

## DESARROLLO DE LOS MODELOS TERMODINÁMICOS DE CHAO-SEADER, GRAYSON-STREED Y LEE-ERBAR-EDMISTER MODIFICADO COMO COMPONENTES CAPE-OPEN

R. E. López<sup>1,2\*</sup>, C. G. Pernaleté<sup>2\*</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería Química. Vice-Rectorado de Barquisimeto. Universidad Nacional Experimental Politécnica “Antonio José de Sucre”. Venezuela.

<sup>2</sup> Gerencia Técnica de Refinación. PDVSA Intevep. Venezuela.

**Resumen.** Una de las principales fortalezas de los simuladores de proceso comerciales, es su versatilidad para cálculos termodinámicos. En la industria petrolera las ecuaciones de estado (EOS) han desempeñado un papel central en el modelado termodinámico del equilibrio líquido-vapor (ELV) de hidrocarburos, sin embargo, éstas proporcionan resultados inexactos bajo ciertas condiciones y para estos casos deben emplearse modelos termodinámicos especiales tal como Chao-Seader, Grayson-Streed y Lee-Erbar-Edmister. Estos modelos termodinámicos están disponibles en la mayoría de los simuladores comerciales, sin embargo, su uso está restringido al pago de una licencia alquilada.

El presente trabajo plantea el desarrollo de los modelos termodinámicos de Chao-Seader, Grayson-Streed y Lee-Erbar-Edmister utilizando CAPE OPEN, estándar que define un conjunto de reglas e interfaces libres de uso y sin propiedad para crear componentes de software interoperables con diferentes aplicaciones para simulación de procesos que implementen dicho estándar.

---

\* A quien debe enviarse toda la correspondencia

Dirección: Universidad Nacional Experimental Politécnica “Antonio José de Sucre”. Vice-Rectorado de Barquisimeto. Departamento de Ingeniería Química. Av. Corpahuaico entre Av. La Salle y Rotaria. Barquisimeto. edo. Lara. Venezuela. Teléfono: +58 (251)442.01.33. E-mail: lopezrej@pdvsa.com

Dirección: PDVSA Intevep. Gerencia Técnica de Refinación. Urbanización Santa Rosa. Sector El Tambor. Los Teques. Estado Miranda. Venezuela. Teléfono +58 (212) 330.63.86. E-mail: pernaletec@pdvsa.com

En tal sentido, se identificaron los modelos ya mencionados y datos asociados, se establecieron las restricciones correspondientes, se diseñaron sus algoritmos en Lenguaje de Modelado Unificado (UML), se efectuó un análisis de los estándares de interoperabilidad y se realizó la implementación de algoritmos e interfaces específicas bajo el lenguaje de programación C/C++, obteniendo tres modelos termodinámicos interoperables que pueden ser usados en simuladores comerciales y no comerciales que implementen el estándar descrito.

Así mismo, se ejecutó la validación y prueba de los componentes empleando COCO Simulator como plataforma de simulación, una herramienta de software no comercial inspirada en los estándares CAPE OPEN.

**Palabras clave:** Modelos Termodinámicos, Interoperabilidad, CAPE-OPEN.

## 1. Introducción

La simulación de procesos químicos, es una técnica moderna indispensable para la ejecución eficiente de tareas como diseño, optimización y operación de plantas industriales. El simulador de procesos es una herramienta de software que agrupa un conjunto de funcionalidades tales como, bases de datos de propiedades físicas, propiedades termodinámicas, métodos numéricos, operaciones unitarias y modelos de cinéticas químicas integradas de forma tal que la simulación de procesos sea una tarea fácil de llevar a cabo. Cada vez son más numerosas las propuestas comerciales existentes en el mercado de software de simulación de procesos, que suministran el simulador bajo el criterio de licencias que en la mayoría de los casos son alquiladas a elevados costos. En consecuencia, el hecho de poseer una licencia alquilada, una vez culminado su periodo de validez, hace imposible la utilización de los modelos generados tras muchas horas labor-esfuerzo, ocasionando dependencia tecnológica. Esta situación motiva la evaluación de herramientas de simulación de procesos alternativas especialmente aquellas de acceso libre (no comerciales), tal como COCO Simulator.

El proceso de separación y purificación representa una parte importante del diseño y costos de operación de las plantas químicas. Aunque algunos nuevos procesos como separación de membrana y pre-evaporación entre otros, se están aplicando en la escala comercial, los procesos por contacto de fases tales como destilación, absorción de gases, extracción, siguen siendo los principales procesos de separación. En consecuencia, el modelado termodinámico de equilibrio de fases es una preocupación central en el diseño de estos procesos. El diseño y operación de los separadores de contacto de fase requieren por lo tanto de un conocimiento detallado de los equilibrios entre las fases coexistentes.

