuación.

Basado en la similitud de las relaciones  $P - v - T$  y  $T - \mu - P$ , las posiciones de  $T$  y  $P$  son intercambiadas;  $v$  es remplazada por  $\mu$ , y la constante de los gases  $R$  es remplazada por una análoga  $r$ . Por lo que la ecuación 3.52 es transformada siguiente ecuación:

$$T = \frac{rP}{\mu - b} - \frac{a}{\mu^2 + \alpha b\mu - \beta b^2} \quad (3.53)$$

Lamentablemente, éste no es un modelo predictivo ya que para obtener los parámetros característicos de cada sustancia se requiere de datos de referencia de viscosidad para cada una de ellas y además se obtienen resultados insatisfactorios cuando son aplicados a fluidos de yacimiento.

### 3.4.3 Modelo Wang-Guo

En 1991, L.Wang y T. Guo [31], desarrollaron un modelo basado en la Ecuación de Estado de Patel-Teja:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v(v + b) + c(v - b)} \quad (3.54)$$

Y, basándose en la similitud geométrica, realizaron los mismos cambios mostrados en los anteriores autores obteniendo la siguiente ecuación:

$$T = \frac{rP}{\mu - b'} - \frac{a}{\mu(\mu + b) + c(\mu - b)} \quad (3.55)$$

Los parámetros  $a, b$  y  $c$  se calculan de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

$$a = \frac{\Omega_a r_c^2 P_c^2}{T_c} \quad (3.56)$$

$$b = \frac{\Omega_b r_c P_c}{T_c} \quad (3.57)$$

$$c = \frac{\Omega_c r_c P_c}{T_c} \quad (3.58)$$

Para encontrar los factores  $\Omega$  se aplican las condiciones críticas tal como lo hicieron Patel y Teja. Mientras que  $r$  y  $b'$  son funciones de la presión y temperatura y se obtienen aplicando la condición de que la primera y la segunda derivada, con respecto a la viscosidad, son cero en el punto de presión crítica.

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \mu}\right)_{P_c} = \left(\frac{\partial^2 T}{\partial \mu^2}\right)_{P_c} = 0 \quad (3.59)$$

Finalmente, generalizaron los parámetros  $\tau$  y  $\varphi$  obteniendo un buen resultado solo aplicable para compuestos no polares con un error absoluto promedio de 8.7% [31].

### 3.4.4 Modelo Guo et al.

Más tarde, en 1997, *Guo et al.* [29] desarrollaron un modelo similar basado en la Ecuación de Estado de Peng-Robinson para la predicción de viscosidad de hidrocarburos, dióxido de carbono y nitrógeno.

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)+b(v-b)} \quad (3.60)$$

Del mismo modo, sustituyendo e intercambiando variables encontraron:

$$T = \frac{rP}{\mu-b'} - \frac{a}{\mu(\mu+b)+b(\mu-b)} \quad (3.61)$$

Los parámetros de dicha ecuación se calculan con las ecuaciones 3.62-3.69.

$$a = 0.45724 \frac{r_c^2 P_c^2}{T_c} \quad (3.62)$$

$$b = 0.07780 \frac{r_c P_c}{T_c} \quad (3.63)$$

$$r = r_c \tau(T_r, P_r) \quad (3.64)$$

$$r_c = \frac{\mu_c T_c}{P_c Z_c} \quad (3.65)$$

$$b' = b \varphi(T_r, P_r) \quad (3.66)$$

$$\mu_c = 7.7 T_c^{-1/6} M_w^{0.5} P_c^{2/3} \quad (3.67)$$

$$\tau(T_r, P_r) = \{1 + Q_1 [(T_r P_r)^{0.5} - 1]\}^{-2} \quad (3.68)$$

$$\varphi(T_r, P_r) = \exp[Q_2(\sqrt{T_r} - 1) + Q_3(\sqrt{P_r} - 1)] \quad (3.69)$$

Los parámetros  $Q_1$ ,  $Q_2$  y  $Q_3$  se correlacionaron con el factor acéntrico y el peso molecular, con el fin de generalizar los resultados para cualquier sustancia pura, tal como se muestran en las siguientes ecuaciones.

$$Q_1 = 0.798750 + 2.574040\omega + 0.006232Mw + 0.065526\omega Mw - 13.165058\omega^2 - 0.000079Mw^2 \quad (3.70)$$

$$Q_2 = 1.138605 - 31.783684\omega + 0.088274Mw + 0.242397\omega Mw + 76.541489\omega^2 - 0.001617Mw^2 \quad (3.71)$$

$$Q_3 = 0.350433 + 3.017745\omega - 0.006269Mw + 0.207998\omega Mw - 31.620953\omega^2 - 0.000370Mw^2 \quad (3.72)$$

En éste modelo no se involucran parámetros ajustables. Los resultados de aplicar el modelo resultante a una serie de 16 sustancias puras y CO<sub>2</sub> mostró una desviación absoluta promedio de 6.18%, con un máximo de desviación de 10.26% para dióxido de carbono, seguido por el 10.03% para metano y 10.02% con isobutano [11].

Por otro lado, Guo et al., en 2001, proponen un modelo para el cálculo de  $\varphi(T_r, P_r)$  como se muestra a continuación:

$$\varphi(T_r, P_r) = \exp \left[ Q_2(\sqrt{T_r} - 1) + Q_3(\sqrt{P_r} - 1)^2 \right] \quad (3.73)$$

Y los parámetros  $Q_1$ ,  $Q_2$  y  $Q_3$  se correlacionaron con el factor acéntrico, obteniendo nuevas expresiones:

Cuando  $\omega < 0.3$ :

$$Q_1 = 0.829599 + 0.350857\omega - 0.747680\omega^2 \quad (3.74)$$

$$Q_2 = 1.94546 - 3.19777\omega + 2.80193\omega^2 \quad (3.75)$$

$$Q_3 = 0.299757 - 2.20855\omega + 6.64959\omega^2 \quad (3.76)$$

Cuando  $\omega \geq 0.3$ :

$$Q_1 = 0.956763 + 0.192829\omega - 0.303189\omega^2 \quad (3.77)$$

$$Q_2 = -0.258789 - 37.107\omega + 20.5510\omega^2 \quad (3.78)$$

$$Q_3 = 5.16307 - 12.8207\omega + 11.0109\omega^2 \quad (3.79)$$

Los resultados para 24 sustancias no polares, principalmente hidrocarburos, muestran desviaciones del 7.0% [29].

Con el paso del tiempo, se han formulado una serie de modelos útiles en la estimación de la viscosidad, sin embargo, muchos de estos modelos reportan resultados poco favorables cuando son aplicados a fluidos de yacimiento. En 2007 Wang et al. aplicó el modelo modificado de Peng Robinson (PR $\mu$  modelo) a algunos hidrocarburos, obteniendo así resultados con errores razonables.

### 3.4.5 Modelo Bonyadi – Rostami

Finalmente, como objetivo principal de éste trabajo, se presenta el modelo formulado por Mohammad Bonyadi y Mina Rostami [10] cuyo propuesta está basada en la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong, la cual es una ecuación de estado comúnmente usada en la industria de los hidrocarburos.

La forma general de la SRK EOS se muestra a continuación [8]:

$$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v(v+b)} \quad (3.80)$$

Donde  $a$  y  $b$  son los parámetros de la SRK EOS los cuales están definidos por las siguientes ecuaciones:

$$a = \alpha \cdot a_c \quad (3.81)$$

$$a_c = 0.42748 \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (3.82)$$

$$\alpha = \left(1 + \beta \left(1 - \sqrt{\frac{T}{T_c}}\right)\right)^2 \quad (3.83)$$

$$\beta = 0.48 + 1.57\omega - 0.176\omega^2 \quad (3.84)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{P_c} \quad (3.85)$$

Donde  $T_c$ ,  $P_c$  y  $\omega$  son la temperatura crítica, presión crítica y factor acéntrico, respectivamente. Nuevamente, basándose en la analogía del comportamiento que autores anteriores han mostrado y realizando el intercambio de variables, una nueva ecuación para la viscosidad es formulada:

$$T = \frac{rP}{\mu - b'} - \frac{a}{\mu(\mu + b)} \quad (3.86)$$

Donde  $a$ ,  $b$  y  $r_c$  están definidos por las siguientes ecuaciones:

$$a = 0.42748 \frac{r_c^2 P_c^2}{T_c} \quad (3.87)$$

$$b = 0.08664 \frac{r_c P_c}{T_c} \quad (3.88)$$

$$r_c = \frac{\mu_c T_c}{P_c Z_c} \quad (3.89)$$

En la ecuación 3.89,  $\mu_c$  corresponde a la viscosidad crítica en micropoise ( $1mP = 10^{-7} Pa \cdot s$ ) la cual puede ser calculada por la siguiente correlación empírica:

$$\mu_c = 7.7 T_c^{-1/6} M W^{0.5} P_c^{2/3} \quad (3.90)$$

$$r = r_c \tau \quad (3.91)$$

$$b' = b \varphi \quad (3.92)$$

$$\tau = \{1 + Q_1 [(T_r P_r)^{0.5} - 1]\}^{-2} \quad (3.93)$$

$$\varphi = \exp[Q_2 (\sqrt{T_r} - 1)] + Q_3 [(\sqrt{P_r} - 1)]^2 \quad (3.94)$$

Para valores óptimos de los parámetros  $Q_1$ ,  $Q_2$  y  $Q_3$ , Bonyadi y Rostami los determinaron para cada componente puro minimizando el promedio de desviación relativa absoluta entre el modelo de predicciones y datos experimentales con la ayuda de un algoritmo genético (GA). Después de determinar los valores óptimos, estos parámetros se generalizaron y correlacionaron con el factor acéntrico como se muestra a continuación:

$$Q_1 = 0.8519 + 0.4082\omega - 3.0409\omega^2 \quad (3.95)$$

$$Q_2 = 1.7583 - 8.6508\omega + 38.6945\omega^2 \quad (3.96)$$

$$Q_3 = 0.3247 - 1.0350\omega + 4.1489\omega^2 \quad (3.97)$$

Las siguientes ecuaciones permiten el uso del modelo en mezclas multicomponentes:

$$a = \sum_i^m \sum_j^m x_i x_j a_{ij} \quad (3.98)$$

$$a_{ij} = \sqrt{a_i a_j} (1 - k_{ij}) \quad (3.99)$$

$$b = \sum_i^m x_i b_i \quad (3.100)$$

$$r = \sum_i^m x_i r_i \quad (3.101)$$

$$b' = b \sum_i^m x_i \varphi_i \quad (3.102)$$

En la ecuación 3.99,  $k_{ij}$  corresponde al coeficiente de interacción binaria.

Finalmente, al resolver la ecuación 3.86 en términos de viscosidad, ésta nos lleva a una ecuación cúbica con tres raíces, a una determinada presión y temperatura. El valor positivo más pequeño se considera como la viscosidad del gas mientras que el valor positivo más grande corresponde a la fase líquida.

## 4. METODOLOGÍA:

### 4.1. Programa de computo

Conforme a los objetivos de este trabajo, en este capítulo se describen las características principales del programa de cómputo desarrollado para calcular la viscosidad de una serie de parafinas mediante el modelo Bonyadi-Rostami [10]

Se desarrolló una programación en la herramienta Wolfram Mathematica® para calcular la viscosidad en función de T y P, ya que este software es fácil de entender, manejar y, por lo tanto, extrapolar sus características para realizar los cálculos que se requieran. Además de ser un software accesible para académicos y alumnos porque la universidad ofrece un licenciamiento a su comunidad. La solución al valor de viscosidad se obtuvo con cálculos iterativos del programa.

#### 4.1.1. Descripción del programa

El programa cuenta con comandos o declaraciones para:

- a) Realizar el cálculo de todas las ecuaciones involucradas en ambos modelos.
- b) Calcular la viscosidad de un componente especificando solo una presión y temperatura.
- c) Calcular la viscosidad de un componente en un rango específico de presión y temperatura.
- d) Calcular la viscosidad de un componente en un rango de temperaturas y presión de saturación.
- e) Obtener la impresión de uno o más datos.
- f) Procesar la información y generar gráficos.

Se realizó la programación del modelo en cuestión para calcular inicialmente la viscosidad de un compuesto puro, especificando temperatura y presión. Más adelante, esta programación se modificó para calcular la viscosidad, especificando rangos de temperatura y presión. A continuación, se realizó la programación para incluir el cálculo de la presión de saturación y con ello obtener las envolventes de fase especificando rangos de temperatura.

#### **4.1.2. Datos de entrada para el algoritmo**

La información requerida para el programa Viscosidad BR.nb (ver anexo I) es:

- a) Peso molecular del componente.
- b) Presión crítica, temperatura crítica y factor de compresibilidad crítico.
- c) Factor acéntrico del componente.
- d) Especificar presión y temperaturas para realizar el cálculo.
- e) Para el caso del cálculo de presión de saturación con los datos obtenidos de la base de datos DIPPR, son necesarios los valores de los parámetros utilizados en el modelo recomendado por la base DIPPR.

Los datos son ingresados al programa cambiando directamente los valores en la sección "Datos requeridos".

#### **4.1.3. Programación del modelo Bonyadi-Rostami**

Para realizar el cálculo de la viscosidad de un compuesto puro, en el anexo I se muestra el código de programación del modelo Bonyadi-Rostami en la que los datos de entrada son agregados directamente y los valores de T y P son los de interés. Esta programación inicial realiza el cálculo de la viscosidad a una sola presión y temperatura.

Posteriormente, esta misma programación se modificó tal como se muestra en el anexo II con la finalidad de poder calcular la viscosidad en rangos de temperatura o presión fijando alguna de las dos variables. Adicionalmente, se agregó una modificación que permitiera el cálculo de las envolventes de fase, así como el gráfico de las mismas. (ver anexo III).

#### **4.2. Recolección de base de datos**

Para tener una base confiable de datos se utilizaron las siguientes fuentes.

- **Aspen Plus®:** Este Sistema Avanzado para la Ingeniería de Procesos líder en herramientas de modelado, optimización y monitoreo de procesos tiene la base más amplia de datos entre los simuladores comerciales, además de contener una amplia gama de modelos para el cálculo de propiedades. Por lo que se tomó como referencia para los datos de viscosidad de los componentes puros.
- **Aspen HYSYS®:** Es un programa interactivo enfocado a la ingeniería de procesos muy eficaz para la solución de problemas relacionados con procesos químicos y con una interfaz amigable para el usuario. Contiene al

igual que Aspen Plus, una amplia gama de modelos y de datos. Así que este programa fue utilizado para obtener las propiedades de los componentes como:  $\omega$ ,  $M$ ,  $T_c$  y  $P_c$ , al igual que los valores de viscosidad para los componentes puros.

- **DIPPR®**: La base de datos “Design Institute for Physical Properties” de AIChE (American Institute of Chemical Engineers) es la mejor fuente de datos de propiedades termofísicas evaluados críticamente. Utiliza una metodología de evaluación patentada que permite al usuario obtener rápidamente información sobre propiedades físicas. Los datos DIPPR son utilizados por las principales compañías químicas, petroleras y farmacéuticas de todo el mundo y usado también ampliamente en softwares. Por lo que se tomó en cuenta como referencia para los datos de viscosidad de los componentes puros.
- **Poling, Prausnitz & O’Connell, The properties of gases and liquids, New York, 2000 [23]**: Es un libro de referencia que incluye varios procedimientos de estimación para propiedades de gases y líquidos. Estos procedimientos son limitados a aquellos autores con gran validez y uso práctico. Además, este libro ofrece recomendaciones para determinar el método más adecuado en la estimación de alguna propiedad. Por esto, dicha referencia se utilizó para obtener los valores de viscosidad de algunos gases ligeros.

La tabla (4.1) muestra un condensado de los compuestos y las fuentes que fueron utilizadas para obtener los datos del componente.

*Tabla 4.1 Fuentes utilizadas como base de datos para propiedades de los componentes puros.*

Sustancia	Propiedades críticas	Viscosidad			
	Aspen HYSYS	Aspen Plus	Aspen HYSYS	DIPPR	Prausnitz
O <sub>2</sub>	✓		✓	✓	✓
NH <sub>3</sub>	✓		✓	✓	✓
CO <sub>2</sub>	✓		✓	✓	✓
CH <sub>4</sub>	✓	✓	✓	✓	
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	✓	✓	✓	✓	
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	✓	✓	✓	✓	
<i>n</i> - C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	✓	✓	✓	✓	
<i>n</i> - C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	✓	✓	✓	✓	✓
<i>n</i> - C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	✓	✓	✓	✓	
<i>n</i> - C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	✓	✓	✓	✓	
<i>n</i> - C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	✓	✓	✓	✓	
<i>n</i> - C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	✓	✓	✓	✓	
<i>n</i> - C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	✓	✓	✓	✓	

#### 4.2.1 Recolección de base de datos para valores de saturación

Debido a que las ecuaciones de estado reproducen el comportamiento fenomenológico de las sustancias en las zonas de saturación, es importante revisar que el modelo propuesto reproduzca valores de viscosidad en la zona de saturación, por lo que, para tener una base de datos en la zona de equilibrio líquido-vapor, se calcularon los valores de viscosidad a diferentes temperaturas con su correspondiente presión de saturación para las fases líquido y vapor utilizando las herramientas Aspen PLUS, HYSYS y DIPPR. A continuación, se describe el proceso de obtención de dichos valores.

##### Aspen plus.

Para obtener los valores de saturación de los componentes puros, mediante la herramienta de Aspen Plus®, se simuló un separador Flash (B1) con las corrientes de entrada (E) y salida (V, vapor; L, líquido) correspondientes como se ilustra en la siguiente figura (4.1).

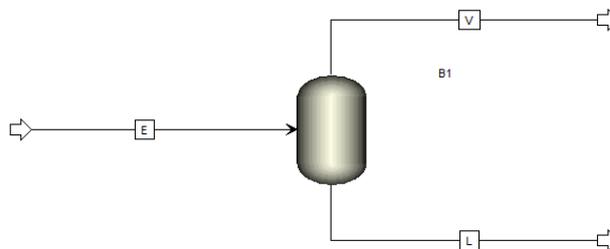


Figura 4.1 Simulación de separador Flash en Aspen Plus®

En el equipo B1 se configuró el modelo SRK para realizar las simulaciones y se especificaron diferentes temperaturas de saturación, con una fracción de vapor igual a 1 para el caso del vapor saturado y con una fracción de vapor igual a 0 para el líquido saturado.

##### Aspen HYSYS

Aspen HYSYS® es más amigable para el cálculo de las propiedades. Ya que, para la saturación, la fracción de vapor puede ser especificada arbitrariamente como 0 o 1. De este modo, sólo se simuló una corriente cambiando las condiciones de temperatura y utilizando el modelo SRK para los cálculos.

##### DIPPR

La base de datos DIPPR ofrece un modelo para el cálculo de viscosidades absolutas de la fase líquida y vapor, respectivamente en las ecuaciones (4.1) y (4.2).

$$Y = \exp\left(A + \frac{B}{T} + C \ln(T) + DT^E\right) \quad (4.1)$$

$$Y = \frac{AT^B}{1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}} \quad (4.2)$$

Las condiciones para el cálculo de la viscosidad del líquido son:  $T_{mín} = TPT$ ,  $T_{máx} = NBP$  o  $0.8 * T_c$ ,  $P = 1 atm$  cuando  $T < NBP$  y  $P_{sat}$  cuando  $T > NBP$ .

Las condiciones para el cálculo de la viscosidad del vapor son:  $T_{mín} = TPT$ ,  $T_{máx} = 1000 K$ ,  $P = 1 atm$  cuando  $T > NBP$  y  $P_{sat}$  cuando  $T < NBP$ .

Los parámetros A, B, C, D y E son obtenidos directamente de la base de datos DIPPR [32]. De igual modo ofrecen una ecuación para el cálculo de la presión de saturación como se muestra a continuación:

$$Y = \exp\left(A + \frac{B}{T} + C \ln(T) + DT^E\right) \quad (4.3)$$

Los parámetros de la ecuación (4.3) también son obtenidos de la base de datos DIPPR.

### 4.3. Validación del algoritmo de cálculo

Para validar la programación propuesta y que los resultados se consideraran aceptables, se compararon con los obtenidos de las herramientas Aspen Plus®, Aspen HYSYS® y DIPPR® en particular para metano. A continuación se describen los detalles de la verificación.

#### 4.3.1 Cálculo de viscosidad para metano

El metano, al ser el primer compuesto puro reportado por Bonyadi y Rostami [10], fue considerado para iniciar las pruebas del algoritmo de cálculo. La programación para el cálculo de viscosidad en el caso del metano a una presión y temperatura específicas se muestra en el anexo IV.

Los primeros cálculos se realizaron a cinco temperaturas distintas y una presión de 50 bar, estas condiciones fueron tomadas de la figura 1 del artículo [10]; los resultados se compararon con los obtenidos por Aspen Plus® y Aspen HYSYS®. Posteriormente, para poder realizar la comparación con la base de datos DIPPR, se calcularon las viscosidades a cinco temperaturas diferentes, mayores a la temperatura normal de ebullición del metano con una presión de 1 atm. Esto es debido a que las condiciones de la base de datos DIPPR para el cálculo de la viscosidad están organizadas conforme a lo que se reproduce en el apartado 4.2.1. Adicionalmente, se utilizaron dos criterios para el análisis de resultados, el primero es el cálculo del porcentaje de desviación relativa (relative deviation, RD) obtenido con la ecuación (4.4):

$$\% RD = \frac{\mu_{teórica} - \mu_{calculada}}{\mu_{teórica}} * 100 \quad (4.4)$$

Donde la viscosidad calculada corresponde a la obtenida con el algoritmo y la viscosidad teórica corresponde al valor proporcionado por las referencias Aspen Plus, HYSYS y DIPPR. El segundo criterio para el análisis de resultados es el porcentaje de desviación relativa absoluta promedio que se calcula con la ecuación (4.5).

$$\%AARD = \sum_{i=1}^N \left| \frac{\mu_i^{teórica} - \mu_i^{calculada}}{\mu_i^{teórica}} \right| \times \frac{100}{N} \quad (4.5)$$

En la tabla siguiente se reportan los promedios de porcentaje de desviación con respecto a las referencias para el cálculo de la viscosidad del metano. Estos porcentajes, en los primeros tres casos, nos muestran la desviación que los resultados del programa Viscosidad BR.nb (dato calculado) tienen con respecto a Aspen Plus, Aspen HYSYS y la base de datos DIPPR (datos teóricos). En los dos siguientes casos, los porcentajes muestran la desviación que la base de datos DIPPR tiene con respecto a las herramientas de simulación. Y por último, el tercer caso nos muestra la desviación que Aspen Plus tiene con respecto a Aspen HYSYS.

