



Universidad de Valladolid



**ESCUELA DE INGENIERÍAS
INDUSTRIALES**

**UNIVERSIDAD DE VALLADOLID
ESCUELA DE INGENIERIAS INDUSTRIALES**

Grado en Ingeniería Química

**Diseño de una planta para la producción de
acetona a partir de isopropanol**

Autor:

David Sanz Sastre

Tutor:

**Rafael Bartolomé Mato Chaín
Departamento de Ingeniería Química y
Tecnología del Medio Ambiente**

Valladolid, julio de 2021

Dedicado a mi abuela, Juana Santiago Rico,

Me siento orgulloso de poder escribir tu nombre en este trabajo tan importante para mí. Siempre has cuidado de mí y eres sin duda la persona que más me quiere y más me valora en este mundo. Nunca olvidaré todos los valores que te representan como persona y que me has enseñado a respetarlos y a demostrarlos día a día. Tu humildad, tu constancia y tu esfuerzo y los sacrificios que estos conllevan. Hoy espero que estén reflejados en este proyecto y que tú también te sientas orgullosa por ello.

Espero que sigas a mi lado muchos años más, sé que vas a seguir luchando por hacerlo posible, porque jamás he conocido una guerrera tan valiente como tú.

Eres lo más grande y lo más bonito que Dios me ha regalado.

Te quiero mucho.

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecer todo el apoyo que he recibido por parte de mi familia y, en especial, a mis padres. Siempre habéis estado a mi lado en este viaje, en los buenos momentos, pero sobre todo en los malos. Muchas gracias por haberme acompañado y por todo el esfuerzo que habéis hecho por mí. Os quiero mucho.

En segundo lugar, dar las gracias al tutor de este Trabajo Final de Grado, Rafael Bartolomé Mato Chaín. Muchas gracias por tu trabajo, por todo lo que me has enseñado y por tu entera disponibilidad. Eres una gran persona y un referente para mí.

Por otro lado, tengo que dar las gracias a mis grandes amigos, Alvarito, Javi y Héctor, por todo el apoyo, el ánimo y los consejos que me han dado.

Finalmente, me gustaría dar las gracias a María Ascensión, profesora del grado de ingeniería química, por su ayuda bibliográfica.

Resumen

En este proyecto se ha realizado el diseño de una planta para la producción de acetona a partir de la deshidrogenación catalítica de isopropanol con una capacidad de producción de 27.000 toneladas anuales y una pureza del 99,5% en masa.

Para ello, se ha hecho uso del software de simulación de procesos químicos Aspen Plus V11, en el que se ha simulado la planta partiendo desde la alimentación al proceso. En el desarrollo de esta tarea, se han establecido diversos criterios de diseño, justificados en base a resultados obtenidos mediante el análisis de la influencia de las variables de operación en la eficiencia y en la rentabilidad económica del proceso. Simultáneamente, se ha llevado a cabo una optimización económica básica de los equipos que forman la sección de separación.

Como resultado se ha obtenido una conversión global de isopropanol del 99,99% con un consumo energético de 3,62 Gcal por tonelada de producto obtenido. Los costes totales asociados a la planta propuesta son de 53.579.600 € al año, con un valor actual neto de 9.884.370 €.

Palabras clave

Acetona, Isopropanol, Deshidrogenación, Aspen, Simulación, Integración de Procesos, Diseño, Optimización

Abstract

This project involved the design of a plant for the production of acetone from the catalytic dehydrogenation of isopropyl alcohol with a production capacity of 27.000 tonnes per year and a mass purity of 99,5%.

For this purpose, the chemical process simulation software Aspen Plus V11 has been used, in which the plant has been simulated starting from the feed to the process. In the development of this task, various design criteria have been established, justified on the basis of results obtained by analysing the influence of the operating variables on the efficiency and economic profitability of the process. Simultaneously, a basic economic optimization of the equipment forming the separation section has been carried out.

As a result, an overall isopropanol conversion of 99,99% has been obtained with an energy consumption of 3,62 Gcal per tonne of product obtained. The total costs associated with the proposed plant are 53.579.600 € per year, with a net present value of 9.884.370 €.

Keywords

Acetone, Isopropanol, Dehydrogenation, Aspen, Simulation, Process Integration, Design, Optimization

Índice del proyecto

Agradecimientos	ii
Resumen	iii
Palabras clave.....	iii
Abstract	iv
Keywords.....	iv
1. Introducción.....	1
1.1. Propiedades físicas.....	1
1.2. Propiedades químicas	2
1.3. Deshidrogenación catalítica de isopropanol.....	3
1.3.1. Reacción.....	4
1.3.2. Catalizador	4
1.3.3. Cinética.....	5
1.4. Otros procesos de obtención de acetona	6
1.5. Aplicaciones industriales de la acetona	9
2. Objetivos	10
3. Bases de diseño del proceso	11
3.1. Capacidad de producción.....	11
3.2. Especificaciones de materias primas.....	11
3.3. Especificaciones de productos	13
3.4. Especificaciones de servicios auxiliares	17
3.5. Límites de batería del proyecto	20
3.6. Localización de la planta.....	20
3.7. Códigos de diseño a utilizar	21
3.8. Tiempo de vida de la planta	22
3.9. Horas de operación.....	22
4. Descripción del proceso	23
4.1. Diagrama de bloques	23
4.2. Diagrama de flujo.....	23
4.3. Descripción detallada.....	23
4.3.1. Acondicionamiento de reactivos	23
4.3.2. Síntesis de acetona	24

4.3.3. Condensación y separación líquido-vapor	24
4.3.4. Absorción de acetona.....	25
4.3.5. Primera etapa de destilación.....	25
4.3.6. Segunda etapa de destilación	26
5. Equipos de proceso.....	28
5.1. Lista de equipos.....	28
5.2. Hojas de especificaciones.....	28
6. Simulación y optimización del proceso.....	29
6.1. Compuestos y propiedades.....	29
6.1.1. Selección del modelo de propiedades	29
6.1.2. Modelo de propiedades UNIQUAC.....	30
6.1.3. Modelo de propiedades NRTL	32
6.1.4. Modelo de propiedades WILSON.....	34
6.2. Alimentación.....	36
6.3. Análisis mediante Integración de Procesos	37
6.4. Acondicionamiento de reactivos.....	39
6.5. Sección de reacción.....	40
6.5.1. Parámetros geométricos iniciales del reactor	40
6.5.2. Fluido térmico de intercambio de calor	41
6.5.3. Modo de operación del fluido térmico	42
6.5.4. Reactor auxiliar de referencia	43
6.5.5. Influencia de la temperatura de operación – Longitud de los tubos.....	44
6.5.6. Influencia de la presión de operación.....	47
6.5.7. Flujo másico de sal fundida	50
6.5.8. Número de tubos.....	50
6.5.9. Coeficiente global de transmisión de calor	50
6.6. Sección de separación	53
6.6.1. Condensador parcial E-301 y separador líquido-vapor V-301	54
6.6.2. Recuperación de acetona – Absorbedor C-301.....	55
6.6.3. Destilación	59
6.6.4. Columna de destilación C-302	62
6.6.5. Columna de destilación C-303	65

6.7. Recirculación y ajuste.....	68
6.8. Optimización económica	69
6.8.2. Columna de destilación C-302	69
6.8.3. Columna de destilación C-303	70
6.8.4. Temperatura de operación	72
6.9. Perfiles de composición finales	75
6.10. Especificaciones finales.....	77
7. Valoración económica del proyecto	79
7.1. Situación más favorable.....	79
7.2. Situación promedio.....	80
7.3. Situación menos favorable	82
7.4. Valoración conjunta	83
8. Seguridad.....	84
9. Impacto ambiental	86
9.1. Análisis de efluentes y posibles tratamientos	86
9.2. Aprovechamiento de materias primas	87
9.3. Uso del agua.....	87
9.4. Aspectos energéticos.....	88
10. Conclusiones	89
11. Bibliografía	91
ANEXOS	95
ANEXO I – Símbolos y acrónimos	96
ANEXO II – Lista de tablas, figuras y ecuaciones	99
ANEXO III – Fichas de seguridad	107
ANEXO IV – Planos.....	126
ANEXO V – Tabla de corrientes.....	129
ANEXO VI – Equipos.....	134
ANEXO VII – Informe de la simulación	154

1. Introducción

La acetona ($\text{CH}_3\text{-CO-CH}_3$), también conocida como 2-propanona o dimetil cetona, es el primer compuesto y más importante de la serie homóloga que constituyen las cetonas alifáticas. Dentro de sus aplicaciones, se encuentra la de ser un efectivo disolvente de un gran número de polímeros. Sin embargo, esta se emplea principalmente a nivel industrial como compuesto intermedio en la obtención de productos con mayor valor como el metacrilato de metilo (MMA), el bisfenol A o la metil isobutil cetona (MIBK), entre otros (*Sifniades & Levy, 2011*).

Este compuesto fue descubierto por primera vez en la Edad Media, el cual recibió inicialmente el nombre de “espíritu de Saturno” (*Martin, 2018*). Su fórmula química fue determinada en el año 1832 por el químico francés Jean Baptiste Dumas y el químico alemán Justus von Liebig (*Arago & Gay-Lussac, 1832*).

El primer proceso químico de fabricación de acetona fue mediante destilación seca del acetato de calcio. A principios del siglo XX, el proceso de fermentación de carbohidratos provenientes del almidón del maíz y de las melazas para dar acetona y alcoholes butílicos y etílicos, sustituyó el anterior proceso productivo. Entre los años 1950 y 1960, debido a la alta disponibilidad de propileno, la fermentación fue sustituida por los procesos de deshidrogenación de isopropanol para la producción de acetona y de oxidación de cumeno (proceso Hock) para la obtención simultánea de fenol y acetona. Junto con el proceso de oxidación directa de propeno (según el proceso Wacker-Hoechst), estos dos últimos procesos constituyen más del 95% de la acetona producida mundialmente (*Sifniades & Levy, 2011; ICIS, 2010a*).

El presente trabajo está enfocado en el proceso de producción de acetona a partir de la deshidrogenación catalítica de isopropanol, el cual se describe detalladamente en el apartado [1.3. Deshidrogenación catalítica de isopropanol](#). El resto de los procesos de obtención de acetona se introducen con menos detalle en el apartado [1.4. Otros procesos de obtención de acetona](#).

1.1. Propiedades físicas

La acetona es un líquido transparente e incoloro a temperatura ambiente, el cual tiene un olor característico no residual. Se trata de un compuesto polar, por lo que es miscible en cualquier proporción con agua y con disolventes orgánicos polares como éteres, ácidos carboxílicos o alcoholes de menor masa molecular. Sin embargo, también presenta una miscibilidad limitada con disolventes orgánicos no polares (*Sifniades & Levy, 2011*).

Las propiedades físicas de este compuesto y del resto que están presentes en el diseño de la planta se han obtenido mediante el modelo de propiedades WILSON (apartado [6.1 Compuestos y propiedades](#)), a través del software de simulación

Aspen Plus V11 ([AspenTech, 2019](#)). Los valores de las variables físicas de los compuestos pueden consultarse en el [ANEXO VII – Informe de la simulación](#).

1.2. Propiedades químicas

La acetona presenta una temperatura de inflamación en vaso cerrado de -18°C y una temperatura de autoignición de 538°C . Los límites explosivos de las mezclas acetona-aire están entre 2,15% y 13,0% en volumen de acetona en aire a 25°C ([Othmer, 1998](#)).

La acetona experimenta las reacciones comunes de las cetonas alifáticas saturadas. Junto a bisulfitos alcalinos forma compuestos cristalinos. Por otro lado, con agentes reductores se transforma en alcohol isopropílico y pinacol y, a través de la denominada reducción de *Clemmensen*, da lugar a propano. Mediante amonólisis reductora se obtiene isopropilamina ([Othmer, 1998](#)).

En condiciones altamente básicas, la acetona reacciona con el cianuro de hidrógeno para dar lugar a cianohidrina de acetona, un producto intermedio fundamental en la producción industrial de metacrilato de metilo ([Sifniades & Levy, 2011](#)).

Junto a acetileno, en medio de una disolución básica de amoníaco y en presencia de un catalizador metálico alcalino, se transforma en 2-metil-3-butin-2-ol, que es compuesto intermedio muy importante en la síntesis industrial de isopreno ([Sifniades & Levy, 2011](#)).

Por otro lado, la acetona experimenta otras muchas reacciones de condensación ([Othmer, 1998](#)):

- Reacciona con aminas para dar lugar a bases de *Schiff*.
- Junto a esteres ortofórmicos forma acetales.
- Con sulfuro de hidrógeno se transforma en tioacetona.
- Mediante reacción con mercaptanos, produce tioacetales.
- Con alcóxidos de sodio y también con anhídridos carboxílicos en presencia de trifluoruro de boro, se forman β -diacetonas.

En cuanto a las reacciones de oxidación, la acetona es estable en presencia de la mayoría de los agentes oxidantes comunes. Sin embargo, esta puede ser oxidada por oxidantes fuertes: con hipohaluros de metales alcalinos para dar acetatos, o con un halógeno en presencia de una base para dar como resultado un haloformo ([Othmer, 1998](#)).

1.3. Deshidrogenación catalítica de isopropanol

En la *Figura 1.1* se muestra un esquema de un proceso típico de deshidrogenación catalítica de isopropanol para dar acetona.

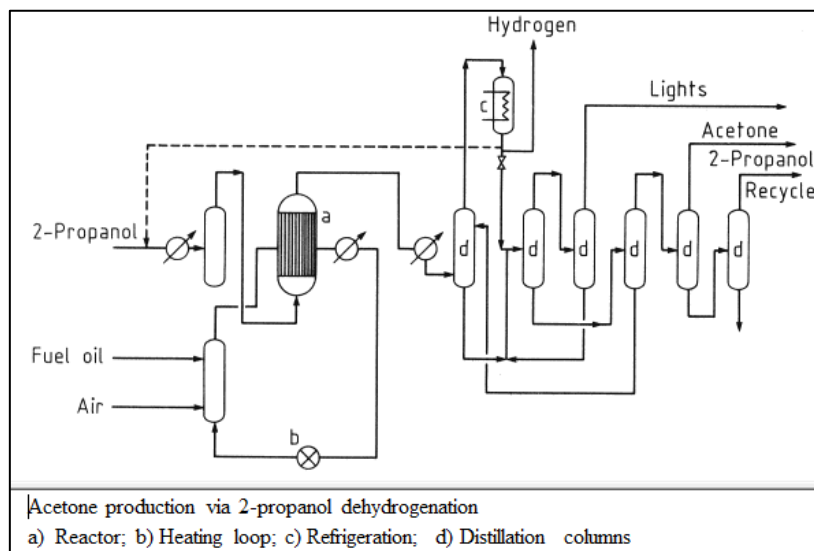


Figura 1.1. Esquema del proceso de producción de acetona a partir de isopropanol (Sifniades & Levy, 2011).

En el proceso típico (*Figura 1.1*), la alimentación a la planta está constituida por la mezcla azeotrópica isopropanol-agua (67% en mol de isopropanol). Esta corriente se introduce en el lecho catalítico de un reactor especialmente diseñado para una transferencia eficaz de calor. El hidrógeno generado al final del proceso puede mezclarse con la alimentación para evitar el ensuciamiento del catalizador. El fluido de transmisión de calor suele ser aceite, vapor a alta presión, gases calientes o sales fundidas. Se produce hidrógeno con una pureza superior al 99% como subproducto de alto valor. Este se separa mediante condensación de los demás componentes. La acetona se separa por destilación (Sifniades & Levy, 2011).

Algunas de las compañías industriales que utilizan este proceso, el catalizador que emplean y las condiciones de operación se muestran en la *Tabla 1.1*.

Tabla 1.1. Condiciones de operación de algunas compañías industriales que emplean el proceso de deshidrogenación catalítica de isopropanol (Sifniades & Levy, 2011).

Company	Catalyst	Temperature, °C	Pressure, kPa	Conversion, %	Selectivity, %	Yield, %
Standard Oil	ZnO/ZnO ₂	400	201 – 304	98.2	90.2	88.6
Knapsack-Griesheim	CuO/Cr ₂ O ₃ /Na ₂ O pumice	300		89.5	99.0	88.6
Toyo-Rayon	CuO/NaF/SiO ₂	300		93.4	100	93.4
Engelhard Industries	5 % Pt/C	310				92.4
Usines de Melle	CuO/Cr ₂ O ₃ /SiO ₂	220	151	75	98.2	73.7

1.3.1. Reacción

La reacción principal que tiene lugar en el proceso de deshidrogenación catalítica de isopropanol (*Ecuación 1.1*). Según *Turton et al., (2003)* esta reacción es irreversible y controlada por la cinética. Sin embargo, el estudio cinético desarrollado por *Luyben, (2011)* demuestra que esta es reversible y que está controlada por parte de la cinética y por parte del equilibrio.

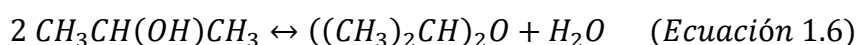
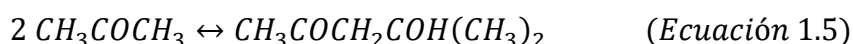
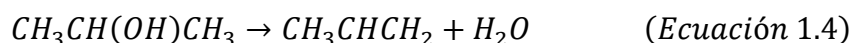


Se trata de una reacción endotérmica en fase gaseosa, con un calor de reacción de $62.900 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$ (*Turton et al., 2003*). La reacción directa es la deshidrogenación de isopropanol (*Ecuación 1.2*) mientras que la reacción inversa es la hidrogenación de acetona (*Ecuación 1.3*).



Las energías de activación de las reacciones directa e inversa son respectivamente $72.380 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$ y $9.480 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$ (*Luyben, 2011*).

Además de la reacción principal, también tienen lugar reacciones secundarias competitivas. Según *Sifniades & Levy, (2011)* la principal reacción secundaria es la deshidratación de isopropanol para dar propileno y agua (*Ecuación 1.4*) aunque también está presente la condensación de dos moléculas de acetona para dar alcohol de diacetona (*Ecuación 1.5*). Por otro lado, *Mourhly et al., (2019)* introduce una tercera reacción secundaria, la deshidratación de dos moléculas de isopropanol para dar diisopropil éter (*Ecuación 1.6*).



Estas reacciones competitivas y las reacciones directa e inversa principales dependen del carácter ácido o básico del catalizador empleado en el proceso (*Bedía et al., 2010*).

1.3.2. Catalizador

En este proceso se emplea gran variedad de catalizadores (*Sifniades & Levy, 2011*). Estos pueden estar constituidos por metales como el cobre, el zinc o el plomo, y por óxidos de metales como el óxido de zinc, el óxido de cobre, el óxido de manganeso o el óxido de magnesio.

También se emplean otros catalizadores con una gran actividad catalítica como son los metales preciosos platino y rutenio, aunque estos son verdaderamente efectivos en reacción en fase líquida ([Sifniades & Levy, 2011](#)).

Diversos autores han estudiado el comportamiento cinético de las reacciones llevadas a cabo por el isopropanol en base a estos catalizadores. Para catalizadores de cobre se puede consultar el estudio de [Rioux & Vannice, \(2003\)](#), para catalizadores de plata [Mourhly et al., \(2019\)](#), para el óxido de manganeso [Klissurski et al., \(1971\)](#), para los óxidos de zinc y de cobre [Lokras et al., \(1970\)](#), entre otros.

Tal y como se dijo anteriormente, el carácter ácido o básico del catalizador desarrolla un papel fundamental en el transcurso de la reacción. Para catalizadores de carácter básico, se favorece la reacción de deshidrogenación de isopropanol, mientras que para catalizadores de carácter ácido se favorecen las reacciones de deshidratación ([Bedia et al., 2010](#)). De acuerdo con esto, se hace indispensable el empleo de catalizadores de carácter básico para este proceso con el fin de minimizar las posibles reacciones secundarias.

En este trabajo se ha decidido emplear un catalizador industrial formado por cobre, zinc y cromo en un soporte de alúmina ([W. & Richardson, 1984](#)). Las características del catalizador empleado en el diseño de la planta se muestran en la siguiente tabla ([Tabla 1.2](#)).

Tabla 1.2. Características del catalizador empleado en el diseño de la planta ([W. & Richardson, 1984](#)).

Composición (% masa)	6% Cu / 3,6% Zn / 0,7% Cr
Soporte	α -Al ₂ O ₃
Diámetro de partícula (mm)	1,41
Densidad de partícula (kg·m ³)	2.732
Porosidad	0,41
Rango de temperatura (°C)	200-500

El rango de temperatura del catalizador ([Tabla 1.2](#)) marcará el rango de operación del reactor, ya que sobrepasando la temperatura de 500 °C se corre el riesgo de que se produzca la descomposición de este.

1.3.3. Cinética

La cinética de la reacción principal empleada en el diseño de la planta ha sido tomada de [Luyben, \(2011\)](#). La cinética de la reacción directa ([Ecuación 1.2](#)) se muestra en la [Ecuación 1.7](#) y la cinética de la reacción inversa ([Ecuación 1.3](#)) se muestra en la [Ecuación 1.8](#).

$$r_D = 22 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[\frac{-E_{AD}}{R \cdot T}\right] \cdot C_{IPA} \quad (\text{Ecuación 1.7})$$

$$r_I = 10^3 \cdot \exp\left[\frac{-EA_I}{R \cdot T}\right] \cdot C_{ACETONA} \cdot C_{H_2} \quad (\text{Ecuación 1.8})$$

Donde r_D representa la velocidad de la reacción principal directa expresada en $\text{kmol}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}$, r_I representa la velocidad de la reacción principal inversa expresada en $\text{kmol}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}$, EA_D representa la energía de activación de la reacción principal directa cuyo valor es de $72.380 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$ (apartado [1.3.1. Reacción](#)), EA_I representa la energía de activación de la reacción principal inversa cuyo valor es de $9.480 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$ (apartado [1.3.1. Reacción](#)), T representa la temperatura expresada en K, R representa la constante universal de los gases expresada en $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, C_{IPA} representa la concentración de isopropanol expresada en $\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$, $C_{ACETONA}$ representa la concentración de acetona expresada en $\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$ y C_{H_2} representa la concentración de hidrógeno expresada en $\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$.

Con el fin de realizar un diseño lo más realista posible también se han tenido en cuenta las reacciones secundarias descritas anteriormente. Debido a la falta de expresiones y datos cinéticos de estas reacciones se ha decidido realizar una distribución de selectividades iniciales a partir de la [Tabla 1.1](#). Asumiendo una selectividad de la reacción principal inicial del 98%, el 2% restante ha sido repartido entre las reacciones secundarias competitivas. A la reacción de deshidratación de isopropanol para dar propileno y agua ([Ecuación 1.4](#)) se le ha asignado una selectividad del 1,5%, a la reacción de condensación de dos moléculas de acetona para dar alcohol de diacetona ([Ecuación 1.5](#)) se le ha asignado una selectividad del 0,1% y a la reacción de deshidratación de dos moléculas de isopropanol para dar diisopropil éter ([Ecuación 1.6](#)) se le ha asignado una selectividad del 0,4%.

1.4. Otros procesos de obtención de acetona

A pesar de que el presente trabajo se centra en la producción de acetona a partir del proceso de deshidrogenación de isopropanol, existen otros procesos industriales de obtención.

Oxidación de cumeno (proceso Hock)

Este proceso ([Figura 1.2](#)) es sin duda el más empleado actualmente para la producción simultánea de acetona y de fenol, ya que requiere menores costes. Casi el 90% de la acetona producida globalmente se produce en base a este proceso ([ICIS, 2010a](#)).

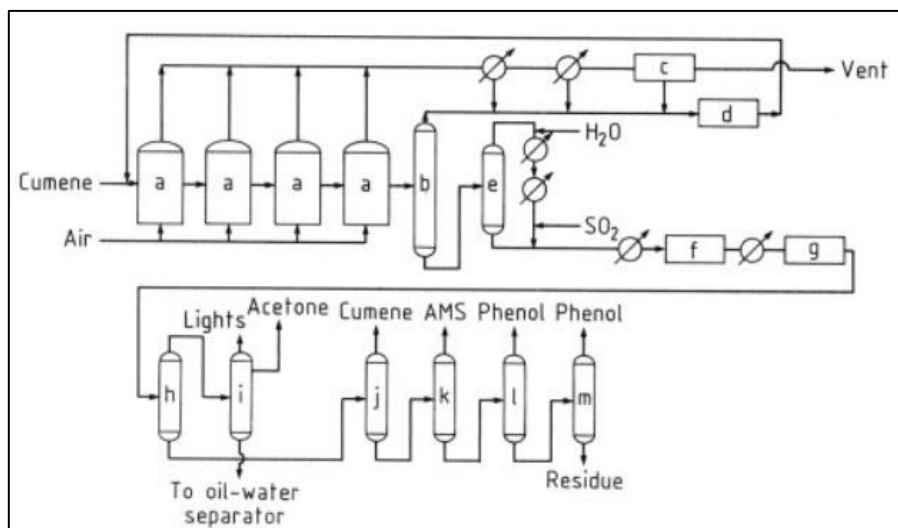


Figura 1.2. Esquema de un proceso típico de obtención de fenol y acetona a partir de cumeno (Sifniades & Levy, 2011).

En este proceso el propeno reacciona con el benceno para dar cumeno (Figura 1.3). El cumeno es oxidado posteriormente mediante aire para obtener hidroperóxido de cumeno, que se escinde en presencia de un catalizador ácido (Figura 1.3). El fenol y la acetona producidos se recuperan mediante destilación.

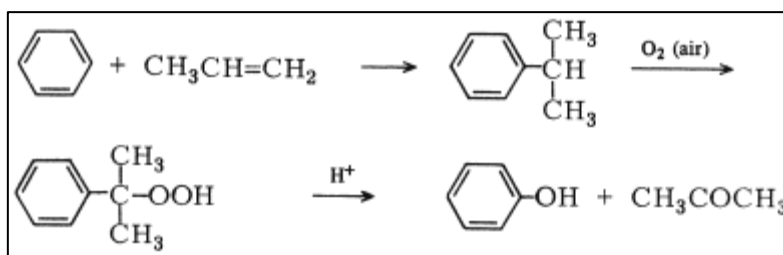


Figura 1.3. Esquema de la reacción de oxidación de cumeno para dar fenol y acetona (Sifniades & Levy, 2011).

Oxidación de propeno (proceso Wacker-Hoechst)

Este proceso de obtención de acetona es análogo al de obtención de acetaldehído a partir de oxidación de etileno según el proceso Wacker-Hoechst. La solución catalizadora que se emplea usualmente está formada por cloruro de paladio (II), cloruro de cobre (II) y ácido acético. La reacción (Figura 1.4) se lleva a cabo en dos etapas alternas. En la primera etapa, los iones metálicos son oxidados hasta su estado de oxidación +2 mediante aire. En la segunda etapa, se elimina el aire y se añade el propeno. El paladio (II) oxida el propeno y el paladio (I) resultante se vuelve a oxidar por el cloruro de cobre (II).

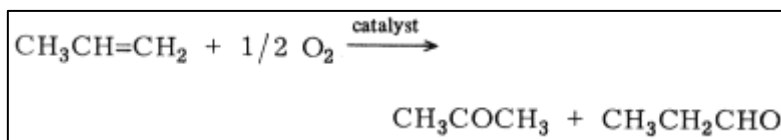


Figura 1.4. Esquema de la reacción de producción de acetona a partir de propeno (Sifniades & Levy, 2011).

Las condiciones de reacción típicas son: una presión de operación de entre 10 y 14 bar y una temperatura de operación de entre 110 °C y 120 °C. La conversión de propeno es superior al 99%.

Oxidación de isopropanol

La reacción llevada a cabo en este proceso (Figura 1.5) se realiza en ausencia de catalizador. El isopropanol reacciona con el oxígeno mediante un mecanismo de radicales libres para dar lugar a acetona y peróxido de hidrógeno.

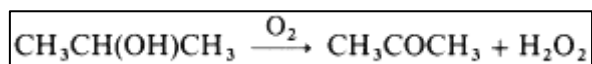


Figura 1.5. Esquema de la reacción de producción de acetona a partir de la oxidación de isopropanol (Sifniades & Levy, 2011).

Oxidación de p-diisopropil benceno

En este proceso, la acetona se produce junto con la hidroquinona (Figura 1.6) mediante un mecanismo similar al de la oxidación de cumeno. El p-diisopropil benceno es oxidado con oxígeno en presencia de sosa cáustica para formar el dihidroperóxido de p-diisopropil benceno. Este último se cristaliza y se lava con benceno. A continuación, se disuelve en acetona y se escinde en hidroquinona y acetona en presencia de ácido sulfúrico. Finalmente, se neutraliza el ácido con amoníaco y se filtra el sulfato de amonio formado. La acetona se recupera por destilación.

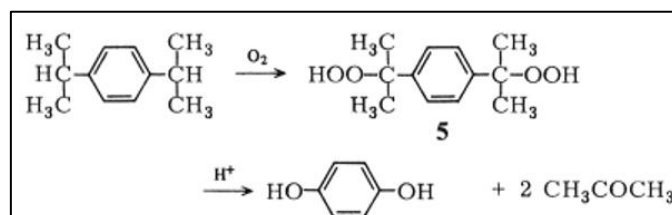


Figura 1.6. Esquema de la reacción de obtención de acetona a partir de la oxidación de p-diisopropil benceno (Sifniades & Levy, 2011).

Fermentación de biomasa

Este proceso se basa en la fermentación de carbohidratos procedentes del almidón de maíz y de las melazas para producir una mezcla de 1-butanol, acetona y etanol con una concentración global del 2%. Estos productos se destilan al vapor y posteriormente se fraccionan.

El proceso se inició durante la Segunda Guerra Mundial para obtener la acetona necesaria para la fabricación de cordita. Actualmente, se emplea poco a nivel industrial. Su futuro está asociado a la disponibilidad de materias primas petroquímicas ([Sifniades & Levy, 2011](#)).

1.5. Aplicaciones industriales de la acetona

La aplicación más destacable de la acetona es su empleo como compuesto intermedio en la síntesis de la cianohidrina de acetona. Este compuesto es el precursor del metacrilato de metilo (MMA), cuyo derivado, el polimetacrilato de metilo (PMMA), se emplea en la fabricación de productos acrílicos como láminas fundidas y extruidas, moldes acrílicos o compuestos de extrusión. Entre las aplicaciones del PMMA están las ventanas, los letreros, los accesorios de iluminación, las piezas de automóvil, los dispositivos médicos y los electrodomésticos. También es empleado en aplicaciones electrónicas, en televisores de pantalla plana y en pantallas que emplean cristal líquido. Los metacrilatos también son utilizados en revestimientos superficiales de látex en aplicaciones como arquitectura, muebles de madera, lacas y esmaltes ([ICIS, 2010b](#)).

Por otro lado, la acetona es empleada en la fabricación de bisfenol-A (BPA). Este compuesto se utiliza como materia prima en la producción de resinas epoxi y de policarbonatos (PC). Estos últimos son empleados en aplicaciones ópticas (CD y DVD), eléctricas y electrónicas (aislantes, conectores y carcasas) y en el sector automovilístico ([ICIS, 2010b](#)).

Otra de las aplicaciones destacables de la acetona es su utilización como disolvente. Dentro de este sector la industria farmacéutica es la mayor consumidora de disolventes de acetona. Sin embargo, esta se emplea también en plásticos reforzados con vidrio, productos químicos de caucho, productos domésticos, cosméticos y de cuidado personal. Otros usos menos frecuentes dentro del sector de los disolventes son la electrónica, los revestimientos superficiales, las tintas de impresión y las láminas de estampación en caliente ([ICIS, 2010b](#)).

Finalmente, otra utilidad destacable de la acetona es su empleo como compuesto intermedio en la producción de metil isobutil cetona (MIBK), de isoforona y de alcohol de diacetona. La metil isobutil cetona se emplea industrialmente como disolvente en pinturas y revestimientos. Por otro lado, la isoforona se utiliza en la fabricación de una serie de derivados empleados en la industria de revestimientos de superficies ([ICIS, 2010b](#)).

2. Objetivos

El principal objetivo de este trabajo es el diseño de una planta para la producción de acetona por deshidrogenación de isopropanol. La capacidad de producción que se pretende alcanzar a partir de este objetivo es de 27.000 toneladas anuales de producto final con una pureza del 99,5% en masa de acetona.

A lo largo del desarrollo del presente trabajo también se han alcanzado otros objetivos secundarios. Por un lado, se ha estudiado la influencia de las variables del proceso y los parámetros geométricos de los equipos con el objetivo de realizar una optimización inicial de las secciones de reacción y de separación de la planta. Por otro lado, se ha realizado un análisis económico en función de la temperatura de operación del reactor con el objetivo de optimizar económicamente el proceso.

Finalmente, se ha realizado un estudio económico de la planta en función de los precios de las materias primas empleadas, del producto final obtenido y del hidrógeno generado como subproducto con el fin de valorar la rentabilidad económica del proceso.

3. Bases de diseño del proceso

3.1. Capacidad de producción

Tal y como se indicó en el anterior apartado, la capacidad de producción seleccionada para el diseño de la planta es de 27.000 toneladas anuales de producto final. Se ha decidido establecer este valor en base a la siguiente tabla (*Tabla 3.1*) donde se muestran datos de capacidades de producción de acetona de varias plantas reales localizadas en Estados Unidos (*Dietrich, 2012*).

Tabla 3.1. Capacidades de producción de acetona de distintas plantas reales situadas en Estados Unidos expresadas en kilotoneladas (kt) anuales (Dietrich, 2012).

Compañía	Localización	Capacidad de producción (kt·año ⁻¹)
Shell Chemical	Deer Park, Texas	355
INEOS Phenol	Theodore, Alabama	330
Honeywell	Frankford, Pennsylvania	317
SABIC	Mount Vernon, Indiana	208
Dow	Freeport, Texas	180
Haverhill Chemicals	Haverhill, Ohio	173
Georgia Gulf	Planquemine, Louisiana	140
Dow	Institute, West Virginia	77
Blue Island Phenol	Blue Island, Illinois	27
Goodyear Tire	Bayport, Texas	7

La capacidad de producción seleccionada a partir de la anterior tabla es la correspondiente a la planta de la compañía *Blue Island Phenol*, situada en Blue Island (Illinois).

3.2. Especificaciones de materias primas

En este proceso únicamente se ha requerido una materia prima, la alimentación a la planta. Según varias referencias bibliográficas consultadas sobre la obtención de acetona a partir del proceso de deshidrogenación catalítica de isopropanol (*Turton et al., 2003; Luyben, 2011; Sifniades & Levy, 2011*), la materia prima empleada está compuesta por la mezcla azeotrópica a presión atmosférica isopropanol-agua con un porcentaje molar de isopropanol del 67%. Sin embargo, a partir del modelo de propiedades de WILSON empleado en la simulación del proceso (apartado *6.1.4. Modelo de propiedades WILSON*) y mediante la justificación desarrollada en el apartado *6.2. Alimentación*, se ha seleccionado una composición molar de la materia prima del 70% en isopropanol y del 30% de agua.

En la siguiente tabla (*Tabla 3.2*) se resumen las principales especificaciones de la materia prima empleada en la planta.

Tabla 3.2. Especificaciones de la materia prima empleada en el proceso.

Temperatura (°C)	25,0
Presión (bar)	1,01
Composición (% mol)	70% Isopropanol / 30% Agua

En cuanto al precio de la materia prima, se ha realizado un análisis de mercado del isopropanol desde junio hasta diciembre del año 2020. Para ello se ha recurrido a la página web www.echemi.com, donde se han recogido los precios del isopropanol en este periodo de tiempo. Los resultados se muestran en la [Figura 3.1](#) y en la [Tabla 3.3](#). Las referencias de donde han sido obtenidos los precios para cada mes se muestran en la [Tabla 3.3](#).



Figura 3.7. Precio del Isopropanol desde junio hasta diciembre del año 2020.

Tabla 3.3. Datos de la [Figura 3.1](#). Continuación de la tabla en la siguiente página.

Mes	Día	Precio (\$·t ⁻¹)	Referencia
Junio	01/06/2020	1.750	https://www.echemi.com/cms/110708.html (Echemi, 2020d)
Junio	08/06/2020	1.700	
Junio	15/06/2020	1.700	
Junio	22/06/2020	1.650	
Junio	29/06/2020	1.600	
Julio	06/07/2020	1.550	https://www.echemi.com/cms/111415.html (Echemi, 2020c)
Julio	13/07/2020	1.440	
Julio	20/07/2020	1.370	
Julio	27/07/2020	1.320	
Agosto	03/08/2020	1.250	https://www.echemi.com/cms/122873.html (Echemi, 2020a)
Agosto	10/08/2020	1.220	
Agosto	17/08/2020	1.210	
Agosto	24/08/2020	1.210	
Agosto	31/08/2020	1.220	
Septiembre	07/09/2020	1.220	https://www.echemi.com/cms/122881.html (Echemi, 2020g)
Septiembre	14/09/2020	1.260	
Septiembre	21/09/2020	1.240	
Septiembre	28/09/2020	1.180	

Tabla 3.3. Continuación.

Mes	Día	Precio (\$·t ⁻¹)	Referencia
Octubre	12/10/2020	1.270	https://www.echemi.com/cms/126126.html (Echemi, 2020f)
Octubre	19/10/2020	1.220	
Octubre	26/10/2020	1.240	
Noviembre	02/11/2020	1.280	https://www.echemi.com/cms/131474.html (Echemi, 2020e)
Noviembre	09/11/2020	1.320	
Noviembre	16/11/2020	1.380	
Noviembre	23/11/2020	1.400	
Noviembre	30/11/2020	1.450	
Diciembre	07/12/2020	1.400	https://www.echemi.com/cms/135628.html (Echemi, 2020b)
Diciembre	14/12/2020	1.370	
Diciembre	21/12/2020	1.340	
Diciembre	28/12/2020	1.300	

Los precios anteriormente expuestos se corresponden con isopropanol de una elevada pureza (99,8% en masa). Sin embargo, la materia prima de este proceso únicamente tiene una pureza molar del 70% (el resto es agua), por lo que se ha decidido calcular el precio en función a este último porcentaje, suponiendo que el agua no tiene ningún coste asociado.

Bajo esta premisa y en vista de las grandes desviaciones de los resultados expuestos en la [Tabla 3.3](#), se pueden distinguir tres situaciones de mercado:

1 - Situación más favorable: Cuando el precio de la materia prima es el más bajo posible. En esta situación la corriente de materia prima de este proceso tiene un coste de 1.046 \$·t⁻¹ (se corresponde con el valor 1.180 \$·t⁻¹ de la [Tabla 3.3](#)).

2 - Situación promedio: Cuando el precio de la materia prima es el promedio de los anteriores resultados. En esta situación la corriente de materia prima tiene un coste de 1.213 \$·t⁻¹ (se corresponde con el valor promedio de los datos de la [Tabla 3.3](#), 1.369 \$·t⁻¹).

3 - Situación menos favorable: Cuando el precio de la materia prima es el más alto posible. En esta situación la corriente de materia prima tiene un coste de 1.551 \$·t⁻¹ (se corresponde con el valor 1.750 \$·t⁻¹ de la [Tabla 3.3](#)).

Estas situaciones se tendrán en cuenta en posteriores apartados.

3.3. Especificaciones de productos

En el proceso diseñado se obtiene una corriente de producto principal y dos corrientes de subproductos.

El producto principal es acetona, con una pureza másica del 99,5% y cuya principal impureza es el agua. Las especificaciones de este producto están recogidas en la

siguiente tabla (*Tabla 3.4*), mientras que las condiciones de temperatura y de presión de esta corriente se reflejan en el apartado *3.5. Límites de batería del proyecto*.

Tabla 3.4. Especificaciones del producto final acetona según la norma ASTM D329-76 (Sifniades & Levy, 2011).

Property	ASTM test	Specification
Relative density	D268	
20/20 °C		0.7905 – 0.7930
25/25 °C		0.7860 – 0.7885
Color	D1209	:5 on platinum-cobalt scale
Distillation range	D1078	1.0 °C, including 56.1 °C
Nonvolatile matter	D1353	:5 mg/100 mL
Odor	D1296	characteristic, nonresidual
Water	D1364	:0.5 wt % *
Acidity (as acetic acid)	D1613	:0.002 wt %
Water miscibility	D1722	passes test
Alkalinity (as ammonia)	D1614	:0.001 wt %
Permanganate time	D1363	:30 min at 25 °C

* This water limit ensures that the material is miscible without turbidity with 19 volumes of 99 % heptane at 20 °C (ASTM D1476).

En cuanto al precio del producto principal, se ha realizado un nuevo análisis de mercado a través de la página web www.echemi.com. En este caso el análisis abarca desde julio del año 2020 hasta enero del año 2021. Los resultados se muestran en la *Figura 3.2* y en la *Tabla 3.5*.



Figura 3.8. Precio de la acetona desde julio de 2020 hasta enero de 2021 (Echemi Technology Co., 2021).

Tabla 3.5. Datos de la Figura 3.2. Continuación de la tabla en la siguiente página.

Mes	Día	Precio (\$·t ⁻¹)
Julio	20/07/2020	1.115
Agosto	05/08/2020	834
Agosto	21/08/2020	878
Septiembre	08/09/2020	1.064

Tabla 3.5. Continuación.

Mes	Día	Precio (\$·t ⁻¹)
Septiembre	24/09/2020	1.015
Octubre	12/10/2020	1.086
Octubre	28/10/2020	1.011
Noviembre	16/11/2020	1.171
Diciembre	02/12/2020	1.401
Diciembre	18/12/2020	1.239
Enero	08/01/2021	859
Enero	11/01/2021	859
Enero	12/01/2021	878
Enero	13/01/2021	885
Enero	14/01/2021	883
Enero	15/01/2021	890
Enero	18/01/2021	913

A la vista de los resultados expuestos, se puede apreciar que hay una gran variación en cuanto al precio de la acetona, por lo que se ha decidido establecer de nuevo tres situaciones distintas:

1 - Situación más favorable: Cuando el precio de la acetona es el más alto de los expuestos en la [Tabla 3.5](#), es decir, 1.401 \$·t⁻¹.

2 - Situación promedio: Cuando el precio de la acetona es el promedio de los valores recogidos en la [Tabla 3.5](#). Este precio es de 999 \$·t⁻¹.

3 - Situación menos favorable: Cuando el precio de la acetona es el más bajo de los valores expuestos en la [Tabla 3.5](#), es decir, 834 \$·t⁻¹.

Estas situaciones se tendrán en cuenta en posteriores apartados.

Por otro lado, uno de los subproductos obtenidos en el proceso diseñado es una corriente rica en hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, “**A2-PFD-101-2**” [ANEXO IV - Planos](#)). Las especificaciones de esta corriente se muestran en la [Tabla 3.6](#).

Tabla 3.6. Especificaciones de la corriente rica en hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, “**A2-PFD-101-2**” [ANEXO IV - Planos](#)). Continuación de la tabla en la siguiente página.

Corriente	54
Temperatura (°C)	15,1
Presión (bar)	1,01
Masa molecular media	2,93
Fracciones molares	
Hidrógeno	0,9687
Propileno	0,0133
Acetona	9,95E-05
Diisopropil éter	0,0010
Isopropanol	2,45E-06
Agua	0,0169

Tabla 3.6. Continuación.

Fracciones molares	
Diacetona alcohol	5,51E-06
Nitrato de sodio	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000
Densidad (kg·m ⁻³)	0,12
Viscosidad de gas (Pa·s)	9,40E-06

En cuanto al precio de esta corriente rica en hidrógeno, se ha supuesto que el hidrógeno producido es prácticamente puro. Según la *Agencia Internacional de la Energía (PV Magazine, 2020)* un kilogramo de hidrógeno verde cuesta entre 3,50 € y 5 €, mientras que un kilogramo de hidrógeno obtenido a partir de gas natural cuesta alrededor de 1,5 €. Por lo tanto, se ha establecido un rango de precios para esta corriente, desde 1,5 €·kg⁻¹ hasta 5 €·kg⁻¹, ya que no se trata de hidrógeno verde ni de hidrógeno obtenido a partir de gas natural. Este rango de precios seleccionado para esta corriente se tendrá en cuenta en el apartado [7. Valoración económica del proyecto](#).

Finalmente, el otro subproducto que se obtiene es una corriente con un elevado contenido en agua (corriente 56 del diagrama de flujo, **“A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos**). Las especificaciones de esta corriente se muestran en la [Tabla 3.7](#).

Tabla 3.7. Especificaciones de la corriente con elevado contenido en agua (corriente 56 del diagrama de flujo, **“A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos**).

Corriente	56
Temperatura (°C)	35,0
Presión (bar)	1,01
Masa molecular media	18,12
Fracciones molares	
Hidrógeno	8,46E-19
Propileno	3,39E-18
Acetona	3,87E-05
Diisopropil éter	1,75E-12
Isopropanol	1,11E-05
Agua	0,9989
Diacetona alcohol	0,0011
Nitrato de sodio	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000
Densidad (kg·m ⁻³)	984,04
Viscosidad de líquido (Pa·s)	0,0007

3.4. Especificaciones de servicios auxiliares

Se han empleado diversos servicios auxiliares en el diseño de la planta. La mayoría de ellos han sido tomados por defecto en el software de simulación (*AspenTech, 2019*). Estos se especifican a continuación.

Electricidad (electricity)

Las especificaciones de este servicio auxiliar se muestran en la siguiente tabla (*Tabla 3.8*).

Tabla 3.8. Especificaciones del servicio auxiliar electricidad (AspenTech, 2019).

Utility type	ELECTRICITY
Specified electricity price (\$·kWh ⁻¹)	0,078
Specified CO ₂ emission factor (kg·cal ⁻¹)	2,34E-07
Specified CO ₂ energy source efficiency factor	0,58
Calculated total cost (\$·h ⁻¹)	0,058
Calculated total Electric usage (kW)	0,75
Calculated CO ₂ emission rate (kg·h ⁻¹)	0,34

Agua de refrigeración (cooling water)

En la siguiente tabla (*Tabla 3.9*) se exponen las especificaciones de este servicio auxiliar.

Tabla 3.9. Especificaciones del servicio auxiliar agua de refrigeración (AspenTech, 2019).

Utility type	COOLING WATER
Specified energy price (\$·kJ ⁻¹)	2,12E-07
Specified inlet pressure (atm)	1,00
Specified outlet pressure (atm)	1,00
Specified inlet temperature (°C)	20,0
Specified outlet temperature (°C)	25,0
Specified CO ₂ energy source efficiency factor	1
Calculated heating/cooling value (kJ·kg ⁻¹)	-20,88
Calculated inlet enthalpy (kJ·kg ⁻¹)	-15.886,67
Calculated outlet enthalpy (kJ·kg ⁻¹)	-15.865,80
Calculated total cost (\$·h ⁻¹)	3,33
Calculated total usage rate (kg·h ⁻¹)	753.412,05

Agua refrigerada (chilled water)

En este caso, se ha recurrido a *The Trane Company, (1999)* para establecer las especificaciones de este servicio auxiliar, reflejadas en la siguiente tabla (*Tabla 3.10*).

Tabla 3.10. Especificaciones del servicio auxiliar agua refrigerada (*The Trane Company, 1999*).

Utility type	CHILLED WATER
Specified energy price (\$·kWh ⁻¹)	0,05
Specified inlet pressure (atm)	1,00
Specified outlet pressure (atm)	1,00
Specified inlet temperature (°C)	5,0
Specified outlet temperature (°C)	15,0
Specified CO ₂ energy source efficiency factor	1
Calculated heating/cooling value (kJ·kg ⁻¹)	-41,88
Calculated inlet enthalpy (kJ·kg ⁻¹)	-15.949,45
Calculated outlet enthalpy (kJ·kg ⁻¹)	-15.907,56
Calculated total cost (\$·h ⁻¹)	99,60
Calculated total usage rate (kg·h ⁻¹)	171.213,21

Refrigerante (propane)

Las especificaciones de este servicio auxiliar se muestran en la siguiente tabla (*Tabla 3.11*).

Tabla 3.11. Especificaciones del servicio auxiliar refrigerante (*AspenTech, 2019*).

Utility type	PROPANE
Specified cooling value (kJ·kg ⁻¹)	-4
Specified energy price (\$·kJ ⁻¹)	2,74E-06
Specified inlet temperature (°C)	-25,0
Specified outlet temperature (°C)	-24,0
Specified CO ₂ emission factor (kg·cal ⁻¹)	2,34E-07
Specified CO ₂ energy source efficiency factor	1
Calculated total cost (\$·h ⁻¹)	1,27
Calculated total usage rate (kg·h ⁻¹)	115.432,15
Calculated CO ₂ emission rate (kg·h ⁻¹)	25,81

Vapor de baja presión (LPS, Low Pressure Steam)

En la siguiente tabla (*Tabla 3.12*) se exponen las especificaciones de este servicio auxiliar.

Tabla 3.12. Especificaciones del servicio auxiliar vapor de baja presión (*AspenTech, 2019*). Continuación de la tabla en la siguiente página.

Utility type	LPS
Specified energy price (\$·kJ ⁻¹)	1,90E-06
Specified inlet temperature (°C)	125,0
Specified outlet temperature (°C)	124,0
Specified inlet vapor fraction	1
Specified outlet vapor fraction	0
Specified CO ₂ emission factor (kg·cal ⁻¹)	2,34E-07
Specified CO ₂ energy source efficiency factor	0,85
Calculated heating/cooling value (kJ·kg ⁻¹)	2.191,88
Calculated inlet enthalpy (kJ·kg ⁻¹)	-13.258,70
Calculated outlet enthalpy (kJ·kg ⁻¹)	-15.450,57
Calculated inlet pressure (bar)	2,32

Tabla 3.12. Continuación.

Utility type	LPS
Calculated outlet pressure (bar)	2,25
Calculated total cost (\$·h ⁻¹)	30,31
Calculated total usage rate (kg·h ⁻¹)	7.277,34
Calculated CO ₂ emission rate (kg·h ⁻¹)	1.048,83

Gases de combustión (combustion gases)

Las especificaciones de este servicio auxiliar se muestran en la siguiente tabla ([Tabla 3.13](#)).

Tabla 3.13. Especificaciones del servicio auxiliar gases de combustión ([AspenTech, 2019](#)).

Utility type	COMBUSTION GASES
Specified cooling value (kJ·kg ⁻¹)	600
Specified energy price (\$·kJ ⁻¹)	4,25E-06
Specified inlet temperature (°C)	1.000,0
Specified outlet temperature (°C)	600,0
Specified CO ₂ emission factor (kg·cal ⁻¹)	2,34E-07
Specified CO ₂ energy source efficiency factor	0,85
Calculated total cost (\$·h ⁻¹)	49,57
Calculated total usage rate (kg·h ⁻¹)	19.440,67
Calculated CO ₂ emission rate (kg·h ⁻¹)	766,97

Sal fundida (molten salt)

En cuanto a este servicio auxiliar, se ha escogido una sal fundida ([Sanz & Thomkins, 1981](#)) compuesta por una mezcla eutéctica de NaNO₂ (48,9% masa), NaNO₃ (6,9% masa) y KNO₃ (44,2% masa). En el apartado [6.5.2. Fluido térmico de intercambio de calor](#) se hace referencia a este servicio auxiliar, ya que forma parte del proceso de simulación y optimización de la planta. Las especificaciones de la sal fundida se muestran en la siguiente tabla ([Tabla 3.14](#)).

Tabla 3.14. Especificaciones del servicio auxiliar sal fundida (corrientes 15 y 17 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Corriente	15	17
Temperatura (°C)	443,3	525,0
Presión (bar)	3,00	3,00
Masa molecular media	81,49	81,49
Entalpía másica (kJ·kg ⁻¹)	1.024,58	1.199,15
Densidad (kg·m ⁻³)	287,21	275,41
Viscosidad de líquido (Pa·s)	0,0015	0,0011

3.5. Límites de batería del proyecto

Se han establecido cinco límites de batería en la planta. Las condiciones de presión y temperatura de cada uno de ellos se exponen a continuación (*Tabla 3.15*).

Tabla 3.15. Condiciones de los límites de batería de la planta (ver diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Límite de batería	Nombre	Corriente	T (°C)	P (bar)
1	L.B.1	10	25,0	1,01
2	L.B.2	54	15,1	1,01
3	L.B.3	46	30,0	1,01
4	L.B.4	56	35,0	1,01
5	L.B.5	Purga	77,9	1,01

3.6. Localización de la planta

El lugar donde estaría ubicada la planta es en el entorno de la bahía de Algeciras. Las coordenadas de la ubicación son: 36°10'10.4"N 5°26'13.4"W (*Figura 3.3*).

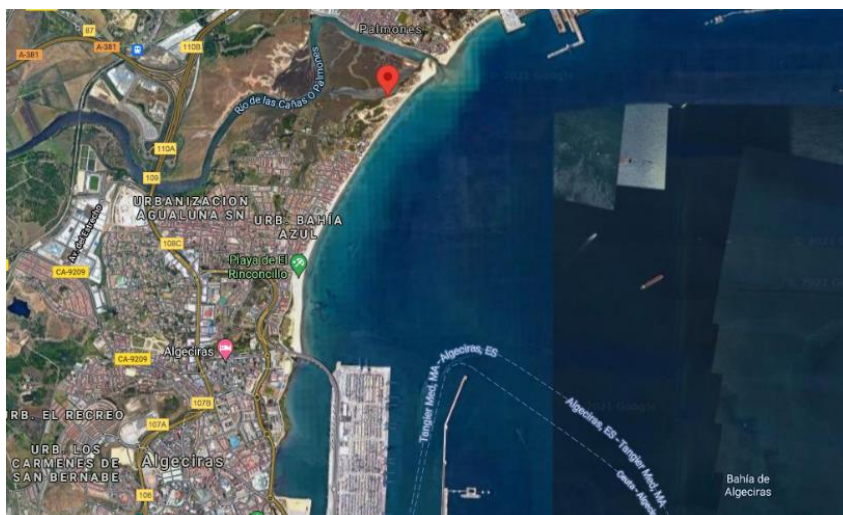


Figura 3.9. Localización de la planta (vista principal).

Se ha decidido situar la planta en esta ubicación debido a que tiene una conexión directa a través del mar con el continente europeo, africano y americano. Además, también tiene conexión vía terrestre con Europa (*Figura 3.4*).

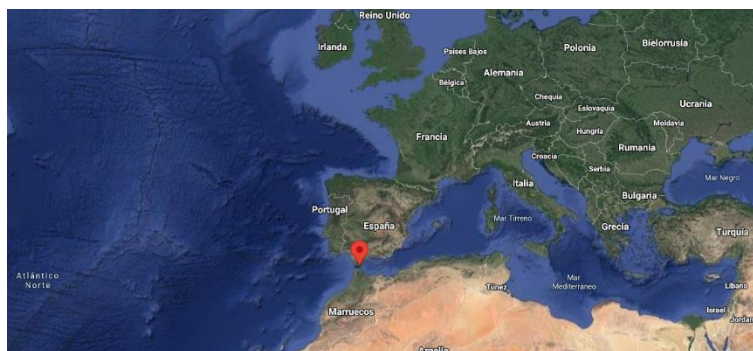


Figura 3.10. Localización de la planta (vista global).

Este punto estratégico de la localización de la planta facilitaría indudablemente las exportaciones de productos y las importaciones de materias primas, ya que existe un amplio abanico de posibilidades tanto por vía marítima como por vía terrestre.

Además, la planta estaría situada cerca de otras grandes factorías (Figura 3.5) como la central de *Acerinox Palomares*, la central de *CEPSA* de Puente Mayorga, la central térmica *Los Barrios* o la refinería de *CEPSA* de San Roque, que podrían ser claves en la adquisición de isopropanol o de otros servicios auxiliares. También se podría vender el hidrógeno obtenido como subproducto directamente a estas compañías sin necesidad de transportarlo, lo cual sería una gran ventaja ya que el transporte de H_2 es complicado.



Figura 3.11. Localización de la planta (factorías cercanas).

3.7. Códigos de diseño a utilizar

Dentro de la gran multitud de códigos tanto a nivel nacional como a nivel internacional se recogen a continuación los que principalmente han sido empleados en el presente trabajo.

-**Código ASME (American Society of Mechanical Engineers)**: Dentro de este código se ha empleado la sección VIII, división 1 para el diseño de los equipos del proceso.

-**Código TEMA (Tubular Exchanger Manufacturers Association)**.

-**Norma BS 3606**: Dimensiones estandarizadas de tubos de acero.

-**Norma ASTM (American Society for Testing Materials)**.

-**UNE (Una Norma Española) / ISO (International Organization for Standardization)**:

-**UNE-EN 14015**: Tanques de acero para almacenamiento de líquidos.

-**UNE-EN 13445-3**: Recipientes a presión no sometidos a llama.

-**UNE-EN ISO 10628**: Diagrama de flujo de plantas de proceso.

-**UNE-EN ISO 2858**: Bombas centrífugas de aspiración axial (con presión nominal < 16 bar).

3.8. Tiempo de vida de la planta

Se han seleccionado 25 años como tiempo de vida de la planta.

3.9. Horas de operación

La planta estará operativa 24 horas al día, divididas en tres turnos de 8 horas cada uno. Los días laborales del año serán 335 días, por lo que el total de horas que funcionará la planta son 8.040 horas al año. Los 30 días restantes estarán destinados a funciones de mantenimiento, reparaciones, modificaciones e implementación de nuevos sistemas.

4. Descripción del proceso

4.1. Diagrama de bloques

El diagrama de bloques del proceso se encuentra en el [ANEXO IV – Planos](#) y está nombrado como “**A3-BD-101-1**”. En él se muestran los requerimientos totales de calefacción y de refrigeración de la planta, además de un balance de materia global.

4.2. Diagrama de flujo

El diagrama de flujo del proceso se encuentra en el [ANEXO IV – Planos](#) y está nombrado como “**A2-PFD-101-2**”.

4.3. Descripción detallada

En este apartado se recomienda tener presente el diagrama de flujo del proceso (“**A2-PFD-101-2**” [ANEXO IV – Planos](#)) debido al gran número de corrientes y de equipos que van a ser mencionados, y el diagrama de bloques del proceso (“**A3-BD-101-1**” [ANEXO IV – Planos](#)) para tener una perspectiva general de las secciones de la planta. De todos modos, se harán referencias a los mismos en algunos puntos de la descripción detallada del proceso. Las propiedades, flujos y composiciones de todas las corrientes del proceso se muestran en la tabla de corrientes en el [ANEXO V – Tabla de corrientes](#).

4.3.1. Acondicionamiento de reactivos

La mezcla azeotrópica isopropanol-agua con una fracción molar de isopropanol del 70% (corriente 10 del diagrama de flujo, “**A2-PFD-101-2**” [ANEXO IV – Planos](#)) y un flujo molar de $83,94 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ es introducida al proceso desde el límite de batería 1 (L.B.1), con una temperatura de 25°C y una presión de 1,01 bar. Esta es mezclada en el depósito horizontal V-101 con $2,31 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ de recirculación de reactivos (corriente 11), proveniente de las colas de la última etapa de destilación que tiene una fracción molar de isopropanol del 16,1% y del 81,4% en agua a una temperatura de $77,9^\circ\text{C}$ y una presión de 1,01 bar. La suma de estas dos corrientes da lugar a la corriente 12 (corriente líquida) con una fracción molar de isopropanol del 68,6% y del 31,4% en agua a una temperatura de 26°C y una presión de 1,01 bar, que se corresponde con la alimentación al reactor R-201 A/B.

Previa a la entrada a la sección de reacción, esta última corriente es primero impulsada por la bomba centrífuga P-101 A/B hasta conseguir una presión de 2,7 bar y a continuación calentada a través del cambiador de calor E-101 para llevarla a estado gaseoso y alcanzar una temperatura de 360°C . Estos dos últimos equipos constituyen la sección de acondicionamiento de reactivos (diagrama de bloques, “**A3-BD-101-1**” [ANEXO IV – Planos](#)) en la que la corriente de entrada al

reactor recibe 0,75 kW de potencia eléctrica (bomba P-101 A/B) y 1.860 kW de calor (cambiador E-101) transferidos mediante los gases de combustión del horno H-101.

4.3.2. Síntesis de acetona

El resultado de esta primera sección del proceso es la corriente 14, ya acondicionada, que es introducida en el reactor de lecho catalítico fijo R-201 A/B, constituido por 400 tubos de 12 ft de longitud. En este equipo se produce la síntesis de acetona por medio de la deshidrogenación de isopropanol ([Ecuación 1.1](#)), con un calor molar de reacción de +62.900 kJ·kmol⁻¹ (endotérmica).

Este calor molar de reacción es aportado por medio de 349,12 kmol·h⁻¹ de sal fundida, que es introducida en contracorriente a una temperatura de 525 °C y a una presión de 3 bar (corriente 17 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) y que abandona el sistema de reacción intercambiando 1.380 kW con la mezcla reaccionante, con una temperatura de 443,3 °C (corriente 15). La sal fundida, tras su paso por el reactor, es llevada primero al cambiador E-201 donde recibe 1.380 kW de calor proveniente de los gases de combustión del horno H-101 para alcanzar de nuevo los 525 °C de temperatura (corriente 16). Finalmente, la sal fundida es retornada al reactor por medio de la bomba P-201 A/B, a una presión de 3 bar (corriente 17).

Al mismo tiempo, la corriente gaseosa de reactivos (corriente 14) atraviesa el lecho catalítico (catalizador compuesto por un 6% en masa de Cu, 3,6% de Zn y 0,7% de Cr en un soporte de α -Al₂O₃, apartado [1.3.2. Catalizador](#)) donde se produce la transformación de isopropanol para obtener acetona mediante la reacción principal ([Ecuación 1.1](#)) y otros compuestos (alcohol de diacetona, propileno y diisopropil éter) mediante reacciones secundarias competitivas ([Ecuación 1.4](#), [Ecuación 1.5](#) y [Ecuación 1.6](#)).

El resultado es una selectividad del 98,2% en pro de la reacción principal, con una conversión de isopropanol por paso del 99,36%. La corriente que abandona el reactor (corriente 18 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) tiene un flujo molar de 144,77 kmol·h⁻¹ y está formada principalmente por acetona (57,75 kmol·h⁻¹), hidrógeno (57,74 kmol·h⁻¹) y agua (27,96 kmol·h⁻¹), con una temperatura de 496,5 °C y una presión de 1,20 bar.

4.3.3. Condensación y separación líquido-vapor

Con el objetivo de separar los compuestos volátiles de la corriente de salida del reactor (hidrógeno y propileno), esta última corriente es introducida en la sección de condensación y separación líquido-vapor (diagrama de bloques, “[A3-BD-101-1](#)” [ANEXO IV - Planos](#)).

En primer lugar, en el condensador parcial E-301 se transfieren 1.992 kW de calor al servicio auxiliar de agua de refrigeración, disminuyendo la temperatura de la

corriente de proceso hasta los 22 °C. Como resultado se obtiene la corriente 19, con una fracción molar de vapor del 50,32%.

A continuación, esta última es llevada al depósito vertical V-301, donde se escinde en dos corrientes: una corriente gaseosa rica en volátiles (corriente 20) y una corriente líquida formada principalmente por acetona (62,02% en mol) y agua (37,38% en mol).

4.3.4. Absorción de acetona

Por un lado, la corriente 20 además de contener compuestos volátiles (79,25% en mol de hidrógeno y 1,1% en mol de propileno) también lleva consigo una fracción importante de acetona (18,04% en mol) por lo que es llevada al absorbedor C-301 con el objetivo de recuperar este último.

El absorbedor está compuesto por 13 platos (9 etapas de equilibrio) y opera de forma adiabática sin condensador ni ebullición, a una presión de 1,01 bar en la parte superior de la torre. Como disolvente se emplea agua a una temperatura de 15 °C y una presión de 1,5 bar (corriente 51 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) que es introducido por la parte superior de la columna de absorción.

Como resultado de esta operación unitaria, se consigue recuperar el 99,99% del flujo molar de acetona que es introducido a este equipo en la corriente 23, que abandona el absorbedor por la parte inferior de la columna con una temperatura de 39,8 °C y que es impulsada por medio de la bomba centrífuga P-301 A/B a la columna de destilación C-302 (corriente 24). Por la parte superior del absorbedor C-301 se obtiene una corriente gaseosa rica en hidrógeno (96,87% en mol, corriente 52).

4.3.5. Primera etapa de destilación

Por otro lado, la corriente líquida procedente del separador líquido-vapor V-301 (corriente 21) es impulsada a través de la bomba centrífuga P-302 A/B a la torre de destilación C-302 (corriente 22).

Esta última corriente (corriente 22) y la corriente 24 representan la entrada a la primera etapa de destilación del proceso (diagrama de bloques, “[A3-BD-101-1](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) en la que se sigue una secuencia indirecta.

Esta primera etapa está constituida por la columna de destilación C-302, que está compuesta por 13 platos (11 etapas de equilibrio) y que opera con un condensador parcial E-302 para eliminar volátiles y un ebullición de tipo Kettle E-303. La corriente 22 es introducida en el plato número 10 de la columna C-302 mientras que la corriente 24 se introduce en el plato número 11.

Por un lado, el condensador de la torre opera a una presión de 1,01 bar y transfiere 1.658 kW de la corriente vapor que abandona la columna por la parte superior

(corriente 25) a $56,5^{\circ}\text{C}$ mediante agua de refrigeración como servicio auxiliar. La salida del condensador (corriente 26) tiene una fracción molar de vapor del 0,0056% con una temperatura de 30°C y es introducida al depósito horizontal V-302, donde se escinde en dos corrientes: una corriente gaseosa rica en volátiles (corriente 35) que se junta con la corriente 52 proveniente del absorbedor C-301 para dar la corriente 53 y una corriente líquida (corriente 27) que a través de la bomba P-303 A/B es retornada a la columna mediante una relación molar de reflujo de 1,93.

Por otro lado, el ebullidor de la torre (equipo E-303) transfiere 2.186 kW por medio de vapor de baja presión como servicio auxiliar a la corriente líquida que abandona la columna por la parte inferior (corriente 30) a una temperatura de $98,7^{\circ}\text{C}$. La salida del ebullidor está compuesta por dos corrientes: una corriente gaseosa a una temperatura de $99,9^{\circ}\text{C}$ (corriente 31) que es retornada a la torre por la parte inferior (36,42% del flujo molar de la corriente 30) y una corriente líquida a una temperatura de $99,9^{\circ}\text{C}$ (corriente 32) que abandona la primera etapa de destilación por medio de la bomba centrífuga P-304 A/B dando lugar a la corriente 33.

Globalmente, en la columna C-302 se consigue recuperar por la corriente 33 el 99,25% del flujo molar de agua proveniente de las corrientes de alimentación (corriente 24 y corriente 22 del diagrama de flujo, "[A2-PFD-101-2](#)" [ANEXO IV – Planos](#)) con una pureza molar de agua del 99,89%. Esta corriente es llevada al refrigerador E-304 donde se transfieren 468 kW al agua de refrigeración que es empleado como servicio auxiliar de este equipo. Como resultado se obtiene la corriente 34, con una temperatura de 35°C , que es introducida posteriormente al depósito horizontal V-304.

En este depósito, la corriente 34 se escinde en otras dos corrientes. Por un lado, el 7,3% del flujo molar de la corriente 34 (que se corresponde con la corriente 55), es impulsado a través de la bomba P-307 A/B para abandonar el proceso por el límite de batería 4 (L.B.4, corriente 56). Por otro lado, el flujo molar restante (que se corresponde con la corriente 47) es recirculado a través de la bomba P-308 A/B hacia el depósito horizontal V-102. Este depósito da como resultado la corriente 49, que mediante 0,23 kW de potencia eléctrica proporcionados por la bomba centrífuga P-102 A/B, alcanza una presión de 1,5 bar (corriente 50). Finalmente, esta última corriente transfiere 128 kW al refrigerante empleado como servicio auxiliar en el refrigerador E-102 para conseguir la temperatura de entrada de disolvente al absorbedor C-301 (15°C).

4.3.6. Segunda etapa de destilación

El destilado líquido de la columna C-302 (corriente 36) tiene un flujo molar de $60,71\text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ con una fracción del 95,11% en mol de acetona, a una temperatura de 30°C y una presión de 1,01 bar. Esta corriente supone el punto de partida de la segunda etapa de destilación del proceso (diagrama de bloques, "[A3-BD-101-1](#)" [ANEXO IV – Planos](#)).

Esta segunda etapa está constituida por la columna de destilación C-303, que está compuesta por 38 platos (28 etapas de equilibrio) y que opera con un condensador parcial E-305 para eliminar volátiles y un ebullición de tipo Kettle E-306. La corriente 36 es introducida en el plato número 27 de la columna C-303.

Por un lado, el condensador de la torre opera a una presión de 1,01 bar y transfiere 2.243 kW de la corriente vapor que abandona la columna por la parte superior (corriente 37) a 56,1°C mediante agua de refrigeración como servicio auxiliar. La salida del condensador (corriente 38) tiene una fracción molar de vapor del 0,00038% con una temperatura de 30°C y es introducida al depósito horizontal V-303, donde se escinde en dos corrientes: una corriente gaseosa rica en volátiles (corriente 45) que se junta con la corriente 53 dando lugar a la corriente 54, que abandona el proceso por el límite de batería 2 (L.B.2, corriente 56) con una temperatura de 15,1°C y una presión de 1,01 bar; y una corriente líquida (corriente 39) que a través de la bomba P-305 A/B es retornada a la columna mediante una relación molar de reflujo de 3,18.

Por otro lado, el ebullición de la torre (equipo E-306) transfiere 2.245 kW por medio de vapor de baja presión como servicio auxiliar a la corriente líquida que abandona la columna por la parte inferior (corriente 42) a una temperatura de 68,1°C. La salida del ebullición está compuesta por dos corrientes: una corriente gaseosa a una temperatura de 77,9°C (corriente 43) que es retornada a la torre por la parte inferior (98,87% del flujo molar de la corriente 42) y una corriente líquida a una temperatura de 77,9°C (corriente 44) que es recirculada a través de la bomba P-306 A/B hacia el depósito V-101 para mezclarse con la alimentación fresca del proceso (corriente 10). En esta corriente de recirculación de reactivos (corriente 11) se retira una pequeña corriente de purga por el límite de batería 5 (L.B.5).

Como resultado final de la columna C-303 y del proceso, se obtiene un flujo molar de destilado líquido de 58,4 kmol·h⁻¹ (corriente 46), que supone la recuperación del 99,9% del flujo molar de acetona alimentado a la columna (corriente 36). Este flujo molar se traduce en una capacidad de producción de 27.071 toneladas anuales de producto final con una pureza en masa del 99,5% en acetona, que abandona el proceso por el límite de batería 3 (L.B.3), con una temperatura de 30°C y una presión de 1,01 bar.

5. Equipos de proceso

5.1. Lista de equipos

La lista de los equipos del proceso se muestra en el [ANEXO VI – Equipos](#) con el título “**ANEXO VI – Equipos – Lista de equipos**”.

5.2. Hojas de especificaciones

Las hojas de especificaciones de los equipos del proceso están recogidas en el [ANEXO VI – Equipos](#). En el título de cada hoja se especifica el equipo al que corresponde, de tal manera: “**ANEXO VI – Equipos – Hoja de especificación XXX**”, donde “**XXX**” es el equipo especificado.

6. Simulación y optimización del proceso

El proceso ha sido implementado en el software de simulación de procesos *Aspen Plus Versión 11* (AspenTech, 2019). Dentro de este simulador, se han empleado las extensiones “*NIST ThermoData Engine Versión 10.2*” como base de datos experimentales del equilibrio entre compuestos y “*Aspen Process Economic Analyzer*” para la optimización económica de equipos y de la planta. Se adjunta en este documento el fichero resultante de la simulación, nombrado como “*Acetone_Dehydrogenation_Isopropanol_rev152.apwz*”.

Además, puede consultarse el [ANEXO VII – Informe de la simulación](#) para más información,

6.1. Compuestos y propiedades

En primer lugar, se han introducido en el simulador todos los compuestos presentes en el proceso y se han asignado como compuestos de Henry al hidrógeno y al propileno por ser compuestos volátiles. El equilibrio de estos dos últimos ha sido calculado mediante la Ley de Henry y no por el modelo de propiedades del resto de sustancias del sistema.

6.1.1. Selección del modelo de propiedades

El siguiente paso ha sido escoger el modelo de propiedades más adecuado para el rango de operación del proceso y las características de los compuestos empleados en la simulación. Para ello, se ha hecho uso de los siguientes diagramas ([Figura 6.1](#) y [Figura 6.2](#)) para la elección del modelo.

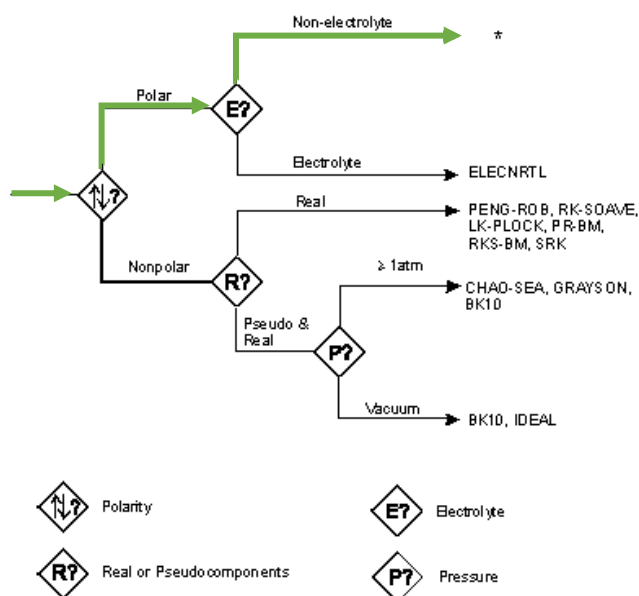


Figura 6.12. Diagrama de elección del modelo de propiedades (AspenTech, 2019).

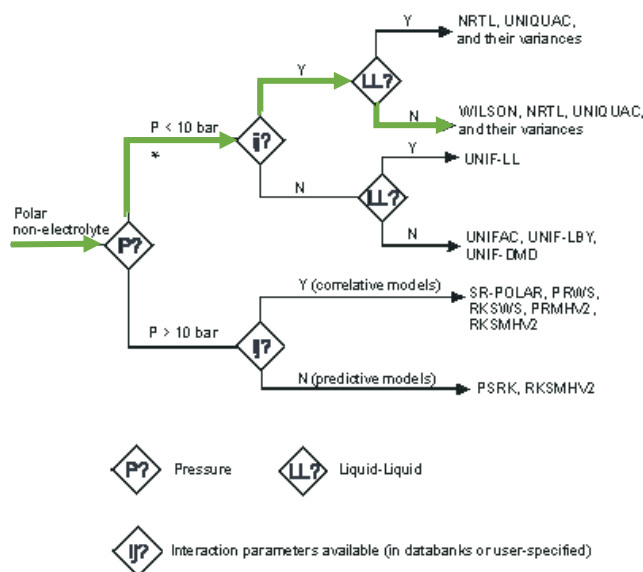


Figura 6.13. Diagrama de elección de modelo de propiedades para sistemas polares sin electrolitos (AspenTech, 2019).

Atendiendo a los anteriores diagramas, se ha decidido tener en cuenta los modelos de propiedades de WILSON, NRTL y UNIQUAC, ya que el sistema de compuestos del proceso es polar, sin electrolitos, se opera a presiones inferiores a 10 bar y no se espera la presencia de zonas con miscibilidad parcial líquido-líquido.

En los siguientes apartados, se observarán los resultados de la interacción binaria entre compuestos mediante representaciones del equilibrio líquido-vapor y se compararán con resultados experimentales a través de la base de datos “NIST Thermodata Engine Versión 10.2” (AspenTech, 2019) para la validación de cada uno de los modelos previamente seleccionados.

6.1.2. Modelo de propiedades UNIQUAC

En primer lugar, se ha seleccionado el modelo de propiedades UNIQUAC y se ha cambiado la ecuación de estado de gas ideal establecida por defecto en el software de simulación por la ecuación de estado de Redlich-Kwong.

A continuación, se ha estudiado el equilibrio binario líquido-vapor mediante este modelo de propiedades para la terna: acetona, isopropanol y agua. Además, se han comparado los resultados del estudio con resultados experimentales proporcionados por “NIST Thermodata Engine Versión 10.2” (AspenTech, 2019).

Los diagramas T-xy para las duplas acetona-isopropanol (Figura 6.3), acetona-agua (Figura 6.4) e isopropanol-agua (Figura 6.5) son los que siguen.

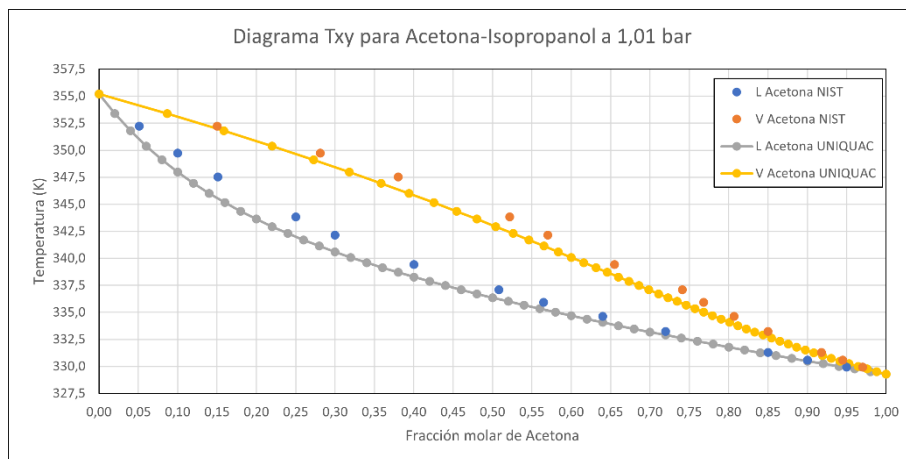


Figura 6.14. Diagrama T-xy para Acetona-Isopropanol a 1,01 bar calculado por UNIQUAC- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Verhoeve & De Schepper, 1973).

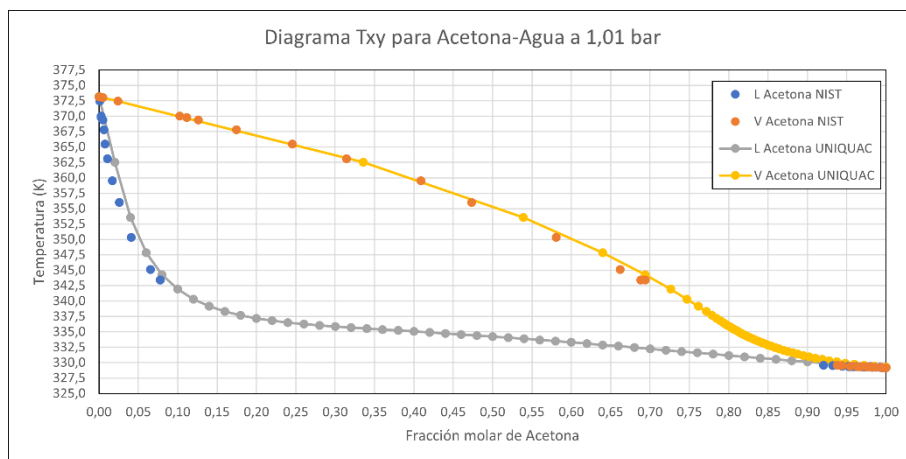


Figura 6.15. Diagrama T-xy para Acetona-Agua a 1,01 bar calculado por UNIQUAC- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Polednová & Wichterle, 1984).

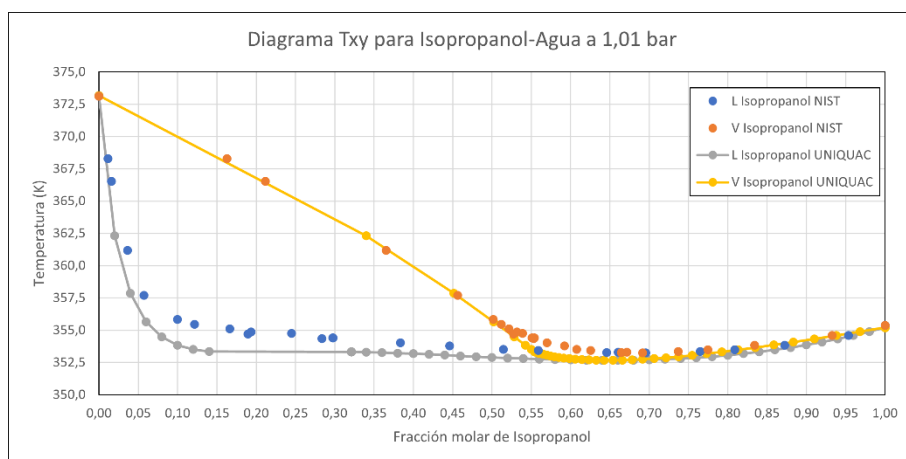


Figura 6.16. Diagrama T-xy para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado por UNIQUAC- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Wilson & Simons, 1952).

Como se puede apreciar en las anteriores figuras, el equilibrio calculado mediante el modelo de propiedades UNIQUAC se ajusta considerablemente bien a los datos experimentales para el caso de las mezclas acetona-isopropanol (Figura 6.3) y acetona-agua (Figura 6.4).

Sin embargo, para la dupla isopropanol-agua (Figura 6.5) los resultados no son favorables. Aparece una zona de miscibilidad parcial líquido-líquido que no reflejan los datos experimentales. Debido a esto, se ha considerado descartar el empleo de UNIQUAC como modelo de propiedades del sistema.

6.1.3. Modelo de propiedades NRTL

A continuación, se ha seleccionado el modelo de propiedades NRTL, para el cual se ha empleado la ecuación de estado de *Redlich-Kwong* en lugar de la ecuación de estado de gas ideal impuesta por defecto en el simulador.

Del mismo modo, se ha estudiado el equilibrio líquido-vapor entre los mismos compuestos (acetona, isopropanol y agua) y se han comparado los resultados obtenidos con los datos experimentales proporcionados por “*NIST Thermodata Engine Versión 10.2*” (AspenTech, 2019).

Los diagramas T-xy para las duplas acetona-isopropanol (Figura 6.6), acetona-agua (Figura 6.7) e isopropanol-agua (Figura 6.8 y Figura 6.9) son los mostrados a continuación.

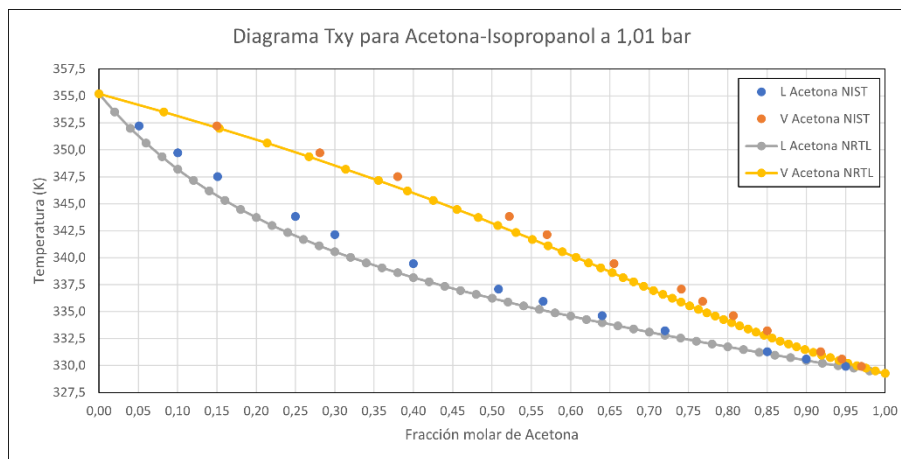


Figura 6.17. Diagrama T-xy para Acetona-Isopropanol a 1,01 bar calculado por NRTL- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales “*NIST Thermodata Engine Versión 10.2*” (Verhoeye & De Schepper, 1973).

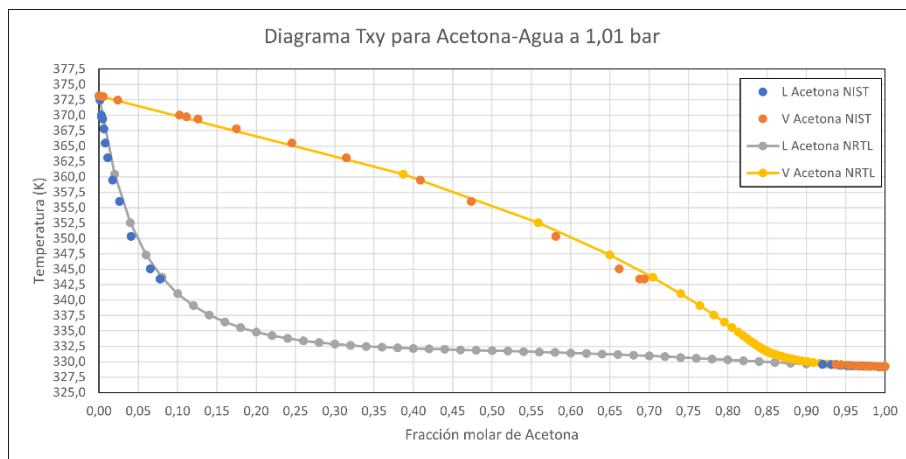


Figura 6.18. Diagrama T-xy para Acetona-Agua a 1,01 bar calculado por NRTL- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Polednová & Wichterle, 1984).

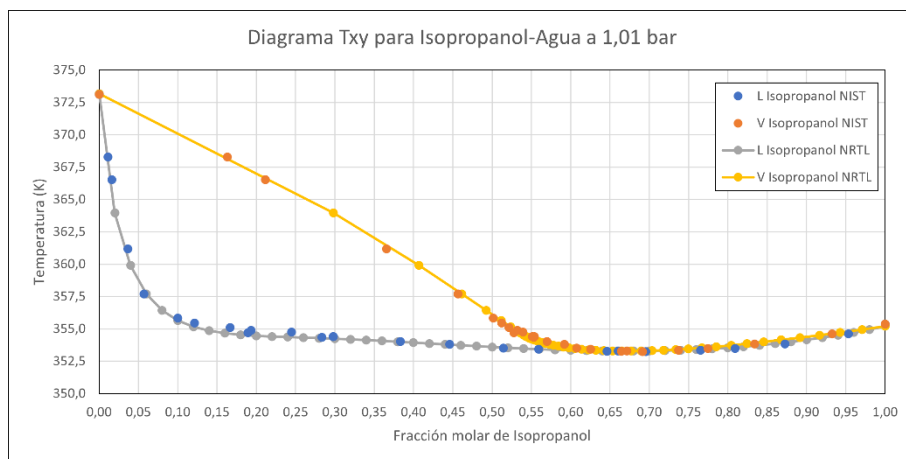


Figura 6.19. Diagrama Txy para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado por NRTL- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Wilson & Simons, 1952).

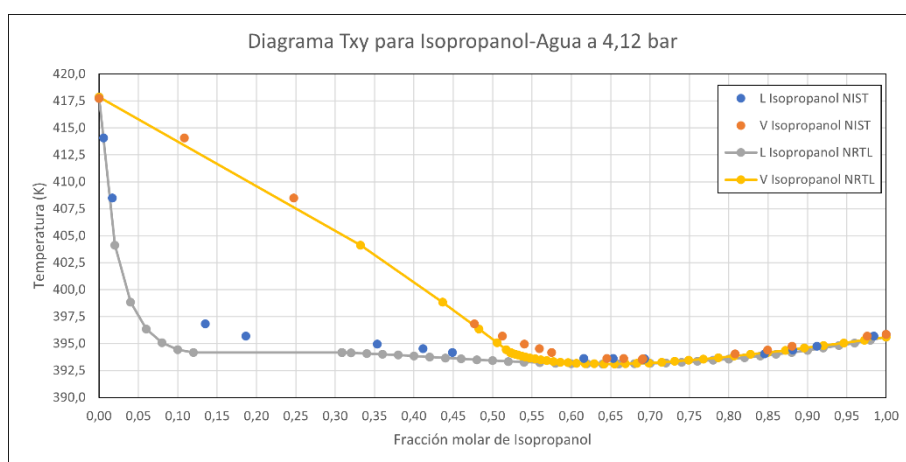


Figura 6.20. Diagrama T-xy para Isopropanol-Agua a 4,12 bar calculado por NRTL- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Wilson & Simons, 1952).