De esta forma, las ecuaciones de estado (EOS), las relaciones volumétricas entre la presión, volumen molar y la temperatura absoluta, han desempeñado un papel central en el modelado termodinámico del equilibrio líquido-vapor (ELV) de hidrocarburos líquidos, sobre todo a presiones moderadas. Castillo C. y Fernández N. (2001) establecen que las principales dificultades desde el punto de vista termodinámico que se presentan dentro de procesos de separación en la industria de refinación, y en particular, las etapas de separación del proceso que involucran gases livianos, son las siguientes: presencia de hidrógeno, presencia de sulfuro de hidrógeno y mezclas complejas de hidrocarburos, compuestos sulfurados y nitrogenados sometidas a altas presiones y temperaturas. En estos casos el modelado por ecuaciones de estado (EOS) proporcionan resultados inexactos.

El Instituto de Tecnología Venezolana para Petróleo (INTEVEP), filial de la estatal Petróleos de Venezuela S.A. (PDVSA), realizó el desarrollo de modelos termodinámicos especiales (Chao-Seader, Grayson-Streed y Lee-Erbar-Edmister) como componentes de simulación, para modelar equilibrios líquido-vapor en mezclas de gases e hidrocarburos sometidas a altas presiones y temperaturas. Para ello inicialmente se utilizó un pseudo-lenguaje de programación orientada a objetos, y una posterior implementación de los mismos bajo los estándares CAPE-OPEN, cuya finalidad es garantizar la interoperabilidad de los componentes desarrollados en simuladores de procesos no comerciales que soporten el estándar, disminuyendo costos por uso de simuladores comerciales bajo concepto de licencia.

## **2. PDVSA: Historia y desarrollo**

Petróleos de Venezuela, S.A. (PDVSA) es una corporación propiedad de la República Bolivariana de Venezuela, creada por el Estado venezolano en el año 1975, en cumplimiento de la Ley Orgánica que Reserva al Estado, la Industria y el Comercio de Hidrocarburos (Ley de Nacionalización). Sus operaciones son supervisadas y controladas por el Ministerio del Poder Popular para la Energía y Petróleo (MENPET). La Constitución aprobada mediante referéndum popular en diciembre de 1999, y el Decreto N° 1.510 con Rango y Fuerza de Ley Orgánica de Hidrocarburos, de fecha 2 de noviembre de 2001, la cual fue modificada con el Decreto de la Ley de Reforma Parcial de la Ley Orgánica de Hidrocarburos, publicado en la Gaceta Oficial N° 38.443, de fecha 24 de mayo de 2006 y, la Ley Orgánica de Hidrocarburos Gaseosos de septiembre de 1999 y su Reglamento de junio de 2000, configuran un nuevo marco jurídico donde el Estado recupera el control de sus recursos energéticos para el beneficio de la mayoría e implementa la política de plena soberanía petrolera.

PDVSA es responsable, en Venezuela, del desarrollo de la industria de los hidrocarburos; así como también de planificar, coordinar, supervisar y controlar las actividades relacionadas con exploración, explotación, manufactura, refinación, transporte y venta de los hidrocarburos y sus derivados, tanto en Venezuela como fuera del país. La mayoría de sus filiales en el exterior están involucradas en las actividades de refinación y comercialización a nivel mundial.

## **3. El proyecto CAPE-OPEN**

Es un proyecto fundado en el seno de la Comunidad Europea, siendo sus promotores compañías del área de procesos (BASF, Bayer, BP, DuPont, Elf, ICI, IFP, entre otras), universidades (Imperial College, Institut National Polytechnique de Toulouse, RWTH Technische Hochschule Aachen, entre otras) y proveedores de aplicaciones CAPE (Computer Aided Process Engineering) (Aspentech, Simsci, Quantisci, entre otros). El principal objetivo de este proyecto es habilitar la posibilidad de que componentes de un simulador de procesos comercial, puedan ser reemplazados por aquellos de una fuente independiente, que sean parte de otro simulador o inclusive por componentes que sean desarrollados por la misma comunidad de usuarios de los simuladores, con un mínimo

esfuerzo. Con este propósito el proyecto CAPE OPEN se enfoca en el desarrollo, pruebas, descripción y publicación de estándares para interfaces de comunicación entre los componentes de software de un simulador de procesos (Pérez 2005).