Tabla 4.2 Promedios de porcentajes de desviación obtenidos.

METANO		% AARD					
T (K)	P (bar)	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS	Viscosidad BR.nb vs DIPPR	DIPPR vs Aspen Plus	DIPPR vs HYSYS	Aspen Plus vs HYSYS
273.15 - 410.93	50	1.00	2.27	ND	ND	ND	2.35
273.15 - 410.93	1.013	7.77	9.70	9.01	1.37	0.76	2.10

ND: No disponible en la base de datos DIPPR.

#### 4.4. Evaluación del modelo Bonyadi-Rostami

Para la evaluación del modelo propuesto por Bonyadi y Rostami, se realizaron los cálculos de viscosidad a gases ligeros como dióxido de carbono y amoníaco, ya que los resultados para metano no resultan tan favorables al calcularlos a 1 atm, por lo que se consideró utilizar compuestos no parafínicos; estos compuestos fueron tomados de la referencia de Prausnitz [23].

Posteriormente, se calcularon las viscosidades a dos compuestos más: etano y butano, presentados en el artículo [10]. Y, para observar si los resultados mostrados en el artículo, para ambos compuestos, son reproducibles, se realizó un análisis gráfico de las figuras 1, 2 y 3 del artículo. Finalmente, se calcularon las envolventes de fase para cada uno de los compuestos propuestos en éste trabajo. Los detalles de cada evaluación se muestran a continuación:

##### 4.4.1 Cálculos de viscosidad para gases ligeros

Tomando los datos de viscosidad reportados por Poling, Prausnitz & O'Connell, [23] se calcularon las viscosidades para las siguientes sustancias: oxígeno, amoníaco, dióxido de carbono, metano y n-Pentano a las condiciones de P y T mencionados en la misma fuente bibliográfica y los resultados se compararon contra los datos de la referencia. Posteriormente, se compararon estos resultados con los obtenidos con Aspen Plus® y Aspen HYSYS®. De igual forma se calculó el porcentaje de desviación utilizando la ecuación (4.4). Todos los resultados se presentan en el apartado (5.2).

La siguiente tabla muestra los %AARD de desviación de los resultados obtenidos.

Tabla 4.3 Promedios de porcentajes de desviación obtenidos.

Compuesto	T(K)	P(bar)	% AARD					
			Viscosidad BR.nb vs Prausnitz	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS	Aspen Plus vs Prausnitz	Aspen HYSYS vs Prausnitz	Aspen Plus vs Aspen HYSYS
Oxígeno	300	30-304	1.59	1.33	2.75	0.80	1.21	1.94
Amoniaco	420,520	50-600	45.08	43.08	84.13	4.47	18.57	28.34
Dioxido de carbono	360,500	50-800	25.05	19.09	20.54	5.40	6.27	7.20
Metano	300,400	50-300	11.25	11.78	30.69	4.66	12.81	20.74
n-Pentano	600	30-160	42.66	43.67	58.22	2.99	10.96	11.32

#### 4.4.2 Cálculo de viscosidad etano y butano

Para continuar con la evaluación del modelo Bonyadi-Rostami, se realizó el cálculo de viscosidad de los compuestos mostrados en el artículo [10] (etano, butano) a diferentes temperaturas y una presión de 100 bar. Posteriormente, estos cálculos se realizaron a 1 atm para ser comparados con la base de datos DIPPR®. En la tabla 4.4 se presenta el resumen de los %AARD de desviación obtenidos.

Tabla 4.4 Promedios de porcentajes de desviación para etano y butano.

Compuesto	T (K)	P (bar)	% AARD					
			Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS	Viscosidad BR.nb vs DIPPR	DIPPR vs Aspen Plus	DIPPR vs Aspen HYSYS	Aspen Plus vs Aspen HYSYS
Etano	312.15-523.26	100	8.44	16.26	ND	ND	ND	8.18
	312.15-523.27	1.013	11.78	13.20	10.34	1.62	3.29	1.82
Butano	444.59-510.93	100	25.57	49.16	ND	ND	ND	18.96
	423.59-510.93	1.013	5.49	4.44	3.61	1.95	0.99	1.29

ND: No disponible en la base de datos DIPPR.

#### 4.4.3 Análisis gráfico

Debido a los resultados anteriores poco favorables, se realizó un análisis de imagen a las Figuras 1, 2 y 3 mostradas en el artículo [10] utilizando la calculadora gráfica del programa GeoGebra® [33], con el fin asegurar que los valores calculados por el programa de Wolfram Mathematica® eran semejantes a los reportados. Éste análisis de imagen consistió en ajustar la escala del plano a la imagen como lo muestra la Figura 4.2 y capturar diversos puntos de las isoterms reportadas en las figuras del artículo [10] ubicando sus coordenadas, las cuales corresponden a la viscosidad (eje x) y presión (eje y). La precisión que presentan las coordenadas de los puntos se consideró de  $\pm 0.01$  debido al tamaño del punto.

Posteriormente, se calcularon estos puntos en la programación realizada con Wolfram Mathematica®, en Aspen HYSYS® y Aspen Plus®. Todos los valores se compararon mediante una representación gráfica, calculando también el porcentaje de desviación con la ecuación 4.4, en la que la viscosidad calculada corresponde al valor obtenido con el algoritmo y la viscosidad teórica al valor obtenido de las figuras del artículo.

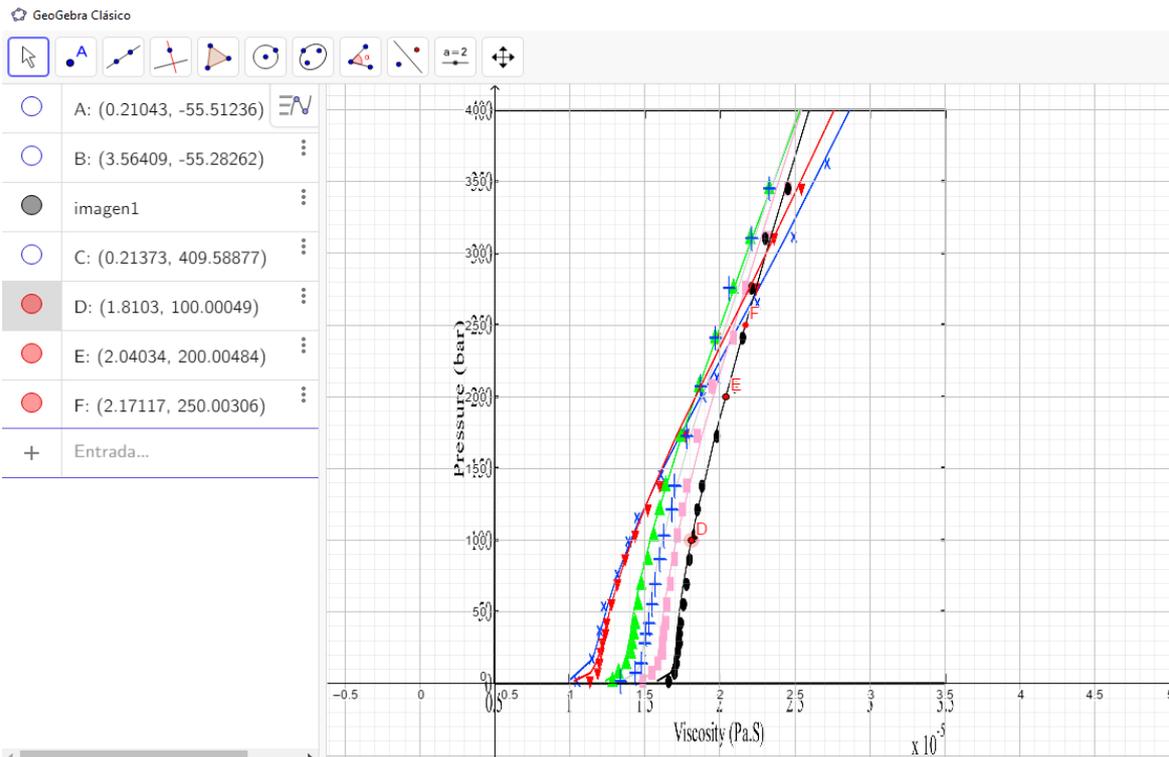


Figura 4.2 Ejemplo de análisis gráfico mediante la herramienta GeoGebra. Los puntos D, E, F corresponden a diferentes puntos de viscosidad y presión colocados sobre la isoterma de la Figura 1 del artículo. [10]

La siguiente tabla ofrece el %AARD de desviación de los resultados del análisis de imagen realizado a las figuras 1, 2 y 3 reportadas en el artículo [10].

Tabla 4.5 Promedios de porcentaje de desviación con respecto al análisis gráfico de las Figuras 1, 2 y 3 [10].

Compuesto	T [K]	P [bar]	% AARD				
			Viscosidad BR.nb vs Bonyadi-Rostami	Aspen Plus vs Bonyadi-Rostami	Aspen HYSYS vs Bonyadi-Rostami	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS
Metano	273-445	50-380	3.65	5.60	4.85	1.84	2.65
Etano	312-524	40-780	61.08	60.49	51.64	11.34	11.55
Butano	423-511	45-680	29.41	28.03	40.99	59.94	71.79

#### 4.4.4 Cálculo de envoltantes de fase líquido-vapor

En el capítulo 3.1 se mencionó que, los modelos basados en ecuaciones de estado deben reproducir el comportamiento de equilibrio de las sustancias. Por lo que, en este apartado se busca analizar la reproducibilidad de los datos de equilibrio líquido-vapor que ofrece el modelo propuesto por Bonyadi y Rostami, para ello, se realizaron los cálculos de equilibrio en un rango de temperaturas desde el punto triple hasta el punto crítico y, además, se construyeron las gráficas de la zona de saturación en el plano Viscosidad vs Presión.

Para realizar éste cálculo en el programa Viscosidad BR.nb, se modificó la programación para incluir la dependencia de la presión y temperatura dentro del algoritmo y de igual forma incluir el gráfico de la envolvente (ver anexo III).

Y, debido a que este programa revela un gráfico con la forma de una función cúbica, se ubicaron las coordenadas de los puntos de saturación (P, T,  $\mu$ ) para diferentes isotermas y posteriormente se construyó la curva de saturación con la ayuda de la herramienta Excel®. De igual forma, estas envolventes de fase se construyeron con la información proporcionada por las herramientas ya antes mencionadas en el apartado 4.2.1., para compararlas posteriormente. Las envolventes de fase fueron calculadas para toda la serie de parafinas propuesta.

La figura 4.3 muestra el cálculo de diferentes isotermas para metano en un rango de 0 a 50 bar, realizado con el programa Viscosidad BR.nb, donde se resuelve numéricamente la ecuación (3.86) y se impone como restricción que sólo se registren las raíces reales.

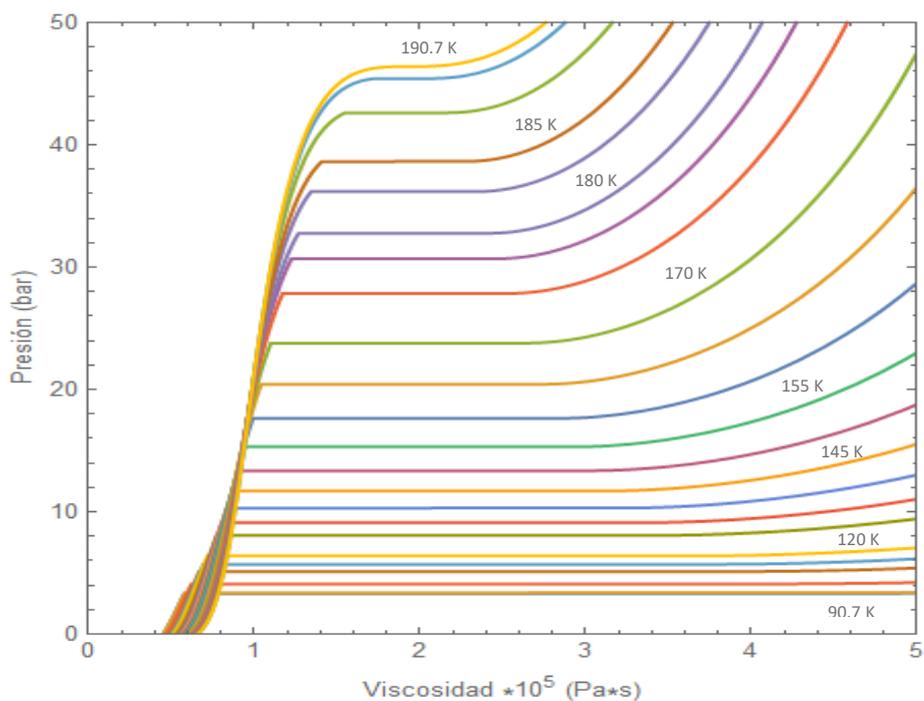


Figura 4.3 Isotermas calculadas con el programa Viscosidad BR.nb para el caso de Metano.

La forma de esta función se comporta en términos de las raíces que devuelve la ecuación (3.86) se explica en la siguiente gráfica:

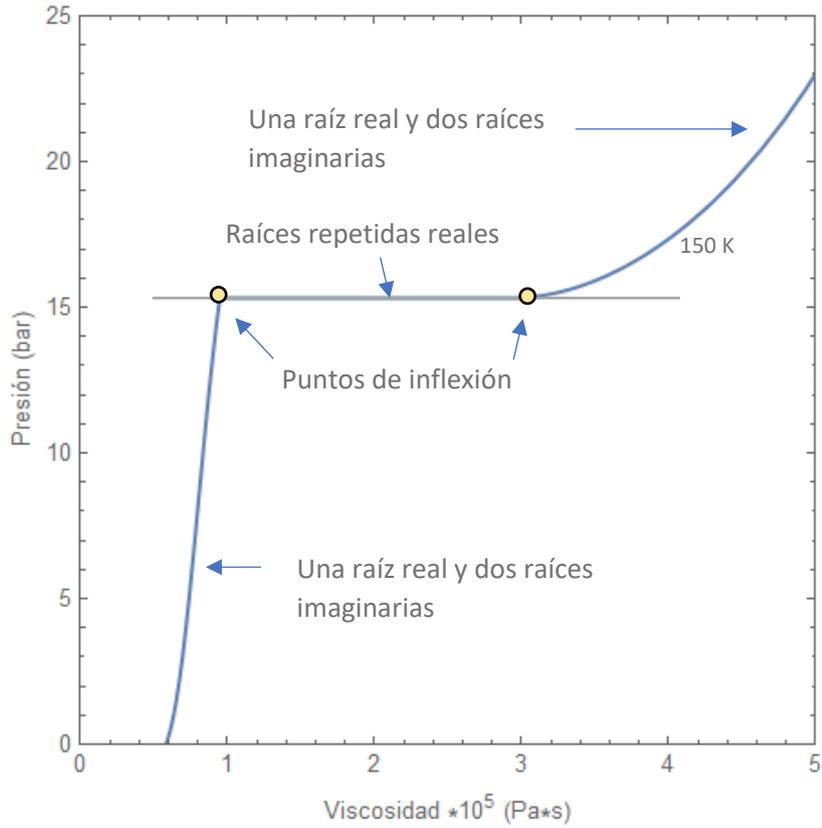


Figura 4.4 Isoterma 155°C calculada con el programa Viscosidad BR.nb.

Esta representación gráfica no permite observar claramente la envolvente de fases, por lo que se ubicaron las coordenadas de los puntos de inflexión y posteriormente se construyó la envolvente con ayuda de la herramienta Excel® como se ejemplifica en la figura 4.4.

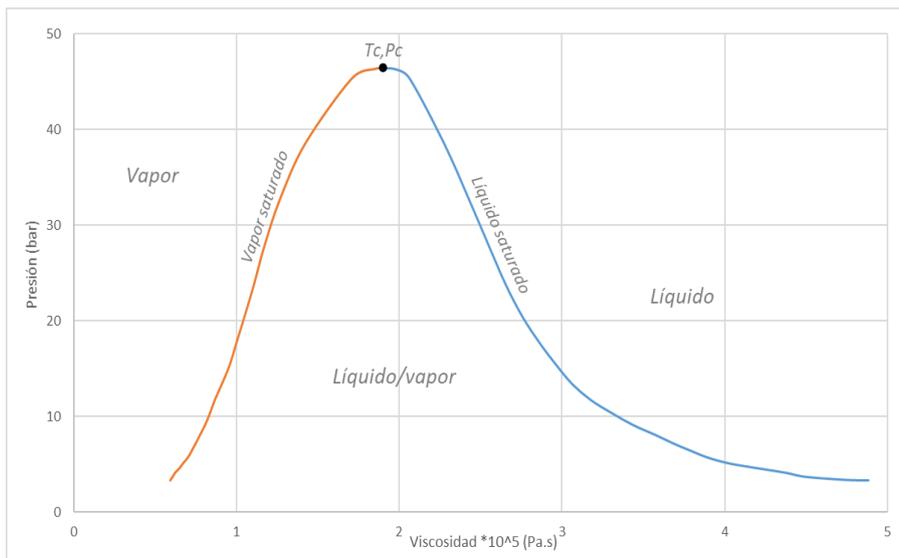


Figura 4.5 Diagrama P- $\mu$  para la región de equilibrio líquido-vapor.

Este diagrama exhibe una similitud con los diagramas  $P - v - T$  para el equilibrio de fases, ya que expone las líneas de saturación para ambas fases pero en diferente posición.

## 5. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En este capítulo se presentarán los resultados que fueron obtenidos al emplear la metodología discutida en el capítulo 4, así como el análisis de los mismos.

### 5.1. Verificación de los resultados del programa

Para el desarrollo de este trabajo se realizó la programación del modelo Bonyadi-Rostami, inicialmente para el cálculo de viscosidad de metano, tal como se observa en el anexo IV. En la validación del algoritmo, se procedió al cálculo de viscosidad a cinco diferentes temperaturas: 273.15, 323.15, 348.15, 377.15, 410.93K y una presión de 50 bar, dichos valores fueron tomados de las isothermas de la figura 1 reportada en el artículo [10].

Los resultados obtenidos muestran que, al resolver la ecuación a las condiciones dadas y en términos de la viscosidad, se obtuvieron las tres raíces esperadas, de las cuales dos resultan ser imaginarias y sin sentido físico y la tercera es un valor real que corresponde a la viscosidad del fluido, como se mostró en la figura (4.4), los puntos de equilibrio están señalados cuando se tienen raíces reales repetidas.

Los valores de  $\omega$ ,  $M$ ,  $T_c$  y  $P_c$  empleados para el cálculo de viscosidad de metano y los compuestos presentados en éste trabajo se obtuvieron de Aspen HYSYS®, los cuales se resumen en la tabla siguiente:

Tabla 5.1 Tabla de propiedades para componentes puros.

COMPONENTE	Mw	$T_c$ [K]	$P_c$ [bar]	$\omega$	$Z_c$	NBP [K]	TPT [K]
O <sub>2</sub>	32.00000	154.77000	50.80020	0.01900	0.288	90.19960	54.361
NH <sub>3</sub>	17.03000	405.54901	112.76900	0.25500	0.255	239.69901	195.410
CO <sub>2</sub>	44.00970	304.10001	73.70000	0.23894	0.274	194.59801	216.580
Metano	16.04290	190.69901	46.40680	0.01150	0.286	111.62500	90.694
Etano	30.06990	305.42801	48.83850	0.09860	0.279	184.55000	90.352
Propano	44.09700	369.89801	42.56660	0.15240	0.276	231.04800	85.470
n-Butano	58.12400	425.19901	37.96620	0.20100	0.274	272.64801	134.860
n-Pentano	72.15100	469.60001	33.75120	0.25389	0.268	309.20901	143.420
n-Hexano	86.17790	507.89801	30.31620	0.30070	0.264	341.88000	177.830
n-Heptano	100.20500	540.15802	27.36780	0.34979	0.261	371.57901	182.570
n-Octano	114.23200	568.59802	24.96620	0.40180	0.259	398.82001	216.380
n-Nonano	128.25900	594.59802	23.00070	0.44549	0.257	423.96701	219.660
n-Decano	142.28500	617.59802	21.07550	0.48848	0.256	447.29901	243.510

La tabla 5.2 reporta los resultados de los primeros cálculos de viscosidad para metano y la comparación de los resultados obtenidos con las herramientas Aspen Plus® y Aspen HYSYS®.

Se puede observar que la comparación con Aspen Plus reporta un menor promedio de desviación relativa con un 1%. Y que, los valores obtenidos por el programa realizado en Wolfram Mathematica son similares a los calculados con Aspen plus, con desviaciones relativas menores a 0.6%, con excepción del valor obtenido a 273.15K que tiene la desviación relativa más grande. Pero al comparar los resultados con Aspen HYSYS éstos resultan ser mayores, a pesar de haberse utilizado los valores que la herramienta ofrece para las propiedades del compuesto. También, se puede observar que ambas herramientas, Aspen Plus y Aspen HYSYS, muestran una desviación promedio de 2.35%, la cual es mayor que las comparadas con el programa Viscosidad BR.nb.