Poniendo el foco en los resultados obtenidos para una presión de 1,01 bar, se podría concluir con que el equilibrio líquido-vapor para las mezclas acetona-isopropanol (*Figura 6.6*), acetona-agua (*Figura 6.7*) e isopropanol-agua (*Figura 6.8*) está considerablemente bien reproducido a través del modelo de propiedades NRTL.

Sin embargo, atendiendo al equilibrio a una presión más elevada (dentro del rango de operación del proceso) de 4,12 bar entre el isopropanol y el agua (*Figura 6.9*) se puede observar que los resultados nuevamente muestran una zona de miscibilidad parcial líquido-líquido que no reflejan los datos experimentales. Debido a esto, el modelo de propiedades NRTL también ha sido descartado.

6.1.4. Modelo de propiedades WILSON

Finalmente, se ha realizado el mismo estudio del equilibrio líquido-vapor que en los anteriores casos para el modelo de propiedades WILSON. De nuevo se ha optado por el empleo de la ecuación de estado de *Redlich-Kwong* en lugar de la ecuación de estado de gas ideal impuesta por defecto en el simulador.

Los diagramas T-xy para las mezclas acetona-isopropanol (*Figura 6.10*), acetona-agua (*Figura 6.11*) e isopropanol-agua (*Figura 6.12* y *Figura 6.13*) son los siguientes.

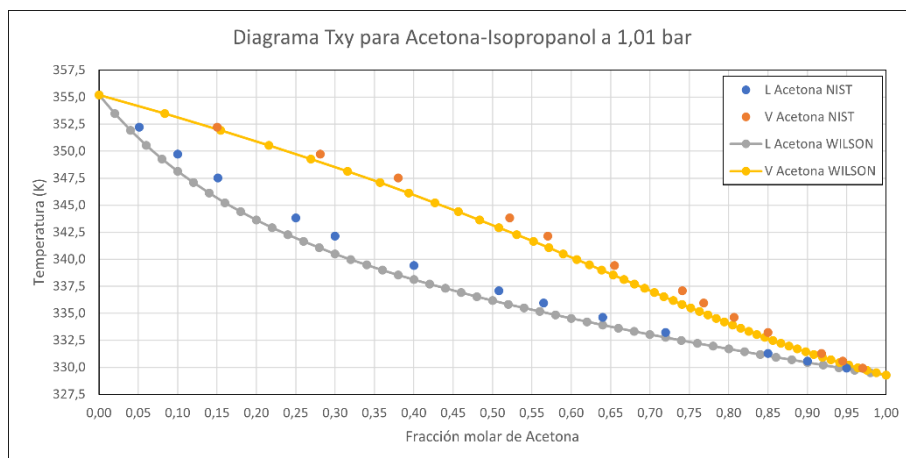


Figura 6.21. Diagrama T-xy para Acetona-Isopropanol a 1,01 bar calculado por WILSON- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Verhoeve & De Schepper, 1973).

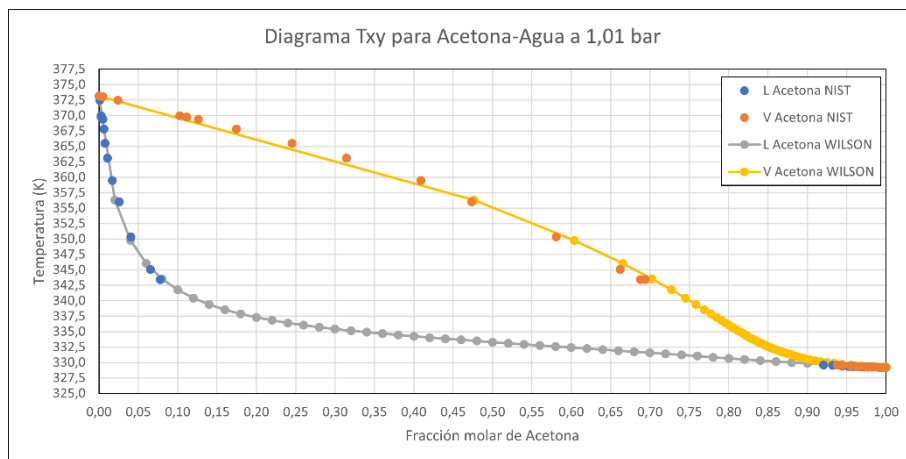


Figura 6.22. Diagrama T-xy para Acetona-Agua a 1,01 bar calculado por WILSON- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Polednová & Wichterle, 1984).

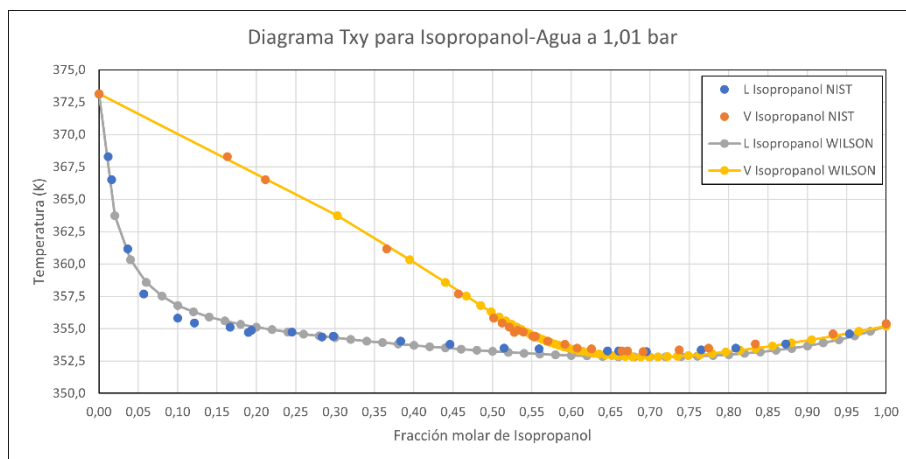


Figura 6.23. Diagrama Txy para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado por WILSON- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Wilson & Simons, 1952).

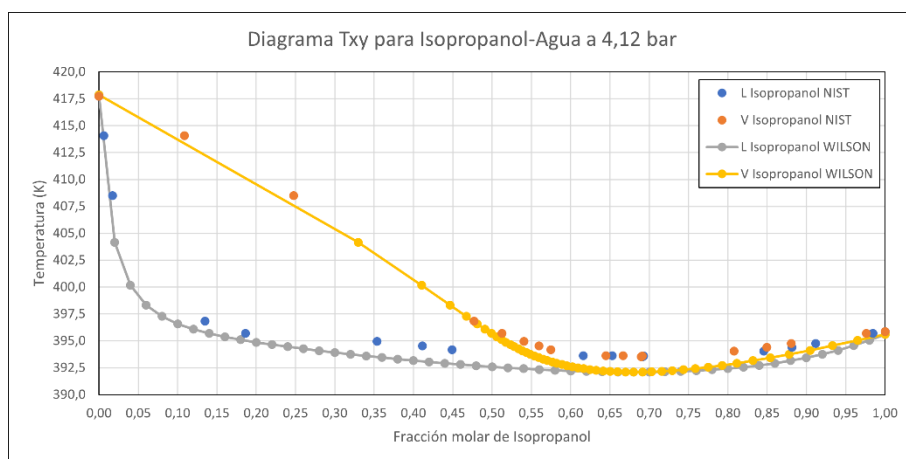


Figura 6.24. Diagrama T-xy para Isopropanol-Agua a 4,12 bar calculado por WILSON- Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del "NIST Thermodata Engine Versión 10.2" (Wilson & Simons, 1952).

A la vista de los resultados obtenidos, se puede observar que, a una presión constante de 1,01 bar, el equilibrio líquido-vapor calculado mediante el modelo de propiedades WILSON está correctamente reproducido para las mezclas acetona-isopropanol (Figura 6.10), acetona-agua (Figura 6.11) e isopropanol-agua (Figura 6.12).

Además, en el diagrama T-xy para la mezcla isopropanol-agua a 4,12 bar (Figura 6.13) no aparece ninguna zona de miscibilidad parcial líquido-líquido, al contrario que en el estudio del modelo de propiedades NRTL (Figura 6.9).

Esto se corresponde con los datos experimentales, por lo que se ha seleccionado el modelo de propiedades WILSON para el proceso, empleando para el cálculo de la fase vapor la ecuación de estado de Redlich-Kwong.

6.2. Alimentación

Tal y como se introdujo en las bases de diseño del proceso (apartado 3.2. Especificaciones de materias primas), según varias referencias bibliográficas consultadas sobre el proceso (Turton et al., 2003; Luyben, 2011; Sifniades & Levy, 2011) la alimentación está compuesta por la mezcla azeotrópica a presión atmosférica de isopropanol y agua (67% en mol de isopropanol).

Sin embargo, a partir del análisis del equilibrio isopropanol-agua realizado con el modelo de propiedades WILSON (Figura 6.14) se ha seleccionado una mezcla azeotrópica de alimentación de 70% en mol de isopropanol y 30% en mol de agua.

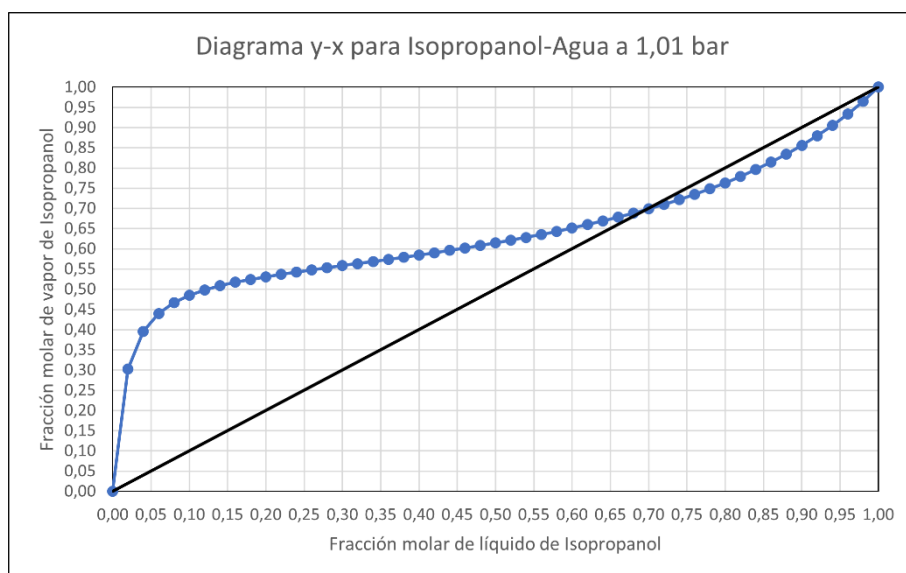


Figura 6.25. Diagrama y-x para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado a partir del modelo de propiedades WILSON (AspenTech, 2019).

A partir de la capacidad de producción de 27.000 toneladas anuales de acetona justificada en el apartado 3.1. Capacidad de producción, de la masa molecular de la

acetona y de las horas anuales que opera la planta (8.040 h, apartado [3.9. Horas de operación](#)) se ha calculado la capacidad de producción molar de acetona requerida ([Ecuación 6.1](#)).

$$PROD_{m,ACETONA} = \frac{PROD_{w,ACETONA}}{MM_{ACETONA} \cdot t_{h,a}} \quad (\text{Ecuación 6.1})$$

Donde $PROD_{m,ACETONA}$ representa la capacidad de producción de acetona expresada en $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$, $PROD_{w,ACETONA}$ representa la capacidad de producción de acetona en $\text{kg}\cdot\text{año}^{-1}$, $MM_{ACETONA}$ representa la masa molecular de acetona expresada en $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$ y $t_{h,a}$ representa las horas anuales de operación de la planta expresada en $\text{h}\cdot\text{año}^{-1}$.

El resultado ha sido una capacidad molar de producción de acetona de $57,82 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$. Teniendo en cuenta la estequiometría de la reacción 1:1 entre la acetona y el isopropanol ([Ecuación 1.1](#)) y asumiendo una conversión global de isopropanol del 95%, se requiere un flujo molar estimado de alimentación de $86,94 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ de la mezcla azeotrópica.

La temperatura y la presión de la alimentación son 25°C y $1,01 \text{ bar}$, tal y como se mostró en el apartado [3.5. Límites de batería del proyecto](#).

6.3. Análisis mediante Integración de Procesos

El siguiente paso ha sido el análisis de las variables de operación de la sección de reacción mediante Integración de Procesos. Debido a la imposición de una distribución de selectividades para las reacciones secundarias que tienen lugar en el reactor (apartado [1.3.3. Cinética](#)), únicamente se ha tenido en cuenta en el análisis las cinéticas de la reacción principal directa ([Ecuación 1.7](#)) e inversa ([Ecuación 1.8](#)) ([Luyben, 2011](#)).

$$r_D = 22 \cdot 10^6 \cdot \exp\left[\frac{-EA_D}{R \cdot T}\right] \cdot C_{IPA} \quad (\text{Ecuación 1.7})$$

$$r_I = 10^3 \cdot \exp\left[\frac{-EA_I}{R \cdot T}\right] \cdot C_{ACETONA} \cdot C_{H_2} \quad (\text{Ecuación 1.8})$$

Objetivo de la sección de reacción

El producto que se desea maximizar es la acetona. Este compuesto es un producto de la reacción directa (deshidrogenación de isopropanol) y un reactivo de la reacción inversa (hidrogenación de acetona). Por lo que, el objetivo principal es favorecer en la medida de lo posible la cinética de la reacción directa, es decir, maximizar la conversión de isopropanol.

Modelo de flujo

Para maximizar la conversión de isopropanol es necesario, en primer lugar, favorecer la reacción directa. Atendiendo a la cinética ([Ecuación 1.7](#)), interesa que la concentración de isopropanol disminuya progresivamente a lo largo de la reacción. Esto se corresponde con un modelo de flujo pistón ([Figura 6.15](#)). Si la concentración de isopropanol disminuyera bruscamente (flujo de mezcla perfecta, [Figura 6.16](#)) se minimizaría el efecto de la reacción directa.

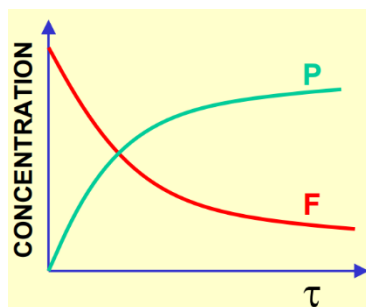


Figura 6.26. Modelo de flujo pistón. Concentración de productos (P) y reactivos (F) en función del tiempo de residencia (τ) ([Mato, 2019](#)).

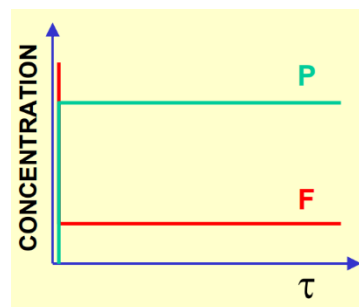


Figura 6.27. Modelo de flujo de mezcla perfecta. Concentración de productos (P) y reactivos (F) en función del tiempo de residencia (τ) ([Mato, 2019](#)).

En segundo lugar, es necesario minimizar el efecto de la reacción inversa. De forma análoga, teniendo en cuenta la cinética de la reacción inversa ([Ecuación 1.8](#)), interesa que la concentración de productos aumente progresivamente en el transcurso de la reacción con un modelo de flujo pistón ([Figura 6.15](#)). Si la concentración de acetona y de hidrógeno aumentaran bruscamente al inicio de la reacción (flujo de mezcla perfecta, [Figura 6.16](#)), la reacción inversa se vería favorecida.

Concentración

Únicamente hay un reactivo en la reacción principal ([Ecuación 1.1](#)), isopropanol, por lo que no se puede establecer una relación de exceso entre reactivos. Sin embargo, el empleo de una sustancia como inerte añadida a la mezcla de la reacción podría ser beneficioso para lograr una mayor conversión. Esto es porque, según el principio de Le Châtelier, añadiendo el inerte disminuye la concentración desplazando el equilibrio hacia la formación de productos. En contrapartida, la cinética disminuye significativamente y el calor transferido es mayor, es por ello por lo que no se ha tenido en cuenta en el diseño del proceso.

Temperatura

La reacción principal ([Ecuación 1.1](#)) es reversible y endotérmica, con un calor de reacción de $+62.900 \text{ kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$ ([Turton et al., 2003](#)), por lo que operar a la mayor temperatura posible aumentará la cinética de la reacción y desplazará el equilibrio

hacia los productos según el principio de Le Châtelier. Dentro del rango de operación, la temperatura más elevada posible son 500 °C (apartado [1.3.2. Catalizador](#)).

Presión

El número de moles aumenta en el transcurso de la reacción principal ([Ecuación 1.1](#)). Operar a una presión elevada favorecería la cinética de la reacción. Sin embargo, desplazaría el equilibrio hacia los reactivos según el principio de Le Châtelier.

Por lo tanto, la solución óptima sería operar con una presión decreciente, es decir, una presión elevada al inicio del reactor y una presión baja al final de este.

Tipo de reactor

Debido a que la reacción tiene lugar en fase gas, se trata de una catálisis heterogénea y el catalizador no requiere una regeneración continua ([Sifniades & Levy, 2011](#)), se ha optado por un reactor catalítico de lecho fijo.

Además, también se ha tenido en cuenta una unidad más de este equipo para una regeneración periódica del catalizador ([Sifniades & Levy, 2011](#)). Los dos reactores se colocarán en paralelo en la línea de producción para utilizarlos de forma alternativa.

6.4. Acondicionamiento de reactivos

Con el fin de modificar la presión de entrada al reactor se ha implementado en el simulador una bomba centrífuga (identificada como P-101 A/B en el diagrama de flujo, "[A2-PFD-101-2](#)" [ANEXO IV - Planos](#)). A continuación, se ha introducido un ebullidor (identificado como E-101 en el diagrama de flujo, "[A2-PFD-101-2](#)" [ANEXO IV - Planos](#)) para llevar la corriente líquida de reactivos a fase gaseosa y modificar la temperatura de entrada al reactor.

Se ha decidido implementar primero la bomba y después el ebullidor puesto que proporcionar presión a una corriente líquida requiere menor potencia eléctrica y menor coste que comprimir una corriente gaseosa.

Como valor inicial de presión de operación, la bomba impulsa la corriente de reactivos hasta 5 bar. Se ha elegido esta presión como punto de partida de la simulación ya que es un valor intermedio dentro del rango de operación y la caída de presión no es tan elevada (-1,07 bar) como para tener un valor al final del reactor inferior a la presión atmosférica.

En el caso del ebullidor, el valor inicial de la temperatura de entrada al reactor seleccionado ha sido de 350 °C. Se ha empleado este parámetro inicial ya que es la temperatura intermedia dentro del rango de operación de la reacción principal, entre 200 °C y 500 °C ([W. & Richardson, 1984](#)).

Los servicios auxiliares escogidos para estos equipos han sido electricidad para la bomba y gases de combustión de horno para el ebullidor con una temperatura de entrada de 1.000 °C y una temperatura de salida de 600 °C.

6.5. Sección de reacción

En este apartado se han analizado y justificado los valores de las variables de operación y los parámetros geométricos de los equipos empleados en la sección de reacción.

6.5.1. Parámetros geométricos iniciales del reactor

Se ha introducido el reactor catalítico de lecho fijo (R-201 A/B en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) en el simulador, estableciendo un modelo de flujo pistón (como se analizó en el apartado 6.3. *Análisis mediante Integración de Procesos*). En este equipo se han introducido las cinéticas de la reacción principal (Ecuación 1.1): la reacción directa (Ecuación 1.7) y la reacción inversa (Ecuación 1.8).

Los parámetros geométricos seleccionados inicialmente han sido los propuestos por *Turton et al., (2003)*. En el caso del diámetro interior de los tubos no se ha tomado el valor de la referencia seguida (5,1 cm) ya que, según la norma BS 3606 para dimensiones estandarizadas de tubos de acero, el diámetro interior más elevado es de 4,6 cm (*Tabla 6.1*).

Número inicial de tubos: 448

Longitud inicial de los tubos: 20 ft

Diámetro interior inicial de los tubos: 4,6 cm

Tabla 6.1. Dimensiones estandarizadas de tubos de acero según la norma BS 3606 (*Towler & Sinnott, 2012*).

Outside diameter (mm)		Wall thickness (mm)				
16	1.2	1.6	2.0	—	—	
20	—	1.6	2.0	2.6	—	
25	—	1.6	2.0	2.6	3.2	
30	—	1.6	2.0	2.6	3.2	
38	—	—	2.0	2.6	3.2	
50	—	—	2.0	2.6	3.2	

A partir del análisis de la distancia al equilibrio en función de la presión y temperatura de operación se seleccionará la longitud final de los tubos del reactor. Por otro lado, se establecerá una caída de presión de -1,5 bar (calculada mediante la ecuación de *Ergun*) en el equipo para calcular el número final de tubos.

En el caso del diámetro de los tubos, se tendría que analizar la transmisión de calor en el lecho poroso, observando los perfiles de temperatura en el interior de los tubos. Este análisis se ha descartado por considerar que sobrepasa la perspectiva de objetivos de este *Trabajo Final de Grado*. Por lo que se va a asumir que la transmisión de calor es correcta para el diámetro de tubos inicialmente seleccionado ([Turton et al., 2003](#)).

El coeficiente global de transmisión de calor también ha sido seleccionado inicialmente de la referencia, con un valor de $60 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{°C}^{-1}$ ([Turton et al., 2003](#)). En el apartado [6.5.9. Coeficiente global de transmisión de calor](#), se describe la metodología que se ha seguido para el cálculo de este a partir de las propiedades de los fluidos de intercambio de calor y de las características geométricas del reactor.

Finalmente, para simular las reacciones competitivas en paralelo (deshidratación de isopropanol para dar propileno y agua, [Ecuación 1.4](#) y deshidratación de isopropanol para dar diisopropil éter y agua, [Ecuación 1.6](#)) se ha introducido en el simulador un bloque auxiliar en el que se han impuesto las selectividades para cada reacción (apartado [1.3.3. Cinética](#)). Del mismo modo, se ha introducido en el simulador otro bloque auxiliar para la simulación de la reacción competitiva en serie (acetona para dar diacetona alcohol, [Ecuación 1.5](#)). Los dos reactores auxiliares han sido introducidos como equipos adiabáticos en los que no hay caída de presión.

En el apartado [6.9. Perfiles de composición finales](#), se presentan los perfiles de composición finales del reactor R-201 A/B ([Figura 6.38](#)) una vez realizadas las recirculaciones de reactivos y de agua (corrientes 11 y 48 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)), el ajuste de parámetros de operación del proceso y la optimización económica.

Los parámetros geométricos finales de este equipo están recogidos en su correspondiente hoja de especificaciones (“[ANEXO VI - Equipos - Hoja de especificación R-201 A/B](#)” [ANEXO VI - Equipos](#)), mientras que los criterios de diseño finales se exponen en el apartado [6.10. Especificaciones finales](#).

6.5.2. Fluido térmico de intercambio de calor

Tal y como se introdujo en las bases de diseño del proceso (apartado [3.4. Especificaciones de servicios auxiliares](#)), se ha decidido optar por una sal fundida como fluido térmico de intercambio del calor de reacción ya que esta tiene lugar en un rango de temperaturas entre 200°C y 500°C ([W. & Richardson, 1984](#)). La sal fundida escogida ([Sanz & Thomkins, 1981](#)) ha sido la compuesta por una mezcla eutéctica de NaNO_2 (48,9% masa), NaNO_3 (6,9% masa) y KNO_3 (44,2% masa).

Los valores iniciales de la presión (3 bar) y flujo másico ($35,1 \text{ th}^{-1}$) de operación de la sal fundida han sido seleccionados a partir de [Turton et al., \(2003\)](#). El flujo másico

de sal fundida será modificado para alcanzar una distancia porcentual al equilibrio de 0.02% (posteriormente descrito en el apartado 6.5.7. *Flujo másico de sal fundida*). La presión de operación se ha mantenido constante en todo el proceso de simulación.

En el caso de la temperatura de operación, se ha establecido como criterio un valor de 525 °C. Este último, permanecerá constante durante el proceso de simulación y optimización para garantizar una correcta transmisión de calor en el reactor. La temperatura de salida del reactor de la sal fundida será variada automáticamente por el simulador para que la temperatura de entrada se mantenga en 525 °C.

Cabe destacar que, se ha impuesto que la temperatura de salida de sal fundida no sea inferior a 142 °C ya que el fluido térmico solidificaría (Sanz & Thomkins, 1981).

6.5.3. Modo de operación del fluido térmico

Se han estudiado mediante simulación dos modos de operación para la sal fundida: operación en contracorriente y operación en paralelo. Para ello, se ha realizado un análisis variando la temperatura de entrada de la corriente de reactivos (entre 200 °C y 500 °C) para ver la influencia en la conversión de isopropanol para los dos modos de operación. Los resultados obtenidos se muestran a continuación (Figura 6.17, Tabla 6.2 y Tabla 6.3).

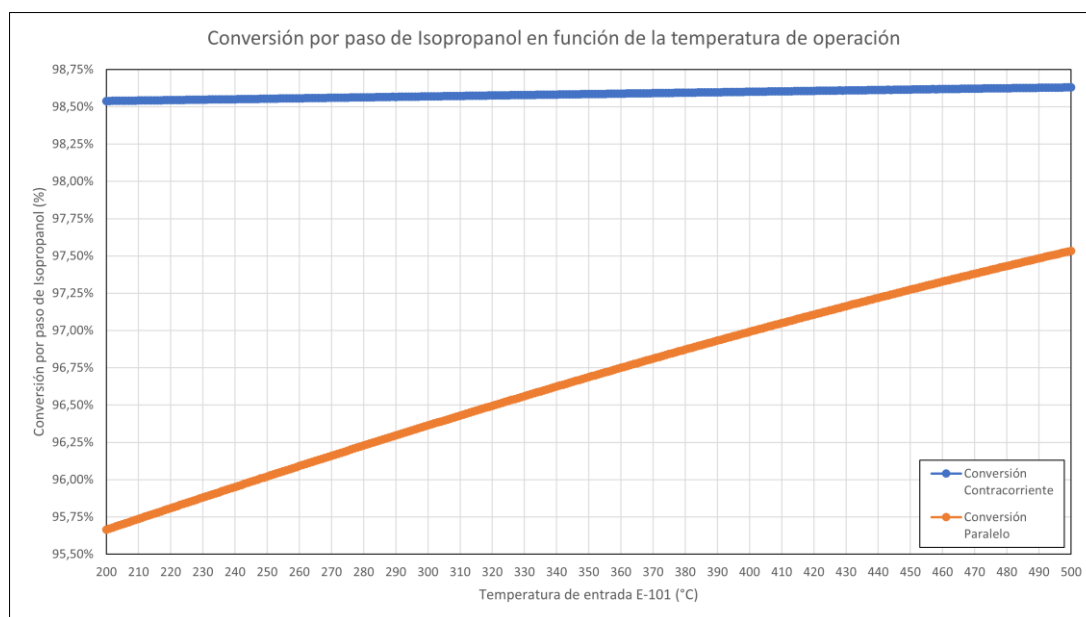


Figura 6.28. Conversión por paso de Isopropanol en función de la temperatura de entrada al reactor para los modos de operación de la sal fundida, en contracorriente y en paralelo.

Tabla 6.2. Resultados extremos del análisis para el modo de operación en contracorriente.

Caso	T _{E-101} (°C)	F _{18,IPA} (kmol·h ⁻¹)	X _{IPA} (%)	1-X _{IPA} (%)
1	200	0,8893	98,54	1,46
301	500	0,8337	98,63	1,37

Tabla 6.3. Resultados extremos del análisis para el modo de operación en paralelo.

Caso	T_{E-101} (°C)	$F_{18,IPA}$ (kmol·h ⁻¹)	X_{IPA} (%)	$1-X_{IPA}$ (%)
1	200	2,6385	95,66	4,34
301	500	1,5007	97,53	2,47

Atendiendo a los resultados obtenidos, la menor fracción molar de isopropanol no convertida se da en ambos casos para la mayor temperatura de operación, 500 °C (1,37% en contracorriente, [Tabla 6.2](#) y 2,47% en paralelo, [Tabla 6.3](#)). Para esta temperatura, el isopropanol que no reacciona operando en paralelo (1,50 kmol·h⁻¹, [Tabla 6.3](#)) es casi el doble que en contracorriente (0,83 kmol·h⁻¹, [Tabla 6.2](#)). En el otro extremo, a 200 °C, la diferencia es más notoria, siendo el isopropanol que no reacciona operando en paralelo (2,64 kmol·h⁻¹, [Tabla 6.3](#)) casi el triple que operando en contracorriente (0,89 kmol·h⁻¹, [Tabla 6.2](#)).

Por lo tanto, se puede concluir a la vista del análisis que la mejor opción es la operación de la sal fundida en contracorriente.

Además, también se puede percibir en la [Figura 6.17](#) la tendencia analizada en el apartado [6.3. Análisis mediante Integración de Procesos](#). A mayor temperatura de operación en el reactor se consigue una mayor conversión de isopropanol.

6.5.4. Reactor auxiliar de referencia

A continuación, se ha introducido otro reactor auxiliar en el simulador. La cinética y los parámetros geométricos seleccionados en este bloque son los mismos que en el bloque de simulación del reactor principal (apartado [6.5.1. Parámetros geométricos iniciales del reactor](#)) a excepción de la longitud de los tubos. Se ha impuesto una longitud de tubos de 20 m con la que se ha pretendido alcanzar el equilibrio de la reacción en todos los análisis. Además, este bloque de reacción opera de forma isoterma e isobárica para que la temperatura y la presión sean constantes en todo momento.

La importancia de este reactor reside en que, en todos los análisis realizados con el reactor principal (R-201 A/B en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)), toma las condiciones a la salida del reactor (temperatura y presión) como parámetros de operación. De esta manera y gracias a su elevada longitud de tubos, se podrá calcular la conversión de isopropanol de equilibrio y la distancia porcentual al mismo, comparando los resultados con los obtenidos en la simulación del reactor principal.

6.5.5. Influencia de la temperatura de operación – Longitud de los tubos

Se ha realizado un análisis de la influencia de la temperatura de entrada al reactor principal en la conversión por paso de isopropanol para distintas longitudes de tubos estandarizadas (según la norma BS 3606 para dimensiones estandarizadas de tubos de acero).

Además, se ha calculado simultáneamente la conversión de equilibrio obtenida en el reactor auxiliar de referencia y se han comparado ambos resultados mediante la distancia porcentual al equilibrio (*Ecuación 6.2*).

$$D_{eq} = \frac{F_{eq,ACETONA} - F_{18,ACETONA}}{F_{eq,ACETONA}} \quad (\text{Ecuación 6.2})$$

Donde D_{eq} representa la distancia porcentual al equilibrio expresada en %, $F_{eq,ACETONA}$ representa el flujo molar de acetona a la salida del reactor auxiliar de referencia expresado en $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ y $F_{18,ACETONA}$ representa el flujo molar de acetona a la salida del reactor principal expresado en $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$.

La metodología de este análisis es la siguiente:

- 1° - Se ha seleccionado una longitud de tubos estandarizada para el reactor principal (24 ft, 20 ft, 16 ft, 12 ft, 8 ft y 6 ft).
- 2° - Se ha variado la temperatura de entrada al reactor principal entre 200 °C y 500 °C (rango de operación de la reacción).
- 3° - Se ha calculado para cada longitud de tubos y temperatura de operación, la conversión de isopropanol, la conversión de isopropanol en equilibrio y la distancia porcentual al equilibrio.

La conversión por paso de isopropanol en función de la temperatura de entrada al reactor principal para distintas longitudes de reactor estandarizadas se muestra a continuación (*Figura 6.18*).

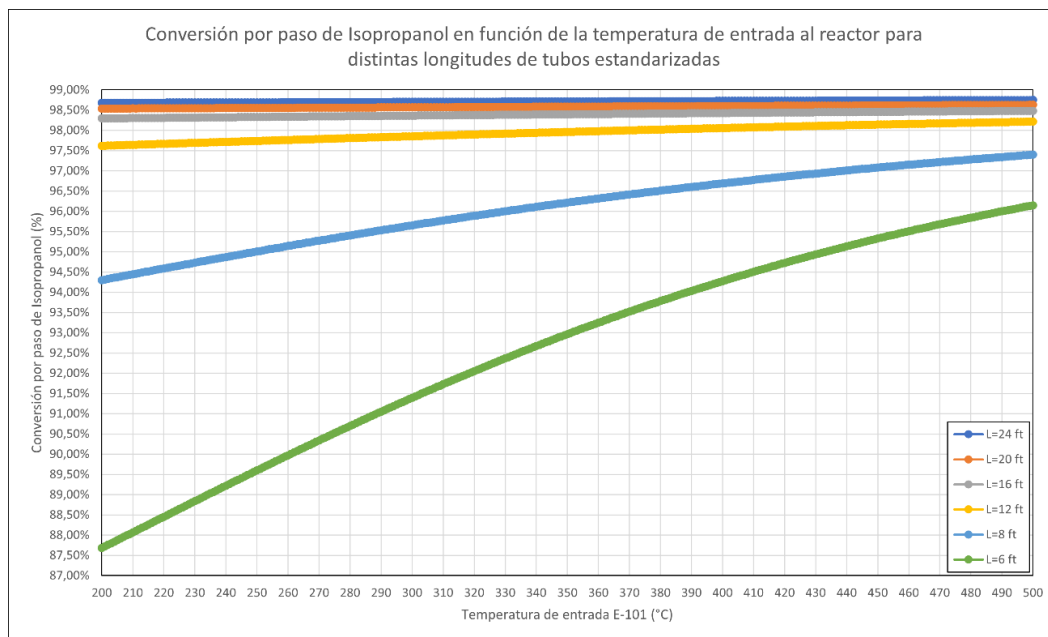


Figura 6.29. Conversión por paso de Isopropanol en función de la temperatura de entrada al reactor para distintas longitudes de tubos estandarizadas de acero según la norma BS 3606.

A la vista de los resultados representados en la [Figura 6.18](#), de nuevo se puede observar lo analizado mediante Integración de Procesos (aparado [6.3. Análisis mediante Integración de Procesos](#)) para el caso de la temperatura. A medida que aumenta la temperatura de operación, la conversión por paso de isopropanol es más elevada. Además, queda presente la influencia de la longitud de los tubos, pues cuanto más elevada es esta, el tiempo de residencia en el reactor aumenta y, por lo tanto, la conversión también.

Por otro lado, la conversión de isopropanol de equilibrio y la distancia porcentual al mismo en función de las longitudes de tubos estandarizadas para distintas temperaturas de entrada al reactor se muestran en la [Figura 6.20](#) y [Figura 6.19](#), respectivamente.

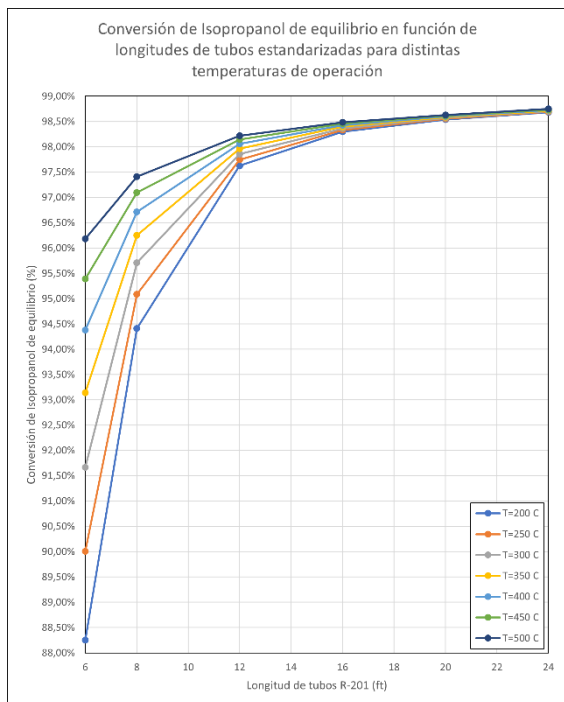


Figura 6.31. Conversión de Isopropanol de equilibrio en función de longitudes de tubos estandarizadas (norma BS 3606) para distintas temperaturas de operación.

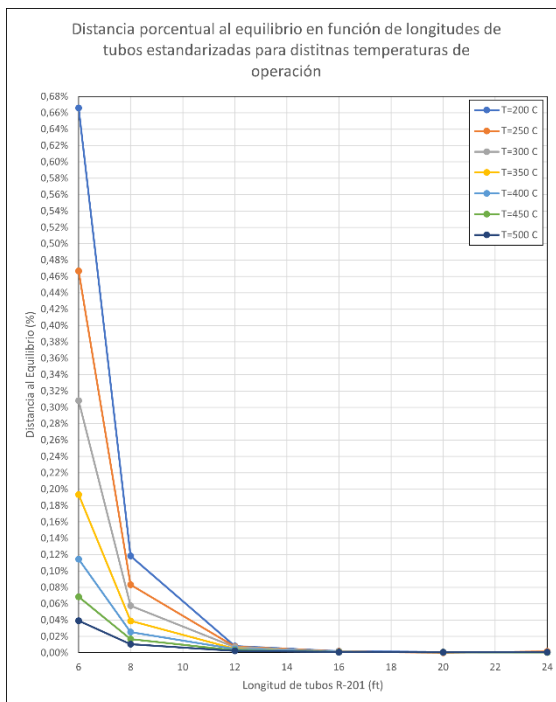


Figura 6.30. Distancia porcentual al equilibrio en función de longitudes de tubos estandarizadas (norma BS 3606) para distintas temperaturas de operación.

Observando los resultados obtenidos para la conversión de isopropanol de equilibrio (Figura 6.20), se pueden destacar varias conclusiones. En primer lugar, se aprecia que la conversión de equilibrio no varía de forma muy acusada para longitudes de tubos de 16 ft, 20 ft y 24 ft. Esto es debido a que, a pesar de variar la temperatura de entrada al reactor, las temperaturas de salida para estas longitudes son elevadas y muy similares, ya que el tiempo de residencia es suficiente en cada caso para calentar la mezcla de reacción. Por el contrario, para longitudes de tubos cortas (6 ft y 8 ft) se aprecia que esta variación es más notoria para distintas temperaturas de entrada al reactor, ya que el tiempo de residencia no es suficiente para alcanzar la misma temperatura al final del reactor.

En segundo lugar, se aprecia que la conversión de equilibrio (Figura 6.20) se encuentra en un rango bastante estrecho de entre el 98% y el 99% para longitudes de tubos de 16 ft, 20 ft y 24 ft, para cualquier temperatura de entrada al reactor. Esto es debido, de igual manera, a que el tiempo de residencia es suficiente para alcanzar temperaturas próximas a la conversión de equilibrio máxima para la presión de operación de 5 bar. En contrapartida, se puede observar que la situación para longitudes de tubos de 6 ft y 8 ft es diferente, pues el tiempo de permanencia en el reactor es más corto.

Finalmente, observando los resultados de distancia porcentual al equilibrio (Figura 6.19), se puede concluir que, para longitudes de tubos superiores a 12 ft, la distancia porcentual al equilibrio es inferior al 0,02%. Esto se debe a que el tiempo de residencia de la mezcla reactante es suficientemente elevado para que la cinética

de la reacción alcance punto de equilibrio. Por el contrario, para longitudes inferiores a 12 ft, la cinética de la reacción depende fuertemente de la temperatura de entrada al reactor y del tiempo de residencia, ya que las distancias porcentuales al equilibrio son más elevadas.

A la vista de los resultados obtenidos del análisis, se ha decidido seleccionar una longitud de tubos estandarizada de 12 ft, ya que la distancia al equilibrio es inferior al 0,02% para todo el rango de temperatura de operación.

En cuanto a la temperatura de entrada al reactor, se ha decidido escoger una temperatura intermedia de 350 °C, ya que los resultados no son suficientemente concluyentes para decantarse por otro valor para la longitud de tubos seleccionada.

En el apartado [6.8.4. Temperatura de operación](#) se ha estudiado económicamente el proceso en función de esta temperatura y se ha observado si se puede seleccionar en base a un criterio económico.

6.5.6. Influencia de la presión de operación

Una vez establecida la temperatura de operación (350 °C) y la longitud de los tubos del reactor (12 ft) se ha realizado un análisis para estudiar la influencia de la presión de operación en la conversión por paso y de equilibrio de isopropanol y en la distancia al equilibrio. Para ello, se ha variado la presión de entrada al reactor a través de la bomba centrífuga (P-101 A/B en el diagrama de flujo, "[A2-PFD-101-2](#)" [ANEXO IV - Planos](#)) entre 2,5 bar y 10 bar.

Se ha comenzado el análisis con una presión de 2,5 bar ya que, para valores inferiores a este, la caída de presión en el reactor era tal que a la salida se obtenían presiones inferiores a la atmosférica. Esto es debido a la influencia de los parámetros geométricos del reactor y las dimensiones de las partículas de catalizador en la ecuación de *Ergun* para el cálculo de la caída de presión.

Los resultados obtenidos del análisis de la influencia de la presión de operación en la conversión por paso de isopropanol se representan en la siguiente figura ([Figura 6.21](#)).

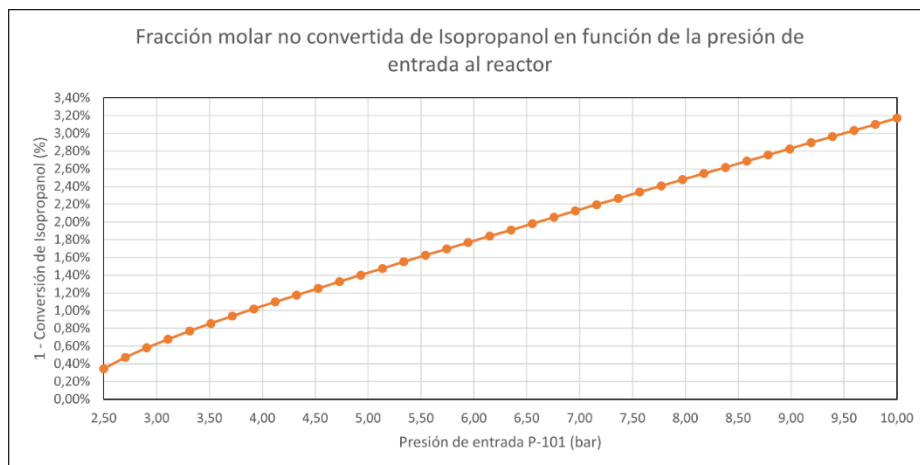


Figura 6.32. Fracción molar de Isopropanol no convertida (1-Conversion) en función de la presión de entrada al reactor.

A la vista de los resultados reflejados en la anterior figura (Figura 6.21), se puede apreciar como la fracción molar no convertida de isopropanol aumenta a medida que aumenta la presión de operación. Este aumento se corresponde con una disminución de la conversión por paso de isopropanol. Atendiendo a lo analizado mediante Integración de Procesos (apartado 6.3. Análisis mediante Integración de Procesos), interesa que la presión sea elevada al inicio del reactor y que sea baja al final del mismo. Se puede concluir que, para una longitud de tubos de 12 ft, la cinética de la reacción está menos influenciada por la presión que lo que está el equilibrio, ya que a presiones de entrada al reactor bajas, la conversión es más elevada.

Esto último se aprecia desde otra perspectiva en la siguiente figura (Figura 6.22) que representa la influencia de la caída de presión en la fracción molar no convertida de isopropanol. Cabe destacar que la mayor caída de presión (-1,45 bar) se corresponde con el límite inferior del análisis (2,5 bar), mientras que la menor caída de presión (-0,25 bar) se corresponde con el límite superior (10 bar).

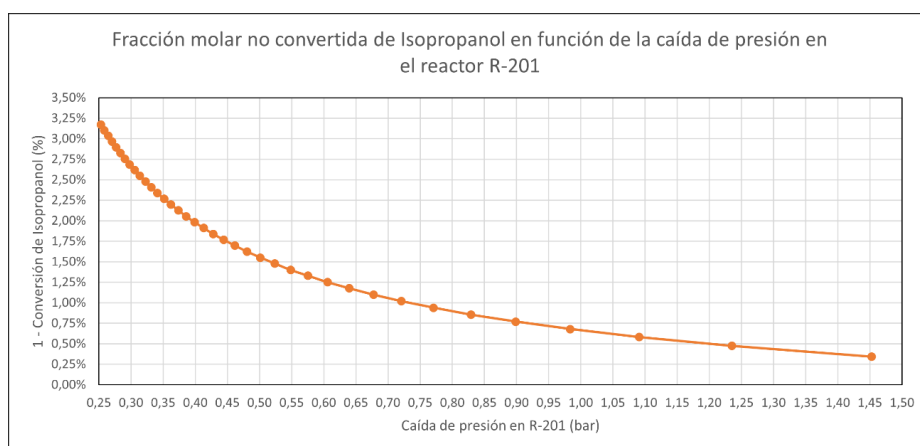


Figura 6.33. Fracción molar de Isopropanol no convertida (1-Conversion) en función de la caída de presión en el reactor.

Observando los anteriores resultados (*Figura 6.22*), se puede corroborar lo concluido en la anterior figura (*Figura 6.21*). A mayores caídas de presión (presiones de operación más bajas) la fracción molar no convertida de isopropanol disminuye. Todo lo contrario que en el caso de caídas de presión más bajas (presiones de operación más elevadas). Esto significa que, a pesar de que presiones de operación más elevadas favorecen la cinética de la reacción, la influencia no es notoria en comparación con el equilibrio, ya que cuanto mayor es la caída de presión, menor es la fracción molar no convertida de isopropanol.

Otro aspecto para destacar de la *Figura 6.21* es que, la menor fracción molar no convertida de isopropanol (0,34%) se obtiene para un valor de la presión de operación de 2,5 bar. A 3,11 bar se duplica (0,68%) y a 3,92 bar se triplica (1,02%). Esto se traduce en una gran influencia de la presión de operación en la conversión por paso de isopropanol ya que, en menos de 1,5 bar de diferencia, el isopropanol que no reacciona puede ser el doble o el triple del que no reacciona para 2,5 bar.

Los resultados del análisis del equilibrio en el reactor auxiliar de referencia se muestran a continuación en la *Figura 6.23*.

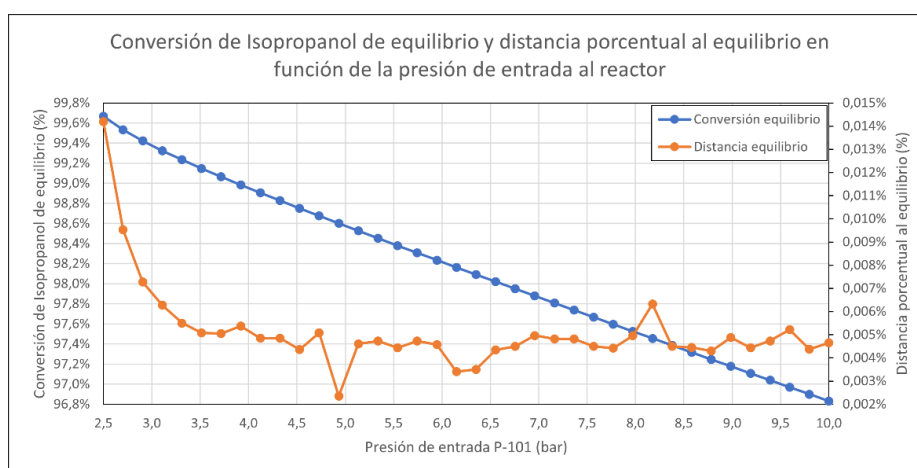


Figura 6.34. Conversión de Isopropanol de equilibrio y distancia porcentual al equilibrio en función de la presión de entrada al reactor.

A la vista de los resultados obtenidos (*Figura 6.23*), se puede apreciar que la distancia porcentual al equilibrio es inferior al 0,015% para todas las presiones estudiadas, alcanzando una tendencia a un valor de 0,0045% a partir de 4 bar. Esto refleja que la distancia es muy pequeña en todos los casos y que prácticamente se alcanza el equilibrio en todo el rango de presiones.

Por otro lado, la conversión de isopropanol de equilibrio disminuye al aumentar la presión de entrada al reactor. Esto se corresponde con lo analizado en la *Figura 6.22*, pues para presiones más bajas, la caída de presión es más elevada y, por ende, la presión a la salida del reactor es menor, favoreciendo el equilibrio según el principio de Le Châtelier.

Cabe destacar que el análisis de la influencia de la presión de operación se ha realizado para unos parámetros geométricos del reactor determinados. Un estudio más completo tendría en cuenta el factor económico entre los costes de los equipos y los costes de operación. Sin embargo, este no se ha llevado a cabo ya que se ha considerado que escapaba de los objetivos fijados para este trabajo.

En conclusión, se ha seleccionado una presión baja de operación de 2,7 bar ya que, para este valor, la fracción molar no convertida de isopropanol es del 0,47% (menos del doble de la fracción molar de isopropanol no convertida mínima, 0,34%) y, además, la distancia porcentual al equilibrio es razonablemente baja (0,01%).

6.5.7. Flujo másico de sal fundida

A la vista de los resultados del análisis de la influencia de la temperatura y presión de operación en el equilibrio de la reacción (*Figura 6.19* para la temperatura y *Figura 6.23* para la presión), se ha seleccionado como criterio de diseño una distancia porcentual al equilibrio fija del 0,02%. Se ha seleccionado este valor por ser razonablemente alcanzable por el sistema de reacción.

El flujo másico de sal fundida ha sido calculado para alcanzar este valor.

6.5.8. Número de tubos

Como criterio de diseño, se ha decidido seleccionar un valor de caída de presión de -1,5 bar en el reactor. Para poder alcanzar este valor, el número de tubos ha sido modificado manualmente en cada simulación ya que el software no permite el cálculo automático al ser una variable entera.

6.5.9. Coeficiente global de transmisión de calor

En el reactor están presentes tres mecanismos de transmisión de calor:

1 - Convección forzada en el lado de la carcasa por donde circula la sal fundida

El coeficiente individual asociado a este mecanismo ha sido representado como h_o , expresado en $J \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \cdot K^{-1}$, y ha sido calculado a través del método de Kern (*Ecuación 6.3*).

$$\frac{h_o \cdot d_e}{k_{sf}} = jh \cdot \left(\frac{d_e \cdot G_{sf}}{\mu_{sf}} \right) \cdot \left(\frac{c_{p,sf} \cdot \mu_{sf}}{k_{sf}} \right)^{1/3} \cdot \left(\frac{\mu_{sf}}{\mu_w} \right)^{0,14} \quad (\text{Ecuación 6.3})$$

Donde d_e representa el diámetro hidráulico equivalente expresado en m, k_{sf} representa la conductividad térmica promedio de la sal fundida expresada en $J \cdot s^{-1} \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$, jh representa un factor de corrección en función del número de Reynolds y del corte de placa deflectora, G_{sf} representa la densidad de flujo másico de sal fundida expresada en $kg \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}$, μ_{sf} representa la viscosidad promedio de la sal fundida expresada en $kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1}$, $c_{p,sf}$ representa la capacidad calorífica promedio a

presión constante de la sal fundida expresada en $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ y μ_w representa la viscosidad promedio del agua expresada en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$.

2 – Conducción a través de la pared de los tubos

El coeficiente individual asociado a este mecanismo es la conductividad del material de los tubos. Se ha representado como k_w , expresado en $\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, y ha sido seleccionado a partir de la siguiente tabla ([Tabla 6.4](#)) para el material acero a una temperatura de entre 100°C y 600°C .

Tabla 6.4. Conductividades para distintos materiales y temperaturas ([Towler & Sinnott, 2012](#)).

Metal	Temperature ($^\circ\text{C}$)	$k_w(\text{W}/\text{m}^\circ\text{C})$
Aluminium	0	202
	100	206
Brass (70 Cu, 30 Zn)	0	97
	100	104
	400	116
Copper	0	388
	100	378
Nickel	0	62
	212	59
Cupro-nickel (10 per cent Ni)	0–100	45
Monel	0–100	30
Stainless steel (18/8)	0–100	16
	0	45
Steel	100	45
	600	36
	0–100	16
Titanium	0–100	16

En este caso, se ha decidido tomar un valor intermedio de conductividad fijo entre 100°C y 600°C de $40 \text{ J}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$.

3 – Convección forzada de la mezcla reactante a través del lecho catalítico

El coeficiente individual representativo de este mecanismo ha sido identificado como h_i , expresado en $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, y ha sido calculado mediante la siguiente correlación ([Leva, 1950](#)) para lechos catalíticos cuyo ratio entre el diámetro de partículas de catalizador y el diámetro de los tubos es inferior a 0,35 (en este caso es de 0,03).

$$\frac{h_i \cdot D_p}{k_{gas}} = 0,813 \cdot \left(\frac{D_p \cdot G_{gas}}{\mu_{gas}} \right)^{0,9} \cdot \exp\left(-6 \cdot \frac{D_p}{D_{t,i}}\right) \quad (\text{Ecuación 6.4})$$

Donde D_p representa el diámetro de las partículas de catalizador expresado en m, k_{gas} representa la conductividad térmica promedio del gas expresada en $\text{J}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, G_{gas} representa la densidad de flujo másico del gas de reacción expresada en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$, μ_{gas} representa la viscosidad promedio del gas de reacción expresada en $\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ y $D_{t,i}$ representa el diámetro interior de los tubos expresado en m.

Además, se han tenido en cuenta los factores de ensuciamiento por los lados de la carcasa y de los tubos (representados como $h_{o,d}$ y $h_{i,d}$, respectivamente, expresados

en $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) en el cálculo del coeficiente global de transmisión de calor. Los valores de estos factores se han obtenido de la siguiente tabla (*Tabla 6.5*).

Tabla 6.5. Valores típicos para factores de ensuciamiento (Towler & Sinnott, 2012).

Fluid	Coefficient ($\text{W}/\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}$)	Factor (resistance) ($\text{m}^2\cdot^\circ\text{C}/\text{W}$)
River water	3000–12,000	0.0003–0.0001
Sea water	1000–3000	0.001–0.0003
Cooling water (towers)	3000–6000	0.0003–0.00017
Towns water (soft)	3000–5000	0.0003–0.0002
Towns water (hard)	1000–2000	0.001–0.0005
Steam condensate	1500–5000	0.00067–0.0002
Steam (oil free)	4000–10,000	0.0025–0.0001
Steam (oil traces)	2000–5000	0.0005–0.0002
Refrigerated brine	3000–5000	0.0003–0.0002
Air and industrial gases	5000–10,000	0.0002–0.0001
Flue gases	2000–5000	0.0005–0.0002
Organic vapours	5000	0.0002
Organic liquids	5000	0.0002
Light hydrocarbons	5000	0.0002
Heavy hydrocarbons	2000	0.0005
Boiling organics	2500	0.0004
Condensing organics	5000	0.0002
Heat transfer fluids	5000	0.0002
Aqueous salt solutions	3000–5000	0.0003–0.0002

A partir de esta tabla, se han seleccionado unos valores de factores de ensuciamiento de $7.500 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ para el interior de los tubos y de $5.000 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ para el lado de la carcasa.

El coeficiente global de transmisión de calor, representado como U y expresado en $\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$, engloba los mecanismos individuales y los factores de ensuciamiento anteriormente descritos y ha sido calculado mediante la siguiente ecuación (*Towler & Sinnott, 2012*).

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_o} + \frac{1}{h_{o,d}} + \frac{D_{t,o} \cdot \ln\left(\frac{D_{t,o}}{D_{t,i}}\right)}{2 \cdot k_w} + \frac{D_{t,o}}{D_{t,i} \cdot h_{i,d}} + \frac{D_{t,o}}{D_{t,i} \cdot h_i} \quad (\text{Ecuación 6.5})$$

Donde $D_{t,o}$ representa el diámetro exterior de los tubos expresado en m.

La metodología que ha sido seguida para el cálculo del coeficiente global de transmisión de calor es el proceso iterativo que se describe a continuación:

- 1° - Se han tomado las propiedades y flujos de los fluidos.
- 2° - Se ha establecido el número de tubos para que la caída de presión en el reactor sea de -1,5 bar.
- 3° - Se han calculado los coeficientes individuales de transmisión de calor h_i y h_o .

4° - Se ha calculado el coeficiente global de transmisión de calor U a través de los coeficientes individuales h_i y h_o , de la conductividad k_w y de los factores de ensuciamiento $h_{i,d}$ y $h_{o,d}$.

5° - Se ha introducido el coeficiente global en el simulador.

6° - Se ha repetido desde el primer paso hasta que la diferencia entre dos iteraciones del coeficiente global de transmisión de calor consecutivas ha sido de $0,25 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ en valor absoluto.

El valor final calculado del coeficiente global de transmisión de calor ha sido de $59 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$.

6.6. Sección de separación

Una vez simulada la sección de reacción en lazo abierto, es decir, sin recirculación de reactivos, se ha obtenido la siguiente corriente de productos (*Tabla 6.6*).

Tabla 6.6. Corriente de productos tras la simulación de la sección de reacción en lazo abierto (corriente 18 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Corriente	18
Desde	R-201 A/B
Hasta	E-301
Temperatura (°C)	497,98
Presión (bar)	1,20
Fracción de vapor (molar)	1,0000
Flujos molares ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	147,1678
Hidrógeno	59,4330
Propileno	0,8216
Acetona	59,3795
Diisopropil éter	0,1095
Isopropanol	0,3843
Agua	27,0131
Diacetona alcohol	0,0267
Nitrato de sodio	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000
Fracciones molares	
Hidrógeno	0,4038
Propileno	0,0056
Acetona	0,4035
Diisopropil éter	0,0007
Isopropanol	0,0026
Agua	0,1836
Diacetona alcohol	0,0002
Nitrato de sodio	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000

Esta corriente de productos expuesta en la anterior tabla será el punto de partida del diseño y la simulación de la sección de separación, que consta de tres etapas:

1ª – Condensación parcial y separación líquido-vapor.

2ª – Absorción.

3ª – Destilación.

6.6.1. Condensador parcial E-301 y separador líquido-vapor V-301

De la anterior tabla ([Tabla 6.6](#)) se puede apreciar que el contenido en compuestos volátiles (hidrógeno y propileno) es bastante elevado. En porcentaje molar, la corriente de productos contiene un 40,38% de hidrógeno y un 0,56% de propileno.

Debido a este alto contenido, se ha decidido introducir en el simulador un condensador (equipo E-301 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) con el fin de eliminar la mayor cantidad posible de volátiles en fase gaseosa.

Tras este equipo, se ha implementado un separador líquido-vapor (equipo V-301 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) con el objetivo de separar en dos corrientes la corriente procedente del condensador E-301: una corriente gaseosa rica en compuestos volátiles (corriente número 20 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) y una corriente líquida rica en acetona y agua, principalmente (corriente número 22 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)). Este equipo opera a presión constante y de forma adiabática.

Como servicio auxiliar del condensador se ha decidido emplear agua refrigerada a 15 °C. Por lo que, estableciendo una diferencia de temperaturas de 7 °C, la corriente de productos se ha enfriado hasta 22 °C. Se ha decidido emplear este servicio auxiliar para el condensador E-301 ya que enfría la corriente de productos hasta una temperatura razonablemente baja, favoreciendo el porcentaje de volátiles recuperado en fase gaseosa. Para esta temperatura, se recupera el 99,97% en la corriente gaseosa de los volátiles presentes en la corriente de productos ([Tabla 6.7](#)).

Los resultados de esta primera etapa de separación se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 6.7. Resultados de la primera etapa de la sección de separación en lazo abierto (equipos E-301 y V-301 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)). Continuación de la tabla en la siguiente página.

Corriente	19	20	22
Desde	E-301	V-301	P-302 A/B
Hasta	V-301	C-301	C-302
Temperatura (°C)	22,00	22,00	22,00
Presión (bar)	1,20	1,20	1,20
Fracción de vapor (molar)	0,5097	1,0000	0,0000
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	147,1678	75,0140	72,1539
Hidrógeno	59,4330	59,4195	0,0135
Propileno	0,8216	0,8155	0,0061
Acetona	59,3795	13,5805	45,7990
Diisopropil éter	0,1095	0,0681	0,0415

Tabla 6.7. Continuación.

Corriente	19	20	22
Desde	E-301	V-301	P-302 A/B
Hasta	V-301	C-301	C-302
Temperatura (°C)	22,00	22,00	22,00
Presión (bar)	1,20	1,20	1,20
Fración de vapor (molar)	0,5097	1,0000	0,0000
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	147,1678	75,0140	72,1539
Isopropanol	0,3843	0,0329	0,3514
Agua	27,0131	1,0975	25,9156
Diacetona alcohol	0,0267	1,28E-06	0,0267
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Fraciones molares			
Hidrógeno	0,4038	0,7921	0,0002
Propileno	0,0056	0,0109	0,0001
Acetona	0,4035	0,1810	0,6347
Diisopropil éter	0,0007	0,0009	0,0006
Isopropanol	0,0026	0,0004	0,0049
Agua	0,1836	0,0146	0,3592
Diacetona alcohol	0,0002	1,70E-08	0,0004
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000

6.6.2. Recuperación de acetona – Absorbedor C-301

A la vista de los resultados obtenidos en la anterior etapa de la sección de separación ([Tabla 6.7](#)), se puede apreciar que el contenido de acetona que abandona el separador V-301 por la corriente gaseosa es bastante elevado (22,87% con respecto a la corriente número 19). Debido a esto, se ha decidido implementar en el simulador un absorbedor (C-301 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) con el fin de recuperar este contenido de acetona en una corriente líquida para su posterior destilación.

Como disolvente para el absorbedor se ha escogido agua. El motivo principal de esta elección ha sido que este compuesto es uno de los que están presentes en la corriente 22 (corriente líquida del separador líquido-vapor V-301) que, junto con la corriente líquida que abandonará el absorbedor C-301 (corriente 24), se llevará a la etapa de destilación. De esta forma, no se introducirá en el proceso ningún compuesto nuevo. Además, el agua no es tóxica, ni inflamable, ni muy viscosa y es poco volátil, lo cual hace que esta elección de disolvente sea favorable.

Para modificar las condiciones de operación del disolvente (presión y temperatura), se han introducido en el simulador una bomba centrífuga (P-102 A/B en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) y un cambiador de calor de carcasa y tubos (E-102 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)).

Como parámetros iniciales, el número de etapas seleccionado ha sido de 10 etapas y la presión de operación de la torre 1,01 bar. Al final de este apartado se justificará en base a criterios económicos el número final de etapas seleccionado (*Figura 6.26* y *Tabla 6.9*).

Con el fin de establecer la temperatura de operación del disolvente, se ha realizado en primer lugar un estudio de su influencia en el porcentaje de recuperación de acetona en el absorbedor. En este análisis se ha variado la temperatura del disolvente entre 15 °C y 35 °C y se ha calculado el porcentaje de recuperación de acetona con respecto a la corriente 20 y el porcentaje de pérdidas de acetona con respecto a la corriente 19 para un flujo molar constante de 100 kmol·h⁻¹ de agua. Los resultados se muestran en la siguiente figura (*Figura 6.24*).

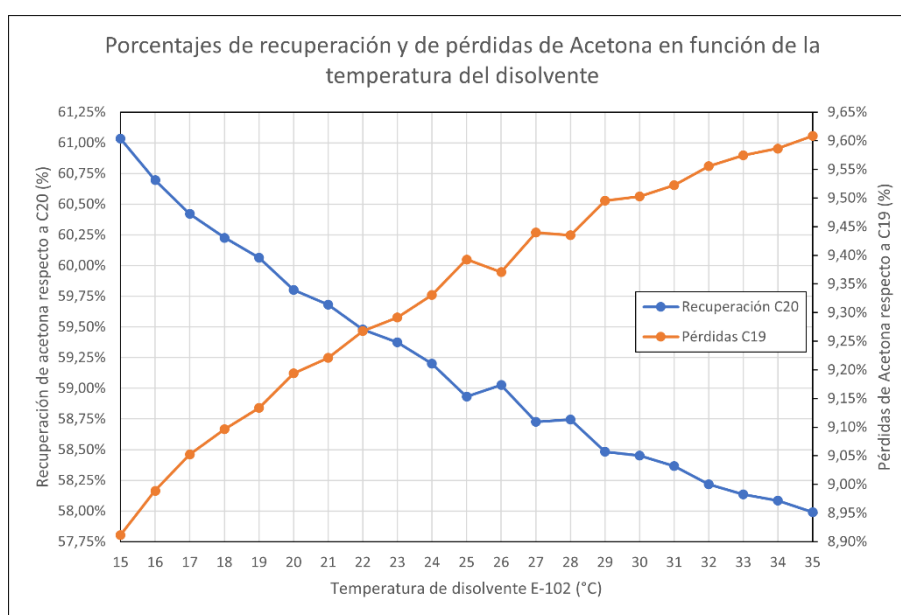


Figura 6.35. Influencia de la temperatura del disolvente en la recuperación de Acetona. C20: corriente número 20; C19: corriente número 19.

Como se puede apreciar en la anterior figura, el mejor porcentaje de recuperación de acetona se consigue para el límite inferior del análisis, 15 °C.

A continuación, se ha establecido un criterio de diseño para calcular el flujo molar de agua introducido al absorbedor. Este criterio ha sido el de recuperar el mayor porcentaje posible de la acetona proveniente de la corriente 20 por la corriente 24 (ver diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos). Inicialmente (en lazo abierto) se ha tomado un valor de 99,9%. El simulador modificará el flujo molar de agua para cumplir esta especificación inicial. En el apartado 6.10. *Especificaciones finales* se muestra el porcentaje final de acetona recuperado en este equipo.

Para seleccionar la temperatura final de entrada de disolvente, se ha realizado un análisis de los costes de operación y de capital del conjunto de equipos que forman la etapa de absorción (bomba P-102 A/B, cambiador de calor E-102 y columna C-301

en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) en función de la temperatura de disolvente. Se ha escogido refrigerante (propano, descrito en el apartado 3.4. Especificaciones de servicios auxiliares) como servicio auxiliar para el cambiador E-102 y electricidad para la bomba P-102 A/B. Como coste de la corriente de disolvente, se ha establecido un valor simbólico de 0,05 \$·kg⁻¹ para la realización de este análisis.

En estas condiciones, se ha variado la temperatura de entrada de disolvente a través del cambiador E-102, desde 15 °C hasta 35 °C. Para el límite superior del análisis, no se ha tenido en cuenta el cambiador E-102 en el análisis económico puesto que la temperatura no varía según los límites de batería impuestos (35 °C, L.B.4 ver apartado 3.5. Límites de batería del proyecto). Los resultados de los costes de operación y de capital se muestran en la Figura 6.25 y en la Tabla 6.8.

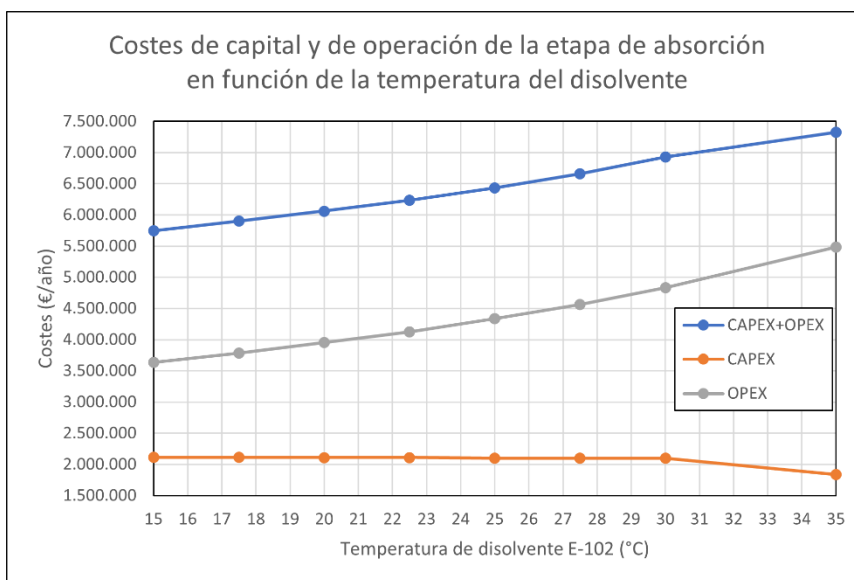


Figura 6.36. Costes de capital (CAPEX) y de operación (OPEX) de la etapa de absorción en función de la temperatura de entrada del disolvente. Número de etapas de C-301: 10 etapas.

Tabla 6.8. Resultados de la Figura 6.25.

CASO	T _{AGUA} (°C)	F _{AGUA} (kmol·h ⁻¹)	CAPEX (€)	OPEX (€·año ⁻¹)	CAPEX + OPEX (€·año ⁻¹)
1	15,0	312,37	2.112.920	3.632.480	5.745.400
2	17,5	330,44	2.112.550	3.785.680	5.898.230
3	20,0	349,98	2.109.640	3.951.170	6.060.810
4	22,5	370,71	2.109.540	4.126.730	6.236.270
5	25,0	395,34	2.097.810	4.335.450	6.433.260
6	27,5	422,40	2.097.810	4.564.660	6.662.470
7	30,0	453,92	2.095.980	4.831.710	6.927.690
8	35,0	531,32	1.839.570	5.486.780	7.326.350

Como se puede apreciar en la Figura 6.25, de nuevo los resultados más favorables son para una temperatura de entrada de disolvente de 15 °C, pues a pesar de que

la temperatura a la que hay que enfriar es más baja, el requerimiento de flujo molar de disolvente es mayor para temperaturas más elevadas (*Tabla 6.8*).

Por lo tanto, en base a estos dos análisis (*Figura 6.24* y *Figura 6.25*), se ha decidido tomar una temperatura de entrada de disolvente de 15 °C.

En el caso de la presión de operación, se ha observado que no tiene gran influencia en el porcentaje de recuperación de acetona, por lo que se ha decidido seleccionar un valor de 1,5 bar.

Finalmente, se ha realizado un análisis económico con el fin de seleccionar el número óptimo de etapas del absorbedor C-301. Para ello, se ha modificado el número de etapas del equipo y se han estimado los costes de capital y de operación de la etapa de absorción. Los resultados se muestran en la *Figura 6.26* y en la *Tabla 6.9*.



Figura 6.37. Costes de capital más costes de operación (CAPEX + OPEX) de la etapa de absorción en función del número de etapas del absorbedor C-301. Temperatura de entrada del disolvente: 15°C.

Tabla 6.9. Resultados de la Figura 6.26.

CASO	F _{AGUA} (kmol·h ⁻¹)	Nº ETAPAS	CAPEX (€)	OPEX (€·año ⁻¹)	CAPEX + OPEX (€·año ⁻¹)
1	311,45	18	2.170.880	3.631.120	5.802.000
2	311,36	17	2.165.080	3.629.550	5.794.630
3	311,52	16	2.155.030	3.629.660	5.784.690
4	311,52	15	2.140.060	3.628.520	5.768.580
5	311,48	14	2.130.010	3.627.060	5.757.070
6	311,53	13	2.126.380	3.626.970	5.753.350
7	311,53	12	2.124.380	3.626.810	5.751.190
8	311,77	11	2.116.890	3.627.200	5.744.090
9	312,37	10	2.112.920	3.632.480	5.745.400
10	313,22	9	2.104.150	3.638.280	5.742.430
11	314,75	8	2.101.680	3.651.050	5.752.730
12	320,64	7	2.096.880	3.700.950	5.797.830
13	334,08	6	2.098.450	3.816.220	5.914.670

De los resultados representados en la [Figura 6.26](#), se puede apreciar que existe un mínimo en la curva para 9 etapas, que se corresponde con un valor de costes de capital más costes de operación de 5.742.430 €año⁻¹ ([Tabla 6.9](#)). Por lo tanto, se han establecido 9 etapas como parámetro final del absorbedor C-301.

En el apartado [6.9. Perfiles de composición finales](#), se presentan los perfiles de composición finales en el absorbedor C-301 ([Figura 6.40](#)) tras las recirculaciones de reactivos y de agua, el ajuste de parámetros de operación del proceso y la optimización económica.

6.6.3. Destilación

Tras la segunda etapa de la sección de separación, las corrientes enviadas a la etapa de destilación (corrientes 22 y 24 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) tienen la siguiente composición ([Tabla 6.10](#)).

Tabla 6.10. Corrientes de partida para la destilación (corrientes 22 y 24 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)).

Corriente	24	22
Desde	P-301 A/B	P-302 A/B
Hasta	C-302	C-302
Temperatura (°C)	40,37	22,00
Presión (bar)	1,01	1,20
Fracción de vapor (molar)	0,0000	0,0000
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	326,3665	72,1539
Hidrógeno	0,0048	0,0135
Propileno	0,0008	0,0061
Acetona	13,5669	45,7990
Diisopropil éter	0,0042	0,0415
Isopropanol	0,0329	0,3514
Agua	312,7569	25,9156
Diacetona alcohol	1,28E-06	0,0267
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000
Fracciones molares		
Hidrógeno	1,48E-05	0,0002
Propileno	2,45E-06	0,0001
Acetona	0,0416	0,6347
Diisopropil éter	1,27E-05	0,0006
Isopropanol	0,0001	0,0049
Agua	0,9583	0,3592
Diacetona alcohol	3,91E-09	0,0004
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000

A la vista de los resultados mostrados en la anterior tabla ([Tabla 6.10](#)), se puede apreciar que ambas corrientes están compuestas principalmente por acetona, agua e isopropanol. Esto hace que sean posibles dos secuencias de destilación: secuencia directa e indirecta.

Para describir las, se ha empleado el diagrama de residuos de la mezcla ternaria acetona-isopropanol-agua a 1,01 bar para la secuencia directa (Figura 6.27) y para la secuencia indirecta (Figura 6.28).

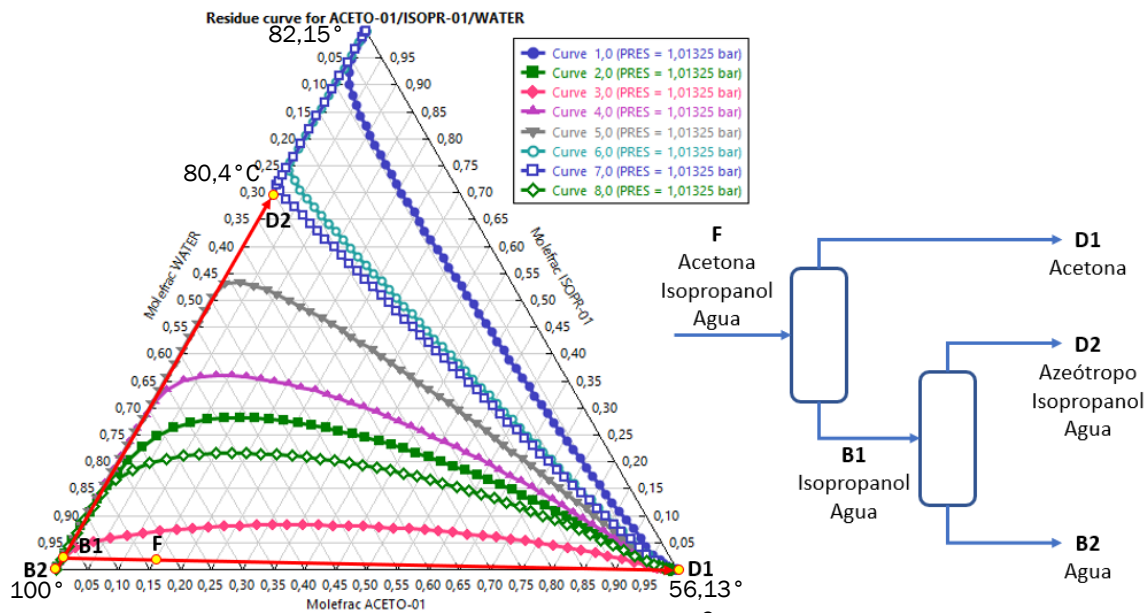


Figura 6.38. Secuencia de destilación directa junto a diagrama de residuos a 1,01 bar para Acetona-Isopropanol-Agua. Temperaturas de ebullición (AspenTech, 2019): Isopropanol (82,15°C), Agua (100°C), Acetona (56,13°C), Azeótropo Isopropanol-Agua (80,4°C).

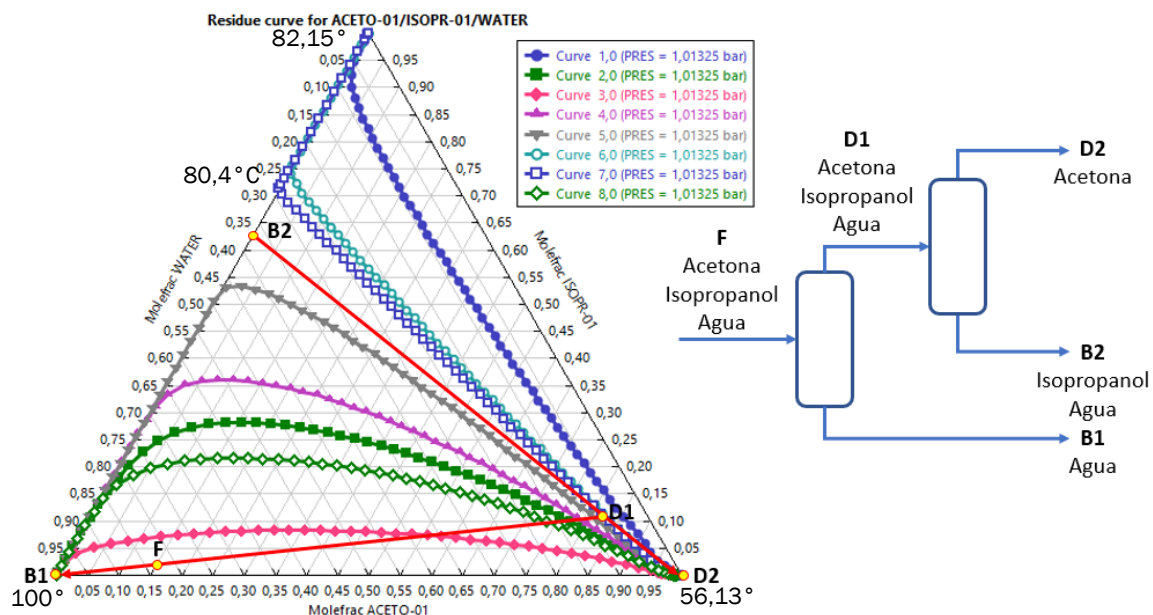


Figura 6.39. Secuencia de destilación indirecta junto a diagrama de residuos a 1,01 bar para Acetona-Isopropanol-Agua. Temperaturas de ebullición (AspenTech, 2019): Isopropanol (82,15°C), Agua (100°C), Acetona (56,13°C), Azeótropo Isopropanol-Agua (80,4°C).

En las anteriores figuras se puede observar la presencia de dos regiones dentro de los diagramas de residuos, separadas por el azeótropo de composición 70% mol en

isopropanol y 30% mol en agua. En la secuencia directa (*Figura 6.27*), el componente clave ligero es la acetona que se destila el primero, mientras que el componente clave pesado es el isopropanol. Por otro lado, en secuencia indirecta (*Figura 6.28*), el componente clave pesado es el agua que se separa primero, mientras que el componente clave ligero es el isopropanol.

Con el fin de seleccionar una de las dos secuencias, también se ha recurrido al siguiente método (*Porter & Momoh, 1991*) expuesto en la *Ecuación 6.6*, que calcula el flujo mínimo de vapor necesario en la destilación.

$$V_{min} = D + F \cdot \frac{R_F}{(\alpha - 1)} \quad (\text{Ecuación 6.6})$$

Donde V_{min} representa el flujo mínimo de vapor expresado en $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$, D representa el flujo molar de destilado expresado en $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$, R_F representa la ratio entre la relación de reflujo y la relación de reflujo mínima (se ha seleccionado un valor de 1,10 para el cálculo) y α representa la volatilidad relativa. Los resultados del método se muestran en la siguiente tabla (*Tabla 6.11*).

Tabla 6.11. Flujos mínimos de vapor en la destilación para secuencias directa e indirecta (Porter & Momoh, 1991). Subíndices: 1 para la primera etapa de destilación y 2 para la segunda. Continuación de la tabla en la siguiente página.

T (K)	DIRECTA			INDIRECTA		
	V_1 ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	V_2 ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	V_{min} ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	V_1 ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	V_2 ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)	V_{min} ($\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$)
363,73	277,8	18,8	296,5	81,3	92,1	173,5
360,33	277,8	25,8	303,6	89,6	92,1	181,7
358,57	277,8	33,4	311,1	98,5	92,1	190,6
357,51	277,8	41,5	319,3	108,0	92,1	200,2
356,80	277,8	50,3	328,0	118,4	92,1	210,5
356,29	277,8	59,8	337,5	129,5	92,1	221,6
355,90	277,8	70,0	347,8	141,6	92,1	233,7
355,59	277,8	81,1	358,9	154,6	92,1	246,7
355,34	277,8	93,1	370,9	168,7	92,1	260,8
355,12	277,8	106,1	383,9	184,0	92,1	276,1
354,92	277,8	120,3	398,1	200,6	92,1	292,8
354,75	277,8	135,7	413,5	218,8	92,1	310,9
354,59	277,8	152,7	430,4	238,7	92,1	330,8
354,44	277,8	171,2	449,0	260,5	92,1	352,6
354,30	277,8	191,7	469,5	284,6	92,1	376,7
354,17	277,8	214,4	492,2	311,2	92,1	403,3
354,05	277,8	239,6	517,4	340,9	92,1	433,0
353,93	277,8	267,9	545,7	374,1	92,1	466,3
353,82	277,8	299,8	577,6	411,6	92,1	503,7
353,71	277,8	336,0	613,8	454,2	92,1	546,3
353,61	277,8	377,5	655,3	502,9	92,1	595,0
353,51	277,8	425,4	703,2	559,2	92,1	651,3
353,42	277,8	481,5	759,2	625,1	92,1	717,2
353,33	277,8	547,9	825,6	703,1	92,1	795,2
353,25	277,8	627,8	905,5	797,0	92,1	889,1
353,17	277,8	725,7	1003,5	912,1	92,1	1004,2
353,10	277,8	848,6	1126,4	1056,5	92,1	1148,6
353,04	277,8	1007,4	1285,2	1243,1	92,1	1335,2

352,98	277,8	1220,3	1498,1	1493,3	92,1	1585,4
352,93	277,8	1520,8	1798,6	1846,4	92,1	1938,5
352,89	277,8	1976,7	2254,4	2382,1	92,1	2474,2
352,85	277,8	2750,6	3028,3	3291,5	92,1	3383,6
352,83	277,8	4353,0	4630,8	5174,5	92,1	5266,6
352,81	277,8	9646,0	9923,7	11394,2	92,1	11486,3

La volatilidad relativa entre la acetona y el isopropanol ha sido promediada (3,01, [Figura 6.10](#)), ya que esta no variaba acusadamente en función de la temperatura. Sin embargo, la volatilidad relativa entre el isopropanol y el agua varía de forma muy brusca al presentar azeótropo ([Figura 6.12](#)). Es por ello por lo que el análisis del método se ha realizado para distintas temperaturas.

A la vista de los resultados obtenidos en la [Tabla 6.11](#), se puede concluir que la mejor opción es la secuencia indirecta, ya que el flujo mínimo de vapor requerido es menor que en el caso de secuencia directa para la mayoría de las temperaturas. Para temperaturas más cercanas al azeótropo (353,10 K), la secuencia directa sería mejor opción que la indirecta.

6.6.4. Columna de destilación C-302

Siguiendo la secuencia indirecta, se ha introducido en el simulador la primera columna de destilación (equipo C-302 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)). El condensador de la columna es parcial para eliminar volátiles presentes en el destilado y opera a una temperatura de 30 °C (agua de refrigeración como servicio auxiliar) y a una presión de 1,01 bar.

Como parámetros iniciales, se han introducido 50 etapas para asegurar que se alcanza el equilibrio con una relación de reflujo de 2,5. La corriente 22 se ha introducido en la etapa 16 y la corriente 24 en la etapa 19.

El primer criterio de diseño impuesto es que la fracción molar de agua por colas sea la mayor posible atendiendo a los resultados de la [Tabla 6.10](#) (pureza molar máxima de agua 99,99% con respecto a diacetona alcohol). Se ha escogido este criterio con el objetivo de no perder una gran cantidad de isopropanol por esta corriente y para que, en la posterior recirculación, la recuperación de acetona en el absorbedor C-301 sea favorable. Como valor inicial en lazo abierto, se ha seleccionado una fracción molar de agua en colas del 99,95%. Para cumplirlo, se ha variado la ratio entre el destilado y la alimentación desde 0,1 a 0,3, dando como resultado inicial 0,164.

El otro criterio de diseño impuesto ha sido que el porcentaje de recuperación de agua por colas sea el mayor posible. Se ha establecido este criterio con el objetivo de minimizar el flujo de la corriente que se introduce a la siguiente torre para reducir los requerimientos de servicios auxiliares en el condensador y ebullición (columna C-303 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)).

En lazo abierto, se ha seleccionado un porcentaje inicial de recuperación de agua por colas del 99% mol. Para escoger este valor inicial se ha realizado un análisis del porcentaje molar de recuperación de agua en función de la relación de reflujo ([Figura 6.29](#)).



Figura 6.40. Recuperación de Agua en la corriente de colas en función de la relación de reflujo de C-302. Fracción molar de Agua 0,9995.

Se ha seleccionado inicialmente un porcentaje molar de recuperación de agua en colas del 99% por estar a una distancia de entorno al 1% del porcentaje molar de recuperación máximo (99,66%, [Figura 6.29](#)). Para cumplir este segundo criterio, se ha variado la relación de reflujo entre 0,1 y 2, dando como resultado 0,88. El ratio destilado-alimentación para esta relación de reflujo es de 0,165.

En el apartado [6.7. Recirculación y ajuste](#) se explica cómo estos dos criterios de diseño de la columna C-302 han sido modificados tras introducir las recirculaciones del proceso.

Los perfiles de composición iniciales C-302 se muestran en la [Figura 6.30](#).

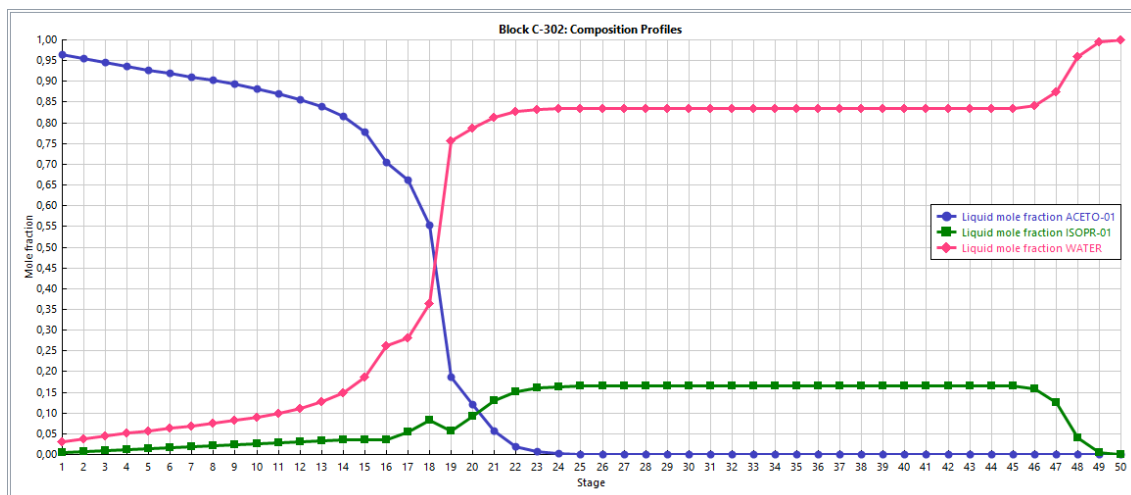


Figura 6.41. Perfiles de composición iniciales en C-302.