Con el objeto de administrar los estándares CAPE-OPEN en el año 2001 se crea la red de laboratorios CAPE-OPEN “CO-LaN”. CO-LaN es una organización orientada al usuario y reconocida internacionalmente para la validación y administración de los estándares CAPE-OPEN (Pons 2005).

### **3.1. Alcance del proyecto CAPE-OPEN**

El foco del proyecto CAPE-OPEN ha sido el generar herramientas para el modelado de procesos y su uso para simulación en estado estable y dinámico. El proyecto ha reconocido dos tipos de esas herramientas, modulares y orientadas a ecuaciones. En una arquitectura para herramientas de modelado de procesos modular, que es el enfoque más común en simuladores de proceso comerciales en estado estable, existe un “Process Modelling Executive” (PME) que es el responsable de soportar la construcción del modelo y llevar a cabo los cálculos necesarios para resolverlo (CAPE-OPEN Consortium, 1999). Para cumplir este objetivo el PME debe comunicarse con otros módulos que describen, ya sean operaciones unitarias individuales u otros cálculos como equilibrios termodinámicos, algoritmos especializados para resolución de sistemas de ecuaciones o cálculos de propiedades físicas (Pérez 2005). Estos módulos son llamados “Process Modelling Components” (PMC) ya que se encapsulan las tareas en componentes de software bien definidos.

En la figura 1 se muestra de forma conceptual la idea detrás de los estándares CAPE-OPEN referente a la componentización de las diversas tareas que deben ser llevadas a cabo en un simulador de procesos. En este esquema se muestran las fronteras entre los diversos componentes que integran un simulador. Nótese que el PME es el ente responsable de orquestar todas las funciones que desempeñan cada uno de los PMC o componentes de modelado de proceso.

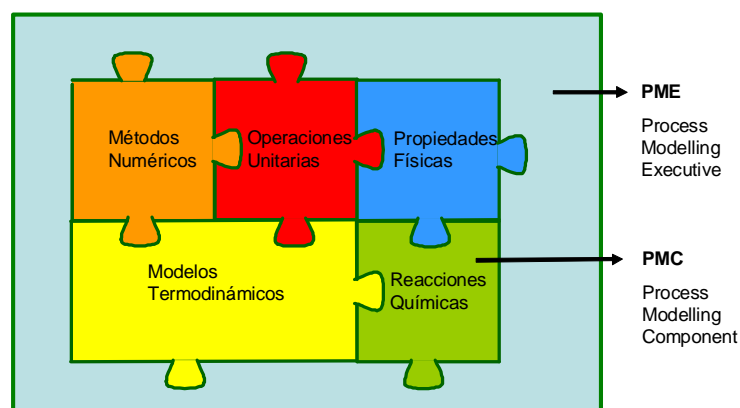


Fig. 1. Enfoque conceptual CAPE-OPEN.

### 3.2. Cálculos Externos de Equilibrio

La arquitectura de CAPE OPEN está soportada en la tecnología de desarrollo basado en componentes (CBD, por sus siglas en inglés), la cual permite que sistemas de software sean construidos a partir de componentes de software binarios. Para sistemas operativos Windows se utiliza la tecnología “Component Object Modelling” (COM) mientras que para sistemas operativos Linux se utiliza “Common Object Request Broker Architecture” (CORBA). Estos componentes de software pueden venir de diferentes proveedores y pueden residir en diferentes computadores y comunicarse a través de una red.

El sistema de interfaces de CAPE-OPEN (CO) es un estándar que habilita la conexión de un componente de software externo, que puede representar por ejemplo un modelo de cálculo de equilibrio en cualquier simulador que soporte el estándar para este componente. La interfaz puede ser interpretada como un “socket” o un “plug”, el cual intercambia información entre dos partes.

Tanto el simulador, como el cálculo externo de equilibrio, desconocen la implementación interna de cada uno de ellos. El trabajo de la interfaz es traducir los requerimientos de información o acción de cada uno de los componentes en un lenguaje que puedan entender (COLaN Consortium, 2001).

En la figura 2 se puede observar el mecanismo de comunicación entre un cálculo externo de equilibrio y un simulador de procesos a través de los estándares CO. Nótese que los cálculos correspondientes a las propiedades requeridas son ejecutados por un

componente de software llamado el paquete de propiedades (Property Package), existiendo interfaces de comunicación para esta información entre el paquete de propiedades y el componente que describe el cálculo externo de equilibrio. Luego es el paquete de propiedades quien se comunica con el Ejecutivo para entregarle los resultados de cálculo de equilibrio.