*Tabla 5.2 Resultados de viscosidad para metano a 50 bar y % desviación relativa absoluta.*

METANO		Viscosidad * 10 <sup>5</sup> (Pa.s)			% desviación relativa absoluta		
T [K]	P [bar]	Aspen HYSYS	Aspen Plus	Viscosidad BR.nb	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Aspen Plus vs Aspen HYSYS
273.15	50 bar	1.1612	1.1391	1.1843	1.99	3.97	1.90
323.15	50 bar	1.2992	1.2675	1.2749	1.87	0.58	2.44
348.15	50 bar	1.3625	1.3328	1.3321	2.23	0.05	2.18
377.15	50 bar	1.4459	1.4080	1.4050	2.83	0.21	2.62
410.93	50 bar	1.5341	1.4944	1.4970	2.42	0.17	2.59
Promedio					2.27	1.00	2.35

En las tablas 5.3 y 5.4 se exponen los resultados de los cálculos realizados a 1 atm y las comparaciones realizadas con las bases de datos. La tabla 5.4, revela que los porcentajes de desviación obtenidos a 1 atm son mayores que en los cálculos realizados anteriormente a 50 bar con el programa Viscosidad BR.nb. Y que las menores desviaciones obtenidas a estas condiciones se encuentran al comparar la base de datos DIPPR y la herramienta Aspen HYSYS. También, se puede observar que al comparar los resultados del programa Viscosidad BR.nb con las bases de datos, la menor desviación se obtiene al compararlo con Aspen Plus, con una desviación promedio de 7.77%.

Adicionalmente, se compararon los resultados de las bases de datos y éstos muestran que Aspen HYSYS y DIPPR tienen los valores de viscosidad más similares, con una desviación promedio de 0.76%. En este caso también, Aspen HYSYS y Aspen Plus reportan una diferencia en los valores de viscosidad con una desviación promedio de 2.10%, muy cercana a la obtenida en los cálculos a 50 bar de 2.35%.

Tabla 5.3 Resultados de viscosidad para metano a 1 atm.

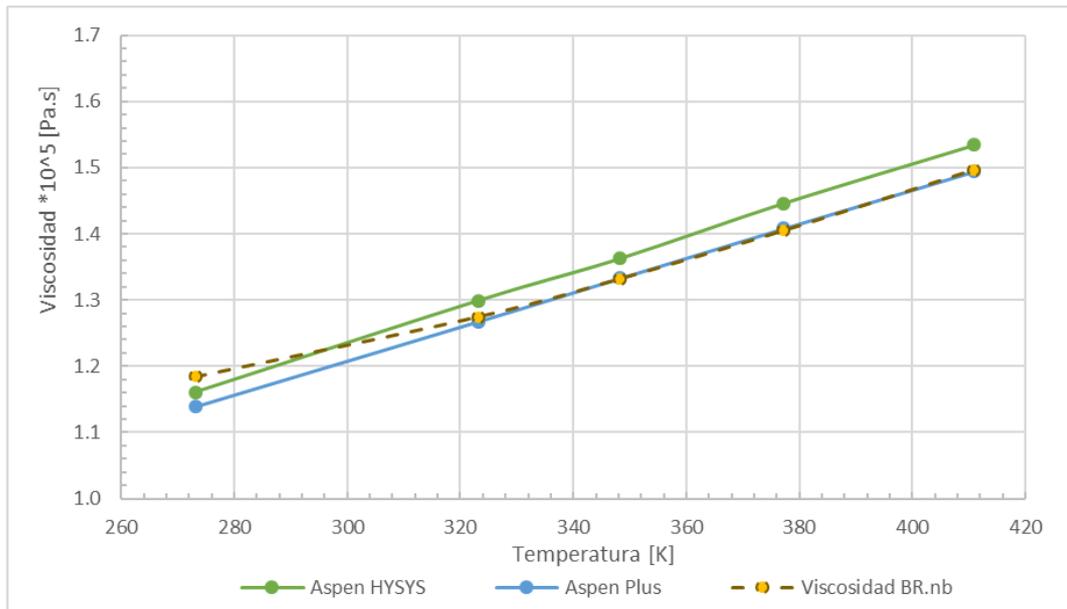
METANO		Viscosidad * 10 <sup>5</sup> (Pa.s)			
T [K]	P [bar]	Aspen HYSYS	Aspen Plus	DIPPR	Viscosidad BR.nb
273.15	1.013	1.0424	1.0230	1.0378	0.9312
323.15	1.013	1.2076	1.1818	1.1978	1.0763
348.15	1.013	1.2856	1.2574	1.2741	1.1531
377.15	1.013	1.3720	1.3421	1.3601	1.2458
410.93	1.013	1.4682	1.4373	1.4569	1.3587

Tabla 5.4 Porcentajes de desviación relativa absoluta para metano.

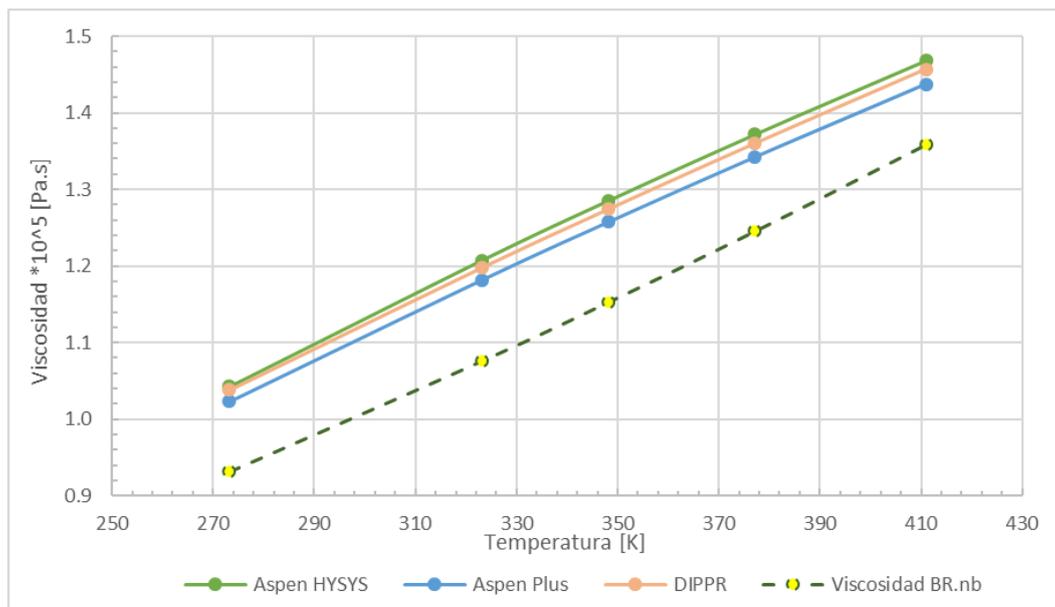
METANO		% desviación relativa absoluta					
T [K]	P [bar]	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs DIPPR	DIPPR vs Aspen HYSYS	DIPPR vs Aspen Plus	Aspen Plus vs Aspen HYSYS
273.15	1.013	10.66	8.97	10.27	0.44	1.45	1.87
323.15	1.013	10.87	8.93	10.14	0.82	1.35	2.14
348.15	1.013	10.30	8.29	9.50	0.89	1.33	2.19
377.15	1.013	9.20	7.18	8.40	0.87	1.34	2.18
410.93	1.013	7.46	5.47	6.74	0.77	1.37	2.11
Promedio		9.70	7.77	9.01	0.76	1.37	2.10

Estos resultados sugieren que el algoritmo reproduce mejores resultados a altas temperaturas con respecto a los datos obtenidos con Aspen Plus. Por lo que se puede decir que la programación hasta el momento se había realizado de forma correcta.

Las gráficas 5.1 y 5.2 ilustran el comportamiento de los resultados obtenidos a 50 bar y 1 atm, respectivamente. En ambas gráficas se puede observar que la programación Viscosidad BR.nb sigue una tendencia similar a las referencias utilizadas. En el primer caso, los resultados se encuentran en un rango aceptable. En el segundo, como se vio en la tabla 5.2, los resultados revelan una diferencia significativa. Con esto se puede proponer que, hasta este punto el modelo tiene mejores resultados cuando se aplica a altas presiones.



Gráfica 5.1. Comportamiento de la viscosidad para metano a 50 bar.



Gráfica 5.2. Comportamiento de la viscosidad para metano a 1 atm.

Con los resultados obtenidos a 50 bar, podemos decir que la programación en Wolfram Mathematica se realizó de manera correcta, pues se obtienen valores numéricos razonables para datos de viscosidad, aunque, al realizar los cálculos a 1 atm, los resultados no fueron muy favorables, pero se observa que éstos siguen la misma tendencia que los de la referencia.

Este escenario revela una complicación del modelo Bonyadi-Rostami en su predicción de los valores de viscosidad. Ya que sus resultados arrojan una diferencia muy significativa a baja presión.

## 5.2. Viscosidad de gases ligeros

Con los resultados obtenidos, poco favorables, para metano a 1 atm, se consideró realizar el cálculo de viscosidad a gases ligeros como: oxígeno, amoniaco y dióxido de carbono, reportados por Poling, Prausnitz & O'Connell [23]. Adicionalmente, la literatura ofrece datos de viscosidad para metano y n-pentano. Los cuales también fueron comparados.

En la tabla 5.5 se reportan los valores de viscosidad obtenidos. Dichos valores se calcularon siguiendo el algoritmo de cálculo mostrado en el anexo II y cambiando los datos de entrada para cada compuesto. Se puede notar que las viscosidades calculadas para amoniaco exhiben diferencias muy notables al compararse con todas las referencias. Y que, para el caso del oxígeno, los resultados son más similares.

Tabla 5.5 Viscosidades calculadas a las condiciones de la referencia [23].

Compuesto	T[K]	P[bar]	Viscosidad *10 <sup>5</sup> [Pa.s]			
			Prausnitz	Aspen HYSYS	Aspen Plus	Viscosidad BR.nb
Oxígeno	300	30.4	2.128	2.1644	2.1007	2.0821
		81	2.257	2.2964	2.2383	2.2073
		152	2.503	2.5373	2.5049	2.4659
		304	3.193	3.1925	3.2247	3.1760
Amoniaco	420	50	1.49	1.3211	1.5306	1.6693
		150	3.49	2.7464	3.3398	5.9337
		300	5.71	3.9100	6.0214	9.1571
		600	7.52	4.4247	8.1238	11.6478
	520	50	1.85	1.6283	1.8754	1.9911
		150	1.96	1.8733	2.0720	2.7816
		300	2.96	2.6031	2.7705	4.7419
		600	4.66	3.9704	4.7417	7.1559
Dióxido de carbono	360	50	1.90	1.9878	1.9667	2.3784
		100	2.30	2.3435	2.3821	3.3008
		400	7.30	6.6572	7.8873	7.9510
		800	11.04	10.1818	11.2080	9.6728
	500	50	2.43	2.7012	2.5139	2.9533
		100	2.54	2.8465	2.6808	3.2844
		400	4.11	4.2387	4.4261	5.4808
		800	6.36	6.4029	6.9865	8.0251
Metano	200	40	0.90	0.9505	0.9080	1.1867
		100	2.96	2.0863	3.2110	3.4971
		200	4.15	2.4162	4.3670	4.6169
		500	40	1.80	1.7401	1.7028
	500	100	1.87	1.8167	1.7788	1.8997
		200	2.04	1.9733	1.9430	2.1164
		500	2.63	2.5427	2.5504	2.9302
		n-Pentano	600	20.3	1.43	1.4883
81.1	2.42			2.1933	2.2970	3.7527
152	3.83			3.0855	3.9156	5.6459

En la tabla 5.6, se presentan los porcentajes de desviación relativa de los resultados obtenidos anteriormente. En ella se puede comprobar que los resultados para amoniaco tienen las mayores desviaciones, especialmente al comparar los resultados obtenidos del programa Viscosidad BR.nb contra los obtenidos con Aspen HYSYS. Mientras que para el caso del oxígeno se obtienen menores desviaciones en la mayoría de los casos.

Los resultados para oxígeno, calculados con el programa propuesto, arrojan una mayor diferencia al compararlos con Aspen HYSYS, mientras que los comparados con Aspen Plus son menores. Esto sugiere que el programa calcula de forma correcta la viscosidad, ya que Aspen Plus calcula valores muy similares a los de la referencia Prausnitz. Y que, el modelo estudiado ofrece resultados aceptables para oxígeno.

Para el caso del dióxido de carbono, los resultados del programa muestran diferencias en todos los casos, siendo mayores al compararlos con los reportados por Prausnitz. Los datos negativos de desviación relativa, señalan que los valores de la viscosidad calculados con el programa Viscosidad BR.nb, son mayores que los de las referencias en la mayoría de casos.

En esta ocasión, para metano, Poling, Prausnitz & O' Connell ofrecen datos de viscosidad a diferentes condiciones. Pero los resultados obtenidos con el programa nuevamente revelan diferencias notables al compararlos con las referencias, siendo mayores al compararlos con Aspen HYSYS. Nuevamente, el modelo en cuestión presenta problemas para el cálculo de viscosidad para metano y amoníaco. Para el caso de n-Pentano, los resultados tampoco son favorables, pues muestran desviaciones muy grandes cuando se compararon con Aspen HYSYS. Y de igual forma para el dióxido de carbono se obtienen diferencias notables cuando se comparan los resultados del programa Viscosidad BR.nb con las referencias, a excepción del valor calculado con Aspen Plus a 360K y 400bar.

Tabla 5.6 Viscosidades calculadas a las condiciones de la referencia [23].

Compuesto	T[K]	P[bar]	% desviación relativa					
			Viscosidad BR.nb vs Prausnitz	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS	Aspen Plus vs Prausnitz	Aspen HYSYS vs Prausnitz	Aspen Plus vs Aspen HYSYS
Oxígeno	300	30.4	2.16	0.89	3.81	1.28	-1.71	2.94
		81	2.20	1.38	3.88	0.83	-1.74	2.53
		152	1.48	1.55	2.81	-0.07	-1.37	1.28
		304	0.53	1.51	0.52	-0.99	0.02	-1.01
Amoníaco	420	50	-12.03	-9.06	-26.36	-2.72	11.34	-15.86
		150	-70.02	-77.67	-116.05	4.30	21.31	-21.60
		300	-60.37	-52.08	-134.20	-5.45	31.52	-54.00
		600	-54.89	-43.38	-163.24	-8.03	41.16	-83.60
	520	50	-7.63	-6.17	-22.28	-1.37	11.98	-15.17
		150	-41.92	-34.25	-48.48	-5.71	4.42	-10.61
		300	-60.20	-71.16	-82.17	6.40	12.06	-6.43
Dióxido de carbono	360	600	-53.56	-50.91	-80.23	-1.75	14.80	-19.43
		50	-25.18	-20.94	-19.65	-3.51	-4.62	1.06
		100	-43.51	-38.57	-40.85	-3.57	-1.89	-1.65
		400	-8.92	-0.81	-19.44	-8.05	8.81	-18.48
	500	800	12.38	13.70	5.00	-1.52	7.77	-10.08
		50	-21.53	-17.48	-9.33	-3.45	-11.16	6.93
		100	-29.31	-22.51	-15.38	-5.54	-12.07	5.82
		400	-33.35	-23.83	-29.30	-7.69	-3.13	-4.42
		800	-26.18	-14.86	-25.34	-9.85	-0.67	-9.12
		200	-31.86	-30.70	-24.86	-0.89	-5.61	4.47
Metano	200	100	-18.14	-8.91	-67.62	-8.48	29.52	-53.91
		200	-11.25	-5.72	-91.08	-5.23	41.78	-80.74
		500	40	-0.77	-6.52	-4.24	5.40	3.33
	500	100	-1.59	-6.79	-4.57	4.88	2.85	2.09
		200	-3.75	-8.92	-7.25	4.75	3.27	1.54
		500	-11.41	-14.89	-15.24	3.03	3.32	-0.30
n-Pentano	600	20.3	-25.50	-23.45	-20.58	-1.66	-4.08	2.32
		81.1	-55.07	-63.37	-71.10	5.08	9.37	-4.73
		152	-47.41	-44.19	-82.98	-2.23	19.44	-26.91

Con la información de la tabla anterior también se puede ver que, al comparar los resultados de las referencias, éstos exponen variaciones importantes entre ellas. Siendo menores en el caso del oxígeno y mayores para amoniaco cuando se compararon los valores de Aspen Plus y Aspen HYSYS. Esto deja en evidencia que las mismas referencias muestran diferencias en sus resultados al calcular la viscosidad de gases ligeros a las mismas condiciones de presión y temperatura; éstas diferencias pueden deberse a los métodos que cada herramienta utiliza para el cálculo de viscosidad. Adicionalmente, se observa que Aspen Plus arrojó mejores resultados, en la mayoría de casos, con respecto a los reportados por Prausnitz.

### 5.3. Viscosidad etano y butano.

Para observar si el modelo muestra un problema para calcular la viscosidad a baja presión, como se señaló en el apartado 5.1 para metano, se analizaron dos compuestos más reportados en el artículo: etano y butano, los cálculos se realizaron a diferentes temperaturas y una presión de 1 atm, dicha presión se tomó de la figura 2 del artículo Bonyadi-Rostami [10] posteriormente se realizaron los cálculos a 100 bar. La tabla 5.7 ofrece los datos de viscosidad obtenidos para ambos compuestos. Para el caso de la base de datos DIPPR no es posible calcular los datos de viscosidad a 100 bar, debido a las condiciones reportadas en el apartado 4.2.1 de la misma base de datos.

Tabla 5.7 Resultados de viscosidad para etano y butano a 50 bar y 1 atm.

Compuesto	P [bar]	T [K]	Viscosidad *10 <sup>5</sup> [Pa.s]			
			Aspen HYSYS	Aspen Plus	DIPPR	Viscosidad BR.nb
Etano	1.013	312.15	0.98502	0.98771	0.97664	0.94464
		323.15	1.01985	1.02061	1.00817	0.96127
		373.15	1.17828	1.16642	1.14780	1.03814
		423.15	1.33504	1.30604	1.28198	1.11713
		473.93	1.49022	1.44176	1.41336	1.19960
	100	523.26	1.63571	1.56814	1.53680	1.28195
		312.15	3.81718	4.41305	ND	5.04503
		323.15	3.10544	3.93027	ND	4.19150
		373.15	1.87531	1.92129	ND	1.84722
		423.15	1.76004	1.76850	ND	1.66211
Butano	1.013	423.59	1.04878	1.06689	1.05097	1.03565
		444.59	1.10507	1.12474	1.10020	1.06867
		460.93	1.14917	1.16358	1.13841	1.09470
		510.93	1.28532	1.28007	1.25491	1.17618
		100	444.59	4.46102	5.19573	ND
	460.93		3.54918	4.67104	ND	5.73422
	510.93		2.59881	2.82734	ND	3.62288

ND: No disponible en la base de datos DIPPR.

En la tabla 5.8 se presentan las comparaciones realizadas, así como los porcentajes de desviación; se puede observar que los resultados del programa tienen desviaciones significativas (>8% [10]) en varias ocasiones. Para el caso de etano se obtienen menores desviaciones cuando son comparadas con Aspen Plus a 100 bar, mientras que a 1 atm las desviaciones con respecto a la base de datos DIPPR son ligeramente menores que las demás referencias. En el caso de butano, se muestran desviaciones menores cuando se realizaron los cálculos a 1 atm que a 100 bar. Esto permite ver que el modelo BR exhibe un problema de cálculo no sólo a baja presión, como se observó en los resultados para metano. Además, en ésta tabla se identifica que al comparar los resultados de las referencias Aspen HYSYS y DIPPR, éstos resultan ser más cercanos, en la mayoría de casos, para la viscosidad del butano.

Tabla 5.8 Porcentajes de desviación relativa de resultados para etano y butano.

Compuesto	P [bar]	T [K]	% desviación relativa					
			Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS	Viscosidad BR.nb vs DIPPR	DIPPR vs Aspen Plus	DIPPR vs Aspen HYSYS	Aspen Plus vs Aspen HYSYS
Etano	1.013	312.15	4.36	4.10	3.28	1.12	0.85	-0.27
		323.15	5.81	5.74	4.65	1.22	1.15	-0.07
		373.15	11.00	11.89	9.55	1.60	2.59	1.01
		423.15	14.46	16.32	12.86	1.84	3.97	2.17
		473.93	16.80	19.50	15.12	1.97	5.16	3.25
		523.26	18.25	21.63	16.58	2.00	6.05	4.13
	100	312.15	-14.32	-32.17	NA	NA	NA	-15.61
		323.15	-6.65	-34.97	NA	NA	NA	-26.56
		373.15	3.86	1.50	NA	NA	NA	-2.45
		423.15	6.02	5.56	NA	NA	NA	-0.48
		473.93	8.87	10.01	NA	NA	NA	1.26
		523.26	10.96	13.36	NA	NA	NA	2.70
Butano	1.013	423.59	2.93	1.25	1.46	1.49	-0.21	-1.73
		444.59	4.99	3.29	2.87	2.18	0.44	-1.78
		460.93	5.92	4.74	3.84	2.16	0.94	-1.25
		510.93	8.12	8.49	6.27	1.97	2.37	0.41
	100	444.59	-25.80	-46.52	NA	NA	NA	-16.47
		460.93	-22.76	-61.56	NA	NA	NA	-31.61
		510.93	-28.14	-39.41	NA	NA	NA	-8.79

NA: No aplica para la base de datos DIPPR.