Reajustando el número de etapas y las etapas de alimentación, se obtuvieron los perfiles mostrados en la [Figura 6.31](#).

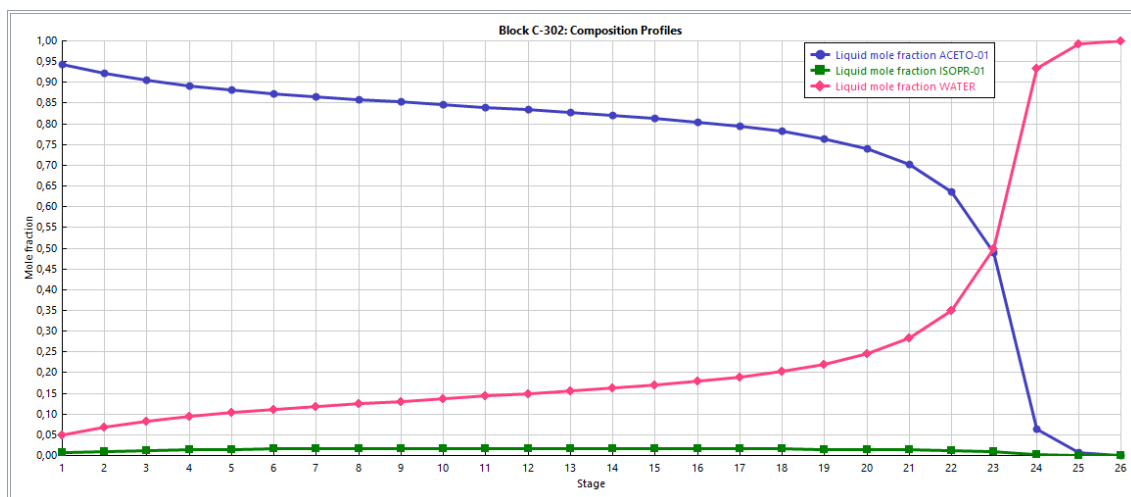


Figura 6.42. Perfiles de composición en C-302 para 26 etapas. Etapas de alimentación: 23 y 24.

En estas condiciones, el ratio destilado-alimentación es de 0,158 y la relación de reflujo de 0,56, que supone un 36,36% menos que la relación de reflujo inicial (0,88).

En el apartado [6.9. Perfiles de composición finales](#), se presentan los perfiles de composición finales en la columna C-302 ([Figura 6.41](#)) una vez realizadas las recirculaciones de reactivos y de agua (corrientes 11 y 48 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)), el ajuste de parámetros de operación del proceso y la optimización económica.

Los parámetros geométricos finales de este equipo están recogidos en su correspondiente hoja de especificaciones (“[ANEXO VI - Equipos - Hoja de especificación C-302](#)” [ANEXO VI - Equipos](#)), mientras que los criterios de diseño finales se exponen en el apartado [6.10. Especificaciones finales](#).

Las corrientes que abandonan la columna C-302 se muestran a continuación (*Tabla 6.12*).

Tabla 6.12. Corrientes que abandonan la columna C-302 (corrientes 33, 35 y 36 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Corriente	35	36	33
Desde	C-302	P-303 A/B	P-304 A/B
Hasta	L.B.2	C-303	E-304
Temperatura (°C)	30,00	30,00	99,36
Presión (bar)	1,01	1,01	1,01
Fracción de vapor (molar)	1,0000	0,0000	0,0000
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	0,0100	63,0568	335,4536
Hidrógeno	0,0062	0,0121	1,33E-15
Propileno	0,0001	0,0067	8,91E-15
Acetona	0,0036	59,2336	0,1288
Diisopropil éter	1,14E-05	0,0456	9,43E-09
Isopropanol	9,58E-06	0,3722	0,0122
Agua	0,0001	3,3866	335,2859
Diacetona alcohol	0,0000	0,0000	0,0267
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Fracciones molares			
Hidrógeno	0,6170	0,0002	3,98E-18
Propileno	0,0142	0,0001	2,66E-17
Acetona	0,3559	0,9394	0,0004
Diisopropil éter	0,0011	0,0007	2,81E-11
Isopropanol	0,0010	0,0059	3,62E-05
Agua	0,0108	0,0537	0,9995
Diacetona alcohol	0,0000	0,0000	7,97E-05
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000

6.6.5. Columna de destilación C-303

Continuando la secuencia indirecta de destilación, se ha introducido en el simulador la segunda columna (equipo C-303 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos). El condensador de esta columna es parcial, con el fin de eliminar volátiles presentes en el destilado y opera a una temperatura de 30 °C (agua de refrigeración como servicio auxiliar) y a una presión de 1,01 bar.

Como parámetros iniciales, se han establecido 50 etapas para asegurar que se alcanza el equilibrio con una relación de reflujo de 5. La corriente 36 se ha introducido en la etapa 25.

El primer criterio de diseño impuesto ha sido que el porcentaje de recuperación molar de acetona en la corriente líquida de destilado sea del 99,9%. Se ha seleccionado este valor con el fin de no perder el producto deseado por las otras dos corrientes (corrientes 44 y 45 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Para cumplir este criterio, se ha modificado la ratio entre el destilado y la alimentación entre 0,8 y 0,97.

El segundo criterio de diseño establecido ha sido que la pureza de acetona en la corriente líquida de destilado sea del 99,5% en masa (tal y como se exige en la especificación del producto, apartado 3.3. Especificaciones de productos). Para ello, se ha modificado la relación de reflujo de la columna entre 1 y 5.

Los resultados iniciales para la ratio destilado-alimentación y para la relación de reflujo son 0,95 y 2,82 respectivamente. Los perfiles de composición iniciales C-303 se muestran en la Figura 6.32.

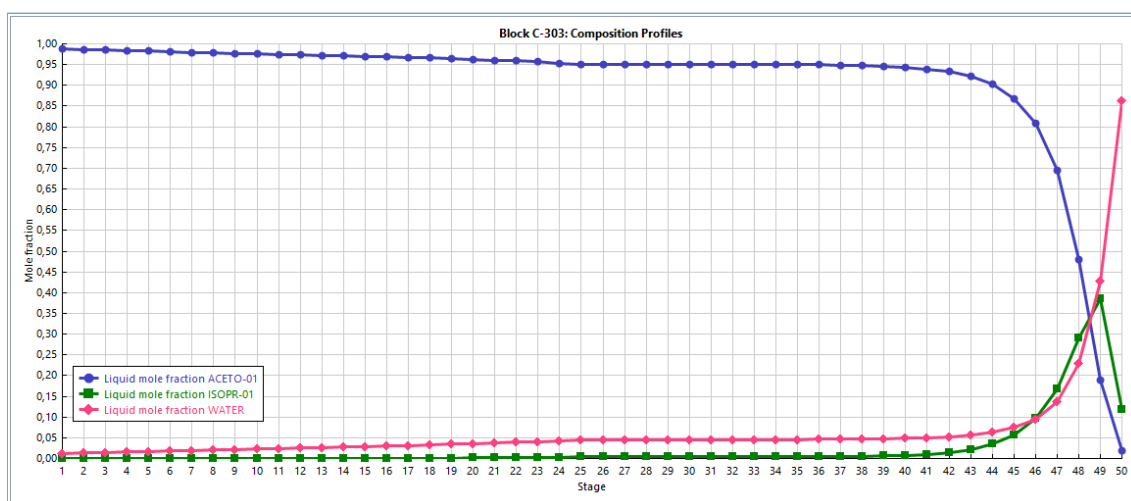


Figura 6.43. Perfiles iniciales de composición en C-303.

Reajustando la etapa de alimentación, se han obtenido los perfiles de composición mostrados en la Figura 6.33.

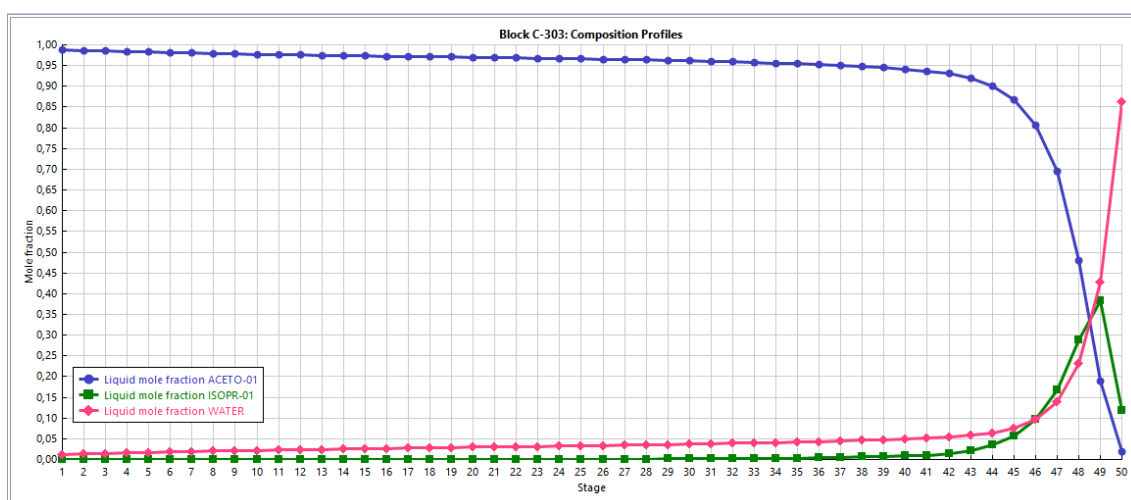


Figura 6.44. Perfiles de composición en C-303 con ajuste de etapa de alimentación (etapa 41).

El ratio destilado-alimentación obtenido es de 0,95 y la relación de reflujo de 2,52, que supone un 10,64% menos que la relación de reflujo inicial (2,82).

En el apartado [6.9. Perfiles de composición finales](#), se presentan los perfiles de composición finales en la columna C-303 ([Figura 6.42](#)) una vez realizadas las recirculaciones de reactivos y de agua (corrientes 11 y 48 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)), el ajuste de parámetros de operación del proceso y la optimización económica.

Los parámetros geométricos finales de este equipo están recogidos en su correspondiente hoja de especificaciones (“[ANEXO VI - Equipos - Hoja de especificación C-303](#)” [ANEXO VI - Equipos](#)), mientras que los criterios de diseño finales se exponen en el apartado [6.10. Especificaciones finales](#).

Las corrientes que abandonan la columna C-303 se muestran a continuación ([Tabla 6.13](#)).

Tabla 6.13. Corrientes que abandonan la columna C-303 (corrientes 11, 45 y 46 en el diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)).

Corriente	45	11	46
Desde	V-303	P-306 A/B	P-305 A/B
Hasta	L.B.2	V-101	L.B.3
Temperatura (°C)	30,00	78,97	30,00
Presión (bar)	1,01	1,01	1,01
Fracción de vapor (molar)	1,0000	0,0000	0,0000
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	0,0011	3,1349	59,9207
Hidrógeno	0,0007	8,99E-25	0,0114
Propileno	1,90E-05	0,0000	0,0067
Acetona	0,0004	0,0587	59,1744
Diisopropil éter	1,30E-06	2,27E-10	0,0456
Isopropanol	5,41E-10	0,3720	0,0002
Agua	3,19E-06	2,7042	0,6823
Diacetona alcohol	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Fracciones molares			
Hidrógeno	0,6074	2,87E-25	0,0002
Propileno	0,0169	0,0000	0,0001
Acetona	0,3717	0,0187	0,9875
Diisopropil éter	0,0012	7,25E-11	0,0008
Isopropanol	4,80E-07	0,1187	2,85E-06
Agua	0,0028	0,8626	0,0114
Diacetona alcohol	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000

6.7. Recirculación y ajuste

Una vez finalizada la simulación del proceso en lazo abierto, se ha obtenido una capacidad de producción molar de producto de $59,92 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ con una pureza del 99,5% en masa de acetona. Esta capacidad de producción molar se corresponde mediante la [Ecuación 6.1](#) con una capacidad de producción en masa de 27.771 toneladas anuales, que sobrepasa la capacidad de producción establecida en las bases de diseño del proceso (27.000 toneladas anuales, apartado [3.1. Capacidad de producción](#)) en un 2,86%.

El siguiente paso que se ha dado ha sido recircular la corriente 11 ([Tabla 6.13](#)) para mezclarla con la alimentación fresca de isopropanol (corriente 10 en el diagrama de flujo, "[A2-PFD-101-2](#)" [ANEXO IV - Planos](#)). La suma de estas dos corrientes da lugar a la corriente 12, que es la nueva entrada a la sección de reacción en lazo cerrado.

Tras este paso, se ha continuado con la recirculación de parte del agua proveniente de la columna C-302. Para ello, se ha introducido un depósito horizontal (equipo V-304 en el diagrama de flujo, "[A2-PFD-101-2](#)" [ANEXO IV - Planos](#)) para dividir el flujo de la corriente de colas de la columna C-302 (corriente 34) entre la corriente 47 y la corriente 55. La corriente 47 es recirculada hasta el tanque V-102, que da lugar a la corriente 49 y es la nueva corriente de disolvente en lazo cerrado empleada en el absorbedor C-301. Por otro lado, la corriente 55 abandona el proceso por el límite de batería de la planta L.B.4. La relación entre el flujo de la corriente 55 y el flujo de la corriente 34 ha sido modificada manualmente para alcanzar el mayor porcentaje de recuperación de acetona en el absorbedor C-301 (99,99%). En pasos anteriores, el criterio de diseño de este equipo era la recuperación del 99,9% de la acetona proveniente de la corriente 20 por la corriente 24 (ver apartado [6.6.2. Recuperación de acetona - Absorbedor C-301](#)).

En estas condiciones de lazo cerrado, los criterios de diseño de la columna C-302 han sido modificados, ya que la fracción molar máxima de agua por colas no podía ser tan elevada como se estableció en un principio (99,95%, ver apartado [6.6.4. Columna de destilación C-302](#)). Esto es debido a que, al introducir la recirculación de agua, la corriente 24 proveniente del absorbedor (una de las dos alimentaciones a la columna C-302) contiene más cantidad de diacetona alcohol. Esto hace que, según la secuencia de destilación indirecta, la máxima fracción molar de agua por colas sea menor. Por lo tanto, para cada simulación del proceso en lazo cerrado se ha ajustado la fracción molar de agua en la corriente de colas de la columna C-302 y, a partir de este criterio, se ha establecido la segunda especificación de este equipo, el porcentaje de recuperación de agua (inicialmente del 99%, apartado [6.6.4. Columna de destilación C-302](#)).

Por otro lado, los criterios de diseño iniciales de la sección de reacción y de la columna C-303 (explicados en los apartados [6.5. Sección de reacción](#) y

6.6.5. *Columna de destilación C-303*, respectivamente) se han mantenido fijos en lazo cerrado.

Tras estas premisas, se han ajustado los parámetros de operación de los equipos con el objetivo de cumplir los criterios de diseño especificados en cada uno de ellos para la simulación del proceso en lazo cerrado.

Finalmente, después del ajuste de los parámetros de operación, se ha modificado el flujo molar de alimentación para alcanzar la capacidad de producción de producto deseada. El flujo molar resultante de la corriente 10 ha sido de $83,94 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$, con el que se ha obtenido una capacidad de producción de 27.071 toneladas anuales con una pureza del 99,5% en masa de acetona. Esta capacidad de producción final difiere en un 0,23% de la capacidad de producción justificada en el apartado [3.1. Capacidad de producción](#), de 27.000 toneladas anuales.

6.8. Optimización económica

En este apartado, se ha realizado un análisis económico con el fin de determinar la influencia de la temperatura de entrada al reactor R-201 A/B. Previo a este análisis, se han modificado los parámetros de operación de los equipos de la sección de separación (número de etapas en el absorbedor C-301 y relaciones de reflujo para las columnas de destilación C-302 y C-303) con el fin de obtener los valores óptimos desde un punto de vista económico.

Los parámetros económicos analizados han sido los costes de capital (CAPEX), los costes de operación (OPEX) y el valor actual neto (VAN) de la planta.

Los precios de las corrientes de entrada y de salida del proceso, así como los costes de los servicios auxiliares han sido descritos en el apartado [3. Bases de diseño del proceso](#).

6.8.2. Columna de destilación C-302

La optimización económica de la columna de destilación C-302 se ha realizado variando el número de etapas y calculando los costes de capital y de operación del equipo. Para cada caso, se han modificado las etapas de alimentación a la columna con el objetivo de introducir las corrientes 24 y 22 en las etapas para las cuales la composición es muy similar.

Los resultados del análisis económico de la columna C-302 en función de la relación de reflujo se muestran a continuación en la [Figura 6.34](#) y la [Tabla 6.14](#).



Figura 6.45. Costes de capital más costes de operación (CAPEX + OPEX) de la columna C-302 en función de la relación de reflujo.

Tabla 6.14. Resultados de la Figura 6.34.

CASO	Nº ETAPAS	Relación de reflujo	CAPEX (€)	OPEX (€año ⁻¹)	CAPEX + OPEX (€año ⁻¹)
1	17	1,49	877.900	133.128	1.011.028
2	16	1,51	861.000	133.736	994.736
3	15	1,54	855.600	135.032	990.632
4	14	1,57	850.900	136.466	987.366
5	13	1,62	830.500	138.456	968.956
6	12	1,68	827.900	141.324	969.224
7	11	1,79	785.900	145.832	931.732
8	10	1,97	805.000	153.679	958.679
9	9	2,36	852.000	170.628	1.022.628
10	8	3,49	925.000	220.014	1.145.014

De los resultados representados en la [Figura 6.34](#), se puede apreciar que existe un mínimo en la curva para una relación de reflujo de 1,79, que se corresponde con 11 etapas y unos costes de capital más costes de operación de 931.732 €año⁻¹ ([Tabla 6.14](#)). Por lo tanto, se han establecido 11 etapas como parámetro final de la columna C-302, donde la corriente 22 se alimenta en la etapa número 8 y la corriente 24 en la etapa número 9.

6.8.3. Columna de destilación C-303

A continuación, se ha realizado el mismo procedimiento descrito en el anterior apartado para la columna de destilación C-303.

Los resultados del análisis económico de la columna C-303 en función de la relación de reflujo se muestran a continuación en la [Figura 6.35](#) y la [Tabla 6.15](#).



Figura 6.46. Costes de capital más costes de operación (CAPEX + OPEX) de la columna C-303 en función de la relación de reflujo.

Tabla 6.15. Resultados de la [Figura 6.35](#).

CASO	Nº ETAPAS	Relación de reflujo	CAPEX (€)	OPEX (€año ⁻¹)	CAPEX + OPEX (€año ⁻¹)
1	21	5,18	1.178.100	240.932	1.419.032
2	22	4,65	1.123.200	222.190	1.345.390
3	23	4,27	1.137.800	210.027	1.347.827
4	24	4,02	1.142.200	201.584	1.343.784
5	25	3,78	1.148.300	193.989	1.342.289
6	26	3,60	1.136.600	187.969	1.324.569
7	27	3,45	1.140.400	183.052	1.323.452
8	28	3,32	1.136.600	177.917	1.314.517
9	29	3,22	1.147.000	174.638	1.321.638
10	30	3,14	1.154.200	171.783	1.325.983
11	31	3,06	1.187.400	169.318	1.356.718
12	32	2,99	1.197.600	167.130	1.364.730
13	33	2,94	1.220.300	165.272	1.385.572
14	34	2,89	1.244.600	163.640	1.408.240
15	35	2,84	1.268.000	162.192	1.430.192
16	36	2,80	1.278.700	160.904	1.439.604

A la vista de los resultados mostrados en la [Figura 6.35](#), se puede observar que existe un mínimo en la curva para una relación de reflujo de 3,32, que se corresponde con 28 etapas y unos costes de capital más costes de operación de 1.314.517 €año⁻¹ ([Tabla 6.15](#)). Por lo tanto, se han establecido 28 etapas como parámetro final de la columna C-303, donde la corriente 36 se alimenta en la etapa número 20.

6.8.4. Temperatura de operación

Finalmente, se ha realizado un análisis económico del proceso en función de la temperatura de entrada al reactor (equipo R-201 A/B en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” [ANEXO IV - Planos](#)). Para ello, se ha modificado la temperatura de operación desde 250 °C hasta 420 °C y se han calculado los costes de capital, de operación y el valor actual neto de la planta para cada caso. Se han establecido estos límites en el análisis por estar dentro del rango de operación del reactor (entre 200 °C y 500 °C). El límite superior es de 420 °C, pues para valores superiores a este, la transmisión de calor en el reactor no es adecuada (temperatura de salida del fluido térmico inferior a la temperatura de entrada de reactivos).

Para cada simulación dentro del análisis, se han ajustado los parámetros geométricos y de operación de los equipos, con el fin de mantener los criterios de diseño para cada uno de ellos (descritos en anteriores apartados).

Los precios de las corrientes que han sido seleccionados para este análisis han sido los de la situación más favorable, es decir, se ha tomado el precio más bajo de la corriente 10 (1.046 \$ por tonelada métrica, apartado [3.2. Especificaciones de materias primas](#)) y el precio más elevado para la corriente 46 (1.401 \$ por tonelada métrica, apartado [3.3. Especificaciones de productos](#)). Por otro lado, se ha seleccionado el precio más elevado de la corriente 54 (5 €·kg⁻¹, apartado [3.3. Especificaciones de productos](#)) y se han mantenido los precios de los servicios auxiliares expuestos en el apartado [3.4. Especificaciones de servicios auxiliares](#).

Además, se ha tenido en cuenta en este estudio los equipos para los cuáles hay dos unidades en la planta (“[ANEXO VI – Equipos – Lista de equipos](#)” [ANEXO VI - Equipos](#)).

Los resultados del análisis económico del proceso para cada temperatura se muestran a continuación en la [Figura 6.36](#), en la [Figura 6.37](#) y en la [Tabla 6.16](#).

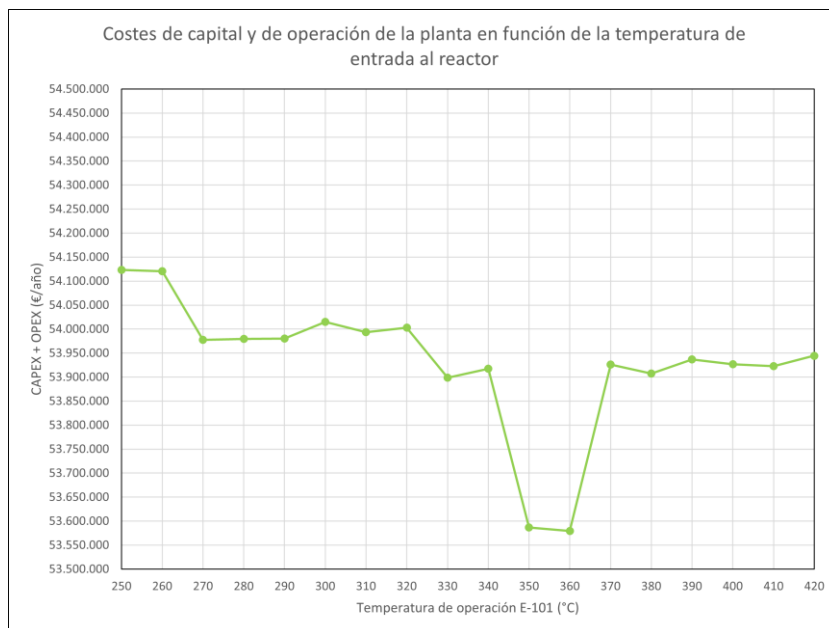


Figura 6.47. Costes de capital más costes de operación de la planta (CAPEX + OPEX) en función de la temperatura de operación (corriente 14, cambiador E-101 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

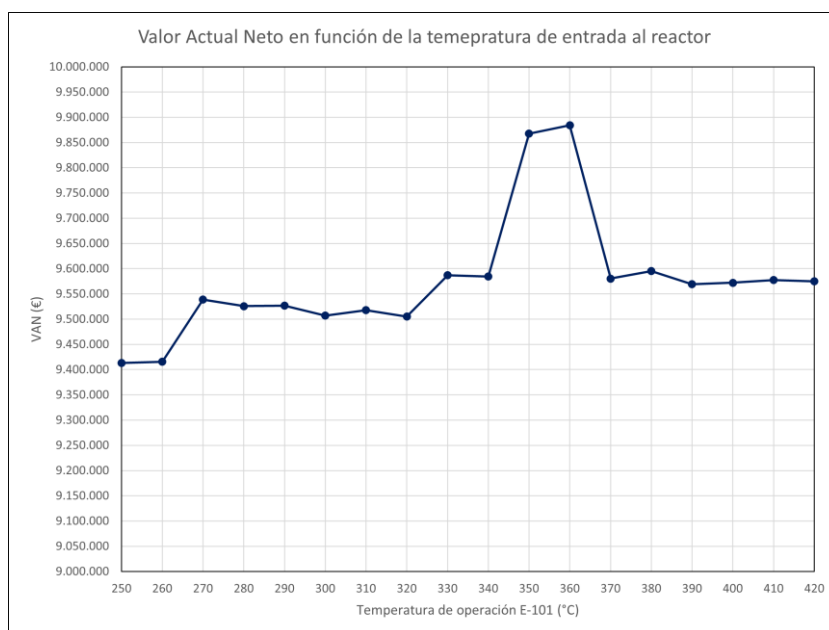


Figura 6.48. Valor actual neto (VAN) de la planta en función de la temperatura de operación (corriente 14, cambiador E-101 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 6.16. Resultados de la *Figura 6.36* y de la *Figura 6.37*.

T ₁₄ (°C)	CAPEX (€)	OPEX (€·año ⁻¹)	CAPEX+OPEX (€·año ⁻¹)	VAN (€)
250	12.579.700	41.543.600	54.123.300	9.413.470
260	12.578.900	41.541.800	54.120.700	9.415.800
270	12.433.000	41.544.800	53.977.800	9.538.790
280	12.437.900	41.541.700	53.979.600	9.525.730
290	12.436.800	41.543.700	53.980.500	9.526.560
300	12.457.200	41.557.800	54.015.000	9.507.250
310	12.455.200	41.538.300	53.993.500	9.517.950
320	12.459.400	41.543.800	54.003.200	9.504.930
330	12.375.200	41.523.500	53.898.700	9.586.850
340	12.376.700	41.540.900	53.917.600	9.584.630
350	12.042.800	41.544.100	53.586.900	9.867.820
360	12.035.300	41.544.300	53.579.600	9.884.370
370	12.377.500	41.548.800	53.926.300	9.580.310
380	12.374.400	41.533.100	53.907.500	9.595.090
390	12.389.000	41.547.700	53.936.700	9.569.260
400	12.388.500	41.538.500	53.927.000	9.572.130
410	12.385.300	41.537.500	53.922.800	9.577.390
420	12.385.000	41.559.500	53.944.500	9.574.740

Observando los resultados mostrados en la *Figura 6.36*, se puede destacar la presencia de un mínimo en la curva que representa la suma de los costes de capital y de operación de la planta. Este punto singular se corresponde con una temperatura de entrada al reactor de 360 °C, para la cual, la suma de los costes de operación y de capital es de 53.579.600 €·año⁻¹. Por otro lado, en la *Figura 6.37* está presente un valor máximo en la curva que representa el VAN. Este último se corresponde con la misma temperatura de operación, 360°C, y es de 9.884.370 €.

Con el fin de estudiar la magnitud de los resultados se ha elaborado la siguiente tabla (*Tabla 6.17*), donde se representan los valores promedios de las variables económicas analizadas y las desviaciones de los anteriores puntos singulares con respecto a estos.

Tabla 6.17. Valores promedio del VAN y de la suma del CAPEX y el OPEX de la planta. Diferencias con respecto a los resultados para 360°C de la *Tabla 6.16*.

CAPEX + OPEX (€·año ⁻¹)	DIF CAPEX + OPEX (%)	DIF CAPEX + OPEX (€·año ⁻¹)	VAN (€)	DIF VAN (%)	DIF VAN (€)
53.930.067	0,65	350.467	9.574.615	1,68	161.145

De la anterior tabla se puede apreciar cómo las diferencias porcentuales con respecto a los resultados de los parámetros económicos para la temperatura de operación de 360 °C no son muy elevadas. Sin embargo, estos porcentajes suponen unas diferencias de 350.467 €·año⁻¹ para la suma del CAPEX y del OPEX y de 161.145 € para el VAN. Estas desviaciones han sido consideradas como valores relevantes en el análisis económico realizado, por lo que se ha decidido seleccionar una temperatura de operación de 360 °C en base a estos resultados.

6.9. Perfiles de composición finales

En este punto se muestran los perfiles de composición finales de los equipos simulados a lo largo del apartado 6. *Simulación y optimización del proceso*. Específicamente, se han representado los perfiles de composición finales del reactor R-201 A/B, del absorbedor C-301 y de las columnas de destilación C-302 y C-303 (ver diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos). Además, también se muestra el perfil de temperaturas en el reactor R-201 A/B.

Los perfiles finales de composición de acetona y de isopropanol en el reactor principal R-201 A/B y en el reactor auxiliar de referencia (R-201-REF) están representados en la siguiente figura.

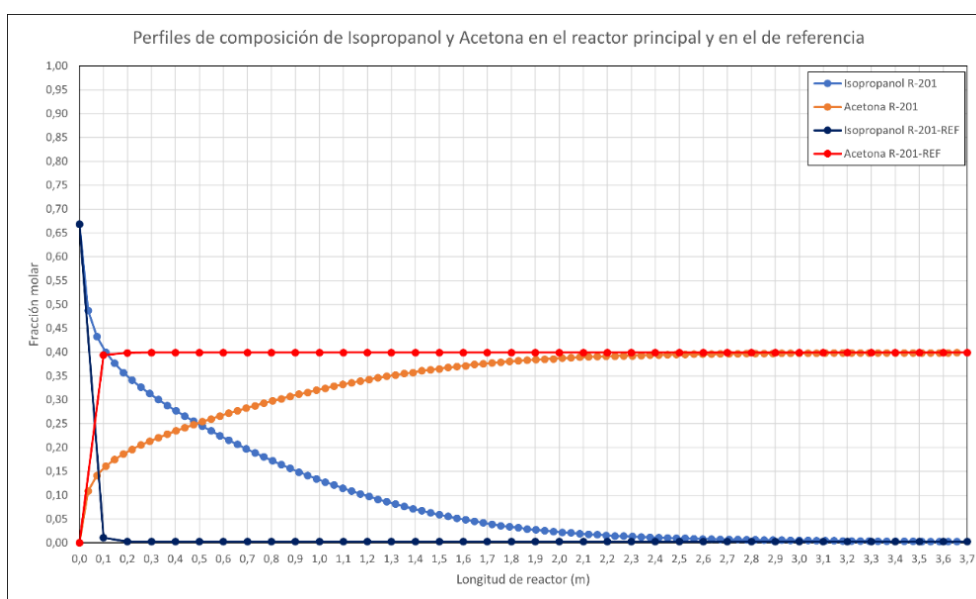


Figura 6.49. Perfiles de composición finales de acetona y de isopropanol en el reactor principal (R-201 A/B en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) y en el reactor auxiliar de referencia (R-201-REF) en función de la longitud del reactor.

Los perfiles de temperatura de la corriente de proceso y de la sal fundida en el reactor principal (R-201 A/B en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) se muestran en la siguiente figura.

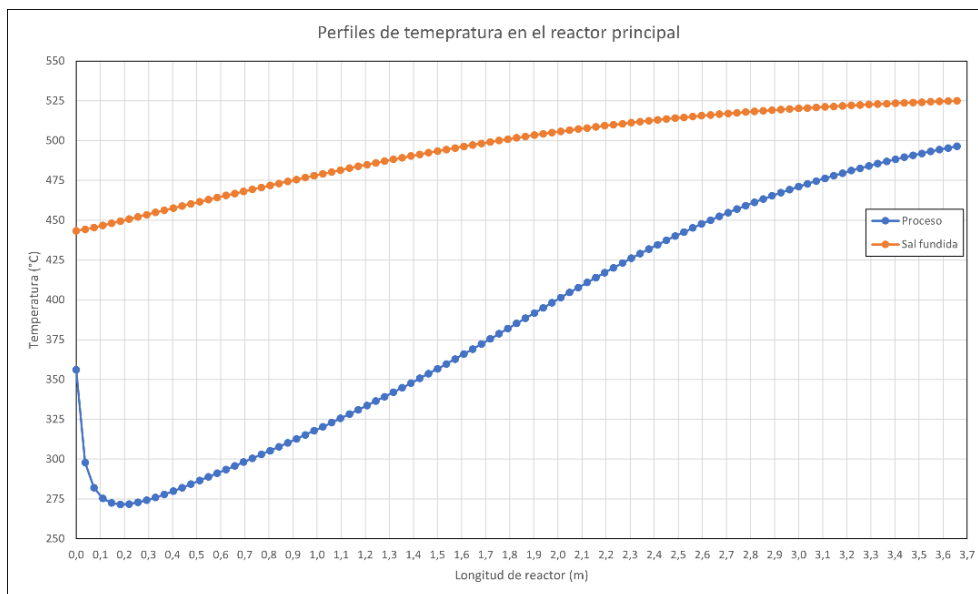


Figura 6.50. Perfiles finales de temperatura de la corriente de proceso (desde corriente 14 hasta corriente 18 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos) y de la sal fundida en función de la longitud del reactor R-201 A/B.

En cuanto al absorbedor C-301, se han representado en la siguiente figura los perfiles de composición de acetona en fase líquida y gaseosa para cada etapa de equilibrio.

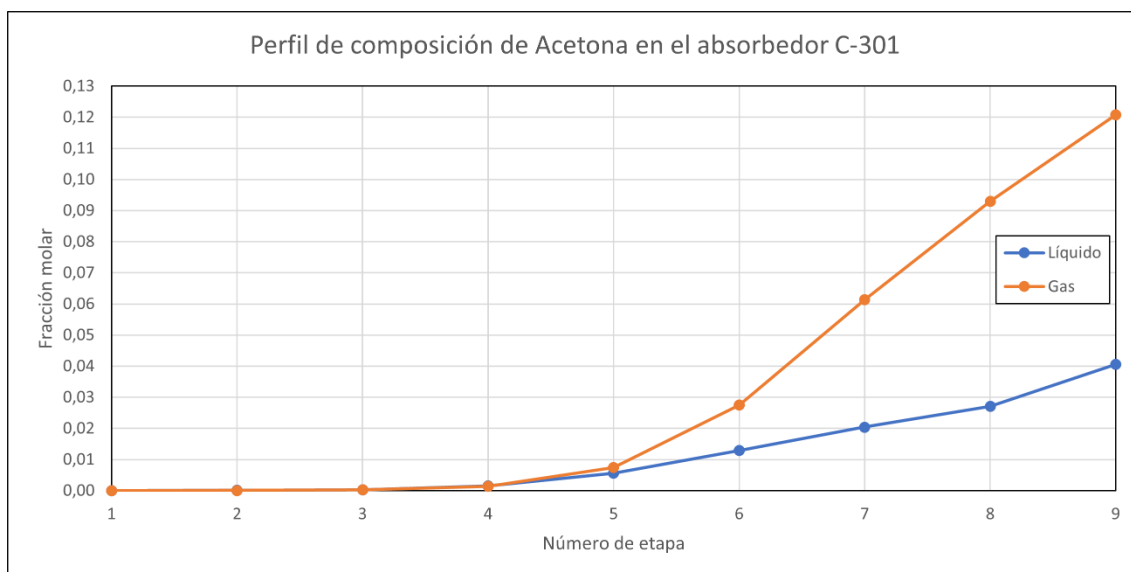


Figura 6.51. Perfil de composición final de acetona en el absorbedor C-301.

Por otro lado, se muestran en las siguientes figuras los perfiles de composición finales en fase líquida en la columna C-302 (Figura 6.41) y en la columna C-303 (Figura 6.42).

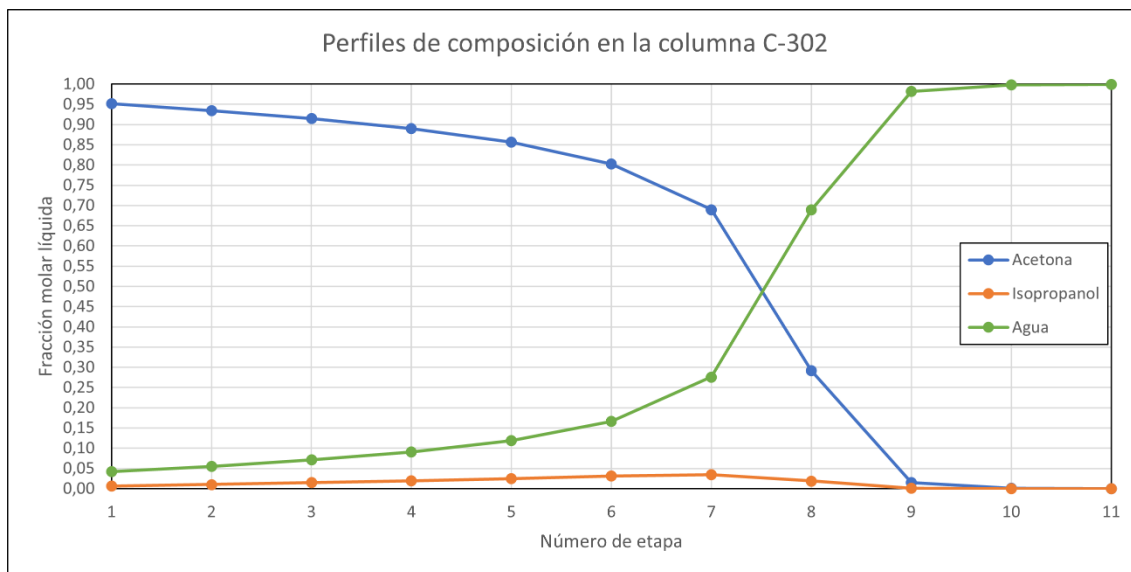


Figura 6.52. Perfiles de composición finales en fase líquida en la columna C-302. Etapas de alimentación: 8 y 9 (corrientes 22 y 24 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

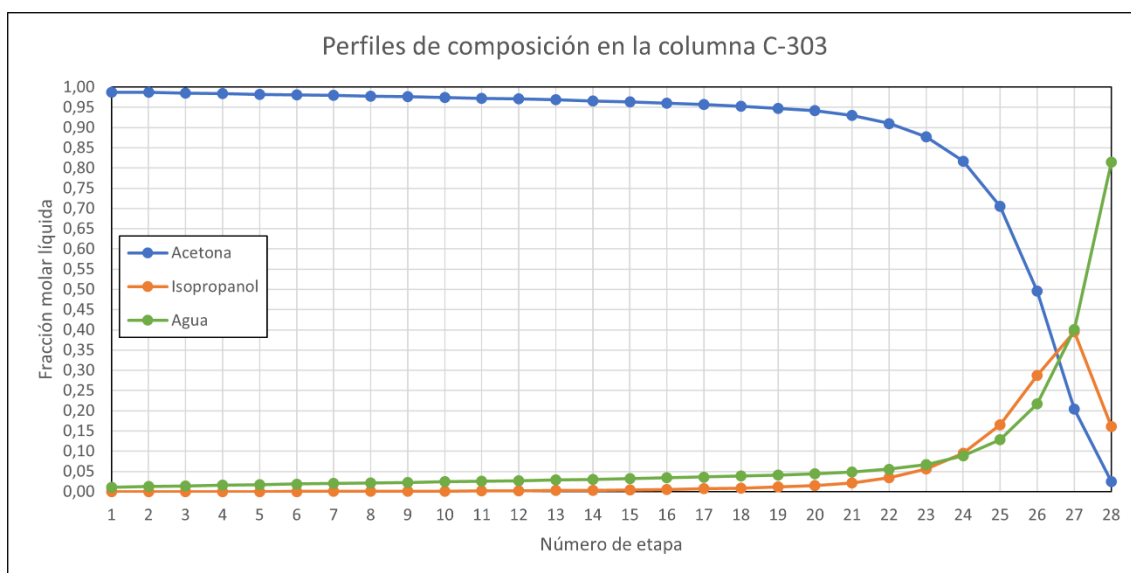


Figura 6.53. Perfiles de composición finales en fase líquida en la columna C-303. Etapa de alimentación: 20 (corriente 36 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

6.10. Especificaciones finales

En el reactor R-201 A/B se han mantenido los criterios de diseño iniciales expuestos en el apartado 6.5. *Sección de reacción*. Para cumplir el criterio de la caída de presión en este equipo (-1,5 bar) se han seleccionado finalmente 400 tubos. Por otro lado, para cumplir el criterio de la distancia porcentual al equilibrio (0,02%) se ha empleado un flujo másico de sal fundida de 28.450 kg·h⁻¹. La temperatura final seleccionada para la entrada de reactivos ha sido de 360°C en base al análisis económico descrito en el apartado 6.8.4. *Temperatura de operación*.

Por otro lado, el porcentaje final de recuperación de acetona en la corriente 24 que abandona el absorbedor C-301 es del 99,99% con respecto a las corrientes 51 y 20. Para alcanzar este valor, el ratio entre los flujos molares de las corrientes 56 y 34 es de 0,073.

En cuanto a la columna de destilación C-302, la fracción molar final de agua en colas (corriente 33 en el diagrama de flujo, "**A2-PFD-101-2**" [ANEXO IV - Planos](#)) es de 0,9989. Para alcanzarla, el ratio entre el destilado y la alimentación a la torre es de 0,154. El porcentaje de recuperación final de agua por colas es del 99,25%, para el cual la relación de reflujo es de 1,93.

Finalmente, en la columna C-303 se han mantenido los criterios de diseño detallados en el apartado [6.6.5. Columna de destilación C-303](#). Se recupera el 99,9% de la acetona proveniente de la corriente 36 en la corriente final de producto con una relación de reflujo de 3,18. Para alcanzar la pureza del 99,5% en masa de acetona en la corriente 46, el ratio entre el destilado y la alimentación a la torre es de 0,962.

7. Valoración económica del proyecto

Tal y como se describió en el apartado 3. *Bases de diseño del proceso*, existe una amplia variación del precio de la materia prima empleada en la planta y el precio de los productos. En consecuencia, para la realización de la valoración económica del proyecto, se han definido tres situaciones distintas y se ha realizado un estudio económico en función del precio del subproducto principal (hidrógeno). Los parámetros económicos que han sido empleados en estos análisis han sido el valor actual neto de la planta (VAN) y la suma de los costes de operación (CAPEX) y los costes de capital (CAPEX).

La herramienta que ha sido empleada para la realización de la valoración económica del proyecto ha sido el software de simulación *Aspen Plus Versión 11* (*AspenTech, 2019*) y, en concreto, se ha hecho uso de la extensión “*Aspen Process Economic Analyzer*”. Como ejemplo se ha adjuntado uno de los ficheros Excel que genera el software para la situación más favorable de todas las posibles, nombrado como “*7_Valoracion_economica_ejemplo.xls*”.

7.1. Situación más favorable

En este primer contexto económico el precio de la materia prima es el más bajo posible (1.046 \$·t⁻¹, apartado 3.2. *Especificaciones de materias primas*), mientras que el precio del producto es el más elevado de los datos recopilados (1.401 \$·t⁻¹, apartado 3.3. *Especificaciones de productos*).

Bajo estas premisas, se ha variado el precio de la corriente rica en hidrógeno obtenida como subproducto de la planta (corriente 54 del diagrama de flujo, “*A2-PFD-101-2*” *ANEXO IV - Planos*) desde 1,5 €·kg⁻¹ hasta 5 €·kg⁻¹ (apartado 3.3. *Especificaciones de productos*) y se han calculado los parámetros económicos citados anteriormente (VAN, CAPEX y OPEX). Los resultados de este primer análisis se muestran a continuación en la *Figura 7.1* y en la *Tabla 7.1*.

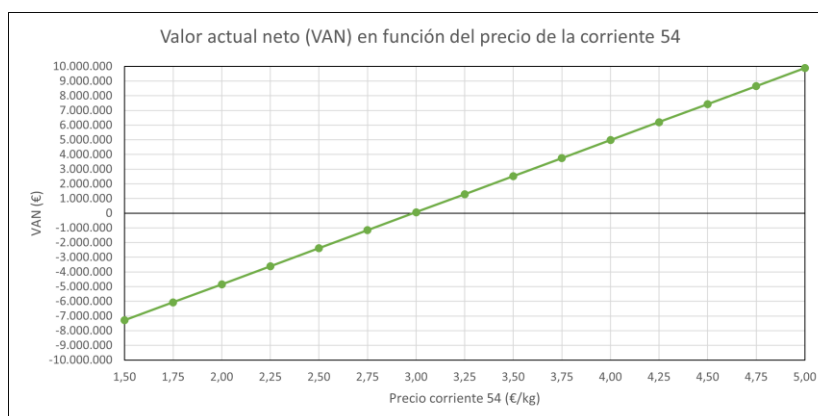


Figura 7.54. Variación del valor actual neto de la planta (VAN) en función del precio del hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, “*A2-PFD-101-2*” *ANEXO IV - Planos*) para la situación más favorable.

Tabla 7.1. Resultados del análisis de la situación económica más favorable.

CASO	Precio H ₂ (€·kg ⁻¹)	CAPEX+OPEX (€·año ⁻¹)	NPV (€)
1	5,00	53.579.600	9.884.370
2	4,75	53.579.600	8.657.270
3	4,50	53.579.600	7.430.160
4	4,25	53.579.600	6.203.060
5	4,00	53.579.600	4.975.960
6	3,75	53.579.600	3.748.850
7	3,50	53.579.600	2.521.750
8	3,25	53.579.600	1.294.650
9	3,00	53.579.600	67.545
10	2,75	53.579.600	-1.159.560
11	2,50	53.579.600	-2.386.660
12	2,25	53.579.600	-3.613.760
13	2,00	53.579.600	-4.840.860
14	1,75	53.579.600	-6.067.960
15	1,50	53.579.600	-7.295.060

El primer comentario que se puede realizar observando los datos obtenidos de la [Tabla 7.1](#) es que la suma de los costes de operación y los costes de capital se mantiene invariable en el análisis (53.579.600 €·año⁻¹). Esto no podría ser de otra manera, puesto que los equipos tienen los mismos parámetros geométricos y de operación en todas las situaciones analizadas.

La segunda conclusión que se puede sacar a partir de los resultados de la [Figura 7.1](#) y de la [Tabla 7.1](#) es que existe un cambio de tendencia en cuanto a la rentabilidad de la planta en torno a un precio del hidrógeno de 3,06 €·kg⁻¹. Por encima de este valor, el valor actual neto comienza a ser positivo, lo que supone que el proceso es rentable. En el caso más favorable de todos los presentados (5 €·kg⁻¹), el VAN es de 9.884.370 €. Sin embargo, la no rentabilidad de la planta se observa por debajo de este precio, donde el valor actual neto empieza a ser negativo hasta alcanzar un valor de -7.295.060 €.

7.2. Situación promedio

En este caso, tanto el precio de la materia prima como el precio del producto final es el promedio de los precios recopilados. El precio promedio del producto es de 999 \$·t⁻¹ (apartado [3.3. Especificaciones de productos](#)) mientras que el precio promedio de la materia prima es de 1.213 \$·t⁻¹ (apartado [3.2. Especificaciones de materias primas](#)).

Partiendo de esta base, se ha variado el precio de la corriente rica en hidrógeno obtenida como subproducto de la planta (corriente 54 del diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” [ANEXO IV - Planos](#)) desde 1,5 €·kg⁻¹ hasta 5 €·kg⁻¹ (apartado [3.3. Especificaciones de productos](#)) y se han calculado los parámetros económicos citados anteriormente (VAN, CAPEX y OPEX).

Los resultados de este segundo análisis se recogen a continuación en la [Figura 7.2](#) y en la [Tabla 7.2](#).

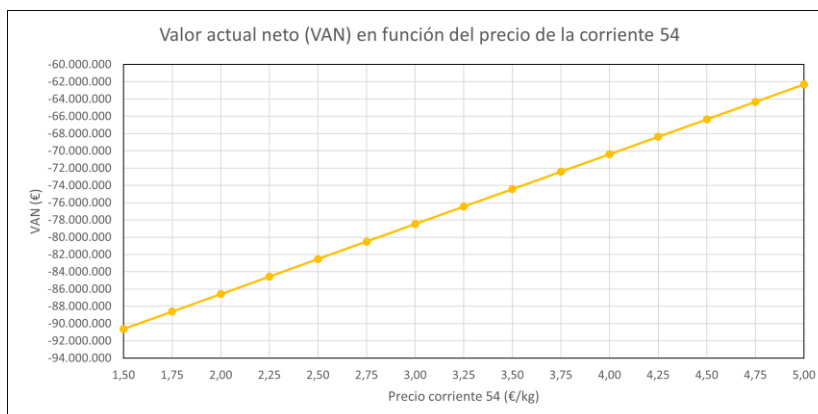


Figura 7.55. Variación del valor actual neto de la planta (VAN) en función del precio del hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos) para la situación promedio.

Tabla 7.2. Resultados del análisis de la situación económica promedio.

CASO	Precio H ₂ (€·kg ⁻¹)	CAPEX+OPEX (€·año ⁻¹)	NPV (€)
1	5,00	59.357.800	-62.320.900
2	4,75	59.357.800	-64.325.300
3	4,50	59.357.800	-66.337.200
4	4,25	59.357.800	-68.354.600
5	4,00	59.357.800	-70.379.900
6	3,75	59.357.800	-72.405.200
7	3,50	59.357.800	-74.430.600
8	3,25	59.357.800	-76.455.900
9	3,00	59.357.800	-78.481.200
10	2,75	59.357.800	-80.506.500
11	2,50	59.357.800	-82.531.800
12	2,25	59.357.800	-84.557.100
13	2,00	59.357.800	-86.582.400
14	1,75	59.357.800	-88.607.700
15	1,50	59.357.800	-90.633.000

Nuevamente, en la [Tabla 7.2](#) se puede observar la misma situación que en el caso anterior (apartado [7.1. Situación más favorable](#)) para la suma de los costes de operación y los costes de capital de la planta. Esta suma permanece constante en los 15 casos estudiados ya que en todo el análisis los equipos tienen los mismos parámetros geométricos y de operación. Sin embargo, en este caso son superiores, 59.357.800 €·año⁻¹ (un 10,78% más que el caso anterior), debido al aumento del precio de la materia prima desde 1.046 \$·t⁻¹ hasta 1.213 \$·t⁻¹.

Por otro lado, se puede apreciar tanto en la [Figura 7.2](#) como en la [Tabla 7.2](#) que el proceso no es rentable económicamente para ningún precio del hidrógeno dentro del rango de análisis. No se observa ningún resultado positivo del valor actual neto.

7.3. Situación menos favorable

En esta última situación, el precio seleccionado para la materia prima es el más elevado de todos los registrados ($1.551 \text{ \$t}^{-1}$, apartado 3.2. *Especificaciones de materias primas*) mientras que el precio seleccionado para el producto final es el más bajo de los recopilados ($834 \text{ \$t}^{-1}$, apartado 3.3. *Especificaciones de productos*).

Bajo estas indicaciones previas, se ha variado el precio de la corriente rica en hidrógeno obtenida como subproducto de la planta (corriente 54 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos) desde $1,5 \text{ €}\cdot\text{kg}^{-1}$ hasta $5 \text{ €}\cdot\text{kg}^{-1}$ (apartado 3.3. *Especificaciones de productos*) y se han calculado los parámetros económicos citados anteriormente (VAN, CAPEX y OPEX). Los resultados de este último análisis se muestran a continuación en la Figura 7.3 y en la Tabla 7.3.

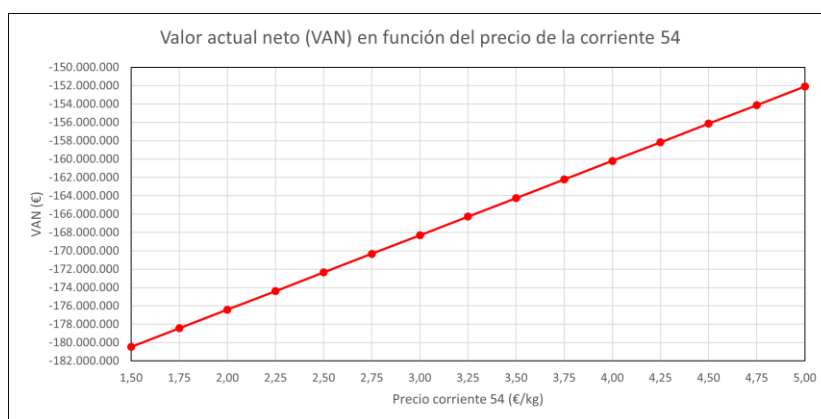


Figura 7.56. Variación del valor actual neto de la planta (VAN) en función del precio del hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos) para la situación menos favorable.

Tabla 7.3. Resultados del análisis de la situación económica menos favorable.

CASO	Precio H2 (€·kg ⁻¹)	CAPEX+OPEX (€·año ⁻¹)	NPV (€)
1	5,00	71.052.500	-152.097.000
2	4,75	71.052.500	-154.123.000
3	4,50	71.052.500	-156.149.000
4	4,25	71.052.500	-158.175.000
5	4,00	71.052.500	-160.201.000
6	3,75	71.052.500	-162.227.000
7	3,50	71.052.500	-164.253.000
8	3,25	71.052.500	-166.279.000
9	3,00	71.052.500	-168.305.000
10	2,75	71.052.500	-170.331.000
11	2,50	71.052.500	-172.357.000
12	2,25	71.052.500	-174.383.000
13	2,00	71.052.500	-176.409.000
14	1,75	71.052.500	-178.435.000
15	1,50	71.052.500	-180.461.000

En primer lugar, como no podía ser de otra manera, los resultados de la [Tabla 7.3](#) muestran la misma dinámica en cuanto a la suma del CAPEX más el OPEX que en las otras dos situaciones anteriores. En este caso esta suma es más elevada todavía, con un valor de 71.052.500 €·año⁻¹, que supone un 32,61% más que en el caso más favorable (53.579.600 €·año⁻¹, apartado [7.1. Situación más favorable](#)). Esto es debido a la diferencia de precios de la materia prima (1.046 \$·t⁻¹ para la situación más favorable y 1.551 \$·t⁻¹ para la situación menos favorable).

Por otro lado, se puede apreciar tanto en la [Figura 7.3](#) como en la [Tabla 7.3](#) que la planta diseñada no es rentable para ninguno de los precios de la corriente de hidrógeno estudiados. Todos los resultados son negativos.

7.4. Valoración conjunta

A pesar de que existe un rango de precio del hidrógeno (de 3,06 €·kg⁻¹ hasta 5 €·kg⁻¹) dentro de la situación más favorable para el cual la planta es económicamente viable (valor actual neto positivo), los resultados para las otras dos situaciones son completamente desfavorables, ya que no se obtiene un valor positivo del VAN en ningún caso.

Debido a esto no es posible concluir que la planta es rentable desde un punto de vista económico, sino todo lo contrario. Este proceso no podría hacer frente a las grandes variaciones de los precios de la materia prima y del producto principal dentro del rango de precios del hidrógeno estudiado.

Uno de los aspectos que es interesante destacar es que no se ha tenido en cuenta la integración energética de la planta, lo cual podría abaratar los costes y mejorar tanto la rentabilidad energética como económica del proceso. Además, en la optimización económica del proceso realizada en el apartado [6.8. Optimización económica](#) no se tuvieron en cuenta todas las variables del proceso, sino únicamente los parámetros geométricos de algunos equipos y la temperatura de operación del reactor. Por lo tanto, la anterior conclusión es acertada, pero de ninguna manera definitiva, ya que todavía hay muchos aspectos que tener en cuenta en el estudio de la rentabilidad de la planta.

8. Seguridad

En lo referente a la seguridad de la planta, hubiera sido conveniente la realización de un análisis de riesgos HAZOP, con el fin de identificar los peligros potenciales y problemas operativos. Sin embargo, esto no ha sido posible debido a que no se ha realizado un diagrama PID del proceso (ya que el tiempo de realización de este trabajo ha sido destinado a otras tareas como la simulación y optimización de la planta). De todos modos, se van a realizar algunos análisis de los posibles riesgos potenciales, posibles consecuencias y respuestas del sistema ante varias desviaciones en la operación normal de los equipos de proceso. Además, también se describen otros sistemas de prevención y detección de riesgos. Las fichas de seguridad de todas las sustancias presentes en el proceso se muestran en el [ANEXO III – Fichas de seguridad](#), las cuales han sido obtenidas del [Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo \(INSST\), \(2021\)](#).

En todos los depósitos de la planta, y en especial los asociados a los condensadores de las columnas de destilación C-302 y C-303, se deberán introducir válvulas de alivio de presión con el objetivo de expulsar flujo de gas hacia antorchas y evitar una posible explosión por BLEVE (*Boiling Liquid Expanding Vapour Explosion*). Estas válvulas deberán estar correctamente taradas y debidamente conectadas a sus correspondientes antorchas, donde se quemará el flujo de gas que produce la sobrepresión de los equipos hasta que cese la perturbación. Además de la presencia de las válvulas de alivio de presión en los depósitos de la planta, éstas también deberán estar presentes en los cambiadores de calor E-301, E-102 y E-304, en los condensadores y ebulliciones de las torres de destilación (equipos E-302, E-303, E-305 y E-306) y en el absorbedor C-301. Este aumento de presión en los equipos puede estar provocado por diversas causas como, por ejemplo, a causa de fallo de suministro de agua de refrigeración o de otro servicio auxiliar.

En todos los equipos en los que se almacenan de forma temporal líquidos, deberá haber instalado un sistema de control de nivel con el objetivo de evitar desbordamientos hacia el exterior. Si los líquidos son inflamables (en este proceso todos los compuestos son inflamables excepto el agua, ver fichas de seguridad en el [ANEXO III – Fichas de seguridad](#)) pueden producir incendios o explosiones al contactar con el aire. Por otro lado, si los líquidos no son inflamables no existiría un riesgo elevado de incendio, pero se podría producir algún otro accidente por parte de los operarios por resbalar al circular por la zona donde se produjo el desbordamiento y derrame del líquido. Si los lazos de control de nivel fallaran en los equipos, estos deberán disponer al menos de una tubuladura de drenaje de líquido para evacuar el exceso y trasladar el flujo de líquido a otro depósito seguro. Los drenajes de líquidos exigen el empleo de válvulas de venteo, que se abrirán simultáneamente a la apertura de las válvulas de drenaje para evitar una posible implosión de los equipos por diferencias de presión.

En caso de almacenamiento temporal de líquidos a elevada temperatura (ebullidores Kettle de las columnas de destilación, equipos E-303 y E-306, y reactor R-201 A/B) estos deberán disponer de un cartel avisando del posible riesgo de fuga. Esto podría producir quemaduras de distinta gravedad, irritación de la piel y de los ojos, e incluso incendios por contacto con el aire (ya que, aunque principalmente estos equipos almacenan agua temporalmente, también están presentes otras sustancias inflamables como el alcohol de diacetona o el isopropanol).

En caso de almacenamiento temporal de gases, como los ebullidores Kettle de las columnas de destilación (E-303 y E-306) o como los depósitos separadores líquido-vapor V-301, V-302 y V-303, también deberán tener un cartel asociado a posibles riesgos de fuga. En este proceso no se opera a presiones por debajo de la presión atmosférica por lo que, en caso de generación de orificios o grietas en los equipos, los gases contenidos serían expulsados al exterior en forma de fuga y no entraría aire al sistema. En este caso, también se deberá disponer de sistemas de detección de gases, ya que pueden acarrear problemas por inhalación a determinadas concentraciones y límites de exposición o incluso producir incendio.

En todos los casos se deberá disponer de pantallas protectoras de proyección de partículas debidamente señalizadas y de sistemas contra incendios, ya que como se ha dicho anteriormente, la mayoría de las sustancias del proceso son altamente inflamables. Además, se deberá disponer de mascarillas y de gafas protectoras para los operarios de la planta, por si fallan los equipos de detección.

Por otro lado, se deberá asegurar el correcto flujo de fluidos por las tuberías de la planta. Para ello se ha tenido en cuenta la instalación de dobles equipos en el caso de las bombas. En caso de fallo de la primera bomba, la segunda en espera estaría operativa para asegurar la circulación del líquido por las tuberías.

Además, la planta deberá disponer de un eyector de aire situado en la parte final para poder extraer el aire de los equipos y de las tuberías en el momento del arranque de la planta. De esta forma se evitaría el contacto entre los compuestos inflamables y el aire, que podrían producir incendios o explosiones.

9. Impacto ambiental

9.1. Análisis de efluentes y posibles tratamientos

Aunque en el proceso diseñado no existe una gran cantidad de efluentes, estos pueden poner en riesgo el medio ambiente. Debido a esto, se describen a continuación los principales efluentes de la planta y los posibles tratamientos que se pueden emplear fuera de los límites de batería del proyecto.

Corriente rica en hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos)

En este caso se trata de un importante y valioso subproducto del proceso, ya que es muy demandado por parte de otras industrias como el transporte o la industria energética y de calefacción. Además, es empleado en numerosas plantas químicas como materia prima de otros procesos industriales. Según la consultora estratégica *Bain & Company* (*Europa Press, 2021*), la demanda del hidrógeno podría triplicarse hacia 2050 y podría ser competitivo en costes con respecto otras fuentes de energía alternativas hacia 2030. Debido a este gran interés por parte de otras industrias, se ha decidido ponerle precio a esta corriente (apartado *3.3. Especificaciones de productos*) para venderla.

El tratamiento que habría que darle a esta corriente estaría destinado a aumentar su pureza y obtener un mayor valor económico que permitiera competir en el mercado. Según las hojas de especificaciones de producto hidrógeno de la compañía de gases industriales *Linde* en España (*Linde Gas España S.A.U., 2021*), la pureza comercial de este compuesto es superior al 99,99% en masa en todas sus variantes. Dentro de los posibles tratamientos que se podrían emplear en este efluente para aumentar su pureza, se puede optar por el empleo de membranas de Pd y Cu o por el empleo de materiales formadores de hidruros (*Milidoni et al., 2007*).

El impacto ambiental estaría asociado a posteriores tratamientos de las impurezas retiradas de esta corriente, que queda fuera de los objetivos del presente trabajo.

Corriente rica en agua (corriente 56 del diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos)

En este caso, la corriente 56 tiene un elevado contenido en agua (99,31% en masa). Sin embargo, también está presente una pequeña fracción de alcohol de diacetona (0,67% en masa). Uno de los posibles tratamientos que se podría dar a esta corriente debido a su baja concentración de impurezas sería mediante adsorción química. Si esta concentración de alcohol de diacetona fuera significativa se podría optar por un tratamiento de disolventes, que puede estar basado en procesos de destilación y posterior condensación, ya que la diferencia de temperaturas de ebullición es notable (100 °C para el agua y 166 °C para el alcohol de diacetona).

Dentro de estas tecnologías se podría optar por la propuesta de *OFRU Recycling* (*OFRU Recycling, 2021*).

Corriente de purga

Esta corriente está compuesta principalmente por agua (56,85% en masa) y por isopropanol (37,54% en masa) aunque también tiene una fracción másica considerable de acetona (5,62% en masa). Por otro lado, el caudal de esta corriente es prácticamente despreciable en comparación con los demás efluentes de la planta. Debido a esto, se gestionaría como residuo del proceso.

Gases de combustión

Este efluente representa un gran problema medioambiental debido a la emisión de gases de efecto invernadero como el CO₂ o el NO_x (productos de la combustión de gas natural en el horno H-101) o como el CH₄ (combustión incompleta de combustible). Por lo tanto, esta corriente deberá ser llevada a sistemas de tratamiento para reducir las emisiones de estos gases a la atmósfera.

En el caso de los compuestos nitrogenados (NO_x), su tratamiento suele basarse en reducción catalítica en seco o en base húmeda. Este proceso se realiza normalmente utilizando un catalizador de pentóxido de vanadio y trióxido de tungsteno sobre un soporte de titanio o a partir de zeolitas (*Escuela de Organización Industrial (EOI), 2009*). Por otro lado, en el caso del CO₂, existe una amplia variedad de alternativas como la absorción química, absorción física, métodos criogénicos, sistemas de membrana y adsorción química. En los últimos años también se ha intentado explorar el posible mercado del CO₂ como vector energético o intermedio en algunos procesos para que pueda ser utilizado como subproducto (*Escuela de Organización Industrial (EOI), 2009*).

9.2. Aprovechamiento de materias primas

En este aspecto se puede destacar que la planta es verdaderamente eficiente. Solo se emplea una materia prima (mezcla azeotrópica isopropanol-agua, corriente 10 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" *ANEXO IV - Planos*) y se obtiene una conversión global de isopropanol del 99,99%. Esto se traduce en un aprovechamiento prácticamente completo de la materia prima, ya que todo se emplea en la obtención de productos.

9.3. Uso del agua

En la planta únicamente se requiere agua en el momento de arranque de la planta, ya que todas las corrientes de agua empleadas como servicios auxiliares en los equipos (retorno de agua de refrigeración, retorno de agua refrigerada y

condensados de vapor de baja presión) han de ser llevadas a torres de refrigeración, donde, tras su debido acondicionamiento térmico, serán devueltas al proceso.

Por otro lado, la materia prima empleada en la planta contiene un 30% en mol de agua (apartado [3.2. Especificaciones de materias primas](#)) lo que supone un flujo molar de entrada de $25,18 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$ (corriente 10 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)). Esta fracción sirve como reposición de agua en el proceso, ya que una gran cantidad ($24,43 \text{ kmol}\cdot\text{h}^{-1}$) abandona la planta por el límite de batería 4 (L.B.4, corriente 56 del diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) que, tras su debido tratamiento (apartado [9.1. Análisis de efluentes y posibles tratamientos](#)), podrá ser empleada de nuevo en el proceso.

9.4. Aspectos energéticos

En el proceso diseñado se requieren 6.489 kW de refrigeración, 7.671 kW de calefacción y 0,98 kW de potencia eléctrica. En total, se requieren 14.161 kW de energía. Realizando el ratio entre la capacidad anual de producción y transformándolo en giga calorías (Gcal), en la planta se necesitan 3,62 Gcal por tonelada de producto producido.

Analizando una posible futura integración energética de la planta mediante la página web de la Universidad de Valladolid *HIX WebApp* ([Mato Chaín & Universidad de Valladolid, 2012](#)), se han introducido los correspondientes intercambios de calor en la planta (ver diagrama de flujo, “[A2-PFD-101-2](#)” [ANEXO IV - Planos](#)) aplicando una diferencia mínima de temperaturas de 5°C (agua de refrigeración en condensadores E-302 y E-305). Como resultado se ha obtenido un requerimiento mínimo de refrigeración de 4.285 kW y un requerimiento mínimo de calefacción de 5.466 kW. Esto supondría un ahorro energético del 34% en el caso de la refrigeración y del 28,7% en el caso de la calefacción. Realizando nuevamente el ratio entre la capacidad anual de producción, se requerirían 2,49 Gcal por tonelada de producto producido.

Se puede apreciar que existe una ineficiencia energética del proceso diseñado, ya que los ahorros energéticos (si se realizara una integración energética) serían considerablemente ventajosos. Esto se traduciría en un menor consumo de servicios auxiliares y, a su vez, en un menor impacto ambiental.

10. Conclusiones

En primer lugar, se puede concluir que se ha alcanzado el objetivo principal del presente trabajo. Se ha diseñado una planta de producción de acetona por deshidrogenación de isopropanol con una capacidad de producción de 27.071 toneladas anuales y una pureza del 99,5% en masa.

En segundo lugar, analizando los resultados del proceso, se obtiene una conversión global de isopropanol del 99,99% con una selectividad del 98,2% hacia la producción de acetona. Con estos resultados se puede concluir con que el proceso aprovecha al máximo la materia prima introducida a la planta y que el diseño mediante simulación e integración de procesos de las secciones de reacción y de separación es el correcto.

Por otro lado, en lo referido a la rentabilidad económica del proyecto, el resultado de la suma de los costes de capital y los costes de operación de la planta para la situación más favorable asumiendo un precio de mercado de 5 €·kg⁻¹ para la corriente de hidrógeno obtenida como subproducto es de 53.579.600 €·año⁻¹, con un valor actual neto de 9.884.370 €. Esta situación económica del proyecto es favorable ya que el VAN tiene un valor positivo. Sin embargo, este proceso no puede hacer frente a las grandes desviaciones de los precios de las materias primas y de los productos en base a los resultados obtenidos de los análisis realizados en distintas situaciones de mercado. Por lo tanto, se puede concluir con que la planta es únicamente rentable en la situación más favorable (1.046 \$·t⁻¹ para la materia prima, 1.401 \$·t⁻¹ para el producto principal) y en un rango de precios de subproducto muy estrecho (desde 3,06 €·kg⁻¹ hasta 5 €·kg⁻¹). Para todas las demás situaciones de mercado, el proceso no es económicamente viable.

Atendiendo al consumo energético externo de la planta, esta requiere 6.489 kW de servicios de refrigeración, 7.671 kW de servicios de calefacción y 0,98 kW de potencia eléctrica, que se traduce en un consumo de energía de 3,62 Gcal por tonelada de producto producido. Sin embargo, con la debida integración energética, se podría reducir en un 34% (como máximo) los servicios de refrigeración y en un 28,7% (como máximo) los servicios de calefacción, dando como resultado un consumo mínimo de energía de 2,49 Gcal por tonelada de producto producido. A partir de esto, se puede concluir con que la planta no es eficiente desde el punto de vista energético, ya que se requiere más energía externa de la mínima necesaria por el sistema. Por lo tanto, se debería realizar una adecuada integración energética de la planta, ya que las posibilidades de mejora en términos de eficiencia energética son prometedoras en comparación con los resultados obtenidos.

Finalmente, en lo referente a la utilización de agua, el proceso únicamente la emplea en el momento del arranque de la planta y, además, consigue reponerlo ya que se consigue recuperar el 97% del agua introducido en la alimentación. Con esto se

puede llegar a la conclusión de que el proceso realiza un correcto uso de este recurso tan influyente en el medio ambiente y que incluso genera un excedente que puede ser empleado como reposición.

11. Bibliografía

- Arago, F., & Gay-Lussac, J. L. (1832). *Annales de chimie et de physique* (49th ed.). Crochard. <https://books.google.es/books?id=nilCAAAAcAAJ>
- AspenTech. (2019). *AspenPlus* (No. 11). <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspentech/aspentech-plus-v11-messaging>
- Bedia, J., Ruiz-Rosas, R., Rodríguez-Mirasol, J., & Cordero, T. (2010). A kinetic study of 2-propanol dehydration on carbon acid catalysts. *Journal of Catalysis*, 271(1), 33–42. <https://doi.org/10.1016/j.jcat.2010.01.023>
- Dietrich, J. (2012). *Chemical Profile: Acetone*. Independent Commodity Intelligence Services. <https://www.icis.com/explore/resources/news/2012/01/02/9519333/chemical-profile-acetone/>
- Echemi. (2020a). *Market Analysis - Monthly Report - August, 2020 - Isopropanol*. Echemi.Com. <https://www.echemi.com/cms/122873.html>
- Echemi. (2020b). *Market Analysis - Monthly Report - December, 2020 - Isopropanol*. Echemi.Com. <https://www.echemi.com/cms/135628.html>
- Echemi. (2020c). *Market Analysis - Monthly Report - July, 2020 - Isopropanol*. Echemi.Com. <https://www.echemi.com/cms/111415.html>
- Echemi. (2020d). *Market Analysis - Monthly Report - June, 2020 - Isopropanol*. Echemi.Com. <https://www.echemi.com/cms/110708.html>
- Echemi. (2020e). *Market Analysis - Monthly Report - November, 2020 - Isopropanol*. Echemi.Com. <https://www.echemi.com/cms/131474.html>
- Echemi. (2020f). *Market Analysis - Monthly Report - October, 2020 - Isopropanol*. Echemi.Com. <https://www.echemi.com/cms/126126.html>
- Echemi. (2020g). *Market Analysis - Monthly Report - September, 2020 - Isopropanol*. Echemi.Com. <https://www.echemi.com/cms/122881.html>
- Echemi Technology Co. (2021). *Acetone Price Analysis*. Echemi.Com. https://www.echemi.com/productsInformation/pid_Rock3929-acetone.html
- Escuela de Organización Industrial (EOI). (2009). *TECNOLOGÍAS AVANZADAS DE REDUCCIÓN DE LA CONTAMINACIÓN Y NUEVAS TENDENCIAS ENERGETICAS*.

<https://static.eoi.es/savia/documents/componente48142.pdf>

Europa Press. (2021). La demanda de hidrógeno podría triplicarse hacia 2050, según Bain & Company. *Europapress.Es*.

<https://www.europapress.es/economia/energia-00341/noticia-demanda-hidrogeno-podria-triplicarse-2050-bain-company-20210217183157.html>

ICIS. (2010a). *Acetone Production and Manufacturing Process*. Icis.Com.

<https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/01/9074860/acetone-production-and-manufacturing-process/>

ICIS. (2010b). *Acetone Uses and Market Data*. Icis.Com.

<https://www.icis.com/explore/resources/news/2007/11/01/9074858/acetone-uses-and-market-data/>

Instituto Nacional de Seguridad y Salud en el Trabajo (INSST). (2021). *Fichas Internacionales de Seguridad Química. FISQ*. Insst.Es.

<https://www.insst.es/documentacion/colecciones-tecnicas/fisq>

Klissurski, D. G., McCaffrey, E. F., & Ross, R. A. (1971). The Catalytic Decomposition of Isopropyl Alcohol Vapor on Manganese (II) Oxide. *Canadian Journal of Chemistry*, 49(23), 3778–3784. <https://doi.org/10.1139/v71-631>

Leva, M. (1950). Packed-Tube Heat Transfer. *Ind. Eng. Chem.*, 42(12), 2498–2501. <https://doi.org/10.1021/ie50492a031>

Linde Gas España S.A.U. (2021). *Hojas técnicas de producto*. Linde-Gas.Es.

https://www.linde-gas.es/es/about_the_linde_group/company_profile/index.html

Lokras, S. S., Deshpande, P. K., & Kuloor, N. R. (1970). Catalytic Dehydrogenation Of 2-Propanol To Acetone. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 9(2), 293–297.

<https://doi.org/10.1021/i260034a022>

Luyben, W. L. (2011). Design and control of the acetone process via dehydrogenation of 2-propanol. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 50(3), 1206–1218. <https://doi.org/10.1021/ie901923a>

Martin, R. (2018). *What is Acetone?- History, Properties, Production and Uses*. World of Chemicals. <https://www.worldofchemicals.com/632/chemistry-articles/what-is-acetone-history-properties-production-and-uses.html>

Mato Chaín, F., & Universidad de Valladolid. (2012). *HIX-IQTMA, Heat Integration (41863- UVA)*. Hix.Eii.Uva.Es. <http://hix.eii.uva.es/hix/fb.pl>

- Mato, R. B. (2019). *Integrated Process Design - Choice of reactor - Apuntes de clase de la asignatura Integración de Procesos. Grado de Ingeniería Química en la Universidad de Valladolid* (p. 15).
- Milidoni, M., Somoza, J., Borzone, E. M., Blanco, M. V., Cestau, D., Baruj, A., & Meyer, G. (2007). *ANÁLISIS DE MÉTODOS DE SEPARACIÓN DE HIDRÓGENO EN PROCESOS INDUSTRIALES DE BAJA PRESIÓN*.
https://inis.iaea.org/collection/NCLCollectionStore/_Public/46/127/46127058.pdf
- Mourhly, A., El Hamidi, A., Halim, M., & Arsalane, S. (2019). Selective gas conversion of isopropyl alcohol over silver nanoparticles (Ag-NPs) supported on new mesoporous silica precipitated from natural resources. *Research on Chemical Intermediates*, 45(10), 5091–5109.
<https://doi.org/10.1007/s11164-019-03882-5>
- OFRU Recycling. (2021). *TRATAMIENTO DE DISOLVENTE - RECOMENDACIÓN DEL SISTEMA Y RESUMEN DEL PRODUCTO*. Ofru.Com.
<https://www.ofru.com/es/productos/tratamiento-de-disolventes/>
- Othmer, K. (1998). *Enciclopedia de tecnología química* (Instituto Politécnico Nacional (ed.)).
- Polednová, J., & Wichterle, I. (1984). Vapour-liquid equilibrium in the acetone-water system at 101.325 kPa. *Fluid Phase Equilibria*, 17(1), 115–121.
[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0378-3812\(84\)80015-1](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0378-3812(84)80015-1)
- Porter, K. E., & Momoh, S. O. (1991). Finding the optimum sequence of distillation columns - an equation to replace the “rules of thumb” (heuristics). *The Chemical Engineering Journal*, 46(3), 97–108.
[https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0300-9467\(91\)87001-Q](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0300-9467(91)87001-Q)
- PV Magazine. (2020). *El hidrógeno verde alcanzará la paridad de precios con el hidrógeno gris en 2030*. Worldenergytrade.Com.
<https://www.worldenergytrade.com/energias-alternativas/gas/el-hidrogeno-verde-alcanzara-la-paridad-de-precios-con-el-hidrogeno-gris-en-2030>
- Rioux, R. M., & Vannice, M. A. (2003). Hydrogenation/dehydrogenation reactions: Isopropanol dehydrogenation over copper catalysts. *Journal of Catalysis*, 216(1–2), 362–376. [https://doi.org/10.1016/S0021-9517\(02\)00035-0](https://doi.org/10.1016/S0021-9517(02)00035-0)
- Sanz, G. J., & Thomkins, R. P. T. (1981). Molten Salts: Data on Additional Single and Multi-Component Salt Systems. In *Physical Properties Data Compilations Relevant to Energy Storage* (p. 870). NATIONAL BUREAU OF STANDARDS JOURNAL.

- Sifniades, S., & Levy, A. B. (2011). Acetone. In *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry* (7th ed., p. 19). Wiley-VCH. <https://www.wiley.com/en-us/Ullmann%27s+Encyclopedia+of+Industrial+Chemistry%2C+40+Volume+Set%2C+7th+Edition-p-9783527329434>
- The Trane Company. (1999). chilled water plants and... Asymmetry as a Basis of Design. *Trane Engineers Newsletter*, 28(4). https://www.trane.com/content/dam/Trane/Commercial/global/products-systems/education-training/engineers-newsletters/waterside-design/enews_28_4_093099.pdf
- Towler, G., & Sinnott, R. (2012). Chapter 12: Heat Transfer Equipment. In *Chemical Engineering Design: Principles, Practice and Economics of Plant and Process Design* (Second Edi, pp. 634–691). Elsevier Science. <https://www.elsevier.com/books/chemical-engineering-design/towler/978-0-08-096659-5>
- Turton, R., Bailie, R., Whiting, W., & Shaeiwitz, J. (2003). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes* (Third Edit).
- Verhoeve, L., & De Schepper, H. (1973). The vapour–liquid equilibria of the binary, ternary and quaternary systems formed by acetone, methanol, propan-2-ol, and water. *Journal of Applied Chemistry and Biotechnology*, 23(8), 607–619. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/jctb.5020230807>
- W., L. H. S. G., & Richardson, S. J. D. (1984). *CONVERSION OF SOPROPYL ALCOHOL TO ACETONE* (Patent No. 4,472,593). <https://patents.google.com/patent/US4472593A/en>
- Wilson, A., & Simons, E. L. (1952). Vapor-Liquid Equilibria. *Industrial & Engineering Chemistry*, 44(9), 2214–2219. <https://doi.org/10.1021/ie50513a063>

ANEXOS

ANEXO I – Símbolos y acrónimos

Símbolos y términos en ecuaciones, tablas y figuras

Símbolo	Descripción	Unidades
μ_{gas}	Viscosidad promedio del gas de reacción	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
μ_{sf}	Viscosidad promedio de sal fundida	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
μ_{w}	Viscosidad promedio del agua	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$
C_{ACETONA}	Concentración de acetona	$\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$
C_{H_2}	Concentración de hidrógeno	$\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$
C_{IPA}	Concentración de isopropanol	$\text{kmol}\cdot\text{m}^{-3}$
$c_{p,\text{sf}}$	Capacidad calorífica promedio a presión constante de la sal fundida	$\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
D	Flujo molar de destilado	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$
d_e	Diámetro hidráulico equivalente	m
D_{eq}	Distancia porcentual al equilibrio	%
D_p	Diámetro de las partículas de catalizador	m
$D_{t,i}$	Diámetro interior de los tubos	m
$D_{t,o}$	Diámetro exterior de los tubos	m
EA_D	Energía de activación de la reacción principal directa	$\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$
EA_I	Energía de activación de la reacción principal inversa	$\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$
$F_{18,\text{ACETONA}}$	Flujo molar de acetona en la corriente 18	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$
$F_{18,\text{IPA}}$	Flujo molar de isopropanol en la corriente 18	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$
F_{AGUA}	Flujo molar de entrada del disolvente	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$
$F_{\text{eq,ACETONA}}$	Flujo molar de acetona a la salida del reactor auxiliar de referencia	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$
G_{gas}	Densidad de flujo másico del gas de reacción	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
G_{sf}	Densidad de flujo másico de sal fundida	$\text{kg}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$
h_i	Coficiente individual de transmisión de calor por los tubos	$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
$h_{i,d}$	Factor de ensuciamiento por los tubos	$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
h_o	Coficiente individual de transmisión de calor por carcasa	$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
$h_{o,d}$	Factor de ensuciamiento por carcasa	$\text{J}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
jh	Factor de corrección en función del número de Reynolds y del corte de placa deflectora	
k_{gas}	Conductividad térmica promedio del gas de reacción	$\text{J}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
k_{sf}	Conductividad térmica promedio de sal fundida	$\text{J}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
k_w	Conductividad del material de los tubos	$\text{J}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
MM_{ACETONA}	Masa molecular de acetona	$\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$
P	Presión	Bar; atm
$\text{PROD}_{\text{m,ACETONA}}$	Capacidad de producción de acetona	$\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$
$\text{PROD}_{\text{w,ACETONA}}$	Capacidad de producción de acetona	$\text{kg}\cdot\text{año}^{-1}$
R	Constante universal de los gases	$\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
r_D	Velocidad de la reacción principal directa	$\text{kmol}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}$
R_F	Ratio entre la relación de reflujo y la relación de reflujo mínima	
r_i	Velocidad de la reacción principal inversa	$\text{kmol}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}$
T	Temperatura	K; °C

T_{14}	Temperatura de la corriente 14	°C
T_{AGUA}	Temperatura de entrada del disolvente	°C
T_{E-101}	Temperatura de salida de E-101	°C
$t_{h,a}$	Horas anuales de operación	año ⁻¹
U	Coefficiente global de transmisión de calor	$J \cdot m^{-2} \cdot s^{-1} \cdot K^{-1}$
V_1	Flujo mínimo de vapor en la primera etapa de destilación	$kmol \cdot h^{-1}$
V_2	Flujo mínimo de vapor en la segunda etapa de destilación	$kmol \cdot h^{-1}$
V_{min}	Flujo mínimo de vapor	$kmol \cdot h^{-1}$
X_{IPA}	Conversión por paso de isopropanol	%
α	Volatilidad relativa	

Acrónimos y abreviaturas

B1	Primeras colas de destilación
B2	Segundas colas de destilación
BPA	Bisfenol-A
CAPEX	Costes de capital
D1	Primer destilado
D2	Segundo destilado
DIF	Diferencia
F	Alimentación
IPA	Isopropanol
L.B.	Límite de batería
LPS	Vapor de baja presión (Low Pressure Steam)
MIBK	Metil isobutil cetona
MMA	Metacrilato de metilo
NIST	National Institute of Standards and Technology
OPEX	Costes de operación
PC	Policarbonatos
PMMA	Polimetacrilato de metilo
VAN	Valor actual neto

ANEXO II – Lista de tablas, figuras y ecuaciones

Figuras

Figura 1.1. Esquema del proceso de producción de acetona a partir de isopropanol.

Figura 1.2. Esquema de un proceso típico de obtención de fenol y acetona a partir de cumeno.

Figura 1.3. Esquema de la reacción de oxidación de cumeno para dar fenol y acetona.

Figura 1.4. Esquema de la reacción de producción de acetona a partir de propeno.

Figura 1.5. Esquema de la reacción de producción de acetona a partir de la oxidación de isopropanol.

Figura 1.6. Esquema de la reacción de obtención de acetona a partir de la oxidación de p-diisopropil benceno.

Figura 3.1. Precio del Isopropanol desde junio hasta diciembre del año 2020.

Figura 3.2. Precio de la acetona desde julio de 2020 hasta enero de 2021.

Figura 3.3. Localización de la planta (vista principal).

Figura 3.4. Localización de la planta (vista global).

Figura 3.5. Localización de la planta (factorías cercanas).

Figura 6.1. Diagrama de elección del modelo de propiedades.

Figura 6.2. Diagrama de elección de modelo de propiedades para sistemas polares sin electrolitos.

Figura 6.3. Diagrama T-xy para Acetona-Isopropanol a 1,01 bar calculado por UNIQUAC - Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2".

Figura 6.4. Diagrama T-xy para Acetona-Agua a 1,01 bar calculado por UNIQUAC-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2".

Figura 6.5. Diagrama T-xy para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado por UNIQUAC - Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2".

Figura 6.6. Diagrama T-xy para Acetona-Isopropanol a 1,01 bar calculado por NRTL - Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales "NIST Thermodata Engine Versión 10.2".

Figura 6.7. Diagrama T-xy para Acetona-Agua a 1,01 bar calculado por NRTL-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del “NIST Thermodata Engine Versión 10.2”.

Figura 6.8. Diagrama Txy para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado por NRTL-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del “NIST Thermodata Engine Versión 10.2”.

Figura 6.9. Diagrama T-xy para Isopropanol-Agua a 4,12 bar calculado por NRTL-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del “NIST Thermodata Engine Versión 10.2”.

Figura 6.10. Diagrama T-xy para Acetona-Isopropanol a 1,01 bar calculado por WILSON-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales “NIST Thermodata Engine Versión 10.2”.

Figura 6.11. Diagrama T-xy para Acetona-Agua a 1,01 bar calculado por WILSON-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del “NIST Thermodata Engine Versión 10.2”.

Figura 6.12. Diagrama Txy para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado por WILSON-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del “NIST Thermodata Engine Versión 10.2”.

Figura 6.13. Diagrama T-xy para Isopropanol-Agua a 4,12 bar calculado por WILSON-Redlich-Kwong. Comparación con datos experimentales del “NIST Thermodata Engine Versión 10.2”.

Figura 6.14. Diagrama y-x para Isopropanol-Agua a 1,01 bar calculado a partir del modelo de propiedades WILSON.

Figura 6.15. Modelo de flujo pistón. Concentración de productos (P) y reactivos (F) en función del tiempo de residencia (τ).

Figura 6.16. Modelo de flujo de mezcla perfecta. Concentración de productos (P) y reactivos (F) en función del tiempo de residencia (τ).

Figura 6.17. Conversión por paso de Isopropanol en función de la temperatura de entrada al reactor para los modos de operación de la sal fundida, en contracorriente y en paralelo.

Figura 6.18. Conversión por paso de Isopropanol en función de la temperatura de entrada al reactor para distintas longitudes de tubos estandarizadas de acero según la norma BS 3606.

Figura 6.19. Distancia porcentual al equilibrio en función de longitudes de tubos estandarizadas (norma BS 3606) para distintas temperaturas de operación.

Figura 6.20. Conversión de Isopropanol de equilibrio en función de longitudes de tubos estandarizadas (norma BS 3606) para distintas temperaturas de operación.