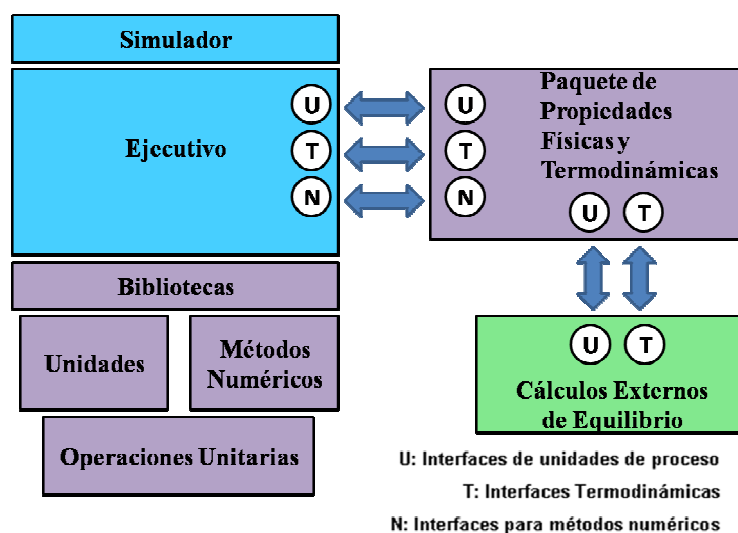


Fig. 2. Esquema de interfaces de comunicación CAPE-OPEN para cálculos externos de equilibrio.

## 4. Características de los componentes

### 4.1. Métodos termodinámicos

Tres métodos alternativos para el cálculo de equilibrios líquido vapor (ELV) son implementados en tres componentes de software interoperables.

Estos métodos utilizan un conjunto de ecuaciones para la fase de vapor y otro para la fase líquida, en una técnica similar. Son identificados como Chao-Seader (1961), Grayson-Streed (1963) y una modificación del método propuesto por Lee-Erbar-Edmister (1973). La ecuación general que describe los métodos se describe a continuación:

$$K = \frac{y}{x} = \frac{v \cdot \phi}{\gamma}$$

donde,

$v$  = coeficiente de fugacidad del líquido puro

$\phi$  = coeficiente de fugacidad del componente  $i$  en la mezcla vapor

$\gamma$  = coeficiente de actividad del componente  $i$  en la solución líquida

Los métodos de Chao-Seader y Grayson-Streed son muy similares, ya que ambos utilizan los mismos modelos matemáticos para cada fase. Para la fase de vapor se emplea la ecuación de estado de Redlich-Kwong. Esta expresión generalizada PVT es muy conveniente dada su simplicidad y por el hecho de que sólo los valores de las propiedades críticas de los compuestos y pseudocompuestos en la mezcla son requeridos. Para la fase líquida, ambos métodos usan la teoría de soluciones regulares de Scatchard-Hildebrand para el cálculo del coeficiente de actividad, además una relación empírica para el cálculo del coeficiente de fugacidad del compuesto puro.

El método de Lee-Erbar-Edmister es del mismo tipo, pero utiliza diferentes expresiones para los coeficientes de fugacidad y actividad. El presente trabajo emplea una forma diferente para el cálculo del coeficiente de actividad. La ecuación de estado para la fase de vapor es una expresión de tres parámetros, y una corrección para los parámetros de interacción binaria es incluida.

La expresión para el coeficiente de fugacidad se deriva por la extensión del método a bajas presiones para mejorar la aproximación. La expresión para el coeficiente de actividad es calculada a través del modelo de superficies regulares de soluciones propuesto por Ęrdos (1956), que requiere del cálculo de un parámetro de solubilidad de superficie previo, y en el caso de hidrocarburos alifáticos de C5 a C12, nitrógeno, hidrógeno, dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno, se empleó la expresión propuesta por Zwolinski y Wilhoit (1971) para su estimación.

#### **4.2. Predicción del equilibrio**

Para la predicción del equilibrio empleando los modelos descritos anteriormente, se requiere que la composición de la alimentación sea siempre conocida, así en presencia de otras dos propiedades adicionales, formen el conjunto de variables independientes que describan el estado del sistema en equilibrio líquido-vapor. Tales propiedades adicionales del sistema generalmente son: presión-temperatura para cálculos de equilibrio en operaciones unitarias de separación isotérmica y presión-entalpía para cálculos en operaciones unitarias de separación adiabática.