Con los resultados de las tablas 5.6 y 5.8 se nota que el modelo reproduce datos de viscosidad inapropiados, pues se han encontrado grandes desviaciones con respecto a los reportados por la literatura y las herramientas comerciales. Esto genera la inquietud de conocer si la programación realizada en Wolfram Mathematica era correcta o si el modelo en cuestión muestra complicaciones para el cálculo de la viscosidad a ciertas condiciones de presión y temperatura.

Para resolver la primera cuestión se consideró realizar la programación del modelo Bonyadi-Rostami en la herramienta Excel®. Para ello se utilizó una presión y una temperatura de las ya empleadas con anterioridad para metano, los datos para el componente puro se tomaron de la tabla 5.1 de este trabajo y con ayuda de Solver se calculó el valor de la viscosidad. El resultado obtenido con Excel fue el mismo que el calculado en Wolfram Mathematica. Posteriormente, se repitieron los cálculos a diferentes condiciones, en los que de nueva cuenta se obtenían los mismos valores en

ambas programaciones. Esto permitió verificar la programación propuesta y sus resultados, por lo que se procedió a resolver la segunda cuestión.

#### 5.4. Resultados del análisis gráfico

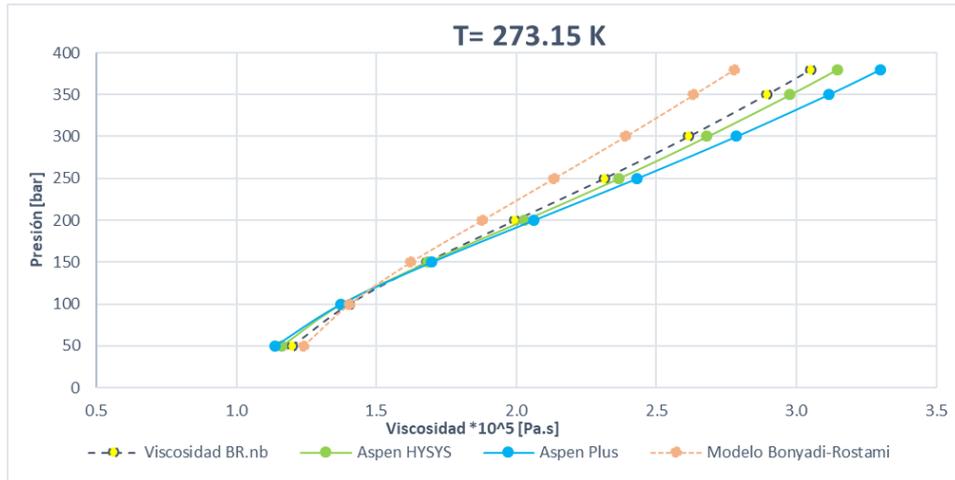
En primer lugar, se trató de verificar si la información reportada en la artículo [10] era reproducible y, debido a que no se presentan tablas con datos de viscosidad, se realizó un análisis de imagen a las figuras 1, 2 y 3 del mencionado trabajo que corresponden a metano, etano y butano, respectivamente. Este análisis consistió en ubicar las coordenadas de distintos puntos del gráfico, utilizando la calculadora gráfica del programa GeoGebra®. Posteriormente, con la información obtenida de presión y temperatura, se calculó la viscosidad en los programas Viscosidad BR.nb, Aspen Plus y Aspen HYSYS. También, se calculó el porcentaje de desviación para comprobar que se obtuvieron resultados similares a los reportados y observar si existe alguna diferencia con las herramientas comerciales.

En la tabla 5.9 se presenta los %AARD para los resultados obtenidos de la figura 1 del artículo [10] correspondiente a metano. Las temperaturas corresponden a cada una de las isothermas reportadas. Se puede observar que el programa Viscosidad BR.nb no reproduce completamente los valores reportados en la figura 1 mencionada y que a 323.15K se obtienen resultados similares, con respecto a los reportados por Bonyadi y Rostami. Dicha diferencia del 1.98% puede atribuirse al valor de los datos de propiedades para el componente puro que los autores hayan utilizado, pues las referencias pueden variar hasta en un 1%, dependiendo de la fuente consultada. También, se puede observar que los resultados del programa Viscosidad BR.nb con respecto a los obtenidos con Aspen Plus, tienen mejores resultados a 323.15 y 348.15K, con desviaciones menores a 1%.

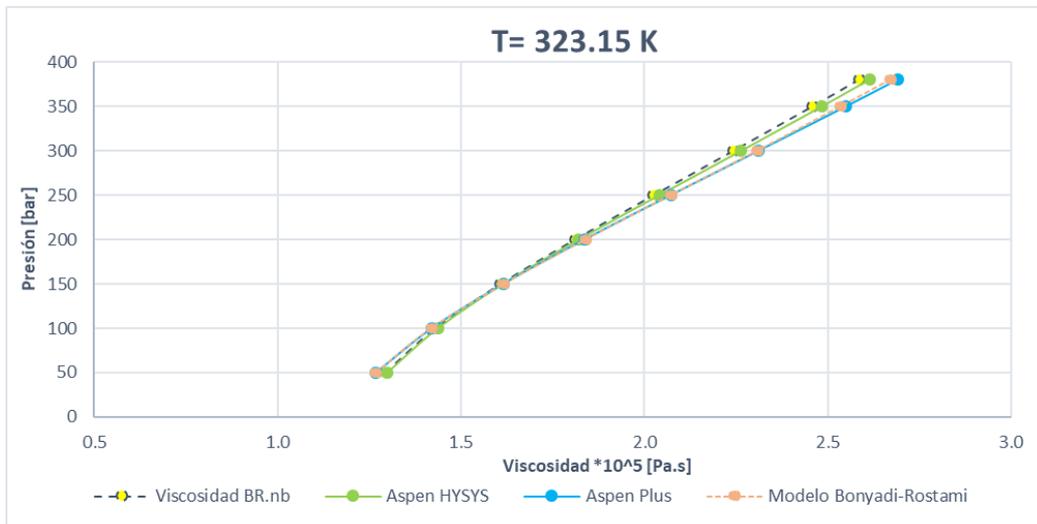
*Tabla 5.9 Comparación de resultados del análisis gráfico para metano.*

Metano		% AARD				
T [K]	P [bar]	Viscosidad BR.nb vs Bonyadi-Rostami	Aspen Plus vs Bonyadi-Rostami	Aspen HYSYS vs Bonyadi-Rostami	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS
273.15	50-380	6.34	11.57	8.70	2.21	4.68
323.15	50-381	1.98	0.25	1.53	0.74	2.14
348.15	50-382	2.13	2.80	1.61	0.62	0.91
377.15	50-383	3.01	3.93	3.77	1.52	0.95
410.93	50-384	3.87	6.40	5.76	2.47	2.69
444.26	50-385	4.56	8.68	7.72	3.50	4.53
Promedio		3.65	5.60	4.85	1.84	2.65

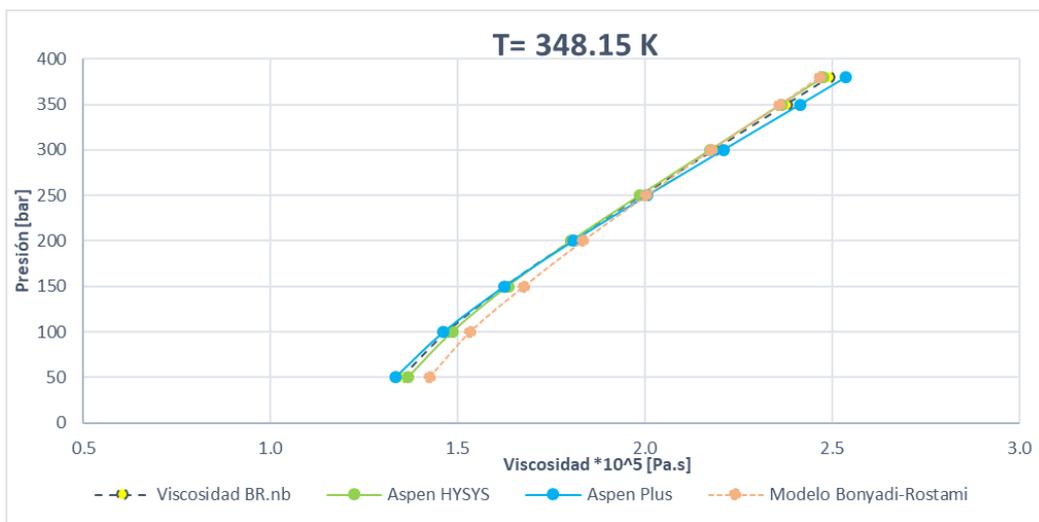
En las gráficas 5.3 – 5.8 se ilustran los comportamientos de viscosidad para cada una de las isothermas, calculados con las diferentes herramientas, el programa propuesto y los reportados en el artículo.



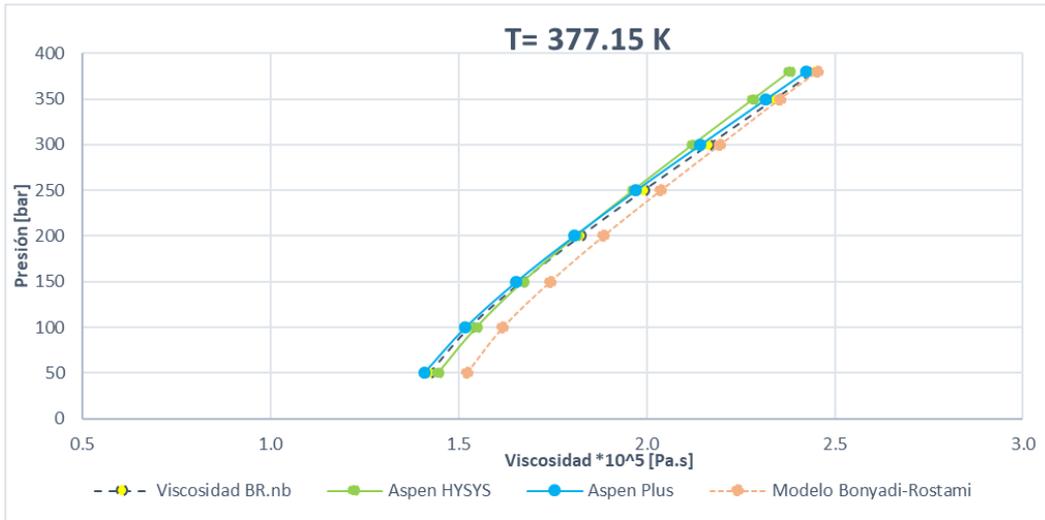
Gráfica 5.3. Comportamiento de la viscosidad para metano a 273.15K.



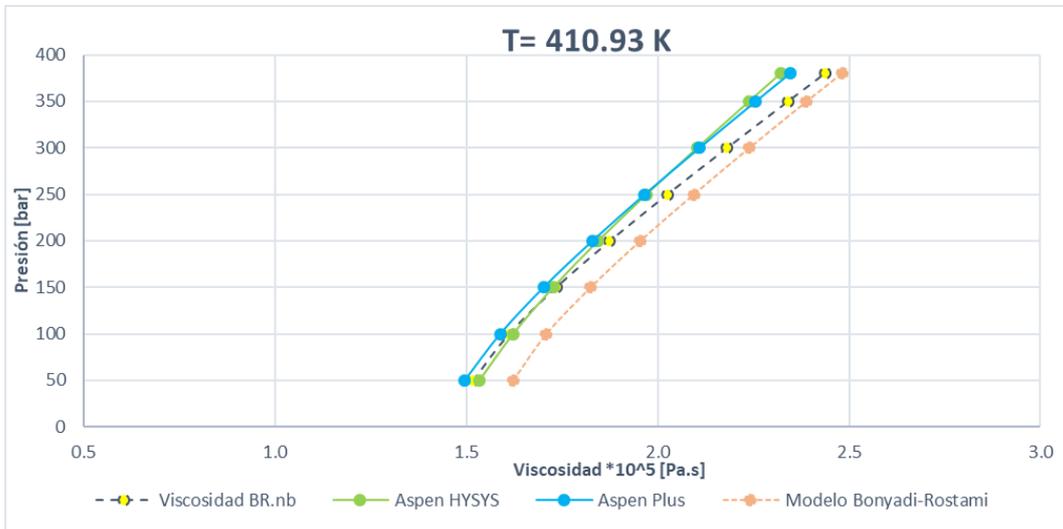
Gráfica 5.4. Comportamiento de la viscosidad para metano a 323.15K.



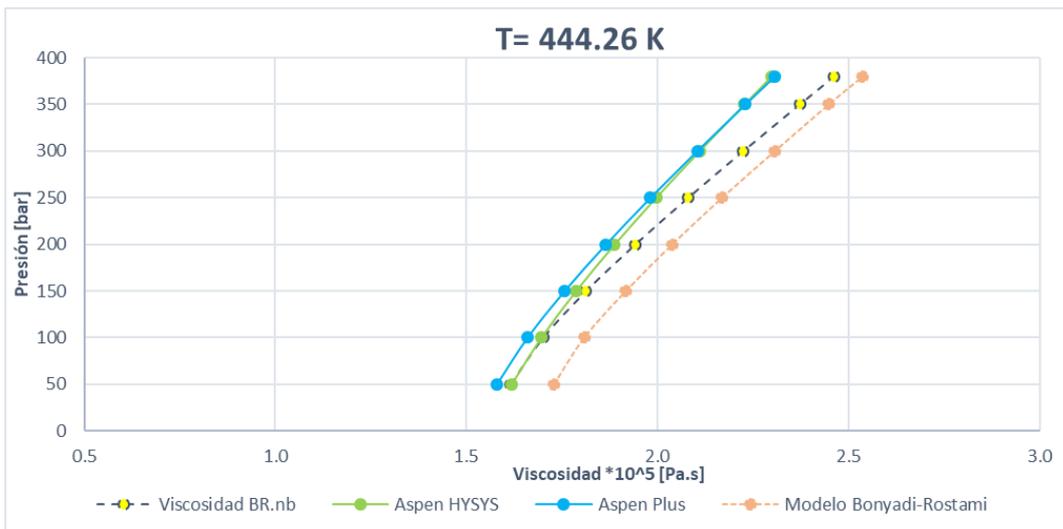
Gráfica 5.5. Comportamiento de la viscosidad para metano a 348.15K.



Gráfica 5.6. Comportamiento de la viscosidad para metano a 377.15K.



Gráfica 5.7. Comportamiento de la viscosidad para metano a 410.93K.



Gráfica 5.8. Comportamiento de la viscosidad para metano a 444.26K.

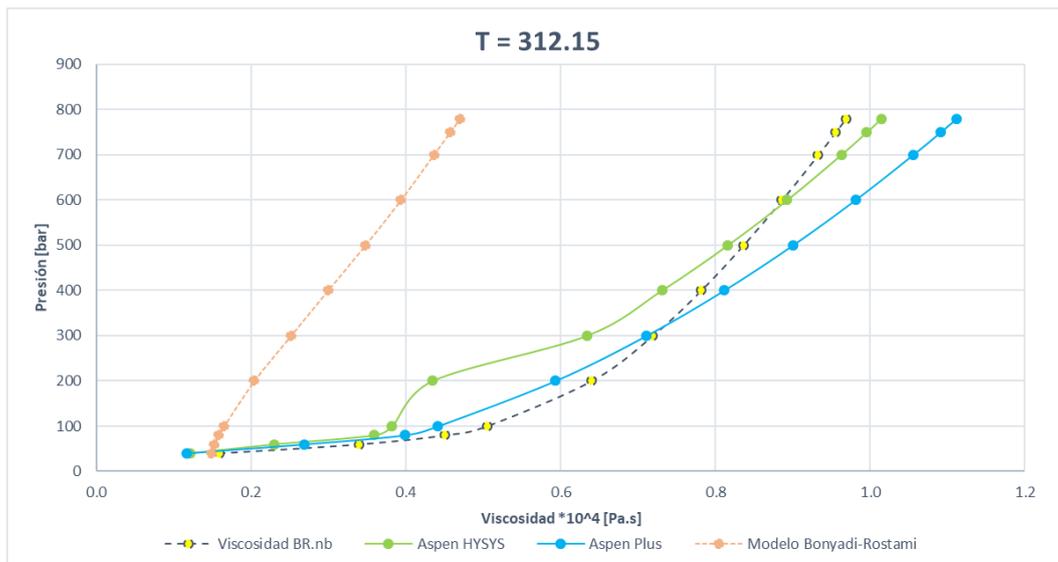
En la gráfica 5.3, se puede observar que los datos reportados por Bonyadi y Rostami se encuentran alejados de los resultados obtenidos con el programa y las herramientas, a presiones mayores de 150 bar. Esta diferencia de resultados es más notable en las gráficas 5.6, 5.7 y 5.8 en la que los valores reportados son mayores a los calculados. Sólo en la gráfica 5.4 se observa que los resultados son similares. Cabe resaltar que, aunque los valores reportados por Bonyadi y Rostami muestran diferencias, los calculados con el programa Viscosidad BR.nb reportan mayor similitud con los resultados de Aspen HYSYS y Aspen Plus en la mayoría de casos, con excepción de los obtenidos a 273.15, 410.93 y 444.26K en los que se obtiene un mejor ajuste a presiones menores de 150 bar.

Los resultados del análisis gráfico para Etano se presentan en la siguiente tabla 5.9, donde se observa que los datos reportados no pudieron ser reproducidos ni con el programa Viscosidad BR.nb, ni con las herramientas comerciales, pues las comparaciones entre éstos exhiben grandes desviaciones, todas mayores a 5%. Por otro lado, los resultados del programa Viscosidad BR.nb tienen un mejor desempeño que los reportados en la figura 2 del artículo, pues se obtuvieron desviaciones menores cuando se compararon contra los resultados de Aspen HYSYS y Aspen Plus.

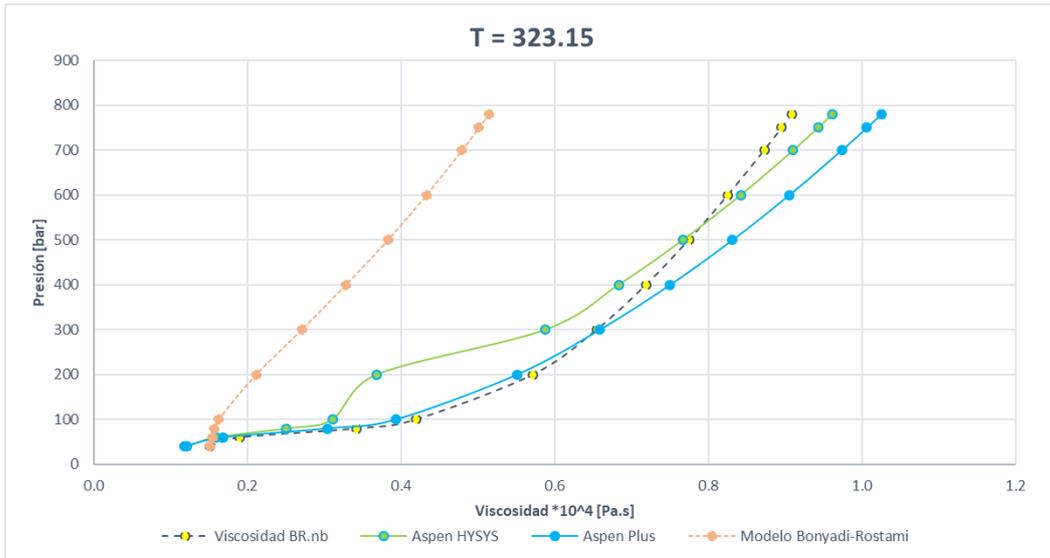
Tabla 5.10 Comparación de resultados del análisis gráfico para etano.

Etano		% AARD				
T [K]	P [bar]	Viscosidad BR.nb vs Bonyadi-Rostami	Aspen Plus vs Bonyadi-Rostami	Aspen HYSYS vs Bonyadi-Rostami	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS
312.15	40-780	140.14	141.07	113.04	13.13	18.34
323.15	40-780	96.95	102.50	77.82	9.84	17.08
373.15	40-780	20.66	32.76	23.28	9.84	5.98
423.15	40-780	15.58	5.82	9.76	10.69	7.54
473.93	40-780	41.03	34.29	36.23	12.04	9.84
523.26	40-780	54.32	49.61	51.07	12.34	10.75
Promedio		61.08	60.49	51.64	11.34	11.55

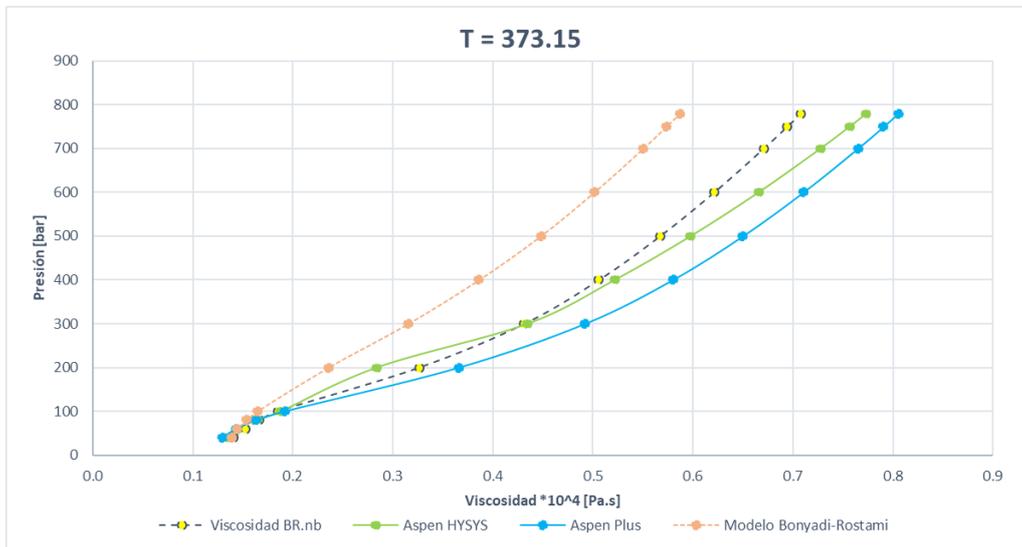
En las gráficas 5.9 – 5.14, se ilustran los comportamientos de los cálculos realizados a las temperaturas reportadas y de los valores obtenidos de la figura 2 ya mencionada.