Figura 6.21. Fracción molar de Isopropanol no convertida (1-Conversión) en función de la presión de entrada al reactor.

Figura 6.22. Fracción molar de Isopropanol no convertida (1-Conversión) en función de la caída de presión en el reactor.

Figura 6.23. Conversión de Isopropanol de equilibrio y distancia porcentual al equilibrio en función de la presión de entrada al reactor.

Figura 6.24. Influencia de la temperatura del disolvente en la recuperación de Acetona. C20: corriente número 20; C19: corriente número 19.

Figura 6.25. Costes de capital (CAPEX) y de operación (OPEX) de la etapa de absorción en función de la temperatura de entrada del disolvente. Número de etapas de C-301: 10 etapas.

Figura 6.26. Costes de capital más costes de operación (CAPEX + OPEX) de la etapa de absorción en función del número de etapas del absorbedor C-301. Temperatura de entrada del disolvente: 15 °C.

Figura 6.27. Secuencia de destilación directa junto a diagrama de residuos a 1,01 bar para Acetona-Isopropanol-Agua. Temperaturas de ebullición: Isopropanol (82,15 °C), Agua (100 °C), Acetona (56,13 °C), Azeótropo Isopropanol-Agua (80,4 °C).

Figura 6.28. Secuencia de destilación indirecta junto a diagrama de residuos a 1,01 bar para Acetona-Isopropanol-Agua. Temperaturas de ebullición: Isopropanol (82,15 °C), Agua (100 °C), Acetona (56,13 °C), Azeótropo Isopropanol-Agua (80,4 °C).

Figura 6.29. Recuperación de Agua en la corriente de colas en función de la relación de reflujo de C-302. Fracción molar de Agua 0,9995.

Figura 6.30. Perfiles de composición iniciales en C-302.

Figura 6.31. Perfiles de composición en C-302 para 26 etapas. Etapas de alimentación: 23 y 24.

Figura 6.32. Perfiles iniciales de composición en C-303.

Figura 6.33. Perfiles de composición en C-303 con ajuste de etapa de alimentación (etapa 41).

Figura 6.34. Costes de capital más costes de operación (CAPEX + OPEX) de la columna C-302 en función de la relación de reflujo.

Figura 6.35. Costes de capital más costes de operación (CAPEX + OPEX) de la columna C-303 en función de la relación de reflujo.

Figura 6.36. Costes de capital más costes de operación de la planta (CAPEX + OPEX) en función de la temperatura de operación (corriente 14, cambiador E-101 en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV – Planos).

Figura 6.37. Valor actual neto (VAN) de la planta en función de la temperatura de operación (corriente 14, cambiador E-101 en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV – Planos).

Figura 6.38. Perfiles de composición finales de acetona y de isopropanol en el reactor principal (R-201 A/B en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) y en el reactor auxiliar de referencia (R-201-REF) en función de la longitud del reactor.

Figura 6.39. Perfiles finales de temperatura de la corriente de proceso (desde corriente 14 hasta corriente 18 en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) y de la sal fundida en función de la longitud del reactor R-201 A/B.

Figura 6.40. Perfil de composición final de acetona en el absorbedor C-301.

Figura 6.41. Perfiles de composición finales en fase líquida en la columna C-302. Etapas de alimentación: 8 y 9 (corrientes 22 y 24 en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos).

Figura 6.42. Perfiles de composición finales en fase líquida en la columna C-303. Etapa de alimentación: 20 (corriente 36 en el diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos).

Figura 7.1. Variación del valor actual neto de la planta (VAN) en función del precio del hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) para la situación más favorable.

Figura 7.2. Variación del valor actual neto de la planta (VAN) en función del precio del hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) para la situación promedio.

Figura 7.3. Variación del valor actual neto de la planta (VAN) en función del precio del hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, “A2-PFD-101-2” ANEXO IV - Planos) para la situación menos favorable.

Tablas

Tabla 1.1. Condiciones de operación de algunas compañías industriales que emplean el proceso de deshidrogenación catalítica de isopropanol.

Tabla 1.2. Características del catalizador empleado en el diseño de la planta.

Tabla 3.1. Capacidades de producción de acetona de distintas plantas reales situadas en Estados Unidos expresadas en kilotoneladas (kt) anuales.

Tabla 3.2. Especificaciones de la materia prima empleada en el proceso.

Tabla 3.3. Datos de la [Figura 3.1](#).

Tabla 3.4. Especificaciones del producto final acetona según la norma ASTM D329-76.

Tabla 3.5. Datos de la [Figura 3.2](#).

Tabla 3.6. Especificaciones de la corriente rica en hidrógeno (corriente 54 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 3.7. Especificaciones de la corriente con elevado contenido en agua (corriente 56 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 3.8. Especificaciones del servicio auxiliar electricidad.

Tabla 3.9. Especificaciones del servicio auxiliar agua de refrigeración.

Tabla 3.10. Especificaciones del servicio auxiliar agua refrigerada.

Tabla 3.11. Especificaciones del servicio auxiliar refrigerante.

Tabla 3.12. Especificaciones del servicio auxiliar vapor de baja presión.

Tabla 3.13. Especificaciones del servicio auxiliar gases de combustión.

Tabla 3.14. Especificaciones del servicio auxiliar sal fundida (corrientes 15 y 17 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 3.15. Condiciones de los límites de batería de la planta (ver diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 6.1. Dimensiones estandarizadas de tubos de acero según la norma BS 3606.

Tabla 6.2. Resultados extremos del análisis para el modo de operación en contracorriente.

Tabla 6.3. Resultados extremos del análisis para el modo de operación en paralelo.

Tabla 6.4. Conductividades para distintos materiales y temperaturas.

Tabla 6.5. Valores típicos para factores de ensuciamiento.

Tabla 6.6. Corriente de productos tras la simulación de la sección de reacción en lazo abierto (corriente 18 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 6.7. Resultados de la primera etapa de la sección de separación en lazo abierto (equipos E-301 y V-301 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 6.8. Resultados de la [Figura 6.25](#).

Tabla 6.9. Resultados de la [Figura 6.26](#).

Tabla 6.10. Corrientes de partida para la destilación (corrientes 22 y 24 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 6.11. Flujos mínimos de vapor en la destilación para secuencias directa e indirecta. Subíndices: 1 para la primera etapa de destilación y 2 para la segunda.

Tabla 6.12. Corrientes que abandonan la columna C-302 (corrientes 33, 35 y 36 del diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 6.13. Corrientes que abandonan la columna C-303 (corrientes 11, 45 y 46 en el diagrama de flujo, "A2-PFD-101-2" ANEXO IV - Planos).

Tabla 6.14. Resultados de la [Figura 6.34](#).

Tabla 6.15. Resultados de la [Figura 6.35](#).

Tabla 6.16. Resultados de la [Figura 6.36](#) y de la [Figura 6.37](#).

Tabla 6.17. Valores promedio del VAN y de la suma del CAPEX y el OPEX de la planta. Diferencias con respecto a los resultados para 360 °C de la [Tabla 6.16](#).

Tabla 7.1. Resultados del análisis de la situación económica más favorable.

Tabla 7.2. Resultados del análisis de la situación económica promedio.

Tabla 7.3. Resultados del análisis de la situación económica menos favorable.

Ecuaciones

Ecuación 1.1. *Reacción principal de deshidrogenación catalítica de isopropanol.*

Ecuación 1.2. *Reacción directa. Deshidrogenación de isopropanol.*

Ecuación 1.3. *Reacción inversa. Hidrogenación de acetona.*

Ecuación 1.4. *Reacción secundaria. Deshidratación de isopropanol para dar propileno y agua.*

Ecuación 1.5. *Reacción secundaria. Condensación de dos moléculas de acetona para dar alcohol de diacetona.*

Ecuación 1.6. *Reacción secundaria. Deshidratación de dos moléculas de isopropanol para dar diisopropil éter.*

Ecuación 1.7. *Expresión cinética de la reacción principal directa.*

Ecuación 1.8. *Expresión cinética de la reacción principal inversa.*

Ecuación 6.1. *Cálculo de la capacidad de producción de acetona.*

Ecuación 6.2. *Cálculo de la distancia porcentual al equilibrio.*

Ecuación 6.3. *Correlación del método de Kern.*

Ecuación 6.4. *Correlación para el cálculo del coeficiente individual de transmisión de calor por los tubos.*

Ecuación 6.5. *Correlación para el cálculo del coeficiente global de transmisión de calor.*

Ecuación 6.6. *Ecuación para el cálculo del flujo mínimo de vapor requerido en destilación.*

ANEXO III – Fichas de seguridad

CAS: 1333-74-0


N° ONU: 1049

CE: 215-605-7

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Extremadamente inflamable. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión. Las mezclas gas/aire son explosivas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas. No manipular botellas con las manos grasientas.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con agua pulverizada, polvo, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.

Usar controles apropiados en el proceso.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Vértigo. Dolor de cabeza. Apatía. Asfixia.	Usar ventilación.	Aire limpio, reposo.
Piel	EN CONTACTO CON GAS: CONGELACIÓN.	Guantes aislantes del frío.	EN CASO DE CONGELACIÓN: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.
Ojos	EN CONTACTO CON GAS: CONGELACIÓN.	Utilizar pantalla facial.	EN CASO DE CONGELACIÓN: enjuagar con agua abundante. Proporcionar asistencia médica inmediatamente.
Ingestión			

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
¡Evacuar la zona de peligro! ¡Consultar a un experto! Ventilar. Eliminar toda fuente de ignición. Eliminar el vapor con agua pulverizada.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p>  <p>PELIGRO</p> <p>Gas extremadamente inflamable Contiene gas a presión; puede explotar si se calienta</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 2.1</p>
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio. Fresco. Ventilación a ras del suelo y techo. Separado de materiales oxidantes.	
ENVASADO	

Organización
Internacional
del TrabajoOrganización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.

© OIT y OMS 2018

European
Commission

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

GAS INODORO INCOLORO COMPRIMIDO.

Peligros físicos

El gas se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas. El gas es más ligero que el aire.

Peligros químicos

El calentamiento intenso puede originar combustión violenta o explosión. Reacciona violentamente con halógenos, materiales oxidantes y grasas. Esto genera peligro de incendio y explosión. Los metales catalizadores tales como el platino o el níquel aumentan este tipo de reacciones.

Fórmula: H₂

Masa molecular: 2.0

Punto de ebullición: -253°C

Punto de fusión: -259°C

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 0.07

Punto de inflamación: gas inflamable

Temperatura de autoignición: 560°C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 4-75

Presión de vapor, kPa a 25°C: 165320

Solubilidad en agua, mg/l a 21°C: 1.62 (muy escasa)

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La exposición es por vía inhalatoria principalmente.

Efectos de exposición de corta duración

Asfixia. Ver Notas. La exposición a gas frío podría causar congelación.

Riesgo de inhalación

Al producirse pérdidas en zonas confinadas, esta sustancia puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno en el aire.

Efectos de exposición prolongada o repetida

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte.

Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona.

Medir concentraciones de hidrógeno con un detector de gas adecuado (un detector de gas inflamable normal no es adecuado).

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Límites de exposición profesional (INSHT 2014):

Notas: asfixiante simple.

- N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 001-001-00-9

- **Clasificación UE**

Pictograma: F+; R: 12; S: (2)-9-16-33



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



Instituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

PROPILENO

ICSC: 0559

Metiletileno
Propeno
Metileteno

Noviembre 1998

CAS: 115-07-1

Nº ONU: 1077

CE: 204-062-1

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Extremadamente inflamable. Las mezclas gas/aire son explosivas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Evitar la generación de cargas electrostáticas (p. ej., mediante conexión a tierra) si aparece en estado líquido.	Cortar el suministro; si no es posible y no existe riesgo para el entorno próximo, dejar que el incendio se extinga por sí mismo; en otros casos apagar con polvo, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fría la botella rociando con agua. NO poner en contacto directo con agua. Combatir el incendio desde un lugar protegido.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Somnolencia. Asfixia. Ver Notas.	Usar ventilación.	Aire limpio, reposo. Puede ser necesaria respiración artificial. Proporcionar asistencia médica.
Piel	EN CONTACTO CON LÍQUIDO: CONGELACIÓN.	Guantes aislantes del frío.	EN CASO DE CONGELACIÓN: aclarar con agua abundante, NO quitar la ropa. Proporcionar asistencia médica.
Ojos	Ver Piel.	Utilizar gafas de protección de montura integral o pantalla facial.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión		No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
¡Evacuar la zona de peligro! ¡Consultar a un experto! Ventilar. Eliminar toda fuente de ignición. NO verter NUNCA chorros de agua sobre el líquido. Protección personal: traje de protección química, incluyendo equipo autónomo de respiración.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 2.1
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio. Fresco.	
ENVASADO	



La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

GAS INCOLORO COMPRIMIDO LICUADO.

Peligros físicos

El gas es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante. El gas es más denso que el aire y puede acumularse en las zonas más bajas produciendo una deficiencia de oxígeno. Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.

Peligros químicos

Reacciona violentamente con oxidantes. Esto genera peligro de incendio y explosión.

Fórmula: C₃H₆ / CH₂CHCH₃

Masa molecular: 42.1

Punto de ebullición: -48°C

Punto de fusión: -185°C

Densidad relativa (agua = 1): 0.5

Solubilidad en agua: escasa

Presión de vapor, kPa a 25°C: 1158

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 1.5

Punto de inflamación: gas inflamable

Temperatura de autoignición: 460°C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.4-10.3

Coeficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 1.77

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación.

Efectos de exposición de corta duración

La evaporación rápida del líquido puede producir congelación. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central. La exposición podría causar disminución del estado de alerta. Ver Notas.

Riesgo de inhalación

Al producirse pérdidas en zonas confinadas, esta sustancia puede originar asfixia por disminución del contenido de oxígeno en el aire.

Efectos de exposición prolongada o repetida

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

TLV: 500 ppm como TWA; A4 (no clasificado como cancerígeno humano)

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

Altas concentraciones en el aire producen una deficiencia de oxígeno con riesgo de pérdida de conocimiento o muerte.

Comprobar el contenido de oxígeno antes de entrar en la zona.

Con el fin de evitar la fuga de gas en estado líquido, girar la botella que tenga un escape manteniendo arriba el punto de escape.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Límites de exposición profesional (INSHT 2012):

VLA-ED: 500 ppm

- N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 601-011-00-9

- **Clasificación UE**

Pictograma: F+; R: 12; S: (2)-9-16-33



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



Instituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

ACETONA
2-Propanona
Dimetil cetona
Metil cetona


ICSC: 0087

Abril 2009

CAS: 67-64-1
Nº ONU: 1090
CE: 200-662-2

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Altamente inflamable. Las mezclas vapor/aire son explosivas. El calentamiento intenso puede producir aumento de la presión con riesgo de estallido.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	Usar polvo, espuma resistente al alcohol, agua, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Dolor de garganta. Tos. Confusión mental. Dolor de cabeza. Vértigo. Somnolencia. Pérdida del conocimiento.	Usar ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Piel seca.	Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Visión borrosa.	Utilizar gafas de protección.	Enjuagar con agua abundante (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad). Proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Náuseas. Vómitos. Además ver Inhalación.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Enjuagar la boca. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Eliminar toda fuente de ignición. Protección personal: respirador con filtro para gases y vapores orgánicos de bajo punto de ebullición adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. Ventilar. Recoger el líquido procedente de la fuga en recipientes precintables. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte. A continuación, almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local. NO verterlo en el alcantarillado.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p>  <p>PELIGRO</p> <p>Líquido y vapores muy inflamables Provoca irritación ocular</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Grupo de Embalaje/Envase ONU: II</p>
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio. Separado de: ver Peligros Químicos. Almacenar en un área sin acceso a desagües o alcantarillas.	
ENVASADO	



Organización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



European
Commission

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

LÍQUIDO INCOLORO DE OLORES CARACTERÍSTICOS.

Peligros físicos

El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante.

Peligros químicos

El contacto con oxidantes fuertes tales como ácido acético, ácido nítrico y peróxido de hidrógeno genera peróxidos explosivos. Reacciona con cloroformo y bromoformo en condiciones básicas. Esto genera peligro de incendio y explosión. Ataca los plásticos.

Fórmula: C₃H₆O / CH₃-CO-CH₃

Masa molecular: 58.1

Punto de ebullición: 56°C

Punto de fusión: -95°C

Densidad relativa (agua = 1): 0.8

Solubilidad en agua: miscible

Presión de vapor, kPa a 20°C: 24

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.0

Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.2

Punto de inflamación: -18°C c.c.

Temperatura de autoignición: 465°C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2.2-13

Coefficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.24

Viscosidad: 0.34 mm²/s a 40°C

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación.

Efectos de exposición de corta duración

La sustancia irrita los ojos y el tracto respiratorio. La exposición a concentraciones altas podría causar disminución del estado de alerta.

Riesgo de inhalación

Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire, más rápidamente por pulverización o cuando se dispersa.

Efectos de exposición prolongada o repetida

La sustancia desengrasa la piel, lo que puede producir sequedad y agrietamiento. El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir sequedad y agrietamiento.

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

TLV: 250 ppm como TWA; 500 ppm como STEL; BEI establecido; A4 (no clasificado como cancerígeno humano).

MAK: 1200 mg/m³, 500 ppm; categoría de limitación de pico: I(2); riesgo para el embarazo: grupo B.

EU-OEL: 1210 mg/m³, 500 ppm como TWA

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

El consumo de bebidas alcohólicas aumenta el efecto nocivo.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Límites de Exposición Profesional (INSST 2021):

VLA-ED: 500 ppm; 1210 mg/m³

VLB: 50 mg/l (en orina). Nota I: El determinante es inespecífico puesto que puede encontrarse después de la exposición a otros agentes químicos.

- Nº de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 606-001-00-8

- **Clasificación UE**

Pictograma: F, Xi; R: 11-36-66-67; S: (2)-9-16-26



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



Instituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

DIISOPROPILÉTERÉter isopropílico
2,2'-Oxibispropano
2-Isopropoxipropano

ICSC: 0906

Marzo 1996

CAS: 108-20-3

Nº ONU: 1159

CE: 203-560-6

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Altamente inflamable. Las mezclas vapor/aire son explosivas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. Evitar la generación de cargas electrostáticas (p. ej., mediante conexión a tierra).	Usar agua pulverizada, AFFF, polvo, espuma resistente al alcohol, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Somnolencia. Dolor de garganta.	Usar ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Piel seca. Enrojecimiento.	Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar la piel con agua abundante o ducharse.
Ojos	Enrojecimiento.	Utilizar gafas de protección.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Además ver Inhalación.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. Reposo. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
¡Evacuar la zona de peligro! ¡Consultar a un experto! Protección personal: equipo autónomo de respiración. Ventilar. Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes precintables de metal. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte. A continuación, almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local. NO verterlo en el alcantarillado.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU
ALMACENAMIENTO	Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Grupo de Embalaje/Envase ONU: II
A prueba de incendio. Fresco. Mantener en la oscuridad. Mantener en lugar bien ventilado. Almacenar solamente si está estabilizado.	
ENVASADO	

Organización
Internacional
del TrabajoOrganización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018

European
Commission

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

LÍQUIDO INCOLORO DE OLORES CARACTERÍSTICOS.

Peligros físicos

El vapor es más denso que el aire y puede extenderse a ras del suelo; posible ignición en punto distante. Como resultado del flujo, agitación, etc., se pueden generar cargas electrostáticas.

Peligros químicos

La sustancia puede formar fácilmente peróxidos explosivos si no está estabilizada y estallar por sacudidas.

Fórmula: C₆H₁₄O / (CH₃)₂CHOCH(CH₃)₂

Masa molecular: 102.18

Punto de ebullición: 69°C

Punto de fusión: -60°C

Densidad relativa (agua = 1): 0.7

Solubilidad en agua: escasa

Presión de vapor, kPa a 20°C: 15.9

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 3.5

Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.5

Punto de inflamación: -28°C

Temperatura de autoignición: 443°C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 1.4-7.9

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor.

Efectos de exposición de corta duración

La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central. La exposición por encima del LEP podría causar disminución del estado de alerta.

Riesgo de inhalación

Por evaporación de esta sustancia a 20°C se puede alcanzar bastante rápidamente una concentración nociva en el aire.

Efectos de exposición prolongada o repetida

El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir dermatitis.

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

TLV: 250 ppm como TWA; 310 ppm como STEL.

MAK: 850 mg/m³, 200 ppm; categoría de limitación de pico: I(2); riesgo para el embarazo: grupo C

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

Normalmente contiene p-bencilaminofenol como estabilizante.

La adición de estabilizantes o inhibidores puede influir sobre las propiedades toxicológicas de esta sustancia; consultar a un experto.

Antes de la destilación comprobar si existen peróxidos; en caso positivo, eliminarlos.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Límites de exposición profesional (INSHT 2012):

VLA-ED: 250 ppm, 1060 mg/m³VLA-EC: 310 ppm, 1310 mg/m³

- N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 603-045-00-X

- Clasificación UE

Pictograma: F; R: 11-19-66-67; S: (2)-9-16-29-33; Nota: C

GOBIERNO
DE ESPAÑAMINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIALInstituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

ALCOHOL ISOPROPÍLICO

ICSC: 0554

2-Propanol
Isopropanol
Dimetilcarbinol
1-Metiletanol
2-Hidroxipropano

Julio 2020


CAS: 67-63-0

N° ONU: 1219

CE: 200-661-7

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Altamente inflamable. Las mezclas vapor/aire son explosivas. Riesgo de explosión en contacto con oxidantes fuertes.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. NO poner en contacto con oxidantes fuertes. Sistema cerrado, ventilación, equipo eléctrico y de alumbrado a prueba de explosión. NO utilizar aire comprimido para llenar, vaciar o manipular.	Usar agua, polvo, espuma resistente al alcohol, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Dolor de garganta. Tos. Dolor de cabeza. Vértigo. Somnolencia. Además ver Ingestión.	Usar ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Piel seca.	Guantes de protección.	Aclarar con agua abundante durante 15 minutos como mínimo, después quitar la ropa contaminada y aclarar de nuevo. Ver Notas.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor. Visión borrosa. Quemaduras.	Utilizar gafas de protección o protección ocular en combinación con protección respiratoria.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Ver Inhalación. Dolor abdominal. Náuseas. Vómitos. Ataxia. Convulsiones. Dificultad respiratoria. Presión sanguínea baja. Arritmia cardíaca. Pérdida del conocimiento.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. No dar nada a beber. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
¡Evacuar la zona de peligro! ¡Consultar a un experto! Eliminar toda fuente de ignición. Protección personal: respirador con filtro para gases y vapores orgánicos adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. Recoger, en la medida de lo posible, el líquido que se derrama y el ya derramado en recipientes precintables que no sean de plástico. Absorber el líquido residual en arena o absorbente inerte. A continuación, almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local. Eliminar el residuo con agua abundante.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p> <div style="text-align: center;">  <p>PELIGRO</p> </div> <p>Líquido y vapores muy inflamables Provoca irritación ocular grave Puede provocar somnolencia o vértigo</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Grupo de Embalaje/Envase ONU: II</p>
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio. Separado de oxidantes fuertes. Fresco. Bien cerrado.	
ENVASADO	

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

LÍQUIDO INCOLORO.

Peligros físicos

El vapor se mezcla bien con el aire, formándose fácilmente mezclas explosivas.

Peligros químicos

Reacciona con oxidantes fuertes. Esto genera peligro de explosión. Se descompone por calentamiento intenso. Esto produce humos irritantes y gas tóxico e inflamable. Ataca algunos plásticos y el caucho.

Fórmula: C₃H₈O / CH₃CHOHCH₃

Masa molecular: 60.1

Punto de ebullición: 83°C

Punto de fusión: -90°C

Densidad relativa (agua = 1): 0.79

Solubilidad en agua: miscible

Presión de vapor, kPa a 20°C: 4.4

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 2.1

Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.05

Punto de inflamación: 11.7°C c.c.

Temperatura de autoignición: 456°C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 2-12

Coefficiente de reparto octanol/agua como log Pow: 0.05

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor.

Efectos de exposición de corta duración

La sustancia irrita los ojos y el tracto respiratorio. La sustancia puede afectar al sistema nervioso central. La exposición muy por encima del LEP podría causar pérdida del conocimiento.

Riesgo de inhalación

La evaporación de esta sustancia a 20°C producirá bastante lentamente una concentración nociva de la misma en aire; sin embargo, más rápidamente por pulverización o cuando se dispersa.

Efectos de exposición prolongada o repetida

El contacto prolongado o repetido con la piel puede producir sequedad y agrietamiento.

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

TLV: 200 ppm como TWA; 400 ppm como STEL; A4 (no clasificado como cancerígeno humano); BEI establecido.

MAK: 500 mg/m³, 200 ppm; categoría de limitación de pico: II(2); riesgo para el embarazo: grupo C

MEDIO AMBIENTE

Los efectos de esta sustancia sobre el medio ambiente han sido investigados adecuadamente, pero no se ha encontrado ninguno significativo.

NOTAS

El peligro de incendio es el riesgo principal si una gran superficie de la piel y la ropa está expuesta a la sustancia pura. En este caso se recomienda aclarar con agua en primer lugar y después quitar la ropa.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Límites de exposición profesional (INSST 2019):

VLA-ED: 200 ppm, 500 mg/m³

VLA-EC: 400 ppm, 1000 mg/m³

Notas: esta sustancia tiene prohibida total o parcialmente su comercialización y uso como fitosanitario y/o biocida.

VLB: 40 mg/l en orina de acetona. Notas F,I.

- N° de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 603-117-00-0

- **Clasificación UE**



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



Instituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

DIACETONA ALCOHOL4-Hidroxi-4-metil-2-pentanona
4-Hidroxi-2-ceto-4-metilpentano

ICSC: 0647

Abril 2005

CAS: 123-42-2

Nº ONU: 1148

CE: 204-626-7

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	Inflamable. Ver Notas. Por encima de 58°C pueden formarse mezclas explosivas vapor/aire. Ver Notas.	Evitar las llamas, NO producir chispas y NO fumar. Por encima de 58°C, sistema cerrado, ventilación y equipo eléctrico a prueba de explosión. Utilícense herramientas manuales no generadoras de chispas.	Usar agua pulverizada, espuma resistente al alcohol, polvo seco, dióxido de carbono. En caso de incendio: mantener fríos los bidones y demás instalaciones rociando con agua.

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Dolor de garganta.	Usar ventilación, extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo.
Piel	Enrojecimiento. Piel seca. ¡PUEDE ABSORBERSE!	Guantes de protección. Traje de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar y lavar la piel con agua y jabón.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar gafas de protección de montura integral.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión		No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo.	Enjuagar la boca. NO provocar el vómito. Dar a beber uno o dos vasos de agua. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Eliminar toda fuente de ignición. Protección personal: respirador con filtro para gases y vapores orgánicos adaptado a la concentración de la sustancia en el aire. Cubrir el material derramado con un absorbente inerte. Recoger cuidadosamente el residuo.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 3; Grupo de Embalaje/Envase ONU: III
ALMACENAMIENTO	
A prueba de incendio. Separado de ácidos, bases, aminas y oxidantes.	
ENVASADO	



La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.
© OIT y OMS 2018



INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

LÍQUIDO INCOLORO DE OLORES CARACTERÍSTICOS.

Peligros físicos
Peligros químicos

Se descompone por calentamiento intenso o al arder o en contacto con ácidos, bases y aminas. Esto produce acetona y alcohol metílico. Reacciona violentamente con oxidantes. Esto produce gas inflamable/explosivo (hidrógeno - ver FISQ 0001).

Fórmula: $C_6H_{12}O_2 / (CH_3)_2C(OH)CH_2COCH_3$

Masa molecular: 116.2

Punto de ebullición: 169-171°C

Punto de fusión: -47°C

Densidad relativa (agua = 1): 0.93

Solubilidad en agua: miscible

Presión de vapor, kPa a 20°C: 0.108

Densidad relativa de vapor (aire = 1): 4.0

Densidad relativa de la mezcla vapor/aire a 20°C (aire = 1): 1.0048

Punto de inflamación: 58°C c.c.

Temperatura de autoignición: 640°C

Límites de explosividad, % en volumen en el aire: 1.8-6.9

Coefficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -0.14 - 1.03 (calculado)

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación del vapor, a través de la piel y por ingestión.

Efectos de exposición de corta duración

La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La ingestión del líquido puede dar lugar a la aspiración del mismo por los pulmones y a la consiguiente neumonitis química. La exposición muy por encima del LEP podría causar disminución del estado de alerta.

Riesgo de inhalación

Por evaporación de esta sustancia a 20°C no se alcanza, o se alcanza sólo muy lentamente, una concentración nociva en el aire.

Efectos de exposición prolongada o repetida

La sustancia desengrasa la piel, lo que puede producir sequedad y agrietamiento.

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

TLV: 50 ppm como TWA.

MAK: 96 mg/m³, 20 ppm; categoría de limitación de pico: I(2); absorción dérmica (H); riesgo para el embarazo: grupo D

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

Esta ficha hace referencia solamente a la sustancia pura.

El producto técnico puede contener hasta un 5% de acetona (ver FISQ 0087), dando lugar a inflamabilidad alta.

Otra clasificación ONU para el producto comercial: clase de peligro 3, grupo emb/env II.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Límites de exposición profesional (INSHT 2012):

VLA-ED: 50 ppm; 241 mg/m³

- Nº de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 603-016-00-1

- **Clasificación UE**

Pictograma: Xi; R: 36; S: (2)-24/25



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



Instituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

CAS: 7632-00-0
Nº ONU: 1500
CE: 231-555-9

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible pero facilita la combustión de otras sustancias. Muchas reacciones pueden producir incendio o explosión. En caso de incendio se desprenden humos (o gases) tóxicos e irritantes.	NO poner en contacto con sustancias combustibles.	En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado.

¡EVITAR LA DISPERSIÓN DEL POLVO!

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Labios, uñas y piel azulados. Confusión mental. Convulsiones. Vértigo. Dolor de cabeza. Náuseas. Pérdida del conocimiento.	Usar extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Puede ser necesaria respiración artificial. Proporcionar asistencia médica.
Piel		Guantes de protección.	Aclarar con agua abundante durante 15 minutos como mínimo, después quitar la ropa contaminada y aclarar de nuevo.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar gafas de protección.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Ritmo cardíaco acelerado. Ver Inhalación.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Provocar el vómito (¡ÚNICAMENTE EN PERSONAS CONSCIENTES!). Dar a beber uno o dos vasos de agua. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Protección personal: respirador con filtro para partículas adaptado a la concentración de la sustancia en aire. NO permitir que este producto químico se incorpore al ambiente. Barrer la sustancia derramada e introducirla en un recipiente tapado. Si fuera necesario, humedecer el polvo para evitar su dispersión. Recoger cuidadosamente el residuo. A continuación, almacenar y eliminar el residuo conforme a la normativa local.	<p>Conforme a los criterios del GHS de la ONU</p> <p>Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 5.1; Peligro Secundario ONU: 6.1; Grupo de Embalaje/Envase ONU: III</p>
ALMACENAMIENTO	
Separado de sustancias combustibles, reductores y ácidos. Seco. Bien cerrado.	
ENVASADO	



**Organización
Mundial de la Salud**

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.

© OIT y OMS 2018



**European
Commission**

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

SÓLIDO HIGROSCÓPICO DE BLANCO A AMARILLO EN DIVERSAS FORMAS.

Peligros físicos
Peligros químicos

Puede explotar por calentamiento por encima de 530°C. Se descompone en contacto con ácidos. Esto produce humos tóxicos de óxidos de nitrógeno. La sustancia es un oxidante fuerte. Reacciona con materiales reductores y combustibles. Esto genera peligro de incendio y explosión. La disolución en agua es una base débil. Reacciona con aluminio, compuestos de amonio y aminas.

Fórmula: NaNO₂

Masa molecular: 69.0

Se descompone por debajo del punto de ebullición

Punto de fusión: No tiene punto de fusión; se descompone a 280°C

Densidad: 2.2 g/cm³

Solubilidad en agua, g/100ml a 20°C: 82

Coefficiente de reparto octanol/agua como log Pow: -3.7

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación del aerosol y por ingestión.

Efectos de exposición de corta duración

La sustancia irrita los ojos. La sustancia puede afectar al sistema cardiovascular y a la sangre. Esto puede dar lugar a disminución de la presión sanguínea y formación de metahemoglobina. La exposición podría causar la muerte. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata. Se recomienda vigilancia médica.

Riesgo de inhalación

La evaporación a 20°C es despreciable; sin embargo, se puede alcanzar rápidamente una concentración nociva de partículas en el aire.

Efectos de exposición prolongada o repetida

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

MEDIO AMBIENTE

La sustancia es tóxica para los organismos acuáticos.

NOTAS

Enjuagar la ropa contaminada con agua abundante (peligro de incendio).

En caso de envenenamiento con esta sustancia es necesario realizar un tratamiento específico; así como disponer de los medios adecuados junto a las instrucciones correspondientes.

Está indicado un examen médico periódico dependiendo del grado de exposición.

INFORMACIÓN ADICIONAL

- Nº de índice (clasificación y etiquetado armonizados conforme al Reglamento CLP de la UE): 007-010-00-4

- **Clasificación UE**

Pictograma: O, T, N; R: 8-25-50; S: (1/2)-45-61



GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



Instituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSSST, 2018

CAS: 7631-99-4

N° ONU: 1498

CE: 231-554-3

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible pero facilita la combustión de otras sustancias. En caso de incendio se desprenden humos (o gases) tóxicos e irritantes. Riesgo de incendio y explosión en contacto con reductores.	NO poner en contacto con sustancias combustibles o reductores.	En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado.

¡EVITAR LA DISPERSIÓN DEL POLVO!

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Dolor de garganta.	Usar extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Enrojecimiento.	Guantes de protección.	Aclarar con agua abundante durante 15 minutos como mínimo, después quitar la ropa contaminada y aclarar de nuevo.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar gafas de protección de montura integral.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Labios, uñas y piel azulados. Convulsiones. Diarrea. Vértigo. Dolor de cabeza. Dificultad respiratoria. Confusión. Náuseas. Pérdida del conocimiento.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Enjuagar la boca. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Barrer la sustancia derramada e introducirla en recipientes de plástico o vidrio. Eliminar el residuo con agua abundante.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 5.1; Grupo de Embalaje/Envase ONU: III
ALMACENAMIENTO	
Separado de sustancias combustibles y reductores. Seco.	
ENVASADO	

Organización
Internacional
del TrabajoOrganización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.

© OIT y OMS 2018

European
Commission

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

CRISTALES INCOLOROS HIGROSCÓPICOS.

Peligros físicos
Peligros químicos

Se descompone por calentamiento. Esto aumenta el peligro de incendio. La sustancia es un oxidante fuerte. Reacciona con materiales reductores y combustibles. Esto genera peligro de incendio y explosión.

Fórmula: NaNO_3

Masa molecular: 85

Se descompone a 380°C

Punto de fusión: 308°C

Densidad: 2.3 g/cm³

Solubilidad en agua, g/100ml a 25°C: 92.1

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación del aerosol y por ingestión.

Efectos de exposición de corta duración

La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La ingestión podría afectar a la sangre. Esto puede dar lugar a formación de metahemoglobina. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata. Se recomienda vigilancia médica.

Riesgo de inhalación

La evaporación a 20°C es despreciable; sin embargo, se puede alcanzar rápidamente una concentración nociva de partículas en el aire cuando se dispersa.

Efectos de exposición prolongada o repetida

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

Enjuagar la ropa contaminada con agua abundante (peligro de incendio).

En caso de envenenamiento con esta sustancia es necesario realizar un tratamiento específico; así como disponer de los medios adecuados junto a las instrucciones correspondientes.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Clasificación UE


GOBIERNO
DE ESPAÑA

MINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIAL



Instituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

CAS: 7757-79-1

Nº ONU: 1486

CE: 231-818-8

	PELIGROS	PREVENCIÓN	LUCHA CONTRA INCENDIOS
INCENDIO Y EXPLOSIÓN	No combustible pero facilita la combustión de otras sustancias. En caso de incendio se desprenden humos (o gases) tóxicos e irritantes. Riesgo de incendio y explosión en contacto con reductores.	NO poner en contacto con sustancias combustibles o reductores.	En caso de incendio en el entorno: usar un medio de extinción adecuado.

¡EVITAR LA DISPERSIÓN DEL POLVO!

	SÍNTOMAS	PREVENCIÓN	PRIMEROS AUXILIOS
Inhalación	Tos. Dolor de garganta.	Usar extracción localizada o protección respiratoria.	Aire limpio, reposo. Proporcionar asistencia médica.
Piel	Enrojecimiento.	Guantes de protección.	Quitar las ropas contaminadas. Aclarar y lavar la piel con agua y jabón.
Ojos	Enrojecimiento. Dolor.	Utilizar gafas de protección de montura integral.	Enjuagar con agua abundante durante varios minutos (quitar las lentes de contacto si puede hacerse con facilidad), después proporcionar asistencia médica.
Ingestión	Dolor abdominal. Labios, uñas y piel azulados. Vértigo. Dificultad respiratoria. Confusión. Convulsiones. Diarrea. Dolor de cabeza. Náuseas. Pérdida del conocimiento.	No comer, ni beber, ni fumar durante el trabajo. Lavarse las manos antes de comer.	Enjuagar la boca. Proporcionar asistencia médica.

DERRAMES Y FUGAS	CLASIFICACIÓN Y ETIQUETADO
Barrer la sustancia derramada e introducirla en recipientes de plástico o vidrio. Eliminar el residuo con agua abundante.	Conforme a los criterios del GHS de la ONU Transporte Clasificación ONU Clase de Peligro ONU: 5.1; Grupo de Embalaje/Envase ONU: III
ALMACENAMIENTO	
Separado de sustancias combustibles y reductores.	
ENVASADO	

Organización
Internacional
del TrabajoOrganización
Mundial de la Salud

La información original ha sido preparada en inglés por un grupo internacional de expertos en nombre de la OIT y la OMS, con la asistencia financiera de la Comisión Europea.

© OIT y OMS 2018

European
Commission

INFORMACIÓN FÍSICO-QUÍMICA

Estado físico; aspecto

POLVO DE INCOLORO A BLANCO CRISTALINO.

Peligros físicos**Peligros químicos**

Se descompone por calentamiento. Esto aumenta el peligro de incendio. La sustancia es un oxidante fuerte. Reacciona con materiales reductores y combustibles.

Fórmula: KNO_3

Masa molecular: 101.1

Se descompone a 400°C

Punto de fusión: 333-334°C

Densidad: 2.1 g/cm³

Solubilidad en agua, g/100ml a 25°C: 35.7

EXPOSICIÓN Y EFECTOS SOBRE LA SALUD

Vías de exposición

La sustancia se puede absorber por inhalación del aerosol y por ingestión.

Efectos de exposición de corta duración

La sustancia irrita los ojos, la piel y el tracto respiratorio. La ingestión podría afectar a la sangre. Esto puede dar lugar a formación de metahemoglobina. Los efectos pueden aparecer de forma no inmediata. Se recomienda vigilancia médica.

Riesgo de inhalación

La evaporación a 20°C es despreciable; sin embargo, se puede alcanzar rápidamente una concentración nociva de partículas en el aire cuando se dispersa.

Efectos de exposición prolongada o repetida

LÍMITES DE EXPOSICIÓN LABORAL

MEDIO AMBIENTE

NOTAS

Enjuagar la ropa contaminada con agua abundante (peligro de incendio).

En caso de envenenamiento con esta sustancia es necesario realizar un tratamiento específico; así como disponer de los medios adecuados junto a las instrucciones correspondientes.

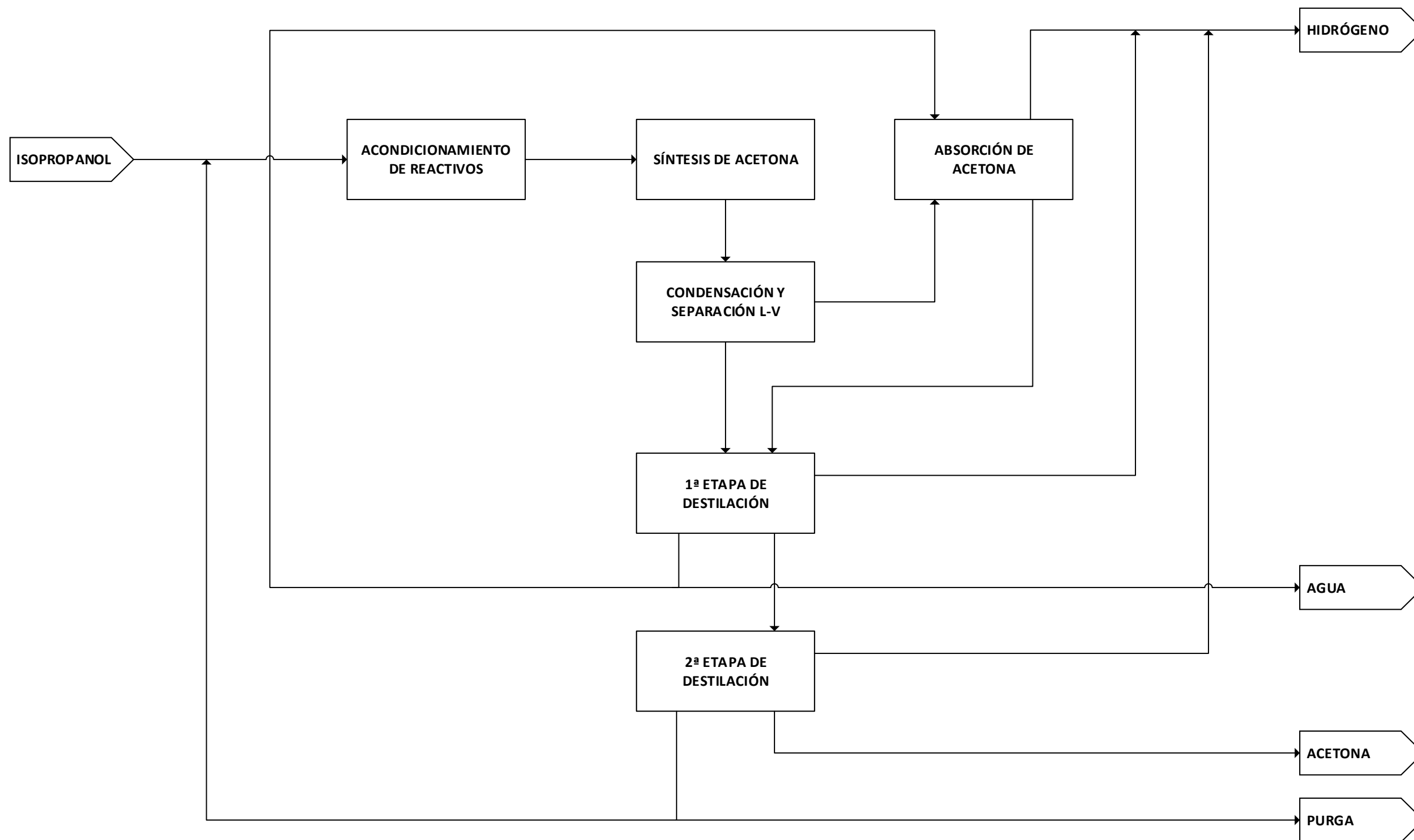
INFORMACIÓN ADICIONAL

Clasificación UEGOBIERNO
DE ESPAÑAMINISTERIO
DE TRABAJO
Y ECONOMÍA SOCIALInstituto Nacional de
Seguridad y Salud en el Trabajo

La calidad y exactitud de la traducción o el posible uso que se haga de esta información no es responsabilidad de la OIT, la OMS ni la Comisión Europea.

© Versión en español, INSST, 2018

ANEXO IV – Planos



NOTAS GENERALES

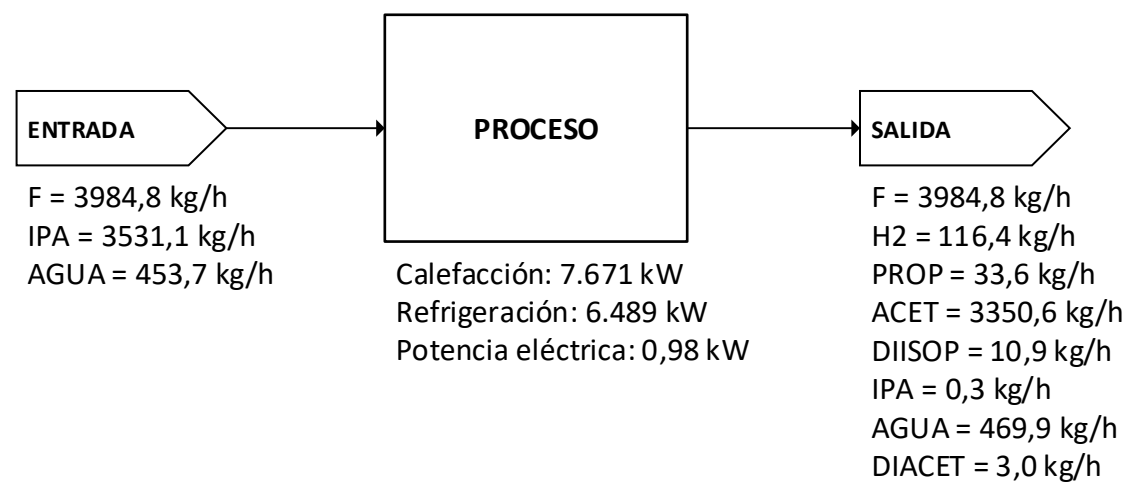
1- LA TABLA DE CORRIENTES DEL PROCESO SE ENCUENTRA EN EL ANEXO V – TABLA DE CORRIENTES

2- EN LA PARTE INFERIOR DEL DIAGRAMA SE MUESTRA UN BALANCE DE MATERIA GLOBAL DEL PROCESO JUNTO A LOS REQUERIMIENTOS ENERGÉTICOS DE LA PLANTA

ACRÓNIMOS

- F: FLUJO MÁSSICO TOTAL (kg/h)
- H2: HIDRÓGENO
- PROP: PROPILENO
- ACET: ACETONA
- DIISOP: DIISOPROPIL ÉTER
- IPA: ISOPROPANOL
- DIAC: DIACETONA ALCOHOL

BALANCE DE MATERIA GLOBAL Y REQUERIMIENTOS ENERGÉTICOS



REVISIÓN	0	1		
FECHA	06/07/21	13/07/21		
DIBUJADO	D.S.S.	D.S.S.		
APROBADO	R.B.M.C.	D.S.S.		



Universidad de Valladolid



ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES

TRABAJO FINAL DE GRADO

DISEÑO DE UNA PLANTA PARA LA PRODUCCIÓN DE ACETONA A PARTIR DE ISOPROPANOL

NOMBRE DEL PLANO:

A3-BD-101-1

AUTOR: DAVID SANZ SASTRE

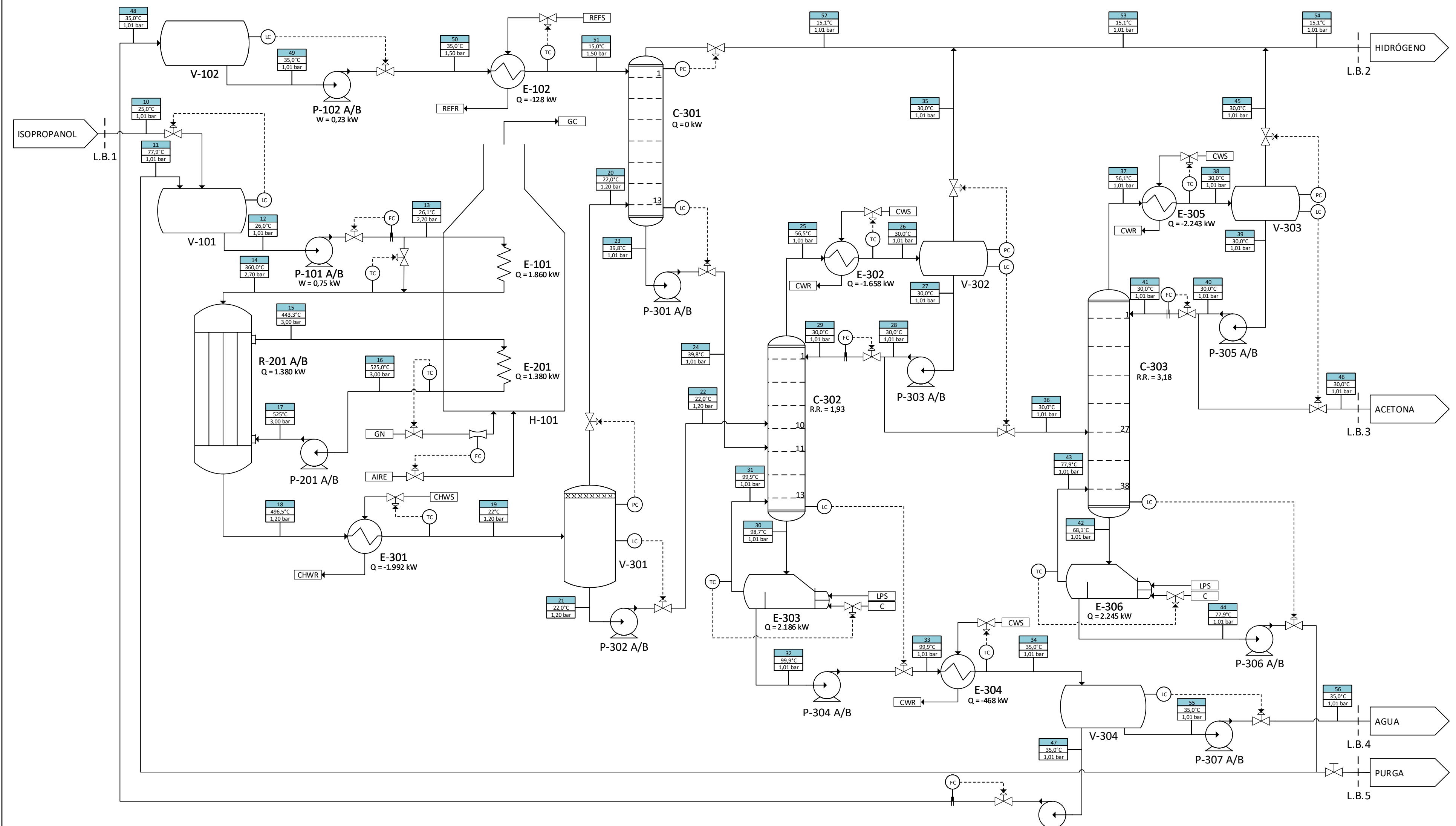
TUTOR: RAFAEL B. MATO CHAIN

V-101 DEPÓSITO HORIZONTAL ALIMENTACIÓN IPA	P-101 A/B BOMBA CENTRÍFUGA ALIMENTACIÓN IPA	E-101 EBULLIDOR ALIMENTACIÓN IPA	V-102 DEPÓSITO HORIZONTAL AGUA	P-102 A/B BOMBA CENTRÍFUGA AGUA	E-102 REFRIGERADOR AGUA	H-101 HORNO GAS NATURAL	E-201 CALENTADOR SAL FUNDIDA	P-201 A/B BOMBA CENTRÍFUGA SAL FUNDIDA	R-201 A/B REACTOR MULTITUBULAR ACETONA	E-301 CONDENSADOR PRODUCTOS	V-301 DEPÓSITO VERTICAL SEPARADOR L-V	C-301 ABSORBEDOR ACETONA
P-301 A/B BOMBA CENTRÍFUGA LÍQUIDO C-301	P-302 A/B BOMBA CENTRÍFUGA LÍQUIDO V-301	C-302 COLUMNA DESTILACIÓN ACETONA	E-302 CONDENSADOR CABEZAS C-302	V-302 DEPÓSITO HORIZONTAL CABEZAS C-302	P-303 A/B BOMBA CENTRÍFUGA REFLUJO C-302	E-303 EBULLIDOR KETTLE COLAS C-302	P-304 A/B BOMBA CENTRÍFUGA COLAS C-302	E-304 REFRIGERADOR COLAS C-302	C-303 COLUMNA DESTILACIÓN PRODUCTO ACETONA	E-305 CONDENSADOR CABEZAS C-303	V-303 DEPÓSITO HORIZONTAL CABEZAS C-303	P-305 A/B BOMBA CENTRÍFUGA REFLUJO C-303
E-306 EBULLIDOR KETTLE COLAS C-303	P-306 A/B BOMBA CENTRÍFUGA COLAS C-302	V-304 DEPÓSITO HORIZONTAL RECIRCULACIÓN AGUA	P-307 A/B BOMBA CENTRÍFUGA AGUA V-304	P-308 A/B BOMBA CENTRÍFUGA RECIRCULACIÓN V-304								

NOTAS GENERALES

1- LA TABLA DE CORRIENTES DEL PROCESO SE ENCUENTRA EN EL ANEXO V – TABLA DE CORRIENTES

2- EN LOS EQUIPOS SE MUESTRAN ALGUNOS DE LOS PARÁMETROS DE OPERACIÓN. PARA MÁS DETALLE, CONSULTAR EL ANEXO VI - EQUIPOS



SÍMBOLOS Y ACRÓNIMOS

EQUIPOS

- Q: CALOR INTERCAMBIADO (kW)
- W: POTENCIA ELÉCTRICA (kW)
- R.R.: RELACIÓN DE REFLUJO
- A/B: EQUIPO DUPLICADO
- REFS: ENTRADA DE REFRIGERANTE
- REFR: SALIDA DE REFRIGERANTE
- GN: GAS NATURAL
- GC: GASES DE COMBUSTIÓN
- CHWS: ENTRADA DE AGUA REFRIGERADA
- CHWR: SALIDA DE AGUA REFRIGERADA
- CWS: ENTRADA DE AGUA DE REFRIGERACIÓN
- CWR: SALIDA DE AGUA DE REFRIGERACIÓN
- LPS: VAPOR DE BAJA PRESIÓN
- C: CONDENSADO

CONTROL

- TC: CONTROL DE TEMPERATURA
- PC: CONTROL DE PRESIÓN
- LC: CONTROL DE NIVEL
- FC: CONTROL DE FLUJO

OTROS

- L.B.: LÍMITE DE BATERÍA
- IPA: ISOPROPANOL

LÍNEAS

- CORRIENTE DE PROCESO
- SEÑAL ELÉCTRICA DE CONTROL
- - - LÍMITE DE BATERÍA
- - - X PLATO DE TORRE (X: N° PLATO)

INSTRUMENTOS

- ⊗ VÁLVULA DE CONTROL
- ⊗ VÁLVULA MANUAL
- ⊗ VENTURI
- || PLACA ORIFICIO
- ⊗ CONTROLADOR (X: VARIABLE CONTROLADA)

ANOTACIONES

- X: N° CORRIENTE
- Y: TEMPERATURA (°C)
- Z: PRESIÓN (BAR)

REVISIÓN	0	1	2
FECHA	29/06/21	04/07/21	11/07/21
DIBUJADO	D.S.S.	D.S.S.	D.S.S.
APROBADO	D.S.S.	R.B.M.C.	D.S.S.

ESCUELA DE INGENIERÍAS INDUSTRIALES
 Universidad de Valladolid

TRABAJO FINAL DE GRADO

DISEÑO DE UNA PLANTA PARA LA PRODUCCIÓN DE ACETONA A PARTIR DE ISOPROPANOL

NOMBRE DEL PLANO:
A2-PFD-101-2

AUTOR: DAVID SANZ SASTRE

TUTOR: RAFAEL B. MATO CHAIN

ANEXO V – Tabla de corrientes

Corriente	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
Desde	L.B.1	P-306 A/B	V-101	P-101 A/B	E-101	R-201 A/B	E-201	P-201 A/B	R-201 A/B	E-301	V-301	V-301	P-302 A/B
Hasta	V-101	V-101	P-101 A/B	E-101	R-201 A/B	E-201	P-201 A/B	R-201 A/B	E-301	V-301	C-301	P-302 A/B	C-302
Temperatura (°C)	25,0	77,9	26,0	26,1	360,0	443,3	525,0	525,0	496,5	22,0	22,0	22,0	22,0
Presión (bar)	1,01	1,01	1,01	2,70	2,70	3,00	3,00	3,00	1,20	1,20	1,20	1,20	1,20
Fración de vapor (molar)	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,5032	1,0000	0,0000	0,0000
Masa molecular media	47,47	25,79	46,89	46,89	46,89	81,49	81,49	81,49	27,94	27,94	12,92	43,15	43,15
Entalpía molar (kJ·kmol ⁻¹)	-308.755	-285.467	-308.132	-308.101	-230.444	83.496	97.723	97.722	-102.986	-152.523	-42.815	-263.636	-263.636
Entalpía másica (kJ·kg ⁻¹)	-6.504	-11.067	-6.571	-6.570	-4.914	1.025	1.199	1.199	-3.686	-5.459	-3.314	-6.110	-6.110
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	83,94	2,31	86,25	86,25	86,25	349,12	349,12	349,12	144,77	144,77	72,84	71,92	71,92
Hidrógeno	0,00	3,3E-24	3,3E-24	3,3E-24	3,3E-24	0,00	0,00	0,00	57,74	57,74	57,73	0,01	0,01
Propileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,80	0,80	0,79	5,9E-03	5,9E-03
Acetona	0,00	0,06	0,06	0,06	0,06	0,00	0,00	0,00	57,75	57,75	13,14	44,61	44,61
Diisopropil éter	0,00	8,3E-10	8,3E-10	8,3E-10	8,3E-10	0,00	0,00	0,00	0,11	0,11	0,07	0,04	0,04
Isopropanol	58,76	0,37	59,13	59,13	59,13	0,00	0,00	0,00	0,38	0,38	0,03	0,34	0,34
Agua	25,18	1,88	27,06	27,06	27,06	0,00	0,00	0,00	27,96	27,96	1,08	26,88	26,88
Diacetona alcohol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,03	0,03	1,3E-06	0,03	0,03
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	23,10	23,10	23,10	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	124,38	124,38	124,38	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	201,64	201,64	201,64	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fraciones molares													
Hidrógeno	0,0000	1,4E-24	3,8E-26	3,8E-26	3,8E-26	0,0000	0,0000	0,0000	0,3989	0,3989	0,7925	0,0002	0,0002
Propileno	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0055	0,0055	0,0109	8,2E-05	8,2E-05
Acetona	0,0000	0,0249	0,0007	0,0007	0,0007	0,0000	0,0000	0,0000	0,3989	0,3989	0,1804	0,6202	0,6202
Diisopropil éter	0,0000	3,6E-10	9,6E-12	9,6E-12	9,6E-12	0,0000	0,0000	0,0000	0,0007	0,0007	0,0009	0,0006	0,0006
Isopropanol	0,7000	0,1611	0,6856	0,6856	0,6856	0,0000	0,0000	0,0000	0,0026	0,0026	0,0004	0,0048	0,0048
Agua	0,3000	0,8139	0,3137	0,3137	0,3137	0,0000	0,0000	0,0000	0,1932	0,1932	0,0148	0,3738	0,3738
Diacetona alcohol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0002	0,0002	1,7E-08	0,0004	0,0004
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0662	0,0662	0,0662	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3563	0,3563	0,3563	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,5776	0,5776	0,5776	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujos másicos (kg·h ⁻¹)	3.984,78	59,49	4.044,27	4.044,27	4.044,27	28.449,68	28.449,68	28.449,68	4.044,27	4.044,27	941,05	3.103,21	3.103,21
Hidrógeno	0,00	6,7E-24	6,7E-24	6,7E-24	6,7E-24	0,00	0,00	0,00	116,40	116,40	116,38	0,03	0,03
Propileno	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	33,59	33,59	33,34	0,25	0,25
Acetona	0,00	3,34	3,34	3,34	3,34	0,00	0,00	0,00	3.353,99	3.353,99	763,17	2.590,80	2.590,80
Diisopropil éter	0,00	8,4E-08	8,4E-08	8,4E-08	8,4E-08	0,00	0,00	0,00	10,87	10,87	6,77	4,10	4,10
Isopropanol	3.531,12	22,33	3.553,45	3.553,45	3.553,45	0,00	0,00	0,00	22,62	22,62	1,92	20,70	20,70
Agua	453,66	33,82	487,48	487,48	487,48	0,00	0,00	0,00	503,78	503,78	19,47	484,31	484,31
Diacetona alcohol	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	3,02	3,02	1,5E-04	3,02	3,02
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1.963,03	1.963,03	1.963,03	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	12.574,76	12.574,76	12.574,76	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	13.911,89	13.911,89	13.911,89	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fraciones másicas													
Hidrógeno	0,0000	1,1E-25	1,7E-27	1,7E-27	1,7E-27	0,0000	0,0000	0,0000	0,0288	0,0288	0,1237	8,4E-06	8,4E-06
Propileno	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0083	0,0083	0,0354	8,0E-05	8,0E-05
Acetona	0,0000	0,0562	0,0008	0,0008	0,0008	0,0000	0,0000	0,0000	0,8293	0,8293	0,8110	0,8349	0,8349
Diisopropil éter	0,0000	1,4E-09	2,1E-11	2,1E-11	2,1E-11	0,0000	0,0000	0,0000	0,0027	0,0027	0,0072	0,0013	0,0013
Isopropanol	0,8862	0,3754	0,8786	0,8786	0,8786	0,0000	0,0000	0,0000	0,0056	0,0056	0,0020	0,0067	0,0067
Agua	0,1138	0,5685	0,1205	0,1205	0,1205	0,0000	0,0000	0,0000	0,1246	0,1246	0,0207	0,1561	0,1561
Diacetona alcohol	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0007	0,0007	1,5E-07	0,0010	0,0010
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0690	0,0690	0,0690	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,4420	0,4420	0,4420	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,4890	0,4890	0,4890	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujo volumétrico (m ³ ·h ⁻¹)	4,91	0,07	4,99	4,99	1668,28	99,05	103,30	103,30	7739,67	1496,04	1492,24	3,80	3,80
Densidad (kg·m ⁻³)	810,88	836,94	811,15	810,96	2,42	287,21	275,41	275,41	0,52	2,70	0,63	816,63	816,63
Viscosidad de gas (Pa·s)					1,85E-05				2,40E-05	1,07E-05	1,07E-05		
Viscosidad de líquido (Pa·s)	0,0016	0,0004	0,0015	0,0015		0,0015	0,0011	0,0011		0,0005		0,0005	0,0005

Corriente	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35
Desde	C-301	P-301 A/B	C-302	E-302	V-302	P-303 A/B	P-303 A/B	C-302	E-303	E-303	P-304 A/B	E-304	V-302
Hasta	P-301 A/B	C-302	E-302	V-302	P-303 A/B	C-302	C-302	E-303	C-302	P-304 A/B	E-304	V-304	L.B.2
Temperatura (°C)	39,8	39,8	56,5	30,0	30,0	30,0	30,0	98,7	99,9	99,9	99,9	35,0	30,0
Presión (bar)	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01
Fracción de vapor (molar)	0,0000	0,0000	1,0000	5,60E-05	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000
Masa molecular media	19,75	19,75	56,44	56,44	56,44	56,44	56,44	18,18	18,29	18,12	18,12	18,12	23,03
Entalpía molar (kJ·kmol ⁻¹)	-283.865	-283.865	-214.869	-248.405	-248.415	-248.415	-248.415	-280.426	-239.667	-280.282	-280.282	-285.307	-79.824
Entalpía másica (kJ·kg ⁻¹)	-14.375	-14.375	-3.807	-4.401	-4.401	-4.401	-4.401	-15.422	-13.101	-15.468	-15.468	-15.745	-3.467
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	323,79	323,79	177,97	177,97	177,96	177,96	117,26	526,83	191,85	334,97	334,97	334,97	0,01
Hidrógeno	4,8E-03	4,8E-03	0,04	0,04	0,03	0,03	0,02	1,1E-11	1,1E-11	2,8E-16	2,8E-16	2,8E-16	6,1E-03
Propileno	8,3E-04	8,3E-04	0,02	0,02	0,02	0,02	0,01	1,8E-11	1,8E-11	1,1E-15	1,1E-15	1,1E-15	1,4E-04
Acetona	13,15	13,15	169,27	169,27	169,27	169,27	111,53	0,43	0,42	0,01	0,01	0,01	3,6E-03
Diisopropil éter	4,4E-03	4,4E-03	0,13	0,13	0,13	0,13	0,09	2,9E-07	2,9E-07	5,9E-10	5,9E-10	5,9E-10	1,1E-05
Isopropanol	0,04	0,04	1,10	1,10	1,10	1,10	0,73	0,07	0,07	3,7E-03	3,7E-03	3,7E-03	1,0E-05
Agua	310,26	310,26	7,41	7,41	7,41	7,41	4,88	525,63	191,02	334,61	334,61	334,61	8,8E-05
Diacetona alcohol	0,33	0,33	7,0E-19	7,0E-19	7,0E-19	7,0E-19	4,6E-19	0,70	0,34	0,35	0,35	0,35	1,0E-26
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fracciones molares													
Hidrógeno	1,5E-05	1,5E-05	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	2,2E-14	5,9E-14	8,5E-19	8,5E-19	8,5E-19	0,6159
Propileno	2,6E-06	2,6E-06	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	3,4E-14	9,4E-14	3,4E-18	3,4E-18	3,4E-18	0,0137
Acetona	0,0406	0,0406	0,9511	0,9511	0,9511	0,9511	0,9511	0,0008	0,0022	3,9E-05	3,9E-05	3,9E-05	0,3594
Diisopropil éter	1,3E-05	1,3E-05	0,0007	0,0007	0,0007	0,0007	0,0007	5,5E-10	1,5E-09	1,8E-12	1,8E-12	1,8E-12	0,0011
Isopropanol	0,0001	0,0001	0,0062	0,0062	0,0062	0,0062	0,0062	0,0001	0,0004	1,1E-05	1,1E-05	1,1E-05	0,0010
Agua	0,9582	0,9582	0,0416	0,0416	0,0416	0,0416	0,0416	0,9977	0,9957	0,9989	0,9989	0,9989	0,0089
Diacetona alcohol	0,0010	0,0010	3,9E-21	3,9E-21	3,9E-21	3,9E-21	3,9E-21	0,0013	0,0018	0,0011	0,0011	0,0011	1,0E-24
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujos másicos (kg·h ⁻¹)	6.393,54	6.393,54	10.045,30	10.045,30	10.045,07	10.045,07	6.618,49	9.579,79	3.509,86	6.069,93	6.069,93	6.069,93	0,23
Hidrógeno	9,7E-03	9,7E-03	0,08	0,08	0,07	0,07	0,05	2,3E-11	2,3E-11	5,7E-16	5,7E-16	5,7E-16	0,01
Propileno	0,03	0,03	0,82	0,82	0,81	0,81	0,54	7,6E-10	7,6E-10	4,8E-14	4,8E-14	4,8E-14	5,7E-03
Acetona	763,76	763,76	9.831,31	9.831,31	9.831,10	9.831,10	6.477,50	25,24	24,49	0,75	0,75	0,75	0,21
Diisopropil éter	0,45	0,45	13,33	13,33	13,33	13,33	8,78	2,9E-05	2,9E-05	6,0E-08	6,0E-08	6,0E-08	1,2E-03
Isopropanol	2,11	2,11	66,23	66,23	66,23	66,23	43,64	4,37	4,15	0,22	0,22	0,22	6,0E-04
Agua	5.589,34	5.589,34	133,53	133,53	133,53	133,53	87,98	9.469,39	3.441,29	6.028,10	6.028,10	6.028,10	1,6E-03
Diacetona alcohol	37,84	37,84	8,1E-17	8,1E-17	8,1E-17	8,1E-17	5,3E-17	80,79	39,93	40,86	40,86	40,86	1,2E-24
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fracciones másicas													
Hidrógeno	1,5E-06	1,5E-06	8,1E-06	8,1E-06	6,9E-06	6,9E-06	6,9E-06	2,4E-15	6,5E-15	9,4E-20	9,4E-20	9,4E-20	0,0539
Propileno	5,4E-06	5,4E-06	8,2E-05	8,2E-05	8,1E-05	8,1E-05	8,1E-05	7,9E-14	2,2E-13	7,9E-18	7,9E-18	7,9E-18	0,0250
Acetona	0,1195	0,1195	0,9787	0,9787	0,9787	0,9787	0,9787	0,0026	0,0070	0,0001	0,0001	0,0001	0,9065
Diisopropil éter	7,0E-05	7,0E-05	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	0,0013	3,1E-09	8,4E-09	9,9E-12	9,9E-12	9,9E-12	0,0050
Isopropanol	0,0003	0,0003	0,0066	0,0066	0,0066	0,0066	0,0066	0,0005	0,0012	3,7E-05	3,7E-05	3,7E-05	0,0026
Agua	0,8742	0,8742	0,0133	0,0133	0,0133	0,0133	0,0133	0,9885	0,9805	0,9931	0,9931	0,9931	0,0069
Diacetona alcohol	0,0059	0,0059	8,1E-21	8,1E-21	8,1E-21	8,1E-21	8,1E-21	0,0084	0,0114	0,0067	0,0067	0,0067	5,2E-24
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujo volumétrico (m ³ ·h ⁻¹)	6,75	6,75	4698,21	13,05	12,81	12,81	8,44	10,43	5831,18	6,61	6,61	6,17	0,25
Densidad (kg·m ⁻³)	947,60	947,60	2,14	769,54	784,27	784,27	784,27	918,27	0,60	917,88	917,88	984,04	0,93
Viscosidad de gas (Pa·s)			8,48E-06	1,01E-05					1,26E-05				1,01E-05
Viscosidad de líquido (Pa·s)	0,0006	0,0006		0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003		0,0003	0,0003	0,0007	

Corriente	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48
Desde	P-303 A/B	C-303	E-305	V-303	P-305 A/B	P-305 A/B	C-303	E-306	E-306	V-303	P-305 A/B	V-304	P-308 A/B
Hasta	C-303	E-305	V-303	P-305 A/B	C-303	C-303	E-306	C-303	P-306 A/B	L.B.2	L.B.3	P-308 A/B	V-102
Temperatura (°C)	30,0	56,1	30,0	30,0	30,0	30,0	68,1	77,9	77,9	30,0	30,0	35,0	35,0
Presión (bar)	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01
Fracción de vapor (molar)	0,0000	1,0000	3,80E-06	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Masa molecular media	56,44	57,65	57,65	57,65	57,65	57,65	42,83	43,02	25,79	23,69	57,65	18,12	18,12
Entalpía molar (kJ·kmol ⁻¹)	-248.415	-213.728	-246.837	-246.837	-246.837	-246.837	-284.918	-245.022	-285.467	-80.690	-246.837	-285.307	-285.307
Entalpía máscica (kJ·kg ⁻¹)	-4.401	-3.707	-4.281	-4.281	-4.281	-4.281	-6.653	-5.696	-11.067	-3.406	-4.281	-15.745	-15.745
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	60,71	243,94	243,94	243,94	243,94	185,52	204,93	202,62	2,31	9,3E-04	58,39	310,52	310,52
Hidrógeno	0,01	0,05	0,05	0,05	0,05	0,04	9,7E-18	9,7E-18	3,3E-24	5,6E-04	0,01	2,6E-16	2,6E-16
Propileno	6,6E-03	0,03	0,03	0,03	0,03	0,02	0,00	0,00	0,00	1,6E-05	6,6E-03	1,1E-15	1,1E-15
Acetona	57,74	240,93	240,93	240,93	240,93	183,24	41,76	41,70	0,06	3,5E-04	57,68	0,01	0,01
Diisopropil éter	0,04	0,19	0,19	0,19	0,19	0,14	1,4E-06	1,4E-06	8,3E-10	1,1E-06	0,04	5,4E-10	5,4E-10
Isopropanol	0,38	0,02	0,02	0,02	0,02	0,01	81,07	80,70	0,37	1,2E-08	4,3E-03	3,4E-03	3,4E-03
Agua	2,53	2,72	2,72	2,72	2,72	2,07	82,10	80,22	1,88	2,6E-06	0,65	310,18	310,18
Diacetona alcohol	2,4E-19	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,33	0,33
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fracciones molares													
Hidrógeno	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	4,7E-20	4,8E-20	1,4E-24	0,6076	0,0002	8,5E-19	8,5E-19
Propileno	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0167	0,0001	3,4E-18	3,4E-18
Acetona	0,9511	0,9876	0,9876	0,9877	0,9877	0,9877	0,2038	0,2058	0,0249	0,3718	0,9877	3,9E-05	3,9E-05
Diisopropil éter	0,0007	0,0008	0,0008	0,0008	0,0008	0,0008	7,0E-09	7,1E-09	3,6E-10	0,0012	0,0008	1,8E-12	1,8E-12
Isopropanol	0,0062	7,4E-05	7,4E-05	7,4E-05	7,4E-05	7,4E-05	0,3956	0,3983	0,1611	1,2E-05	7,4E-05	1,1E-05	1,1E-05
Agua	0,0416	0,0112	0,0112	0,0112	0,0112	0,0112	0,4006	0,3959	0,8139	0,0028	0,0112	0,9989	0,9989
Diacetona alcohol	3,9E-21	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0011	0,0011
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujos máscicos (kg·h ⁻¹)	3.426,59	14.063,26	14.063,26	14.063,24	14.063,24	10.696,17	8.775,85	8.716,36	59,49	0,02	3.367,08	5.626,84	5.626,84
Hidrógeno	0,02	0,09	0,09	0,09	0,09	0,07	1,9E-17	1,9E-17	6,7E-24	1,1E-03	0,02	5,3E-16	5,3E-16
Propileno	0,28	1,16	1,16	1,16	1,16	0,88	0,00	0,00	0,00	6,5E-04	0,28	4,4E-14	4,4E-14
Acetona	3.353,60	13.992,94	13.992,94	13.992,92	13.992,92	10.642,68	2.425,06	2.421,72	3,34	0,02	3.350,24	0,70	0,70
Diisopropil éter	4,55	18,99	18,99	18,99	18,99	14,44	1,5E-04	1,5E-04	8,4E-08	1,1E-04	4,55	5,6E-08	5,6E-08
Isopropanol	22,59	1,08	1,08	1,08	1,08	0,82	4.871,80	4.849,47	22,33	7,0E-07	0,26	0,21	0,21
Agua	45,55	49,00	49,00	49,00	49,00	37,27	1.478,99	1.445,17	33,82	4,6E-05	11,73	5.588,05	5.588,05
Diacetona alcohol	2,8E-17	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	37,88	37,88
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fracciones máscicas													
Hidrógeno	6,9E-06	6,7E-06	6,7E-06	6,7E-06	6,7E-06	6,7E-06	2,2E-21	2,2E-21	1,1E-25	0,0517	6,7E-06	9,4E-20	9,4E-20
Propileno	8,1E-05	8,2E-05	8,2E-05	8,2E-05	8,2E-05	8,2E-05	0,0000	0,0000	0,0000	0,0297	8,2E-05	7,9E-18	7,9E-18
Acetona	0,9787	0,9950	0,9950	0,9950	0,9950	0,9950	0,2763	0,2778	0,0562	0,9114	0,9950	0,0001	0,0001
Diisopropil éter	0,0013	0,0014	0,0014	0,0014	0,0014	0,0014	1,7E-08	1,7E-08	1,4E-09	0,0050	0,0014	9,9E-12	9,9E-12
Isopropanol	0,0066	7,7E-05	7,7E-05	7,7E-05	7,7E-05	7,7E-05	0,5551	0,5564	0,3754	3,2E-05	7,7E-05	3,7E-05	3,7E-05
Agua	0,0133	0,0035	0,0035	0,0035	0,0035	0,0035	0,1685	0,1658	0,5685	0,0021	0,0035	0,9931	0,9931
Diacetona alcohol	8,1E-21	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0067	0,0067
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujo volumétrico (m ³ ·h ⁻¹)	4,37	6426,83	17,99	4,30	4,30	4,30	11,44	5748,25	0,07	0,02	4,30	5,72	5,72
Densidad (kg·m ⁻³)	784,27	2,19	781,72	782,77	782,77	782,77	766,95	1,52	836,94	0,96	782,77	984,04	984,04
Viscosidad de gas (Pa·s)		8,40E-06	1,01E-05						1,03E-05		1,01E-05		
Viscosidad de líquido (Pa·s)	0,0003		0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0003	0,0004		0,0004		0,0003	0,0007

Corriente	49	50	51	52	53	54	55	56
Desde	V-102	P-102 A/B	E-102	C-301	C-301	C-301	V-304	P-307 A/B
Hasta	P-102 A/B	E-102	C-301	L.B.2	L.B.2	L.B.2	P-307 A/B	L.B.4
Temperatura (°C)	35,0	35,0	15,0	15,0	15,1	15,1	35,0	35,0
Presión (bar)	1,01	1,50	1,50	1,01	1,01	1,01	1,01	1,01
Fracción de vapor (molar)	0,0000	0,0000	0,0000	1,0000	1,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Masa molecular media	18,12	18,12	18,12	2,93	2,93	2,93	18,12	18,12
Entalpía molar (kJ·kmol ⁻¹)	-285.307	-285.304	-286.791	-4.457	-4.470	-4.471	-285.307	-285.307
Entalpía másica (kJ·kg ⁻¹)	-15.745	-15.745	-15.827	-1.524	-1.526	-1.526	-15.745	-15.745
Flujos molares (kmol·h ⁻¹)	310,52	310,52	310,52	59,58	59,60	59,60	24,46	24,46
Hidrógeno	2,6E-16	2,6E-16	2,6E-16	57,72	57,73	57,73	2,1E-17	2,1E-17
Propileno	1,1E-15	1,1E-15	1,1E-15	0,79	0,79	0,79	8,3E-17	8,3E-17
Acetona	0,01	0,01	0,01	2,0E-03	5,6E-03	5,9E-03	9,5E-04	9,5E-04
Diisopropil éter	5,4E-10	5,4E-10	5,5E-10	0,06	0,06	0,06	4,3E-11	4,3E-11
Isopropanol	3,4E-03	3,4E-03	3,4E-03	1,4E-04	1,5E-04	1,5E-04	2,7E-04	2,7E-04
Agua	310,18	310,18	310,18	1,01	1,01	1,01	24,43	24,43
Diacetona alcohol	0,33	0,33	0,33	3,3E-04	3,3E-04	3,3E-04	0,03	0,03
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fracciones molares								
Hidrógeno	8,5E-19	8,5E-19	8,5E-19	0,9687	0,9687	0,9687	8,5E-19	8,5E-19
Propileno	3,4E-18	3,4E-18	3,4E-18	0,0133	0,0133	0,0133	3,4E-18	3,4E-18
Acetona	3,9E-05	3,9E-05	3,9E-05	3,4E-05	9,4E-05	1,0E-04	3,9E-05	3,9E-05
Diisopropil éter	1,8E-12	1,8E-12	1,8E-12	0,0010	0,0010	0,0010	1,8E-12	1,8E-12
Isopropanol	1,1E-05	1,1E-05	1,1E-05	2,3E-06	2,5E-06	2,5E-06	1,1E-05	1,1E-05
Agua	0,9989	0,9989	0,9989	0,0169	0,0169	0,0169	0,9989	0,9989
Diacetona alcohol	0,0011	0,0011	0,0011	5,5E-06	5,5E-06	5,5E-06	0,0011	0,0011
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujos másicos (kg·h ⁻¹)	5.626,84	5.626,84	5.626,84	174,34	174,55	174,57	443,11	443,11
Hidrógeno	5,3E-16	5,3E-16	5,3E-16	116,37	116,38	116,38	4,2E-17	4,2E-17
Propileno	4,4E-14	4,4E-14	4,4E-14	33,31	33,31	33,31	3,5E-15	3,5E-15
Acetona	0,70	0,70	0,70	0,12	0,32	0,34	0,06	0,06
Diisopropil éter	5,6E-08	5,6E-08	5,6E-08	6,33	6,33	6,33	4,4E-09	4,4E-09
Isopropanol	0,21	0,21	0,21	8,2E-03	8,8E-03	8,8E-03	0,02	0,02
Agua	5.588,05	5.588,05	5.588,03	18,16	18,16	18,16	440,05	440,05
Diacetona alcohol	37,88	37,88	37,88	0,04	0,04	0,04	2,98	2,98
Nitrato de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrato de potasio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Nitrito de sodio	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Fracciones másicas								
Hidrógeno	9,4E-20	9,4E-20	9,4E-20	0,6675	0,6667	0,6666	9,4E-20	9,4E-20
Propileno	7,9E-18	7,9E-18	7,9E-18	0,1911	0,1908	0,1908	7,9E-18	7,9E-18
Acetona	0,0001	0,0001	0,0001	0,0007	0,0019	0,0020	0,0001	0,0001
Diisopropil éter	9,9E-12	9,9E-12	9,9E-12	0,0363	0,0363	0,0363	9,9E-12	9,9E-12
Isopropanol	3,7E-05	3,7E-05	3,7E-05	4,7E-05	5,0E-05	5,0E-05	3,7E-05	3,7E-05
Agua	0,9931	0,9931	0,9931	0,1042	0,1041	0,1040	0,9931	0,9931
Diacetona alcohol	0,0067	0,0067	0,0067	0,0002	0,0002	0,0002	0,0067	0,0067
Nitrato de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrato de potasio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Nitrito de sodio	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Flujo volumétrico (m ³ ·h ⁻¹)	5,72	5,72	5,61	1409,95	1410,20	1410,22	0,45	0,45
Densidad (kg·m ⁻³)	984,04	984,02	1003,41	0,12	0,12	0,12	984,04	984,04
Viscosidad de gas (Pa·s)				9,39E-06	9,40E-06	9,40E-06		
Viscosidad de líquido (Pa·s)	0,0007	0,0007	0,0012				0,0007	0,0007

ANEXO VI – Equipos



Universidad de Valladolid

EQUIPMENT LIST

REV.	0	1				JOB NO.	2021
DATE	06/07/21	13/07/21				UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL
BY	D.S.S.	D.S.S.				CLIENT	UVa
APPR'V	D.S.S.	D.S.S.				AUTOR	DAVID SANZ SASTRE

REV.	ITEM NO.	QUANTITY	DESCRIPTION	ORIGIN (1)	DRIVER (1)	REMARKS
1	V-101	1	HORIZONTAL VESSEL	O		IPA FEED
2	P-101 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	IPA FEED
3	E-101	1	BOILER	O		IPA FEED, U: COMBUSTION GASES
4	V-102	1	HORIZONTAL VESSEL	O		RECIRCULATED WATER
5	P-102 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMPO	O	M	WATER
6	E-102	1	COOLER	O		WATER, U: PROPANE
7	H-101	1	FURNACE	O		NATURAL GAS
8	E-201	1	HEATER	O		MOLTEN SALT, U: COMBUSTION GASES
9	P-201 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	MOLTEN SALT, U: COMBUSTION GASES
10	R-201 A/B	2	ACETONE MULTITUBULAR REACTOR	O		U: MOLTEN SALT
11	E-301	1	CONDENSER	O		REACTION PRODUCTS, U: CHILLED WATER
12	V-301	1	VERTICAL VESSEL	O		LIQUID-VAPOR SEPARATOR
13	C-301	1	ACETONE ABSORBER	O		TRAYED COLUMN
14	P-301 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	C-301 LIQUID OUTLET
15	P-302 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	V-301 LIQUID OUTLET
16	C-302	1	ACETONE DISTILLATION COLUMN	O		TRAYED COLUMN
17	E-302	1	CONDENSER	O		COLUMN C-302, U: COOLING WATER
18	V-302	1	HORIZONTAL VESSEL	O		COLUMN C-302, LIQUID-VAPOR SEPARATOR
19	P-303 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	COLUMN REFLUX C-302
20	E-303	1	KETTLE REBOILER	O		COLUMN C-302, U: LOW PRESSURE STEAM
21	P-304 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	COLUMN BOTTOMS C-302
22	E-304	1	COOLER	O		U: COOLING WATER
23	C-303	1	FINAL PRODUCT DISTILLATION COLUMN	O		TRAYED COLUMN
24	E-305	1	CONDENSER	O		COLUMN C-303, U: COOLING WATER
25	V-303	1	HORIZONTAL VESSEL	O		COLUMN C-303, LIQUID-VAPOR SEPARATOR
26	P-305 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	COLUMN REFLUX C-303
27	E-306	1	KETTLE REBOILER	O		COLUMN C-303, U: LOW PRESSURE STEAM
28	P-306 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O		COLUMN BOTTOMS C-303, RECIRCULATION OF IPA
29	V-304	1	HORIZONTAL VESSEL	O		WATER RECIRCULATION
30	P-307 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	WATER OUTLET
31	P-308 A/B	2	CENTRIFUGAL PUMP	O	M	WATER RECIRCULATION
32						
33						
34						
35						
36						
37						
38						
39						
40						
41						

LEGEND:

1.- DRIVER: M - ELECTRIC MOTOR T - TURBINE

ORIGIN: E - SPAIN O - OTHERS

2.- IPA: ISOPROPYL ALCOHOL

3.- U: UTILITY

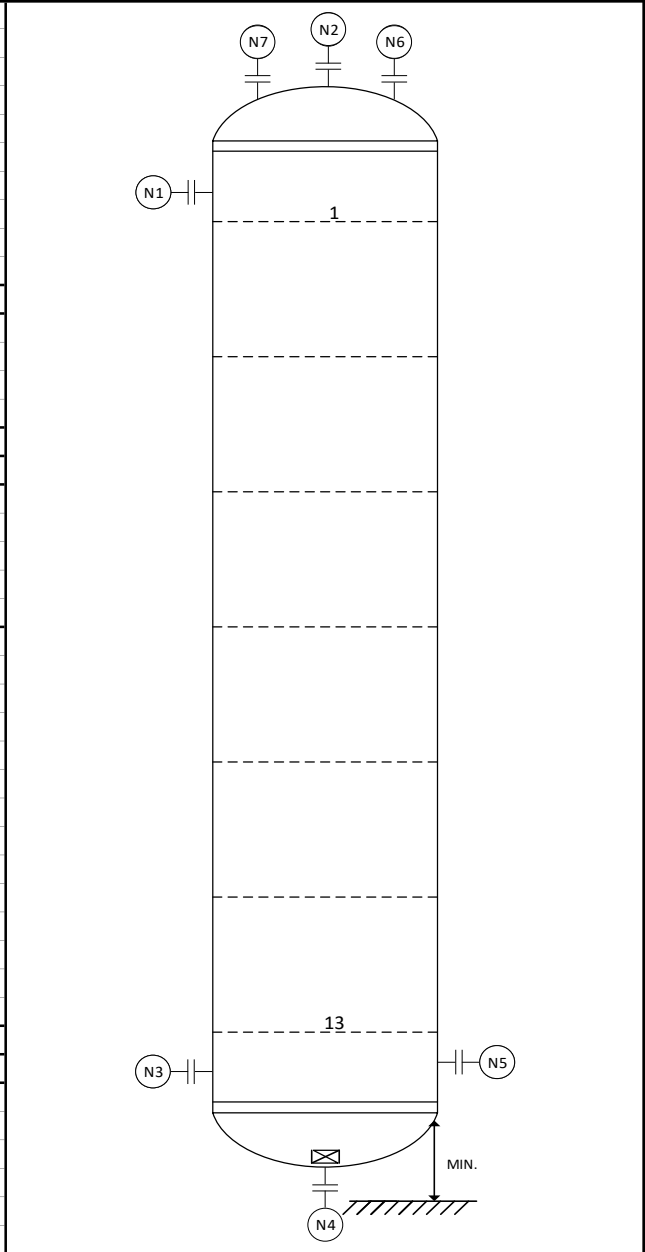


Universidad de Valladolid

ABSORBER PROCESS DATA SHEET

REV.	0					JOB N°	2021
DATE	08/07/21					UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL
BY	D.S.S.					CLIENT	UVa
APPR'V	D.S.S.					AUTOR	DAVID SANZ SASTRE