Se emplean “dos ciclos” en cada uno de los dos tipos de cálculos de equilibrio. Cuando se especifican composición, presión y temperatura, el ciclo interno estima la fracción de



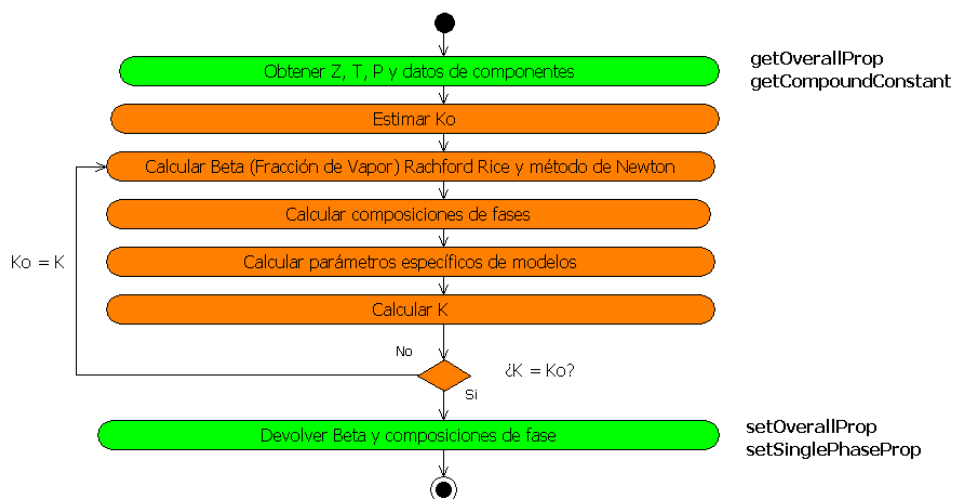


Fig. 3. Algoritmo para el cálculo del equilibrio líquido vapor (ELV) a partir de temperatura y presión

vapor o líquido y el ciclo externo ajusta la composición en las fases, empleando como criterio de convergencia la proximidad entre dos valores “ $k$ ” de equilibrio consecutivo tal como se muestra en la figura 3. Cuando se especifican composición, presión y entalpía, se emplea una estructura denominada “sobre-iteración” donde un cálculo de equilibrio líquido vapor a partir de presión y temperatura se realiza en el lazo interno y un balance de energía se realiza en el lazo externo, tal como se muestra en la figura 4.

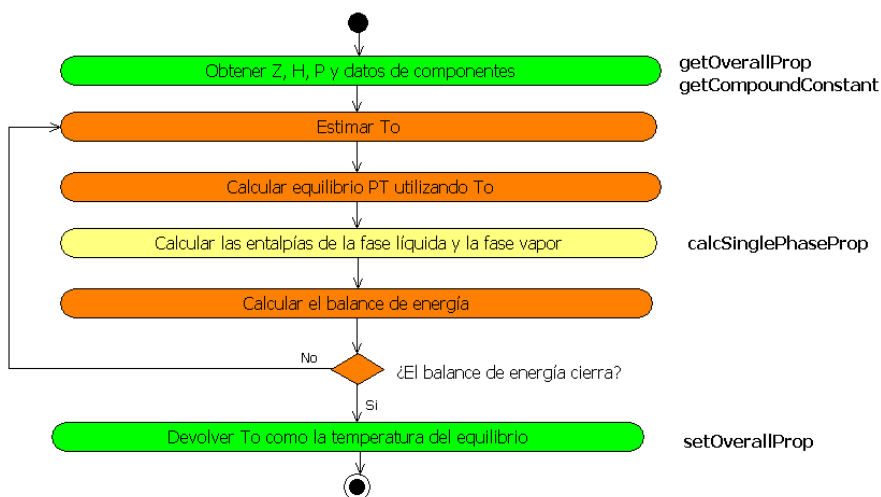


Fig. 4. Algoritmo para el cálculo del equilibrio líquido vapor (ELV) a partir de entalpía y presión

### 4.3. Código fuente

Los modelos fueron previamente documentados en el lenguaje de arquitectura de software Unified Modeling Lenguaje (UML) para programación orientada a objetos, garantizando una mejor mantenibilidad y escalabilidad del desarrollo. Posteriormente el código fuente fue escrito en lenguaje C++, utilizando Visual C++ 2005 Express Edition.