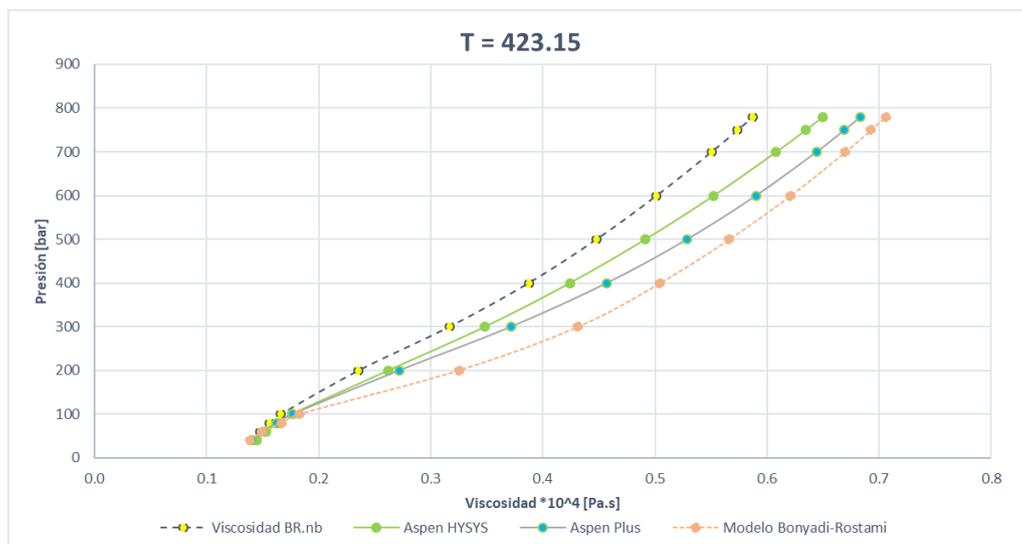
Gráfica 5.9. Comportamiento de la viscosidad para etano a 312.15K.



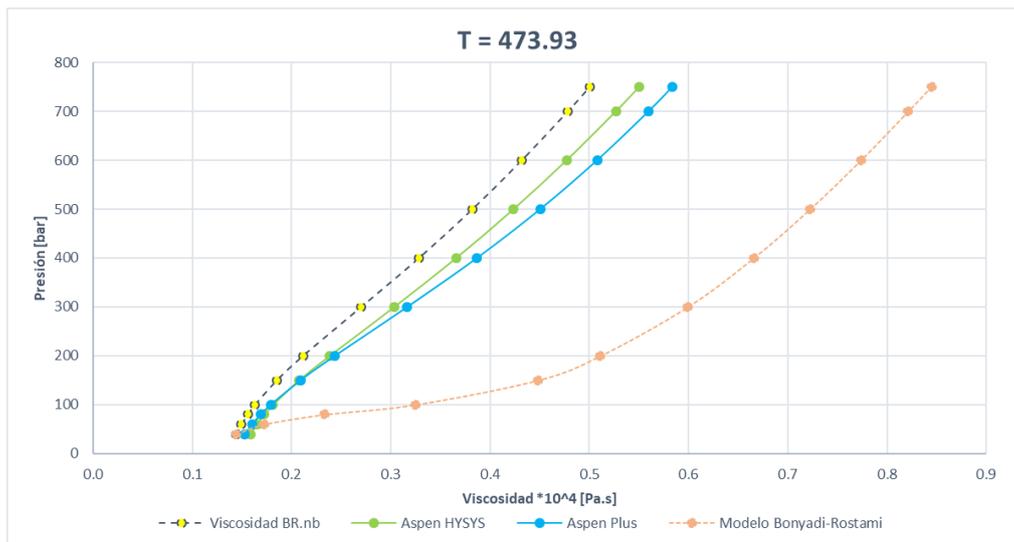
*Gráfica 5.10. Comportamiento de la viscosidad para etano a 323.15K.*



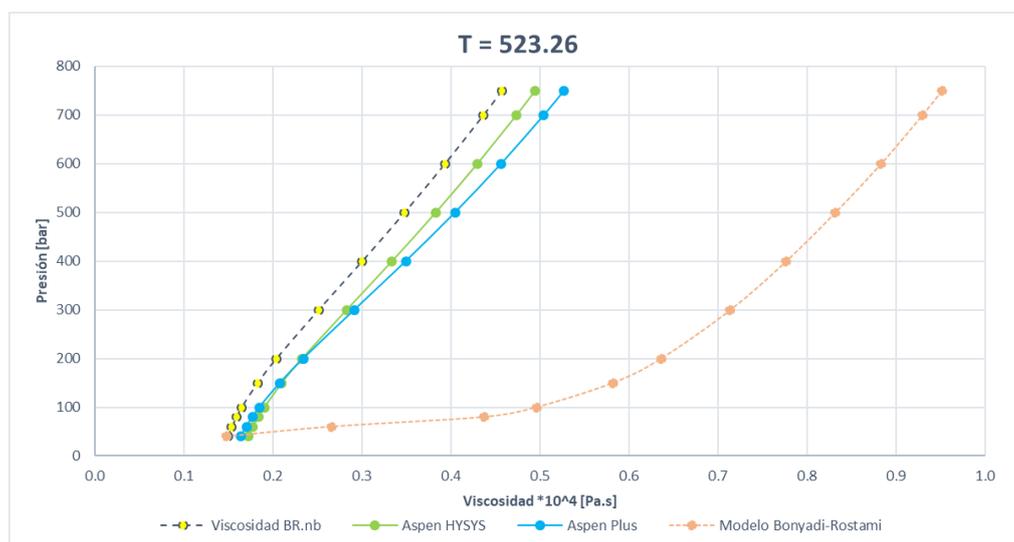
*Gráfica 5.11. Comportamiento de la viscosidad para etano a 373.15K.*



*Gráfica 5.12. Comportamiento de la viscosidad para etano a 423.15K.*



Gráfica 5.13. Comportamiento de la viscosidad para etano a 473.93K.



Gráfica 5.14. Comportamiento de la viscosidad para etano a 523.26K.

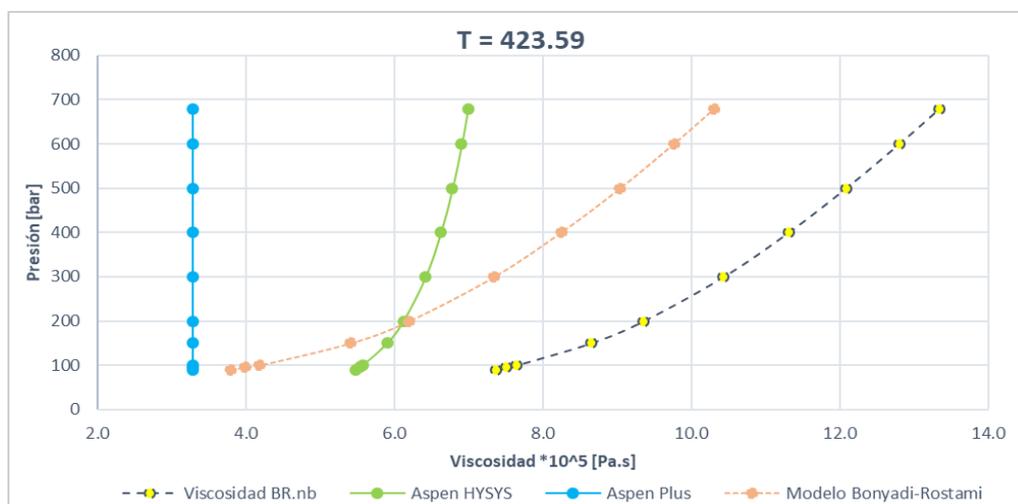
Con base en la comparación de los resultados presentados en la tabla 5.9 y las gráficas 5.9-5.14 se observa que no es posible reproducir los valores reportados en el trabajo de Bonyadi-Rostami [10] para el caso de Etano, pues se obtienen desviaciones mayores al 100% en los cálculos realizados a 312.15K. Nuevamente se revela que los resultados del programa Viscosidad BR.nb se encuentran más cercanos a los calculados con las herramientas comerciales y que siguen una tendencia similar.

Para el caso del butano, las comparaciones de los resultados del análisis gráfico se presentan en la tabla 5.11. En la que rápidamente resalta una desviación muy grande que corresponde a la comparación del modelo Viscosidad BR.nb contra Aspen Plus, pero ésta desviación se debe a que dicha herramienta a 423.59K, devuelve el mismo valor de viscosidad en todo el rango de presiones ( $3.281866 \times 10^{-5}$  Pa.s), el lector podrá verificar éste resultado realizando la simulación en Aspen Plus V10.

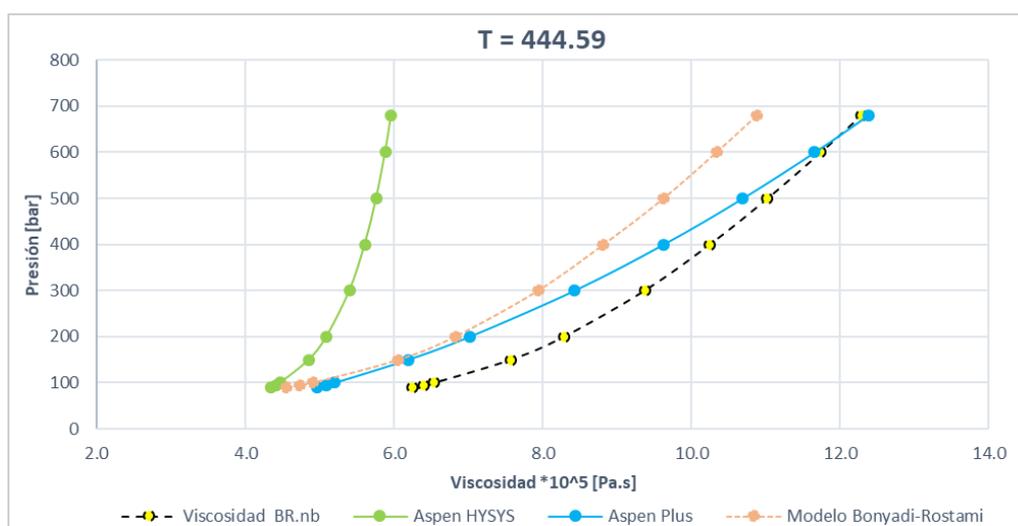
Tabla 5.11 Comparación de resultados del análisis gráfico para butano.

Butano		% AARD				
T [K]	P [bar]	Viscosidad BR.nb vs Bonyadi-Rostami	Aspen Plus vs Bonyadi-Rostami	Aspen HYSYS vs Bonyadi-Rostami	Viscosidad BR.nb vs Aspen Plus	Viscosidad BR.nb vs Aspen HYSYS
423.59	90-680	54.94	45.31	24.52	206.29	59.43
444.59	90-680	22.80	8.05	26.25	14.05	70.82
460.93	70-680	0.65	12.47	45.25	16.23	87.29
510.93	45-680	40.97	46.04	65.10	12.33	68.40
Promedio		29.41	28.03	40.99	59.94	71.79

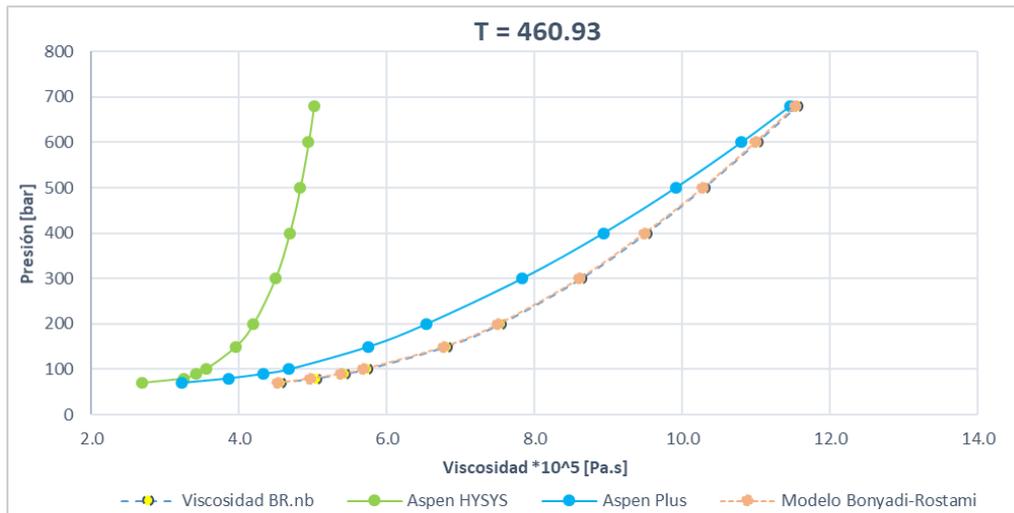
También, se puede observar que en la mayoría de los resultados se tienen desviaciones muy grandes, con excepción de los obtenidos a 460.93K con el programa Viscosidad BR.nb, pues al compararlos con los valores reportados, se obtuvo una buena correlación con una desviación menor al 1%. Las gráficas 5.15 – 5.18 describen el comportamiento de las isoterms calculadas.



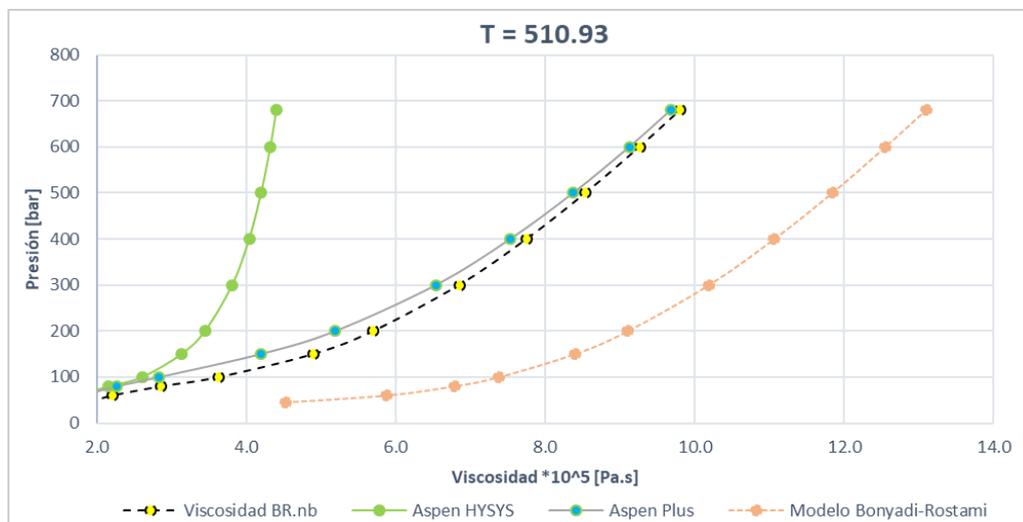
Gráfica 5.15. Comportamiento de la viscosidad para butano a 423.59K.



Gráfica 5.16. Comportamiento de la viscosidad para butano a 444.59K.



Gráfica 5.17. Comportamiento de la viscosidad para butano a 460.93K.



Gráfica 5.18. Comportamiento de la viscosidad para butano a 510.93K.

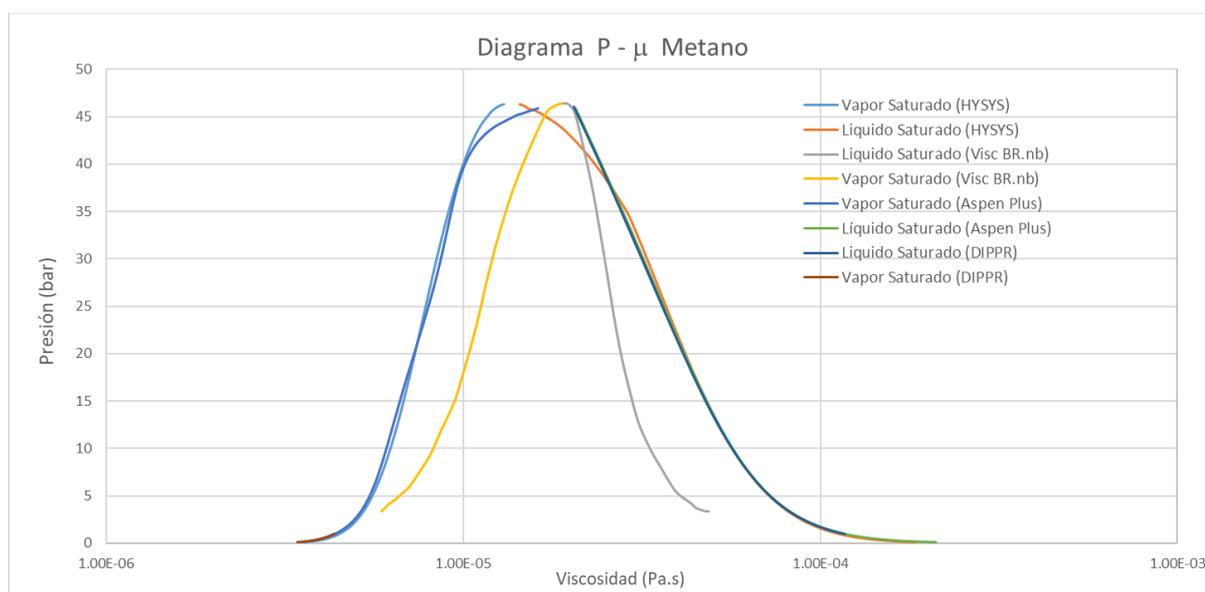
En la gráfica 5.15 se observa, como ya se mencionó, el valor constante que calcula la herramienta Aspen plus a las condiciones dadas, pero también se observa que ninguna de las herramientas devolvió valores similares. Sólo a partir de la gráfica 5.16 se muestra que el programa Viscosidad BR.nb sigue una tendencia similar a los resultados de Aspen Plus, pero a pesar de ello sigue existiendo una desviación significativa, ésta tendencia se vuelve más clara en la gráfica 5.18 con una desviación menor en los resultados. Adicionalmente, como ya se mencionó, sólo a 460.93K se observa que el programa propuesto y los datos reportados devuelven resultados muy similares con una desviación promedio de 0.65%.

Cabe mencionar que aunque se obtienen desviaciones muy grandes, los resultados de las herramientas Aspen Plus, Aspen HYSYS y el programa Viscosidad BR.nb, a las condiciones reportadas, siguen tendencias similares.

## 5.5. Resultados envolventes de fase

Como se mencionó en el apartado 4.4.4, los modelos basados en ecuaciones de estado deben reproducir el comportamiento de equilibrio de las sustancias. Por esta razón se buscó construir las envolventes de fase con el programa Viscosidad BR.nb para cada compuesto de la serie de parafinas y posteriormente compararlas con las construidas con las herramientas comerciales, para observar si el modelo propuesto por Bonyadi y Rostami muestra un desajuste. Dichas envolventes se obtuvieron modificando la programación propuesta, como lo ejemplifica el anexo III, en la que se incluye la dependencia de la presión y temperatura por medio del comando ParametricPlot[{}], en la que se fijaron distintos valores de temperatura y un rango de presiones menor o igual que la presión crítica del compuesto.

La gráfica 5.19 ilustra la envolvente de fases obtenida, para el caso de metano, con el programa Viscosidad BR.nb modificado (Anexo V), así como las envolventes obtenidas con las herramientas Aspen Plus®, Aspen HYSYS®, DIPPR.



Gráfica 5.19. Envolventes de fase para Metano en el plano  $P - \mu$ .

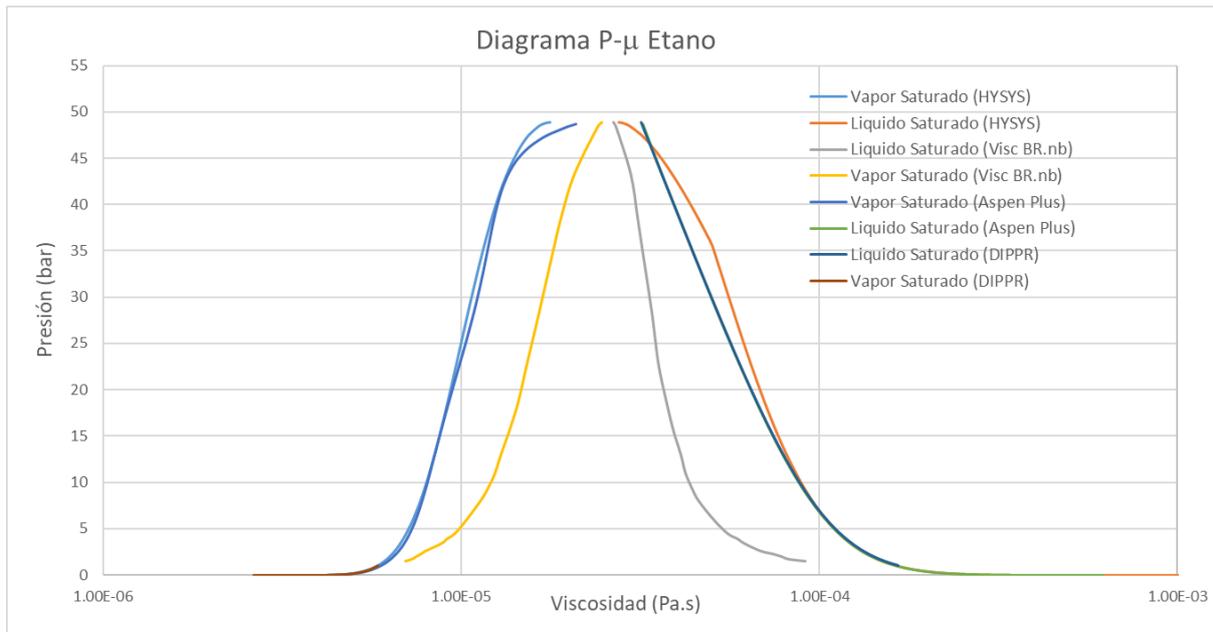
En la gráfica 5.19 se observan claramente las envolventes de fases. En la cual, como se mencionó en el apartado 4.4.4., la parte izquierda de la envolvente corresponde a la zona del gas saturado y el lado derecho corresponde la zona del líquido saturado.