REV.				
1	Item Number: C-301 Quantity: 1			
2	Case: NORMAL			
3	Service: ACETONE ABSORBER			
4	Fluid: ACETONE / WATER / HYDROGEN			
5	Volume	1,85	m ³	
6	Diameter (ID)	460	Height (TL-TL)	11.125 mm
7	Horizontal or Vertical: VERTICAL			
8	Demister	Δ P	bar	Thickness mm
9				
10		PRESSURE bar g		TEMPERATURE °C
11		Operating	Design	Operating Design
12	TOP COLUMN	0,0	3,5	15,0 65,0
13	BOTTOMS COLUMN	0,0	3,5	39,8 65,0
14				
15				
16		MATERIAL		CORR. ALLOW.
17	Shell	CS		3 mm
18	Heads	CS		3 mm
19	Trays	SS		3 mm
20	Coil			mm
21	Demister			
22				
23	Internal liner	Thickness:		mm
24	Number of equilibrium stages:	9		
25	Number of trays:	13		
26	Tray spacing:	0,61	m	
27	Heads type ELLIPSOIDAL			
28	Code ASME SECTION VIII Div.1			
29	Steam Out conditions	0.0 bar g	@	100 (1) (2) °C
30	Stress Relieve for Process Reasons NO			
31	Minimum Elevation (BTL to Grade)	(3)	mm	
32	Insulation: Type			
33	Thickness mm			
34	Radiograph			
35				
36	NOZZLES			
37	Mark N°	Quantity	Size	Service
38	N1	1	4"(1)	STREAM 51
39	N2	1	10"(1)	STREAM 52
40	N3	1	10"(1)	STREAM 20
41	N4	1	4"(1)	STREAM 23
42	N5	1	1 1/2"(1)	LEVEL TRANSMITOR
43	N6	1	1 1/2"(1)	PRESSURE TRANSMITOR
44	N7	1	1 1/2"(1)	PRESSURE SAFETY VALVE
45				
46				
47				
48				
49				
50				
51				
52				
53				
54				
55				
56				
57				
58				



NOTES

(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE

(2) LPS = 0.0 barg T = 100°C (H = 2.675,8 kJ/kg)

(3) MINIMUM FOR PIPING REASONS

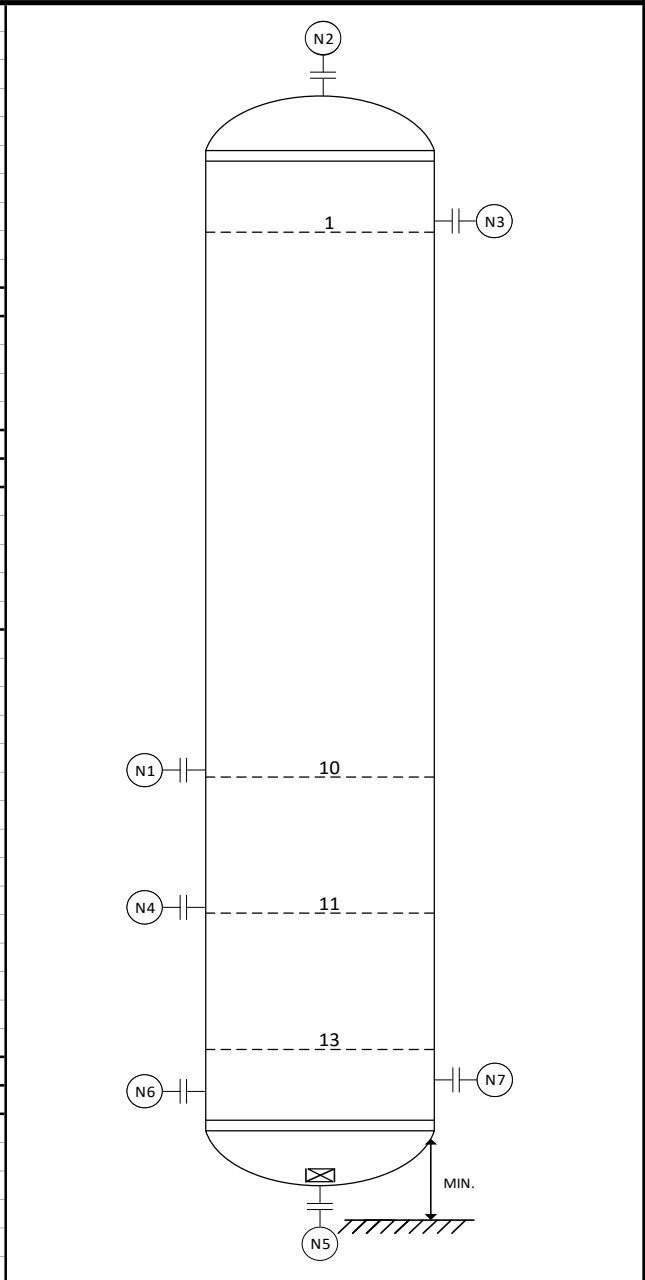


Universidad de Valladolid

DISTILLATION COLUMN PROCESS DATA SHEET

REV.	0				JOB N°	2021
DATE	08/07/21				UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL
BY	D.S.S.				CLIENT	UVa
APPR'V	D.S.S.				AUTOR	DAVID SANZ SASTRE

REV.					
1	Item Number:	C-302	Quantity:	1	
2	Case:	NORMAL			
3	Service:	ACETONE DISTILLATION COLUMN			
4	Fluid:	ACETONE / ISOPROPYL ALCOHOL / WATER			
5	Volume	13,0	m ³		
6	Diameter (ID)	1.220	mm	Height (TL-TL)	11.125 mm
7	Horizontal or Vertical:	VERTICAL			
8	Demister	Δ P	bar	Thickness	mm
9					
10		PRESSURE bar g		TEMPERATURE °C	
11		Operating	Design	Operating	Design
12	TOP COLUMN	0,0	3.5	56,5	130,0
13	BOTTOMS COLUMN	0,0	3.5	99,9	130,0
14					
15					
16		MATERIAL		CORR. ALLOW.	
17	Shell	CS		3 mm	
18	Heads	CS		3 mm	
19	Trays	SS		3 mm	
20	Coil			mm	
21	Demister				
22					
23	Internal liner	Thickness:	mm		
24	Number of equilibrium stages:	11			
25	Number of trays:	13			
26	Tray spacing:	0,61		m	
27	Feed stages:	10 / 11 Reflux ratio: 1,93			
28	Heads type	ELLIPSOIDAL			
29	Code	ASME SECTION VIII Div.1			
30	Steam Out conditions	0.0	bar g	@	100 (1) (2 °C
31	Stress Relieve for Process Reasons	NO			
32	Minimum Elevation (BTL to Grade)	(3)	mm		
33	Insulation: Type				
34	Thickness	mm			
35	Radiograph				
36					
37	NOZZLES				
38	Mark N°	Quantity	Size	Service	
39	N1	1	4"(1)	STREAM 22	
40	N2	1	14"(1)	STREAM 25	
41	N3	1	4"(1)	STREAM 29	
42	N4	1	4"(1)	STREAM 24	
43	N5	1	4"(1)	STREAM 30	
44	N6	1	14"(1)	STREAM 31	
45	N7	1	1 1/2"(1)	LEVEL TRANSMITOR	
46					
47					
48					
49					
50					
51					
52					
53					
54					
55					
56					
57					
58					
59					



NOTES

(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE

(2) LPS = 0.0 barg T = 100°C (H = 2.675,8 kJ/kg)

(3) MINIMUM FOR PIPING REASONS

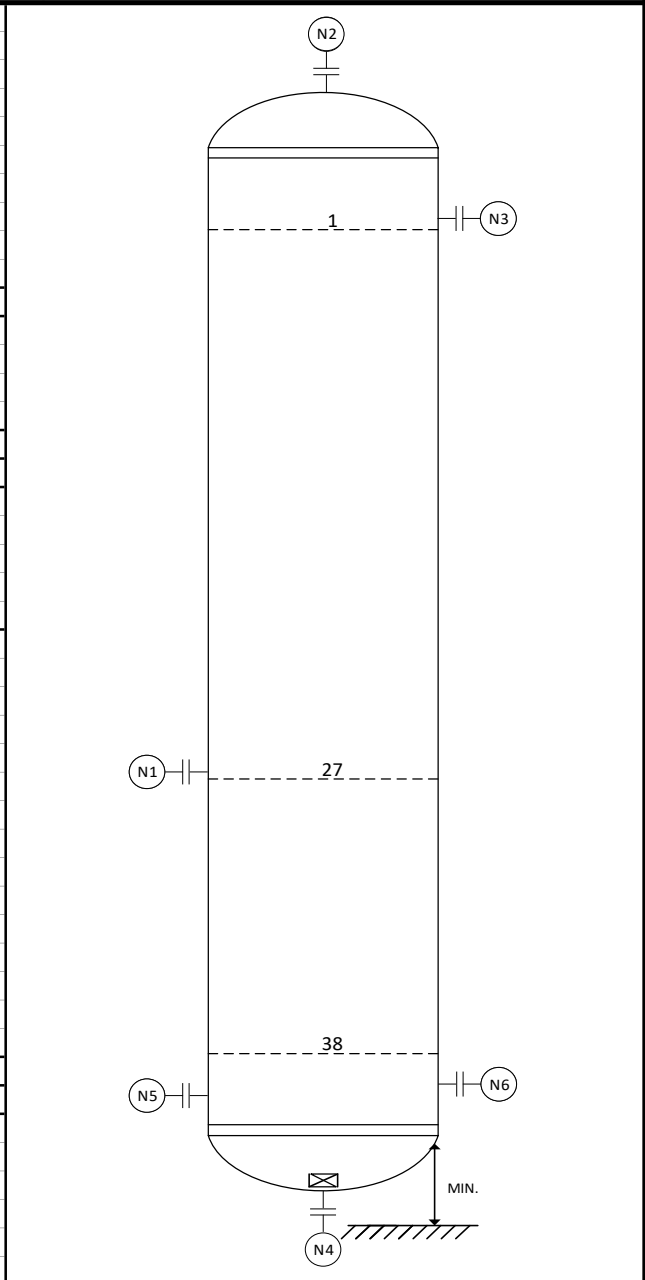


Universidad de Valladolid

DISTILLATION COLUMN PROCESS DATA SHEET

REV.	0					JOB N°	2021
DATE	08/07/21					UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL
BY	D.S.S.					CLIENT	UVa
APPR'V	D.S.S.					AUTOR	DAVID SANZ SASTRE

REV.					
1	Item Number: C-303 Quantity: 1				
2	Case: NORMAL				
3	Service: FINAL PRODUCT DISTILLATION COLUMN				
4	Fluid: ACETONE / ISOPROPYL ALCOHOL / WATER				
5	Volume 38,9 m ³				
6	Diameter (ID) 1.370 mm Height (TL-TL) 26.370 mm				
7	Horizontal or Vertical: VERTICAL				
8	Demister Δ P bar Thickness mm				
9					
10		PRESSURE bar g		TEMPERATURE °C	
11		Operating	Design	Operating	Design
12	TOP COLUMN	0,0	3.5	56,1	110,0
13	BOTTOMS COLUMN	0,0	3.5	77,9	110,0
14					
15					
16		MATERIAL		CORR. ALLOW.	
17	Shell	CS		3 mm	
18	Heads	CS		3 mm	
19	Trays	SS		3 mm	
20	Coil			mm	
21	Demister				
22					
23	Internal liner	Thickness:		mm	
24	Number of equilibrium stages:	28			
25	Number of trays:	38			
26	Tray spacing:	0,61 m			
27	Feed stage: 27	Reflux ratio: 3,18			
28	Heads type ELLIPSOIDAL				
29	Code ASME SECTION VIII Div.1				
30	Steam Out conditions	0.0 bar g @		100 (1) (2) °C	
31	Stress Relieve for Process Reasons NO				
32	Minimum Elevation (BTL to Grade)	(3)		mm	
33	Insulation: Type				
34	Thickness		mm		
35	Radiograph				
36					
37	NOZZLES				
38	Mark N°	Quantity	Size	Service	
39	N1	1	4"(1)	STREAM 36	
40	N2	1	14"(1)	STREAM 37	
41	N3	1	4"(1)	STREAM 41	
42	N4	1	4"(1)	STREAM 42	
43	N5	1	14"(1)	STREAM 43	
44	N6	1	1 1/2"(1)	LEVEL TRANSMITOR	
45					
46					
47					
48					
49					
50					
51					
52					
53					
54					
55					
56					
57					
58					
59					





NOTES


(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE


(2) LPS = 0.0 barg T = 100°C (H = 2.675,8 kJ/kg)


(3) MINIMUM FOR PIPING REASONS


 Universidad de Valladolid				<h2 style="text-align: center;">HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET</h2>			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	E-102		QUANTITY	1		
2	SERVICE	WATER REFRIGERATION					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BEM	Units	SHELL SIDE	TUBE SIDE		
5	FLUID CIRCULATED			PROPANE	WATER		
6	FLOW TOTAL.		kg/h	115.432,2	5.626,8		
7	Gas			115.432,2			
8	Liquid				5.626,8		
9	Steam						
10	Incondensables						
11	Vaporized or condensate						
12	Steam or condensate						
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)		kg/m ³		984,0	1.003,4	
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)		cP		0,7	1,2	
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)			44,1	44,1		
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)		kJ/kg K	1,49	1,50	4,13	
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)		kJ/kg	551,1	552,6	-15.744,9	
18	THERMAL CONDUCTIVITY		W/m K	0,01	0,01	0,58	
19	SURFACE TENSION		dyna/cm			72,8	
20	TEMPERATURE INLET		°C	-25,0	35,0		
21	OUTLET		°C	-24,0	15,0		
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)		barg	0,00	0,50		
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	0,00	0,00		
24	FOULING FACTOR		h m ² °C/kcal	0,0001 (1)	0,0001 (1)		
25	DUTY		kW		-128,26		
26	SURFACE OVERDESIGN		%		20		
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE		barg	3,5	3,5		
29	TEMPERATURE		°C	-30,0	55,0		
30	MATERIALS						
31	Shell and cover	CS		Tubes	SS		
32	Floating head and cover			Channel and cover	CS		
33	Fixed tubesheet	CS		Floating tubesheet			
34	Wear plate			Baffles	CS		
35	Joint type	Gaskets					
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	18 (1) inch	Outlet	18 (1) inch	
38		Tube side	Inlet	6 (1) inch	Outlet	6 (1) inch	
39	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
40	NOTES						
41	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
41							
42							
43							
44							


 Universidad de Valladolid				<h2 style="text-align: center;">HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET</h2>			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	E-301		QUANTITY	1		
2	SERVICE	REACTOR PRODUCTS CONDENSATION					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BEM	Units	SHELL SIDE	TUBE SIDE		
5	FLUID CIRCULATED			CHILLED WATER	REACTOR PRODUCTS		
6	FLOW TOTAL.		kg/h	171.213,2	4.044,3		
7	Gas				2.035,1		
8	Liquid			171.213,2			
9	Steam						
10	Incondensables						
11	Vaporized or condensate						
12	Steam or condensate				2.009,2		
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)		kg/m ³	1.000,0	999,1	816,6	
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)		cP	1,5	1,1	0,5	
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)				27,94	12,92	
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)		kJ/kg K	4,21	4,19	3,56	
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)		kJ/kg	21,1	63,1	-5.459,4	
18	THERMAL CONDUCTIVITY		W/m K	0,57	0,59	0,10	
19	SURFACE TENSION		dyna/cm	72,8		41,8	
20	TEMPERATURE INLET		°C	5,0		496,5	
21	OUTLET		°C	15,0		22,0	
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)		barg	0,00		0,18	
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	0,00		0,00	
24	FOULING FACTOR		h m ² °C/kcal	0,0001 (1)		0,0001 (1)	
25	DUTY		kW		-1.991,96		
26	SURFACE OVERDESIGN		%		20		
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE		barg	3,5		3,5	
29	TEMPERATURE		°C	75,0		550,0	
30	MATERIALS						
31	Shell and cover	CS		Tubes	INCONEL		
32	Floating head and cover			Channel and cover	CS		
33	Fixed tubesheet	CS		Floating tubesheet			
34	Wear plate			Baffles	CS		
35	Joint type	Gaskets					
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	8 (1) inch	Outlet	8 (1) inch	
38		Tube side	Inlet	24 (1) inch	Outlet	14 (1) inch	
39	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
40	NOTES						
41	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
41							
42							
43							
44							


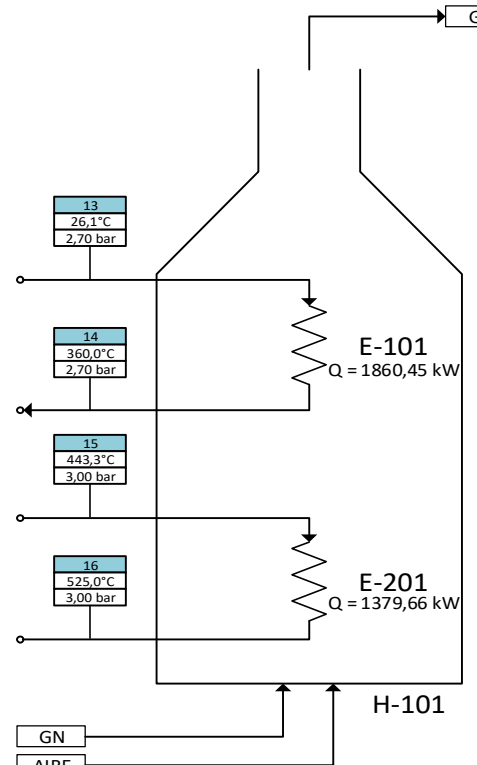
 Universidad de Valladolid				HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	E-302		QUANTITY	1		
2	SERVICE	COLUMN HEADS CONDENSATION					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BEM	Units	SHELL SIDE		TUBE SIDE	
5	FLUID CIRCULATED			COOLING WATER		COLUMN HEADS	
6	FLOW TOTAL.			kg/h	285.912,6		10.045,3
7	Gas						0,6
8	Liquid				285,912,6		
9	Steam						
10	Incondensables						
11	Vaporized or condensate						
12	Steam or condensate						10.044,7
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)			kg/m ³	998,2	997,1	769,5
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)			cP	1,0	0,9	0,3
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)					56,44	23,03
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)			kJ/kg K	4,18	4,18	1,45
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)			kJ/kg	84,0	104,9	-3.806,9
18	THERMAL CONDUCTIVITY			W/m K	0,60	0,61	0,01
19	SURFACE TENSION			dyna/cm	72,8		24,1
20	TEMPERATURE INLET			°C	20,0		56,5
21	OUTLET			°C	25,0		30,0
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)			barg	0,00		0,00
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP			bar	0,00		0,00
24	FOULING FACTOR			h m ² °C/kcal	0,0001 (1)		0,0001 (1)
25	DUTY			kW	-1.657,96		
26	SURFACE OVERDESIGN			%	20		
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE			barg	3,5		3,5
29	TEMPERATURE			°C	50,0		100,0
30	MATERIALS						
31	Shell and cover	CS		Tubes	CS		
32	Floating head and cover			Channel and cover	CS		
33	Fixed tubesheet	CS		Floating tubesheet			
34	Wear plate			Baffles	CS		
35	Joint type	Gaskets					
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	8 (1)	inch	Outlet	8 (1) inch
38		Tube side	Inlet	24 (1)	inch	Outlet	8 (1) inch
39	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
40	NOTES						
41	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
41							
42							
43							
44							


 Universidad de Valladolid				HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	E-303		QUANTITY	1		
2	SERVICE	BOILING OF COLUMN BOTTOMS					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BKT	Units	SHELL SIDE		TUBE SIDE	
5	FLUID CIRCULATED			COLUMN BOTTOMS		LPS	
6	FLOW TOTAL.		kg/h	9.579,8		3.589,7	
7	Gas						
8	Liquid			6.069,9			
9	Steam						
10	Incondensables						
11	Vaporized or condensate			3.509,9			
12	Steam or condensate					3.589,7	
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)		kg/m ³	918,3	917,9		939,9
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)		cP	0,3	0,3		0,2
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)				18,12	18,01	
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)		kJ/kg K	4,42	(2)	2,21	4,25
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)		kJ/kg	-15.421,8	(3)	2.713,1	520,8
18	THERMAL CONDUCTIVITY		W/m K	0,58	(4)	0,03	0,68
19	SURFACE TENSION		dyna/cm	58,42	58,22	72,8	
20	TEMPERATURE INLET		°C	98,7		125,0	
21	OUTLET		°C	99,9		124,0	
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)		barg	0,0		1,3	
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	0,0		0,0	
24	FOULING FACTOR		h m ² °C/kcal	0,0001 (1)		0,0001 (1)	
25	DUTY		kW	2.185,61			
26	SURFACE OVERDESIGN		%	20			
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE		barg	3,5		3,5	
29	TEMPERATURE		°C	150,0		175,0	
30	MATERIALS						
31	Shell and cover	CS		Tubes	CS		
32	Floating head and cover	CS		Channel and cover	CS		
33	Fixed tubesheet			Floating tubesheet	CS		
34	Wear plate			Baffles	CS		
35	Joint type	Gaskets					
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	8 (1)	inch	Outlet	8 (1) inch
38						Outlet	18 (1) inch
39		Tube side	Inlet	18 (1)	inch	Outlet	4 (1) inch
40	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
41	NOTES						
42	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
42	(2) SATURATED VAPOUR CP = 1,90 kJ/kg K; SATURATED LIQUID CP = 4,43 kJ/kg K						
43	(3) SATURATED VAPOUR ENTHALPY = -13.100,6 kJ/kg; SATURATED LIQUID ENTHALPY = -15.467,8 kJ/kg						
44	(4) SATURATED VAPOUR K = 0,02 W/m K; SATURATED LIQUID K = 0,61 W/m K						
45							


 Universidad de Valladolid				HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	E-304		QUANTITY	1		
2	SERVICE	COLUMN BOTTOMS REFRIGERATION					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BEM	Units	SHELL SIDE		TUBE SIDE	
5	FLUID CIRCULATED			COOLING WATER		WATER	
6	FLOW TOTAL.		kg/h	80.639,6		6.069,9	
7	Gas						
8	Liquid			80.639,6		6.069,9	
9	Steam						
10	Incondensables						
11	Vaporized or condensate						
12	Steam or condensate						
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)		kg/m ³	998,2	997,1	917,9	984,0
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)		cP	1,0	0,9	0,3	0,7
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)						
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)		kJ/kg K	4,18	4,18	4,43	4,13
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)		kJ/kg	84,0	104,9	-15.467,8	-15.745,1
18	THERMAL CONDUCTIVITY		W/m K	0,60	0,61	0,62	0,58
19	SURFACE TENSION		dyna/cm	72,8		58,2	70,7
20	TEMPERATURE INLET		°C	20,0		99,9	
21	OUTLET		°C	25,0		35,0	
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)		barg	0,00		0,00	
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	0,00		0,00	
24	FOULING FACTOR		h m ² °C/kcal	0,0001 (1)		0,0001 (1)	
25	DUTY		kW	-467,62			
26	SURFACE OVERDESIGN		%	20			
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE		barg	3,5		3,5	
29	TEMPERATURE		°C	50,0		140,0	
30	MATERIALS						
31	Shell and cover	CS		Tubes	CS		
32	Floating head and cover			Channel and cover	CS		
33	Fixed tubesheet	CS		Floating tubesheet			
34	Wear plate			Baffles	CS		
35	Joint type	Gaskets					
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	8 (1)	inch	Outlet	8 (1) inch
38		Tube side	Inlet	8 (1)	inch	Outlet	8 (1) inch
39	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
40	NOTES						
41	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
41							
42							
43							
44							


 Universidad de Valladolid				HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	E-305		QUANTITY	1		
2	SERVICE	COLUMN HEADS CONDENSATION					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BEM	Units	SHELL SIDE		TUBE SIDE	
5	FLUID CIRCULATED			COOLING WATER		COLUMN HEADS	
6	FLOW TOTAL.			kg/h	386.859,9		14.063,3
7	Gas						0,1
8	Liquid				386.859,9		
9	Steam						
10	Incondensables						
11	Vaporized or condensate						
12	Steam or condensate						14.063,2
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)			kg/m ³	998,2	997,1	781,7
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)			cP	1,0	0,9	0,3
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)						57,65 23,69
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)			kJ/kg K	4,18	4,18	2,01 2,16
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)			kJ/kg	84,0	104,9	-3.707,1 -4.281,3
18	THERMAL CONDUCTIVITY			W/m K	0,60	0,61	0,01 0,16
19	SURFACE TENSION			dyna/cm	72,8		22,6
20	TEMPERATURE INLET			°C	20,0		56,1
21	OUTLET			°C	25,0		30,0
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)			barg	0,00		0,00
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP			bar	0,00		0,00
24	FOULING FACTOR			h m ² °C/kcal	0,0001 (1)		0,0001 (1)
25	DUTY			kW	-2.243,33		
26	SURFACE OVERDESIGN			%	20		
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE			barg	3,5		3,5
29	TEMPERATURE			°C	50,0		80,0
30	MATERIALS						
31	Shell and cover	CS		Tubes	CS		
32	Floating head and cover			Channel and cover	CS		
33	Fixed tubesheet	CS		Floating tubesheet			
34	Wear plate			Baffles	CS		
35	Joint type	Gaskets					
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side		3 mm	Tube side		3 mm
37	NOZZLES	Shell side		Inlet	8 (1)	inch	Outlet 8 (1) inch
38		Tube side		Inlet	24 (1)	inch	Outlet 8 (1) inch
39	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
40	NOTES						
41	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
41							
42							
43							
44							


 Universidad de Valladolid				HEAT EXCHANGER PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	E-306		QUANTITY	1		
2	SERVICE	BOILING OF COLUMN BOTTOMS					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BKT	Units	SHELL SIDE		TUBE SIDE	
5	FLUID CIRCULATED			COLUMN BOTTOMS		LPS	
6	FLOW TOTAL.		kg/h	8.775,8		3.687,6	
7	Gas						
8	Liquid			59,5			
9	Steam						
10	Incondensables						
11	Vaporized or condensate			8.716,3			
12	Steam or condensate					3.687,6	
13	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)		kg/m ³	767,0	837,0		939,9
14	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)		cP	0,4	0,4		0,2
15	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)				43,02	18,01	
16	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)		kJ/kg K	3,56	(2)	2,21	4,25
17	ENTHALPY (Inlet/Outlet)		kJ/kg	-6.652,9	(3)	2.713,1	520,8
18	THERMAL CONDUCTIVITY		W/m K	0,14	(4)	0,03	0,68
19	SURFACE TENSION		dyna/cm	36,2	53,9	72,8	
20	TEMPERATURE INLET		°C	68,1		125,0	
21	OUTLET		°C	77,9		124,0	
22	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)		barg	0,0		1,3	
23	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	0,0		0,0	
24	FOULING FACTOR		h m ² °C/kcal	0,0001 (1)		0,0001 (1)	
25	DUTY		kW	2.245,23			
26	SURFACE OVERDESIGN		%	20			
27	DESIGN CONDITIONS						
28	PRESSURE		barg	3,5		3,5	
29	TEMPERATURE		°C	100,0		175,0	
30	MATERIALS						
31	Shell and cover	CS		Tubes	CS		
32	Floating head and cover	CS		Channel and cover	CS		
33	Fixed tubesheet			Floating tubesheet	CS		
34	Wear plate			Baffles	CS		
35	Joint type	Gaskets					
36	CORROSION ALLOWANCE	Shell side	3 mm	Tube side	3 mm		
37	NOZZLES	Shell side	Inlet	8 (1)	inch	Outlet	1 (1) inch
38						Outlet	18 (1) inch
39		Tube side	Inlet	18 (1)	inch	Outlet	4 (1) inch
40	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
41	NOTES						
42	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
42	(2) SATURATED VAPOUR CP = 1,68 kJ/kg K; SATURATED LIQUID CP = 4,14 kJ/kg K						
43	(3) SATURATED VAPOUR ENTHALPY = -5.695,5 kJ/kg; SATURATED LIQUID ENTHALPY = -11.066,8 kJ/kg						
44	(4) SATURATED VAPOUR K = 0,02 W/m K; SATURATED LIQUID K = 0,19 W/m K						
45							


 Universidad de Valladolid					FIRED HEATER PROCESS DATA SHEET															
REV.	0				JOB N°	2021														
DATE	07/07/21				UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL														
BY	D.S.S.				CLIENT	UVa														
APPR'V	D.S.S.				AUTOR	DAVID SANZ SASTRE														
REV.																				
1	ITEM N°:	H-101			QUANTITY:	1														
2	SERVICE:	MOLTEN SALT HEATING AND BOILING OF REAGENTS																		
3	SERVICES (1)					HEAT DUTY CONSUMPTION (kW)														
4	1. HEATING OF MOLTEN SALT - E-201					1.379,66														
5	2. BOILING OF REAGENTS - E-101					1.860,45														
6	TOTAL HEAT DUTY CONSUMPTION (kW)					3.240,11														
7	FUEL TYPE AND GRADE					NATURAL GAS														
8	FLOW				kg/h	19.440,67														
9	HEATING VALUE (NET)				MJ/kg	47,1														
10	FUEL MOLECULAR WEIGHT					18,36														
11	VISCOSITY				cP	0,011														
12	DENSITY				kg/m ³	1,83														
13	PRESSURE				barg	1,5														
14	TEMPERATURE				°C	30,0														
15																				
16																				
17																				
18																				
19																				
20																				
21																				
22																				
23																				
24																				
25																				
26																				
27																				
28																				
29																				
30																				
31																				
32																				
33																				
34																				
35																				
36																				
37																				
38																				
39																				
40																				
41	NOTES																			
42	(1) DIAGRAM OF THE SERVICES IN THE FURNACE																			
43	(2) 1.70% OF THE HEAT IS LOST IN THE COMBUSTION GASES																			

 Universidad de Valladolid				FIRED HEATER PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	07/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM N°:	H-101		QUANTITY:	1		
2	SERVICE 1:	HEATING OF MOLTEN SALT IN E-201					
3			UNITS				
4	FLUID	MOLTEN SALT					
5	FLUID RATE		m ³ /h	103,3			
6	INLET PRESSURE (NORMAL/MAX.)		barg	2,0			
7	ALLOWABLE PRESSURE DROP		bar	0,0			
8				IN	OUT		
9	LIQUID FLOW		kg/h	28.449,7	28.449,7		
10	VAPOUR FLOW		kg/h				
11	TEMPERATURE		°C	443,3	525,0		
12	LIQUID DENSITY		kg/m ³	287,2	275,4		
13	VAPOUR DENSITY		kg/m ³				
14	LIQUID SPECIFIC HEAT		kJ/kg K	2,06	2,23		
15	VAPOUR SPECIFIC HEAT		kJ/kg K				
16	LIQUID VISCOSITY		cP	1,5	1,1		
17	VAPOUR VISCOSITY		cP				
18	LIQUID CONDUCTIVITY		W/m K	0,10	0,09		
19	VAPOUR CONDUCTIVITY		W/ m K				
20	VAPOUR MOLECULAR WEIGHT						
21	LATENT HEAT (1)		kJ/kg				
22	FOULING FACTOR (TUBESIDE)		h m ² °C/kcal		0,0002 (2)		
23	HEAT DUTY		kW		1.379,66		
24	TURNDOWN RATIO		%				
25	AMBIENT AIR TEMP. RANGE		°C		15-40		
26	MATERIALS OF CONSTRUCTION				INCONEL		
27	DESIGN TEMPERATURE		°C		1.000		
28	DESIGN PRESSURE		barg		3,5		
29	FUEL TYPE AND GRADE				NATURAL GAS		
30	HEATING VALUE (NET)				47,1		
31	FUEL MOLECULAR WEIGHT				18,36		
32	VISCOSITY		cP		0,011		
33	DENSITY		kg/m ³		1,83		
34	PRESSURE		barg		1,5		
35	TEMPERATURE		°C		30,0		
36	NOTES						
37	(1) REQUIRED FOR BOILING DUTIES ONLY						
38	(2) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
39							
40							
41							
42							
43							
44							
45							
46							
47							
48							

 Universidad de Valladolid				FIRED HEATER PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	07/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM N°:	H-101	QUANTITY:	1			
2	SERVICE 2:	BOILING OF REAGENTS - E-101					
3		UNITS	ISOPROPYL ALCOHOL AND WATER				
4	FLUID						
5	FLUID RATE (INLET/OUTLET)	m ³ /h	5,0	1.668,30			
6	INLET PRESSURE (NORMAL/MAX.)	barg	1,7				
7	ALLOWABLE PRESSURE DROP	bar	0,0				
8			IN	OUT			
9	LIQUID FLOW	kg/h	4.044,3				
10	VAPOUR FLOW	kg/h		4.044,3			
11	TEMPERATURE	°C	26,1	360,0			
12	LIQUID DENSITY	kg/m ³	811,0				
13	VAPOUR DENSITY	kg/m ³		2,42			
14	LIQUID SPECIFIC HEAT	kJ/kg K	3,28				
15	VAPOUR SPECIFIC HEAT	kJ/kg K		2,51			
16	LIQUID VISCOSITY	cP	1,50				
17	VAPOUR VISCOSITY	cP		0,02			
18	LIQUID CONDUCTIVITY	W/m K	0,15				
19	VAPOUR CONDUCTIVITY	W/ m K		0,06			
20	VAPOUR MOLECULAR WEIGHT			46,89			
21	LATENT HEAT (1)	kJ/kg		1.098,15			
22	FOULING FACTOR (TUBESIDE)	h m ² °C/kcal		0,0002 (2)			
23	HEAT DUTY	kW		1.860,45			
24	TURNDOWN RATIO	%					
25	AMBIENT AIR TEMP. RANGE	°C		15-40			
26	MATERIALS OF CONSTRUCTION			INCONEL			
27	DESIGN TEMPERATURE	°C		1.000			
28	DESIGN PRESSURE	barg		3,5			
29	FUEL TYPE AND GRADE			NATURAL GAS			
30	HEATING VALUE (NET)			47,1			
31	FUEL MOLECULAR WEIGHT			18,36			
32	VISCOSITY	cP		0,011			
33	DENSITY	kg/m ³		1,83			
34	PRESSURE	barg		1,5			
35	TEMPERATURE	°C		30,0			
36	NOTES						
37	(1) REQUIRED FOR BOILING DUTIES ONLY						
38	(2) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
39							
40							
41							
42							
43							
44							
45							
46							
47							
48							

 Universidad de Valladolid				PUMP PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	P-101 A/B					
2	SERVICE	ISOPROPYL ALCOHOL REACTOR FEED					
3	TYPE	CENTRIFUGAL					
4	NO. OF PUMPS	2					
5	IN OPERATION	1					
6	SPARE	1					
7	DRIVER	MOTOR		2			
8		TURBINE		0			
9		OTHERS					
10	LIQUID PUMPED	ISOPROPYL ALCOHOL (70% MOL)					
11	OPERATING CASE	NORMAL					
12	PUMPING TEMPERATURE (T)	°C	26,0				
13	VISCOSITY (@ T)	cP	1,5				
14	VAPOR PRESSURE (@ T)	bar a	0,062 (1)				
15	DENSITY (@ T)	kg/m ³	811,0				
16							
17	NORMAL CAPACITY	m ³ /h	5,0				
18	DESIGN CAPACITY	m ³ /h	6,0				
19	DISCHARGE PRESSURE Normal/Design	bar a	2,70				
20	SUCTION PRESSURE Normal/Design	bar a	1,01				
21	DIFFERENTIAL PRESSURE Normal/Design	Bar	1,69				
22	DIFFERENTIAL HEAD Normal/Design	m	21,2				
23	NPSH MINIMUM AVAILABLE Normal/Design	m	11,9				
24	MAXIMUM SUCTION PRESSURE	bar a	2,6				
25	SHUT-OFF PRESSURE	bar a	4,6				
26	DUTY (Continuous/Intermitent)	CONTINUOUS					
27	MINIMUM CIRCULATION FLOW	(2)					
28	CORROSION OR EROSION DUE TO						
29	SOLIDS IN SUSPENSION	NO					
30	LOCATION (Indoors/Outdoors)	OUTDOORS					
31	HIDRAULIC POWER @ Normal flow	kW	0,75				
32	CONSTRUCTION MATERIALS	CASE		CS			
33		IMPELLER		SS			
34		SHAFT		SS			
35	NOTES						
36	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
37	(2) BY VENDOR						
38							
39							
40							
41							
42							
43							
44							

 Universidad de Valladolid				<h2 style="text-align: center;">PUMP PROCESS DATA SHEET</h2>			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	06/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	P-102 A/B					
2	SERVICE	WATER					
3	TYPE	CENTRIFUGAL					
4	NO. OF PUMPS	2					
5	IN OPERATION	1					
6	SPARE	1					
7	DRIVER	MOTOR	2				
8		TURBINE	0				
9		OTHERS					
10	LIQUID PUMPED	WATER					
11	OPERATING CASE	NORMAL					
12	PUMPING TEMPERATURE (T)	°C	35,0				
13	VISCOSITY (@ T)	cP	0,7				
14	VAPOR PRESSURE (@ T)	bar a	0,056 (1)				
15	DENSITY (@ T)	kg/m ³	984,0				
16							
17	NORMAL CAPACITY	m ³ /h	5,7				
18	DESIGN CAPACITY	m ³ /h	6,8				
19	DISCHARGE PRESSURE Normal/Design	bar a	1,50				
20	SUCTION PRESSURE Normal/Design	bar a	1,01				
21	DIFFERENTIAL PRESSURE Normal/Design	Bar	0,49				
22	DIFFERENTIAL HEAD Normal/Design	m	5,1				
23	NPSH MINIMUM AVAILABLE Normal/Design	m	9,9				
24	MAXIMUM SUCTION PRESSURE	bar a	3,6				
25	SHUT-OFF PRESSURE	bar a	4,2				
26	DUTY (Continuous/Intermitent)	CONTINUOUS					
27	MINIMUM CIRCULATION FLOW	(2)					
28	CORROSION OR EROSION DUE TO						
29	SOLIDS IN SUSPENSION	NO					
30	LOCATION (Indoors/Outdoors)	OUTDOORS					
31	HIDRAULIC POWER @ Normal flow	kW	0,23				
32	CONSTRUCTION MATERIALS	CASE	CS				
33		IMPELLER	SS				
34		SHAFT	SS				
35	NOTES						
36	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
37	(2) BY VENDOR						
38							
39							
40							
41							
42							
43							
44							

 Universidad de Valladolid				REACTOR PROCESS DATA SHEET			
REV.	0			JOB N°	2021		
DATE	07/07/21			UNIT	ACETONE FROM ISOPROPYL ALCOHOL		
BY	D.S.S.			CLIENT	UVa		
APPR'V	D.S.S.			AUTOR	DAVID SANZ SASTRE		
REV.							
1	ITEM NUMBER	R-201 A/B		QUANTITY	2		
2	SERVICE	ACETONE SYNTHESIS					
3	OPERATING CASE	NORMAL					
4	TEMA Type	BEM	Units	SHELL SIDE		TUBE SIDE	
5	FLUID CIRCULATED			MOLTEN SALT		IPA+ACETONE+H2	
6	FLOW TOTAL.	Normal (Máx.)	kg/h	28.449,7		4.044,3	
7	Gas					4.044,3	
8	Liquid			28.449,7			
9	Steam						
10	LIQUID DENSITY (Inlet/Outlet)			kg/m ³	275,4	287,2	
11	VISCOSITY-LIQUID (Inlet/Outlet)			cP	1,1	1,5	
12	MOLECULAR WEIGHT-GAS (Inlet/Outlet)						46,89 27,94
13	SPECIFIC HEAT (Inlet/Outlet)			kJ/kg K	2,23	2,06	2,51 2,78
14	ENTHALPY (Inlet/Outlet)			kJ/kg	1.199,15	1.024,58	-4.914,34 -3.686,29
15	THERMAL CONDUCTIVITY			W/m K	0,09	0,10	0,06 0,13
16	SURFACE TENSION			dyna/cm	84,5	89,2	
17	TEMPERATURE INLET			°C	525,0		360,0
18	OUTLET			°C	443,3		496,5
19	OPERATING PRESSURE (Normal, Inlet)			barg	2,0		1,7
20	ALLOWABLE PRESSURE DROP			bar	0,0		1,5
21	FOULING FACTOR			h m ² °C/kcal	0,0002 (1)		0,0002 (1)
22	DUTY			kW	1380,00		
23	SURFACE OVERDESIGN			%	20		
24	DESIGN CONDITIONS						
25	PRESSURE			barg	3,8		3,5
26	TEMPERATURE			°C	550,0		550,0
27	REACTOR DIMENSIONS						
28	NUMBER OF TUBES				400		
29	LENGTH OF TUBES			m	3,66		
30	INTERNAL DIAMETER OF TUBES			m	0,046		
31	EXTERNAL DIAMETER OF TUBES			m	0,050		
32	MATERIALS						
33	Shell and cover	INCONEL		Tubes	INCONEL		
34	Floating head and cover			Channel and cover	INCONEL		
35	Fixed tubesheet	INCONEL		Floating tubesheet			
36	Wear plate			Baffles	INCONEL		
37	Joint type	Gaskets					
38	CORROSION ALLOWANCE	Shell side		6 mm	Tube side	6 mm	
39	NOZZLES	Shell side		Inlet	6 (1) inch	Outlet	6 (1) inch
40		Tube side		Inlet	16 (1) inch	Outlet	20 (1) inch
41	CODE REQUIREMENTS ASME SECTION VIII, DIV.1						
42	NOTES						
43	(1) TO BE DEFINED DURING DETAILED ENGINEERING PHASE						
43							
44							
45							
46							

ANEXO VII – Informe de la simulación

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION

ASPEN PLUS (R) IS A PROPRIETARY PRODUCT OF ASPEN TECHNOLOGY, INC. (ASPENTECH), AND MAY BE USED ONLY UNDER AGREEMENT WITH ASPENTECH. RESTRICTED RIGHTS LEGEND: USE, REPRODUCTION, OR DISCLOSURE BY THE U.S. GOVERNMENT IS SUBJECT TO RESTRICTIONS SET FORTH IN (i) FAR 52.227-14, Alt. III, (ii) FAR 52.227-19, (iii) DFARS 252.227-7013(c)(1)(ii), or (iv) THE ACCOMPANYING LICENSE AGREEMENT, AS APPLICABLE. FOR PURPOSES OF THE FAR, THIS SOFTWARE SHALL BE DEEMED TO BE "UNPUBLISHED" AND LICENSED WITH DISCLOSURE PROHIBITIONS. CONTRACTOR/SUBCONTRACTOR: ASPEN TECHNOLOGY, INC. 20 CROSBY DRIVE, BEDFORD, MA 01730.

TABLE OF CONTENTS

RUN CONTROL SECTION.....	1
RUN CONTROL INFORMATION.....	1
DESCRIPTION.....	1
INPUT SECTION.....	2
INPUT FILE(S).....	2
FLOWSHEET SECTION.....	30
FLOWSHEET CONNECTIVITY BY STREAMS.....	30
FLOWSHEET CONNECTIVITY BY BLOCKS.....	30
CONVERGENCE STATUS SUMMARY.....	30
DESIGN-SPEC: MMS.....	31
DESIGN-SPEC: TMSIN.....	31
CALCULATOR BLOCK: 11-ACET.....	32
CALCULATOR BLOCK: 11-AGUA.....	32
CALCULATOR BLOCK: 11-DIIS.....	33
CALCULATOR BLOCK: 11-H2.....	33
CALCULATOR BLOCK: 11-IPA.....	33
CALCULATOR BLOCK: 11-PROP.....	34
CALCULATOR BLOCK: 11DIACE.....	34
CALCULATOR BLOCK: P13-P12E.....	35
CALCULATOR BLOCK: T13-T12E.....	35
CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE133.....	35
CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE134.....	37
CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE135.....	37
COMPUTATIONAL SEQUENCE.....	38
OVERALL FLOWSHEET BALANCE.....	38
PHYSICAL PROPERTIES SECTION.....	40
COMPONENTS.....	40
PARAMETER VALUES.....	40
PROPERTY PARAMETERS.....	105

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
TABLE OF CONTENTS

PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION.....217
 BINARY PARAMETERS.....217

REACTION SECTION.....227
 REACTION: DEHYDFOR TYPE: GENERAL.....227

U-O-S BLOCK SECTION.....228
 BLOCK: B1 MODEL: MIXER.....228
 BLOCK: B2 MODEL: MIXER.....229
 BLOCK: B3 MODEL: MIXER.....230
 BLOCK: B4 MODEL: FSPLIT.....231
 BLOCK: P-102 MODEL: PUMP.....232
 BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC.....233
 BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC.....240
 BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC.....248
 BLOCK: E-101 MODEL: HEATER.....257
 BLOCK: E-301 MODEL: HEATER.....259
 BLOCK: E-102 MODEL: HEATER.....261
 BLOCK: E-206 MODEL: HEATER.....263
 BLOCK: V-301 MODEL: FLASH2.....265
 BLOCK: P-101 MODEL: PUMP.....267
 BLOCK: R-TURTON MODEL: RPLUG.....268

STREAM SECTION.....272
 STREAM COSTS.....272
 10 11 12 13 14.....273
 18 19 20 21 22.....273
 24 25 26 27 28.....275
 29 32 36 40 41.....275
 44 51 52 53 F-MSALT.....277
 F-TURTON O-MSALT P-TURTON.....277

UTILITY SECTION.....279
 UTILITY USAGE: U-101 (GENERAL).....279
 UTILITY USAGE: U-102 (STEAM).....280
 UTILITY USAGE: U-103 (REFRIGERANT).....281
 UTILITY USAGE: U-104 (WATER).....282
 UTILITY USAGE: U-105 (WATER).....283
 UTILITY USAGE: U-106 (ELECTRICITY).....284

PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION.....285
 FLASH CURVE TABLE: BINRY-1.....285
 FLASH CURVE TABLE: BINRY-2.....293

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
TABLE OF CONTENTS

FLWSHEET SECTION (HIERARCHY: R-201)	301
FLWSHEET CONNECTIVITY BY STREAMS	301
FLWSHEET CONNECTIVITY BY BLOCKS	301
FLWSHEET SECTION BALANCE: GLOBAL	301
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)	302
BLOCK: E-104 MODEL: HEATER	302
BLOCK: S1-101EQ MODEL: RSTOIC	304
BLOCK: S2-101EQ MODEL: RSTOIC	306
BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG	308
BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG	315
BLOCK: SUB1-101 MODEL: RSTOIC	323
BLOCK: SUB2-101 MODEL: RSTOIC	325
STREAM SECTION (HIERARCHY: R-201)	327
11 11EQ 12 12EQ 13	327
13EQ MS MS-IN MS-OUT PRODEQ	327
PRODUCTS	329
PROBLEM STATUS SECTION	331
BLOCK STATUS	331

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
RUN CONTROL SECTION

RUN CONTROL INFORMATION

THIS COPY OF ASPEN PLUS LICENSED TO UNIVERSIDAD DE VALLADOLI

TYPE OF RUN: EDIT

INPUT FILE NAME: _3227fpm.inm

INPUT PROBLEM DATA FILE NAME : _3227fpm

OUTPUT PROBLEM DATA FILE NAME: _1849edh

LOCATED IN:

PDF SIZE USED FOR INPUT TRANSLATION:

NUMBER OF FILE RECORDS (PSIZE) = 0
NUMBER OF IN-CORE RECORDS = 256
PSIZE NEEDED FOR SIMULATION = 1

CALLING PROGRAM NAME: apmain

LOCATED IN: C:\Program Files\AspenTech\Aspen Plus V11.0\Engine\XeQ

SIMULATION REQUESTED FOR ENTIRE FLOWSHEET

DESCRIPTION

General Simulation with Metric Units : C, bar, kg/hr, kmol/hr,
Gcal/hr, cum/hr. Property Method: None Flow basis for input: Mole
Stream report composition: Mole flow

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S)

;
;Input file created by Aspen Plus Rel. 37.0 at 03:06:00 Fri Jul 2, 2021
;Directory Runid
acetone_dehydrogenation_isopropanol_rev102_pruebaaguabien
;

DYNAMICS

DYNAMICS RESULTS=ON

TITLE 'ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION'

IN-UNITS MET ENTHALPY='J/KG' VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO=KW &
MOLE-HEAT-CA='KJ/KMOL-K' HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' &
PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C VOLUME=CUM DELTA-T=C &
HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' MASS-DENSITY='KG/CUM' &
MOLE-ENTHALP='KJ/KMOL' MASS-ENTHALP='KJ/KG' &
MASS-HEAT-CA='KJ/KG-K' HEAT=KJ MOLE-CONC='MOL/L' PDROP=BAR &
VOL-HEAT-CAP='KJ/CUM-K' HEAT-FLUX='KW/M' &
VOL-ENTHALPY='KJ/CUM' SHORT-LENGTH=MM

DEF-STREAMS CONVEN ALL

SIM-OPTIONS MASS-BAL-CHE=YES OPER-YEAR=8040.

MODEL-OPTION

DESCRIPTION "

General Simulation with Metric Units :
C, bar, kg/hr, kmol/hr, Gcal/hr, cum/hr.

Property Method: None

Flow basis for input: Mole

Stream report composition: Mole flow

"

DATABANKS 'APV110 PURE37' / 'APV110 AQUEOUS' / 'APV110 SOLIDS' &
/ 'APV110 INORGANIC' / 'APESV110 AP-EOS' / &
'NISTV110 NIST-TRC' / NOASPENPCD

PROP-SOURCES 'APV110 PURE37' / 'APV110 AQUEOUS' / &
'APV110 SOLIDS' / 'APV110 INORGANIC' / 'APESV110 AP-EOS' &
/ 'NISTV110 NIST-TRC'

COMPONENTS

HYDROGEN H2 /
PROPY-01 C3H6-2 /
ACETO-01 C3H6O-1 /
DIISO-01 C6H14O-3 /
ISOPR-01 C3H8O-2 /
WATER H2O /
DIACE-01 C6H12O2-D3 /

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

SODIU-01 NANO3 /
POTAS-01 KNO3 /
SODIU-02 NANO2

HENRY-COMPS HC-1 HYDROGEN PROPY-01

SOLVE

RUN-MODE MODE=SIM

FLOWSHEET

HIERARCHY R-201
CONNECT \$C-1 IN=14 OUT="R-201.11"
CONNECT \$C-2 IN="R-201.PRODUCTS" OUT=18
BLOCK R-TURTON IN=F-TURTON F-MSALT OUT=P-TURTON O-MSALT
BLOCK E-101 IN=13 OUT=14
BLOCK P-101 IN=12 OUT=13
BLOCK E-301 IN=18 OUT=19
BLOCK V-301 IN=19 OUT=20 21
BLOCK C-301 IN=20 25 OUT=27 26
BLOCK E-102 IN=24 OUT=25
BLOCK C-302 IN=21 26 OUT=32 36 40
BLOCK C-303 IN=36 OUT=44 52 11
BLOCK B2 IN=10 11 OUT=12
BLOCK B1 IN=27 32 OUT=28
BLOCK B3 IN=28 44 OUT=29
BLOCK E-206 IN=40 OUT=53
BLOCK B4 IN=53 OUT=41 51
BLOCK B5 IN=51 22 OUT=23
BLOCK P-102 IN=23 OUT=24

PROPERTIES WILS-RK HENRY-COMPS=HC-1

PROPERTIES NRTL-RK / UNIQU-RK / UNIQUAC / UNIQUAC2

PROP-REPLACE UNIQUAC2 NRTL

ESTIMATE ALL

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='GCAL/HR' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=GCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
PDROP=BAR SHORT-LENGTH=MM

WILSON ALL ALL UNIFAC
NRTL ALL ALL UNIFAC
WILSON ALL ALL UNIFAC
UNIQU ALL ALL UNIFAC

PROP-DATA PCES-1

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='GCAL/HR' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=GCAL MOLE-CONC='MOL/L' &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

PDROP=BAR SHORT-LENGTH=MM
PROP-LIST RKTZRA / VLSTD / GMUQR / GMUQQ
PVAL SODIU-01 .2917000720 / 40.23640000 / 1.637442320 / &
1.604000000
PROP-LIST RKTZRA / VLSTD
PVAL POTAS-01 .2918596200 / 298.9063450
PROP-LIST VLSTD
PVAL SODIU-02 34.31970000

PROP-DATA REVIEW-1

IN-UNITS MET ENTHALPY='J/KG' VOLUME-FLOW='CUM/HR' &
ENTHALPY-FLO=KW MOLE-HEAT-CA='KJ/KMOL-K' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KJ/KMOL' &
MASS-ENTHALP='KJ/KG' MASS-HEAT-CA='KJ/KG-K' HEAT=KJ &
MOLE-CONC='MOL/L' PDROP=BAR VOL-HEAT-CAP='KJ/CUM-K' &
HEAT-FLUX='KW/M' VOL-ENTHALPY='KJ/CUM' SHORT-LENGTH=MM
PROP-LIST VB
PVAL SODIU-01 45.86690000

PROP-DATA DHVLWT-1

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='GCAL/HR' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=GCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
PDROP=BAR SHORT-LENGTH=MM
PROP-LIST DHVLWT
PVAL SODIU-01 17.87345080 380.0000000 .3800000000 0.0 &
-11.89000000
PVAL SODIU-02 16.66987148 320.0000000 .3800000000 0.0 &
-35.89000000

PROP-DATA KLDIP-1

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='GCAL/HR' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=GCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
PDROP=BAR SHORT-LENGTH=MM
PROP-LIST KLDIP
PVAL SODIU-01 .0840444912 2.64729732E-4 -8.6468041E-7 &
9.3323272E-10 -3.839389E-13 380.0000000 1034.640000
PVAL SODIU-02 .0199118291 1.15215392E-3 -4.3702829E-6 &
6.43967123E-9 -3.602786E-12 320.0000000 690.1200000

PROP-DATA HENRY-1

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='GCAL/HR' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=GCAL MOLE-CONC='MOL/L' &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

PDROP=BAR SHORT-LENGTH=MM
PROP-LIST HENRY
BPVAL HYDROGEN ACETO-01 20.33877454 46.95500200 -2.213400000 &
7.89000000E-4 -81.90000000 40.00000000 0.0
BPVAL HYDROGEN WATER 180.0660745 -6993.510000 -26.31190000 &
.0150431000 .8500000000 65.85000000 0.0
BPVAL PROPY-01 ISOPR-01 12.13967354 -2401.899902 0.0 0.0 &
20.00000000 60.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 WATER 299.1734745 -15567.37000 -41.73762000 &
0.0 20.85000000 104.8500000 0.0

PROP-DATA NRTL-1

IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='GCAL/HR' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=GCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
PDROP=BAR SHORT-LENGTH=MM

PROP-LIST NRTL
BPVAL PROPY-01 ACETO-01 0.0 422.6352000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 25.00000000 25.00000000
BPVAL ACETO-01 PROPY-01 0.0 -29.41320000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 25.00000000 25.00000000
BPVAL ACETO-01 DIISO-01 0.0 456.6203000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 50.90000000 61.90000000
BPVAL DIISO-01 ACETO-01 0.0 75.97160000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 50.90000000 61.90000000
BPVAL ACETO-01 ISOPR-01 -2.410600000 822.4892000 .3000000000 &
0.0 0.0 0.0 25.00000000 82.30000000
BPVAL ISOPR-01 ACETO-01 2.449400000 -583.3452000 .3000000000 &
0.0 0.0 0.0 25.00000000 82.30000000
BPVAL ACETO-01 WATER 6.398100000 -1808.991000 .3000000000 &
0.0 0.0 0.0 20.00000000 95.10000000
BPVAL WATER ACETO-01 .0544000000 419.9716000 .3000000000 &
0.0 0.0 0.0 20.00000000 95.10000000
BPVAL ACETO-01 DIACE-01 0.0 873.6603000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 56.00000000 164.00000000
BPVAL DIACE-01 ACETO-01 0.0 -759.4806000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 56.00000000 164.00000000
BPVAL DIISO-01 ISOPR-01 0.0 419.8083000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 65.50000000 82.40000000
BPVAL ISOPR-01 DIISO-01 0.0 40.00400000 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 65.50000000 82.40000000
BPVAL DIISO-01 WATER 0.0 770.5660000 .3000000000 0.0 0.0 &
0.0 63.00000000 100.0000000
BPVAL WATER DIISO-01 0.0 1484.160000 .3000000000 0.0 0.0 &
0.0 63.00000000 100.0000000

BPVAL ISOPR-01 WATER -1.31150000 426.3978000 .300000000 &
0.0 0.0 0.0 25.00000000 100.0000000
BPVAL WATER ISOPR-01 6.82840000 -1483.457300 .300000000 &
0.0 0.0 0.0 25.00000000 100.0000000
BPVAL WATER DIACE-01 6.22380000 -1245.740100 .300000000 &
0.0 0.0 0.0 38.20000000 109.1000000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

BPVAL	DIACE-01	WATER	-	.7413000000	184.2232000	.3000000000	&
0.0	0.0	0.0	38.20000000	109.1000000			
BPVAL	HYDROGEN	PROPY-01	0.0	-827.8145840	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	PROPY-01	HYDROGEN	0.0	1703.313690	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	HYDROGEN	ACETO-01	0.0	-1019.473120	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	ACETO-01	HYDROGEN	0.0	2566.196760	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	HYDROGEN	DIISO-01	0.0	-1729.733730	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	DIISO-01	HYDROGEN	0.0	9461.056730	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	HYDROGEN	ISOPR-01	0.0	-1513.266280	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	ISOPR-01	HYDROGEN	0.0	6517.683430	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	HYDROGEN	WATER	0.0	-449.6704350	.3000000000	0.0 0.0	&
0.0	25.00000000	25.00000000					
BPVAL	WATER	HYDROGEN	0.0	638.3454270	.3000000000	0.0 0.0	&
0.0	25.00000000	25.00000000					
BPVAL	HYDROGEN	DIACE-01	0.0	-2732.477650	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	DIACE-01	HYDROGEN	0.0	3000.000000	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	PROPY-01	DIISO-01	0.0	-324.7387780	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	DIISO-01	PROPY-01	0.0	414.7291660	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	PROPY-01	ISOPR-01	0.0	645.4015090	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	ISOPR-01	PROPY-01	0.0	-48.78344540	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	PROPY-01	WATER	0.0	701.1383670	.3000000000	0.0 0.0	&
0.0	25.00000000	25.00000000					
BPVAL	WATER	PROPY-01	0.0	1263.197690	.3000000000	0.0 0.0	&
0.0	25.00000000	25.00000000					
BPVAL	PROPY-01	DIACE-01	0.0	916.1969630	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	DIACE-01	PROPY-01	0.0	-186.9163410	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	DIISO-01	DIACE-01	0.0	856.8834020	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	DIACE-01	DIISO-01	0.0	81.16170840	.3000000000	0.0	&
0.0	0.0	25.00000000	25.00000000				
BPVAL	ISOPR-01	DIACE-01	0.0	329.8845520	.3000000000	0.0	&

```
0.0 0.0 25.00000000 25.00000000
BPVAL DIACE-01 ISOPR-01 0.0 -198.8754160 .3000000000 0.0 &
0.0 0.0 25.00000000 25.00000000
```

```
PROP-DATA UNIQ-1
IN-UNITS MET VOLUME-FLOW='CUM/HR' ENTHALPY-FLO='GCAL/HR' &
```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KCAL/MOL' &
MASS-ENTHALP='KCAL/KG' HEAT=GCAL MOLE-CONC='MOL/L' &
PDROP=BAR SHORT-LENGTH=MM
PROP-LIST UNIQ
BPVAL PROPY-01 ACETO-01 0.0 -187.0595000 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ACETO-01 PROPY-01 0.0 14.97910000 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ACETO-01 DIISO-01 0.0 -12.56390000 0.0 0.0 &
50.90000000 61.90000000 0.0
BPVAL DIISO-01 ACETO-01 0.0 -168.7302000 0.0 0.0 &
50.90000000 61.90000000 0.0
BPVAL ACETO-01 ISOPR-01 2.708800000 -828.8772000 0.0 0.0 &
25.00000000 82.30000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 ACETO-01 -3.453000000 947.6735000 0.0 0.0 &
25.00000000 82.30000000 0.0
BPVAL ACETO-01 WATER 8.605100000 -3122.581800 0.0 0.0 &
20.00000000 95.10000000 0.0
BPVAL WATER ACETO-01 -4.833800000 1612.196300 0.0 0.0 &
20.00000000 95.10000000 0.0
BPVAL ACETO-01 DIACE-01 0.0 -222.0655000 0.0 0.0 &
56.00000000 164.0000000 0.0
BPVAL DIACE-01 ACETO-01 0.0 256.6596000 0.0 0.0 &
56.00000000 164.0000000 0.0
BPVAL DIISO-01 ISOPR-01 0.0 -353.6478000 0.0 0.0 &
65.50000000 82.40000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 DIISO-01 0.0 129.0989000 0.0 0.0 &
65.50000000 82.40000000 0.0
BPVAL DIISO-01 WATER 0.0 -774.7116000 0.0 0.0 63.00000000 &
100.0000000 0.0
BPVAL WATER DIISO-01 0.0 -29.59200000 0.0 0.0 63.00000000 &
100.0000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 WATER 2.923400000 -1111.674000 0.0 0.0 &
25.00000000 100.0000000 0.0
BPVAL WATER ISOPR-01 -3.312700000 1045.578600 0.0 0.0 &
25.00000000 100.0000000 0.0
BPVAL WATER DIACE-01 -.6087000000 377.4282000 0.0 0.0 &
38.20000000 109.1000000 0.0
BPVAL DIACE-01 WATER 1.006300000 -869.3205000 0.0 0.0 &
38.20000000 109.1000000 0.0
BPVAL HYDROGEN PROPY-01 0.0 35.57638480 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 HYDROGEN 0.0 -25.02745440 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL HYDROGEN ACETO-01 0.0 82.28341100 0.0 0.0 &

25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ACETO-01 HYDROGEN 0.0 -10.25734410 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL HYDROGEN DIISO-01 0.0 106.5695900 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIISO-01 HYDROGEN 0.0 -84.72988160 0.0 0.0 &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL HYDROGEN ISOPR-01 0.0 134.0446560 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 HYDROGEN 0.0 133.0035190 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL HYDROGEN WATER 0.0 -38.09447290 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL WATER HYDROGEN 0.0 36.14987320 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL HYDROGEN DIACE-01 0.0 123.4207660 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIACE-01 HYDROGEN 0.0 93.20530480 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 DIISO-01 0.0 20.06664820 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIISO-01 PROPY-01 0.0 -34.44062890 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 ISOPR-01 0.0 -273.0919270 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 PROPY-01 0.0 32.86481970 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 WATER 0.0 -423.8002690 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL WATER PROPY-01 0.0 -404.0904620 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 DIACE-01 0.0 -225.9345960 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIACE-01 PROPY-01 0.0 36.04843680 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIISO-01 DIACE-01 0.0 -317.2861310 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIACE-01 DIISO-01 0.0 87.19029430 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 DIACE-01 0.0 -44.94008030 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIACE-01 ISOPR-01 0.0 13.39883880 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0

PROP-DATA WILSON-1

IN-UNITS MET ENTHALPY='J/KG' VOLUME-FLOW='CUM/HR' &
ENTHALPY-FLO=KW MOLE-HEAT-CA='KJ/KMOL-K' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KJ/KMOL' &
MASS-ENTHALP='KJ/KG' MASS-HEAT-CA='KJ/KG-K' HEAT=KJ &
MOLE-CONC='MOL/L' PDROP=BAR VOL-HEAT-CAP='KJ/CUM-K' &
HEAT-FLUX='KW/M' VOL-ENTHALPY='KJ/CUM' SHORT-LENGTH=MM

PROP-LIST WILSON

BPVAL PROPY-01 ACETO-01 0.0 -77.18570000 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ACETO-01 PROPY-01 0.0 -429.2175000 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ACETO-01 DIISO-01 0.0 -134.5457000 0.0 0.0 &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

50.90000000	61.90000000	0.0							
BPVAL	DIISO-01	ACETO-01	0.0	-440.7704000	0.0	0.0	&		
50.90000000	61.90000000	0.0							
BPVAL	ACETO-01	ISOPR-01	-1.506000000	301.6087000	0.0	0.0	&		
25.00000000	82.30000000	0.0							
BPVAL	ISOPR-01	ACETO-01	1.617000000	-600.7607000	0.0	0.0	&		
25.00000000	82.30000000	0.0							
BPVAL	ACETO-01	WATER	-8.514500000	2265.050800	0.0	0.0	&		
20.00000000	230.0000000	0.0							
BPVAL	WATER	ACETO-01	2.265900000	-1044.383500	0.0	0.0	&		
20.00000000	230.0000000	0.0							
BPVAL	ACETO-01	DIACE-01	0.0	614.3831000	0.0	0.0	&		
56.00000000	164.0000000	0.0							
BPVAL	DIACE-01	ACETO-01	0.0	-1613.975700	0.0	0.0	&		
56.00000000	164.0000000	0.0							
BPVAL	DIISO-01	ISOPR-01	0.0	-111.9926000	0.0	0.0	&		
65.50000000	82.40000000	0.0							
BPVAL	ISOPR-01	DIISO-01	0.0	-372.2020000	0.0	0.0	&		
65.50000000	82.40000000	0.0							
BPVAL	DIISO-01	WATER	0.0	-1891.062700	0.0	0.0	&	63.00000000	&
100.0000000	0.0								
BPVAL	WATER	DIISO-01	0.0	-961.3133000	0.0	0.0	&	63.00000000	&
100.0000000	0.0								
BPVAL	ISOPR-01	WATER	-6.032000000	1294.689100	0.0	0.0	&		
25.00000000	144.6100000	0.0							
BPVAL	WATER	ISOPR-01	.1372000000	-183.0400000	0.0	0.0	&		
25.00000000	144.6100000	0.0							
BPVAL	WATER	DIACE-01	.5249000000	-255.1855000	0.0	0.0	&		
38.20000000	109.1000000	0.0							
BPVAL	DIACE-01	WATER	-7.071600000	1626.590900	0.0	0.0	&		
38.20000000	109.1000000	0.0							
BPVAL	HYDROGEN	PROPY-01	0.0	410.8972580	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							
BPVAL	PROPY-01	HYDROGEN	0.0	-363.8466530	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							
BPVAL	HYDROGEN	ACETO-01	0.0	465.4717350	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							
BPVAL	ACETO-01	HYDROGEN	0.0	-296.9620820	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							
BPVAL	HYDROGEN	DIISO-01	0.0	631.9973360	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							
BPVAL	DIISO-01	HYDROGEN	0.0	-456.0676040	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							
BPVAL	HYDROGEN	ISOPR-01	0.0	568.7835740	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							
BPVAL	ISOPR-01	HYDROGEN	0.0	-206.6554640	0.0	0.0	&		
25.00000000	25.00000000	0.0							

BPVAL HYDROGEN WATER 0.0 216.3350670 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL WATER HYDROGEN 0.0 -203.9626300 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL HYDROGEN DIACE-01 0.0 719.8352510 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

BPVAL DIACE-01 HYDROGEN 0.0 -303.3987330 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 DIISO-01 0.0 -421.8636430 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIISO-01 PROPY-01 0.0 277.2234190 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 ISOPR-01 0.0 -35.68968270 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 PROPY-01 0.0 -560.5277580 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 WATER 0.0 -1334.559720 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL WATER PROPY-01 0.0 -760.7589440 0.0 0.0 25.00000000 &
25.00000000 0.0
BPVAL PROPY-01 DIACE-01 0.0 100.9783730 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIACE-01 PROPY-01 0.0 -810.7866140 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIISO-01 DIACE-01 0.0 -164.8497410 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIACE-01 DIISO-01 0.0 -805.0481700 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL ISOPR-01 DIACE-01 0.0 134.1040410 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0
BPVAL DIACE-01 ISOPR-01 0.0 -256.2937530 0.0 0.0 &
25.00000000 25.00000000 0.0

STREAM 10

SUBSTREAM MIXED TEMP=25. PRES=1.01325 MOLE-FLOW=83.94
MOLE-FRAC ISOPR-01 0.7 / WATER 0.3

STREAM 22

SUBSTREAM MIXED TEMP=35. PRES=1.01325 MOLE-FLOW=39.9864
MOLE-FRAC WATER 1.

STREAM 25

SUBSTREAM MIXED TEMP=15. PRES=1.5 MOLE-FLOW=302.482
MOLE-FLOW HYDROGEN 4.53455E-16 / PROPY-01 1.91595E-15 / &
ACETO-01 0.0224993 / DIISO-01 1.13804E-09 / ISOPR-01 &
0.00320361 / WATER 302.351 / DIACE-01 0.105547

STREAM F-MSALT

SUBSTREAM MIXED TEMP=407. PRES=3. MASS-FLOW=35100.00000
MASS-FRAC SODIU-01 1.

STREAM F-TURTON

SUBSTREAM MIXED TEMP=234. PRES=2.16 MOLE-FLOW=57.84

MOLE-FLOW ACETO-01 0.16 / ISOPR-01 38.64 / WATER 19.04

BLOCK B1 MIXER
PARAM

BLOCK B2 MIXER

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

PARAM

BLOCK B3 MIXER
PARAM

BLOCK B4 FSPLIT
FRAC 41 0.073

BLOCK E-101 HEATER
PARAM TEMP=360. PRES=0. DPPARMOPT=YES
UTILITY UTILITY-ID=U-101

BLOCK E-102 HEATER
PARAM TEMP=15. PRES=0. DPPARMOPT=NO
UTILITY UTILITY-ID=U-103

BLOCK E-206 HEATER
PARAM TEMP=35. PRES=0. DPPARMOPT=NO
UTILITY UTILITY-ID=U-104

BLOCK E-301 HEATER
PARAM TEMP=22. PRES=0. DPPARMOPT=NO
UTILITY UTILITY-ID=U-105

BLOCK V-301 FLASH2
PARAM PRES=0. DUTY=0.

BLOCK C-301 RADFRAC
PARAM NSTAGE=9 ALGORITHM=STANDARD INIT-OPTION=STANDARD &
ABSORBER=YES HYDRAULIC=NO MAXOL=75 P-UPDATE=YES &
P-FIX=TOP DAMPING=NONE
PARAM2 STATIC-DP=YES
COL-CONFIG CONDENSER=NONE REBOILER=NONE CA-CONFIG=INT-1
FEEDS 20 9 ON-STAGE / 25 1
PRODUCTS 27 1 V / 26 9 L
P-SPEC 1 1.01325
COL-SPECS
T-EST 1 15.7592676 / 2 18.233846 / 3 23.9909129 / 4 &
31.8504865 / 5 38.1238967 / 6 41.7588349 / 7 &
43.3327336 / 8 43.2774744 / 9 40.3411877
L-EST 1 302.751024 / 2 303.697587 / 3 306.118984 / 4 &
309.711328 / 5 312.951399 / 6 314.963187 / 7 &
315.899839 / 8 316.072461 / 9 315.667078
V-EST 1 59.6517487 / 2 59.9207724 / 3 60.8673353 / 4 &
63.288733 / 5 66.8810766 / 6 70.1211475 / 7 &
72.1329356 / 8 73.0695875 / 9 73.2422101

X-EST 1 HYDROGEN 1.4634706E-05 / 1 PROPY-01 2.1770745E-06 / &
1 ACETO-01 0.00033385077 / 1 DIISO-01 5.3497103E-06 / &
1 ISOPR-01 1.0704286E-05 / 1 WATER 0.99928457 / 1 &
DIACE-01 0.00034871385 / 2 HYDROGEN 1.4471171E-05 / 2 &
PROPY-01 2.1441570E-06 / 2 ACETO-01 0.00164616469 / 2 &
DIISO-01 5.9358483E-06 / 2 ISOPR-01 1.1074045E-05 / 2 &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

WATER 0.997972326 / 2 DIACE-01 0.00034788388 / 3 &
HYDROGEN 1.4164111E-05 / 3 PROPY-01 2.0859529E-06 / 3 &
ACETO-01 0.0058339743 / 3 DIISO-01 7.0646055E-06 / 3 &
ISOPR-01 1.1949018E-05 / 3 WATER 0.993785134 / 3 &
DIACE-01 0.00034562847 / 4 HYDROGEN 1.3788334E-05 / 4 &
PROPY-01 1.9483697E-06 / 4 ACETO-01 0.0127631297 / 4 &
DIISO-01 7.981431E-06 / 4 ISOPR-01 1.3238872E-05 / 4 &
WATER 0.986857752 / 4 DIACE-01 0.00034216092 / 5 &
HYDROGEN 1.3560717E-05 / 5 PROPY-01 1.8047590E-06 / 5 &
ACETO-01 0.0192486771 / 5 DIISO-01 8.2307307E-06 / 5 &
ISOPR-01 1.4698053E-05 / 5 WATER 0.980374031 / 5 &
DIACE-01 0.00033899737 / 6 HYDROGEN 1.3359438E-05 / 6 &
PROPY-01 1.7081816E-06 / 6 ACETO-01 0.0235008976 / 6 &
DIISO-01 8.1776189E-06 / 6 ISOPR-01 1.6780984E-05 / 6 &
WATER 0.976122095 / 6 DIACE-01 0.00033698069 / 7 &
HYDROGEN 1.3290719E-05 / 7 PROPY-01 1.6871511E-06 / 7 &
ACETO-01 0.0262484443 / 7 DIISO-01 8.2652174E-06 / 7 &
ISOPR-01 2.1682138E-05 / 7 WATER 0.973370796 / 7 &
DIACE-01 0.00033583464 / 8 HYDROGEN 1.3498753E-05 / 8 &
PROPY-01 1.7991391E-06 / 8 ACETO-01 0.0296927451 / 8 &
DIISO-01 9.0026402E-06 / 8 ISOPR-01 3.7279497E-05 / 8 &
WATER 0.969910752 / 8 DIACE-01 0.00033492261 / 9 &
HYDROGEN 1.4813260E-05 / 9 PROPY-01 2.4780742E-06 / 9 &
ACETO-01 0.0416117932 / 9 DIISO-01 1.3022539E-05 / 9 &
ISOPR-01 0.00010922129 / 9 WATER 0.957914676 / 9 &
DIACE-01 0.00033399587
Y-EST 1 HYDROGEN 0.96769481 / 1 PROPY-01 0.0132690647 / &
1 ACETO-01 0.00027114507 / 1 DIISO-01 0.00104416862 / &
1 ISOPR-01 2.3487389E-06 / 1 WATER 0.0177165069 / 1 &
DIACE-01 1.9559671E-06 / 2 HYDROGEN 0.963424135 / 2 &
PROPY-01 0.0132204909 / 2 ACETO-01 0.0015812323 / 2 &
DIISO-01 0.00106651017 / 2 ISOPR-01 2.9577837E-06 / 2 &
WATER 0.0207022838 / 2 DIACE-01 2.3904882E-06 / 3 &
HYDROGEN 0.9484411 / 3 PROPY-01 0.0130147654 / 3 &
ACETO-01 0.00810962459 / 3 DIISO-01 0.00105293234 / 3 &
ISOPR-01 4.9231622E-06 / 3 WATER 0.0293730192 / 3 &
DIACE-01 3.6351440E-06 / 4 HYDROGEN 0.912153251 / 4 &
PROPY-01 0.012516627 / 4 ACETO-01 0.0281182005 / 4 &
DIISO-01 0.00101833438 / 4 ISOPR-01 9.3906200E-06 / 4 &
WATER 0.0461782999 / 4 DIACE-01 5.8968117E-06 / 5 &
HYDROGEN 0.863158324 / 5 PROPY-01 0.0118438038 / 5 &
ACETO-01 0.0590086319 / 5 DIISO-01 0.00096826226 / 5 &
ISOPR-01 1.5501063E-05 / 5 WATER 0.0649973895 / 5 &
DIACE-01 8.0871707E-06 / 6 HYDROGEN 0.823274198 / 6 &
PROPY-01 0.0112959891 / 6 ACETO-01 0.0858168417 / 6 &
DIISO-01 0.00092500342 / 6 ISOPR-01 2.1908874E-05 / 6 &
WATER 0.0786566538 / 6 DIACE-01 9.4046546E-06 / 7 &

HYDROGEN 0.800312574 / 7 PROPY-01 0.0109805725 / 7 &
ACETO-01 0.102527265 / 7 DIISO-01 0.00089920272 / 7 &
ISOPR-01 3.0802728E-05 / 7 WATER 0.0852397921 / 7 &
DIACE-01 9.7913158E-06 / 8 HYDROGEN 0.790053539 / 8 &
PROPY-01 0.0108397476 / 8 ACETO-01 0.113392652 / 8 &
DIISO-01 0.00088815971 / 8 ISOPR-01 5.1812020E-05 / 8 &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

WATER 0.0847650591 / 8 DIACE-01 9.0307539E-06 / 9 &
HYDROGEN 0.788192411 / 9 PROPY-01 0.0108146869 / 9 &
ACETO-01 0.128050942 / 9 DIISO-01 0.00088926821 / 9 &
ISOPR-01 0.00011905049 / 9 WATER 0.0719277756 / 9 &
DIACE-01 5.8651706E-06

REPORT NOHYDRAULIC

BLOCK C-302 RADFRAC

PARAM NSTAGE=11 ALGORITHM=STANDARD MAXOL=75 DAMPING=NONE
COL-CONFIG CONDENSER=PARTIAL-V-L
FEEDS 21 8 ON-STAGE / 26 9 ON-STAGE
PRODUCTS 32 1 V / 36 1 L / 40 11 L
P-SPEC 1 1.01325
COL-SPECS D:F=0.157826925 MOLE-RR=0.633041762 T1=30.
T-EST 1 30. / 2 56.6154748 / 3 56.8328174 / 4 &
57.0725963 / 5 57.3833363 / 6 57.861799 / 7 &
58.8212198 / 8 61.8227687 / 9 81.5678888 / 10 &
97.5058413 / 11 99.8585007
L-EST 1 61.4704308 / 2 67.8307282 / 3 67.1943286 / 4 &
66.4562089 / 5 65.4777528 / 6 63.9026763 / 7 &
60.4561233 / 8 125.626415 / 9 458.183951 / 10 &
471.845592 / 11 326.888683
V-EST 1 0.00941558958 / 2 122.93641 / 3 129.296708 / 4 &
128.660308 / 5 127.922189 / 6 126.943732 / 7 &
125.368656 / 8 121.922103 / 9 114.40481 / 10 &
131.295268 / 11 144.95691
X-EST 1 HYDROGEN 0.00019206003 / 1 PROPY-01 0.00010637706 / &
1 ACETO-01 0.939245898 / 1 DIISO-01 0.00071804547 / &
1 ISOPR-01 0.00603880438 / 1 WATER 0.0536988148 / 2 &
HYDROGEN 8.8290345E-08 / 2 PROPY-01 3.3882388E-07 / 2 &
ACETO-01 0.914028964 / 2 DIISO-01 0.00018689585 / 2 &
ISOPR-01 0.00990819315 / 2 WATER 0.07587552 / 2 &
DIACE-01 1.4999984E-18 / 3 HYDROGEN 4.9472085E-08 / 3 &
PROPY-01 1.5991088E-07 / 3 ACETO-01 0.888339303 / 3 &
DIISO-01 0.00011151891 / 3 ISOPR-01 0.0132305312 / 3 &
WATER 0.0983184375 / 3 DIACE-01 3.2420611E-16 / 4 &
HYDROGEN 4.8620158E-08 / 4 PROPY-01 1.5423625E-07 / 4 &
ACETO-01 0.859952571 / 4 DIISO-01 9.8759163E-05 / 4 &
ISOPR-01 0.0159974971 / 4 WATER 0.12395097 / 4 &
DIACE-01 7.8310828E-14 / 5 HYDROGEN 4.7237522E-08 / 5 &
PROPY-01 1.4544596E-07 / 5 ACETO-01 0.824319038 / 5 &
DIISO-01 9.3316081E-05 / 5 ISOPR-01 0.0181200391 / 5 &
WATER 0.157467414 / 5 DIACE-01 2.0979149E-11 / 6 &
HYDROGEN 4.4592727E-08 / 6 PROPY-01 1.3135919E-07 / 6 &
ACETO-01 0.770855848 / 6 DIISO-01 8.6326017E-05 / 6 &
ISOPR-01 0.0193053177 / 6 WATER 0.209752327 / 6 &
DIACE-01 6.1636251E-09 / 7 HYDROGEN 3.8002720E-08 / 7 &

PROPY-01 1.0611959E-07 / 7 ACETO-01 0.664567736 / 7 &
DIISO-01 7.2165956E-05 / 7 ISOPR-01 0.0184742199 / 7 &
WATER 0.316883827 / 7 DIACE-01 1.9068461E-06 / 8 &
HYDROGEN 1.6575695E-08 / 8 PROPY-01 4.9264117E-08 / 8 &
ACETO-01 0.349860866 / 8 DIISO-01 3.2796291E-05 / 8 &
ISOPR-01 0.0105347628 / 8 WATER 0.639250382 / 8 &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

DIACE-01 0.00032112620 / 9 HYDROGEN 7.3616398E-10 / 9 &
PROPY-01 4.9314944E-10 / 9 ACETO-01 0.0238986751 / 9 &
DIISO-01 2.7601468E-07 / 9 ISOPR-01 0.00109773286 / 9 &
WATER 0.974518387 / 9 DIACE-01 0.00048492755 / 10 &
HYDROGEN 3.7241153E-14 / 10 PROPY-01 6.3902289E-14 / &
10 ACETO-01 0.00160229462 / 10 DIISO-01 1.2084168E-09 / &
10 ISOPR-01 0.00013162490 / 10 WATER 0.997774225 / &
10 DIACE-01 0.00049185399 / 11 HYDROGEN 1.7263472E-18 / &
11 PROPY-01 7.3017231E-18 / 11 ACETO-01 8.5676384E-05 / &
11 DIISO-01 4.3359278E-12 / 11 ISOPR-01 1.2203452E-05 / &
11 WATER 0.999500026 / 11 DIACE-01 0.00040209462
Y-EST 1 HYDROGEN 0.617132956 / 1 PROPY-01 0.014070839 / &
1 ACETO-01 0.355864104 / 1 DIISO-01 0.00112982503 / &
1 ISOPR-01 0.00097625995 / 1 WATER 0.010826016 / 2 &
HYDROGEN 0.00023931098 / 2 PROPY-01 0.00010744659 / 2 &
ACETO-01 0.939201218 / 2 DIISO-01 0.00071807700 / 2 &
ISOPR-01 0.00603841665 / 2 WATER 0.0536955312 / 2 &
DIACE-01 4.2812680E-21 / 3 HYDROGEN 0.00013627577 / 3 &
PROPY-01 5.1764946E-05 / 3 ACETO-01 0.925974285 / 3 &
DIISO-01 0.00043942748 / 3 ISOPR-01 0.0080683672 / 3 &
WATER 0.0653298796 / 3 DIACE-01 7.9394486E-19 / 4 &
HYDROGEN 0.00013692913 / 4 PROPY-01 5.1925878E-05 / 4 &
ACETO-01 0.912616649 / 4 DIISO-01 0.00040131012 / 4 &
ISOPR-01 0.00979439612 / 4 WATER 0.0769987894 / 4 &
DIACE-01 1.6932632E-16 / 5 HYDROGEN 0.00013771849 / 5 &
PROPY-01 5.2221623E-05 / 5 ACETO-01 0.898009684 / 5 &
DIISO-01 0.00039635348 / 5 ISOPR-01 0.0112120218 / 5 &
WATER 0.0901920008 / 5 DIACE-01 4.0682870E-14 / 6 &
HYDROGEN 0.00013877891 / 6 PROPY-01 5.2618414E-05 / 6 &
ACETO-01 0.879923194 / 6 DIISO-01 0.00039583972 / 6 &
ISOPR-01 0.0122699465 / 6 WATER 0.107219622 / 6 &
DIACE-01 1.0821074E-11 / 7 HYDROGEN 0.00014052052 / 7 &
PROPY-01 5.3270480E-05 / 7 ACETO-01 0.853370622 / 7 &
DIISO-01 0.00039607753 / 7 ISOPR-01 0.0128006065 / 7 &
WATER 0.1332389 / 7 DIACE-01 3.1417115E-09 / 8 &
HYDROGEN 0.0001444883 / 8 PROPY-01 5.4760127E-05 / 8 &
ACETO-01 0.802999311 / 8 DIISO-01 0.00039781235 / 8 &
ISOPR-01 0.0122046211 / 8 WATER 0.184198061 / 8 &
DIACE-01 9.4552606E-07 / 9 HYDROGEN 4.0891120E-05 / 9 &
PROPY-01 6.8916272E-06 / 9 ACETO-01 0.498748535 / 9 &
DIISO-01 7.1945101E-05 / 9 ISOPR-01 0.0118345797 / 9 &
WATER 0.489171872 / 9 DIACE-01 0.00012528540 / 10 &
HYDROGEN 2.5690074E-09 / 10 PROPY-01 1.7209542E-09 / &
10 ACETO-01 0.0831864145 / 10 DIISO-01 9.6320364E-07 / &
10 ISOPR-01 0.00380039895 / 10 WATER 0.912321061 / &
10 DIACE-01 0.00069115850 / 11 HYDROGEN 1.2121884E-13 / &
11 PROPY-01 2.0799027E-13 / 11 ACETO-01 0.00502238228 / &

```
11 DIISO-01 3.9237095E-09 / 11 ISOPR-01 0.00040092922 / &  
11 WATER 0.993882416 / 11 DIACE-01 0.00069426808  
SPEC 1 MOLE-FRAC 0.9989 COMPS=WATER BASE-COMPS=HYDROGEN &  
  PROPY-01 ACETO-01 DIISO-01 ISOPR-01 WATER DIACE-01 &  
  STREAMS=40 SPEC-ACTIVE=YES &  
  SPEC-DESCRIP="Fracción molar Agua en colas"
```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

SPEC 2 MOLE-RECOV 0.9925 COMPS=WATER STREAMS=40 &
BASE-STREAMS=21 26 SPEC-ACTIVE=YES &
SPEC-DESCRIP="Recuperación de Agua en colas"
VARY 1 D:F 0.14 0.2 VARY-ACTIVE=YES
VARY 2 MOLE-RR 0.1 2. VARY-ACTIVE=YES
UTILITIES COND-UTIL=U-104 REB-UTIL=U-102

BLOCK C-303 RADFRAC

PARAM NSTAGE=28 ALGORITHM=STANDARD INIT-OPTION=STANDARD &
MAXOL=75 DAMPING=NONE

COL-CONFIG CONDENSER=PARTIAL-V-L

FEEDS 36 20 ON-STAGE

PRODUCTS 44 1 V / 52 1 L / 11 28 L

P-SPEC 1 1.01325

COL-SPECS D:F=0.97 MOLE-RR=3.3 T1=30.