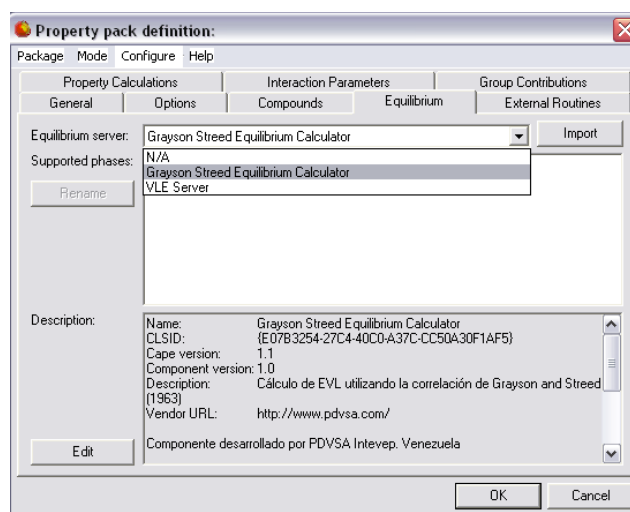


Fig 5. Importando Grayson Streed Equilibrium Calculador desde TEA.

## 5. Resultados

Un vez compilados los códigos fuentes, se obtuvieron tres archivos con extensión (.dll) denominados *chaoSeader.dll*, *graysonStreed.dll* y *leeErbEdm.dll*, correspondientes a cada modelo termodinámico para cálculos de equilibrio composición-presión-temperatura (TP Flash) y composición-presión-entalpía (PH Flash).

Estos componentes de software presentan las siguientes características:

- Pueden ser llamados desde cualquier simulador comercial o no comercial vía TEA, la librería de propiedades físicas y termodinámicas de COCO Simulator, o cualquier otro paquete de propiedades que soporte la comunicación con un calculador externo de equilibrio vía CAPE OPEN.

- Están sometidos a las restricciones originalmente descritas en Chao-Seader, Grayson-Streed y Lee-Erbar-Edmister, en cuanto a rangos de aplicación de presión y temperatura y la naturaleza propia del sistema en estudio (mezcla de gases livianos e hidrocarburos).
- Las propiedades físicas y termodinámicas necesarias para efectuar sus cálculos son obtenidas del paquete de propiedades a través de los métodos e interfaces específicas.

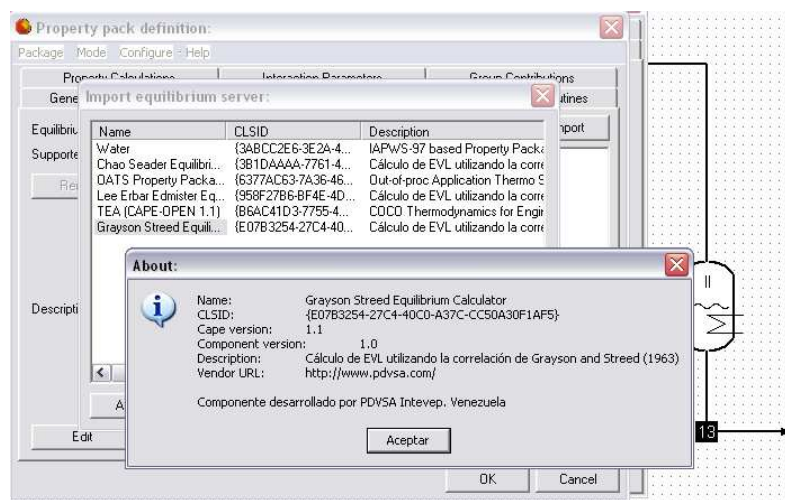


Fig 6. Grayson Streed Equilibrium Calculator desde TEA.

Un resumen del código genérico escrito para la construcción de los componentes se describe a continuación:

```

STDMETHOD( CalcEquilibrium)
(VARIANT specification1, VARIANT specification2, BSTR solutionType)
{
//Obtención del número de componentes en el Material Object
ICapeThermoCompounds *cmpds;
HRESULT hr;
hr=contextMat->QueryInterface( IID_ICapeThermoCompounds, (LPVOID*)&cmpds );

//Obtención del número de compuestos
long nC;
nC = 0;

hr=cmpds->GetNumCompounds ( &nC );