Así mismo, se observó que, con en análisis cualitativo de ciertos puntos, la envolvente de fases obtenida con el programa Viscosidad BR.nb no coincide con las envolventes que ofrecen las herramientas comerciales. Por lo que se consideró que los autores ajustaron los parámetros las ecuaciones Q1, Q2 y Q3 a ciertas zonas de presión y temperatura en los cuales los valores de viscosidad si son reproducibles o que éstos parámetros fueron ajustados con valores experimentales propios de los autores.

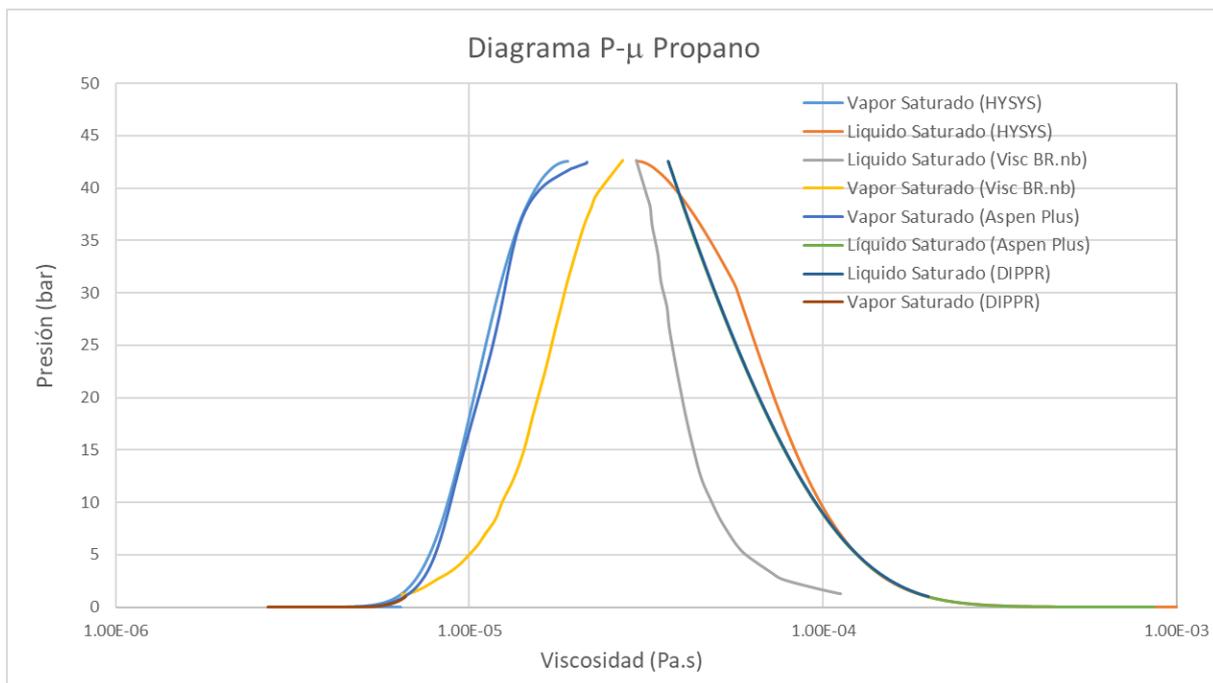
Para comprobar si éste fenómeno ocurría en otros compuestos y no sólo en el metano, se realizaron las envolventes de fases a toda la serie de parafinas presentadas en el apartado 4.2. Estas envolventes de fase se construyeron en un rango de temperaturas y presiones menores a las condiciones críticas del compuesto. De igual

forma, se compararon con las envolventes de fase obtenidas con las herramientas mencioandas.

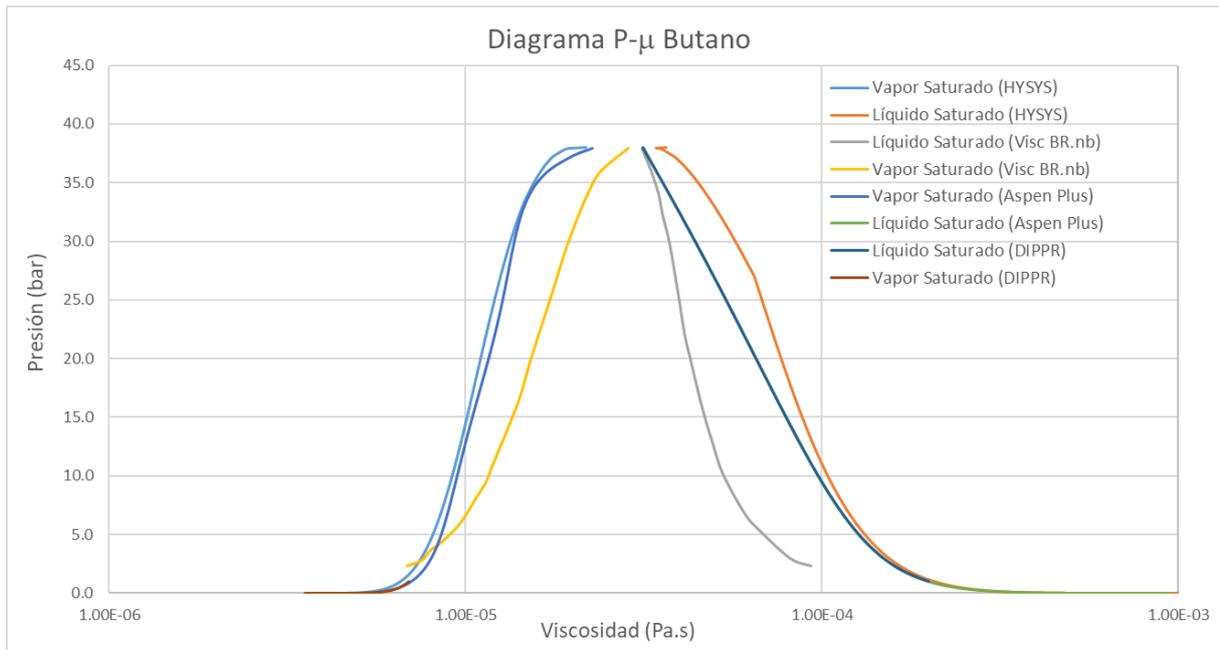
Las gráficas 5.20 - 5.28 presentan las envolventes obtenidas para los compuestos: Etano, Propano, Butano, Pentano, Hexano, Heptano, Octano, Nonano y Decano. Y los anexos V – XIV muestran los algoritmos de cálculo para las envolventes de cada componente, respectivamente.



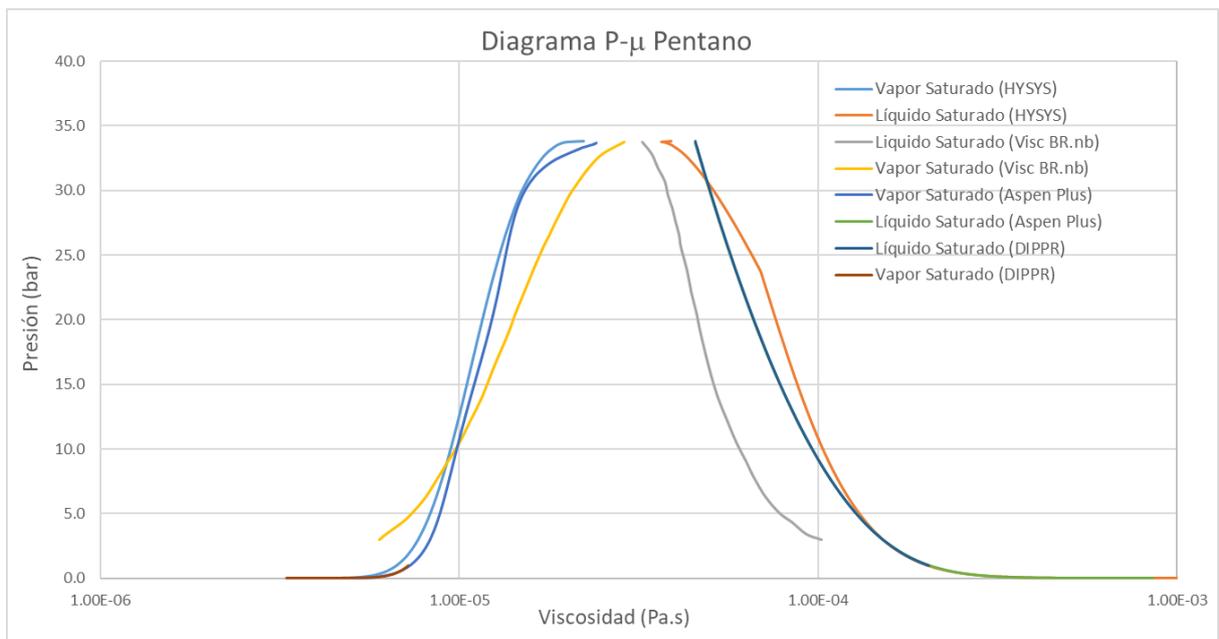
Gráfica 5.20. Envolventes de fase para Etano en el plano P- $\mu$ .



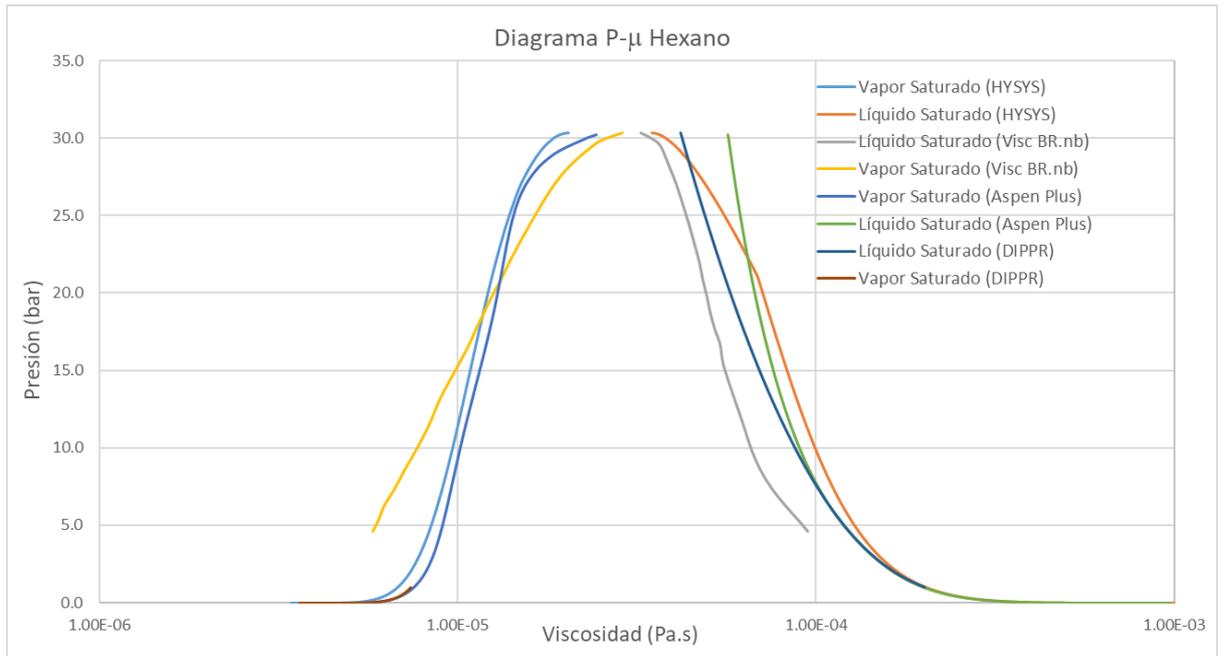
Gráfica 5.21. Envolventes de fase para Propano en el plano P -  $\mu$ .



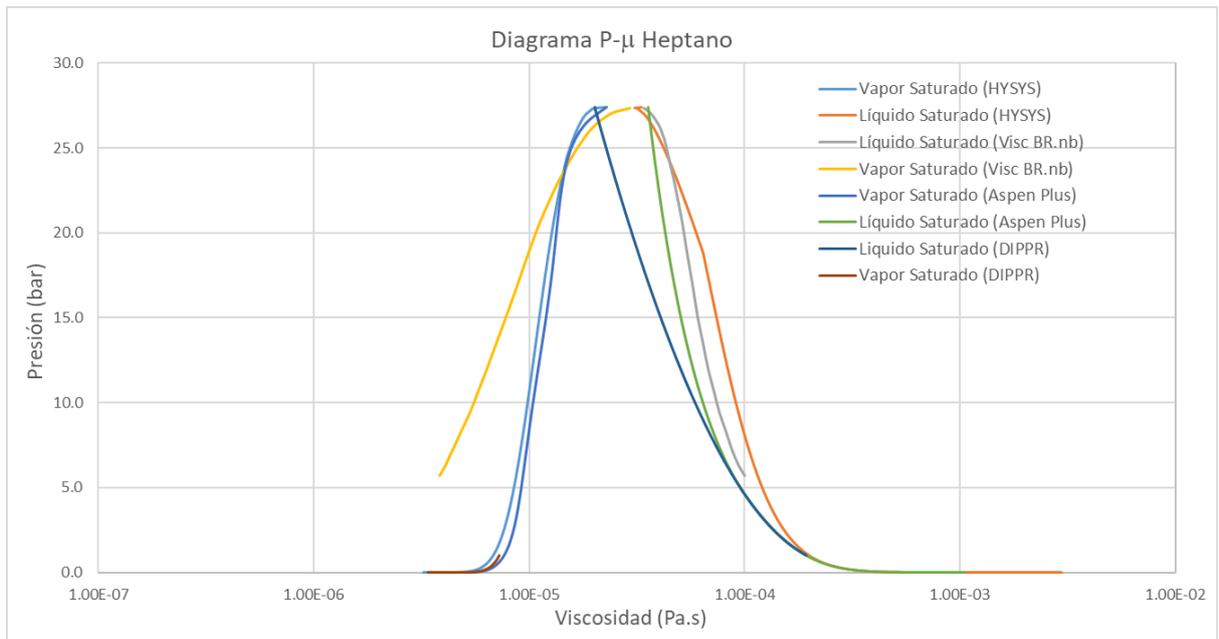
Gráfica 5.22. Envoltentes de fase para Butano en el plano  $P - \mu$ .



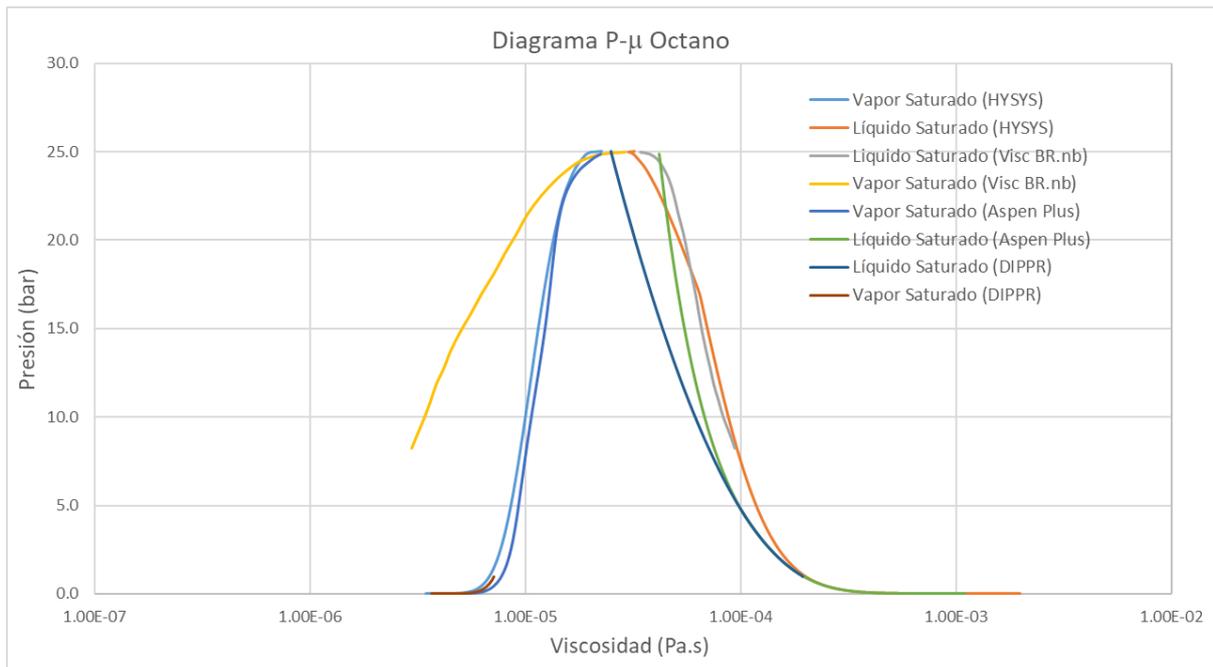
Gráfica 5.23. Envoltentes de fase para Pentano en el plano  $P - \mu$ .



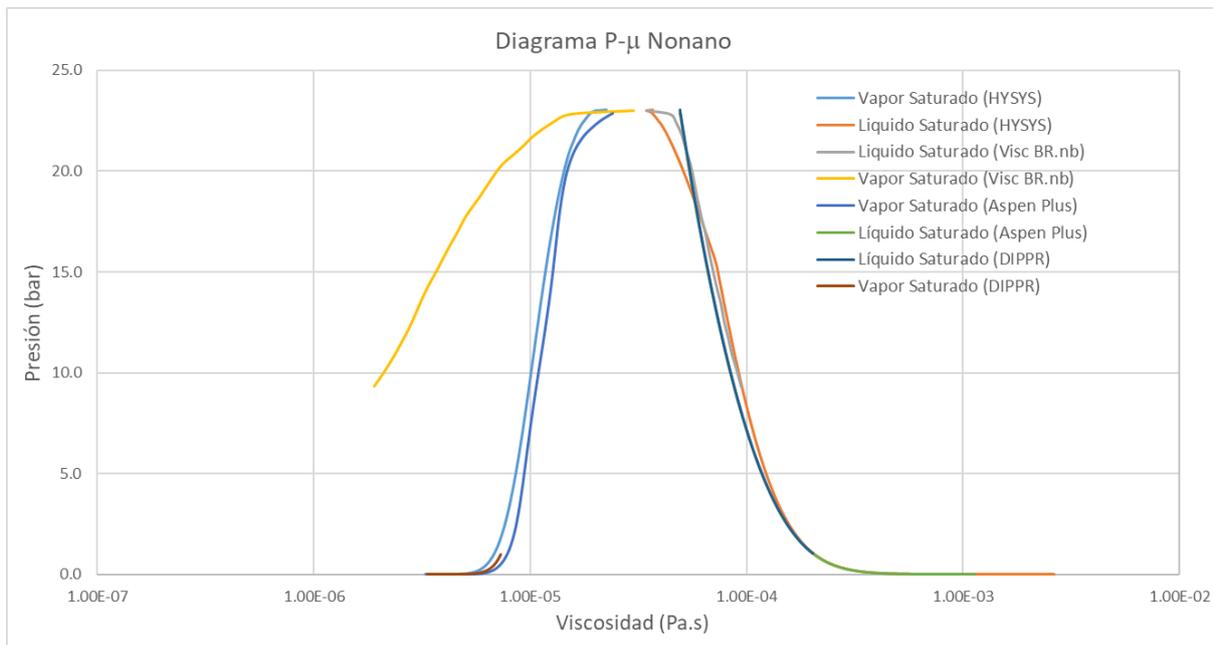
Gráfica 5.24. Envoltentes de fase para Hexano en el plano P -  $\mu$ .



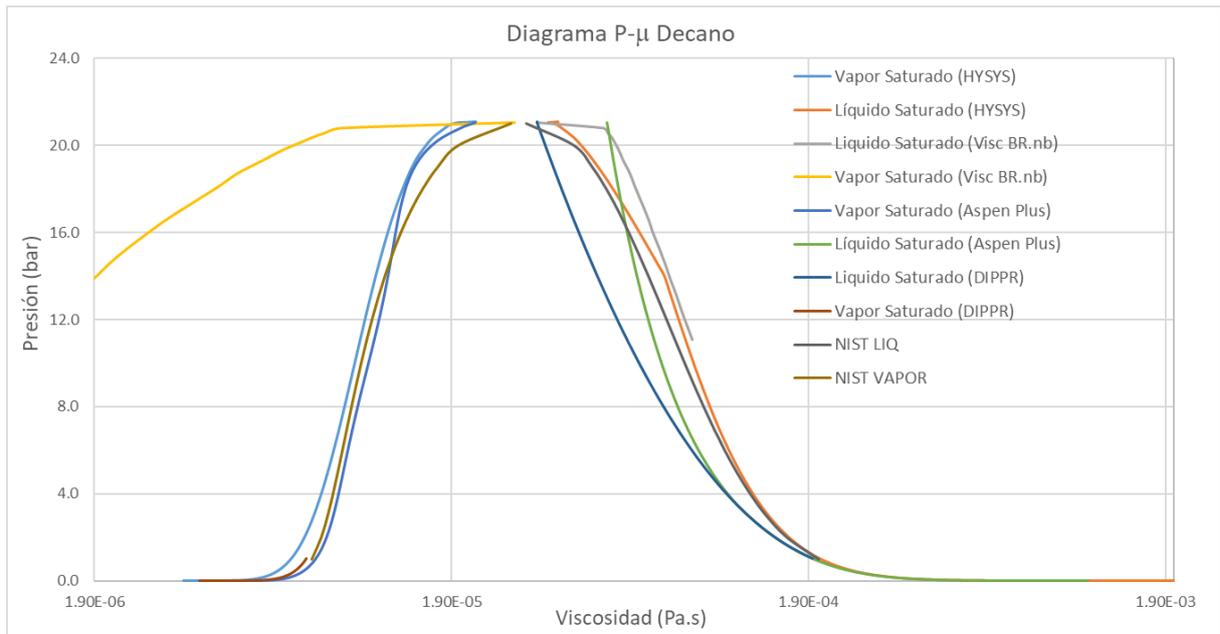
Gráfica 5.25. Envoltentes de fase para Heptano en el plano P -  $\mu$ .