T-EST 1 30. / 2 56.1450697 / 3 56.1681243 / 4 &
56.176935 / 5 56.1843709 / 6 56.1917872 / 7 &
56.1995793 / 8 56.2079565 / 9 56.217115 / 10 &
56.2272846 / 11 56.2387504 / 12 56.2518724 / 13 &
56.2671106 / 14 56.2850582 / 15 56.3064888 / 16 &
56.332421 / 17 56.3642136 / 18 56.4037051 / 19 &
56.4534272 / 20 56.5169428 / 21 56.6367668 / 22 &
56.8345698 / 23 57.1857122 / 24 57.8467673 / 25 &
59.1966486 / 26 62.2041876 / 27 68.6114278 / 28 &
78.9675687

L-EST 1 193.734945 / 2 215.126558 / 3 215.036623 / 4 &
214.939061 / 5 214.841402 / 6 214.742834 / 7 &
214.642098 / 8 214.537712 / 9 214.427976 / 10 &
214.310898 / 11 214.184081 / 12 214.044582 / 13 &
213.888754 / 14 213.711884 / 15 213.507982 / 16 &
213.269194 / 17 212.985106 / 18 212.641674 / 19 &
212.219586 / 20 280.01083 / 21 278.901124 / 22 &
277.014036 / 23 273.709037 / 24 267.657356 / 25 &
256.097956 / 26 235.277206 / 27 211.177788 / 28 &
3.06983411

V-EST 1 0.00110043591 / 2 252.121675 / 3 273.513288 / &
4 273.423353 / 5 273.325791 / 6 273.228132 / 7 &
273.129564 / 8 273.028828 / 9 272.924442 / 10 &
272.814706 / 11 272.697628 / 12 272.570811 / 13 &
272.431312 / 14 272.275484 / 15 272.098614 / 16 &
271.894712 / 17 271.655924 / 18 271.371836 / 19 &
271.028404 / 20 270.606316 / 21 276.940996 / 22 &
275.83129 / 23 273.944202 / 24 270.639203 / 25 &
264.587521 / 26 253.028121 / 27 232.207371 / 28 &
208.107954

X-EST 1 HYDROGEN 0.00019070814 / 1 PROPY-01 0.00011165909 / &
1 ACETO-01 0.987658572 / 1 DIISO-01 0.00075579117 / &

1 ISOPR-01 6.3933329E-05 / 1 WATER 0.0112193363 / 2 &
HYDROGEN 7.3586455E-08 / 2 PROPY-01 2.9462798E-07 / 2 &
ACETO-01 0.986782334 / 2 DIISO-01 0.00020921553 / 2 &
ISOPR-01 0.00010304234 / 2 WATER 0.0129050398 / 3 &
HYDROGEN 1.6432888E-08 / 3 PROPY-01 6.3870346E-08 / 3 &
ACETO-01 0.98525191 / 3 DIISO-01 8.9948772E-05 / 3 &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

ISOPR-01 0.00015258569 / 3 WATER 0.0145054753 / 4 &
HYDROGEN 1.6409744E-08 / 4 PROPY-01 6.3771840E-08 / 4 &
ACETO-01 0.9836719 / 4 DIISO-01 6.3951740E-05 / 4 &
ISOPR-01 0.00021548260 / 4 WATER 0.0160485859 / 5 &
HYDROGEN 1.6404796E-08 / 5 PROPY-01 6.4244774E-08 / 5 &
ACETO-01 0.98209306 / 5 DIISO-01 5.8239076E-05 / 5 &
ISOPR-01 0.00029539819 / 5 WATER 0.0175532222 / 6 &
HYDROGEN 1.6400206E-08 / 6 PROPY-01 6.4815759E-08 / 6 &
ACETO-01 0.980509965 / 6 DIISO-01 5.6930578E-05 / 6 &
ISOPR-01 0.00039700282 / 6 WATER 0.0190360205 / 7 &
HYDROGEN 1.6395948E-08 / 7 PROPY-01 6.5500958E-08 / 7 &
ACETO-01 0.978904508 / 7 DIISO-01 5.6578520E-05 / 7 &
ISOPR-01 0.00052626080 / 7 WATER 0.0205125708 / 8 &
HYDROGEN 1.6392053E-08 / 8 PROPY-01 6.6321515E-08 / 8 &
ACETO-01 0.977254495 / 8 DIISO-01 5.6435629E-05 / 8 &
ISOPR-01 0.00069079915 / 8 WATER 0.0219981873 / 9 &
HYDROGEN 1.6388604E-08 / 9 PROPY-01 6.7301313E-08 / 9 &
ACETO-01 0.975534624 / 9 DIISO-01 5.6340245E-05 / 9 &
ISOPR-01 0.00090038301 / 9 WATER 0.0235085687 / 10 &
HYDROGEN 1.6385717E-08 / 10 PROPY-01 6.8466452E-08 / &
10 ACETO-01 0.973715648 / 10 DIISO-01 5.6257625E-05 / &
10 ISOPR-01 0.00116753186 / 10 WATER 0.0250604774 / &
11 HYDROGEN 1.6383548E-08 / 11 PROPY-01 6.9844662E-08 / &
11 ACETO-01 0.971762902 / 11 DIISO-01 5.6180649E-05 / &
11 ISOPR-01 0.00150832184 / 11 WATER 0.0266725094 / &
12 HYDROGEN 1.6382302E-08 / 12 PROPY-01 7.1464247E-08 / &
12 ACETO-01 0.969634333 / 12 DIISO-01 5.6108386E-05 / &
12 ISOPR-01 0.00194343517 / 12 WATER 0.028366036 / &
13 HYDROGEN 1.6382281E-08 / 13 PROPY-01 7.3352446E-08 / &
13 ACETO-01 0.967277939 / 13 DIISO-01 5.6041545E-05 / &
13 ISOPR-01 0.00249953858 / 13 WATER 0.0301663915 / &
14 HYDROGEN 1.6383751E-08 / 14 PROPY-01 7.5532828E-08 / &
14 ACETO-01 0.964628224 / 14 DIISO-01 5.5981462E-05 / &
14 ISOPR-01 0.00321111428 / 14 WATER 0.0321045883 / &
15 HYDROGEN 1.6387176E-08 / 15 PROPY-01 7.8022142E-08 / &
15 ACETO-01 0.961601508 / 15 DIISO-01 5.5930075E-05 / &
15 ISOPR-01 0.00412289417 / 15 WATER 0.0342195732 / &
16 HYDROGEN 1.6393088E-08 / 16 PROPY-01 8.0825899E-08 / &
16 ACETO-01 0.958089274 / 16 DIISO-01 5.5889900E-05 / &
16 ISOPR-01 0.00529314175 / 16 WATER 0.0365615966 / &
17 HYDROGEN 1.6402135E-08 / 17 PROPY-01 8.3933298E-08 / &
17 ACETO-01 0.953948684 / 17 DIISO-01 5.5864116E-05 / &
17 ISOPR-01 0.00679811394 / 17 WATER 0.0391972376 / &
18 HYDROGEN 1.6415081E-08 / 18 PROPY-01 8.7311412E-08 / &
18 ACETO-01 0.948988652 / 18 DIISO-01 5.5856589E-05 / &
18 ISOPR-01 0.00873819749 / 18 WATER 0.0422171898 / &
19 HYDROGEN 1.6432775E-08 / 19 PROPY-01 9.0898853E-08 / &

19 ACETO-01 0.942948797 / 19 DIISO-01 5.5871772E-05 / &
19 ISOPR-01 0.0112464482 / 19 WATER 0.0457487753 / &
20 HYDROGEN 1.6456039E-08 / 20 PROPY-01 9.4598716E-08 / &
20 ACETO-01 0.93546647 / 20 DIISO-01 5.5914268E-05 / &
20 ISOPR-01 0.0145005994 / 20 WATER 0.0499769052 / &
21 HYDROGEN 6.2944445E-12 / 21 PROPY-01 4.0624924E-10 / &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

21 ACETO-01 0.923804937 / 21 DIISO-01 1.5357534E-05 / &
21 ISOPR-01 0.0219943058 / 21 WATER 0.0541853987 / &
22 HYDROGEN 2.4196326E-15 / 22 PROPY-01 1.8938299E-12 / &
22 ACETO-01 0.904203718 / 22 DIISO-01 4.2578451E-06 / &
22 ISOPR-01 0.0347657507 / 22 WATER 0.0610262733 / &
23 HYDROGEN 9.3704175E-19 / 23 PROPY-01 9.4330154E-15 / &
23 ACETO-01 0.870381015 / 23 DIISO-01 1.1989143E-06 / &
23 ISOPR-01 0.0569581506 / 23 WATER 0.072659635 / 24 &
HYDROGEN 3.6585519E-22 / 24 PROPY-01 4.8684782E-17 / &
24 ACETO-01 0.809596039 / 24 DIISO-01 3.4559034E-07 / &
24 ISOPR-01 0.0965740314 / 24 WATER 0.0938295837 / &
25 HYDROGEN 1.4175685E-25 / 25 PROPY-01 2.4637534E-19 / &
25 ACETO-01 0.694846742 / 25 DIISO-01 1.0223347E-07 / &
25 ISOPR-01 0.168944204 / 25 WATER 0.136208951 / 26 &
PROPY-01 1.0800777E-21 / 26 ACETO-01 0.478904164 / 26 &
DIISO-01 2.9499269E-08 / 26 ISOPR-01 0.291876522 / 26 &
WATER 0.229219284 / 27 PROPY-01 2.9357363E-24 / 27 &
ACETO-01 0.18716703 / 27 DIISO-01 6.1678256E-09 / 27 &
ISOPR-01 0.386470466 / 27 WATER 0.426362497 / 28 &
HYDROGEN 4.9581823E-25 / 28 PROPY-01 1.7115127E-23 / &
28 ACETO-01 0.018681521 / 28 DIISO-01 2.2362604E-10 / &
28 ISOPR-01 0.119677922 / 28 WATER 0.861640556
Y-EST 1 HYDROGEN 0.607699717 / 1 PROPY-01 0.0166141363 / &
1 ACETO-01 0.371739918 / 1 DIISO-01 0.00114766776 / &
1 ISOPR-01 1.0784871E-05 / 1 WATER 0.00278777632 / 2 &
HYDROGEN 0.00019335974 / 2 PROPY-01 0.00011173112 / 2 &
ACETO-01 0.987655884 / 2 DIISO-01 0.00075579289 / 2 &
ISOPR-01 6.3933097E-05 / 2 WATER 0.0112192995 / 3 &
HYDROGEN 4.3212453E-05 / 3 PROPY-01 2.4133933E-05 / 3 &
ACETO-01 0.986966906 / 3 DIISO-01 0.00032589430 / 3 &
ISOPR-01 9.4693550E-05 / 3 WATER 0.0125451597 / 4 &
HYDROGEN 4.3181693E-05 / 4 PROPY-01 2.3960293E-05 / 4 &
ACETO-01 0.985763349 / 4 DIISO-01 0.00023213411 / 4 &
ISOPR-01 0.00013365468 / 4 WATER 0.0138037204 / 5 &
HYDROGEN 4.3197082E-05 / 5 PROPY-01 2.3968745E-05 / 5 &
ACETO-01 0.984521036 / 5 DIISO-01 0.00021174121 / 5 &
ISOPR-01 0.00018310906 / 5 WATER 0.0150169475 / 6 &
HYDROGEN 4.3212512E-05 / 6 PROPY-01 2.3977661E-05 / 6 &
ACETO-01 0.983279886 / 6 DIISO-01 0.00020730212 / 6 &
ISOPR-01 0.00024593573 / 6 WATER 0.016199686 / 7 &
HYDROGEN 4.3228097E-05 / 7 PROPY-01 2.3986740E-05 / 7 &
ACETO-01 0.982035636 / 7 DIISO-01 0.00020632713 / 7 &
ISOPR-01 0.00032580256 / 7 WATER 0.017365019 / 8 &
HYDROGEN 4.3244037E-05 / 8 PROPY-01 2.3996105E-05 / 8 &
ACETO-01 0.980774067 / 8 DIISO-01 0.00020610548 / 8 &
ISOPR-01 0.00042739268 / 8 WATER 0.0185251951 / 9 &
HYDROGEN 4.3260568E-05 / 9 PROPY-01 2.4005902E-05 / 9 &

ACETO-01 0.979477756 / 9 DIISO-01 0.00020605035 / 9 &
ISOPR-01 0.00055669352 / 9 WATER 0.0196922335 / 10 &
HYDROGEN 4.3277959E-05 / 10 PROPY-01 2.4016302E-05 / &
10 ACETO-01 0.97812686 / 10 DIISO-01 0.00020603556 / &
10 ISOPR-01 0.00072136912 / 10 WATER 0.0208784415 / &
11 HYDROGEN 4.3296531E-05 / 11 PROPY-01 2.4027500E-05 / &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

11	ACETO-01	0.976698454	/	11	DIISO-01	0.00020603490	/	&
11	ISOPR-01	0.00093124242	/	11	WATER	0.022096945	/	&
12	HYDROGEN	4.3316665E-05	/	12	PROPY-01	2.4039730E-05	/	&
12	ACETO-01	0.975165388	/	12	DIISO-01	0.0002060441	/	&
12	ISOPR-01	0.00119892268	/	12	WATER	0.0233622888	/	&
13	HYDROGEN	4.3338837E-05	/	13	PROPY-01	2.4053276E-05	/	&
13	ACETO-01	0.97349475	/	13	DIISO-01	0.00020606406	/	&
13	ISOPR-01	0.00154062529	/	13	WATER	0.0246911684	/	&
14	HYDROGEN	4.3363631E-05	/	14	PROPY-01	2.4068485E-05	/	&
14	ACETO-01	0.971645871	/	14	DIISO-01	0.00020609737	/	&
14	ISOPR-01	0.0019772474	/	14	WATER	0.0261033526	/	&
15	HYDROGEN	4.3391809E-05	/	15	PROPY-01	2.4085795E-05	/	&
15	ACETO-01	0.969567569	/	15	DIISO-01	0.00020614772	/	&
15	ISOPR-01	0.00253579418	/	15	WATER	0.0276230114	/	&
16	HYDROGEN	4.3424340E-05	/	16	PROPY-01	2.4105755E-05	/	&
16	ACETO-01	0.967194515	/	16	DIISO-01	0.00020621998	/	&
16	ISOPR-01	0.00325127181	/	16	WATER	0.0292804632	/	&
17	HYDROGEN	4.3462500E-05	/	17	PROPY-01	2.4129077E-05	/	&
17	ACETO-01	0.964442078	/	17	DIISO-01	0.00020632055	/	&
17	ISOPR-01	0.00416923311	/	17	WATER	0.0311147764	/	&
18	HYDROGEN	4.3507989E-05	/	18	PROPY-01	2.4156691E-05	/	&
18	ACETO-01	0.961199003	/	18	DIISO-01	0.00020645779	/	&
18	ISOPR-01	0.00534922798	/	18	WATER	0.0331776467	/	&
19	HYDROGEN	4.3563110E-05	/	19	PROPY-01	2.4189845E-05	/	&
19	ACETO-01	0.957316681	/	19	DIISO-01	0.00020664271	/	&
19	ISOPR-01	0.00686952996	/	19	WATER	0.0355393931	/	&
20	HYDROGEN	4.3631047E-05	/	20	PROPY-01	2.4230253E-05	/	&
20	ACETO-01	0.952592991	/	20	DIISO-01	0.00020688981	/	&
20	ISOPR-01	0.00883367919	/	20	WATER	0.0382985785	/	&
21	HYDROGEN	1.6638451E-08	/	21	PROPY-01	9.5647324E-08	/	&
21	ACETO-01	0.945628843	/	21	DIISO-01	5.6534064E-05	/	&
21	ISOPR-01	0.0133347303	/	21	WATER	0.0409797802	/	&
22	HYDROGEN	6.3644978E-12	/	22	PROPY-01	4.1077055E-10	/	&
22	ACETO-01	0.933878409	/	22	DIISO-01	1.5528451E-05	/	&
22	ISOPR-01	0.0209071468	/	22	WATER	0.0451989151	/	&
23	HYDROGEN	2.4467471E-15	/	23	PROPY-01	1.9150522E-12	/	&
23	ACETO-01	0.914126929	/	23	DIISO-01	4.3055562E-06	/	&
23	ISOPR-01	0.0338142202	/	23	WATER	0.0520545448	/	&
24	HYDROGEN	9.4767051E-19	/	24	PROPY-01	9.5400131E-15	/	&
24	ACETO-01	0.880041759	/	24	DIISO-01	1.2125110E-06	/	&
24	ISOPR-01	0.0562467265	/	24	WATER	0.0637103016	/	&
25	HYDROGEN	3.7008389E-22	/	25	PROPY-01	4.9249640E-17	/	&
25	ACETO-01	0.818772496	/	25	DIISO-01	3.4959741E-07	/	&
25	ISOPR-01	0.0963059731	/	25	WATER	0.0849211812	/	&
26	HYDROGEN	1.3506787E-25	/	26	PROPY-01	2.4936465E-19	/	&
26	ACETO-01	0.703050229	/	26	DIISO-01	1.0347110E-07	/	&
26	ISOPR-01	0.169541927	/	26	WATER	0.127407741	/	27 &

PROPY-01 1.0944707E-21 / 27 ACETO-01 0.484988397 / 27 &
DIISO-01 2.9886301E-08 / 27 ISOPR-01 0.294153035 / 27 &
WATER 0.220858539 / 28 HYDROGEN 1.8936906E-20 / 28 &
PROPY-01 4.8711660E-20 / 28 ACETO-01 0.189652381 / 28 &
DIISO-01 6.2555097E-09 / 28 ISOPR-01 0.390405969 / 28 &
WATER 0.419941644

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

SPEC 1 MASS-FRAC 0.995 COMPS=ACETO-01 BASE-COMPS=HYDROGEN &
PROPY-01 ACETO-01 DIISO-01 ISOPR-01 WATER DIACE-01 &
SODIU-01 POTAS-01 SODIU-02 STREAMS=52 SPEC-ACTIVE=YES &
SPEC-DESCRIP="Pureza Acetona"
SPEC 2 MOLE-RECOV 0.999 COMPS=ACETO-01 STREAMS=52 &
BASE-STREAMS=36 SPEC-ACTIVE=YES &
SPEC-DESCRIP="Recuperación Acetona"
VARY 1 D:F 0.94 0.99 VARY-ACTIVE=YES
VARY 2 MOLE-RR 1. 5. VARY-ACTIVE=YES
UTILITIES COND-UTIL=U-104 REB-UTIL=U-102

BLOCK R-TURTON RPLUG

PARAM TYPE=CO-COOL NTUBE=448 LENGTH=6.1 DIAM=.0510000000 &
PRES=0. PDROP=0.25 U=60. <J/SEC-SQM-K>
COOLANT PRES=0. PDROP=0.
REACTIONS RXN-IDS=DEHYDFOR

HIERARCHY R-201

DEF-STREAMS CONVEN ALL

SOLVE

PARAM METHOD=SM
RUN-MODE MODE=SIM

FLWSHEET

BLOCK SUB1-101 IN=11 OUT=12
BLOCK SUB2-101 IN=13 OUT=PRODUCTS
BLOCK SR-201 IN=12 MS-IN OUT=13 MS-OUT
BLOCK SR-101EQ IN=12EQ OUT=13EQ
BLOCK S1-101EQ IN=11EQ OUT=12EQ
BLOCK S2-101EQ IN=13EQ OUT=PRODEQ
BLOCK E-104 IN=MS-OUT OUT=MS

PROPERTIES WILS-RK HENRY-COMPS=HC-1 FREE-WATER=STEAM-TA &
SOLU-WATER=3 TRUE-COMPS=YES
PROPERTIES NRTL-RK / UNIQ-RK / UNIQAC / UNIQAC2

STREAM 11EQ

SUBSTREAM MIXED TEMP=350. PRES=1.01325 MOLE-FLOW=86.
MOLE-FRAC ISOPR-01 0.7 / WATER 0.3

STREAM MS-IN

SUBSTREAM MIXED TEMP=525. PRES=3. MASS-FLOW=35.1 <TONNE/HR>
MASS-FRAC SODIU-01 0.069 / POTAS-01 0.442 / SODIU-02 &
0.489

BLOCK E-104 HEATER
PARAM TEMP=525. PRES=0. DPPARMOPT=NO
UTILITY UTILITY-ID=U-101

BLOCK S1-101EQ RSTOIC

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

PARAM PRES=0. DUTY=0.
STOIC 1 MIXED ISOPR-01 -1. / PROPY-01 1. / WATER 1.
STOIC 2 MIXED ISOPR-01 -2. / DIISO-01 1. / WATER 1.
CONV 1 MIXED ISOPR-01 0.0135
CONV 2 MIXED ISOPR-01 0.0036

BLOCK S2-101EQ RSTOIC

PARAM PRES=0. DUTY=0.
STOIC 1 MIXED ACETO-01 -2. / DIACE-01 1.
CONV 1 MIXED ACETO-01 0.0009

BLOCK SUB1-101 RSTOIC

PARAM PRES=0. DUTY=0.
STOIC 1 MIXED ISOPR-01 -1. / PROPY-01 1. / WATER 1.
STOIC 2 MIXED ISOPR-01 -2. / DIISO-01 1. / WATER 1.
CONV 1 MIXED ISOPR-01 0.0135
CONV 2 MIXED ISOPR-01 0.0036

BLOCK SUB2-101 RSTOIC

PARAM PRES=0. DUTY=0.
STOIC 1 MIXED ACETO-01 -2. / DIACE-01 1.
CONV 1 MIXED ACETO-01 0.0009

BLOCK SR-101EQ RPLUG

PARAM TYPE=T-SPEC NTUBE=400 LENGTH=20. DIAM=0.046 NPHASE=2 &
NPOINT=200 CAT-PRESENT=YES BED-VOIDAGE=0.41 &
CAT-RHO=2732. <kg/cum>
BLOCK-OPTION FREE-WATER=NO
REACTIONS RXN-IDS=DEHYDFOR

BLOCK SR-201 RPLUG

PARAM TYPE=COUNTER-COOL NTUBE=400 LENGTH=12. <ft> DIAM=0.046 &
U=59. <J/sec-sqm-K> NPOINT=100 CAT-PRESENT=YES &
BED-VOIDAGE=0.41 CAT-RHO=2732. <kg/cum> &
OPT-PDROP=CORRELATION DP-FCOR=ERGUN DIA-PART=1.41 <mm>
COOLANT TEMP=360.
REACTIONS RXN-IDS=DEHYDFOR

ENDHIERARCHY R-201

BLOCK P-101 PUMP

PARAM PRES=2.7
UTILITY UTILITY-ID=U-106

BLOCK P-102 PUMP

PARAM PRES=1.5

STREAM-PRICE

STREAM-PRICE STREAM=41 MASS-PRICE=0.05 / STREAM=10 &
MASS-PRICE=1046. <\$/tonne> / STREAM=52 &
MASS-PRICE=1401. <\$/tonne> / STREAM=29 MASS-PRICE=5.

UTILITY U-101 GENERAL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

DESCRIPTION &
"FIRED HEATER, INLET TEMP=1000 C, OUTLET TEMP=400 C"
COST ENERGY-PRICE=4.25E-06 <\$/KJ>
PARAM UTILITY-TYPE=GENERAL COOLING-VALU=600. TIN=1000. &
TOUT=600. MIN-TAPP=25. CALCCO2=YES FACTORSOURCE= &
"US-EPA-RULE-E9-5711" FUELSOURCE="NATURAL_GAS" &
CO2FACTOR=2.3400000E-7 EFFICIENCY=0.85 &
HTC=0.0003996 <GJ/HR-SQM-C>

UTILITY U-102 GENERAL

DESCRIPTION &
"LOW PRESSURE STEAM, INLET TEMP=125 C, OUTLET TEMP=124 C"
COST ENERGY-PRICE=1.9E-06 <\$/KJ>
PARAM UTILITY-TYPE=STEAM TIN=125. TOUT=124. VFRAC=1. &
VFR-OUT=0. CALOPT=FLASH MIN-TAPP=10. CALCCO2=YES &
FACTORSOURCE="US-EPA-RULE-E9-5711" FUELSOURCE="NATURAL_GAS" &
CO2FACTOR=2.3400000E-7 EFFICIENCY=0.85 &
HTC=0.0216 <GJ/HR-SQM-C>

UTILITY U-103 GENERAL

DESCRIPTION &
"REFRIGERANT 1, INLET TEMP=-25 C, OUTLET TEMP=-24 C"
COST ENERGY-PRICE=2.74E-06 <\$/KJ>
PARAM UTILITY-TYPE=REFRIGERATIO COOLING-VALU=-4. TIN=-25. &
TOUT=-24. MIN-TAPP=3. CALCCO2=YES FACTORSOURCE= &
"US-EPA-RULE-E9-5711" FUELSOURCE="NATURAL_GAS" &
CO2FACTOR=2.3400000E-7 EFFICIENCY=1. &
HTC=0.00468 <GJ/HR-SQM-C>

UTILITY U-104 GENERAL

DESCRIPTION "COOLING WATER, INLET TEMP=20 C, OUTLET TEMP=25 C"
COST ENERGY-PRICE=2.12E-07 <\$/KJ>
PARAM UTILITY-TYPE=WATER PRES=1. <ATM> PRES-OUT=1. <ATM> &
TIN=20. TOUT=25. CALOPT=FLASH MIN-TAPP=5. &
HTC=0.0135 <GJ/HR-SQM-C>

UTILITY U-105 GENERAL

COST ENERGY-PRICE=0.05 <\$/KWHR>
PARAM UTILITY-TYPE=WATER PRES=1.01325 PRES-OUT=1.01325 &
TIN=5. TOUT=15. CALOPT=FLASH MIN-TAPP=7. &
VISCOSITY=0.0013278 <PA-SEC> &
CONDUCTIVITY=0.579975 <WATT/M-K> DENSITY=999.535 <KG/CUM>

UTILITY U-106 GENERAL

DESCRIPTION "ELECTRICAL UTILITY"
COST ELEC-PRICE=0.0775 <\$/KWHR>
PARAM UTILITY-TYPE=ELECTRICITY CALCCO2=YES FACTORSOURCE= &

"US-EPA-RULE-E9-5711" FUELSOURCE="NATURAL_GAS" &
CO2FACTOR=2.3400000E-7 EFFICIENCY=0.58

DESIGN-SPEC MMS

DEFINE ACETFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &
SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

```
DEFINE ACETEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
SPEC "(ACETEQ-ACETFLOW)/ACETEQ" TO "0.0002"  
TOL-SPEC "0.00001"  
VARY STREAM-VAR STREAM="R-201.MS-IN" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=MASS-FLOW UOM="KG/HR"  
LIMITS "1000" "200000"
```

DESIGN-SPEC TMSIN

```
DEFINE TMSIN STREAM-VAR STREAM="R-201.MS-IN" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=TEMP UOM="C"  
DEFINE TMSOUT STREAM-VAR STREAM="R-201.MS-OUT" &  
  SUBSTREAM=MIXED VARIABLE=TEMP UOM="C"  
SPEC "TMSIN" TO "525"  
TOL-SPEC "0.01"  
VARY BLOCK-VAR BLOCK="R-201.SR-201" VARIABLE=TEMP &  
  SENTENCE=COOLANT UOM="C"  
LIMITS "142" "499"
```

EO-CONV-OPTI

CALCULATOR 11-ACET

```
DEFINE ACET11 MOLE-FLOW STREAM="R-201.11" SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACET11EQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.11EQ" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
F ACET11EQ=ACET11  
READ-VARS ACET11  
WRITE-VARS ACET11EQ
```

CALCULATOR 11-AGUA

```
DEFINE AGUA11 MOLE-FLOW STREAM="R-201.11" SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=WATER UOM="KMOL/HR"  
DEFINE AGUA11EQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.11EQ" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=WATER UOM="KMOL/HR"  
F AGUA11EQ=AGUA11  
READ-VARS AGUA11  
WRITE-VARS AGUA11EQ
```

CALCULATOR 11-DIIS

```
DEFINE DIIS11 MOLE-FLOW STREAM="R-201.11" SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=DIISO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE DIIS11EQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.11EQ" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=DIISO-01 UOM="KMOL/HR"  
F DIIS11EQ=DIIS11  
READ-VARS DIIS11  
WRITE-VARS DIIS11EQ
```

CALCULATOR 11-H2

DEFINE H211 MOLE-FLOW STREAM="R-201.11" SUBSTREAM=MIXED &
COMPONENT=HYDROGEN UOM="KMOL/HR"

DEFINE H211EQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.11EQ" SUBSTREAM=MIXED &
COMPONENT=HYDROGEN UOM="KMOL/HR"

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

F H211EQ=H211
READ-VARS H211
WRITE-VARS H211EQ

CALCULATOR 11-IPA

DEFINE IPA11 MOLE-FLOW STREAM="R-201.11" SUBSTREAM=MIXED &
COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"
DEFINE IPA11EQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.11EQ" SUBSTREAM=MIXED &
COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"

F IPA11EQ=IPA11
READ-VARS IPA11
WRITE-VARS IPA11EQ

CALCULATOR 11-PROP

DEFINE PROP11 MOLE-FLOW STREAM="R-201.11" SUBSTREAM=MIXED &
COMPONENT=PROPY-01 UOM="KMOL/HR"
DEFINE PROP11EQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.11EQ" &
SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=PROPY-01 UOM="KMOL/HR"

F PROP11EQ=PROP11
READ-VARS PROP11
WRITE-VARS PROP11EQ

CALCULATOR 11DIACE

DEFINE DIACE11 MOLE-FLOW STREAM="R-201.11" SUBSTREAM=MIXED &
COMPONENT=DIACE-01 UOM="KMOL/HR"
DEFINE DIACE11E MOLE-FLOW STREAM="R-201.11EQ" &
SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=DIACE-01 UOM="KMOL/HR"

F DIACE11E=DIACE11
READ-VARS DIACE11
WRITE-VARS DIACE11E

CALCULATOR P13-P12E

DEFINE P13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &
VARIABLE=PRES UOM="BAR"
DEFINE P12EQ STREAM-VAR STREAM="R-201.12EQ" SUBSTREAM=MIXED &
VARIABLE=PRES UOM="BAR"

F P12EQ=P13
READ-VARS P13
WRITE-VARS P12EQ

CALCULATOR T13-T12E

DEFINE T13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &
VARIABLE=TEMP UOM="C"
DEFINE T12EQ STREAM-VAR STREAM="R-201.12EQ" SUBSTREAM=MIXED &

```
VARIABLE=TEMP UOM="C"  
F    T12EQ=T13  
    READ-VARS T13  
    WRITE-VARS T12EQ
```

```
SENSITIVITY S-101
```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

```
DEFINE IPAFLOW MOLE-FLOW STREAM=18 SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETFLOW MOLE-FLOW STREAM=18 SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE T13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=TEMP UOM="C"  
DEFINE P13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=PRES UOM="BAR"  
DEFINE TMSOUT STREAM-VAR STREAM="R-201.MS-OUT" &  
  SUBSTREAM=MIXED VARIABLE=TEMP UOM="C"  
TABULATE 1 "IPAFLOW"  
TABULATE 2 "ACETFLOW"  
TABULATE 3 "T13"  
TABULATE 4 "P13"  
TABULATE 5 "TMSOUT"  
VARY BLOCK-VAR BLOCK=E-101 VARIABLE=TEMP SENTENCE=PARAM UOM= &  
  "C"  
RANGE OPT-LIST=RANGE LOWER="200" UPPER="500" NPOINT="301"
```

SENSITIVITY S-120

```
DEFINE IPAFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE IPAEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE T13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=TEMP UOM="C"  
DEFINE T13EQ STREAM-VAR STREAM="R-201.13EQ" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=TEMP UOM="C"  
TABULATE 1 "IPAFLOW"  
TABULATE 2 "ACETFLOW"  
TABULATE 3 "IPAEQ"  
TABULATE 4 "ACETEQ"  
TABULATE 5 "T13"  
TABULATE 6 "T13EQ"  
VARY BLOCK-VAR BLOCK="R-201.SR-201" VARIABLE=LENGTH &  
  SENTENCE=PARAM UOM="FT"  
RANGE OPT-LIST=OLIST LIST=6. 8. 12. 16. 20. 24.
```

SENSITIVITY S-121

```
DEFINE IPAEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"
```

```
DEFINE T13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=TEMP UOM="C"  
DEFINE P13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=PRES UOM="BAR"  
DEFINE T13EQ STREAM-VAR STREAM="R-201.13EQ" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=TEMP UOM="C"
```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

```
DEFINE P13EQ STREAM-VAR STREAM="R-201.13EQ" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=PRES UOM="BAR"  
DEFINE IPAFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
TABULATE 1 "IPAEQ"  
TABULATE 2 "ACETEQ"  
TABULATE 3 "T13"  
TABULATE 4 "P13"  
TABULATE 5 "T13EQ"  
TABULATE 6 "P13EQ"  
TABULATE 7 "IPAFLOW"  
TABULATE 8 "ACETFLOW"  
VARY BLOCK-VAR BLOCK=E-101 VARIABLE=TEMP SENTENCE=PARAM UOM= &  
  "C"  
RANGE OPT-LIST=RANGE LOWER="200" UPPER="500" NPOINT="301"
```

SENSITIVITY S-122

```
DEFINE IPAFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE P13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=PRES UOM="BAR"  
DEFINE T13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
  VARIABLE=TEMP UOM="C"  
DEFINE TMSOUT STREAM-VAR STREAM="R-201.MS-OUT" &  
  SUBSTREAM=MIXED VARIABLE=TEMP UOM="C"  
TABULATE 1 "IPAFLOW"  
TABULATE 2 "ACETFLOW"  
TABULATE 3 "T13"  
TABULATE 4 "P13"  
TABULATE 5 "TMSOUT"  
VARY BLOCK-VAR BLOCK=P-101 VARIABLE=PRES SENTENCE=PARAM UOM= &  
  "BAR"  
RANGE OPT-LIST=RANGE LOWER="2.5" UPPER="10" NPOINT="38"
```

SENSITIVITY S-123

```
DEFINE IPAFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETFLOW MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODUCTS" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE IPAEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" SUBSTREAM=MIXED &  
  COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" &  
  SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"
```

```
DEFINE T13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=TEMP UOM="C"  
DEFINE T13EQ STREAM-VAR STREAM="R-201.13EQ" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=TEMP UOM="C"  
DEFINE P13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=PRES UOM="BAR"
```


ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

```
DEFINE P13EQ STREAM-VAR STREAM="R-201.13EQ" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=PRES UOM="BAR"  
TABULATE 1 "IPAFLOW"  
TABULATE 2 "ACETFLOW"  
TABULATE 3 "IPAEQ"  
TABULATE 4 "ACETEQ"  
TABULATE 5 "T13"  
TABULATE 6 "T13EQ"  
TABULATE 7 "P13"  
TABULATE 8 "P13EQ"  
VARY BLOCK-VAR BLOCK=P-101 VARIABLE=PRES SENTENCE=PARAM UOM= &  
    "BAR"  
RANGE OPT-LIST=RANGE LOWER="2.5" UPPER="10" NPOINT="38"
```

SENSITIVITY S-124

```
DEFINE IPAEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" SUBSTREAM=MIXED &  
    COMPONENT=ISOPR-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETEQ MOLE-FLOW STREAM="R-201.PRODEQ" &  
    SUBSTREAM=MIXED COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
TABULATE 1 "IPAEQ"  
TABULATE 2 "ACETEQ"  
VARY STREAM-VAR STREAM="R-201.11EQ" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=PRES UOM="BAR"  
RANGE OPT-LIST=RANGE LOWER="1" UPPER="20" NPOINT="20"
```

SENSITIVITY S-125

```
DEFINE P13 STREAM-VAR STREAM="R-201.13" SUBSTREAM=MIXED &  
    VARIABLE=PRES UOM="BAR"  
TABULATE 1 "P13"  
VARY BLOCK-VAR BLOCK="R-201.SR-201" VARIABLE=NTUBE &  
    SENTENCE=PARAM  
RANGE OPT-LIST=RANGE LOWER="400" UPPER="800" NPOINT="401"
```

SENSITIVITY S-130

```
DEFINE ACETREC MOLE-FLOW STREAM=26 SUBSTREAM=MIXED &  
    COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
DEFINE ACETPERD MOLE-FLOW STREAM=27 SUBSTREAM=MIXED &  
    COMPONENT=ACETO-01 UOM="KMOL/HR"  
TABULATE 1 "ACETREC"  
TABULATE 2 "ACETPERD"  
VARY STREAM-VAR STREAM=25 SUBSTREAM=MIXED VARIABLE=TEMP UOM= &  
    "C"  
RANGE OPT-LIST=RANGE LOWER="15" UPPER="35" NPOINT="21"
```

TEAR

TEAR 19 0.0001 / 25 0.0001

REPORT INPUT

BLOCK-REPORT NEWPAGE COMPBAL INCL-BLOCKS=B1 B2 B3 B4 P-102 &
C-301 C-302 C-303 E-101 E-301 E-102 E-206 V-301 P-101 &
R-TURTON "R-201.E-104" "R-201.S1-101EQ" "R-201.S2-101EQ" &
"R-201.SR-201" "R-201.SR-101EQ" "R-201.SUB1-101" &

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

"R-201.SUB2-101"

STREAM-REPOR WIDE MOLEFLOW MASSFLOW STDVOLFLOW MOLEFRAC &
MASSFRAC STDVOLFRACT

PROPERTY-REP PARAMS PCES PROP-DATA DFMS PARAM-PLUS PROJECT &
NEUTRAL

ADA-REPORT PARAMS

REACTIONS DEHYDFOR GENERAL

REAC-DATA 1 NAME=FORWARD REAC-CLASS=POWERLAW PHASE=V &
REVERSIBLE=NO
REAC-DATA 2 NAME=REVERSE PHASE=V PH-BASIS-L=LS
RATE-CON 1 PRE-EXP=22000000. ACT-ENERGY=72380.
RATE-CON 2 PRE-EXP=1000. ACT-ENERGY=9480.
STOIC 1 MIXED ISOPR-01 -1. / ACETO-01 1. / HYDROGEN 1.
STOIC 2 MIXED ACETO-01 -1. / HYDROGEN -1. / ISOPR-01 1.
DFORCE-EXP 1 MIXED ISOPR-01 1. / MIXED ACETO-01 0. / &
MIXED HYDROGEN 0.
DFORCE-EXP 2 MIXED ACETO-01 1. / MIXED HYDROGEN 1. / &
MIXED ISOPR-01 0.
DFORCE-EXP-2 1 MIXED ISOPR-01 0. / MIXED ACETO-01 1. / &
MIXED HYDROGEN 1.
REAC-ACT 1

REACTIONS R-TURTON GENERAL

REAC-DATA 1 NAME=R-TURTON PHASE=V
RATE-CON 1 PRE-EXP=351000. ACT-ENERGY=72380.00000
STOIC 1 MIXED ISOPR-01 -1. / ACETO-01 1. / HYDROGEN 1.
DFORCE-EXP 1 MIXED ISOPR-01 1. / MIXED ACETO-01 0. / &
MIXED HYDROGEN 0.

PROP-TABLE BINRY-1 FLASHCURVE

IN-UNITS MET ENTHALPY='J/KG' VOLUME-FLOW='CUM/HR' &
ENTHALPY-FLO=KW MOLE-HEAT-CA='KJ/KMOL-K' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KJ/KMOL' &
MASS-ENTHALP='KJ/KG' MASS-HEAT-CA='KJ/KG-K' HEAT=KJ &
MOLE-CONC='MOL/L' PDROP=BAR VOL-HEAT-CAP='KJ/CUM-K' &
HEAT-FLUX='KW/M' VOL-ENTHALPY='KJ/CUM' SHORT-LENGTH=MM
PROPERTIES WILS-RK HENRY-COMPS=HC-1 FREE-WATER=STEAM-TA &
SOLU-WATER=3 TRUE-COMPS=YES
MOLE-FLOW ISOPR-01 1 / WATER 1
STATE VFRAC=0.0
ANALYSIS ANAL-TYPE=TXY

VARY PRES
RANGE LIST=1.01325
VARY MOLEFRAC COMP=ISOPR-01
RANGE VARVALUE=RANGE LOWER=0.0 UPPER=1.0 NPOINT=50
PARAM NPHASE=3

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

PROP-TABLE BINRY-2 FLASHCURVE

IN-UNITS MET ENTHALPY='J/KG' VOLUME-FLOW='CUM/HR' &
ENTHALPY-FLO=KW MOLE-HEAT-CA='KJ/KMOL-K' &
HEAT-TRANS-C='KCAL/HR-SQM-K' PRESSURE=BAR TEMPERATURE=C &
VOLUME=CUM DELTA-T=C HEAD=METER MOLE-DENSITY='KMOL/CUM' &
MASS-DENSITY='KG/CUM' MOLE-ENTHALP='KJ/KMOL' &
MASS-ENTHALP='KJ/KG' MASS-HEAT-CA='KJ/KG-K' HEAT=KJ &
MOLE-CONC='MOL/L' PDROP=BAR VOL-HEAT-CAP='KJ/CUM-K' &
HEAT-FLUX='KW/M' VOL-ENTHALPY='KJ/CUM' SHORT-LENGTH=MM
PROPERTIES WILS-RK HENRY-COMPS=HC-1 FREE-WATER=STEAM-TA &
SOLU-WATER=3 TRUE-COMPS=YES
MOLE-FLOW ISOPR-01 1 / WATER 1
STATE VFRAC=0.0
ANALYSIS ANAL-TYPE=TXY
VARY PRES
RANGE LIST=1.013250000
VARY MOLEFRAC COMP=ISOPR-01
RANGE VARVALUE=RANGE LOWER=0.0 UPPER=1.0 NPOINT=50
PARAM NPHASE=3

DISABLE

SENSITIVITY S-101 S-120 S-121 S-122 S-123 S-124 S-125 &
S-130
CALCULATOR C-201-1 C-201-2 MB

;
;
;
;
;

STREAM 24

SUBSTREAM MIXED TEMP=35. PRES=1.5 MOLE-FLOW=302.45
MOLE-FRAC WATER 1.

FLOWSHEET

HIERARCHY R-201
CONNECT \$C-1 IN=14 OUT="R-201.11"
CONNECT \$C-2 IN="R-201.PRODUCTS" OUT=18
BLOCK R-TURTON IN=F-TURTON F-MSALT OUT=P-TURTON O-MSALT
BLOCK E-101 IN=13 OUT=14
BLOCK P-101 IN=12 OUT=13
BLOCK E-301 IN=18 OUT=19
BLOCK V-301 IN=19 OUT=20 21
BLOCK C-301 IN=20 25 OUT=27 26
BLOCK E-102 IN=24 OUT=S1
BLOCK C-302 IN=21 26 OUT=32 36 40
BLOCK C-303 IN=36 OUT=44 52 11
BLOCK B2 IN=10 11 OUT=12
BLOCK B1 IN=27 32 OUT=28

BLOCK B3 IN=28 44 OUT=29

BLOCK E-206 IN=40 OUT=53

BLOCK B4 IN=53 OUT=41 51

BLOCK B5 IN=51 22 OUT=23

BLOCK P-102 IN=23 OUT=24

FLWSHEET

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
INPUT SECTION

INPUT FILE(S) (CONTINUED)

```
HIERARCHY R-201
CONNECT $C-1 IN=14 OUT="R-201.11"
CONNECT $C-2 IN="R-201.PRODUCTS" OUT=18
BLOCK R-TURTON IN=F-TURTON F-MSALT OUT=P-TURTON O-MSALT
BLOCK E-101 IN=13 OUT=14
BLOCK P-101 IN=12 OUT=13
BLOCK E-301 IN=18 OUT=19
BLOCK V-301 IN=19 OUT=20 21
BLOCK C-301 IN=20 25 OUT=27 26
BLOCK E-102 IN=24 OUT=S1
BLOCK C-302 IN=21 26 OUT=32 36 40
BLOCK C-303 IN=36 OUT=44 52 11
BLOCK B2 IN=10 11 OUT=12
BLOCK B1 IN=27 32 OUT=28
BLOCK B3 IN=28 44 OUT=29
BLOCK E-206 IN=40 OUT=53
BLOCK B4 IN=53 OUT=41 51
BLOCK P-102 IN=51 OUT=24
DESIGN-SPEC SPLIT
  DEFINE M25 STREAM-VAR STREAM=25 SUBSTREAM=MIXED &
    VARIABLE=MOLE-FLOW UOM="kmol/hr"
  SPEC "M25" TO "302.482"
  TOL-SPEC "0.0001"
  VARY BLOCK-VAR BLOCK=B4 SENTENCE=FRAC VARIABLE=FRAC ID1=41
  LIMITS "0.07" "0.08"
FLOWSHEET
HIERARCHY R-201
CONNECT $C-1 IN=14 OUT="R-201.11"
CONNECT $C-2 IN="R-201.PRODUCTS" OUT=18
BLOCK R-TURTON IN=F-TURTON F-MSALT OUT=P-TURTON O-MSALT
BLOCK E-101 IN=13 OUT=14
BLOCK P-101 IN=12 OUT=13
BLOCK E-301 IN=18 OUT=19
BLOCK V-301 IN=19 OUT=20 21
BLOCK C-301 IN=20 25 OUT=27 26
BLOCK E-102 IN=24 OUT=25
BLOCK C-302 IN=21 26 OUT=32 36 40
BLOCK C-303 IN=36 OUT=44 52 11
BLOCK B2 IN=10 11 OUT=12
BLOCK B1 IN=27 32 OUT=28
BLOCK B3 IN=28 44 OUT=29
BLOCK E-206 IN=40 OUT=53
BLOCK B4 IN=53 OUT=41 51
BLOCK P-102 IN=51 OUT=24
```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 FLOWSHEET SECTION

FLOWSHEET CONNECTIVITY BY STREAMS

FLOWSHEET SECTION GLOBAL

STREAM	SOURCE	DEST	STREAM	SOURCE	DEST
F-MSALT	----	R-TURTON	F-TURTON	----	R-TURTON
10	----	B2	18	ŞC-2	E-301
P-TURTON	R-TURTON	----	O-MSALT	R-TURTON	----
14	E-101	ŞC-1	13	P-101	E-101
19	E-301	V-301	20	V-301	C-301
21	V-301	C-302	27	C-301	B1
26	C-301	C-302	25	E-102	C-301
32	C-302	B1	36	C-302	C-303
40	C-302	E-206	44	C-303	B3
52	C-303	----	11	C-303	B2
12	B2	P-101	28	B1	B3
29	B3	----	53	E-206	B4
41	B4	----	51	B4	P-102
24	P-102	E-102			

FLOWSHEET CONNECTIVITY BY BLOCKS

FLOWSHEET SECTION GLOBAL

BLOCK	INLETS	OUTLETS
ŞC-1	14	11
ŞC-2	PRODUCTS	18
R-TURTON	F-TURTON F-MSALT	P-TURTON O-MSALT
E-101	13	14
P-101	12	13
E-301	18	19
V-301	19	20 21
C-301	20 25	27 26
E-102	24	25
C-302	21 26	32 36 40
C-303	36	44 52 11
B2	10 11	12
B1	27 32	28
B3	28 44	29
E-206	40	53
B4	53	41 51
P-102	51	24

CONVERGENCE STATUS SUMMARY

DESIGN-SPEC SUMMARY
 =====

DESIGN SPEC BLOCK	ERROR	TOLERANCE	ERR/TOL	VARIABLE	STAT	CONV
-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
-						
MMS	0.79938E-05	0.10000E-04	0.79938	28450.	#	
\$OLVE134						
TMSIN	-0.34088E-02	0.10000E-01	-0.34088	443.28	#	
\$OLVE135						

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 FLOWSHEET SECTION

CONVERGENCE STATUS SUMMARY (CONTINUED)

TEAR STREAM SUMMARY
 =====

STREAM	VARIABLE	MAXIMUM	MAX. ERR.	ABSOLUTE	
CONV	ID	ERR/TOL	RELATIVE	ERROR	STAT
BLOCK					
-----	-----	-----	-----	-----	-----
19	HYDROGENMOLEFLOW	0.0000	0.0000	0.0000	#
\$OLVE133					
25	HYDROGENMOLEFLOW	0.0000	0.0000	0.0000	#
\$OLVE133					

= CONVERGED
 * = NOT CONVERGED
 LB = AT LOWER BOUNDS
 UB = AT UPPER BOUNDS

DESIGN-SPEC: MMS

SAMPLED VARIABLES:

ACETFLOW : ACETO-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.PRODUCTS SUBSTREAM MIXED
 ACETEQ : ACETO-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.PRODEQ SUBSTREAM MIXED

SPECIFICATION:

MAKE (ACETEQ-ACETFLOW)/ACETEQ APPROACH 0.00020000
 WITHIN 0.100000-04

MANIPULATED VARIABLES:

VARY : TOTAL MASSFLOW IN STREAM R-201.MS-IN SUBSTREAM MIXED
 LOWER LIMIT = 1,000.00 KG/HR
 UPPER LIMIT = 200,000. KG/HR
 FINAL VALUE = 28,449.7 KG/HR

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES:

VARIABLE	VALUE AT START OF LOOP	FINAL VALUE	UNITS
-----	-----	-----	-----
ACETFLOW	57.7476	57.7476	KMOL/HR
ACETEQ	57.7597	57.7597	KMOL/HR

DESIGN-SPEC: TMSIN

SAMPLED VARIABLES :

TMSIN : TEMPERATURE IN STREAM R-201.MS-IN SUBSTREAM MIXED
TMSOUT : TEMPERATURE IN STREAM R-201.MS-OUT SUBSTREAM MIXED

SPECIFICATION :

MAKE TMSIN APPROACH 525.000
WITHIN 0.0100000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
FLWSHEET SECTION

DESIGN-SPEC: TMSIN (CONTINUED)

MANIPULATED VARIABLES:

VARY : SENTENCE=COOLANT VARIABLE=TEMP IN UOS BLOCK R-201.SR-201
LOWER LIMIT = 142.000 C
UPPER LIMIT = 499.000 C
FINAL VALUE = 443.282 C

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES:

VARIABLE	VALUE AT START OF LOOP	FINAL VALUE	UNITS
TMSIN	524.997	524.997	C
TMSOUT	443.282	443.282	C

CALCULATOR BLOCK: 11-ACET

SAMPLED VARIABLES:

ACET11 : ACETO-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11 SUBSTREAM MIXED
ACET11EQ : ACETO-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

ACET11EQ=ACET11

READ VARIABLES: ACET11

WRITE VARIABLES: ACET11EQ

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
ACET11	0.575152E-01		KMOL/HR
ACET11EQ	0.573923E-01	0.575152E-01	KMOL/HR

CALCULATOR BLOCK: 11-AGUA

SAMPLED VARIABLES:

AGUA11 : WATER MOLEFLOW IN STREAM R-201.11 SUBSTREAM MIXED
AGUA11EQ : WATER MOLEFLOW IN STREAM R-201.11EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

AGUA11EQ=AGUA11

READ VARIABLES: AGUA11

WRITE VARIABLES: AGUA11EQ

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
FLOWSHEET SECTION

CALCULATOR BLOCK: 11-AGUA (CONTINUED)

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
AGUA11	27.0592		KMOL/HR
AGUA11EQ	27.0593	27.0592	KMOL/HR

CALCULATOR BLOCK: 11-DIIS

SAMPLED VARIABLES:

DIIS11 : DIISO-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11 SUBSTREAM MIXED
DIIS11EQ : DIISO-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

DIIS11EQ=DIIS11

READ VARIABLES: DIIS11

WRITE VARIABLES: DIIS11EQ

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
DIIS11	0.826872E-09		KMOL/HR
DIIS11EQ	0.824893E-09	0.826872E-09	KMOL/HR

CALCULATOR BLOCK: 11-H2

SAMPLED VARIABLES:

H211 : HYDROGENMOLEFLOW IN STREAM R-201.11 SUBSTREAM MIXED
H211EQ : HYDROGENMOLEFLOW IN STREAM R-201.11EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

H211EQ=H211

READ VARIABLES: H211

WRITE VARIABLES: H211EQ

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
H211	0.331365E-23		KMOL/HR
H211EQ	0.165686E-23	0.331365E-23	KMOL/HR

CALCULATOR BLOCK: 11-IPA

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
FLWSHEET SECTION

CALCULATOR BLOCK: 11-IPA (CONTINUED)

SAMPLED VARIABLES:

IPA11 : ISOPR-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11 SUBSTREAM MIXED
IPA11EQ : ISOPR-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

IPA11EQ=IPA11

READ VARIABLES: IPA11

WRITE VARIABLES: IPA11EQ

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
IPA11	59.1296		KMOL/HR
IPA11EQ	59.1296	59.1296	KMOL/HR

CALCULATOR BLOCK: 11-PROP

SAMPLED VARIABLES:

PROP11 : PROPY-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11 SUBSTREAM MIXED
PROP11EQ : PROPY-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

PROP11EQ=PROP11

READ VARIABLES: PROP11

WRITE VARIABLES: PROP11EQ

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
PROP11	0.00000		KMOL/HR
PROP11EQ	0.00000	0.00000	KMOL/HR

CALCULATOR BLOCK: 11DIACE

SAMPLED VARIABLES:

DIACE11 : DIACE-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11 SUBSTREAM MIXED
DIACE11E : DIACE-01MOLEFLOW IN STREAM R-201.11EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

DIACE11E=DIACE11

READ VARIABLES: DIACE11

WRITE VARIABLES: DIACE11E

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
FLWSHEET SECTION

CALCULATOR BLOCK: 11DIACE (CONTINUED)

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
DIACE11	0.00000		KMOL/HR
DIACE11E	0.00000	0.00000	KMOL/HR

CALCULATOR BLOCK: P13-P12E

SAMPLED VARIABLES:

P13 : PRESSURE IN STREAM R-201.13 SUBSTREAM MIXED
P12EQ : PRESSURE IN STREAM R-201.12EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

P12EQ=P13

READ VARIABLES: P13

WRITE VARIABLES: P12EQ

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
P13	1.19647		BAR
P12EQ	1.01325	1.19647	BAR

CALCULATOR BLOCK: T13-T12E

SAMPLED VARIABLES:

T13 : TEMPERATURE IN STREAM R-201.13 SUBSTREAM MIXED
T12EQ : TEMPERATURE IN STREAM R-201.12EQ SUBSTREAM MIXED

FORTRAN STATEMENTS:

T12EQ=T13

READ VARIABLES: T13

WRITE VARIABLES: T12EQ

VALUES OF ACCESSED FORTRAN VARIABLES ON MOST RECENT SIMULATION PASS:

VARIABLE	VALUE READ	VALUE WRITTEN	UNITS
T13	496.458		C
T12EQ	346.129	496.458	C

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 FLOWSHEET SECTION

CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE133

 Tear Stream : 19 25
 Tolerance used: 0.100D-03 0.100D-03
 Trace molefrac: 0.100D-05 0.100D-05

MAXIT= 30 WAIT 1 ITERATIONS BEFORE ACCELERATING
 QMAX = 0.0 QMIN = -5.0
 METHOD: WEGSTEIN STATUS: CONVERGED
 TOTAL NUMBER OF ITERATIONS: 1
 NUMBER OF ITERATIONS ON LAST OUTER LOOP: 0

*** FINAL VALUES ***

VAR#	TEAR STREAM	VAR	STREAM	SUBSTREA	COMPONEN	UNIT
VALUE	PREV VALUE	ERR/TOL				
1	TOTAL MOLEFLOW	19	MIXED			KMOL/HR
144.7607	144.7607	0.0				
2	TOTAL MOLEFLOW	25	MIXED			KMOL/HR
310.5246	310.5246	0.0				
3	MOLE-FLOW	19	MIXED	HYDROGEN		KMOL/HR
57.7422	57.7422	0.0				
4	MOLE-FLOW	19	MIXED	PROPY-01		KMOL/HR
0.7982	0.7982	0.0				
5	MOLE-FLOW	19	MIXED	ACETO-01		KMOL/HR
57.7475	57.7475	0.0				
6	MOLE-FLOW	19	MIXED	DI ISO-01		KMOL/HR
0.1064	0.1064	0.0				
7	MOLE-FLOW	19	MIXED	ISOPR-01		KMOL/HR
0.3764	0.3764	0.0				
8	MOLE-FLOW	19	MIXED	WATER		KMOL/HR
27.9640	27.9640	0.0				
9	MOLE-FLOW	19	MIXED	DIACE-01		KMOL/HR
2.6010-02	2.6010-02	0.0				
10	MOLE-FLOW	19	MIXED	SODIU-01		KMOL/HR
0.0	0.0	0.0				
11	MOLE-FLOW	19	MIXED	POTAS-01		KMOL/HR
0.0	0.0	0.0				
12	MOLE-FLOW	19	MIXED	SODIU-02		KMOL/HR
0.0	0.0	0.0				
13	PRESSURE	19	MIXED			BAR
1.1965	1.1965	0.0				
14	MASS ENTHALPY	19	MIXED			KJ/KG
5459.4364	-5459.4364	0.0				
15	MOLE-FLOW	25	MIXED	HYDROGEN		KMOL/HR
2.6276-16	2.6276-16	0.0				

16	MOLE-FLOW	25	MIXED	PROPY-01	KMOL/HR	
1.0536-15	1.0536-15	0.0				
17	MOLE-FLOW	25	MIXED	ACETO-01	KMOL/HR	
1.2041-02	1.2041-02	0.0				
18	MOLE-FLOW	25	MIXED	DIISO-01	KMOL/HR	
5.4522-10	5.4522-10	0.0				
19	MOLE-FLOW	25	MIXED	ISOPR-01	KMOL/HR	
3.4429-03	3.4429-03	0.0				
20	MOLE-FLOW	25	MIXED	WATER	KMOL/HR	
310.1830	310.1830	0.0				
21	MOLE-FLOW	25	MIXED	DIACE-01	KMOL/HR	
0.3261	0.3261	0.0				
22	MOLE-FLOW	25	MIXED	SODIU-01	KMOL/HR	
0.0	0.0	0.0				
23	MOLE-FLOW	25	MIXED	POTAS-01	KMOL/HR	
0.0	0.0	0.0				
24	MOLE-FLOW	25	MIXED	SODIU-02	KMOL/HR	
0.0	0.0	0.0				
25	PRESSURE	25	MIXED		BAR	
1.5000	1.5000	0.0				
26	MASS ENTHALPY	25	MIXED		KJ/KG	-
1.5827+04	-1.5827+04	0.0				

*** ITERATION HISTORY ***

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
FLOWSHEET SECTION

CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE133 (CONTINUED)

TEAR STREAMS AND TEAR VARIABLES:

ITERATION	MAX-ERR/TOL	VAR#	STREAM ID	VAR DESCRIPTION	SUBSTREA
COMPONEN	ATTRIBUT	ELEMENT			
1	0.000	3 19		MOLE-FLO	MIXED
HYDROGEN					

CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE134

SPECS: MMS
MAXIT= 30 STEP-SIZE= 1.0000 % OF RANGE
MAX-STEP= 100. % OF RANGE
XTOL= 1.000000E-08
THE NEW ALGORITHM WAS USED WITH BRACKETING=NO
METHOD: SECANT STATUS: CONVERGED
TOTAL NUMBER OF ITERATIONS: 1
NUMBER OF ITERATIONS ON LAST OUTER LOOP: 0

*** FINAL VALUES ***

VAR#	VAR NAME	DESIGN SP	CALCULATOR	VARIABLE DESCRIPTION	UNIT
VALUE	PREV	VALUE	ERR/TOL		
1	VARY	MMS		R-201.MS-IN.MIXED.TOTAL.MASSFLOW	KG/HR
2.8450+04	2.8450+04		0.7994		

*** ITERATION HISTORY ***

DESIGN-SPEC ID: MMS
ITERATED: TOTAL MASSFLOW IN STREAM R-201.MS-IN SUBSTREAM MIXED

ITERATION	VARIABLE	ERROR	ERR/TOL
1	0.2845E+05	0.7994E-05	0.7994

CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE135

SPECS: TMSIN
MAXIT= 30 STEP-SIZE= 1.0000 % OF RANGE
MAX-STEP= 100. % OF RANGE
XTOL= 1.000000E-08
THE NEW ALGORITHM WAS USED WITH BRACKETING=NO

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
FLWSHEET SECTION

CONVERGENCE BLOCK: \$SOLVE135 (CONTINUED)
METHOD: SECANT STATUS: CONVERGED
TOTAL NUMBER OF ITERATIONS: 1
NUMBER OF ITERATIONS ON LAST OUTER LOOP: 0

*** FINAL VALUES ***

VAR#	VAR NAME	DESIGN SP CALCULATOR	VARIABLE DESCRIPTION	UNIT
VALUE	PREV VALUE	ERR/TOL		
1	VARY	TMSIN	R-201.SR-201.COOLANT.TEMP	C
443.2815	443.2815	-0.3409		

*** ITERATION HISTORY ***

DESIGN-SPEC ID: TMSIN
ITERATED: SENTENCE=COOLANT VARIABLE=TEMP IN UOS BLOCK R-201.SR-201

ITERATION	VARIABLE	ERROR	ERR/TOL
1	443.3	-0.3409E-02	-0.3409

COMPUTATIONAL SEQUENCE

SEQUENCE USED WAS:

U-102 U-104 U-103 U-105 U-106 U-101 R-TURTON
\$SOLVE133 V-301 C-301 C-302 C-303 B2 P-101 E-101 \$C-1 R-201.SUB1-101
| 11-ACET 11-AGUA 11-DIIS 11-H2 11-IPA 11-PROP 11DIACE R-201.S1-
101EQ
| \$SOLVE134
| | \$SOLVE135 R-201.SR-201
| | (RETURN \$SOLVE135)
| | R-201.SUB2-101 P13-P12E T13-T12E R-201.SR-101EQ R-201.S2-101EQ
| (RETURN \$SOLVE134)
| \$C-2 E-301 E-206 B4 P-102 E-102
(RETURN \$SOLVE133)
B1 B3 R-201.E-104

OVERALL FLOWSHEET BALANCE

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***
IN OUT GENERATION RELATIVE
DIFF.
CONVENTIONAL COMPONENTS

(KMOL/HR)					
0.309735E-07	HYDROGEN	0.331365E-23	150.450	150.450	-
0.379958E-07	PROPY-01	0.00000	1.59650	1.59650	-
0.711783E-06	ACETO-01	0.217515	150.563	150.346	
0.379886E-07	DIISO-01	0.826872E-09	0.212867	0.212867	-
0.845115E-08	ISOPR-01	156.528	4.05557	-152.472	-
0.873505E-05	WATER	71.2812	73.0899	1.80937	
0.201733E-04	DIACE-01	0.00000	0.520241E-01	0.520251E-01	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 FLOWSHEET SECTION

OVERALL FLOWSHEET BALANCE (CONTINUED)

	*** MASS AND ENERGY BALANCE ***		***	
DIFF.	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
CONVENTIONAL COMPONENTS				
	(KMOL/HR)			
SODIU-01	436.063	436.063	0.00000	
0.00000				
POTAS-01	124.375	124.375	0.00000	
0.00000				
SODIU-02	201.635	201.635	0.00000	
0.00000				
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR)	990.100	1142.09	151.994	
0.648467E-06				
MASS (KG/HR)	74253.1	74253.1		
0.239124E-06				
ENTHALPY (KW)	-11557.8	-8969.08		-
0.223981				

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	1841.86	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	1841.86	KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

COMPONENTS

ID	TYPE	ALIAS	NAME
HYDROGEN	C	H2	HYDROGEN
PROPY-01	C	C3H6-2	PROPYLENE
ACETO-01	C	C3H6O-1	ACETONE
DIISO-01	C	C6H14O-3	DI ISOPROPYL-ETHER
ISOPR-01	C	C3H8O-2	ISOPROPYL-ALCOHOL
WATER	C	H2O	WATER
DIACE-01	C	C6H12O2-D3	DIACETONE-ALCOHOL
SODIU-01	C	NANO3	SODIUM-NITRATE
POTAS-01	C	KNO3	POTASSIUM-NITRATE
SODIU-02	C	NANO2	SODIUM-NITRITE

LISTID SUPERCRITICAL COMPONENT LIST
HC-1 HYDROGEN PROPY-01

PARAMETER VALUES

CONVENTIONAL COMPONENT - UNARY PARAMETER TABLE

PARAMETER NAME/SET/EL	COMPONENTS					
		HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
ZC 1		3.05000-01	2.81000-01	2.37000-01	2.67000-01	2.50000-
01 TC 1		3.31900+01	3.64850+02	5.08100+02	5.00050+02	
5.08300+02 PC 1		1.31300+06	4.60000+06	4.70000+06	2.88000+06	
4.76500+06 MW 1		2.01588 00	4.20806+01	5.80800+01	1.02177+02	
6.00959+01 PLXANT 1 1		1.26900+01	4.39050+01	5.79470+01	4.16310+01	
1.10720+02	2	-9.48960+01	-3.09780+03	-5.35530+03	-4.66870+03	-
9.04000+03	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	1.11250 00	-3.44250 00	-5.21060 00	-2.85510 00	-
1.26760+01	6	3.29150-04	9.99890-17	1.24490-14	6.36930-04	5.53800-
06	7	2.00000 00	6.00000 00	5.00000 00	1.00000 00	2.00000
00	8	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02	
1.85260+02	9	3.31900+01	3.64850+02	5.08100+02	5.00050+02	
5.08300+02						

TB	1	2.03900+01	2.25450+02	3.29280+02	3.41450+02	
3.55300+02						
CPIG	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.00000+03	8	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
	9	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	10	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHVLWT	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
01	3	3.80000-01	3.80000-01	3.80000-01	3.80000-01	3.80000-
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
OMEGA	1	-2.15993-01	1.37588-01	3.06936-01	3.38683-01	6.63000-
01						

		2	0.0	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00							
		3	0.0	0.0	8.00000 00	8.00000 00	8.00000
00							
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	NOATOM	1	1	2.00000 00	3.00000 00	3.00000 00	6.00000 00
00							
		2	0.0	6.00000 00	6.00000 00	1.40000+01	8.00000
00							
		3	0.0	0.0	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00							
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	CPIXP1	1	1	2.98150+02	2.98150+02	MISSING	MISSING
		2	1.00000+03	1.00000+03	MISSING	MISSING	MISSING
		3	-9.17301+06	9.87573+06	MISSING	MISSING	MISSING
		4	2.06851+05	2.31965+05	0.0	0.0	0.0
		5	-3.10709+04	-3.70702+03	0.0	0.0	0.0
		6	3.03790 00	-1.17194+02	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	7	-1.01319-03	1.93231-02	0.0	0.0	0.0
	8	7.07842-08	-1.83608-06	0.0	0.0	0.0
	9	-3.89633+06	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	4.54463+09	0.0	0.0	0.0	0.0
CPIXP2	1 1	1.00000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	3.00000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	1.11864+06	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	1.07239+05	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	-1.66764+04	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	-6.99156 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	5.79596-04	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	-2.90449-08	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	-1.69690+09	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	1.19728+11	0.0	0.0	0.0	0.0
CPIXP3	1 1	3.00000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	5.00000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	-4.10116+07	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	3.26728+05	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	-4.53212+04	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	2.67352 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	-2.44944-04	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	9.11010-09	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	9.39932+09	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	1.71099+12	0.0	0.0	0.0	0.0
TFP	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
S025E	1	1.30680+05	4.09261+05	5.11835+05	0.0	0.0
WAGNER	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03						
DHVLDS	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03						
CPIGDS	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	3.00000+03	3.00000+03	3.00000+03	3.00000+03	
3.00000+03						
CPIGYM	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00						
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03						

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
PDSNEL	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
HCTYPE	1		0.0	3.00000 00	0.0	0.0	0.0
VC	1		6.41470-02	1.85000-01	2.13000-01	3.86000-01	2.22000-
01							
HCSOL	1	1	MISSING	-8.47605 00	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	0.0	MISSING	MISSING	MISSING
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
FREEZEPT	1		1.39500+01	8.79000+01	1.78450+02	1.87650+02	
1.85258+02							
CPIAPI	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPIGPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
CPIALEE	1	1	4.12270+04	3.41001+04	5.61339+04	1.27130+05	
3.37219+04							
		2	-1.14375+04	1.32545+05	1.54546+05	2.16944+05	
1.79808+05							
		3	3.96298+02	8.71983+02	1.43900+03	-7.86388+02	
7.67201+02							
		4	-3.10984+04	3.77334+04	8.22669+04	1.52963+05	
6.84902+04							
		5	1.47084+02	2.96127+02	6.80322+02	1.99818+03	
2.49326+02							
		6	-2.29507+02	-2.93967+02	-4.70754+02	0.0	-
3.30922+02							
00							
		7	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447
5.00000+01							
		8	5.00000+01	5.00000+01	2.00000+02	2.98000+02	

		9	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	CPITMLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
			2	0.0	0.0	0.0	0.0
			3	0.0	0.0	0.0	0.0
			4	0.0	0.0	0.0	0.0
			5	0.0	0.0	0.0	0.0
			6	0.0	0.0	0.0	0.0
			7	6.00000 00	6.00000 00	6.00000 00	6.00000 00
00							
			8	0.0	0.0	0.0	0.0
			9	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03							
	CPIWEOS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
			2	0.0	0.0	0.0	0.0
			3	0.0	0.0	0.0	0.0
			4	0.0	0.0	0.0	0.0
			5	0.0	0.0	0.0	0.0
			6	0.0	0.0	0.0	0.0
			7	0.0	0.0	0.0	0.0
			8	0.0	0.0	0.0	0.0
			9	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447
00							
	12	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00							
	13	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
CMPCLASS	1	1.00000+02	2.20000+02	4.30000+02	4.80000+02		
4.11000+02							
ZWITTER	1	0.0	0.0	0.0	0.0		0.0
TPT	1	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02		
1.85258+02							
HFUS	1	1.17100+05	2.93600+06	5.77400+06	1.10500+07		
5.41000+06							
DCPLS	1	6.89220+03	2.93019+04	6.66964+13	4.04659+04		
2.42346+03							
PSXANT	1 1	4.66750+01	3.19770+01	2.98400+01	3.57030+01		
3.16520+01							
	2	-2.01620+02	-3.40370+03	-5.15970+03	-6.33840+03	-	
6.62000+03							
	3	0.0	0.0	0.0	0.0		0.0
	4	-9.64140 00	0.0	0.0	0.0		0.0
	5	1.06490-02	0.0	0.0	0.0		0.0
	6	2.00000 00	0.0	0.0	0.0		0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0		0.0
	8	1.17100+01	3.78900+01	7.84500+01	1.37650+02		
1.35260+02							
	9	1.41100+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02		
1.85260+02							
HCOM	1	-2.41820+08	-1.92620+09	-1.65900+09	-3.70261+09	-	
1.83400+09							
RKTZRA	1	3.21000-01	2.77530-01	2.44680-01	2.69880-01		2.51940-
01							
VCRKT	1	6.41470-02	1.85000-01	2.13000-01	3.86000-01		2.22000-
01							
RACKET	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING		MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING		MISSING
	3	0.0	0.0	0.0	0.0		0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0		0.0
	5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03							
DNLDIP	1 1	5.41400 00	1.44030 00	1.19310 00	6.92130-01		1.17990
00							
	2	3.48930-01	2.68520-01	2.54140-01	2.69740-01		2.64400-
01							
	3	3.31900+01	3.64850+02	5.08100+02	5.00050+02		
5.08300+02							

01		4	2.70600-01	2.87750-01	2.92000-01	2.85710-01	2.46530-
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.85260+02		6	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02	
		7	3.31900+01	3.64850+02	5.08100+02	5.00050+02	
5.08300+02							
	DNLPDS	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	RHOM	1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	DNLEXSAT	1 1	1.58666+01	5.47157 00	4.34706 00	2.52284 00	4.47123
00		2	2.41568+01	1.03820+01	1.15174+01	5.26711 00	
1.00368+01		3	8.12525 00	5.16304 00	3.38590-01	1.73974 00	5.52416
00		4	-9.05630 00	-3.93636 00	3.85682 00	-7.00140-01	-8.80197
00		5	4.20852 00	3.63960 00	-1.22654 00	1.26103 00	5.37681
00		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	3.31800+01	3.64949+02	5.08067+02	5.00172+02	
5.08266+02		9	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000
00		10	1.39560+01	8.78500+01	1.78200+02	1.87782+02	
1.85242+02		11	3.31800+01	3.64949+02	5.08067+02	5.00172+02	
5.08266+02							
	DNLTMLPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER		VALUES (CONTINUED)					
		5	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000
00		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	DNLRACK	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	VLPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	DNLCOSTD	1 1	5.45699-02	1.86016-01	2.17878-01	4.00806-01	1.83135-
01		2	-1.51980 00	2.24361-01	4.92343-01	3.43917-01	-4.40058-
01		3	3.31800+01	3.64957+02	5.08065+02	5.00172+02	
5.08268+02		4	1.39900+01	9.31580+01	1.83191+02	1.90000+02	
1.96395+02		5	3.15210+01	3.46709+02	4.82662+02	3.33150+02	
4.82855+02							
	MULAND	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	5.00000+02	5.00000+02	5.00000+02	5.00000+02	
5.00000+02							
	MULDIP	1 1	-1.16610+01	-9.20820+01	-1.50760+01	-1.15000+01	-8.89180
00		2	2.47000+01	1.90730+03	1.02290+03	9.93000+02	
2.35760+03		3	-2.61000-01	1.56390+01	6.23910-01	2.20000-02	-9.13760-
01		4	-4.10000-16	-4.30980-02	0.0	0.0	0.0

		5	1.00000+01	1.00000 00	0.0	0.0	0.0
		6	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02	
1.85260+02							
		7	3.30000+01	3.33150+02	3.29280+02	3.41450+02	
3.55300+02							
TRNSWT	1	1	1.01000+02	1.01000+02	1.01000+02	1.01000+02	
1.01000+02							
		2	1.02000+02	1.02000+02	1.02000+02	1.02000+02	
1.02000+02							
		3	1.00000+02	1.23000+02	1.00000+02	1.00000+02	
1.00000+02							
		4	1.02000+02	1.02000+02	1.02000+02	1.02000+02	
1.02000+02							
		5	1.06000+02	1.06000+02	1.06000+02	1.06000+02	
1.06000+02							
MULPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
MULIKC	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
MULPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
MULNVE	1	1	-1.28782+01	-1.34906+01	-1.79293+01	-1.35295+01	-
2.82160+01		2	3.30788+01	1.77638+03	6.27666+03	2.92795+03	
1.48222+04		3	0.0	-1.96025+05	-1.39975+06	-5.56820+05	-
3.75692+06		4	0.0	9.90364+06	1.20065+08	5.05744+07	
3.86348+08		5	1.40000+01	8.87000+01	2.23159+02	2.43150+02	
2.73510+02		6	3.00000+01	3.62836+02	5.00000+02	5.00000+02	
5.00000+02							
MULPPDS9	1	1	MISSING	1.20797-05	1.13038-05	MISSING	1.18411-
07		2	0.0	2.65076 00	2.93059 00	0.0	7.46130
00		3	0.0	3.61705-02	7.94747-03	0.0	-3.15530-
02		4	0.0	3.94372+02	5.60008+02	0.0	
6.48639+02		5	0.0	6.36714+01	1.11659+02	0.0	
1.46253+02		6	0.0	8.87000+01	1.83041+02	0.0	
2.73510+02		7	1.00000+03	3.62836+02	4.67076+02	1.00000+03	
4.58013+02							
KLDIP	1	1	-9.17000-02	9.98740-02	2.76580-01	1.91620-01	2.01610-
01		2	1.76780-02	-1.34090 00	-3.92970-04	-2.76200-04	-2.15290-
04		3	-3.82000-04	1.65450 00	0.0	0.0	0.0
		4	-3.33240-06	1.33340 00	0.0	0.0	0.0
		5	1.02660-07	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02	
1.85260+02							

		7	3.10000+01	3.40490+02	3.43150+02	4.00100+02	
4.25000+02							
KLPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
KLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
KLTMLPO	1	1	MISSING	1.93473-01	1.53084-01	2.30836-01	1.42677-
01		2	0.0	-3.76081-04	7.20434-04	-5.42029-04	1.23304-
04		3	0.0	8.38779-07	-3.29526-06	4.21374-07	-5.01746-
07		4	0.0	-2.19119-09	3.08029-09	0.0	0.0
00		5	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	3.00000 00	3.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER		VALUES (CONTINUED)				
		6	0.0	9.00000+01	1.93195+02	1.90000+02
1.90000+02		7	1.00000+03	3.20000+02	4.87743+02	4.50000+02
4.50000+02	KLPPDS8	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		9	7.00000 00	7.00000 00	7.00000 00	7.00000 00
00		10	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	VB	1	2.85681-02	6.88009-02	7.75949-02	1.51659-01
02	MUP	1	0.0	1.15660-25	9.11056-25	3.57407-25
25	LJPAR	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	STKPAR	1 1	2.40602+01	2.66128+02	5.89172+02	4.04111+02
4.37068+02		2	3.56427-10	4.77700-10	4.32868-10	6.21158-10
10	DVBLNC	1	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00
00	DLWC	1	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00
00	CHI	1	0.0	0.0	0.0	0.0
	SIGDIP	1 1	5.34500-03	5.31180-02	6.24920-02	5.33900-02
02		2	1.06460 00	1.19930 00	1.14470 00	1.24700 00
01		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02
1.85260+02		7	3.31900+01	3.64850+02	5.08100+02	5.00050+02
5.08300+02	SIGPDS	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0

		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
SIGPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
SIGISTE	1	1	MISSING	3.31541-02	4.73466-02	2.48251-02	6.14442-
02		2	0.0	2.81821-02	1.91409-02	6.45783-02	-2.58455-
02		3	0.0	0.0	0.0	-5.01469-02	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	MISSING	3.64949+02	5.08065+02	5.00172+02	
5.08264+02		6	4.00000 00	2.00000 00	2.00000 00	3.00000 00	2.00000
00		7	0.0	2.11546+02	2.73100+02	2.48070+02	
2.83150+02		8	1.00000+03	2.50268+02	3.28150+02	3.73170+02	
3.33150+02							
SIGPDS14	1	1	4.45391-03	2.96318-02	3.13992-02	MISSING	1.51943-
02							

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
	2	1.10944 00	9.55421-01	8.25265-01	0.0	3.14219-	
01							
	3	7.52094-01	1.08488 00	1.22993 00	0.0	1.97529	
00							
	4	3.31800+01	3.64946+02	5.08067+02	MISSING		
5.08268+02							
	5	1.77200+01	2.11046+02	2.73000+02	0.0		
2.83150+02							
	6	3.25700+01	2.50019+02	3.28150+02	1.00000+03		
3.38150+02							
SIGTDEW	1	1	-3.26415 00	1.77089-01	-3.20412 00	-1.57441 00	MISSING
		2	6.78339 00	1.39554+01	-1.54880-01	7.61234 00	0.0
		3	-7.48878 00	-2.21176+01	1.36665 00	-1.20998+01	0.0
		4	2.42521 00	1.08541+01	0.0	6.58862 00	0.0
		5	3.31800+01	3.64957+02	5.08065+02	5.00172+02	MISSING
		6	4.00000 00	4.00000 00	3.00000 00	4.00000 00	4.00000
00							
		7	1.77200+01	2.11546+02	2.73100+02	2.48070+02	0.0
		8	3.31800+01	2.81509+02	5.08065+02	4.43651+02	
1.00000+03							
VKGRP	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		5	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		6	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		7	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		9	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		10	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHFVK	1		MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGFVK	1		MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHFVKM	1		MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGFVKM	1		MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

DGCON	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGCONM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHCON	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHCONM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGSUB	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGSUBM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHSUB	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHSUBM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
THRSWT	1 1	0.0	1.00000+02	1.00000+02	1.00000+02	
1.00000+02						
	2	1.05000+02	1.05000+02	1.05000+02	1.05000+02	
1.05000+02						
	3	1.01000+02	1.01000+02	1.01000+02	1.01000+02	
1.01000+02						
	4	1.06000+02	1.06000+02	1.06000+02	1.06000+02	
1.06000+02						
	5	1.00000+02	1.00000+02	1.00000+02	1.00000+02	
1.00000+02						
	6	1.14000+02	1.00000+02	1.24000+02	1.00000+02	
1.00000+02						

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	7	1.07000+02	1.07000+02	1.07000+02	1.07000+02	
1.07000+02						
	8	1.04000+02	1.04000+02	1.04000+02	1.04000+02	
1.04000+02						
NATOM	1 1	0.0	3.00000 00	3.00000 00	6.00000 00	3.00000 00
	2	2.00000 00	6.00000 00	6.00000 00	1.40000+01	8.00000 00
	3	0.0	0.0	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DHAQFM	1	-4.20000+06	0.0	0.0	0.0	0.0
CPLXP1	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPLXP2	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PLPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
LNVP1	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
LNVP1	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LOGVP1	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LNPR1	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LOGPR1	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LNPR2	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LOGPR2	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PLTDEPOL	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03							
WAGNER25	1	1	-4.61929 00	-6.41578 00	-7.70416 00	-8.59654 00	-8.40037
00							
		2	3.46198-01	7.29396-01	2.02576 00	4.30782 00	1.12896
00							
		3	1.48236 00	-6.23143-01	-2.50535 00	-5.53574 00	-7.14689
00							

00	4	-4.75143-01	-2.91042 00	-2.64119 00	-1.38042 00	1.97523
1.53734+01	5	1.40725+01	1.53398+01	1.53640+01	1.48566+01	
5.08268+02	6	3.31800+01	3.64957+02	5.08065+02	5.00172+02	
1.85170+02	7	1.39560+01	8.78500+01	1.78160+02	1.87782+02	
5.08268+02	8	3.31800+01	3.64957+02	5.08065+02	5.00172+02	
CPIGHY	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.00000+03	7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
PSANT	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
PSTDEPOL	1 1	1.77121+01	4.71227+01	4.85303+01	5.24470+01	
5.16977+01						
	2	-1.22991+02	-3.59661+03	-5.72935+03	-6.65067+03	-
7.31536+03						
	3	0.0	-3.00000 00	-3.00000 00	-3.00000 00	-3.00000
00						
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	4.50000 00	4.39250+01	1.26000+02	9.38910+01	
9.26209+01						
	10	1.39560+01	8.78500+01	1.78160+02	1.87782+02	
1.85242+02						
PSTMLPOL	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000
00						
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
CPSP01	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
DHSFRM	1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSDIP	1 1	5.73000+03	-2.17220+02	-1.40980+04	-1.23300+04	-
3.66000+03						

4.51460+02	2	0.0	-1.34390+02	1.35750+03	1.52200+03	
00	3	0.0	4.64740+01	-7.26710 00	-7.19200 00	9.37730
01	4	0.0	-7.99180-01	1.74220-02	1.86900-02	-1.19660-
04	5	0.0	4.33490-03	0.0	0.0	3.98900-
1.20000+01	6	1.39500+01	1.40000+01	1.33700+01	1.00000+01	
1.85260+02	7	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02	
CPSXP1	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP2	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP3	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP4	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP5	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP6	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

CPSXP7	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TREFHS	1	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02						
CPSPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
CPSTMLPO	1	1	MISSING	-1.57062+04	5.98337+04	-1.45560+04
1.08452+04						
	2	0.0	1.55718+03	1.58232+02	1.66922+03	
1.07231+03						
	3	0.0	-1.41233+01	0.0	-9.95107 00	-5.44550
00						
	4	0.0	7.03509-02	0.0	3.83229-02	1.02461-
02						
	5	0.0	0.0	0.0	-4.70696-05	2.50857-
05						
	6	5.00000 00	4.00000 00	2.00000 00	5.00000 00	5.00000
00						
	7	0.0	1.41800+01	1.26000+02	1.00000+01	
1.20000+01						
	8	1.00000+03	8.78500+01	1.78160+02	1.87782+02	
1.85170+02						
DGSFRM	1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
VSPOLY	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
DNSDIP	1	1	MISSING	2.09260+01	1.91290+01	1.03260+01
1.87690+01						
	2	0.0	-2.17540-02	-1.40780-02	-6.87860-03	-1.26640-
02						
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	7.86000+01	7.13800+01	7.50600+01	
7.41000+01							
		7	1.00000+03	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02	
1.85260+02							
	VSPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	DNSTMLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00
00	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	KSPOLY	1	1	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	UFGRPD	1	1	3.81000+03	1.01500+03	1.01500+03
1.00500+03		2	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00
00		3	MISSING	1.07000+03	1.40500+03	1.01500+03
1.01500+03		4	MISSING	1.00000 00	1.00000 00	4.00000 00
00		5	MISSING	MISSING	MISSING	1.60500+03
1.21000+03		6	MISSING	MISSING	MISSING	1.00000 00
00		7	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		9	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		10	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

UFGRPL	1	1	3.81000+03	1.01500+03	1.01500+03	1.00500+03	
1.00500+03		2	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00		3	MISSING	1.07000+03	1.40500+03	1.01500+03	
1.01500+03		4	MISSING	1.00000 00	1.00000 00	4.00000 00	2.00000
00		5	MISSING	MISSING	MISSING	1.60500+03	
1.20000+03		6	MISSING	MISSING	MISSING	1.00000 00	1.00000
00		7	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		9	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		10	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
UFGRP	1	1	3.81000+03	1.01500+03	1.01500+03	1.00500+03
1.00500+03						
	2	1.00000	00	1.00000	00	1.00000
00						
	3	MISSING	1.07000+03	1.40500+03	1.01500+03	
1.01500+03						
	4	MISSING	1.00000	00	1.00000	00
00						2.00000
	5	MISSING	MISSING	MISSING	1.60500+03	
1.20000+03						
	6	MISSING	MISSING	MISSING	1.00000	00
00						1.00000
	7	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	-1.00000
00						
	8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	9	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
3.05000+03						
	10	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	1.00000
00						
	11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
UFGRP	2	1	3.81000+03	1.01500+03	1.01500+03	1.00500+03
1.00500+03						
	2	1.00000	00	1.00000	00	1.00000
00						
	3	MISSING	1.07000+03	1.40500+03	1.01500+03	
1.01500+03						
	4	MISSING	1.00000	00	1.00000	00
00						2.00000

1.20000+03	5	MISSING	MISSING	MISSING	1.60500+03	
00	6	MISSING	MISSING	MISSING	1.00000 00	1.00000
00	7	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	-1.00000
	8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
3.05000+03	9	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
00	10	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	1.00000
	11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
GMUQR	1	4.16612-01	2.24654 00	2.57350 00	4.74225 00	2.91365	
00							
GMUQQ	1	5.72000-01	2.02400 00	2.33600 00	4.08800 00	2.52760	
00							
GMUQQ1	1	5.72000-01	2.02400 00	2.33600 00	4.08800 00	2.52760	
00							
DHVLDP	1 1	1.01270+06	2.52160+07	5.16480+07	4.63020+07		
8.50200+07							
	2	6.98000-01	3.37210-01	1.19670 00	1.26560 00	1.47400	
00							
	3	-1.81700 00	-1.83990-01	-1.47590 00	-2.32510 00	-1.87800	
00							
	4	1.44700 00	2.23770-01	6.88840-01	1.52530 00	9.33000-	
01							
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	6	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02		
1.85260+02							
	7	3.31900+01	3.64850+02	5.08100+02	5.00050+02		
5.08300+02							
DHVLB	1	8.96545+05	1.87317+07	2.97095+07	2.96166+07		
4.05251+07							
DHVLPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03							
DHVLTDEW	1 1	MISSING	1.72717+01	1.76985+01	1.75992+01		
1.75894+01							
	2	0.0	1.23574 00	8.17733-01	7.61460-02	-9.04545-	
01							
	3	0.0	-1.56359 00	-7.45112-01	6.88388-01	1.71934	
00							
	4	0.0	7.75286-01	3.51631-01	-3.92996-01	-4.58659-	
01							
	5	MISSING	3.64957+02	5.08065+02	5.00172+02		
5.08268+02							
	6	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000	
00							
	7	0.0	9.00000+01	1.78160+02	1.87782+02		
1.85170+02							