```

```

long numCompounds = nC;

//Obtención de los nombres y las fórmulas de los componentes
VARIANT compIds, formulae, names, boiltemps, molwts, casnos;
hr=cmpds->GetCompoundList(&compIds, &formulae, &names, &boiltemps, &molwts, &casnos);

'Obtención de las propiedades de interés
VARIANT componentConstant;
VariantInit(&componentConstant);

hr=cmpds->GetCompoundConstant(constantList, compIds, &componentConstant);

vector <double> Z, H;
vector <double> Yov; //Fracción de la fase vapor (Beta)
vector <double> Xov; //Fracción de la fase líquida (1-Beta)
vector <double> Ycomp; //Composición de la fase vapor
vector <double> Xcomp; //Composición de la fase líquida

GetOverallScalarProp(&Z, fraction, mole, error) //Obtener fracción molar global
GetOverallScalarProp(&T, temperature, NULL, error) //Obtener temperatura global
GetOverallScalarProp(&P, pressure, NULL, error) //Obtener presión global
GetOverallScalarProp(&H, enthalpy, mole, error) //Obtener Entalpía Global

//Cálculo del flash
vector<double> Test, Hinic, Hactual, Hvap, Hliq;
bool convergePH;

//Caso TP, presión, temperatura
//Las composiciones por fase son Xcomp y Ycomp
//La fracción de vapor es Yov y la fracción de líquido Xov

calcTP_EVL(Test, P, Z, ..., Ycomp, Xcomp, Yov, Xov); //Equilibrio TP
//Cálculo flash exitoso. Enviar resultados al "Material Object"
SetPhasesComposition(Yov, Xov, Ycomp, Xcomp, haveVF, T, P, ...);

//Caso PH, presión, entalpía. Estructura de sobre-iteración
Hinic.push_back(H[0]);
Hactual.push_back(0);
Test.push_back(XX); //Temperatura inicial estimada
convergePH = false;
while (convergePH == false){
    calcTP_EVL(Test, P, Z, ..., Ycomp, Xcomp, Yov, Xov);
    SetPhasesComposition(Yov, Xov, Ycomp, Xcomp, haveVF, Test, P, haveT, haveP)
    BOOL haveVap, haveLiq;
    haveVap=((Yov[0]>0)|| (haveVF));
    haveLiq=((Yov[0]<1.0)|| (haveVF));
    if (haveVap){
        hr=ctpr->CalcSinglePhaseProp(...); //Entalpía - Vapor
    }
}

```

```

GetSinglePhaseScalarProp(&Hvap,enthalpy,vapor,mole,error)
Hactual[0]=Hactual[0]+ Hvap[0]*Yov[0];
}

if (haveLiq){
hr=ctpr->CalcSinglePhaseProp(...); //Entalpía - Líquido
GetSinglePhaseScalarProp(&Hliq,enthalpy,liquid,mole,error)
Hactual[0]=Hactual[0]+ Hliq[0]*Xov[0];
}
//El balance de energía cierra?
if (Hactual[0] = Hinic[0]) {
T[0]=Test[0];
convergePH = true;}
else
//Definir una nueva Test[0]
}
//Cálculo flash exitoso. Enviar resultados al "Material Object"
SetPhasesComposition(Yov, Xov, Ycomp, Xcomp, haveVF, T, P, ...);
}
}

```

Estos componentes de software fueron utilizados en COCO Simulator, a través del paquete de propiedades TEA, tal como se muestra en la figura 5 y 6.

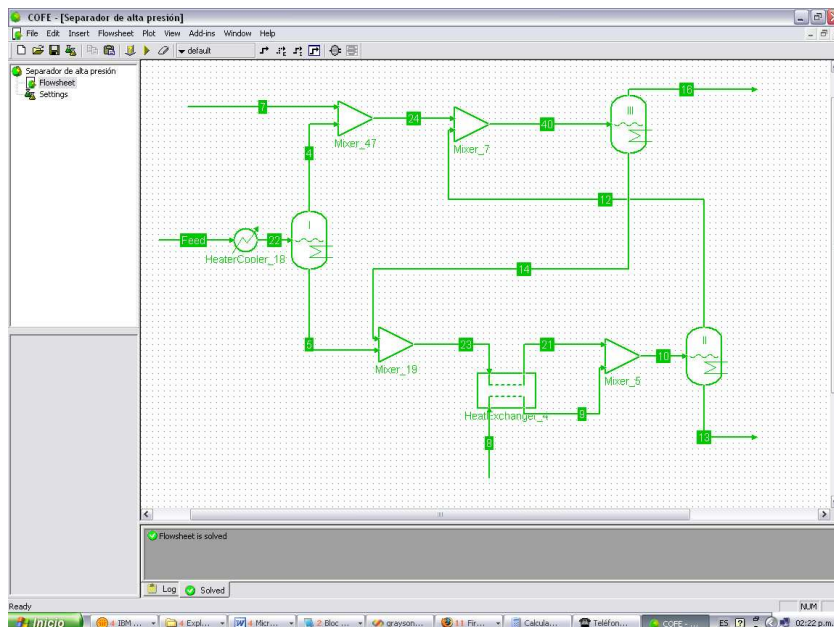


Fig 7. Separador de alta presión y alta temperatura en una unidad de Hidrocrqueo

En la figura 7 se muestra un diagrama de flujo que representa un separador de alta presión y alta temperatura de una unidad de hidrocraqueo. Para este caso se empleó el calculador de equilibrio “Grayson Streed” (*graysonStreed.dll*). La imagen representa el diagrama de flujo una vez realizada la corrida.