Gráfica 5.26. Envolventes de fase para Octano en el plano  $P - \mu$ .



Gráfica 5.27. Envolventes de fase para Nonano en el plano  $P - \mu$ .



Gráfica 5.28. Envoltentes de fase para Decano en el plano P -  $\mu$ .

En las gráficas 5.20, 5.21 y 5.22 se nota que los resultados del programa Viscosidad BR.nb caen dentro de la zona de equilibrio que las demás herramientas calculan. Por otra parte, a partir de la gráfica 5.23 (pentano) algunos de los datos se encuentran por fuera de la zona de equilibrio.

También, se puede observar que incluso las herramientas comerciales exhiben desviaciones en el cálculo de la viscosidad del líquido saturado. Siendo las más relevantes, las gráficas obtenidas para Hexano, Heptano, Octano y Decano, las cuales reportan desviaciones significativas.

Estos resultados permiten observar que el modelo propuesto por Bonyadi y Rostami presentan un problema, pues la ecuación cúbica no permite obtener los datos de equilibrio de los componentes puros, pues predice inapropiadamente la línea de saturación del vapor y en algunos casos la línea de saturación del líquido.

## 6. CONCLUSIONES

- En este trabajo se programaron las ecuaciones del modelo propuesto por Mohammad Bonyadi y Mina Rostami [10] con el uso del software Wolfram Mathematica. Esta programación se realizó siguiendo la información reportada en la referencia. Con ello fue posible realizar los primeros cálculos de viscosidad para el metano y realizar su comparación con valores reportados en la literatura. Pero estos valores mostraron un grado de error significativo.
- Se verificó que la programación del modelo se realizara de forma correcta. Mediante el uso de Excel y la herramienta Solver se resolvieron las ecuaciones y la comparación de los resultados en ambas programaciones, arrojan los mismos datos.
- Se calcularon valores de viscosidad para tres de los compuestos mencionados en la en el artículo [10], pero los resultados no fueron favorables, pues exhibieron desviaciones significativas al compararlos con datos obtenidos de la literatura y de las herramientas comerciales, así como de la base de datos DIPPR.
- El análisis gráfico realizado a las figuras reportadas en el artículo, reveló que no podían ser reproducibles. Ya que a pesar de tomar los datos de las figuras, los resultados calculados con el programa Viscosidad BR.nb no coinciden con los presentados por Bonyadi y Rostami . Además, se observó que los calculos obtenidos con Wolfram Mathematica arrojan una menor desviación y una tendencia similar en el comportamiento del fluido al compararlos con los datos de Aspen HYSYS y Aspen Plus.
- Para un futuro trabajo, se propone utilizar a los parámetros Q1, Q2 y Q3 como parámetros de ajuste. De esta manera se corregirán las desviaciones de la viscosidad para la fase vapor.
- El modelo en cuestión no reproduce el comportamiento fenomenológico de la fase vapor de los fluidos, pues se observó que los resultados obtenidos, para algunos compuestos, caían dentro de la zona de saturación que las demás herramientas calculaban y que otros quedaban fuera de esa zona. Se concluye que este nuevo modelo no puede ser aplicado como una referencia para el cálculo de viscosidades en fluidos de yacimiento.

## 7. Bibliografía

- [1] C. D. C. Gómez, *Diseño , validación e implementación de un sistema experimental de alta presión y temperatura para medición de viscosidad de aceites crudos con precisión de referencia*, México: Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM, 2014.
- [2] H. F. J. S. T. e. a. Alboudwarej, «La Importacia del Petroleo Pesado,» *Oilfield Review*, pp. 38-59, 2006.
- [3] PEMEX, «[www.pemex.com](http://www.pemex.com),» 31 Diciembre 2019. [En línea]. Available: [https://www.pemex.com/ri/Publicaciones/Anuario%20Estadistico%20Archivos/anuario-estadistico\\_2019.pdf](https://www.pemex.com/ri/Publicaciones/Anuario%20Estadistico%20Archivos/anuario-estadistico_2019.pdf).
- [4] L. A. Herrera, *Modelo experimental de fluidos de alta viscosidad con reologías no-newtonianas*, México: Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM., 2018.
- [5] R. Byron Bird, W. E. Steward y E. N. Lightfoot, *Transpor Phenomena*, 2nd ed., New York: John Wiley & Sons, Inc., 1924.
- [6] C. H. Whitson y C. R. Brulé, «Monograph volume 20,» *Phase Behavior*, p. 240, 2000.
- [7] A. S. T. N. C. Patel, «A New Cubic Equation of State for Fluids and Fluids Mixtures,» *Chemical Engineering Science*, vol. 37, nº 3, pp. 463-473, 1982.
- [8] G. Soave, «Equilibrium constants from modified Redlich-Kwong equation state,» *Chemical Engineering Science*, vol. 27, nº 6, pp. 1197-1203, 1972.
- [9] D. a. R. D. Peng, «A New Two-Constan Equation of State,» *Industrial Engineering Chemistry*, vol. 15, nº 1, p. 59, 1976.
- [10] M. Bonyadi y M. Rostami, «A new viscosity model based on Soave-Redlich-Kwong equation of state,» *Fluid Phase Equilibria*, vol. 451, pp. 40-47, 2017.
- [11] L. W. S. R. T. G. X.Q. Guo, «Viscosity model based on equations of state for hydrocarbon liquids and gases.,» *Fluid Phase Equilibria*, nº 139, pp. 405-421, 1997.
- [12] L. W. T.B. Fan, «A viscosity model based on Peng-Robinson equation of state for light hydrocarbon liquids and gases.,» *Fluid Phase Equilibria*, nº 247, pp. 59-69, 2006.
- [13] J. Lohrenz, B. G. Bray y C. R. Clark, «Calculating viscosities of reservior fluids from their compositions.,» *J. Pet. Technol.*, nº 16, pp. 1171-1176, 1964.
- [14] C. H. Whitson y M. R. Brulé, *Phase Behavior*, 1st ed., Texas: Society of Petroleum Engineers Inc., 2000.
- [15] ASPEN TECHNOLOGY, *Aspen HYSYS*, vol. 10, 2019.
- [16] P. Mathias, «A versatile phase equilibrium equation of state,» *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, vol. 385, p. 22, 1983.

- [17] R. a. V. J. Stryjek, «PRSV: An improved Peng-Robinson equation of state for pure compounds and mixtures.,» *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, vol. 323, p. 64, 1986.
- [18] J. v. d. Waals, *On the continuity of the gas and liquid state*, Leiden, 1873.
- [19] J. K. O. Redlich, «Redlich-Kwong equation of state: review for chemical engineering calculations,» *On the thermodynamics of solutions*, vol. 44, p. 233, 1949.
- [20] G. Soave, «Equilibrium constants from a modified redlich-kwong equations of state,» *Chem. Eng. Sci.*, nº 27, pp. 1197-1203, 1972.
- [21] D. a. P. D. Robinson, «The characterization of the heptanes and heavier fracción for the GPA Peng-Robinson program,» *Gas Producer Assn*, vol. 28, 1978.
- [22] A. K. M. W. D. a. S. W. Y. Mehrotra, «A Review of practical calculation methods for viscosity of liquids hydrocarbons and their mixtures,» *Fluid phase equilibria*, nº 117, pp. 334-335, 1996.
- [23] B. E. Poling y J. P. O'Connell, *The Properties of Gases and Liquids*, 5th ed., New York, 2000.
- [24] J. F. E. a. H. J. M. Hanley, «Prediction of transport properties. 1. Viscosity of fluids and mixtures,» *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, vol. 20, nº 4, pp. 323-332, 1981.
- [25] K. K. A. F. K. A. Petersen, «Prediction of Viscosities of Hydrocarbon Mixtures,» *Fluid phase equilibria*, vol. 70, pp. 293-308, 1991.
- [26] S. E. Quiñones Cisneros, «The friction theory (f-theory) for viscosity modeling,» *Fluid phase equilibria*, vol. 169, nº 2, pp. 249-276, 2000.
- [27] L. F. I. Reséndiz, *Modelado de la Viscosidad de Compuestos Puros en Amplios Intervalos de Temperatura y Presión*, U. N. A. d. México, Ed., D.F., 2013.
- [28] H. T. K. J. E. Little, «A Correlation of the Viscosity of Hydrocarbon Systems with Pressure, Temperature and Composition.,» *Society of Petroleum Engineers (SPE)*, 1966.
- [29] C. Y. S. S. X. R. C. J. C. T. M. G. X. Q. Guo, «Equation of state analog correlations for the viscosity and thermal conductivity of hydrocarbons and reservoir fluids,» *J. Pet. Sci. Eng.*, vol. 30, nº 1, pp. 15-27, 2001.
- [30] L. A.S., «Prediction of vapor and liquid viscosities from the Lawal-Lake-Silberberg equation of state,» *Society of Petroleum Engineers of AIME*, nº 14926, 1986.
- [31] T.-M. G. L.-S.Wang, «A Unified Viscosity Model for Hydrocarbon Gases and Liquids Based on Transposed Patel-Teja Equation of State,» *J. Chem. Ind. Eng.*, vol. 6, nº 38, 1991.
- [32] A. I. o. C. E. «DIPPR Data compilation».
- [33] Markus Hohenwarter, *Calculadora gráfica GeoGebra*.

- [34] R. H. Ewell, «Theory of viscosity of liquids as a function of temperatura and pressure,» *J. Chem. Phys.*, nº 5, 1937.
- [35] T. B. Wang y L. S. Wang, «A viscosity model based on peng robinson equation of state for light hydrocarbon liquids and gases,» *Fluid Phase Equilibria*, nº 247, pp. 59-60, 2006.
- [36] O. A. Uyehara y U. K. Watson, «A universal viscosity correlation,» *Nat. Pet. News*, nº 36, pp. 714-722, 1944.
- [37] J. M. Smith, H. C. Van Ness y M. M. Abbot, *Introducción a la termodinámica en ingeniería química*, 5th ed., México: Mc Graw Hill, 1996.
- [38] O. A. Hougen y K. M. Watson, *Chemical Process Principles*, New York: John Wiley & Sons, Inc., 1952.
- [39] D. W. Green y R. H. Perry, *Perry's Chemical Engineers' handbook*, 8th ed., New York: Mc Graw Hill, 2008.
- [40] U. D. o. Commerce, «National Institute of Standards and Technology (NIST),» [En línea]. Available: <https://www.nist.gov/>.
- [41] K. L. K. Stephan, *Viscosity of Dense Fluids*, New York and London: Plenum Press, 1979.

## 8. ANEXOS

### Anexo I. Algoritmo de cálculo de viscosidad “Viscosidad BR.nb”

```
Viscosidad BR.nb - Wolfram Mathematica 12.0 Student Edition - uso personal solamente
Archivo Edición Insertar Formato Celda Gráficos Evaluación Paletas Ventana Ayuda
WOLFRAM MATHEMATICA | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES
+
ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017) 40 - 47*)

(*Datos requeridos*)
ω = 0.000;
Tc = 000 (*K*);
Pc = 00.00 (*Bar*);
Zc = 0.000;
Mw = 00.000 (* g/mol*);
T = -- (*K*);
P = -- (*Bar*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω2;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr = P / Pc;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_] := e(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3*(√Pr-1)2;
τ[T_] := (1 + Q1*(Tr[T]*Pr)0.5 - 1)-2;
μc = 7.7 * 10-7 * Tc-1/6 * Mw0.5 * Pc2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_] := rc * τ[T];
a = 0.42748 * (rc2 * Pc2) / Tc;
b = 0.08664 * rc * Pc / Tc;
b'[T_] := b * φ[T];

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_] := NSolve[-T +  $\frac{r[T] * P}{\mu - b'[T]} - \frac{a}{\mu(\mu + b)} == 0, \mu, \text{Reals}];$ 
|resolver numérico |números reales

x1[T_] |
```

## Anexo II. Modificación de algoritmo “Viscosidad BR.nb” para la dependencia de presión y temperatura.

WOLFRAM MATHEMATICA | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
[borra todo]

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos requeridos*)
ω = 0.000;
Tc = 000 (*K*);
Pc = 00.00 (*Bar*);
Zc = 0.000;
Mw = 00.000 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω2;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr[P_] := P / Pc;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3*(√Pr[P]-1)2;
τ[T_, P_] := (1 + Q1*(Tr[T]*Pr[P])0.5 - 1)-2;
μc = 7.7 * 10-7 * Tc-1/6 * Mw0.5 * Pc2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_, P_] := rc * τ[T, P];
a = 0.4274802335 * (rc2 * Pc2) / Tc;

b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc;
b'[T_, P_] := b * φ[T, P];

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b'[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
[resolvedor numerico] [números reales]

x1[---, ---]
x1[---, ---]
x1[---, ---]

```

### Anexo III. Modificación de algoritmo “Viscosidad BR.nb” para el cálculo de viscosidad en la zona de saturación.

WOLFRAM MATHEMATICA | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
  M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos requeridos*)
ω = 000;
Tc = 000(*K*);
Pc = 000(*Bar*);
Zc = 000; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 000(* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr[P_] := P / Pc;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3 * (√Pr[P] - 1)^2;
τ[T_, P_] := (1 + Q1 * ((Tr[T] * Pr[P])^0.5 - 1))^-2;
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_, P_] := rc * τ[T, P];
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc;
b'[T_, P_] := b * φ[T, P];

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b'[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolver numérico |números reales

s = μ /. Last[x1[T, P]];
|último

ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[000, rr]]) * 10^5, rr}}, {rr, 0, 50},
|gráfico paramétrico |último

AspectRatio → 1 / 1, PlotRange → {{0, 5}, {0, 50}}, Frame → True,
|rango de representación |marco |verdadero

FrameLabel → {"Viscosidad *10^5 (Pa*s)", "Presión (bar)"},
|etiqueta de marco

PlotLegends → {"T = 000K"}]
|leyendas de representación

```

## Anexo IV. Algoritmo de cálculo para la viscosidad de Metano a T y P.

Viscosidad BR-Metano- ANEXO IV.nb - Wolfram Mathematica 12.0 Student Edition - uso personal solamente

Archivo Edición Insertar Formato Celda Gráficos Evaluación Paletas Ventana Ayuda

WOLFRAM MATHEMATICA | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

In[ ]:= ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo de calculo de viscosidad usando metodo reportado por M.Boyandi,
Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para metano*)
 $\omega = 0.0114984000101686;$ 
 $T_c = 190.699005126953 (*K*);$ 
 $P_c = 46.4068017578125 (*Bar*);$ 
 $Z_c = 0.286;$ 
 $M_w = 16.0429000854492 (* g/mol*);$ 
 $T = 323.15 (*K*);$ 
 $P = 50 (*Bar*);$ 

(*Calculo de Q's ecuaciones 17,18,19*)
 $Q1 = 0.8519 + 0.4082 * \omega - 3.0409 * \omega^2;$ 
 $Q2 = 1.7583 - 8.6508 * \omega + 38.6945 * \omega^2;$ 
 $Q3 = 0.3247 - 1.0350 * \omega + 4.1489 * \omega^2;$ 
(*Cálculo de Tr y Pr*)
 $Tr = T / T_c;$ 
 $Pr = P / P_c;$ 

(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
 $\phi = e^{(Q2 * (\sqrt{Tr} - 1))} + Q3 * (\sqrt{Pr} - 1)^2;$ 
 $\tau = (1 + Q1 * ((Tr * Pr)^{0.5} - 1))^{-2};$ 
 $\mu_c = 7.7 * 10^{-7} * T_c^{-1/6} * M_w^{0.5} * P_c^{2/3};$ 
 $rc = (\mu_c * T_c) / (P_c * Z_c);$ 
 $r = rc * \tau;$ 
 $a = 0.4274802335 * (rc^2 * P_c^2) / T_c;$ 
 $b = 0.08664034996 * rc * P_c / T_c;$ 
 $b^r = b * \phi;$ 

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
NSolve[T ==  $\frac{r * P}{\mu - b^r} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ ,  $\mu$ ]
|resolvedor numérico

Out[ ]:= {{ $\mu \rightarrow 6.02239 \times 10^{-6} - 0.0000224713 i$ }, { $\mu \rightarrow 6.02239 \times 10^{-6} + 0.0000224713 i$ }, { $\mu \rightarrow 0.0000130516$ }}

```

## Anexo V. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Metano.

WOLFRAM **MATHEMATICA** | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
  M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Metano*)
ω = 0.0114984000102;
Tc = 190.6990051269530 (*K*);
Pc = 46.4068017578125 (*Bar*);
Zc = 0.286; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 16.0429000854492 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr[P_] := P / Pc;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3*(√Pr[P]-1)^2;
τ[T_, P_] := (1 + Q1*(Tr[T]*Pr[P])^0.5 - 1)^-2;
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_, P_] := rc * τ[T, P];
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc;
b^[T_, P_] := b * φ[T, P];

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b^[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolver numérico |números reales

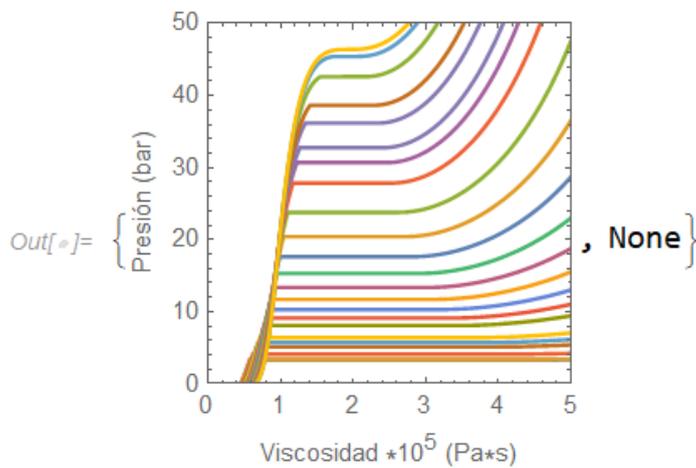
```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[90, rr]]) * 105, rr},
  gráfico gráfico paramétrico último
  {(μ /. Last[x1[90.694, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[188, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[100, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[183, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[110, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[115, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[120, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[178, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[130, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[135, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[140, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[145, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[150, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[155, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[160, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[165, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[170, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[175, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[180, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[185, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[190, rr]]) * 105, rr}, {(μ /. Last[x1[190.7, rr]]) * 105, rr}}, {rr, 0, 50},
  último último
  AspectRatio → 1 / 1, PlotRange → {{0, 5}, {0, 50}}, Frame → True,
  cociente de aspecto rango de representación marco verdadero
  FrameLabel → {"Viscosidad * 105 (Pa*s)", "Presión (bar)"}], Dynamic[MousePosition["Graphics"]]]
  etiqueta de marco dinámico posición del ratón

```

Activ



## Anexo VI. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Etano.

WOLFRAM **MATHEMATICA** | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
  M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Etano*)
ω = 0.0986000001431;
Tc = 305.4280090332030 (*K*) ;
Pc = 48.8385009765625 (*Bar*) ;
Zc = 0.279 ; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 30.0699005126953 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2 ;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2 ;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2 ;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc ;
Pr[P_] := P / Pc ;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3 * (√Pr[P] - 1)^2 ;
τ[T_, P_] := (1 + Q1 * ((Tr[T] * Pr[P])^0.5 - 1))^-2 ;
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3 ;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc) ;
r[T_, P_] := rc * τ[T, P] ;
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc ;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc ;
b^[T_, P_] := b * φ[T, P] ;

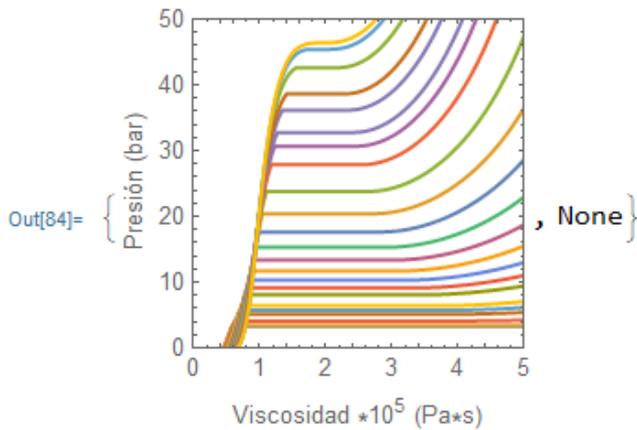
(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b^[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolvidor numérico |números reales