		8	1.00000+03	3.64957+02	4.90910+02	5.00172+02	
4.90932+02							
MUVDIP	1	1	1.79700-07	7.39190-07	2.19610-08	1.69100-07	1.20030-
06							
		2	6.85000-01	5.42300-01	1.02440 00	7.11400-01	4.94000-
01							
		3	-5.90000-01	2.63730+02	0.0	1.24000+02	
4.79780+02							
		4	1.40000+02	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.39500+01	8.78900+01	1.78450+02	1.87650+02	
1.87350+02							
		7	3.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
MUVPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
MUVCEB	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
MUVSUT	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
MUVPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03							
	MJVTMLPO	1 1	4.58594-07	2.42051-06	-7.69770-06	-5.10748-07	-1.74210-06
		2	3.52557-08	3.73710-09	7.59699-08	2.54706-08	3.75040-08
		3	-2.46217-11	8.26799-11	-1.10163-10	-2.13938-12	-2.32819-11
		4	7.99171-15	-8.68726-14	8.02687-14	-1.89393-15	1.59500-14
		5	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00
3.60000+02		6	1.39400+01	1.93475+02	3.38124+02	3.50000+02	
		7	2.12736+03	5.23171+02	7.60000+02	7.50000+02	
7.60000+02							
	KVDIP	1 1	2.65300-03	4.49000-05	1.31180-05	1.98790-04	7.39070-07
		2	7.45200-01	1.20180 00	1.35320 00	9.42300-01	1.74190 00
		3	1.20000+01	4.21000+02	4.81960+02	3.06800+02	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	1.06230+05	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
3.55300+02		6	2.20000+01	2.25450+02	2.73150+02	3.28050+02	
		7	1.60000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	KVPDS	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	KVPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	CPLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	CPLIKC	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03							
CPLTDECS	1	1	MISSING	1.33842+05	1.98716+05	2.05345+05	MISSING
		2	0.0	-8.79619+02	-9.49673+02	-5.56876+02	0.0
		3	0.0	4.49004 00	3.09938 00	2.63135 00	0.0
		4	0.0	-7.53224-03	-2.77231-03	-2.59915-03	0.0
		5	0.0	5.44296+03	3.80154+03	4.87629+03	0.0
		6	MISSING	3.64957+02	5.08065+02	5.00172+02	MISSING
		7	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000
00							
		8	0.0	8.78500+01	1.78160+02	1.87782+02	0.0
		9	1.00000+03	3.44235+02	4.97904+02	4.90000+02	
1.00000+03							
CPLTMLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	-
3.99373+05							
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	
8.27153+03							
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	-
5.02661+01							
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	1.32848-
01							
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	-1.22055-
04							
		6	5.00000 00	5.00000 00	5.00000 00	5.00000 00	5.00000
00							
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	
1.85170+02							
		8	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
3.53150+02							
KVTMLPO	1	1	2.04157-03	-5.71007-03	-3.34293-02	3.79089-03	-1.53513-
02							
		2	7.04758-04	4.66501-05	2.15916-04	-2.24002-05	9.03617-
05							
		3	-4.32055-07	1.11761-07	-3.17159-07	2.24785-07	3.34441-
08							
		4	1.54387-10	-2.29114-11	2.81383-10	-1.09355-10	0.0
		5	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	3.00000
00							
		6	1.46000+01	2.30000+02	3.40483+02	3.50000+02	
3.40283+02							
		7	1.99944+03	6.33108+02	7.60000+02	7.50000+02	
7.60000+02							
VLBROC	1	1	6.49115-02	1.85000-01	2.13000-01	3.86000-01	2.22000-
01							

PARAMETER NAME/SET/EL	COMPONENTS WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02	
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	
ZC	1	2.29000-01	2.77000-01	2.00000-01	2.00000-01	2.60000-
01						
TC	1	6.47096+02	6.06000+02	1.32100+03	2.00000+03	
9.73000+02						
PC	1	2.20640+07	3.60000+06	5.00000+06	5.00000+06	
2.96882+06						
MW	1	1.80153+01	1.16160+02	8.49947+01	1.01103+02	
6.89953+01						
PLXANT	1 1	7.36490+01	1.62020+02	-1.00000+35	-1.00000+35	-
1.00000+20						
	2	-7.25820+03	-1.05310+04	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	-7.30370 00	-2.26710+01	0.0	0.0	0.0
	6	4.16530-06	2.59180-02	0.0	0.0	0.0
	7	2.00000 00	1.00000 00	0.0	0.0	0.0
	8	2.73160+02	2.29150+02	0.0	0.0	0.0
	9	6.47100+02	6.06000+02	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03						
TB	1	3.73150+02	4.41050+02	6.53150+02	3.41900+02	
5.93150+02						
CPIG	1 1	MISSING	MISSING	9.30500+04	9.62700+04	-
4.41289+03						
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER		VALUES (CONTINUED)				
		8	1.00000+03	1.00000+03	2.00000+03	2.00000+03
1.00000+03		9	MISSING	MISSING	3.32560+04	3.32560+04
3.32560+04		10	MISSING	MISSING	2.12860+01	2.12860+01
2.12860+01		11	MISSING	MISSING	1.50000 00	1.50000 00 1.50000
00	DHVLWT	1 1	MISSING	MISSING	7.48326+07	2.88722+07
6.97934+07		2	MISSING	MISSING	6.53150+02	3.41900+02
5.93150+02		3	3.80000-01	3.80000-01	3.80000-01	3.80000-01 3.80000-
01		4	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		5	0.0	0.0	2.61260+02	0.0
2.37260+02	OMEGA	1	3.44861-01	7.68352-01	0.0	0.0 2.96000-
01	DHFORM	1	-2.41818+08	-4.63100+08	0.0	0.0 0.0
	DGFORM	1	-2.28572+08	-2.88600+08	0.0	0.0 0.0
	VLSTD	1	1.80500-02	1.24336-01	4.02364-02	2.98906-01 3.43197-
02	SG	1	1.00000 00	9.36586-01	2.11772 00	MISSING 2.01545
00	API	1	1.00000+01	1.95806+01	-6.46828+01	MISSING -
6.12924+01	WATSOL	1 1	1.76832 00	2.45843 00	-5.30000 00	-5.30000 00 -5.30000
00		2	-2.28298+03	-2.48800+03	-5.00000+02	-5.00000+02 -
5.00000+02		3	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		5	9.24913+02	7.87731+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	CHARGE	1	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	HIGPY	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
		10	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	PSEUDO	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING

CPIGDP	1	1	3.33630+04	1.16770+05	MISSING	MISSING	MISSING
	2		2.67900+04	1.93790+05	0.0	0.0	0.0
	3		2.61050+03	6.78100+02	0.0	0.0	0.0
	4		8.89600+03	1.62900+05	0.0	0.0	0.0
	5		1.16900+03	1.80230+03	0.0	0.0	0.0
	6		1.00000+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	7		2.27315+03	1.20015+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
ATOMNO	1	1	1.00000 00	6.00000 00	7.00000 00	1.90000+01	7.00000
00							
	2		8.00000 00	1.00000 00	1.10000+01	7.00000 00	
1.10000+01							
	3		0.0	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000
00							
	4		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
NOATOM	1	1	2.00000 00	6.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00							
	2		1.00000 00	1.20000+01	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00							
	3		0.0	2.00000 00	3.00000 00	3.00000 00	2.00000
00							
	4		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPIXP1	1 1	2.98150+02	MISSING	5.79000+02	6.07600+02	
5.57000+02						
	2	1.20000+03	MISSING	1.00000+03	7.00000+02	
1.00000+03						
	3	-2.52304+08	MISSING	-3.58291+06	-1.94345+07	
1.12810+08						
	4	2.68010+05	0.0	1.36963+06	1.14046+06	
1.03537+06						
	5	-3.32484+04	0.0	-1.55603+05	-1.23386+05	-
1.21336+05						
	6	2.37049-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	-2.17949-03	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	3.66987-07	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	1.17992+08	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	-9.24171+09	0.0	0.0	0.0	0.0
CPIXP2	1 1	1.20000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	2.50000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	-2.80324+08	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	3.67548+05	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	-4.46634+04	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	-3.70790 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	1.85761-04	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	-2.79906-09	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	1.16931+10	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	-2.30214+12	0.0	0.0	0.0	0.0
CPIXP3	1 1	2.50000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	5.00000+03	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	-2.66964+08	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	3.34868+05	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	-4.07975+04	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	-4.39824 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	2.47266-04	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	-7.91235-09	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	4.83595+08	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	2.44832+12	0.0	0.0	0.0	0.0
TFP	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
S025E	1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WAGNER	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						

DHVLDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7		1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
CPIGDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	3.00000+03	3.00000+03	3.00000+03	3.00000+03	
3.00000+03							
	CPIGYM	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000
00							
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03							
	PDSNEL	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	HCTYPE	1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	VC	1	5.59472-02	3.87000-01	1.00000-01	1.00000-01	3.69445-
01							
	HCSOL	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	FREEZEPT	1	2.73150+02	2.29150+02	5.80150+02	6.10000+02	
5.57150+02							
	CPIAPI	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	CPIGPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	CPIALEE	1 1	3.32748+04	1.04046+05	MISSING	MISSING	MISSING
		2	2.38638+04	1.89302+05	0.0	0.0	0.0
		3	2.35934+03	5.76760+02	0.0	0.0	0.0

	4	7.35122+03	2.01389+05	0.0	0.0	0.0
	5	1.07562+03	1.63902+03	0.0	0.0	0.0
	6	-2.11279+02	0.0	0.0	0.0	0.0
00	7	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447
	8	5.00000+01	2.00000+02	0.0	0.0	0.0
1.00000+03	9	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
CPITMLPO 1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
00	7	6.00000 00	6.00000 00	6.00000 00	6.00000 00	6.00000
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER		VALUES (CONTINUED)				
		9	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	CPIWEOS	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00	8.31447 00
00						
		12	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00	1.00000 00
00						
		13	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	CMPCLASS	1	1.00000+02	4.00000+02	1.30000+02	MISSING
1.30000+02	ZWITTER	1	0.0	0.0	0.0	0.0
	TPT	1	2.73160+02	2.29150+02	5.80150+02	6.09000+02
5.57150+02	HFUS	1	6.00174+06	6.04000+06	1.46022+07	1.05000+07
	DCPLS	1	3.80282+04	3.15298+04	1.39409+02	7.71923+04
	PSXANT	1 1	2.87660+01	3.92660+01	MISSING	MISSING
		2	-6.10920+03	-9.27300+03	MISSING	MISSING
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	1.49300+02	1.79150+02	0.0	0.0
		9	2.73160+02	2.29150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	HCOM	1	0.0	-3.29900+09	0.0	0.0
	RKTZRA	1	2.43172-01	2.64780-01	2.91700-01	2.91860-01
01						
	VCRKT	1	5.59472-02	3.87000-01	3.69445-01	3.69445-01
01						
	RACKET	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	DNLDIP	1 1	1.78630+01	6.72660-01	2.72700+01	MISSING
3.22570+01						

02		2	5.86060+01	2.60310-01	-8.37140-03	0.0	-1.08040-
		3	-9.53960+01	6.06000+02	0.0	0.0	0.0
		4	2.13890+02	2.51100-01	0.0	0.0	0.0
		5	-1.41260+02	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	2.73160+02	2.29150+02	5.80000+02	0.0	
5.57150+02		7	6.47100+02	6.06000+02	7.00000+02	1.00000+03	
7.20000+02							
	DNLPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
			2	0.0	0.0	0.0	0.0
			3	0.0	0.0	0.0	0.0
			4	0.0	0.0	0.0	0.0
			5	0.0	0.0	0.0	0.0
			6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03							
	RHOM	1	1	0.0	0.0	0.0	0.0
	DNLEXSAT	1	1	1.70358+01	2.22103 00	MISSING	MISSING
			2	4.72437+01	5.58434 00	MISSING	MISSING
			3	-1.86062-01	5.72300 00	0.0	0.0
			4	3.14451+01	-1.06919+01	0.0	0.0
			5	-5.61482+01	9.11054 00	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	6.47108+02	6.24000+02	MISSING	MISSING	MISSING
	9	4.00000 00	4.00000 00	6.00000 00	6.00000 00	6.00000 00
00	10	2.73160+02	2.26100+02	0.0	0.0	0.0
	11	6.47108+02	6.24000+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
DNLTMLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00
00	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
DNLRACK	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
VLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
DNLCOSTD	1	1	3.17123-02	3.57160-01	MISSING	MISSING
	2	-2.49864 00	1.17508-01	0.0	0.0	0.0
	3	6.47108+02	6.19000+02	0.0	0.0	0.0
	4	2.73620+02	2.30000+02	0.0	0.0	0.0
	5	6.14753+02	5.88050+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
MULAND	1	1	MISSING	MISSING	-1.09415+01	-1.09415+01
1.09415+01						
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

		5	5.00000+02	5.00000+02	5.00000+02	5.00000+02	
5.00000+02							
MULDIP	1	1	-5.28430+01	1.55570+02	8.52890 00	MISSING	-9.42970
00							
		2	3.70360+03	-8.72640+03	3.45700+02	0.0	
2.04970+03							
		3	5.86600 00	-2.38030+01	-2.34850 00	0.0	0.0
		4	-5.87900-29	2.75020+10	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+01	-4.00000 00	0.0	0.0	0.0
		6	2.73160+02	2.23650+02	5.80150+02	0.0	
5.57150+02							
		7	6.46150+02	4.84800+02	6.53150+02	1.00000+03	
5.93150+02							
TRNSWT	1	1	1.01000+02	1.01000+02	1.01000+02	5.08000+02	
1.01000+02							
		2	1.02000+02	1.02000+02	0.0	0.0	0.0
		3	1.00000+02	1.00000+02	1.00000 00	0.0	1.00000
00							
		4	1.02000+02	1.02000+02	0.0	0.0	0.0
		5	1.06000+02	1.06000+02	1.00000+02	0.0	
1.00000+02							
MULPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

12	5	0.0	0.0	-4.46521-13	0.0	-4.19004-
5.93150+02	6	2.73160+02	2.29150+02	6.53150+02	0.0	
9.63270+02	7	6.33150+02	4.81800+02	1.30779+03	1.00000+03	
KLPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.00000+03	6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
KLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

05		2	2.56700 00	1.10630 00	-1.88400-05	0.0	-6.44000-
		3	-3.33770 00	0.0	-2.75100-08	0.0	0.0
		4	1.96990 00	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	2.73160+02	2.29150+02	5.95150+02	0.0	
5.54150+02							
		7	6.47100+02	6.06000+02	1.01110+03	1.00000+03	
5.93150+02							
	SIGPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
			2	0.0	0.0	0.0	0.0
			3	0.0	0.0	0.0	0.0
			4	0.0	0.0	0.0	0.0
			5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03							
	SIGPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
			2	0.0	0.0	0.0	0.0
			3	0.0	0.0	0.0	0.0
			4	0.0	0.0	0.0	0.0
			5	0.0	0.0	0.0	0.0
			6	0.0	0.0	0.0	0.0
			7	0.0	0.0	0.0	0.0
			8	0.0	0.0	0.0	0.0
			9	0.0	0.0	0.0	0.0
			10	0.0	0.0	0.0	0.0
			11	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER		VALUES (CONTINUED)				
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	SIGISTE	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		6	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00
00		7	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	SIGPDS14	1 1	2.33249-01	2.60287-02	MISSING	MISSING
		2	1.25043 00	6.89539-01	0.0	0.0
		3	-6.15491-01	1.67820 00	0.0	0.0
		4	6.47108+02	6.09000+02	MISSING	MISSING
		5	2.73550+02	2.93138+02	0.0	0.0
		6	6.43497+02	3.23150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	SIGTDEW	1 1	-2.19860 00	-2.80714 00	MISSING	MISSING
		2	8.22938-01	1.04304 00	0.0	0.0
		3	-7.02816-01	0.0	0.0	0.0
		4	9.54507-01	0.0	0.0	0.0
		5	6.47108+02	6.19000+02	MISSING	MISSING
		6	4.00000 00	2.00000 00	4.00000 00	4.00000 00
00		7	2.72640+02	2.93138+02	0.0	0.0
		8	6.47108+02	5.96197+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	VKGRP	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		5	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		6	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		7	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		8	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		9	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		10	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHFVK	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGFVK	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHFVKM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGFVKM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGCON	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGCONM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHCON	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHCONM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
DGSUB	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DGSUBM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHSUB	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DHSUBM	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
THRSWT	1 1	1.00000+02	1.00000+02	1.00000+02	0.0	
	2	1.16000+02	1.05000+02	0.0	0.0	
	3	1.01000+02	1.01000+02	0.0	0.0	0.0
	4	1.06000+02	1.06000+02	0.0	0.0	0.0
	5	1.00000+02	1.02000+02	1.00000+02	2.00000+02	
	6	1.00000+02	1.00000+02	1.00000+02	2.00000+02	
	7	1.07000+02	1.07000+02	0.0	0.0	
	8	1.04000+02	1.04000+02	0.0	0.0	0.0
NATOM	1 1	0.0	6.00000 00	0.0	0.0	0.0
	2	2.00000 00	1.20000+01	0.0	0.0	0.0
	3	1.00000 00	2.00000 00	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DHAQFM	1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPLXP1	1 1	MISSING	MISSING	5.79000+02	6.07600+02	
	2	MISSING	MISSING	1.00000+03	7.00000+02	
	3	MISSING	MISSING	-5.03583+08	-5.19435+08	-
	4	0.0	0.0	1.36963+06	1.14046+06	
	5	0.0	0.0	-1.55603+05	-1.23386+05	-
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPLXP2	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03						
LNVPEQ	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
LNVP1	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LOGVP1	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LNPR1	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LOGPR1	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LNPR2	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
LOGPR2	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PLTDEPOL	1 1	MISSING	MISSING	2.69953+01	3.89790+01	
	2	0.0	0.0	-1.97078+04	-2.46540+04	-
1.59546+04						
	3	0.0	0.0	0.0	-1.07373 00	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	9	0.0	0.0	5.83310+02	6.09000+02	0.0	
5.53200+02							
	10	1.00000+03	1.00000+03	8.48000+02	8.48000+02		
8.48000+02							
WAGNER25	1	1	-7.89890 00	-1.23507+01	MISSING	MISSING	MISSING
		2	1.99929 00	1.01499+01	0.0	0.0	0.0
		3	-2.45056 00	-1.22871+01	0.0	0.0	0.0
		4	-1.88008 00	5.21915 00	0.0	0.0	0.0
		5	1.69098+01	1.51478+01	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)								
		6	6.47108+02	6.19000+02	MISSING	MISSING	MISSING	
		7	2.40000+02	2.26100+02	0.0	0.0	0.0	
		8	6.47108+02	6.19000+02	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03								
	CPIGHY	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03								
	PSANT	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03								
	PSTDEPOL	1	1	4.87508+01	MISSING	5.22149+01	5.53299+01	MISSING
		2	-6.96676+03	0.0	-2.32738+04	-2.70900+04	0.0	
		3	-3.00000 00	0.0	-3.00000 00	-3.00000 00	0.0	
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		9	1.73160+02	0.0	5.49961+02	4.05968+02	0.0	
		10	2.73160+02	1.00000+03	5.83310+02	6.09000+02		
1.00000+03								
	PSTMLPOL	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		9	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000	
00								
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		11	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03								
4.57510+04	CPSP01	1	1	3.81518+03	MISSING	4.57510+04	4.57510+04	
		2	1.25816+02	0.0	0.0	0.0	0.0	
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
		4	-8.65820+04	0.0	0.0	0.0	0.0	

	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	5.00000+01	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	3.00000+02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
DHSFRM	1	-2.92920+08	0.0	-4.65020+08	-4.94460+08	-
3.58650+08						
CPSDIP	1	-2.62490+02	2.19000+03	-1.55000+04	2.00000+05	
3.20510+04						
	2	1.40520+02	7.92670-01	1.01440+03	0.0	
1.03090+02						
	3	0.0	0.0	-4.36900 00	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	9.34500-03	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	-6.81300-06	0.0	0.0
	6	3.15000 00	5.00000+01	4.43500+01	0.0	
3.33150+02						
	7	2.73150+02	2.29150+02	5.79000+02	1.00000+03	
4.73150+02						
CPSXP1	1	MISSING	MISSING	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02						
	2	MISSING	MISSING	5.48000+02	4.01200+02	
5.57000+02						

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
3.70849+08	3	MISSING	MISSING	-4.85680+08	-5.18091+08	-
3.60110+05	4	0.0	0.0	5.78075+05	7.79019+05	
1.05311+04	5	0.0	0.0	-2.56898+04	-6.09860+04	-
9.81148+01	6	0.0	0.0	-1.12947+02	-5.93919+01	-
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP2	1	1	MISSING	MISSING	5.48000+02	4.01200+02 MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	5.79000+02	6.07600+02 MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	-4.81730+08	-5.27303+08 MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	5.70867+05	1.13490+06 0.0
	5	0.0	0.0	0.0	-2.56898+04	-1.20499+05 0.0
	6	0.0	0.0	0.0	-1.12947+02	0.0 0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
CPSXP3	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
CPSXP4	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
CPSXP5	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0 0.0

		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP6	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
CPSXP7	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TREFHS	1	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02						
CPSPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
CPSTMLPO	1 1	-3.22047+02	MISSING	-8.59635+03	1.97476+05	-
2.69716+07						
	2	9.39557+01	0.0	6.76865+02	-3.72065+02	
1.65698+05						
	3	1.57950 00	0.0	-1.13919 00	4.70751-01	-
3.38025+02						
	4	-1.15406-02	0.0	-8.28982-04	0.0	2.30118-
01						
	5	2.44101-05	0.0	3.27807-06	0.0	0.0
	6	5.00000 00	5.00000 00	5.00000 00	3.00000 00	4.00000
00						
	7	5.00000 00	0.0	2.91227+01	4.05968+02	
4.68150+02						
	8	2.40000+02	1.00000+03	5.49961+02	6.09000+02	
5.53200+02						
DGSFRM	1	-2.36760+08	0.0	-3.67153+08	-3.94544+08	-
2.84600+08						
VSPOLY	1 1	1.96500-02	MISSING	3.76000-02	4.80400-02	3.00000-
02						
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
DNSDIP	1	1	5.30300+01	1.09220+01	2.66020+01	MISSING	
3.24510+01							
		2	-7.84090-03	-5.95790-03	0.0	0.0	-5.03850-
03							
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	2.33150+02	9.16600+01	2.93150+02	0.0	
2.73150+02							
		7	2.73150+02	2.29150+02	2.93150+02	1.00000+03	
2.99150+02							
VSPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
DNSTMLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000 00	8.00000
00						
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
KSPOLY	1	1	MISSING	MISSING	5.19220+01	5.19220+01
5.19220+01						
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
UFGRPD	1	1	1.30000+03	1.00000+03	MISSING	MISSING
	2	1.00000 00	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	1.01000+03	MISSING	MISSING	MISSING
	4	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	5	MISSING	1.01500+03	MISSING	MISSING	MISSING
	6	MISSING	2.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	7	MISSING	1.22000+03	MISSING	MISSING	MISSING
	8	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	9	MISSING	1.40500+03	MISSING	MISSING	MISSING
	10	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
UFGRPL	1	1	1.30000+03	1.00000+03	MISSING	MISSING
		2	1.00000 00	1.00000 00	MISSING	MISSING
		3	MISSING	1.01000+03	MISSING	MISSING
		4	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING
		5	MISSING	1.01500+03	MISSING	MISSING
		6	MISSING	2.00000 00	MISSING	MISSING
		7	MISSING	1.20000+03	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	8	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	9	MISSING	1.40500+03	MISSING	MISSING	MISSING
	10	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
UFGRP	1	1	1.30000+03	1.00000+03	MISSING	MISSING
	2	1.00000 00	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	1.01000+03	MISSING	MISSING	MISSING
	4	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	5	MISSING	1.01500+03	MISSING	MISSING	MISSING
	6	MISSING	2.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	7	MISSING	1.20000+03	MISSING	MISSING	MISSING
	8	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	9	MISSING	1.40500+03	MISSING	MISSING	MISSING
	10	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
UFGRP	2	1	1.30000+03	1.00000+03	MISSING	MISSING
	2	1.00000 00	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	3	MISSING	1.01000+03	MISSING	MISSING	MISSING
	4	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	5	MISSING	1.01500+03	MISSING	MISSING	MISSING
	6	MISSING	2.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
	7	MISSING	1.20000+03	MISSING	MISSING	MISSING

8	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
9	MISSING	1.40500+03	MISSING	MISSING	MISSING
10	MISSING	1.00000 00	MISSING	MISSING	MISSING
11	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
12	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
13	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
14	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	15	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	16	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	17	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	18	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	19	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	20	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	21	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	22	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	23	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
	24	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	
00	GMUQR	1	9.20000-01	4.89848 00	1.63744 00	4.49980 00	4.49980
00	GMUQQ	1	1.40000 00	4.30800 00	1.60400 00	3.85600 00	3.85600
00	GMUQQ1	1	1.40000 00	4.30800 00	3.85600 00	3.85600 00	3.85600
01	DHVLDP	1 1	5.66000+07	1.37560+08	MISSING	MISSING	MISSING
		2	6.12040-01	3.58930 00	3.80000-01	3.80000-01	3.80000-
		3	-6.25700-01	-5.43450 00	0.0	0.0	0.0
		4	3.98800-01	2.32570 00	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	2.73160+02	2.29150+02	0.0	0.0	0.0
		7	6.47100+02	6.06000+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	DHVLB	1	4.06937+07	4.45776+07	MISSING	MISSING	MISSING
	DHVLPO	1 1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1.00000+03		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
00	DHVLTD	1 1	1.79705+01	1.82836+01	MISSING	MISSING	MISSING
		2	1.12520 00	1.13344 00	0.0	0.0	0.0
		3	-1.50638 00	-9.97285-01	0.0	0.0	0.0
		4	8.05450-01	3.30756-01	0.0	0.0	0.0
		5	6.47108+02	6.24000+02	MISSING	MISSING	MISSING
		6	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000
		7	2.45000+02	2.26100+02	0.0	0.0	0.0

		8	6.47108+02	6.24000+02	1.00000+03	1.00000+03		
1.00000+03								
	MUVDIP	1	1	1.70960-08	2.84810-07	MISSING	MISSING	MISSING
			2	1.11460 00	6.71400-01	0.0	0.0	0.0
			3	0.0	2.96470+02	0.0	0.0	0.0
			4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
			5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
			6	2.73160+02	2.29150+02	0.0	0.0	0.0
			7	1.07315+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03								
	MUVPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
			2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
			3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
			4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
			5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03								
	MUVCEB	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
			2	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)							
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	MUVSUT	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	MUVPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	MUVTMLPO	1	1	-3.05557-07	-6.54584-07	MISSING	MISSING
		2	2.87489-08	2.57089-08	0.0	0.0	0.0
		3	1.67256-11	-1.83335-12	0.0	0.0	0.0
		4	-7.75682-15	-1.20731-15	0.0	0.0	0.0
		5	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000
00							
		6	3.25736+02	4.40000+02	0.0	0.0	0.0
		7	1.13971+03	9.20000+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	KVDIP	1	1	6.20410-06	1.53900-04	MISSING	MISSING
		2	1.39730 00	9.82500-01	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	7.04300+02	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	2.73160+02	4.41000+02	0.0	0.0	0.0
		7	1.07315+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	KVPDS	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	KVPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03						
CPLPO	1	1	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	3	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	4	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	6	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	7	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	9	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	10	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	11	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	12	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	CPLIKC	1	1	MISSING	MISSING	MISSING
		2	0.0	0.0	0.0	0.0
		3	0.0	0.0	0.0	0.0
		4	0.0	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	0.0	0.0	0.0	0.0
		7	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	CPLTDECS	1	1	8.54450+04	MISSING	MISSING
		2	2.90437+01	0.0	0.0	0.0
		3	-5.24915-01	0.0	0.0	0.0
		4	9.82826-04	0.0	0.0	0.0
		5	1.00206+03	0.0	0.0	0.0
		6	6.47108+02	MISSING	MISSING	MISSING
		7	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00
00		8	2.73160+02	0.0	0.0	0.0
		9	6.30000+02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	CPLTMLPO	1	1	8.74057+04	MISSING	1.82802+05
7.04917+06		2	-4.66538+01	0.0	-1.24088+02	-2.18617+02 -
2.42858+04		3	-5.97946-02	0.0	8.68409-02	1.21878-01
2.12504+01		4	2.75074-04	0.0	0.0	0.0
		5	0.0	0.0	0.0	0.0
		6	5.00000 00	5.00000 00	5.00000 00	5.00000 00
00		7	2.73160+02	0.0	5.83310+02	6.09000+02
5.53200+02		8	3.73150+02	1.00000+03	7.99911+02	7.99911+02
5.83150+02	KVTMLPO	1	1	5.01966-03	4.20479-04	MISSING
		2	5.67690-06	2.38105-06	0.0	0.0
		3	1.45408-07	1.26788-07	0.0	0.0
		4	-6.30525-11	-5.46999-11	0.0	0.0
		5	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00	4.00000 00
00						

		6	3.25986+02	4.40000+02	0.0	0.0	0.0
		7	9.97678+02	9.20000+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03							
	VLBROC	1 1	5.59472-02	3.87000-01	9.39446-02	9.39446-02	9.39446-
02							
		2	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

CONVENTIONAL COMPONENT - BINARY PARAMETER TABLES

TABLE FOR RKTkJ SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
PROPY-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
ACETO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DIISO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
ISOPR-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
WATER	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DIACE-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
SODIU-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
POTAS-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

SODIU-02	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
PROPY-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
ACETO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DIISO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
ISOPR-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
WATER	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
DIACE-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
SODIU-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
POTAS-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
SODIU-02	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

TABLE FOR ANDKIJ SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR ANDKIJ SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR ANDMIJ SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR ANDMIJ SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MLQKIJ SET = 1 ELEMENT = 1

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MUKIJ SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MUKIJ SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MUKIJ SET = 1 ELEMENT = 3

HYDROGEN		PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MUKIJ SET = 1 ELEMENT = 4

HYDROGEN		PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02	
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MUKIJ SET = 1 ELEMENT = 5

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MUKIJ SET = 1 ELEMENT = 6

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
WATER	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					

DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
SODIU-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
POTAS-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
SODIU-02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
WATER	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
SODIU-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
POTAS-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

SODIU-02 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02
 2.98150+02

TABLE FOR MULIJ SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MULIJ SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MULIJ SET = 1 ELEMENT = 3

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MULIJ SET = 1 ELEMENT = 4

HYDROGEN		PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MULIJ SET = 1 ELEMENT = 5

HYDROGEN		PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR MULIJ SET = 1 ELEMENT = 6

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
WATER	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
SODIU-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
POTAS-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
SODIU-02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
WATER	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					

DIACE-01 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02
 2.98150+02
 SODIU-01 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02
 2.98150+02
 POTAS-01 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02
 2.98150+02
 SODIU-02 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02 2.98150+02
 2.98150+02

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
00	HYDROGEN 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01 0.0	0.0	0.0	0.0	-2.41060
00	DIISO-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01 0.0	0.0	2.44940 00	0.0	0.0
	WATER 0.0	0.0	5.44000-02	0.0	6.82840
00	DIACE-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01 6.39810 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01-1.31150 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER 0.0	6.22380 00	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

DIACE-01	-7.41300-01	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	-8.27815+02	-1.01947+03	-1.72973+03	-
1.51327+03					
PROPY-01	1.70331+03	0.0	4.22635+02	-3.24739+02	
6.45402+02					
ACETO-01	2.56620+03	-2.94132+01	0.0	4.56620+02	
8.22489+02					
DIISO-01	9.46106+03	4.14729+02	7.59716+01	0.0	
4.19808+02					
ISOPR-01	6.51768+03	-4.87834+01	-5.83345+02	4.00040+01	0.0
WATER	6.38345+02	1.26320+03	4.19972+02	1.48416+03	-
1.48346+03					
DIACE-01	3.00000+04	-1.86916+02	-7.59481+02	8.11617+01	-
1.98875+02					
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	-4.49670+02	-2.73248+03	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	7.01138+02	9.16197+02	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	-1.80899+03	8.73660+02	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	7.70566+02	8.56883+02	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	4.26398+02	3.29885+02	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	-1.24574+03	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	1.84223+02	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 3

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01					
PROPY-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01					
ACETO-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01					
DIISO-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01					
ISOPR-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01					

01	WATER	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	DIACE-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	SODIU-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	POTAS-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	SODIU-02	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02	
01	HYDROGEN	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	PROPY-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	ACETO-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	DIISO-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	ISOPR-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	WATER	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	DIACE-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	SODIU-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	POTAS-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-
01	SODIU-02	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-01	3.00000-

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 4
 HYDROGEN PROPY-01 ACETO-01 DIISO-01 ISOPR-01

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 5

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 6

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
--	----------	----------	----------	----------	----------

HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 7

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
2.98150+02	HYDROGEN 0.0	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02	PROPY-01 2.98150+02	0.0	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02	ACETO-01 2.98150+02	2.98150+02	0.0	3.24050+02	
3.38650+02	DIISO-01 2.98150+02	2.98150+02	3.24050+02	0.0	
	ISOPR-01 2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	3.38650+02	0.0
2.98150+02	WATER 2.98150+02	2.98150+02	2.93150+02	3.36150+02	
2.98150+02	DIACE-01 2.98150+02	2.98150+02	3.29150+02	2.98150+02	
	SODIU-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN 2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01 2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01 2.93150+02	3.29150+02	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01 3.36150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01 2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	WATER 0.0	3.11350+02	0.0	0.0	0.0
	DIACE-01 3.11350+02	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR NRTL SET = 1 ELEMENT = 8

HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
----------	----------	----------	----------	----------

2.98150+02	HYDROGEN	1.00000+03	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02	PROPY-01	2.98150+02	1.00000+03	2.98150+02	2.98150+02	
3.55450+02	ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	3.35050+02	
3.55550+02	DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	3.35050+02	1.00000+03	
1.00000+03	ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	3.55450+02	3.55550+02	
3.73150+02	WATER	2.98150+02	2.98150+02	3.68250+02	3.73150+02	
2.98150+02	DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	4.37150+02	2.98150+02	
1.00000+03	SODIU-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	POTAS-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	SODIU-02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
	WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
1.00000+03	HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	ACETO-01	3.68250+02	4.37150+02	1.00000+03	1.00000+03	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

DIISO-01	3.73150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
ISOPR-01	3.73150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
WATER	1.00000+03	3.82250+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
DIACE-01	3.82250+02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
SODIU-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
POTAS-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
SODIU-02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				

TABLE FOR WILSON SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
00	HYDROGEN 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01 0.0	0.0	0.0	0.0	-1.50600
01	DIISO-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01 0.0	0.0	1.61700 00	0.0	0.0
	WATER 0.0	0.0	2.26590 00	0.0	1.37200-
	DIACE-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01-8.51450 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01-6.03200 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER 0.0	5.24900-01	0.0	0.0	0.0
	DIACE-01-7.07160 00	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR WILSON SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
5.68784+02	HYDROGEN 0.0	4.10897+02	4.65472+02	6.31997+02	
3.56897+01	PROPY-01-3.63847+02	0.0	-7.71857+01	-4.21864+02	-

	ACETO-01	-2.96962+02	-4.29218+02	0.0		-1.34546+02
3.01609+02						
	DIISO-01	-4.56068+02	2.77223+02	-4.40770+02	0.0	-
1.11993+02						
	ISOPR-01	-2.06655+02	-5.60528+02	-6.00761+02	-3.72202+02	0.0
	WATER	-2.03963+02	-7.60759+02	-1.04438+03	-9.61313+02	-
1.83040+02						
	DIACE-01	-3.03399+02	-8.10787+02	-1.61398+03	-8.05048+02	-
2.56294+02						
	SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN	2.16335+02	7.19835+02	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01	-1.33456+03	1.00978+02	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01	2.26505+03	6.14383+02	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01	-1.89106+03	-1.64850+02	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01	1.29469+03	1.34104+02	0.0	0.0	0.0
	WATER	0.0	-2.55185+02	0.0	0.0	0.0
	DIACE-01	1.62659+03	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

TABLE FOR WILSON SET = 1 ELEMENT = 3

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR WILSON SET = 1 ELEMENT = 4

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR WILSON SET = 1 ELEMENT = 5					
	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
	HYDROGEN 0.0	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
	PROPY-01 2.98150+02	0.0	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
	ACETO-01 2.98150+02	2.98150+02	0.0	3.24050+02	
2.98150+02					
	DIISO-01 2.98150+02	2.98150+02	3.24050+02	0.0	
3.38650+02					

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	3.38650+02	0.0
WATER	2.98150+02	2.98150+02	2.93150+02	3.36150+02	
2.98150+02					
DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	3.29150+02	2.98150+02	
2.98150+02					
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	2.93150+02	3.29150+02	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	3.36150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	3.11350+02	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	3.11350+02	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR WILSON SET = 1 ELEMENT = 6

HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	1.00000+03	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02
2.98150+02				
PROPY-01	2.98150+02	1.00000+03	2.98150+02	2.98150+02
2.98150+02				
ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	3.35050+02
3.55450+02				
DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	3.35050+02	1.00000+03
3.55550+02				
ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	3.55450+02	3.55550+02
1.00000+03				
WATER	2.98150+02	2.98150+02	5.03150+02	3.73150+02
4.17760+02				
DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	4.37150+02	2.98150+02
2.98150+02				
SODIU-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
POTAS-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
SODIU-02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				

ACETO-01	5.03150+02	4.37150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
DIISO-01	3.73150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
ISOPR-01	4.17760+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
WATER	1.00000+03	3.82250+02	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
DIACE-01	3.82250+02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
SODIU-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
POTAS-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				
SODIU-02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03				

TABLE FOR WILSON SET = 1 ELEMENT = 7

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR UNIQ SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
00	HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01	0.0	0.0	0.0	2.70880
00	DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01	0.0	-3.45300 00	0.0	0.0
00	WATER	0.0	-4.83380 00	0.0	-3.31270
	DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01	8.60510 00	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01	2.92340 00	0.0	0.0	0.0
	WATER	0.0	-6.08700-01	0.0	0.0
	DIACE-01	1.00630 00	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR UNIQ SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
1.34045+02	HYDROGEN	0.0	3.55764+01	8.22834+01	1.06570+02
2.73092+02	PROPY-01	-2.50275+01	0.0	-1.87059+02	2.00666+01 -
8.28877+02	ACETO-01	-1.02573+01	1.49791+01	0.0	-1.25639+01 -
3.53648+02	DIISO-01	-8.47299+01	-3.44406+01	-1.68730+02	0.0 -
	ISOPR-01	1.33004+02	3.28648+01	9.47673+02	1.29099+02 0.0

1.04558+03	WATER	3.61499+01	-4.04090+02	1.61220+03	-2.95920+01	
1.33988+01	DIACE-01	9.32053+01	3.60484+01	2.56660+02	8.71903+01	
	SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN	-3.80945+01	1.23421+02	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01	-4.23800+02	-2.25935+02	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01	-3.12258+03	-2.22066+02	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01	-7.74712+02	-3.17286+02	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01	-1.11167+03	-4.49401+01	0.0	0.0	0.0
	WATER	0.0	3.77428+02	0.0	0.0	0.0
	DIACE-01	-8.69320+02	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR UNIQ SET = 1 ELEMENT = 3

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR UNIQ SET = 1 ELEMENT = 4

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR UNIQ SET = 1 ELEMENT = 5

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
	HYDROGEN 0.0	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	

2.98150+02

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

2.98150+02	PROPY-01	2.98150+02	0.0	2.98150+02	2.98150+02	
2.98150+02	ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	0.0	3.24050+02	
2.98150+02	DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	3.24050+02	0.0	
3.38650+02	ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02	3.38650+02	0.0
2.98150+02	WATER	2.98150+02	2.98150+02	2.93150+02	3.36150+02	
2.98150+02	DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	3.29150+02	2.98150+02	
2.98150+02	SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN	2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	PROPY-01	2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	ACETO-01	2.93150+02	3.29150+02	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01	3.36150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	0.0	0.0	0.0
	WATER	0.0	3.11350+02	0.0	0.0	0.0
	DIACE-01	3.11350+02	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR UNIQ SET = 1 ELEMENT = 6

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
2.98150+02	HYDROGEN	1.00000+03	2.98150+02	2.98150+02	2.98150+02
2.98150+02	PROPY-01	2.98150+02	1.00000+03	2.98150+02	2.98150+02
2.98150+02	ACETO-01	2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	3.35050+02
3.55450+02	DIISO-01	2.98150+02	2.98150+02	3.35050+02	1.00000+03
3.55550+02	ISOPR-01	2.98150+02	2.98150+02	3.55450+02	3.55550+02
1.00000+03	WATER	2.98150+02	2.98150+02	3.68250+02	3.73150+02
3.73150+02	DIACE-01	2.98150+02	2.98150+02	4.37150+02	2.98150+02
2.98150+02	SODIU-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	POTAS-01	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03	SODIU-02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03
1.00000+03					

	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
1.00000+03	HYDROGEN 2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	PROPY-01 2.98150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	ACETO-01 3.68250+02	4.37150+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	DIISO-01 3.73150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	ISOPR-01 3.73150+02	2.98150+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	WATER 1.00000+03	3.82250+02	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	DIACE-01 3.82250+02	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	SODIU-01 1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	POTAS-01 1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	
1.00000+03	SODIU-02 1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	1.00000+03	

TABLE FOR UNIQ SET = 1 ELEMENT = 7

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR HENRY SET = 1 ELEMENT = 1

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
	HYDROGEN	MISSING	3.18517+01	MISSING	MISSING
2.36526+01	PROPY-01	MISSING	MISSING	MISSING	
	ACETO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	DIISO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	ISOPR-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	WATER	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	DIACE-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	SODIU-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	POTAS-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	SODIU-02	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
	HYDROGEN	1.91579+02	MISSING	MISSING	MISSING
	PROPY-01	3.10686+02	MISSING	MISSING	MISSING
	ACETO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	DIISO-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	ISOPR-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	WATER	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	DIACE-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	SODIU-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	POTAS-01	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING
	SODIU-02	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING

TABLE FOR HENRY SET = 1 ELEMENT = 2

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
	HYDROGEN	0.0	4.69550+01	0.0	0.0
2.40190+03	PROPY-01	0.0	0.0	0.0	-
	ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	0.0	0.0	0.0	0.0

DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN-6.99351+03	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01-1.55674+04	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR HENRY SET = 1 ELEMENT = 3

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	-2.21340 00	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	-2.63119+01	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	-4.17376+01	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR HENRY SET = 1 ELEMENT = 4

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	7.89000-04	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	1.50431-02	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

TABLE FOR HENRY SET = 1 ELEMENT = 5

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	1.91250+02	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	
2.93150+02					
ACETO-01	1.91250+02	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	2.93150+02	0.0	0.0	0.0
WATER	2.74000+02	2.94000+02	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	2.74000+02	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	2.94000+02	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR HENRY SET = 1 ELEMENT = 6

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	2.00000+03	2.00000+03	3.13150+02	2.00000+03	
2.00000+03					
PROPY-01	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
3.33150+02					
ACETO-01	3.13150+02	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					
DIISO-01	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					
ISOPR-01	2.00000+03	3.33150+02	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					
WATER	3.39000+02	3.78000+02	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					
DIACE-01	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					
SODIU-01	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					
POTAS-01	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					
SODIU-02	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03					

	WATER	DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
2.00000+03	HYDROGEN 3.39000+02	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	PROPY-01 3.78000+02	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	ACETO-01 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	DIISO-01 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	ISOPR-01 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	WATER 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	DIACE-01 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	SODIU-01 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	POTAS-01 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	
2.00000+03	SODIU-02 2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	2.00000+03	

TABLE FOR HENRY SET = 1 ELEMENT = 7

	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER		DIACE-01	SODIU-01	POTAS-01	SODIU-02
HYDROGEN	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
PROPY-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ACETO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIISO-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
ISOPR-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
WATER	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
DIACE-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

UNIFAC GROUPS - UNARY PARAMETER TABLE

PARAMETER	COMPONENTS					
NAME/SET/EL	3810	1015	1070	1405	1005	
01 GMUFR 1	4.16000-01	9.01100-01	1.34540 00	1.67240 00	4.46900-	
01 GMUFR 2	4.16000-01	9.01100-01	1.34540 00	1.67240 00	4.46900-	
01 GMUFQ 1	5.71000-01	8.48000-01	1.17600 00	1.48800 00	2.28000-	
01 GMUFQ 2	5.71000-01	8.48000-01	1.17600 00	1.48800 00	2.28000-	
01 GMUFLR 1	4.16000-01	9.01100-01	1.34540 00	1.67240 00	4.46900-	
01 GMUFLQ 1	5.70500-01	8.48000-01	1.17600 00	1.48800 00	2.28000-	
01 GMUFDR 1	4.16000-01	6.32500-01	1.28320 00	1.70480 00	6.32500-	
01 GMUFDQ 1	5.71000-01	1.06080 00	1.60160 00	1.67000 00	3.55400-	

PARAMETER	COMPONENTS					
NAME/SET/EL	1605	1200	3050	1300	1000	
01 GMUFR 1	6.90800-01	1.00000 00	3.24910 00	9.20000-01	2.19500-	
01 GMUFR 2	6.90800-01	1.00000 00	3.24910 00	9.20000-01	2.19500-	
GMUFQ 1	4.68000-01	1.20000 00	3.12400 00	1.40000 00	0.0	
GMUFQ 2	4.68000-01	1.20000 00	3.12400 00	1.40000 00	0.0	

01	GMUFLR	1	6.90800-01	1.00000 00	MISSING	9.20000-01	2.19500-
	GMUFLQ	1	6.50000-01	1.20000 00	MISSING	1.40000 00	0.0
	GMUFDR	1	1.14340 00	1.23020 00	MISSING	1.73340 00	6.32500-
01	GMUFDQ	1	8.96800-01	8.92700-01	MISSING	2.45610 00	0.0

PARAMETER		COMPONENTS		
NAME/SET/EL		1010	1210	1220
GMUFR	1	6.74400-01	MISSING	MISSING
GMUFR	2	6.74400-01	MISSING	MISSING
GMUFQ	1	5.40000-01	MISSING	MISSING
GMUFQ	2	5.40000-01	MISSING	MISSING
GMUFLR	1	6.74400-01	MISSING	MISSING
GMUFLQ	1	5.40000-01	MISSING	MISSING
GMUFDR	1	6.32500-01	1.06300 00	6.89500-01
GMUFDQ	1	7.08100-01	8.66300-01	8.34500-01

UNIFAC GROUPS - BINARY PARAMETER TABLES

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

TABLE FOR GMUFB		SET = 1 ELEMENT = 1				
		3810	1015	1070	1405	1005
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	0.0	0.0	8.60200+01	4.76400+02	0.0
3.53600+01	1070	0.0	-3.53600+01	0.0	1.82600+02	-
	1405	0.0	2.67600+01	4.29200+01	0.0	
2.67600+01	1005	0.0	0.0	8.60200+01	4.76400+02	0.0
	1605	0.0	8.33600+01	2.65100+01	1.91100+02	
8.33600+01	1200	0.0	1.56400+02	4.57000+02	8.40000+01	
1.56400+02	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1300	0.0	3.00000+02	4.96100+02	-1.95400+02	
3.00000+02	1000	0.0	0.0	8.60200+01	4.76400+02	0.0
	1010	0.0	0.0	8.60200+01	4.76400+02	0.0
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		1605	1200	3050	1300	1000
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	2.51500+02	9.86500+02	0.0	1.31800+03	0.0
3.53600+01	1070	2.14500+02	5.24100+02	0.0	2.70600+02	-
	1405	-1.03600+02	1.64500+02	0.0	4.72500+02	
2.67600+01	1005	2.51500+02	9.86500+02	0.0	1.31800+03	0.0
	1605	0.0	2.37700+02	0.0	-3.14700+02	
8.33600+01	1200	2.80600+01	0.0	0.0	3.53500+02	
1.56400+02	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1300	5.40500+02	-2.29100+02	0.0	0.0	
3.00000+02	1000	2.51500+02	9.86500+02	0.0	1.31800+03	0.0
	1010	2.51500+02	9.86500+02	0.0	1.31800+03	0.0
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		1010	1210	1220		
	3810	0.0	0.0	0.0		
	1015	0.0	0.0	0.0		
	1070	-3.53600+01	0.0	0.0		
	1405	2.67600+01	0.0	0.0		
	1005	0.0	0.0	0.0		
	1605	8.33600+01	0.0	0.0		
	1200	1.56400+02	0.0	0.0		

3050	0.0	0.0	0.0
1300	3.00000+02	0.0	0.0
1000	0.0	0.0	0.0
1010	0.0	0.0	0.0
1210	0.0	0.0	0.0
1220	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR GMUFB SET = 2 ELEMENT = 1

	3810	1015	1070	1405	1005
	3810 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015 0.0	0.0	7.45400+01	4.72600+02	0.0
2.92300+02	1070 0.0	2.92300+02	0.0	3.43700+02	
6.65600+01	1405 0.0	6.65600+01	3.06100+02	0.0	
	1005 0.0	0.0	7.45400+01	4.72600+02	0.0
1.57100+03	1605 0.0	1.57100+03	2.65100+01	1.91100+02	
3.28200+02	1200 0.0	3.28200+02	4.70700+02	6.70700+01	
1.31900+02	3050 0.0	-1.31900+02	-1.35700+02	3.53800+02	-

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER	VALUES (CONTINUED)					
3.42400+02	1300	0.0	3.42400+02	2.20600+02	-1.71800+02	
	1000	0.0	0.0	7.45400+01	4.72600+02	0.0
	1010	0.0	0.0	7.45400+01	4.72600+02	0.0
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1605		1200	3050	1300	1000
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	6.62100+02	6.44600+02	3.10700+02	1.30000+03	0.0
	1070	2.14500+02	7.24400+02	1.73100+03	8.96000+02	
2.92300+02	1405	-1.03600+02	2.16000+02	-1.27600+02	6.34800+02	
6.65600+01	1005	6.62100+02	6.44600+02	3.10700+02	1.30000+03	0.0
	1605	0.0	1.37100+02	-2.18100+02	2.12800+02	
1.57100+03	1200	2.62500+02	0.0	9.91300+02	2.87300+01	
3.28200+02	3050	1.97000+03	-2.68800+02	0.0	5.89000	00 -
1.31900+02	1300	6.44200+01	-1.22400+02	1.04900+02	0.0	
3.42400+02	1000	6.62100+02	6.44600+02	3.10700+02	1.30000+03	0.0
	1010	6.62100+02	6.44600+02	3.10700+02	1.30000+03	0.0
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1010		1210	1220		
	3810	0.0	0.0	0.0		
	1015	0.0	0.0	0.0		
	1070	2.92300+02	0.0	0.0		
	1405	6.65600+01	0.0	0.0		
	1005	0.0	0.0	0.0		
	1605	1.57100+03	0.0	0.0		
	1200	3.28200+02	0.0	0.0		
	3050	-1.31900+02	0.0	0.0		
	1300	3.42400+02	0.0	0.0		
	1000	0.0	0.0	0.0		
	1010	0.0	0.0	0.0		
	1210	0.0	0.0	0.0		
	1220	0.0	0.0	0.0		

TABLE FOR UNIFLB SET = 1 ELEMENT = 1

	3810	1015	1070	1405	1005
3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1015	0.0	0.0	7.64600+01	4.14000+02	0.0
1070	0.0	-4.64500+01	0.0	5.77500+02	-

4.64500+01

7.19300+01	1405 0.0	7.19300+01	-1.44300+02	0.0		
	1005 0.0	0.0	7.64600+01	4.14000+02	0.0	
	1605 0.0	3.69900+02	-1.72300+01	1.60400+02		
3.69900+02						
	1200 0.0	6.37500+02	7.94700+02	1.61000+02		
6.37500+02						
	3050 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	1300 0.0	4.10700+02	5.64400+02	4.02000+01		
4.10700+02						
	1000 0.0	0.0	7.64600+01	4.14000+02	0.0	
	1010 0.0	0.0	7.64600+01	4.14000+02	0.0	
	1210 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	1220 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	1605	1200	3050	1300	1000	
	3810 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	1015 2.30500+02	9.72800+02	0.0	1.85700+03	0.0	
	1070 3.21600+02	6.33500+02	0.0	1.04900+03	-	
4.64500+01						
	1405 -4.80000+01	1.79600+02	0.0	2.72400+02		
7.19300+01						
	1005 2.30500+02	9.72800+02	0.0	1.85700+03	0.0	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

	1605	0.0	1.37100+02	0.0	1.83100+02	
3.69900+02						
	1200	2.27000+02	0.0	0.0	1.55600+02	
6.37500+02						
	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1300	1.95400+01	-4.71500+01	0.0	0.0	
4.10700+02						
	1000	2.30500+02	9.72800+02	0.0	1.85700+03	0.0
	1010	2.30500+02	9.72800+02	0.0	1.85700+03	0.0
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		1010	1210	1220		
	3810	0.0	0.0	0.0		
	1015	0.0	0.0	0.0		
	1070	-4.64500+01	0.0	0.0		
	1405	7.19300+01	0.0	0.0		
	1005	0.0	0.0	0.0		
	1605	3.69900+02	0.0	0.0		
	1200	6.37500+02	0.0	0.0		
	3050	0.0	0.0	0.0		
	1300	4.10700+02	0.0	0.0		
	1000	0.0	0.0	0.0		
	1010	0.0	0.0	0.0		
	1210	0.0	0.0	0.0		
	1220	0.0	0.0	0.0		

TABLE FOR UNIFLB SET = 1 ELEMENT = 2

	3810	1015	1070	1405	1005
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	0.0	-1.83400-01	-5.16500-01	0.0
01	1070	0.0	-1.81700-01	0.0	-1.81700-
01	1405	0.0	-7.96000-01	0.0	-7.96000-
	1005	0.0	0.0	-1.83400-01	-5.16500-01
00	1605	0.0	-1.54200 00	-1.64800 00	5.48400-01
00	1200	0.0	-5.83200 00	0.0	7.50100-01
	3050	0.0	0.0	0.0	0.0
00	1300	0.0	2.86800 00	0.0	1.66800 00
	1000	0.0	0.0	-1.83400-01	-5.16500-01
	1010	0.0	0.0	-1.83400-01	-5.16500-01
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0
		1605	1200	3050	1300
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0
					1000

	1015	-1.32800 00	2.68700-01	0.0	-3.32200 00	0.0
01	1070	4.55100 00	0.0	0.0	-3.30500 00	-1.81700-
	1405	-5.09700-01	-1.28500 00	0.0	-1.84200 00	-7.96000-
01						
	1005	-1.32800 00	2.68700-01	0.0	-3.32200 00	0.0
	1605	0.0	-1.11500 00	0.0	-2.50700 00	-1.54200
00						
	1200	1.36400 00	0.0	0.0	3.76100-01	-5.83200
00						
	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1300	1.29300 00	-4.94700-01	0.0	0.0	2.86800
00						
	1000	-1.32800 00	2.68700-01	0.0	-3.32200 00	0.0
	1010	-1.32800 00	2.68700-01	0.0	-3.32200 00	0.0
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		1010	1210	1220		
	3810	0.0	0.0	0.0		
	1015	0.0	0.0	0.0		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

1070	-1.81700-01	0.0	0.0
1405	-7.96000-01	0.0	0.0
1005	0.0	0.0	0.0
1605	-1.54200 00	0.0	0.0
1200	-5.83200 00	0.0	0.0
3050	0.0	0.0	0.0
1300	2.86800 00	0.0	0.0
1000	0.0	0.0	0.0
1010	0.0	0.0	0.0
1210	0.0	0.0	0.0
1220	0.0	0.0	0.0

TABLE FOR UNIFL B SET = 1 ELEMENT = 3

		3810	1015	1070	1405	1005
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	0.0	0.0	-3.65900-01	1.80300 00	0.0
01	1070	0.0	-4.88800-01	0.0	0.0	-4.88800-
00	1405	0.0	-2.91600 00	0.0	0.0	-2.91600
	1005	0.0	0.0	-3.65900-01	1.80300 00	0.0
00	1605	0.0	-3.22800 00	0.0	0.0	-3.22800
01	1200	0.0	-8.70300-01	0.0	9.00000 00	-8.70300-
	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
00	1300	0.0	9.00000 00	0.0	-1.99400 00	9.00000
	1000	0.0	0.0	-3.65900-01	1.80300 00	0.0
	1010	0.0	0.0	-3.65900-01	1.80300 00	0.0
	1210	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1220	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
		1605	1200	3050	1300	1000
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	-2.47600 00	8.77300 00	0.0	-9.00000 00	0.0
01	1070	0.0	0.0	0.0	0.0	-4.88800-
00	1405	0.0	4.00700 00	0.0	3.30300-01	-2.91600
	1005	-2.47600 00	8.77300 00	0.0	-9.00000 00	0.0
00	1605	0.0	4.43800 00	0.0	0.0	-3.22800
01	1200	3.32400 00	0.0	0.0	-9.00000 00	-8.70300-
	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
00	1300	-8.85000 00	8.65000 00	0.0	0.0	9.00000
	1000	-2.47600 00	8.77300 00	0.0	-9.00000 00	0.0

1010-2.47600 00	8.77300 00	0.0	-9.00000 00	0.0
1210 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1220 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1010	1210	1220		
3810 0.0	0.0	0.0		
1015 0.0	0.0	0.0		
1070-4.88800-01	0.0	0.0		
1405-2.91600 00	0.0	0.0		
1005 0.0	0.0	0.0		
1605-3.22800 00	0.0	0.0		
1200-8.70300-01	0.0	0.0		
3050 0.0	0.0	0.0		
1300 9.00000 00	0.0	0.0		
1000 0.0	0.0	0.0		
1010 0.0	0.0	0.0		
1210 0.0	0.0	0.0		
1220 0.0	0.0	0.0		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

TABLE FOR UNIFDM		SET = 1 ELEMENT = 1				
		3810	1015	1070	1405	1005
	3810 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015 0.0	0.0	1.89660+02	4.33600+02	0.0	0.0
9.54180+01	1070 0.0	-9.54180+01	0.0	1.79800+02	-	
	1405 0.0	1.99000+02	9.18110+01	0.0		
1.99000+02						
	1005 0.0	0.0	1.89660+02	4.33600+02	0.0	
	1605 0.0	-9.65400 00	-8.44300+02	6.95800+02	-9.65400	
00						
	1200 0.0	1.60600+03	1.56600+03	-2.50000+02		
1.60600+03						
	3050 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	1300 0.0	-1.72530+01	-1.30100+03	1.90500+02	-	
1.72530+01						
	1000 0.0	0.0	1.89660+02	4.33600+02	0.0	
	1010 0.0	0.0	1.89660+02	4.33600+02	0.0	
	1210 0.0	1.60600+03	1.56600+03	-2.50000+02		
1.60600+03						
	1220 0.0	1.60600+03	1.56600+03	-2.50000+02		
1.60600+03						
		1605	1200	3050	1300	1000
	3810 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015 2.33100+02	2.77700+03	0.0	1.39130+03	0.0	
9.54180+01	1070 7.33300+02	2.64900+03	0.0	7.78300+02	-	
	1405 3.64500+03	6.53300+02	0.0	7.70600+02		
1.99000+02						
	1005 2.33100+02	2.77700+03	0.0	1.39130+03	0.0	
	1605 0.0	6.50900+02	0.0	4.33207+02	-9.65400	
00						
	1200 8.16700+02	0.0	0.0	-8.01900+02		
1.60600+03						
	3050 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	
	1300 1.77665+02	1.46000+03	0.0	0.0	-	
1.72530+01						
	1000 2.33100+02	2.77700+03	0.0	1.39130+03	0.0	
	1010 2.33100+02	2.77700+03	0.0	1.39130+03	0.0	
	1210 8.16700+02	0.0	0.0	-8.01900+02		
1.60600+03						
	1220 8.16700+02	0.0	0.0	-8.01900+02		
1.60600+03						
		1010	1210	1220		
	3810 0.0	0.0	0.0			
	1015 0.0	2.77700+03	2.77700+03			
	1070 -9.54180+01	2.64900+03	2.64900+03			

1405	1.99000+02	6.53300+02	6.53300+02
1005	0.0	2.77700+03	2.77700+03
1605	-9.65400 00	6.50900+02	6.50900+02
1200	1.60600+03	0.0	0.0
3050	0.0	0.0	0.0
1300	-1.72530+01	1.46000+03	1.46000+03
1000	0.0	2.77700+03	2.77700+03
1010	0.0	2.77700+03	2.77700+03
1210	1.60600+03	0.0	0.0
1220	1.60600+03	0.0	0.0

TABLE FOR UNIFDM SET = 1 ELEMENT = 2

	3810	1015	1070	1405	1005
	3810 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015 0.0	0.0	-2.72320-01	1.47300-01	0.0
02	1070 0.0	6.17080-02	0.0	6.99110-01	6.17080-
01	1405 0.0	-8.70900-01	-7.17150-01	0.0	-8.70900-
	1005 0.0	0.0	-2.72320-01	1.47300-01	0.0
02	1605 0.0	-3.24200-02	2.94500 00	-9.61900-01	-3.24200-
00	1200 0.0	-4.74600 00	-5.80900 00	2.85700 00	-4.74600
	3050 0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)

01	1300	0.0	8.38900-01	4.07200 00	-3.66900 00	8.38900-
	1000	0.0	0.0	-2.72320-01	1.47300-01	0.0
	1010	0.0	0.0	-2.72320-01	1.47300-01	0.0
	1210	0.0	-4.74600 00	-5.80900 00	2.85700 00	-4.74600
00	1220	0.0	-4.74600 00	-5.80900 00	2.85700 00	-4.74600
00						
		1605	1200	3050	1300	1000
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	-3.15500-01	-4.67400 00	0.0	-3.61560 00	0.0
	1070	-2.50900 00	-6.50800 00	0.0	1.48200-01	6.17080-
02	1405	-2.69100+01	-1.41200 00	0.0	-5.87300-01	-8.70900-
01	1005	-3.15500-01	-4.67400 00	0.0	-3.61560 00	0.0
	1605	0.0	-7.13200-01	0.0	-6.05276-01	-3.24200-
02	1200	-5.09200 00	0.0	0.0	3.82400 00	-4.74600
00	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1300	-3.72906 00	-8.67300 00	0.0	0.0	8.38900-
01	1000	-3.15500-01	-4.67400 00	0.0	-3.61560 00	0.0
	1010	-3.15500-01	-4.67400 00	0.0	-3.61560 00	0.0
	1210	-5.09200 00	0.0	0.0	3.82400 00	-4.74600
00	1220	-5.09200 00	0.0	0.0	3.82400 00	-4.74600
00						
		1010	1210	1220		
	3810	0.0	0.0	0.0		
	1015	0.0	-4.67400 00	-4.67400 00		
	1070	6.17080-02	-6.50800 00	-6.50800 00		
	1405	-8.70900-01	-1.41200 00	-1.41200 00		
	1005	0.0	-4.67400 00	-4.67400 00		
	1605	-3.24200-02	-7.13200-01	-7.13200-01		
	1200	-4.74600 00	0.0	0.0		
	3050	0.0	0.0	0.0		
	1300	8.38900-01	-8.67300 00	-8.67300 00		
	1000	0.0	-4.67400 00	-4.67400 00		
	1010	0.0	-4.67400 00	-4.67400 00		
	1210	-4.74600 00	0.0	0.0		
	1220	-4.74600 00	0.0	0.0		

TABLE FOR UNIFDM SET = 1 ELEMENT = 3

	3810	1015	1070	1405	1005
3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
1015	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

	1070	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1405	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1005	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1605	0.0	0.0	0.0	-2.46200-03	0.0
04	1200	0.0	9.18100-04	5.19700-03	-6.02200-03	9.18100-
	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
04	1300	0.0	9.02100-04	0.0	8.83800-03	9.02100-
	1000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1010	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
04	1210	0.0	9.18100-04	5.19700-03	-6.02200-03	9.18100-
04	1220	0.0	9.18100-04	5.19700-03	-6.02200-03	9.18100-
		1605	1200	3050	1300	1000
	3810	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1015	0.0	1.55100-03	0.0	1.14400-03	0.0
	1070	0.0	4.82200-03	0.0	0.0	0.0
	1405	4.75700-02	9.54000-04	0.0	-3.25200-03	0.0
	1005	0.0	1.55100-03	0.0	1.14400-03	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PARAMETER VALUES (CONTINUED)						
	1605	0.0	8.15000-04	0.0	-9.14000-04	0.0
	1200	6.06500-03	0.0	0.0	-7.51400-03	9.18100-
04						
	3050	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
	1300	1.07630-02	1.64100-02	0.0	0.0	9.02100-
04						
	1000	0.0	1.55100-03	0.0	1.14400-03	0.0
	1010	0.0	1.55100-03	0.0	1.14400-03	0.0
	1210	6.06500-03	0.0	0.0	-7.51400-03	9.18100-
04						
	1220	6.06500-03	0.0	0.0	-7.51400-03	9.18100-
04						
		1010	1210	1220		
	3810	0.0	0.0	0.0		
	1015	0.0	1.55100-03	1.55100-03		
	1070	0.0	4.82200-03	4.82200-03		
	1405	0.0	9.54000-04	9.54000-04		
	1005	0.0	1.55100-03	1.55100-03		
	1605	0.0	8.15000-04	8.15000-04		
	1200	9.18100-04	0.0	0.0		
	3050	0.0	0.0	0.0		
	1300	9.02100-04	1.64100-02	1.64100-02		
	1000	0.0	1.55100-03	1.55100-03		
	1010	0.0	1.55100-03	1.55100-03		
	1210	9.18100-04	0.0	0.0		
	1220	9.18100-04	0.0	0.0		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS

PARAMETERS ACTUALLY USED IN THE SIMULATION

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: HYDROGEN
FORMULA: H2 NAME: H2

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE	SET NAME	DESCRIPTIONS NO.	VALUE	UNITS
PURE37	API	1 STANDARD API GRAVITY	340.00	
AQUEOUS	CHARGE	1 IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	CHI	1 STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT	CMPCCLASS1	COMPONENT CLASS INDEX	100.00	
PURE37	DCPLS	1 DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	6.8922	KJ/KMOL-K
PURE37	DGFORM	1 IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DEFAULT	DGSFRM	1 SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
AQUEOUS	DHAQFM	1 AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	-4200.0	KJ/KMOL
PURE37	DHFORM	1 IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL

DHSFRM DEFAULT	1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DHVLB PURE37	1	ENTHALPY OF VAPORIZATION AT TB	896.54	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	
FREEZEPT1 PURE37			-259.20	C
GMUQQ PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	0.57200	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	0.57200	
GMUQR PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	0.41661	
HCOM PURE37	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	-0.24182E+06	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	117.10	KJ/KMOL
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	0.0000	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	2.0159	
OMEGA PURE37	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	-0.21599	
PC PURE37	1	CRITICAL PRESSURE	13.130	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA PURE37	1	RACKETT PARAMETER	0.32100	
S025E AQUEOUS	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	31.212	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	0.30000	

TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	-252.76	C
TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	-239.96	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	-259.20	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	28.568	CC/MOL
VC PURE37	1	CRITICAL VOLUME	64.147	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	64.147	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
VLSTD PURE37	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	53.558	CC/MOL
ZC PURE37	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.30500	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIGDP DIPPR ideal gas heat capacity
$$\text{CPIGDP} = A + B(C/T/\text{SINH}(C/T))^2 + D(E/T/\text{COSH}(E/T))^2$$
TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K
SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 27.6170
B = 9.56000
C = 2466.00
D = 3.76000
E = 567.600
T RANGE = 250.00 TO 1500.00 K

CPSDIP DIPPR solid heat capacity
$$\text{CPSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$
TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K
SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 5.73000
B = 0.00000
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -259.20 TO -259.20 C

DHVLDP DIPPR heat of vaporization

DHVLDP = A(1 - Tr)^(B + CTr + DTr^2 + ETr^3) where Tr =
T/Tc

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 1012.70
B = 0.698000
C = -1.81700
D = 1.44700
E = 0.00000
T RANGE = -259.20 TO -239.96 C

DNLDIP DIPPR liquid density

$$\text{DNLDIP} = A / (B^{(1 + (1 - T/C)^D)})$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 5.41400
B = 0.348930
C = 33.1900
D = 0.270600
E = 0.00000
T RANGE = 13.95 TO 33.19 K

KLDIP DIPPR liquid thermal conductivity

$$\text{KLDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 412.561
B = 6.39030
C = 0.368397E-01
D = 0.935803E-04
E = 0.882717E-07
T RANGE = -259.20 TO -242.15 C

KVDIP DIPPR vapor thermal conductivity

$$\text{KVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.228117E-02
B = 0.745200
C = 12.0000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 22.00 TO 1600.00 K

MULDIP DIPPR liquid viscosity
 $\text{LN(MULDIP)} = A + B/T + C \text{ LN}(T) + DT^E$
TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = -4.75324
B = 24.7000
C = -0.261000
D = -0.410000E-15
E = 10.0000
T RANGE = 13.95 TO 33.00 K

MUVDIP DIPPR vapor viscosity
 $\text{MUVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$
TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.179700E-03
B = 0.685000
C = -0.590000
D = 140.000
E = 0.00000
T RANGE = 13.95 TO 3000.00 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE
 $\text{LN(PL)} = A + B/(T + C) + DT + E \text{ LN}(T) + FT^G$
TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 1.17707
B = -94.8960
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 1.11250
F = 0.329150E-03
G = 2.00000
T RANGE = 13.95 TO 33.19 K

PSXANT EXTENDED SOLID ANTOINE VAPOR PRE

$$\ln(\text{PS}) = A + B/(T + C) + D \ln(T) + ET^F + G/T^2$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 35.1621
B = -201.620
C = 0.00000
D = -9.64140
E = 0.106490E-01
F = 2.00000
G = 0.00000
T RANGE = 11.71 TO 14.11 K

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

T/Tc

$$\text{SIGDIP} = A(1 - \text{Tr})^{(B + C\text{Tr} + D\text{Tr}^2 + E\text{Tr}^3)} \text{ where Tr} =$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 5.34500
B = 1.06460
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -259.20 TO -239.96 C

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: AQUEOUS

A = 64.9115

B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$\text{LN}(X\text{WSOL}) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = -5.30000

B = -500.000

C = 0.00000

T RANGE = 200.00 TO 373.00

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 1.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 2.00000

UFGRP UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER NUMBER OF OCCURENCES

3810.00 1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

GROUP NUMBER NUMBER OF OCCURENCES

3810.00 1.00000

UFGRPD DORTMUND-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
3810.00	1.00000

UFGRPL LYNGBY-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
3810.00	1.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: PROPY-01
FORMULA: C3H6-2 NAME: C3H6-2

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
PURE37	1	STANDARD API GRAVITY	139.60	
AQUEOUS	1	IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT		COMPONENT CLASS INDEX	220.00	
PURE37	1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	29.302	KJ/KMOL-K
PURE37	1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	62640.	KJ/KMOL
DEFAULT	1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DEFAULT	1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	20230.	KJ/KMOL
DEFAULT	1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL

DHVLB PURE37	1	ENTHALPY OF VAPORIZATION AT TB	18732.	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	
FREEZEPT1 PURE37			-185.25	C
GMUQQ PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	2.0240	
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	2.0240	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	2.2465	
HCOM PURE37	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	-0.19262E+07	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	3.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	2936.0	KJ/KMOL
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	0.36575	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	42.081	
OMEGA PURE37	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.13759	
PC PURE37	1	CRITICAL PRESSURE	46.000	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA PURE37	1	RACKETT PARAMETER	0.27753	
S025E AQUEOUS	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	97.750	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	0.52200	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	-47.700	C

TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	91.700	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	-185.26	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	68.801	CC/MOL
VC PURE37	1	CRITICAL VOLUME	185.00	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	185.00	CC/MOL
VLSTD PURE37	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	80.857	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZC PURE37	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.28100	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIGDP DIPPR ideal gas heat capacity
CPIGDP = $A + B(C/T/\text{SINH}(C/T))^2 + D(E/T/\text{COSH}(E/T))^2$
TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K
SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 43.8520
B = 150.600
C = 1398.80
D = 74.7540
E = 616.460
T RANGE = 130.00 TO 1500.00 K

CPSDIP DIPPR solid heat capacity
CPSDIP = $A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$
TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K
SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 11274.8
B = 199.752
C = 1.33217
D = 0.393713E-02
E = 0.433490E-05
T RANGE = -259.15 TO -185.26 C

DHVLDP DIPPR heat of vaporization
DHVLDP = $A(1 - Tr)^{B + CTr + DTr^2 + ETr^3}$ where $Tr =$

T/Tc

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 25216.0
B = 0.337210
C = -0.183990
D = 0.223770
E = 0.00000
T RANGE = -185.26 TO 91.70 C

DNLDIP DIPPR liquid density

$$\text{DNLDIP} = A / (B^{(1 + (1 - T/C)^D)})$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 1.44030
B = 0.268520
C = 364.850
D = 0.287750
E = 0.00000
T RANGE = 87.89 TO 364.85 K

DNSDIP DIPPR solid density

$$\text{DNSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 14.9839
B = -0.217540E-01
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -194.55 TO -185.26 C

HCSOL HYDROCARBON SOLUBILITY

$$\text{LN(XHSOL)} = A + B/T + CT$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS:

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = -8.47605
B = 0.00000
C = 0.00000
T RANGE = -273.15 TO 726.85 C

KLDIP DIPPR liquid thermal conductivity

KLDIP = $A(1 + Bt^{(1/3)} + Ct^{(2/3)} + Dt)$ where $t = 1 - T/Tc$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 0.858762E-01
B = -1.34090
C = 1.65450
D = 1.33340
E = 0.00000
T RANGE = -185.26 TO 67.34 C

KVDIP DIPPR vapor thermal conductivity

KVDIP = $AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 0.386071E-04
B = 1.20180
C = 421.000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 225.45 TO 1000.00 K

MULDIP DIPPR liquid viscosity

$\ln(\text{MULDIP}) = A + B/T + C \ln(T) + DT^E$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = -85.1742
B = 1907.30
C = 15.6390
D = -0.430980E-01
E = 1.00000
T RANGE = 87.89 TO 333.15 K

MUVDIP DIPPR vapor viscosity

$$\text{MUVDIP} = \text{AT}^{\text{B}} / (1 + \text{C}/\text{T} + \text{D}/\text{T}^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.739190E-03
B = 0.542300
C = 263.730
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 87.89 TO 1000.00 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE

$$\text{LN(PL)} = \text{A} + \text{B}/(\text{T} + \text{C}) + \text{DT} + \text{E LN(T)} + \text{FT}^{\text{G}}$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 32.3921
B = -3097.80
C = 0.00000
D = 0.00000
E = -3.44250
F = 0.999890E-16
G = 6.00000
T RANGE = 87.89 TO 364.85 K

PSXANT EXTENDED SOLID ANTOINE VAPOR PRE

$$\text{LN(PS)} = \text{A} + \text{B}/(\text{T} + \text{C}) + \text{D LN(T)} + \text{ET}^{\text{F}} + \text{G}/\text{T}^2$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: BAR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 20.4641
B = -3403.70
C = 273.150
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
T RANGE = -235.26 TO -185.26 C

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

SIGDIP = $A(1 - Tr)^{B + CTr + DTr^2 + ETr^3}$ where $Tr = T/T_c$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 53.1180
B = 1.19930
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -185.26 TO 91.70 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 185.000
B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$LN(XWSOL) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 3.47154
B = -3028.13
C = 0.00000
T RANGE = 295.00 TO 359.00

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 6.00000

B = 1.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 3.00000

B = 6.00000

UFGRP UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER NUMBER OF OCCURENCES

1015.00 1.00000

1070.00 1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

GROUP NUMBER NUMBER OF OCCURENCES

1015.00 1.00000

1070.00 1.00000

UFGRPD DORTMUND-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER NUMBER OF OCCURENCES

1015.00 1.00000

1070.00 1.00000

UFGRPL LYNGBY-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1015.00	1.00000
1070.00	1.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: ACETO-01

FORMULA: C3H6O-1 NAME: C3H6O-1

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
PURE37	1	STANDARD API GRAVITY	48.500	
AQUEOUS	1	IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT		COMPONENT CLASS INDEX	430.00	
PURE37	1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	0.66696E+11	KJ/KMOL-K
PURE37	1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.15130E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DEFAULT	1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	-0.21570E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL

DHVLB PURE37	1	ENTHALPY OF VAPORIZATION AT TB	29710.	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	
FREEZEPT1 PURE37			-94.700	C
GMUQQ PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	2.3360	
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	2.3360	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	2.5735	
HCOM PURE37	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	-0.16590E+07	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	5774.0	KJ/KMOL
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	2.8810	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	58.080	
OMEGA PURE37	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.30694	
PC PURE37	1	CRITICAL PRESSURE	47.000	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA PURE37	1	RACKETT PARAMETER	0.24468	
S025E AQUEOUS	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	122.25	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	0.78600	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	56.130	C

TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	234.95	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	-94.700	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	77.595	CC/MOL
VC PURE37	1	CRITICAL VOLUME	213.00	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	213.00	CC/MOL
VLSTD PURE37	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	73.996	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZC PURE37	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.23700	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIGDP DIPPR ideal gas heat capacity

$$\text{CPIGDP} = A + B(C/T/\text{SINH}(C/T))^2 + D(E/T/\text{COSH}(E/T))^2$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 52.9260
B = 101.150
C = 670.190
D = 98.2570
E = 2186.50
T RANGE = 273.15 TO 1500.00 K

CPSDIP DIPPR solid heat capacity

$$\text{CPSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 169.558
B = 1.28710
C = 0.700936E-02
D = 0.174220E-04
E = 0.00000
T RANGE = -259.78 TO -94.70 C

DHVLDP DIPPR heat of vaporization

$$\text{DHVLDP} = A(1 - \text{Tr})^{(B + C\text{Tr} + D\text{Tr}^2 + E\text{Tr}^3)} \text{ where } \text{Tr} =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 51648.0
B = 1.19670
C = -1.47590
D = 0.688840
E = 0.00000
T RANGE = -94.70 TO 234.95 C

DNLDIP DIPPR liquid density

$$\text{DNLDIP} = A / (B^{(1 + (1 - T/C)^D)})$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 1.19310
B = 0.254140
C = 508.100
D = 0.292000
E = 0.00000
T RANGE = 178.45 TO 508.10 K

DNSDIP DIPPR solid density

$$\text{DNSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 15.2836
B = -0.140780E-01
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -201.77 TO -94.70 C

KLDIP DIPPR liquid thermal conductivity

$$\text{KLDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.145520
B = -0.337893E-03
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -94.70 TO 70.00 C

KVDIP DIPPR vapor thermal conductivity

$$\text{KVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.112794E-04
B = 1.35320
C = 481.960
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 273.15 TO 1000.00 K

MULDIP DIPPR liquid viscosity

$$\text{LN(MULDIP)} = A + B/T + C \text{ LN}(T) + DT^E$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = -8.16824
B = 1022.90
C = 0.623910
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 178.45 TO 329.28 K

MUVDIP DIPPR vapor viscosity

$$\text{MUVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.219610E-04
B = 1.02440
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 178.45 TO 1000.00 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE

$$\ln(PL) = A + B/(T + C) + DT + E \ln(T) + FT^G$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 46.4341
B = -5355.30
C = 0.00000
D = 0.00000
E = -5.21060
F = 0.124490E-13
G = 5.00000
T RANGE = 178.45 TO 508.10 K

PSXANT EXTENDED SOLID ANTOINE VAPOR PRE

$$\ln(PS) = A + B/(T + C) + D \ln(T) + ET^F + G/T^2$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 18.3271
B = -5159.70
C = 273.150
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
T RANGE = -194.70 TO -94.70 C

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

$$\text{SIGDIP} = A(1 - Tr)^{(B + CTr + DTr^2 + ETr^3)} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 62.4920
B = 1.14470
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -94.70 TO 234.95 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 213.000
B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$\text{LN}(XWSOL) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 2.42711
B = -2570.43
C = 0.00000
T RANGE = 0.00 TO 821.98

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 6.00000
B = 1.00000
C = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 3.00000

B = 6.00000
C = 1.00000

UFGRP UNIFAC GROUP COUNT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1015.00	1.00000
1405.00	1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1015.00	1.00000
1405.00	1.00000

UFGRPD DORTMUND-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1015.00	1.00000
1405.00	1.00000

UFGRPL LYNGBY-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1015.00	1.00000
1405.00	1.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: DIISO-01

FORMULA: C6H14O-3

NAME: C6H14O-3

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE	SET NAME	DESCRIPTIONS NO.	VALUE	UNITS
PURE37	API 1	STANDARD API GRAVITY	64.347	
DEFAULT	CHARGE 1	IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	CHI 1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT	CMPCCLASS1	COMPONENT CLASS INDEX	480.00	
PURE37	DCPLS 1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	40.466	KJ/KMOL-K
PURE37	DGFORM 1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.12480E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	DGSFRM 1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DEFAULT	DHAQFM 1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	DHFORM 1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	-0.31920E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	DHSFRM 1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL

DHVLB PURE37	1	ENTHALPY OF VAPORIZATION AT TB	29617.	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	
FREEZEPT1 PURE37			-85.500	C
GMUQQ PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	4.0880	
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	4.0880	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	4.7423	
HCOM PURE37	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	-0.37026E+07	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	11050.	KJ/KMOL
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	1.1302	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	102.18	
OMEGA PURE37	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.33868	
PC PURE37	1	CRITICAL PRESSURE	28.800	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA PURE37	1	RACKETT PARAMETER	0.26988	
S025E DEFAULT	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	0.0000	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	0.72250	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	68.300	C

TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	226.90	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	-85.500	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	151.66	CC/MOL
VC PURE37	1	CRITICAL VOLUME	386.00	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	386.00	CC/MOL
VLSTD PURE37	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	141.77	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZC PURE37	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.26700	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIGDP DIPPR ideal gas heat capacity

$$CPIGDP = A + B(C/T/SINH(C/T))^2 + D(E/T/COSH(E/T))^2$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 109.300
B = 368.300
C = 1605.70
D = 234.200
E = 699.000
T RANGE = 298.15 TO 1500.00 K

CPSDIP DIPPR solid heat capacity

$$CPSDIP = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 247.704
B = 1.77644
C = 0.812352E-02
D = 0.186900E-04
E = 0.00000
T RANGE = -263.15 TO -85.50 C

DHVLDP DIPPR heat of vaporization

$$DHVLDP = A(1 - Tr)^{(B + CTr + DTr^2 + ETr^3)} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 46302.0
B = 1.26560
C = -2.32510
D = 1.52530
E = 0.00000
T RANGE = -85.50 TO 226.90 C

DNLDIP DIPPR liquid density

$$\text{DNLDIP} = A / (B^{(1 + (1 - T/C)^D)})$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 0.692130
B = 0.269740
C = 500.050
D = 0.285710
E = 0.00000
T RANGE = 187.65 TO 500.05 K

DNSDIP DIPPR solid density

$$\text{DNSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 8.44711
B = -0.687860E-02
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -198.09 TO -85.50 C

KLDIP DIPPR liquid thermal conductivity

$$\text{KLDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.998934E-01
B = -0.237489E-03
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -85.50 TO 126.95 C

KVDIP DIPPR vapor thermal conductivity

$$\text{KVDIP} = \text{AT}^{\text{B}} / (1 + \text{C}/\text{T} + \text{D}/\text{T}^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.170929E-03
B = 0.942300
C = 306.800
D = 106230.
E = 0.00000
T RANGE = 328.05 TO 1000.00 K

MULDIP DIPPR liquid viscosity

$$\text{LN}(\text{MULDIP}) = \text{A} + \text{B}/\text{T} + \text{C LN}(\text{T}) + \text{DT}^{\text{E}}$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = -4.59224
B = 993.000
C = 0.220000E-01
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 187.65 TO 341.45 K

MUVDIP DIPPR vapor viscosity

$$\text{MUVDIP} = \text{AT}^{\text{B}} / (1 + \text{C}/\text{T} + \text{D}/\text{T}^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.169100E-03
B = 0.711400
C = 124.000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 187.65 TO 1000.00 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE

$$\ln(PL) = A + B/(T + C) + DT + E \ln(T) + FT^G$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 30.1181
B = -4668.70
C = 0.00000
D = 0.00000
E = -2.85510
F = 0.636930E-03
G = 1.00000
T RANGE = 187.65 TO 500.05 K

PSXANT EXTENDED SOLID ANTOINE VAPOR PRE

$$\ln(PS) = A + B/(T + C) + D \ln(T) + ET^F + G/T^2$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 24.1901
B = -6338.40
C = 273.150
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
T RANGE = -135.50 TO -85.50 C

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

$$\text{SIGDIP} = A(1 - Tr)^{(B + CTr + DTr^2 + ETr^3)} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 53.3900
B = 1.24700
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -85.50 TO 226.90 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 386.000
B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$\text{LN}(XWSOL) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 8.46392
B = -4647.35
C = 0.00000
T RANGE = 0.00 TO 507.14

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 6.00000
B = 1.00000
C = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 6.00000

B = 14.0000
C = 1.00000

UFGRP UNIFAC GROUP COUNT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	4.00000
1605.00	1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	4.00000
1605.00	1.00000

UFGRPD DORTMUND-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	4.00000
1605.00	1.00000

UFGRPL LYNGBY-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	4.00000
1605.00	1.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: ISOPR-01

FORMULA: C3H8O-2

NAME: C3H8O-2

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE	SET NAME	DESCRIPTIONS NO.	VALUE	UNITS
PURE37	API 1	STANDARD API GRAVITY	47.800	
DEFAULT	CHARGE 1	IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	CHI 1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT	CMPCCLASS1	COMPONENT CLASS INDEX	411.00	
PURE37	DCPLS 1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	2.4235	KJ/KMOL-K
PURE37	DGFORM 1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.17520E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	DGSFRM 1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DEFAULT	DHAQFM 1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	DHFORM 1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	-0.27210E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	DHSFRM 1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL

DHVLB PURE37	1	ENTHALPY OF VAPORIZATION AT TB	40525.	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	
FREEZEPT1 PURE37			-87.892	C
GMUQQ PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	2.5276	
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	2.5276	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	2.9137	
HCOM PURE37	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	-0.18340E+07	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	5410.0	KJ/KMOL
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	1.6609	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	60.096	
OMEGA PURE37	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.66300	
PC PURE37	1	CRITICAL PRESSURE	47.650	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA PURE37	1	RACKETT PARAMETER	0.25194	
S025E DEFAULT	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	0.0000	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	0.78930	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	82.150	C

TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	235.15	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	-87.892	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	83.310	CC/MOL
VC PURE37	1	CRITICAL VOLUME	222.00	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	222.00	CC/MOL
VLSTD PURE37	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	76.321	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZC PURE37	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.25000	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIGDP DIPPR ideal gas heat capacity

$$\text{CPIGDP} = A + B(C/T/\text{SINH}(C/T))^2 + D(E/T/\text{COSH}(E/T))^2$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 73.1450
B = 203.130
C = 1937.50
D = 148.150
E = 843.370
T RANGE = 298.15 TO 1500.00 K

CPSDIP DIPPR solid heat capacity

$$\text{CPSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 601.230
B = 11.3087
C = 0.898957E-01
D = 0.316178E-03
E = 0.398900E-06
T RANGE = -261.15 TO -87.89 C

DHVLDP DIPPR heat of vaporization

$$\text{DHVLDP} = A(1 - \text{Tr})^{(B + C\text{Tr} + D\text{Tr}^2 + E\text{Tr}^3)} \text{ where } \text{Tr} =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 85020.0
B = 1.47400
C = -1.87800
D = 0.933000
E = 0.00000
T RANGE = -87.89 TO 235.15 C

DNLDIP DIPPR liquid density
DNLDIP = $A / (B^{(1 + (1 - T/C)^D)})$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 1.17990
B = 0.264400
C = 508.300
D = 0.246530
E = 0.00000
T RANGE = 185.26 TO 508.30 K

DNSDIP DIPPR solid density
DNSDIP = $A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 15.3098
B = -0.126640E-01
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -199.05 TO -87.89 C

KLDIP DIPPR liquid thermal conductivity
KLDIP = $A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.122789
B = -0.185116E-03
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -87.89 TO 151.85 C

KVDIP DIPPR vapor thermal conductivity

$$\text{KVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.635486E-06
B = 1.74190
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 355.30 TO 1000.00 K

MULDIP DIPPR liquid viscosity

$$\ln(\text{MULDIP}) = A + B/T + C \ln(T) + DT^E$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = -1.98404
B = 2357.60
C = -0.913760
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 185.26 TO 355.30 K

MUVDIP DIPPR vapor viscosity

$$\text{MUVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.120030E-02
B = 0.494000
C = 479.780
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 187.35 TO 1000.00 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE

$$\ln(PL) = A + B/(T + C) + DT + E \ln(T) + FT^G$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 99.2071
B = -9040.00
C = 0.00000
D = 0.00000
E = -12.6760
F = 0.553800E-05
G = 2.00000
T RANGE = 185.26 TO 508.30 K