## 6. Conclusiones

El presente documento describe el desarrollo de componentes de software para simulación de procesos utilizando los estándares CAPE OPEN, haciendo énfasis en la construcción de aquellos que implementen modelos de cálculo de equilibrio líquido vapor, específicamente los modelos de Chao-Seader, Grayson-Streed y Lee-Erbar-Edmister modificado.

PDVSA S.A es una empresa del sector energético que opera en la ramas de exploración, producción, refinación y comercialización de productos procedentes del petróleo y gas, comprometida con la soberanía tecnológica de su país, esto implica que el desarrollo de su propios componentes de simulación representan puntos estratégicos para proteger su información y al mismo tiempo garantizar la fiabilidad de los resultados producidos.

El desarrollo de estos componentes de simulación para cálculos de VLE permite que PDVSA Intevep, como filial de investigación y apoyo tecnológico de la corporación PDVSA pueda simular muchos de sus procesos críticos que requieren de la utilización de los modelos termodinámicos en cuestión, sin necesidad de recurrir a herramientas de simulación comercial.

El simulador COCO Simulator, además de ser una herramienta clave para la prueba y validación de componentes de simulación basados en los estándares CAPE-OPEN, puede ser utilizada para modelar casos de estudio reales de la industria petrolera que requieran de modelos termodinámicos especiales, previo desarrollo de las piezas de código necesarias.

## Referencias

CAPE-OPEN Consortium (1999). CAPE-OPEN: Next generation computer aided process engineering open simulation environment. Synthesis report. -- COLaN [online].

Disponible de internet:

[http://www.colan.org/Specifications/v093/00\\_CO\\_Public\\_Synthesis.pdf](http://www.colan.org/Specifications/v093/00_CO_Public_Synthesis.pdf)

Castillo, C., y Fernández, N. (2001). Marco termodinámico para el estudio de simulación de procesos de hidrodesulfuración profunda de diesel. Los Teques: *CIT-Intevep*.

Chao, K. y Seader, J. (1961). A general correlation of Vapor-Liquid Equilibria in Hydrocarbon Mixtures. *American Institute of Chemical Engineers Journal* , 7 (4), 598-605.

COLaN Consortium (Junio de 2001). CAPE-OPEN Specifications. Thermodynamic and Physical Properties. Recuperado el 07 de 12 de 2009, de *CAPE-OPEN Laboratories Network*: [www.colan.org/](http://www.colan.org/)

Ërdos, E. (1956). Determination of the constants in the Van Laar equations from the properties of the pure constituents. *Coll. Chem. Commun.*, 21: 1528-1534.

Gobierno Bolivariano de Venezuela (2008). Petróleos de Venezuela S.A. (PDVSA) y sus Filiales. INFORME DE GESTIÓN ANUAL 2008. Disponible de internet: [ww.pdvsa.com](http://www.pdvsa.com)

Grayson, H. y Streed, C. (1963). Vapor-liquid Equilibria for High Temperature, High Pressure, Hydrogen-Hydrocarbon Systems. *World Petroleum Congress* (20), 169-181.

Lee, B., Erbar, J. H. y Edmister, W. C. (1973). Prediction of Thermodynamic Properties for Low Temperature Hydrocarbon Process Calculation. *American Institute of Chemical Engineers Journal* , 19 (2), 349-3561.

Pérez, V. L., et al. (2005). A CAPE-OPEN compliant simulation module for an ammonia reactor unit. *2nd Mercosur Congress on Chemical Engineering, 4th Mercosur Congress on Process Systems Engineering* [online]. Disponible de internet: [http://www.enpromer2005.eq.ufrj.br/nukleo/pdfs/0217\\_enpromer\\_2005\\_paper\\_virginia\\_final.pdf](http://www.enpromer2005.eq.ufrj.br/nukleo/pdfs/0217_enpromer_2005_paper_virginia_final.pdf)

Pons, M. (22 de Julio de 2005). *What is the CAPE-OPEN Laboratories Network (CO-LaN)*. Recuperado el 07 de 12 de 2009, de Chemical Processing Magazine: [www.chemicalprocessing.com/articles/2005/510.html/](http://www.chemicalprocessing.com/articles/2005/510.html/)

Zwolinski, B. J. y Wilhoit, R. C. (1971). Handbook of Vapor Pressures and Heats of Vapourization of Hydrocarbons and Related Compounds. Thermodynamics Research Center, Texas, 329 páginas.