```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[90.352, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[100, rr]]) * 105, rr},
  gráfico gráfico paramétrico último último
  {(μ /. Last[x1[110, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[120, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[130, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[150, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[160, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[170, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[190, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[210, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[220, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[230, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[240, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[250, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[260, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[270, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[280, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[285, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[290, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[295, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[300, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[305, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[305.4280090332030, rr]]) * 105, rr}},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[190.7, rr]]) * 105, rr}}, {rr, 0, 50}, AspectRatio → 1 / 1, PlotRange → {{0, 5}, {0, 50}}, Frame → True,
  último cociente de aspecto rango de representación marco verdad
  FrameLabel → {"Viscosidad * 105 (Pa*s)", "Presión (bar)"}, Dynamic[MousePosition["Graphics"]]
  etiqueta de marco dinámico posición del ratón

```



## Anexo VII. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Propano.

WOLFRAM **MATHEMATICA** | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```
In[445]:= ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
  M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Propano*)
ω = 0.1524000018835;
Tc = 369.8980102539060 (*K*);
Pc = 42.5666015625000 (*Bar*);
Zc = 0.276; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 44.0970001220703 (* g/mol*);

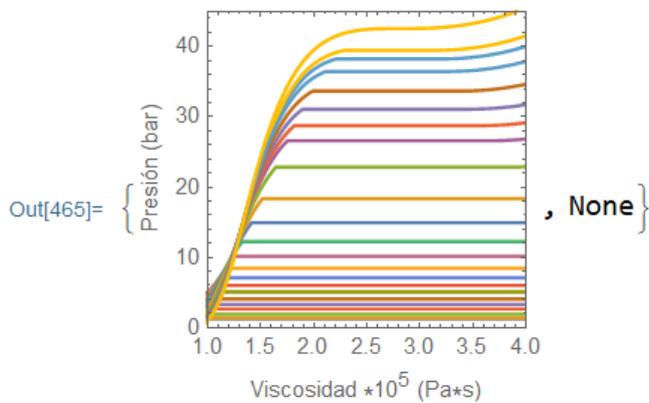
(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr[P_] := P / Pc;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3 * (√Pr[P] - 1)^2;
τ[T_, P_] := (1 + Q1 * ((Tr[T] * Pr[P])^0.5 - 1))^-2;
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_, P_] := rc * τ[T, P];
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc;
b'[T_, P_] := b * φ[T, P];

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b'[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolverador numérico |números reales
```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[85.470, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[90, rr]]) * 105, rr},
|gráfico |gráfico paramétrico |último |último
  {(μ /. Last[x1[120, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[150, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[170, rr]]) * 105, rr},
|último |último |último
  {(μ /. Last[x1[190, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[363, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[365, rr]]) * 105, rr},
|último |último |último
  {(μ /. Last[x1[340, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[210, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[225, rr]]) * 105, rr},
|último |último |último
  {(μ /. Last[x1[240, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[255, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[270, rr]]) * 105, rr},
|último |último |último
  {(μ /. Last[x1[285, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[300, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[315, rr]]) * 105, rr},
|último |último |último
  {(μ /. Last[x1[330, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[345, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[350, rr]]) * 105, rr},
|último |último |último
  {(μ /. Last[x1[355, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[360, rr]]) * 105, rr},
|último |último
  {(μ /. Last[x1[369.8980102539060, rr]]) * 105, rr}], {rr, 0, 45}, AspectRatio → 1/1,
|último |cociente de aspecto
  PlotRange → {{1, 4}, {0, 45}}, Frame → True, FrameLabel → {"Viscosidad *105 (Pa*s)", "Presión (bar)"}],
|rango de representación |marco |verd... |etiqueta de marco
Dynamic[MousePosition["Graphics"]]
|dinámico |posición del ratón

```



## Anexo VIII. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Butano.

WOLFRAM **MATHEMATICA** | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
  M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Butano*)
ω = 0.2010000050068;
Tc = 425.1990051269530 (*K*) ;
Pc = 37.9662011718750 (*Bar*) ;
Zc = 0.274 ; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 58.1240005493164 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω2 ;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω2 ;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω2 ;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc ;
Pr[P_] := P / Pc ;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3 * (√Pr[P] - 1)2 ;
τ[T_, P_] := (1 + Q1 * ((Tr[T] * Pr[P])0.5 - 1))-2 ;
μc = 7.7 * 10-7 * Tc-1/6 * Mw0.5 * Pc2/3 ;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc) ;
r[T_, P_] := rc * τ[T, P] ;
a = 0.4274802335 * (rc2 * Pc2) / Tc ;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc ;
b'[T_, P_] := b * φ[T, P] ;

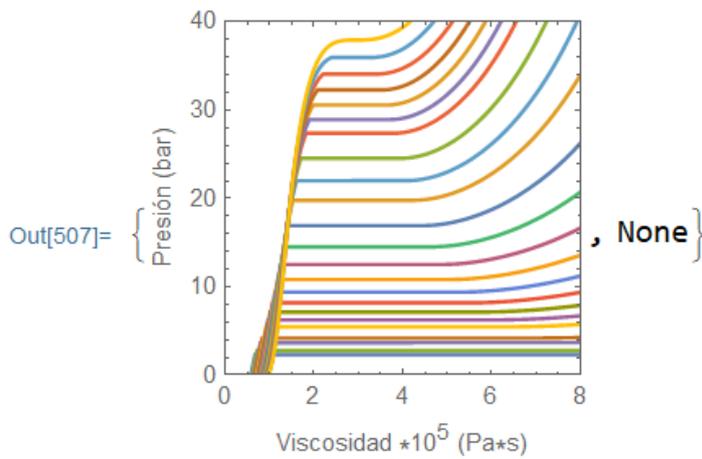
(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b'[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolvedor numérico |números reales

```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[134.860, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[405, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[155, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[415, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[185, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[200, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[375, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[230, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[245, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[260, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[275, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[290, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[305, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[320, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[335, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[350, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[365, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[385, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[395, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[400, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[410, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[420, rr]]) * 105, rr},
  { (μ /. Last[x1[425.1990051269530, rr]]) * 105, rr}], {rr, 0, 40}, AspectRatio → 1 / 1,
  PlotRange → {{0, 8}, {0, 40}}, Frame → True, FrameLabel → {"Viscosidad *105 (Pa*s)", "Presión (bar)"}],
Dynamic[MousePosition["Graphics"]]]

```



## Anexo IX. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Pentano.

WOLFRAM **MATHEMATICA** | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo
(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
  M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Pentano*)
ω = 0.2538900077343;
Tc = 469.6000061035160 (*K*) ;
Pc = 33.7512011718750 (*Bar*) ;
Zc = 0.268 ;(*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 72.1510009765625 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω2 ;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω2 ;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω2 ;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc ;
Pr[P_] := P / Pc ;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3 * (√Pr[P] - 1)2 ;
τ [T_, P_] := (1 + Q1 * ((Tr[T] * Pr[P])0.5 - 1))-2 ;
μc = 7.7 * 10-7 * Tc-1/6 * Mw0.5 * Pc2/3 ;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc) ;
r [T_, P_] := rc * τ [T, P] ;
a = 0.4274802335 * (rc2 * Pc2) / Tc ;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc ;
b^[T_, P_] := b * φ [T, P] ;

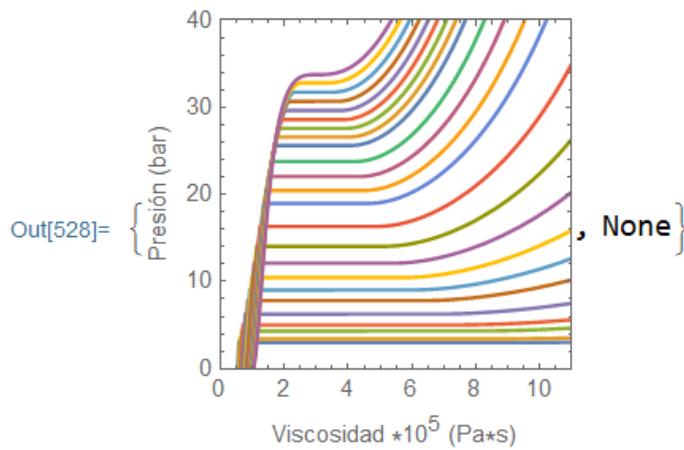
(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r [T, P] * P}{\mu - b^ [T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolvidor numérico |números reales

```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[143.420, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[160, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[190, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[210, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[240, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[270, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[290, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[310, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[330, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[350, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[370, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[390, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[400, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[410, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[420, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[430, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[435, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[440, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[445, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[450, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[455, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[460, rr]]) * 105, rr}, {μ /. Last[x1[465, rr]]) * 105, rr},
  {μ /. Last[x1[469.6000061035160, rr]]) * 105, rr}}, {rr, 0, 50}, AspectRatio -> 1 / 1,
  PlotRange -> {{0, 11}, {0, 40}}, Frame -> True, FrameLabel -> {"Viscosidad *105 (Pa*s)", "Presión (bar)"}],
Dynamic[MousePosition["Graphics"]]

```



## Anexo X. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Hexano.

VOLFRAM **MATHEMATICA** | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Hexano*)
ω = 0.3007000088692;
Tc = 507.8980102539060 (*K*) ;
Pc = 30.3162011718750 (*Bar*) ;
Zc = 0.264; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 86.1779022216797 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω2 ;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω2 ;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω2 ;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc ;
Pr[P_] := P / Pc ;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3 * (√Pr[P] - 1)2 ;
τ[T_, P_] := (1 + Q1 * ((Tr[T] * Pr[P])0.5 - 1))-2 ;
μc = 7.7 * 10-7 * Tc-1/6 * Mw0.5 * Pc2/3 ;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc) ;
r[T_, P_] := rc * τ[T, P] ;
a = 0.4274802335 * (rc2 * Pc2) / Tc ;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc ;
b^[T_, P_] := b * φ[T, P] ;

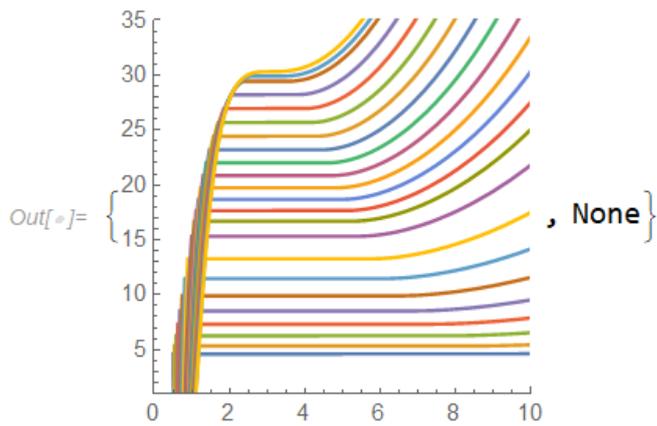
(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b^[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolvedor numérico |números reales

```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[177.830, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[200, rr]]) * 105, rr},
  gráfico gráfico paramétrico último último
  {(μ /. Last[x1[225, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[250, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[275, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[300, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[325, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[350, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[375, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[390, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[400, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[410, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[420, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[430, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[440, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[450, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[460, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[470, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[480, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[490, rr]]) * 105, rr},
  último último último
  {(μ /. Last[x1[500, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[504, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[507.8980102539060, rr]]) * 105, rr}], {rr, 0, 50}, AspectRatio → 1 / 1,
  último cociente de aspecto
  PlotRange → {{0, 10}, {1, 35}}, Frame → True, FrameLabel → {"Viscosidad *105 (Pa*s)", "Presión (bar)"}],
  rango de representación marco verdadero etiqueta de marco
  Dynamic[MousePosition["Graphics"]]
  dinámico posición del ratón

```



## Anexo XI. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Heptano.

WOLFRAM **MATHEMATICA** | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Heptano*)
ω = 0.3497900068760;
Tc = 540.1580200195310(*K*) ;
Pc = 27.3678002929688(*Bar*) ;
Zc = 0.26100 ; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 100.2050018310550(* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2 ;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2 ;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2 ;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc ;
Pr[P_] := P / Pc ;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3 * (√Pr[P] - 1)^2 ;
τ[T_, P_] := (1 + Q1 * ((Tr[T] * Pr[P])^0.5 - 1))^(-2);
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3 ;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc) ;
r[T_, P_] := rc * τ[T, P] ;
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc ;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc ;
b^'[T_, P_] := b * φ[T, P] ;

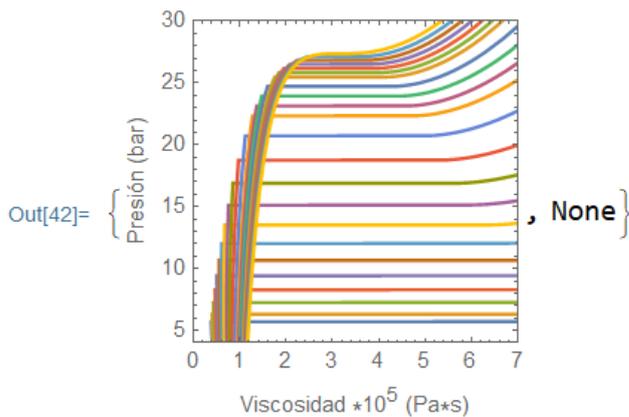
(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T ==  $\frac{r[T, P] * P}{\mu - b^'[T, P]} - \frac{a}{\mu (\mu + b)}$ , μ, Reals];
|resolvedor numérico |números reales

```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[182.570, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[200, rr]]) * 105, rr},
  gráfico gráfico paramétrico último último último último
  {(μ /. Last[x1[225, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[250, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[275, rr]]) * 105, rr},
  último último último último
  {(μ /. Last[x1[300, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[325, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[350, rr]]) * 105, rr},
  último último último último
  {(μ /. Last[x1[375, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[400, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[425, rr]]) * 105, rr},
  último último último último
  {(μ /. Last[x1[450, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[470, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[480, rr]]) * 105, rr},
  último último último último
  {(μ /. Last[x1[490, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[500, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[510, rr]]) * 105, rr},
  último último último último
  {(μ /. Last[x1[515, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[520, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[525, rr]]) * 105, rr},
  último último último último
  {(μ /. Last[x1[530, rr]]) * 105, rr}, { (μ /. Last[x1[535, rr]]) * 105, rr},
  último último
  {(μ /. Last[x1[540.1580200195310, rr]]) * 105, rr}], {rr, 0, 50}, AspectRatio → 1 / 1,
  último cociente de aspecto
  PlotRange → {{0, 7}, {4, 30}}, Frame → True, FrameLabel → {"Viscosidad *105 (Pa*s)", "Presión (bar)"}],
  rango de representación marco verd... etiqueta de marco
Dynamic[MousePosition["Graphics"]]
dinámico posición del ratón

```



## Anexo XII. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Octano.

WOLFRAM MATHEMATICA | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Octano*)
ω = 0.4018000066280;
Tc = 568.5980224609380 (*K*);
Pc = 24.9662011718750 (*Bar*);
Zc = 0.259; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 114.2320022583010 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr[P_] := P / Pc;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3*(√Pr[P]-1)^2;
τ[T_, P_] := (1 + Q1*(Tr[T]*Pr[P])^0.5 - 1)^-2;
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_, P_] := rc * τ[T, P];
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc;
b^[T_, P_] := b * φ[T, P];

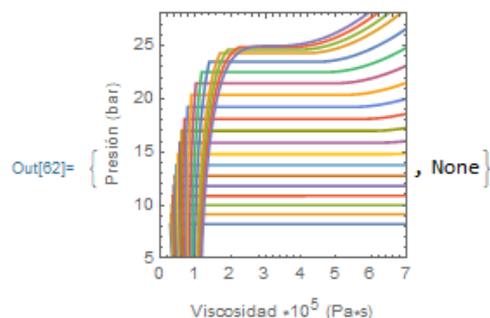
(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T == (r[T, P] * P) / (μ * b^[T, P]) - a / (μ * (μ + b)), μ, Reals];
|resolvidor numérico |números reales

```

```

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[216.380, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[240, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[260, rr]]) * 10^5, rr},
|gráfico |gráfico paramétrico |último |último |último
{(μ /. Last[x1[280, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[300, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[320, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[340, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[360, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[380, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[400, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[420, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[440, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[460, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[480, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[500, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[520, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[540, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[550, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[560, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[568.5980224609380, rr]]) * 10^5, rr}], {rr, 0, 50}, AspectRatio -> 1 / 1, PlotRange -> {{0, 7}, {5, 28}}, Frame -> True,
|último |cociente de aspecto |rango de representación |marco |verdadero
FrameLabel -> {"Viscosidad *10^5 (Pa*s)", "Presión (bar)"}], Dynamic[MousePosition["Graphics"]]}
|etiqueta de marco |dinámico |posición del ratón

```



## Anexo XIII. Algoritmo de cálculo para envolvente de fases de Nonano.

WOLFRAM MATHEMATICA | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```

ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

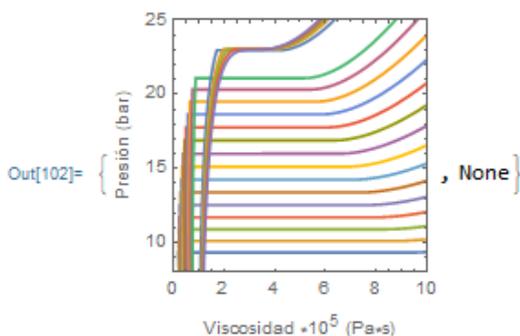
(* Datos para Nonano*)
ω = 0.4454900026321;
Tc = 594.5980224609380 (*K*);
Pc = 23.0007006835937 (*Bar*);
Zc = 0.257; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 128.2590026855470 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2;
(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr[P_] := P / Pc;
(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3*(√Pr[P]-1)^2;
τ[T_, P_] := (1 + Q1*(Tr[T]*Pr[P])^0.5 - 1)^-2;
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_, P_] := rc * τ[T, P];
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc;
b^[T_, P_] := b * φ[T, P];

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T == (r[T, P] * P) / (μ - b^[T, P]) - a / (μ * (μ + b)), μ, Reals];
|resolver numérico |números reales

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[219.660, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[240, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[260, rr]]) * 10^5, rr},
|gráfico paramétrico |último |último |último
{(μ /. Last[x1[280, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[300, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[320, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[340, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[360, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[380, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[400, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[420, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[440, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[460, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[480, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[500, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[570, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[580, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[585, rr]]) * 10^5, rr}, {μ /. Last[x1[590, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
{(μ /. Last[x1[594.5980224609380, rr]]) * 10^5, rr}], {rr, 0, 25}, AspectRatio -> 1 / 1, PlotRange -> {{0, 10}, {8, 25}}, Frame -> True,
|cociente de aspecto |rango de representación |marco |verdadero
FrameLabel -> {"Viscosidad *10^5 (Pa*s)", "Presión (bar)"}], Dynamic[MousePosition["Graphics"]]]
|etiqueta de marco |dinámico |posición del ratón

```



## Anexo XIV. Algoritmo de cálculo para envoltante de fases de Decano.

WOLFRAM MATHEMATICA | EDICIÓN PARA ESTUDIANTES

```
In[103]:= ClearAll["Global`*"];
|borra todo

(*Algoritmo para el cálculo de viscosidad mediante el método
  M.Boyandi-M.Rostami, Fluid Phase Equilibria 451 (2017)40 - 47*)

(* Datos para Decano*)
ω = 0.4884800016880;
Tc = 617.5980224609380 (*K*);
Pc = 21.0755004882813 (*Bar*);
Zc = 0.256; (*Referencia: Prausnitz*)
Mw = 142.2850036621090 (* g/mol*);

(*Cálculo de Q's ecuaciones 17,18,19. Artículo Modelo Bonyadi-Rostami*)
Q1 = 0.8519 + 0.4082 * ω - 3.0409 * ω^2;
Q2 = 1.7583 - 8.6508 * ω + 38.6945 * ω^2;
Q3 = 0.3247 - 1.0350 * ω + 4.1489 * ω^2;

(*Cálculo Tr y Pr*)
Tr[T_] := T / Tc;
Pr[P_] := P / Pc;

(*Cálculo de ecuaciones 8 - 15*)
φ[T_, P_] := e^(Q2*(√Tr[T]-1)) + Q3*(√Pr[P]-1)^2;
τ[T_, P_] := (1 + Q1*(Tr[T]*Pr[P])^0.5 - 1)^-2;
μc = 7.7 * 10^-7 * Tc^-1/6 * Mw^0.5 * Pc^2/3;
rc = (μc * Tc) / (Pc * Zc);
r[T_, P_] := rc * τ[T, P];
a = 0.4274802335 * (rc^2 * Pc^2) / Tc;
b = 0.08664034996 * rc * Pc / Tc;
b^[T_, P_] := b * φ[T, P];

(*Modelo de viscosidad propuesto*)
x1[T_, P_] := NSolve[T == (r[T, P] * P) / (μ - b^[T, P]) - (a / (μ * (μ + b))), μ, Reals];
|resolverdor numérico |números reales

{Graphics[ParametricPlot[{{(μ /. Last[x1[243.510, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[260, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[310, rr]]) * 10^5, rr} ×
|gráfico |gráfico paramétrico |último |último |último
  {(μ /. Last[x1[280, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[300, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[320, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[340, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
  {(μ /. Last[x1[360, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[380, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[400, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[440, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
  {(μ /. Last[x1[460, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[480, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[490, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[500, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
  {(μ /. Last[x1[510, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[520, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[530, rr]]) * 10^5, rr}, {(μ /. Last[x1[540, rr]]) * 10^5, rr},
|último |último |último |último
  {(μ /. Last[x1[617.5980224609380, rr]]) * 10^5, rr}], {rr, 0, 50}, AspectRatio -> 1 / 1, PlotRange -> {{0, 10}, {10, 23}}, Frame -> True,
|último |cociente de aspecto |rango de representación |marco |verdadero
FrameLabel -> {"Viscosidad *10^5 (Pa*s)", "Presión (bar)"}], Dynamic[MousePosition["Graphics"]]]
|etiqueta de marco |dinámico |posición del ratón
```