PSXANT EXTENDED SOLID ANTOINE VAPOR PRE

$$\ln(PS) = A + B/(T + C) + D \ln(T) + ET^F + G/T^2$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 20.1391
B = -6620.00
C = 273.150
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
T RANGE = -137.89 TO -87.89 C

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

$$\text{SIGDIP} = A(1 - Tr)^{(B + CTr + DTr^2 + ETr^3)} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 44.6310
B = 0.855520
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -87.89 TO 235.15 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 222.000
B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$\text{LN}(X\text{WSOL}) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 2.61691
B = -2616.24
C = 0.00000
T RANGE = 0.00 TO 788.76

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 6.00000
B = 1.00000
C = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 3.00000

B = 8.00000
C = 1.00000

UFGRP UNIFAC GROUP COUNT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	2.00000
1200.00	1.00000
-1.00000	0.100000E+36
3050.00	1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	2.00000
1200.00	1.00000
-1.00000	0.100000E+36
3050.00	1.00000

UFGRPD DORTMUND-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	2.00000
1210.00	1.00000

UFGRPL LYNGBY-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1005.00	1.00000
1015.00	2.00000
1200.00	1.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: WATER

FORMULA: H2O

NAME: H2O

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE	SET NAME	DESCRIPTIONS NO.	VALUE	UNITS
PURE37	API 1	STANDARD API GRAVITY	10.000	
DEFAULT	CHARGE 1	IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	CHI 1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT	CMPCCLASS1	COMPONENT CLASS INDEX	100.00	
PURE37	DCPLS 1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	38.028	KJ/KMOL-K
PURE37	DGFORM 1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.22857E+06	KJ/KMOL
SOLIDS	DGSFRM 1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.23676E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	DHAQFM 1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	DHFORM 1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	-0.24182E+06	KJ/KMOL
SOLIDS	DHSFRM 1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	-0.29292E+06	KJ/KMOL

DHVLB PURE37	1	ENTHALPY OF VAPORIZATION AT TB	40694.	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	
FREEZEPT1 PURE37			-0.56843E-13	C
GMUQQ PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	1.4000	
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	1.4000	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	0.92000	
HCOM DEFAULT	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	0.0000	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	6001.7	KJ/KMOL
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	1.8497	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	18.015	
OMEGA PURE37	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.34486	
PC PURE37	1	CRITICAL PRESSURE	220.64	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA PURE37	1	RACKETT PARAMETER	0.24317	
S025E DEFAULT	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	0.0000	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	1.0000	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	100.00	C

TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	373.95	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	0.10000E-01	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	18.831	CC/MOL
VC PURE37	1	CRITICAL VOLUME	55.947	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	55.947	CC/MOL
VLSTD PURE37	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	18.050	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZC PURE37	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.22900	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIGDP DIPPR ideal gas heat capacity

$$CPIGDP = A + B(C/T/SINH(C/T))^2 + D(E/T/COSH(E/T))^2$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 33.3630
B = 26.7900
C = 2610.50
D = 8.89600
E = 1169.00
T RANGE = 100.00 TO 2273.15 K

CPSDIP DIPPR solid heat capacity

$$CPSDIP = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 38.1205
B = 0.140520
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -270.00 TO -0.00 C

DHVLDP DIPPR heat of vaporization

$$DHVLDP = A(1 - Tr)^{B + CTr + DTr^2 + ETr^3} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 56600.0
B = 0.612040
C = -0.625700
D = 0.398800
E = 0.00000
T RANGE = 0.01 TO 373.95 C

DNLDIP DIPPR liquid density

$$\text{DNLDIP} = A + Bt^{0.35} + Ct^{(2/3)} + Dt + Et^{(4/3)}$$

$$\text{where } t = 1 - T/T_c$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 17.8630
B = 58.6060
C = -95.3960
D = 213.890
E = -141.260
T RANGE = 0.01 TO 373.95 C

DNSDIP DIPPR solid density

$$\text{DNSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 50.8883
B = -0.784090E-02
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -40.00 TO -0.00 C

KLDIP DIPPR liquid thermal conductivity

$$\text{KLDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.487653
B = 0.148671E-02
C = -0.563457E-05
D = 0.160017E-08
E = 0.00000
T RANGE = 0.01 TO 360.00 C

KVDIP DIPPR vapor thermal conductivity

$$\text{KVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.533457E-05
B = 1.39730
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 273.16 TO 1073.15 K

MULDIP DIPPR liquid viscosity

$$\ln(\text{MULDIP}) = A + B/T + C \ln(T) + DT^E$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = -45.9352
B = 3703.60
C = 5.86600
D = -0.587900E-28
E = 10.0000
T RANGE = 273.16 TO 646.15 K

MUVDIP DIPPR vapor viscosity

$$\text{MUVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.170960E-04
B = 1.11460
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 273.16 TO 1073.15 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE

$$\ln(PL) = A + B/(T + C) + DT + E \ln(T) + FT^G$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 62.1361
B = -7258.20
C = 0.00000
D = 0.00000
E = -7.30370
F = 0.416530E-05
G = 2.00000
T RANGE = 273.16 TO 647.10 K

PSXANT EXTENDED SOLID ANTOINE VAPOR PRE

$$\ln(PS) = A + B/(T + C) + D \ln(T) + ET^F + G/T^2$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 17.2531
B = -6109.20
C = 273.150
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
T RANGE = -123.85 TO 0.01 C

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

$$\text{SIGDIP} = A(1 - Tr)^{(B + CTr + DTr^2 + ETr^3)} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 177.660

B = 2.56700

C = -3.33770

D = 1.96990

E = 0.00000

T RANGE = 0.01 TO 373.95 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 55.9472

B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$\text{LN}(X\text{WSOL}) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.76832

B = -2282.98

C = 0.00000

T RANGE = 0.00 TO 924.91

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 1.00000

B = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 2.00000

B = 1.00000

UFGRP

UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1300.00	1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1300.00	1.00000

UFGRPD DORTMUND-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1300.00	1.00000

UFGRPL LYNGBY-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1300.00	1.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: DIACE-01
FORMULA: C6H12O2-D3 NAME: C6H12O2-D3

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
PURE37	1	STANDARD API GRAVITY	19.581	
DEFAULT	1	IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT		COMPONENT CLASS INDEX	400.00	
PURE37	1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	31.530	KJ/KMOL-K
PURE37	1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.28860E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DEFAULT	1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	-0.46310E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL

DHVLB PURE37	1	ENTHALPY OF VAPORIZATION AT TB	44578.	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	
FREEZEPT1 PURE37			-44.000	C
GMUQQ PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	4.3080	
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	4.3080	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR PURE37	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	4.8985	
HCOM PURE37	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	-0.32990E+07	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	6040.0	KJ/KMOL
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	3.2378	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	116.16	
OMEGA PURE37	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.76835	
PC PURE37	1	CRITICAL PRESSURE	36.000	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA PURE37	1	RACKETT PARAMETER	0.26478	
S025E DEFAULT	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	0.0000	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	0.93659	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	167.90	C

TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	332.85	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	-44.000	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	146.59	CC/MOL
VC PURE37	1	CRITICAL VOLUME	387.00	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	387.00	CC/MOL
VLSTD PURE37	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	124.34	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZC PURE37	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.27700	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIGDP DIPPR ideal gas heat capacity

$$CPIGDP = A + B(C/T/SINH(C/T))^2 + D(E/T/COSH(E/T))^2$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 116.770
B = 193.790
C = 678.100
D = 162.900
E = 1802.30
T RANGE = 298.15 TO 1200.15 K

CPSDIP DIPPR solid heat capacity

$$CPSDIP = AT^B/(1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 0.219000E+07
B = 0.792670
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 50.00 TO 229.15 K

DHVLDP DIPPR heat of vaporization

$$DHVLDP = A(1 - Tr)^{B + CTr + DTr^2 + ETr^3} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 137560.
B = 3.58930
C = -5.43450
D = 2.32570
E = 0.00000
T RANGE = -44.00 TO 332.85 C

DNLDIP DIPPR liquid density
DNLDIP = $A / (B^{(1 + (1 - T/C)^D)})$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.672660
B = 0.260310
C = 606.000
D = 0.251100
E = 0.00000
T RANGE = 229.15 TO 606.00 K

DNSDIP DIPPR solid density
DNSDIP = $A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 9.29460
B = -0.595790E-02
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -181.49 TO -44.00 C

KLDIP DIPPR liquid thermal conductivity
KLDIP = $A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.126662
B = -0.225365E-03
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -44.00 TO 208.65 C

KVDIP DIPPR vapor thermal conductivity

$$\text{KVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 0.132330E-03
B = 0.982500
C = 704.300
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 441.00 TO 1000.00 K

MULDIP DIPPR liquid viscosity

$$\text{LN(MULDIP)} = A + B/T + C \text{ LN}(T) + DT^E$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 162.478
B = -8726.40
C = -23.8030
D = 0.275020E+11
E = -4.00000
T RANGE = 223.65 TO 484.80 K

MUVDIP DIPPR vapor viscosity

$$\text{MUVDIP} = AT^B / (1 + C/T + D/T^2)$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 0.284810E-03
B = 0.671400
C = 296.470
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 229.15 TO 1000.00 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE

$$\ln(PL) = A + B/(T + C) + DT + E \ln(T) + FT^G$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 150.507
B = -10531.0
C = 0.00000
D = 0.00000
E = -22.6710
F = 0.259180E-01
G = 1.00000
T RANGE = 229.15 TO 606.00 K

PSXANT EXTENDED SOLID ANTOINE VAPOR PRE

$$\ln(PS) = A + B/(T + C) + D \ln(T) + ET^F + G/T^2$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 27.7531
B = -9273.00
C = 273.150
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
T RANGE = -94.00 TO -44.00 C

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

$$\text{SIGDIP} = A(1 - Tr)^{B + CTr + DTr^2 + ETr^3} \text{ where } Tr =$$

T/Tc

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: DYNE/CM

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 62.8840
B = 1.10630
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -44.00 TO 332.85 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 387.000
B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$\text{LN}(XWSOL) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 2.45843
B = -2488.00
C = 0.00000
T RANGE = 0.00 TO 787.73

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 6.00000
B = 1.00000
C = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 6.00000

B = 12.0000
C = 2.00000

UFGRP UNIFAC GROUP COUNT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1000.00	1.00000
1010.00	1.00000
1015.00	2.00000
1200.00	1.00000
1405.00	1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1000.00	1.00000
1010.00	1.00000
1015.00	2.00000
1200.00	1.00000
1405.00	1.00000

UFGRPD DORTMUND-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1000.00	1.00000
1010.00	1.00000
1015.00	2.00000
1220.00	1.00000
1405.00	1.00000

UFGRPL LYNGBY-UNIFAC GROUP COUNT

SET: 1 SOURCE: PURE37

GROUP NUMBER	NUMBER OF OCCURENCES
1000.00	1.00000
1010.00	1.00000
1015.00	2.00000
1200.00	1.00000
1405.00	1.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: SODIU-01

FORMULA: NANO3

NAME: NANO3

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
PURE37	1	STANDARD API GRAVITY	-64.683	
DEFAULT	1	IONIC CHARGE	0.0000	
DEFAULT	1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DEFAULT	1	COMPONENT CLASS INDEX	130.00	
PURE37	1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	0.13941	KJ/KMOL-K
SOLIDS	1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.36715E+06	KJ/KMOL
DEFAULT	1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
SOLIDS	1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
PURE37	1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	-0.46502E+06	KJ/KMOL

DLWC	1	WILKE-CHANG	1.0000	
DEFAULT		DIFFUSING-COMPONENT FLAG		
DVBLNC	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE	1.0000	
DEFAULT		DIFFUSING COMPONENT FLAG		
FREEZEPT1			307.00	C
PURE37				
GMUQQ	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	1.6040	
INPUT				
GMUQQ1	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER	3.8560	
DEFAULT		FOR PRIMARY ALCOHOLS		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR INPUT	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	1.6374	
HCOM DEFAULT	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	0.0000	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS PURE37	1	HEAT OF FUSION	14602.	KJ/KMOL
MUP DEFAULT	1	DIPOLE MOMENT	0.0000	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	84.995	
OMEGA SOLIDS	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.0000	
PC SOLIDS	1	CRITICAL PRESSURE	50.000	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA INPUT	1	RACKETT PARAMETER	0.29170	
S025E DEFAULT	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	0.0000	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	2.1177	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	380.00	C

TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	1047.8	C
TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	307.00	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB INPUT	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	45.867	CC/MOL
VC SOLIDS	1	CRITICAL VOLUME	100.00	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	369.44	CC/MOL
VLSTD INPUT	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	40.236	CC/MOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZC SOLIDS	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.20000	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIG POLYNOMIAL IDEAL GAS CP

$$CP = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5$$

$$CP = I + JT^K \text{ FOR } T < TLOWER$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

$$A = 93.0500$$

$$B = 0.00000$$

$$C = 0.00000$$

$$D = 0.00000$$

$$E = 0.00000$$

$$F = 0.00000$$

$$T \text{ RANGE} = -273.15 \text{ TO } 1726.85 \text{ C}$$

$$I = 33.2560$$

$$J = 0.212860E-01$$

$$K = 1.50000$$

CPSDIP DIPPR solid heat capacity

$$CPSDIP = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

$$A = 88.1326$$

$$B = 0.163937$$

$$C = 0.238815E-03$$

$$D = 0.190112E-05$$

$$E = -0.681300E-08$$

T RANGE = -228.80 TO 305.85 C

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

DHVLWT WATSON HEAT OF VAPORIZATION

$$DHVL = A((1-T/TC)/(1-B/TC))^{(C + D(1-T/TC))}$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL

SET: 1 SOURCE: INPUT

A = 74832.6
B = 380.000
C = 0.380000
D = 0.00000
T LIMIT = -11.89 C

DNSDIP DIPPR solid density

$$DNSDIP = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 26.6020
B = 0.00000
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 20.00 TO 20.00 C

KLDIP DIPPR LIQUID
THERMAL CONDUCTIVITY

$$KL = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: INPUT

A = 0.840445E-01
B = 0.264730E-03
C = -0.864680E-06
D = 0.933233E-09
E = -0.383939E-12
T RANGE = 380.00 TO 1034.64 C

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

KSPOLY SOLID THERMAL CONDUCTIVITY

$$KS = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 44.6449
B = 0.00000
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -273.15 TO 726.85 C

MULDIP DIPPR liquid viscosity

$$\ln(\text{MULDIP}) = A + B/T + C \ln(T) + DT^E$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 15.4367
B = 345.700
C = -2.34850
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 580.15 TO 653.15 K

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

$$\text{SIGDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 133.571
B = -0.338687E-01
C = -0.275100E-04
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 322.00 TO 737.95 C

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 93.9446
B = 0.00000

WATSOL WATER SOLUBILITY

$\text{LN}(XWSOL) = A + B/T + CT$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = -5.30000
B = -500.000
C = 0.00000
T RANGE = 0.00 TO 1000.00

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 7.00000
B = 11.0000
C = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 1.00000
B = 1.00000
C = 3.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: POTAS-01
FORMULA: KNO3 NAME: KNO3

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
CHARGE DEFAULT	1	IONIC CHARGE	0.0000	
CHI DEFAULT	1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
DCPLS NIST-TRC	1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	77.192	KJ/KMOL-K
DGFORM SOLIDS	1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DGSFRM SOLIDS	1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.39454E+06	KJ/KMOL
DHAQFM DEFAULT	1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DHFORM SOLIDS	1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DHSFRM SOLIDS	1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	-0.49446E+06	KJ/KMOL
DLWC DEFAULT	1	WILKE-CHANG DIFFUSING-COMPONENT FLAG	1.0000	
DVBLNC DEFAULT	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE DIFFUSING COMPONENT FLAG	1.0000	

FREEZEPT1 SOLIDS			336.85	C
GMUQQ DEFAULT	1	UNIQAC MOLECULAR AREA PARAMETER	3.8560	
GMUQQ1 DEFAULT	1	UNIQAC SPECIAL AREA PARAMETER FOR PRIMARY ALCOHOLS	3.8560	
GMUQR DEFAULT	1	UNIQAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	4.4998	
HCOM DEFAULT	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	0.0000	KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
HFUS NIST-TRC	1	HEAT OF FUSION	10500.	KJ/KMOL
MUP DEFAULT	1	DIPOLE MOMENT	0.0000	DEBYE
MW SOLIDS	1	MOLECULAR WEIGHT	101.10	
OMEGA SOLIDS	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.0000	
PC SOLIDS	1	CRITICAL PRESSURE	50.000	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA INPUT	1	RACKETT PARAMETER	0.29186	
S025E DEFAULT	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	0.0000	CAL/MOL-K
TB DEFAULT	1	NORMAL BOILING POINT	68.750	C
TC SOLIDS	1	CRITICAL TEMPERATURE	1726.8	C
TPT NIST-TRC	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	335.85	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB DEFAULT	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	140.90	CC/MOL

VC SOLIDS	1	CRITICAL VOLUME	100.00	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	369.44	CC/MOL
VLSTD INPUT	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	298.91	CC/MOL
ZC SOLIDS	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.20000	
ZWITTER DEFAULT	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIG POLYNOMIAL IDEAL GAS CP

$$CP = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5$$

$$CP = I + JT^K \text{ FOR } T < TLOWER$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 96.2700
B = 0.00000
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
T RANGE = -273.15 TO 1726.85 C
I = 33.2560
J = 0.212860E-01
K = 1.50000

CPLXP1 BARIN LIQUID CP RANGE 1

$$G = A + BT + C (T \ln(T)) + DT^2 + ET^3 + FT^4 + G/T + H/T^2$$

$$CP = -C - 2DT - 6ET^2 - 12FT^3 - 2G/T^2 - 6H/T^3$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL

SET: 1 SOURCE: INORGANIC

A = -519435.
B = 1140.46
C = -123.386
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
H = 0.00000
T RANGE = 334.45 TO 426.85 K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

CPSXP1 BARIN SOLID CP RANGE 1

$$G = A + BT + C (T \text{ LN}(T)) + DT^2 + ET^3 + FT^4 + G/T + H/T^2$$

$$CP = -C - 2DT - 6ET^2 - 12FT^3 - 2G/T^2 - 6H/T^3$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL

SET: 1 SOURCE: INORGANIC

A = -518091.
B = 779.019
C = -60.9860
D = -0.593919E-01
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
H = 0.00000
T RANGE = 25.00 TO 128.05 K

CPSXP2 BARIN SOLID CP RANGE 2

$$G = A + BT + C (T \text{ LN}(T)) + DT^2 + ET^3 + FT^4 + G/T + H/T^2$$

$$CP = -C - 2DT - 6ET^2 - 12FT^3 - 2G/T^2 - 6H/T^3$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL

SET: 1 SOURCE: INORGANIC

A = -527303.
B = 1134.90
C = -120.499
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
H = 0.00000
T RANGE = 128.05 TO 334.45 K

DHVLWT WATSON HEAT OF VAPORIZATION

$$DHVL = A ((1-T/TC) / (1-B/TC))^{(C + D(1-T/TC))}$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 28872.2
B = 68.7500
C = 0.380000
D = 0.00000
T LIMIT = -273.15 C

KSPOLY SOLID THERMAL CONDUCTIVITY

$$KS = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 44.6449
B = 0.00000
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -273.15 TO 726.85 C

MULNVE TDE EQUATION FOR LIQUID VISCOSIT

$$\ln(MUL) = A1 + A2/T + A3/T^2 + A4/T^3$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CP

SET: 1 SOURCE: NIST-TRC

A = 10.2952
B = -23948.0
C = 0.176990E+08
D = -0.397836E+10
T RANGE = 339.81 TO 469.78 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 93.9446
B = 0.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

VSPOLY SOLID MOLAR VOLUME

$$VS = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: SOLIDS

A = 48.0400
B = 0.00000
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -273.15 TO 726.85 C

WATSOL WATER SOLUBILITY

$$\ln(XWSOL) = A + B/T + CT$$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = -5.30000
B = -500.000
C = 0.00000
T RANGE = 0.00 TO 1000.00

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: SOLIDS

A = 19.0000
B = 7.00000
C = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: SOLIDS

A = 1.00000
B = 1.00000
C = 3.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PURE COMPONENT PARAMETERS

COMPONENT ID: SODIU-02

FORMULA: NANO2

NAME: NANO2

SCALAR PARAMETERS

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
API PURE37	1	STANDARD API GRAVITY	-61.292	
CHARGE DEFAULT	1	IONIC CHARGE	0.0000	
CHI DEFAULT	1	STIEL POLAR FACTOR	0.0000	
CMPCLASS1 DEFAULT		COMPONENT CLASS INDEX	130.00	
DCPLS DEFAULT	1	DIFFERENCE BETWEEN LIQUID AND SOLID CP AT TRIPLE POINT	0.0000	KJ/KMOL-K
DGFORM DEFAULT	1	IDEAL GAS GIBBS ENERGY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DGSFRM PURE37	1	SOLID GIBBS ENERGY OF FORMATION	-0.28460E+06	KJ/KMOL
DHAQFM DEFAULT	1	AQUEOUS INFINITE DILUTION ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DHFORM DEFAULT	1	IDEAL GAS ENTHALPY OF FORMATION	0.0000	KJ/KMOL
DHSFRM PURE37	1	SOLID ENTHALPY OF FORMATION	-0.35865E+06	KJ/KMOL

DLWC	1	WILKE-CHANG	1.0000	
DEFAULT		DIFFUSING-COMPONENT FLAG		
DVBLNC	1	CHAPMAN-ENSKOG-WILKE-LEE	1.0000	
DEFAULT		DIFFUSING COMPONENT FLAG		
FREEZEPT1			284.00	C
PURE37				
GMUQQ	1	UNIQUAC MOLECULAR AREA PARAMETER	3.8560	
DEFAULT				
GMUQQ1	1	UNIQUAC SPECIAL AREA PARAMETER	3.8560	
DEFAULT		FOR PRIMARY ALCOHOLS		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE NAME	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
GMUQR DEFAULT	1	UNIQUAC MOLECULAR VOLUME PARAMETER	4.4998	
HCOM DEFAULT	1	STANDARD ENTHALPY OF COMBUSTION AT 25 C	0.0000	KJ/KMOL
HCTYPE DEFAULT	1	HYDROCARBON COMP CLASS INDEX	0.0000	
MUP PURE37	1	DIPOLE MOMENT	9.3535	DEBYE
MW PURE37	1	MOLECULAR WEIGHT	68.995	
OMEGA DEFAULT	1	PITZER ACENTRIC FACTOR	0.29600	
PC DEFAULT	1	CRITICAL PRESSURE	29.688	BAR
RHOM DEFAULT	1	MASS DENSITY	0.0000	KG/CUM
RKTZRA DEFAULT	1	RACKETT PARAMETER	0.26214	
S025E DEFAULT	1	SUM OF ELEMENT ENTROPIES AT 25 C	0.0000	CAL/MOL-K
SG PURE37	1	STANDARD SPECIFIC GRAVITY AT 60 F	2.0154	
TB PURE37	1	NORMAL BOILING POINT	320.00	C
TC PURE37	1	CRITICAL TEMPERATURE	699.85	C

TPT PURE37	1	TRIPLE POINT TEMPERATURE	284.00	C
TREFHS DEFAULT	1	REFERENCE TEMPERATURE FOR SOLID REFERENCE STATE	25.000	C
VB PURE37	1	LIQUID MOLAR VOLUME AT TB	38.687	CC/MOL
VC DEFAULT	1	CRITICAL VOLUME	369.44	CC/MOL
VCRKT DEFAULT	1	VC FOR RACKETT MODEL	369.44	CC/MOL
VLSTD INPUT	1	API STANDARD LIQUID MOLAR VOLUME AT 60 F	34.320	CC/MOL
ZC DEFAULT	1	CRITICAL COMPRESSIBILITY FACTOR	0.26000	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PARAM SOURCE	SET NO.	DESCRIPTIONS	VALUE	UNITS
ZWITTER	1	ZWITTERIONS IDENTIFIER	0.0000	
DEFAULT				

TEMPERATURE DEPENDENT PARAMETERS

CPIXP1 BARIN IDEAL GAS CP RANGE 1

$$G = A + BT + C (T \ln(T)) + DT^2 + ET^3 + FT^4 + G/T + H/T^2$$

$$CP = -C - 2DT - 6ET^2 - 12FT^3 - 2G/T^2 - 6H/T^3$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL

SET: 1 SOURCE: INORGANIC

A = 112810.

B = 1035.37

C = -121.336

D = 0.00000

E = 0.00000

F = 0.00000

G = 0.00000

H = 0.00000

T RANGE = 283.85 TO 726.85 K

CPLXP1 BARIN LIQUID CP RANGE 1

$$G = A + BT + C (T \ln(T)) + DT^2 + ET^3 + FT^4 + G/T + H/T^2$$

$$CP = -C - 2DT - 6ET^2 - 12FT^3 - 2G/T^2 - 6H/T^3$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: KJ/KMOL

SET: 1 SOURCE: INORGANIC

A = -387190.

B = 1035.37

C = -121.336

D = 0.00000

E = 0.00000

F = 0.00000

G = 0.00000

H = 0.00000
T RANGE = 283.85 TO 726.85 K

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

CPSDIP DIPPR solid heat capacity

$$\text{CPSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL-K

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 60.2100
B = 0.103090
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 60.00 TO 200.00 C

DHVLWT WATSON HEAT OF VAPORIZATION

$$\text{DHVL} = A((1-T/TC)/(1-B/TC))^{(C + D(1-T/TC))}$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KJ/KMOL

SET: 1 SOURCE: INPUT

A = 69793.4
B = 320.000
C = 0.380000
D = 0.00000
T LIMIT = -35.89 C

DNLDIP DIPPR liquid density

$$\text{DNLDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KMOL/CUM

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 29.3059
B = -0.108040E-01
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 284.00 TO 446.85 C

DNSDIP DIPPR solid density

$$\text{DNSDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C

PROP UNITS: KMOL/CUM

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 31.0747
B = -0.503850E-02
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -0.00 TO 26.00 C

KLDIP

DIPPR LIQUID
THERMAL CONDUCTIVITY

$$KL = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: INPUT

A = 0.199118E-01
B = 0.115215E-02
C = -0.437028E-05
D = 0.643967E-08
E = -0.360279E-11
T RANGE = 320.00 TO 690.12 C

KSPOLY

SOLID THERMAL CONDUCTIVITY

$$KS = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: KCAL-M/HR-SQM-K

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 44.6449
B = 0.00000
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = -273.15 TO 726.85 C

MULDIP

DIPPR liquid viscosity

$$\text{LN(MULDIP)} = A + B/T + C \text{ LN}(T) + DT^E$$

TEMP UNITS: K PROP UNITS: CP

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = -2.52194
B = 2049.70
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 557.15 TO 593.15 K

PLXANT EXTENDED ANTOINE VAPOR PRESSURE

$$\text{LN(PL)} = A + B/(T + C) + DT + E \text{ LN}(T) + FT^G$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: BAR

SET: 1 SOURCE: SOLIDS
A = -0.100000E+21
B = 0.00000
C = 273.150
D = 0.00000
E = 0.00000
F = 0.00000
G = 0.00000
T RANGE = -273.15 TO 1726.85 C

SIGDIP DIPPR liquid surface tension

$$\text{SIGDIP} = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$$

TEMP UNITS: C PROP UNITS: DYNE/CM

SET: 1 SOURCE: PURE37
A = 140.809
B = -0.644000E-01
C = 0.00000
D = 0.00000
E = 0.00000
T RANGE = 281.00 TO 320.00 C

VLBROC BRELVI-O-CONNELL
VOLUME PARAMETER

TEMP UNITS: C PROP UNITS: CC/MOL

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 93.9446
B = 0.00000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

WATSOL WATER SOLUBILITY

$$\text{LN}(X\text{WSOL}) = A + B/T + CT$$

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = -5.30000
B = -500.000
C = 0.00000
T RANGE = 0.00 TO 1000.00

VECTOR PARAMETERS

ATOMNO ATOMIC NUMBER OF ALL ELEMENTS

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 7.00000
B = 11.0000
C = 8.00000

NOATOM NUMBER OF OCCURENCES FOR
EACH TYPE OF ELEMENT

SET: 1 SOURCE: PURE37

A = 1.00000
B = 1.00000
C = 2.00000

BINARY PARAMETERS

HENRY HENRY-S CONSTANTS

$$\text{LN}(\text{HIJ}) = \text{AIJ} + \text{BIJ}/T + \text{CIJ LN}(T) + \text{DIJ T} + \text{EIJ} / T^2$$

THIS PARAMETER IS UNSYMMETRIC, BUT ONLY VALUE I-J ALLOWED

UNITS: BAR

SET: 1

COMP I COMP J VALUE I-J

HYDROGEN ACETO-01 Aij = 20.3388

Bij = 46.9550
Cij = -2.21340
Dij = 0.789000E-03
Gij = 0.00000

T RANGE = 191.25 TO 313.15 K
SOURCE = INPUT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

HYDROGEN WATER Aij = 180.066
 Bij = -6993.51
 Cij = -26.3119
 Dij = 0.150431E-01
 Gij = 0.00000

 T RANGE = 274.00 TO 339.00 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 ISOPR-01 Aij = 12.1397
 Bij = -2401.90
 Cij = 0.00000
 Dij = 0.00000
 Gij = 0.00000

 T RANGE = 293.15 TO 333.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 WATER Aij = 299.173
 Bij = -15567.4
 Cij = -41.7376
 Dij = 0.00000
 Gij = 0.00000

 T RANGE = 294.00 TO 378.00 K
 SOURCE = INPUT

NRTL NRTL BINARY PARAMETERS

 GIJ = EXP (-ALPHA TAU) IJ

 TAU = AIJ + BIJ/T + EIJ LN(T) + FIJ T

 ALPHA = CIJ + DIJ (T - 273.15 K)

 UNITS: K

SET: 1

COMP I	COMP J	VALUE I-J		VALUE J-I	
HYDROGEN	PROPY-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= -827.815	Bji	= 1703.31
		Cij	= 0.300000	Cji	= 0.300000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Eij	= 0.00000	Eji	= 0.00000
		Fij	= 0.00000	Fji	= 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

HYDROGEN ACETO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -1019.47 Bji = 2566.20
 Cij = 0.30000 Cji = 0.30000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

HYDROGEN DIISO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -1729.73 Bji = 9461.06
 Cij = 0.30000 Cji = 0.30000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

HYDROGEN ISOPR-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -1513.27 Bji = 6517.68
 Cij = 0.30000 Cji = 0.30000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

HYDROGEN WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -449.670 Bji = 638.345
 Cij = 0.30000 Cji = 0.30000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

HYDROGEN DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -2732.48 Bji = 30000.0
 Cij = 0.30000 Cji = 0.30000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PROPY-01 ACETO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 422.635 Bji = -29.4132
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

PROPY-01 DIISO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = -324.739 Bji = 414.729
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

PROPY-01 ISOPR-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 645.402 Bji = -48.7834
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

PROPY-01 WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 701.138 Bji = 1263.20
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

PROPY-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 916.197 Bji = -186.916
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

ACETO-01 DIISO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 456.620 Bji = 75.9716
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 324.05 TO 335.05 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 ISOPR-01 Aij = -2.41060 Aji = 2.44940
Bij = 822.489 Bji = -583.345
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 355.45 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 WATER Aij = 6.39810 Aji = 0.544000E-01
Bij = -1808.99 Bji = 419.972
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 293.15 TO 368.25 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 873.660 Bji = -759.481
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 329.15 TO 437.15 K
SOURCE = INPUT

DIISO-01 ISOPR-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 419.808 Bji = 40.0040
Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 338.65 TO 355.55 K
SOURCE = INPUT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

DIISO-01 WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = 770.566 Bji = 1484.16
 Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 336.15 TO 373.15 K
 SOURCE = INPUT

DIISO-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = 856.883 Bji = 81.1617
 Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

ISOPR-01 WATER Aij = -1.31150 Aji = 6.82840
 Bij = 426.398 Bji = -1483.46
 Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 373.15 K
 SOURCE = INPUT

ISOPR-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = 329.885 Bji = -198.875
 Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

WATER DIACE-01 Aij = 6.22380 Aji = -0.741300
 Bij = -1245.74 Bji = 184.223
 Cij = 0.300000 Cji = 0.300000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Eij = 0.00000 Eji = 0.00000
 Fij = 0.00000 Fji = 0.00000

T RANGE = 311.35 TO 382.25 K
SOURCE = INPUT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

UNIQUAC BINARY PARAMETERS

$$\ln(\tau_{AIJ}) = A_{IJ} + B_{IJ}/T + C_{IJ} \ln(T) + D_{IJ} T + E_{IJ} / T^2$$

UNITS: K

SET: 1

COMP I	COMP J	VALUE I-J		VALUE J-I	
HYDROGEN	PROPY-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 35.5764	Bji	= -25.0275
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		
HYDROGEN	ACETO-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 82.2834	Bji	= -10.2573
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		
HYDROGEN	DIISO-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 106.570	Bji	= -84.7299
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		
HYDROGEN	ISOPR-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 134.045	Bji	= 133.004
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

HYDROGEN WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -38.0945 Bji = 36.1499
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

HYDROGEN DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = 123.421 Bji = 93.2053
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 ACETO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -187.060 Bji = 14.9791
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 DIISO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = 20.0666 Bji = -34.4406
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 ISOPR-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -273.092 Bji = 32.8648
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -423.800 Bji = -404.090

Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
T RANGE	=	298.15	TO	298.15	K
SOURCE	=	INPUT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PROPY-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = -225.935 Bji = 36.0484
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 DIISO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = -12.5639 Bji = -168.730
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 324.05 TO 335.05 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 ISOPR-01 Aij = 2.70880 Aji = -3.45300
Bij = -828.877 Bji = 947.674
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 355.45 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 WATER Aij = 8.60510 Aji = -4.83380
Bij = -3122.58 Bji = 1612.20
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 293.15 TO 368.25 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = -222.066 Bji = 256.660
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 329.15 TO 437.15 K
SOURCE = INPUT

DIISO-01 ISOPR-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = -353.648 Bji = 129.099

Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
T RANGE	=	338.65	TO	355.55	K
SOURCE	=	INPUT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

DIISO-01 WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -774.712 Bji = -29.5920
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 336.15 TO 373.15 K
 SOURCE = INPUT

DIISO-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -317.286 Bji = 87.1903
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

ISOPR-01 WATER Aij = 2.92340 Aji = -3.31270
 Bij = -1111.67 Bji = 1045.58
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 373.15 K
 SOURCE = INPUT

ISOPR-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -44.9401 Bji = 13.3988
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

WATER DIACE-01 Aij = -0.608700 Aji = 1.00630
 Bij = 377.428 Bji = -869.321
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 311.35 TO 382.25 K
 SOURCE = INPUT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

WILSON WILSON BINARY PARAMETERS

$$\ln(\tau_{AIJ}) = A_{IJ} + B_{IJ}/T + C_{IJ} \ln(T) + D_{IJ} T + E_{IJ} / T^2$$

UNITS: K

SET: 1

COMP I	COMP J	VALUE I-J		VALUE J-I	
HYDROGEN	PROPY-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 410.897	Bji	= -363.847
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		
HYDROGEN	ACETO-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 465.472	Bji	= -296.962
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		
HYDROGEN	DIISO-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 631.997	Bji	= -456.068
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		
HYDROGEN	ISOPR-01	Aij	= 0.00000	Aji	= 0.00000
		Bij	= 568.784	Bji	= -206.655
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		Dij	= 0.00000	Dji	= 0.00000
		Gij	= 0.00000	Gji	= 0.00000
		T RANGE	= 298.15	TO	298.15 K
		SOURCE	= INPUT		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

HYDROGEN WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = 216.335 Bji = -203.963
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

HYDROGEN DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = 719.835 Bji = -303.399
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 ACETO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -77.1857 Bji = -429.218
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 DIISO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -421.864 Bji = 277.223
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 ISOPR-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -35.6897 Bji = -560.528
 Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
 Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
 Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

 T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
 SOURCE = INPUT

PROPY-01 WATER Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
 Bij = -1334.56 Bji = -760.759

Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
T RANGE	=	298.15	TO	298.15	K
SOURCE	=	INPUT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

PROPY-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 100.978 Bji = -810.787
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 298.15 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 DIISO-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = -134.546 Bji = -440.770
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 324.05 TO 335.05 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 ISOPR-01 Aij = -1.50600 Aji = 1.61700
Bij = 301.609 Bji = -600.761
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 298.15 TO 355.45 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 WATER Aij = -8.51450 Aji = 2.26590
Bij = 2265.05 Bji = -1044.38
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 293.15 TO 503.15 K
SOURCE = INPUT

ACETO-01 DIACE-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = 614.383 Bji = -1613.98
Cij = 0.00000 Cji = 0.00000
Dij = 0.00000 Dji = 0.00000
Gij = 0.00000 Gji = 0.00000

T RANGE = 329.15 TO 437.15 K
SOURCE = INPUT

DIISO-01 ISOPR-01 Aij = 0.00000 Aji = 0.00000
Bij = -111.993 Bji = -372.202

Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
T RANGE	=	338.65	TO	355.55	K
SOURCE	=	INPUT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

DIISO-01 WATER	Aij	=	0.00000	Aji	=	0.00000
	Bij	=	-1891.06	Bji	=	-961.313
	Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
	Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
	Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
	T RANGE	=	336.15	TO	=	373.15 K
	SOURCE	=	INPUT			
DIISO-01 DIACE-01	Aij	=	0.00000	Aji	=	0.00000
	Bij	=	-164.850	Bji	=	-805.048
	Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
	Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
	Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
	T RANGE	=	298.15	TO	=	298.15 K
	SOURCE	=	INPUT			
ISOPR-01 WATER	Aij	=	-6.03200	Aji	=	0.137200
	Bij	=	1294.69	Bji	=	-183.040
	Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
	Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
	Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
	T RANGE	=	298.15	TO	=	417.76 K
	SOURCE	=	INPUT			
ISOPR-01 DIACE-01	Aij	=	0.00000	Aji	=	0.00000
	Bij	=	134.104	Bji	=	-256.294
	Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
	Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
	Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
	T RANGE	=	298.15	TO	=	298.15 K
	SOURCE	=	INPUT			
WATER DIACE-01	Aij	=	0.524900	Aji	=	-7.07160
	Bij	=	-255.186	Bji	=	1626.59
	Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
	Dij	=	0.00000	Dji	=	0.00000
	Gij	=	0.00000	Gji	=	0.00000
	T RANGE	=	311.35	TO	=	382.25 K
	SOURCE	=	INPUT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GROUP PARAMETERS

GROUP NUMBER: 3810

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.571000

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.416000

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.570500

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.416000

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.571000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.571000

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.416000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.416000

GROUP NUMBER: 1015

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.06080

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.632500

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.848000

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.901100

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.848000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.848000

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.901100

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.901100

GROUP NUMBER: 1070

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.60160

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.28320

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.17600

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.34540

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.17600

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 1.17600

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.34540

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 1.34540

GROUP NUMBER: 1405

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.67000

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.70480

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.48800

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.67240

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.48800

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 1.48800

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.67240

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 1.67240

GROUP NUMBER: 1005

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.355400

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.632500

GMUFLQ

LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.228000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.446900

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.228000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.228000

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.446900

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.446900

GROUP NUMBER: 1605

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.896800

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.14340

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.650000

GMUFLR

LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.690800

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.468000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.468000

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.690800

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.690800

GROUP NUMBER: 1200

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.892700

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.23020

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.20000

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.00000

GMUFAQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.20000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 1.20000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 1.00000

GROUP NUMBER: 3050

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 3.12400

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 3.12400

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 3.24910

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 3.24910

GROUP NUMBER: 1300

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 2.45610

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.73340

GMUFLQ

LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.4000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.920000

GMUFQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.40000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 1.40000

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.920000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.920000

GROUP NUMBER: 1000

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.00000

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.632500

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.00000

GMUFLR

LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.219500

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFAQ UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.00000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.00000

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.219500

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.219500

GROUP NUMBER: 1010

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.708100

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.632500

GMUFLQ LYNGBY-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.540000

GMUFLR LYNGBY-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.674400

GMUFG UNIFAC GROUP AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.540000

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.540000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFR UNIFAC GROUP VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.674400

SET: 2 SOURCE: DEFAULT

A = 0.674400

GROUP NUMBER: 1210

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.866300

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 1.06300

GROUP NUMBER: 1220

GMUFDQ DORTMUND-UNIFAC GROUP
AREA PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.834500

GMUFDR DORTMUND-UNIFAC GROUP
VOLUME PARAMETER

SET: 1 SOURCE: DEFAULT

A = 0.689500

GROUP BINARY PARAMETERS

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

GMUFB UNIFAC GROUP BINARY PARAMETER

$$\ln(\tau_{AIJ}) = -BIJ/T$$

SET: 1

COMP I	COMP J		VALUE I-J		VALUE J-I
1015	1070	Bij SOURCE	= 86.0200 = DEFAULT	Bji	= -35.3600
1015	1405	Bij SOURCE	= 476.400 = DEFAULT	Bji	= 26.7600
1015	1605	Bij SOURCE	= 251.500 = DEFAULT	Bji	= 83.3600
1015	1200	Bij SOURCE	= 986.500 = DEFAULT	Bji	= 156.400
1015	1300	Bij SOURCE	= 1318.00 = DEFAULT	Bji	= 300.000
1070	1405	Bij SOURCE	= 182.600 = DEFAULT	Bji	= 42.9200
1070	1005	Bij SOURCE	= -35.3600 = DEFAULT	Bji	= 86.0200
1070	1605	Bij SOURCE	= 214.500 = DEFAULT	Bji	= 26.5100
1070	1200	Bij SOURCE	= 524.100 = DEFAULT	Bji	= 457.000
1070	1300	Bij SOURCE	= 270.600 = DEFAULT	Bji	= 496.100
1070	1000	Bij SOURCE	= -35.3600 = DEFAULT	Bji	= 86.0200
1070	1010	Bij SOURCE	= -35.3600 = DEFAULT	Bji	= 86.0200
1405	1005	Bij SOURCE	= 26.7600 = DEFAULT	Bji	= 476.400

1405	1605	Bij	=	-103.600	Bji	=	191.100
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1200	Bij	=	164.500	Bji	=	84.0000
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1405	1300	Bij	=	472.500	Bji	=	-195.400
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1000	Bij	=	26.7600	Bji	=	476.400
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1405	1010	Bij	=	26.7600	Bji	=	476.400
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1605	Bij	=	251.500	Bji	=	83.3600
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1200	Bij	=	986.500	Bji	=	156.400
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1300	Bij	=	1318.00	Bji	=	300.000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1200	Bij	=	237.700	Bji	=	28.0600
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1300	Bij	=	-314.700	Bji	=	540.500
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1000	Bij	=	83.3600	Bji	=	251.500
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1010	Bij	=	83.3600	Bji	=	251.500
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1300	Bij	=	353.500	Bji	=	-229.100
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1000	Bij	=	156.400	Bji	=	986.500
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1010	Bij	=	156.400	Bji	=	986.500
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1000	Bij	=	300.000	Bji	=	1318.00
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1010	Bij	=	300.000	Bji	=	1318.00
		SOURCE	=	DEFAULT			

SET: 2

COMP I	COMP J		VALUE I-J		VALUE J-I		
1015	1070	Bij	=	74.5400	Bji	=	292.300
		SOURCE	=	DEFAULT			
1015	1405	Bij	=	472.600	Bji	=	66.5600

SOURCE = DEFAULT

1015 1605 Bij = 662.100 Bji = 1571.00
 SOURCE = DEFAULT

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1015	1200	Bij SOURCE	= =	644.600 DEFAULT	Bji	=	328.200
1015	3050	Bij SOURCE	= =	310.700 DEFAULT	Bji	=	-131.900
1015	1300	Bij SOURCE	= =	1300.00 DEFAULT	Bji	=	342.400
1070	1405	Bij SOURCE	= =	343.700 DEFAULT	Bji	=	306.100
1070	1005	Bij SOURCE	= =	292.300 DEFAULT	Bji	=	74.5400
1070	1605	Bij SOURCE	= =	214.500 DEFAULT	Bji	=	26.5100
1070	1200	Bij SOURCE	= =	724.400 DEFAULT	Bji	=	470.700
1070	3050	Bij SOURCE	= =	1731.00 DEFAULT	Bji	=	-135.700
1070	1300	Bij SOURCE	= =	896.000 DEFAULT	Bji	=	220.600
1070	1000	Bij SOURCE	= =	292.300 DEFAULT	Bji	=	74.5400
1070	1010	Bij SOURCE	= =	292.300 DEFAULT	Bji	=	74.5400
1405	1005	Bij SOURCE	= =	66.5600 DEFAULT	Bji	=	472.600
1405	1605	Bij SOURCE	= =	-103.600 DEFAULT	Bji	=	191.100
1405	1200	Bij SOURCE	= =	216.000 DEFAULT	Bji	=	67.0700
1405	3050	Bij SOURCE	= =	-127.600 DEFAULT	Bji	=	353.800
1405	1300	Bij SOURCE	= =	634.800 DEFAULT	Bji	=	-171.800

1405	1000	Bij	=	66.5600	Bji	=	472.600
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1010	Bij	=	66.5600	Bji	=	472.600
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1005	1605	Bij	=	662.100	Bji	=	1571.00
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1200	Bij	=	644.600	Bji	=	328.200
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	3050	Bij	=	310.700	Bji	=	-131.900
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1300	Bij	=	1300.00	Bji	=	342.400
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1200	Bij	=	137.100	Bji	=	262.500
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	3050	Bij	=	-218.100	Bji	=	1970.00
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1300	Bij	=	212.800	Bji	=	64.4200
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1000	Bij	=	1571.00	Bji	=	662.100
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1010	Bij	=	1571.00	Bji	=	662.100
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	3050	Bij	=	991.300	Bji	=	-268.800
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1300	Bij	=	28.7300	Bji	=	-122.400
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1000	Bij	=	328.200	Bji	=	644.600
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1010	Bij	=	328.200	Bji	=	644.600
		SOURCE	=	DEFAULT			
3050	1300	Bij	=	5.89000	Bji	=	104.900
		SOURCE	=	DEFAULT			
3050	1000	Bij	=	-131.900	Bji	=	310.700
		SOURCE	=	DEFAULT			
3050	1010	Bij	=	-131.900	Bji	=	310.700
		SOURCE	=	DEFAULT			

1300	1000	Bij	=	342.400	Bji	=	1300.00
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1010	Bij	=	342.400	Bji	=	1300.00
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

UNIFDM DORTMUND-UNIFAC GROUP
BINARY PARAMETERS

$$AMN = A + BT + CT^2$$

UNITS: K

SET: 1

COMP I	COMP J		VALUE I-J		VALUE J-I
1015	1070	Aij	= 189.660	Aji	= -95.4180
		Bij	= -0.272320	Bji	= 0.617080E-01
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		SOURCE	= DEFAULT		
1015	1405	Aij	= 433.600	Aji	= 199.000
		Bij	= 0.147300	Bji	= -0.870900
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		SOURCE	= DEFAULT		
1015	1605	Aij	= 233.100	Aji	= -9.65400
		Bij	= -0.315500	Bji	= -0.324200E-01
		Cij	= 0.00000	Cji	= 0.00000
		SOURCE	= DEFAULT		
1015	1200	Aij	= 2777.00	Aji	= 1606.00
		Bij	= -4.67400	Bji	= -4.74600
		Cij	= 0.155100E-02	Cji	= 0.918100E-03
		SOURCE	= DEFAULT		
1015	1300	Aij	= 1391.30	Aji	= -17.2530
		Bij	= -3.61560	Bji	= 0.838900
		Cij	= 0.114400E-02	Cji	= 0.902100E-03
		SOURCE	= DEFAULT		
1015	1210	Aij	= 2777.00	Aji	= 1606.00
		Bij	= -4.67400	Bji	= -4.74600
		Cij	= 0.155100E-02	Cji	= 0.918100E-03
		SOURCE	= DEFAULT		
1015	1220	Aij	= 2777.00	Aji	= 1606.00
		Bij	= -4.67400	Bji	= -4.74600
		Cij	= 0.155100E-02	Cji	= 0.918100E-03
		SOURCE	= DEFAULT		
1070	1405	Aij	= 179.800	Aji	= 91.8110

```
Bij      =  0.699110      Bji      = -0.717150
Cij      =  0.00000      Cji      =  0.00000
SOURCE   = DEFAULT
```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1070	1005	Aij	=	-95.4180	Aji	=	189.660
		Bij	=	0.617080E-01	Bji	=	-0.272320
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1070	1605	Aij	=	733.300	Aji	=	-844.300
		Bij	=	-2.50900	Bji	=	2.94500
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1200	Aij	=	2649.00	Aji	=	1566.00
		Bij	=	-6.50800	Bji	=	-5.80900
		Cij	=	0.482200E-02	Cji	=	0.519700E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1300	Aij	=	778.300	Aji	=	-1301.00
		Bij	=	0.148200	Bji	=	4.07200
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1000	Aij	=	-95.4180	Aji	=	189.660
		Bij	=	0.617080E-01	Bji	=	-0.272320
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1010	Aij	=	-95.4180	Aji	=	189.660
		Bij	=	0.617080E-01	Bji	=	-0.272320
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1210	Aij	=	2649.00	Aji	=	1566.00
		Bij	=	-6.50800	Bji	=	-5.80900
		Cij	=	0.482200E-02	Cji	=	0.519700E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1220	Aij	=	2649.00	Aji	=	1566.00
		Bij	=	-6.50800	Bji	=	-5.80900
		Cij	=	0.482200E-02	Cji	=	0.519700E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1005	Aij	=	199.000	Aji	=	433.600
		Bij	=	-0.870900	Bji	=	0.147300
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1605	Aij	=	3645.00	Aji	=	695.800
		Bij	=	-26.9100	Bji	=	-0.961900
		Cij	=	0.475700E-01	Cji	=	-0.246200E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1200	Aij	=	653.300	Aji	=	-250.000
		Bij	=	-1.41200	Bji	=	2.85700

		Cij	=	0.954000E-03	Cji	=	-0.602200E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1300	Aij	=	770.600	Aji	=	190.500
		Bij	=	-0.587300	Bji	=	-3.66900
		Cij	=	-0.325200E-02	Cji	=	0.883800E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1405	1000	Aij	=	199.000	Aji	=	433.600
		Bij	=	-0.870900	Bji	=	0.147300
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1010	Aij	=	199.000	Aji	=	433.600
		Bij	=	-0.870900	Bji	=	0.147300
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1210	Aij	=	653.300	Aji	=	-250.000
		Bij	=	-1.41200	Bji	=	2.85700
		Cij	=	0.954000E-03	Cji	=	-0.602200E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1220	Aij	=	653.300	Aji	=	-250.000
		Bij	=	-1.41200	Bji	=	2.85700
		Cij	=	0.954000E-03	Cji	=	-0.602200E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1605	Aij	=	233.100	Aji	=	-9.65400
		Bij	=	-0.315500	Bji	=	-0.324200E-01
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1200	Aij	=	2777.00	Aji	=	1606.00
		Bij	=	-4.67400	Bji	=	-4.74600
		Cij	=	0.155100E-02	Cji	=	0.918100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1300	Aij	=	1391.30	Aji	=	-17.2530
		Bij	=	-3.61560	Bji	=	0.838900
		Cij	=	0.114400E-02	Cji	=	0.902100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1210	Aij	=	2777.00	Aji	=	1606.00
		Bij	=	-4.67400	Bji	=	-4.74600
		Cij	=	0.155100E-02	Cji	=	0.918100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1220	Aij	=	2777.00	Aji	=	1606.00
		Bij	=	-4.67400	Bji	=	-4.74600
		Cij	=	0.155100E-02	Cji	=	0.918100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1200	Aij	=	650.900	Aji	=	816.700
		Bij	=	-0.713200	Bji	=	-5.09200

		Cij	=	0.815000E-03	Cji	=	0.606500E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1300	Aij	=	433.207	Aji	=	177.665
		Bij	=	-0.605276	Bji	=	-3.72906
		Cij	=	-0.914000E-03	Cji	=	0.107630E-01
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1605	1000	Aij	=	-9.65400	Aji	=	233.100
		Bij	=	-0.324200E-01	Bji	=	-0.315500
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1010	Aij	=	-9.65400	Aji	=	233.100
		Bij	=	-0.324200E-01	Bji	=	-0.315500
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1210	Aij	=	650.900	Aji	=	816.700
		Bij	=	-0.713200	Bji	=	-5.09200
		Cij	=	0.815000E-03	Cji	=	0.606500E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1220	Aij	=	650.900	Aji	=	816.700
		Bij	=	-0.713200	Bji	=	-5.09200
		Cij	=	0.815000E-03	Cji	=	0.606500E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1300	Aij	=	-801.900	Aji	=	1460.00
		Bij	=	3.82400	Bji	=	-8.67300
		Cij	=	-0.751400E-02	Cji	=	0.164100E-01
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1000	Aij	=	1606.00	Aji	=	2777.00
		Bij	=	-4.74600	Bji	=	-4.67400
		Cij	=	0.918100E-03	Cji	=	0.155100E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1010	Aij	=	1606.00	Aji	=	2777.00
		Bij	=	-4.74600	Bji	=	-4.67400
		Cij	=	0.918100E-03	Cji	=	0.155100E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1000	Aij	=	-17.2530	Aji	=	1391.30
		Bij	=	0.838900	Bji	=	-3.61560
		Cij	=	0.902100E-03	Cji	=	0.114400E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1010	Aij	=	-17.2530	Aji	=	1391.30
		Bij	=	0.838900	Bji	=	-3.61560
		Cij	=	0.902100E-03	Cji	=	0.114400E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1210	Aij	=	1460.00	Aji	=	-801.900
		Bij	=	-8.67300	Bji	=	3.82400

		Cij	=	0.164100E-01	Cji	=	-0.751400E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1220	Aij	=	1460.00	Aji	=	-801.900
		Bij	=	-8.67300	Bji	=	3.82400
		Cij	=	0.164100E-01	Cji	=	-0.751400E-02
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1000	1210	Aij	=	2777.00	Aji	=	1606.00
		Bij	=	-4.67400	Bji	=	-4.74600
		Cij	=	0.155100E-02	Cji	=	0.918100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			
1000	1220	Aij	=	2777.00	Aji	=	1606.00
		Bij	=	-4.67400	Bji	=	-4.74600
		Cij	=	0.155100E-02	Cji	=	0.918100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			
1010	1210	Aij	=	2777.00	Aji	=	1606.00
		Bij	=	-4.67400	Bji	=	-4.74600
		Cij	=	0.155100E-02	Cji	=	0.918100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			
1010	1220	Aij	=	2777.00	Aji	=	1606.00
		Bij	=	-4.67400	Bji	=	-4.74600
		Cij	=	0.155100E-02	Cji	=	0.918100E-03
		SOURCE	=	DEFAULT			

UNIFLB LYNGBY-UNIFAC GROUP
BINARY PARAMETERS

$$AMN = A + B (T-T0) + C(T \ln(T0/T) + (T-T0))$$

UNITS: C

SET: 1

COMP I	COMP J		VALUE I-J		VALUE J-I		
1015	1070	Aij	=	76.4600	Aji	=	-46.4500
		Bij	=	-0.183400	Bji	=	-0.181700
		Cij	=	-0.365900	Cji	=	-0.488800
		SOURCE	=	DEFAULT			
1015	1405	Aij	=	414.000	Aji	=	71.9300
		Bij	=	-0.516500	Bji	=	-0.796000
		Cij	=	1.80300	Cji	=	-2.91600
		SOURCE	=	DEFAULT			
1015	1605	Aij	=	230.500	Aji	=	369.900
		Bij	=	-1.32800	Bji	=	-1.54200
		Cij	=	-2.47600	Cji	=	-3.22800
		SOURCE	=	DEFAULT			
1015	1200	Aij	=	972.800	Aji	=	637.500

Bij	=	0.268700	Bji	=	-5.83200
Cij	=	8.77300	Cji	=	-0.870300
SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1015	1300	Aij	=	1857.00	Aji	=	410.700
		Bij	=	-3.32200	Bji	=	2.86800
		Cij	=	-9.00000	Cji	=	9.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1405	Aij	=	577.500	Aji	=	-144.300
		Bij	=	0.00000	Bji	=	0.00000
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1005	Aij	=	-46.4500	Aji	=	76.4600
		Bij	=	-0.181700	Bji	=	-0.183400
		Cij	=	-0.488800	Cji	=	-0.365900
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1605	Aij	=	321.600	Aji	=	-17.2300
		Bij	=	4.55100	Bji	=	-1.64800
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1200	Aij	=	633.500	Aji	=	794.700
		Bij	=	0.00000	Bji	=	0.00000
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1300	Aij	=	1049.00	Aji	=	564.400
		Bij	=	-3.30500	Bji	=	0.00000
		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1000	Aij	=	-46.4500	Aji	=	76.4600
		Bij	=	-0.181700	Bji	=	-0.183400
		Cij	=	-0.488800	Cji	=	-0.365900
		SOURCE	=	DEFAULT			
1070	1010	Aij	=	-46.4500	Aji	=	76.4600
		Bij	=	-0.181700	Bji	=	-0.183400
		Cij	=	-0.488800	Cji	=	-0.365900
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1005	Aij	=	71.9300	Aji	=	414.000
		Bij	=	-0.796000	Bji	=	-0.516500
		Cij	=	-2.91600	Cji	=	1.80300
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1605	Aij	=	-48.0000	Aji	=	160.400
		Bij	=	-0.509700	Bji	=	0.548400

		Cij	=	0.00000	Cji	=	0.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1200	Aij	=	179.600	Aji	=	161.000
		Bij	=	-1.28500	Bji	=	0.750100
		Cij	=	4.00700	Cji	=	9.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1405	1300	Aij	=	272.400	Aji	=	40.2000
		Bij	=	-1.84200	Bji	=	1.66800
		Cij	=	0.330300	Cji	=	-1.99400
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1000	Aij	=	71.9300	Aji	=	414.000
		Bij	=	-0.796000	Bji	=	-0.516500
		Cij	=	-2.91600	Cji	=	1.80300
		SOURCE	=	DEFAULT			
1405	1010	Aij	=	71.9300	Aji	=	414.000
		Bij	=	-0.796000	Bji	=	-0.516500
		Cij	=	-2.91600	Cji	=	1.80300
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1605	Aij	=	230.500	Aji	=	369.900
		Bij	=	-1.32800	Bji	=	-1.54200
		Cij	=	-2.47600	Cji	=	-3.22800
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1200	Aij	=	972.800	Aji	=	637.500
		Bij	=	0.268700	Bji	=	-5.83200
		Cij	=	8.77300	Cji	=	-0.870300
		SOURCE	=	DEFAULT			
1005	1300	Aij	=	1857.00	Aji	=	410.700
		Bij	=	-3.32200	Bji	=	2.86800
		Cij	=	-9.00000	Cji	=	9.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1200	Aij	=	137.100	Aji	=	227.000
		Bij	=	-1.11500	Bji	=	1.36400
		Cij	=	4.43800	Cji	=	3.32400
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1300	Aij	=	183.100	Aji	=	19.5400
		Bij	=	-2.50700	Bji	=	1.29300
		Cij	=	0.00000	Cji	=	-8.85000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1000	Aij	=	369.900	Aji	=	230.500
		Bij	=	-1.54200	Bji	=	-1.32800
		Cij	=	-3.22800	Cji	=	-2.47600
		SOURCE	=	DEFAULT			
1605	1010	Aij	=	369.900	Aji	=	230.500
		Bij	=	-1.54200	Bji	=	-1.32800

		Cij	=	-3.22800	Cji	=	-2.47600
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1300	Aij	=	155.600	Aji	=	-47.1500
		Bij	=	0.376100	Bji	=	-0.494700
		Cij	=	-9.00000	Cji	=	8.65000
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTIES SECTION

PROPERTY PARAMETERS (CONTINUED)

1200	1000	Aij	=	637.500	Aji	=	972.800
		Bij	=	-5.83200	Bji	=	0.268700
		Cij	=	-0.870300	Cji	=	8.77300
		SOURCE	=	DEFAULT			
1200	1010	Aij	=	637.500	Aji	=	972.800
		Bij	=	-5.83200	Bji	=	0.268700
		Cij	=	-0.870300	Cji	=	8.77300
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1000	Aij	=	410.700	Aji	=	1857.00
		Bij	=	2.86800	Bji	=	-3.32200
		Cij	=	9.00000	Cji	=	-9.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			
1300	1010	Aij	=	410.700	Aji	=	1857.00
		Bij	=	2.86800	Bji	=	-3.32200
		Cij	=	9.00000	Cji	=	-9.00000
		SOURCE	=	DEFAULT			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS

 FOR COMPONENT PAIRS CONTAINING HYDROGEN

DESCRIPTION		PARAMETER NAME	ESTIMATED VALUE	METHOD OF ESTIMATION
-----		-----	-----	-----
WILSON PARAMETERS				UNIFAC
HYDROGEN	PROPY-01	WILSON/2	410.9	
PROPY-01	HYDROGEN	WILSON/2	-363.8	
HYDROGEN	ACETO-01	WILSON/2	465.5	
ACETO-01	HYDROGEN	WILSON/2	-297.0	
HYDROGEN	DIISO-01	WILSON/2	632.0	
DIISO-01	HYDROGEN	WILSON/2	-456.1	
HYDROGEN	ISOPR-01	WILSON/2	568.8	
ISOPR-01	HYDROGEN	WILSON/2	-206.7	
HYDROGEN	WATER	WILSON/2	216.3	
WATER	HYDROGEN	WILSON/2	-204.0	
HYDROGEN	DIACE-01	WILSON/2	719.8	
DIACE-01	HYDROGEN	WILSON/2	-303.4	
NRTL PARAMETERS				UNIFAC
HYDROGEN	PROPY-01	NRTL /2	-827.8	
PROPY-01	HYDROGEN	NRTL /2	1703.	
HYDROGEN	PROPY-01	NRTL /3	0.3000	
PROPY-01	HYDROGEN	NRTL /3	0.3000	
HYDROGEN	ACETO-01	NRTL /2	-1019.	
ACETO-01	HYDROGEN	NRTL /2	2566.	
HYDROGEN	ACETO-01	NRTL /3	0.3000	
ACETO-01	HYDROGEN	NRTL /3	0.3000	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

HYDROGEN	DIISO-01	NRTL	/2	-1730.
DIISO-01	HYDROGEN	NRTL	/2	9461.
HYDROGEN	DIISO-01	NRTL	/3	0.3000
DIISO-01	HYDROGEN	NRTL	/3	0.3000
HYDROGEN	ISOPR-01	NRTL	/2	-1513.
ISOPR-01	HYDROGEN	NRTL	/2	6518.
HYDROGEN	ISOPR-01	NRTL	/3	0.3000
ISOPR-01	HYDROGEN	NRTL	/3	0.3000
HYDROGEN	WATER	NRTL	/2	-449.7
WATER	HYDROGEN	NRTL	/2	638.3
HYDROGEN	WATER	NRTL	/3	0.3000
WATER	HYDROGEN	NRTL	/3	0.3000
HYDROGEN	DIACE-01	NRTL	/2	-2732.
DIACE-01	HYDROGEN	NRTL	/2	0.3000E+05
HYDROGEN	DIACE-01	NRTL	/3	0.3000
DIACE-01	HYDROGEN	NRTL	/3	0.3000

UNIQUAC PARAMETERS

UNIFAC

HYDROGEN	PROPY-01	UNIQUAC	/2	35.58
PROPY-01	HYDROGEN	UNIQUAC	/2	-25.03
HYDROGEN	ACETO-01	UNIQUAC	/2	82.28
ACETO-01	HYDROGEN	UNIQUAC	/2	-10.26
HYDROGEN	DIISO-01	UNIQUAC	/2	106.6
DIISO-01	HYDROGEN	UNIQUAC	/2	-84.73
HYDROGEN	ISOPR-01	UNIQUAC	/2	134.0
ISOPR-01	HYDROGEN	UNIQUAC	/2	133.0
HYDROGEN	WATER	UNIQUAC	/2	-38.09
WATER	HYDROGEN	UNIQUAC	/2	36.15
HYDROGEN	DIACE-01	UNIQUAC	/2	123.4
DIACE-01	HYDROGEN	UNIQUAC	/2	93.21

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

FOR COMPONENT PAIRS CONTAINING PROPY-01

DESCRIPTION		PARAMETER NAME	ESTIMATED VALUE	METHOD OF ESTIMATION
-----		-----	-----	-----
WILSON PARAMETERS				UNIFAC
PROPY-01	ACETO-01	WILSON/2	-20.59	
ACETO-01	PROPY-01	WILSON/2	-267.4	
PROPY-01	DIISO-01	WILSON/2	-421.9	
DIISO-01	PROPY-01	WILSON/2	277.2	
PROPY-01	ISOPR-01	WILSON/2	-35.69	
ISOPR-01	PROPY-01	WILSON/2	-560.5	
PROPY-01	WATER	WILSON/2	-1335.	
WATER	PROPY-01	WILSON/2	-760.8	
PROPY-01	DIACE-01	WILSON/2	101.0	
DIACE-01	PROPY-01	WILSON/2	-810.8	
NRTL PARAMETERS				UNIFAC
PROPY-01	ACETO-01	NRTL /2	327.0	
ACETO-01	PROPY-01	NRTL /2	-38.14	
PROPY-01	ACETO-01	NRTL /3	0.3000	
ACETO-01	PROPY-01	NRTL /3	0.3000	
PROPY-01	DIISO-01	NRTL /2	-324.7	
DIISO-01	PROPY-01	NRTL /2	414.7	
PROPY-01	DIISO-01	NRTL /3	0.3000	
DIISO-01	PROPY-01	NRTL /3	0.3000	
PROPY-01	ISOPR-01	NRTL /2	645.4	
ISOPR-01	PROPY-01	NRTL /2	-48.78	
PROPY-01	ISOPR-01	NRTL /3	0.3000	
ISOPR-01	PROPY-01	NRTL /3	0.3000	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

PROPY-01	WATER	NRTL	/2	701.1
WATER	PROPY-01	NRTL	/2	1263.
PROPY-01	WATER	NRTL	/3	0.3000
WATER	PROPY-01	NRTL	/3	0.3000
PROPY-01	DIACE-01	NRTL	/2	916.2
DIACE-01	PROPY-01	NRTL	/2	-186.9
PROPY-01	DIACE-01	NRTL	/3	0.3000
DIACE-01	PROPY-01	NRTL	/3	0.3000

UNIQUAC PARAMETERS

UNIFAC

PROPY-01	ACETO-01	UNIQ	/2	-132.9
ACETO-01	PROPY-01	UNIQ	/2	8.529
PROPY-01	DIISO-01	UNIQ	/2	20.07
DIISO-01	PROPY-01	UNIQ	/2	-34.44
PROPY-01	ISOPR-01	UNIQ	/2	-273.1
ISOPR-01	PROPY-01	UNIQ	/2	32.86
PROPY-01	WATER	UNIQ	/2	-423.8
WATER	PROPY-01	UNIQ	/2	-404.1
PROPY-01	DIACE-01	UNIQ	/2	-225.9
DIACE-01	PROPY-01	UNIQ	/2	36.05

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

 FOR COMPONENT PAIRS CONTAINING ACETO-01

DESCRIPTION		PARAMETER NAME		ESTIMATED VALUE	METHOD OF ESTIMATION
-----		-----		-----	-----
WILSON PARAMETERS					UNIFAC
ACETO-01	DIISO-01	WILSON/2		-206.5	
DIISO-01	ACETO-01	WILSON/2		-216.7	
ACETO-01	ISOPR-01	WILSON/2		-117.9	
ISOPR-01	ACETO-01	WILSON/2		-143.7	
ACETO-01	WATER	WILSON/2		-521.9	
WATER	ACETO-01	WILSON/2		-348.8	
ACETO-01	DIACE-01	WILSON/2		174.3	
DIACE-01	ACETO-01	WILSON/2		-251.2	
NRTL PARAMETERS					UNIFAC
ACETO-01	DIISO-01	NRTL /2		207.2	
DIISO-01	ACETO-01	NRTL /2		192.3	
ACETO-01	DIISO-01	NRTL /3		0.3000	
DIISO-01	ACETO-01	NRTL /3		0.3000	
ACETO-01	ISOPR-01	NRTL /2		145.8	
ISOPR-01	ACETO-01	NRTL /2		106.0	
ACETO-01	ISOPR-01	NRTL /3		0.3000	
ISOPR-01	ACETO-01	NRTL /3		0.3000	
ACETO-01	WATER	NRTL /2		289.5	
WATER	ACETO-01	NRTL /2		511.1	
ACETO-01	WATER	NRTL /3		0.3000	
WATER	ACETO-01	NRTL /3		0.3000	
ACETO-01	DIACE-01	NRTL /2		298.6	
DIACE-01	ACETO-01	NRTL /2		-226.4	
ACETO-01	DIACE-01	NRTL /3		0.3000	

DIACE-01 ACETO-01 NRTL /3 0.3000

UNIQUAC PARAMETERS

UNIFAC

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

ACETO-01	DIISO-01	UNIQ	/2	59.67
DIISO-01	ACETO-01	UNIQ	/2	-238.1
ACETO-01	ISOPR-01	UNIQ	/2	-37.85
ISOPR-01	ACETO-01	UNIQ	/2	-63.15
ACETO-01	WATER	UNIQ	/2	-388.0
WATER	ACETO-01	UNIQ	/2	45.65
ACETO-01	DIACE-01	UNIQ	/2	-39.01
DIACE-01	ACETO-01	UNIQ	/2	17.90

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

FOR COMPONENT PAIRS CONTAINING DIISO-01

DESCRIPTION		PARAMETER NAME		ESTIMATED VALUE	METHOD OF ESTIMATION
-----		-----		-----	-----
WILSON PARAMETERS					UNIFAC
DIISO-01	ISOPR-01	WILSON/2		-161.4	
ISOPR-01	DIISO-01	WILSON/2		-449.8	
DIISO-01	WATER	WILSON/2		-2234.	
WATER	DIISO-01	WILSON/2		-448.1	
DIISO-01	DIACE-01	WILSON/2		-164.8	
DIACE-01	DIISO-01	WILSON/2		-805.0	
NRTL PARAMETERS					UNIFAC
DIISO-01	ISOPR-01	NRTL /2		488.2	
ISOPR-01	DIISO-01	NRTL /2		94.90	
DIISO-01	ISOPR-01	NRTL /3		0.3000	
ISOPR-01	DIISO-01	NRTL /3		0.3000	
DIISO-01	WATER	NRTL /2		500.8	
WATER	DIISO-01	NRTL /2		2163.	
DIISO-01	WATER	NRTL /3		0.3000	
WATER	DIISO-01	NRTL /3		0.3000	
DIISO-01	DIACE-01	NRTL /2		856.9	
DIACE-01	DIISO-01	NRTL /2		81.16	
DIISO-01	DIACE-01	NRTL /3		0.3000	
DIACE-01	DIISO-01	NRTL /3		0.3000	
UNIQUAC PARAMETERS					UNIFAC
DIISO-01	ISOPR-01	UNIQU /2		-362.7	
ISOPR-01	DIISO-01	UNIQU /2		103.3	
DIISO-01	WATER	UNIQU /2		-321.9	
WATER	DIISO-01	UNIQU /2		-296.1	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

DIISO-01	DIACE-01	UNIQ	/2	-317.3
DIACE-01	DIISO-01	UNIQ	/2	87.19

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

FOR COMPONENT PAIRS CONTAINING ISOPR-01

DESCRIPTION		PARAMETER NAME	ESTIMATED VALUE	METHOD OF ESTIMATION
-----		-----	-----	-----
WILSON PARAMETERS				UNIFAC
ISOPR-01	WATER	WILSON/2	-830.5	
WATER	ISOPR-01	WILSON/2	-72.06	
ISOPR-01	DIACE-01	WILSON/2	134.1	
DIACE-01	ISOPR-01	WILSON/2	-256.3	
NRTL PARAMETERS				UNIFAC
ISOPR-01	WATER	NRTL /2	-12.32	
WATER	ISOPR-01	NRTL /2	907.0	
ISOPR-01	WATER	NRTL /3	0.3000	
WATER	ISOPR-01	NRTL /3	0.3000	
ISOPR-01	DIACE-01	NRTL /2	329.9	
DIACE-01	ISOPR-01	NRTL /2	-198.9	
ISOPR-01	DIACE-01	NRTL /3	0.3000	
DIACE-01	ISOPR-01	NRTL /3	0.3000	
UNIQUAC PARAMETERS				UNIFAC
ISOPR-01	WATER	UNIQ /2	-32.67	
WATER	ISOPR-01	UNIQ /2	-156.1	
ISOPR-01	DIACE-01	UNIQ /2	-44.94	
DIACE-01	ISOPR-01	UNIQ /2	13.40	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROPERTY CONSTANT ESTIMATION SECTION

BINARY PARAMETERS (CONTINUED)

FOR COMPONENT PAIRS CONTAINING WATER

DESCRIPTION		PARAMETER NAME	ESTIMATED VALUE	METHOD OF ESTIMATION
-----		-----	-----	-----
WILSON PARAMETERS				UNIFAC
WATER	DIACE-01	WILSON/2	113.5	
DIACE-01	WATER	WILSON/2	-1078.	
NRTL PARAMETERS				UNIFAC
WATER	DIACE-01	NRTL /2	1162.	
DIACE-01	WATER	NRTL /2	-184.3	
WATER	DIACE-01	NRTL /3	0.3000	
DIACE-01	WATER	NRTL /3	0.3000	
UNIQUAC PARAMETERS				UNIFAC
WATER	DIACE-01	UNIQU /2	-89.97	
DIACE-01	WATER	UNIQU /2	-43.49	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
REACTION SECTION

REACTION: DEHYDFOR TYPE: GENERAL

Unit operations referencing this reaction model:

Reactor Name	Block Type	Reactor Name	Block Type
SR-101EQ	RPLUG	SR-201	RPLUG
R-TURTON	RPLUG		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: B1 MODEL: MIXER

INLET STREAMS: 27 32
OUTLET STREAM: 28
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	RELATIVE
DIFF.			
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
HYDROGEN	57.7305	57.7305	0.00000
PROPY-01	0.791653	0.791653	0.00000
ACETO-01	0.558523E-02	0.558523E-02	0.00000
DIISO-01	0.619357E-01	0.619357E-01	0.00000
ISOPR-01	0.146223E-03	0.146223E-03	0.00000
WATER	1.00826	1.00826	0.00000
DIACE-01	0.328653E-03	0.328653E-03	0.00000
SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL BALANCE			
MOLE (KMOL/HR)	59.5984	59.5984	
0.238444E-15			
MASS (KG/HR)	174.555	174.555	
0.162824E-15			
ENTHALPY (KW)	-73.9971	-73.9971	
0.192046E-15			

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE FLASH
MAXIMUM NO. ITERATIONS 30
CONVERGENCE TOLERANCE 0.000100000
OUTLET PRESSURE: MINIMUM OF INLET STREAM PRESSURES

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: B2 MODEL: MIXER

 INLET STREAMS: 10 11
 OUTLET STREAM: 12
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	0.331365E-23	0.331365E-23	0.00000
	PROPY-01	0.00000	0.00000	0.00000
	ACETO-01	0.575152E-01	0.575152E-01	0.00000
	DIISO-01	0.826872E-09	0.826872E-09	0.00000
	ISOPR-01	59.1296	59.1296	0.00000
	WATER	27.0592	27.0592	0.00000
	DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	86.2463	86.2463	0.00000
	MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27	0.00000
	ENTHALPY (KW)	-7382.01	-7382.01	-
0.123204E-15				

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE FLASH
 MAXIMUM NO. ITERATIONS 30
 CONVERGENCE TOLERANCE 0.000100000
 OUTLET PRESSURE: MINIMUM OF INLET STREAM PRESSURES

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: B3 MODEL: MIXER

INLET STREAMS: 28 44
OUTLET STREAM: 29
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	RELATIVE
DIFF.			
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
HYDROGEN	57.7310	57.7310	0.00000
PROPY-01	0.791668	0.791668	0.00000
ACETO-01	0.593029E-02	0.593029E-02	0.00000
DIISO-01	0.619368E-01	0.619368E-01	0.00000
ISOPR-01	0.146235E-03	0.146235E-03	0.00000
WATER	1.00826	1.00826	0.00000
DIACE-01	0.328653E-03	0.328653E-03	0.00000
SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL BALANCE			
MOLE (KMOL/HR)	59.5993	59.5993	-
0.238440E-15			
MASS (KG/HR)	174.577	174.577	-
0.162803E-15			
ENTHALPY (KW)	-74.0179	-74.0179	-
0.191992E-15			

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE FLASH
MAXIMUM NO. ITERATIONS 30
CONVERGENCE TOLERANCE 0.000100000
OUTLET PRESSURE: MINIMUM OF INLET STREAM PRESSURES

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: B4 MODEL: FSPLIT

INLET STREAM: 53
OUTLET STREAMS: 41 51
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	0.283261E-15	0.283261E-15	0.00000
	PROPY-01	0.113569E-14	0.113569E-14	0.00000
	ACETO-01	0.129775E-01	0.129775E-01	0.00000
	DIISO-01	0.587641E-09	0.587641E-09	0.00000
	ISOPR-01	0.371229E-02	0.371229E-02	0.00000
	WATER	334.610	334.610	0.00000
	DIACE-01	0.351783	0.351783	0.00000
	SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	334.979	334.979	
0.169693E-15	MASS (KG/HR)	6069.94	6069.94	
0.149836E-15	ENTHALPY (KW)	-26547.7	-26547.7	0.00000

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

FRACTION OF FLOW STRM=41 FRAC= 0.073000

*** RESULTS ***

STREAM= 41 SPLIT= 0.073000 KEY= 0 STREAM-
ORDER= 1
51 0.92700 0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: P-102 MODEL: PUMP

 INLET STREAM: 51
 OUTLET STREAM: 24
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.	IN	OUT	RELATIVE
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
HYDROGEN	0.262583E-15	0.262583E-15	0.00000
PROPY-01	0.105279E-14	0.105279E-14	0.00000
ACETO-01	0.120301E-01	0.120301E-01	0.00000
DIISO-01	0.544744E-09	0.544744E-09	0.00000
ISOPR-01	0.344129E-02	0.344129E-02	0.00000
WATER	310.184	310.184	0.00000
DIACE-01	0.326103	0.326103	0.00000
SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL BALANCE			
MOLE (KMOL/HR)	310.525	310.525	0.00000
MASS (KG/HR)	5626.83	5626.83	
0.161635E-15			
ENTHALPY (KW)	-24609.7	-24609.5	-
0.941277E-05			

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

OUTLET PRESSURE BAR	1.50000
DRIVER EFFICIENCY	1.00000

FLASH SPECIFICATIONS:

LIQUID PHASE CALCULATION	
NO FLASH PERFORMED	
MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS	30
TOLERANCE	0.000100000

*** RESULTS ***

VOLUMETRIC FLOW RATE CUM/HR	5.71809
PRESSURE CHANGE BAR	0.48675
NPSH AVAILABLE METER	9.91549

FLUID POWER KW	0.077313
BRAKE POWER KW	0.23165
ELECTRICITY KW	0.23165
PUMP EFFICIENCY USED	0.33376
NET WORK REQUIRED KW	0.23165
HEAD DEVELOPED METER	5.04396

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC

```

-----
  INLETS   - 20      STAGE   9
              25      STAGE   1
  OUTLETS  - 27      STAGE   1
              26      STAGE   9
  PROPERTY OPTION SET:  WILS-RK   WILSON / REDLICH-KWONG
  HENRY-COMPS ID:      HC-1
  
```

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***			
	IN	OUT	RELATIVE
DIFF.			
TOTAL BALANCE			
MOLE (KMOL/HR)	383.365	383.365	-
0.148275E-15			
MASS (KG/HR)	6567.87	6567.87	-
0.276953E-15			
ENTHALPY (KW)	-25604.0	-25604.0	
0.120424E-10			

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** INPUT DATA ****

**** INPUT PARAMETERS ****

NUMBER OF STAGES	9
ALGORITHM OPTION	STANDARD
ABSORBER OPTION	YES
INITIALIZATION OPTION	STANDARD
HYDRAULIC PARAMETER CALCULATIONS	NO
INSIDE LOOP CONVERGENCE METHOD	BROYDEN
DESIGN SPECIFICATION METHOD	NESTED
MAXIMUM NO. OF OUTSIDE LOOP ITERATIONS	75
MAXIMUM NO. OF INSIDE LOOP ITERATIONS	10
MAXIMUM NUMBER OF FLASH ITERATIONS	30
FLASH TOLERANCE	0.000100000
OUTSIDE LOOP CONVERGENCE TOLERANCE	0.000100000

**** COL-SPECS ****

MOLAR VAPOR DIST / TOTAL DIST	1.00000
CONDENSER DUTY (W/O SUBCOOL) KW	0.0
REBOILER DUTY KW	0.0

**** PROFILES ****

P-SPEC	STAGE	1	PRES, BAR	1.01325
TEMP-EST	STAGE	1	TEMP, C	15.7593
		2		18.2338
		3		23.9909
		4		31.8505
		5		38.1239
		6		41.7588
		7		43.3327
		8		43.2775
		9		40.3412

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

X-EST STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					
1	1.4635-05	2.1771-06	3.3385-04	5.3497-06	1.0704-05
0.9993					
2	1.4471-05	2.1442-06	1.6462-03	5.9358-06	1.1074-05
0.9980					
3	1.4164-05	2.0860-06	5.8340-03	7.0646-06	1.1949-05
0.9938					
4	1.3788-05	1.9484-06	1.2763-02	7.9814-06	1.3239-05
0.9869					
5	1.3561-05	1.8048-06	1.9249-02	8.2307-06	1.4698-05
0.9804					
6	1.3359-05	1.7082-06	2.3501-02	8.1776-06	1.6781-05
0.9761					
7	1.3291-05	1.6872-06	2.6248-02	8.2652-06	2.1682-05
0.9734					
8	1.3499-05	1.7991-06	2.9693-02	9.0026-06	3.7279-05
0.9699					
9	1.4813-05	2.4781-06	4.1612-02	1.3023-05	1.0922-04
0.9579					

X-EST STAGE	DIACE-01
1	3.4871-04
2	3.4788-04
3	3.4563-04
4	3.4216-04
5	3.3900-04
6	3.3698-04
7	3.3583-04
8	3.3492-04
9	3.3400-04

Y-EST STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					
1	0.9677	1.3269-02	2.7115-04	1.0442-03	2.3487-06
1.7717-02					
2	0.9634	1.3220-02	1.5812-03	1.0665-03	2.9578-06
2.0702-02					
3	0.9484	1.3015-02	8.1096-03	1.0529-03	4.9232-06
2.9373-02					
4	0.9122	1.2517-02	2.8118-02	1.0183-03	9.3906-06
4.6178-02					
5	0.8632	1.1844-02	5.9009-02	9.6826-04	1.5501-05
6.4997-02					

6	0.8233	1.1296-02	8.5817-02	9.2500-04	2.1909-05
7.8657-02					
7	0.8003	1.0981-02	0.1025	8.9920-04	3.0803-05
8.5240-02					
8	0.7901	1.0840-02	0.1134	8.8816-04	5.1812-05
8.4765-02					
9	0.7882	1.0815-02	0.1281	8.8927-04	1.1905-04
7.1928-02					

Y-EST

STAGE

DIACE-01

1	1.9560-06
2	2.3905-06
3	3.6351-06
4	5.8968-06
5	8.0872-06
6	9.4047-06
7	9.7913-06
8	9.0308-06
9	5.8652-06

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** RESULTS ****

*** COMPONENT SPLIT FRACTIONS ***

COMPONENT :	OUTLET STREAMS	
	27	26
HYDROGEN	.99992	.83709E-04
PROPY-01	.99895	.10450E-02
ACETO-01	.15235E-03	.99985
DIISO-01	.93416	.65840E-01
ISOPR-01	.38565E-02	.99614
WATER	.32390E-02	.99676
DIACE-01	.10078E-02	.99899

*** SUMMARY OF KEY RESULTS ***

TOP STAGE TEMPERATURE	C	15.0488
BOTTOM STAGE TEMPERATURE	C	39.8285
TOP STAGE LIQUID FLOW	KMOL/HR	310.544
BOTTOM STAGE LIQUID FLOW	KMOL/HR	323.777
TOP STAGE VAPOR FLOW	KMOL/HR	59.5884
BOILUP VAPOR FLOW	KMOL/HR	72.4101
CONDENSER DUTY (W/O SUBCOOL)	KW	0.0
REBOILER DUTY	KW	0.0

**** MAXIMUM FINAL RELATIVE ERRORS ****

DEW POINT	0.94216E-05	STAGE=	5
BUBBLE POINT	0.15497E-02	STAGE=	4
COMPONENT MASS BALANCE	0.64907E-15	STAGE=	1 COMP=HYDROGEN
ENERGY BALANCE	0.12444E-04	STAGE=	4

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** PROFILES ****

NOTE REPORTED VALUES FOR STAGE LIQUID AND VAPOR RATES ARE THE FLOWS FROM THE STAGE INCLUDING ANY SIDE PRODUCT.

STAGE	TEMPERATURE C	PRESSURE BAR	ENTHALPY KJ/KMOL		HEAT DUTY KW
			LIQUID	VAPOR	
1	15.049	1.0132	-0.28678E+06	-4457.1	
2	15.199	1.0132	-0.28677E+06	-4508.9	
8	41.236	1.0132	-0.28413E+06	-38028.	
9	39.828	1.0132	-0.28386E+06	-42565.	

STAGE RATE	FLOW RATE KMOL/HR		FEED RATE KMOL/HR			PRODUCT KMOL/HR
	LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR	MIXED	LIQUID
VAPOR						
1	310.5	59.59	310.5245			
59.5884						
2	310.6	59.61				
8	323.3	70.52				
9	323.8	72.41			72.8405	323.7766

**** MASS FLOW PROFILES ****

STAGE RATE	FLOW RATE KG/HR		FEED RATE KG/HR			PRODUCT KG/HR
	LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR	MIXED	LIQUID
VAPOR						
1	5627.	174.3	5626.8194			
174.3253						
2	5629.	174.8				
8	6209.	634.3				
9	6394.	756.2			941.0511	6393.5452

STAGE ISOPR-01	HYDROGEN	**** MOLE-X-PROFILE ****		
		PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01
1	0.14746E-04	0.24056E-05	0.43949E-04	0.64898E-05
0.11093E-04				
2	0.14732E-04	0.23987E-05	0.78343E-04	0.66952E-05
0.11119E-04				

8	0.13763E-04	0.19287E-05	0.27074E-01	0.95916E-05
0.35875E-04				
9	0.14925E-04	0.25574E-05	0.40615E-01	0.13480E-04
0.10863E-03				

		****	MOLE-X-PROFILE	****
STAGE	WATER		DIACE-01	
1	0.99887		0.10501E-02	
2	0.99884		0.10500E-02	
8	0.97185		0.10114E-02	
9	0.95824		0.10062E-02	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** MOLE-Y-PROFILE ****				
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.96872	0.13283E-01	0.33626E-04	0.10392E-02
	0.22852E-05			
2	0.96848	0.13291E-01	0.60572E-04	0.10727E-02
	0.23187E-05			
8	0.81857	0.11232E-01	0.92939E-01	0.91934E-03
	0.44187E-04			
9	0.79725	0.10940E-01	0.12076	0.89802E-03
	0.11454E-03			

**** MOLE-Y-PROFILE ****				
STAGE	WATER	DIACE-01		
1	0.16919E-01	0.55154E-05		
2	0.17083E-01	0.55884E-05		
8	0.76267E-01	0.25300E-04		
9	0.70021E-01	0.17537E-04		

**** K-VALUES ****				
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	65695.	5521.9	0.76510	160.14
	0.20599			
2	65756.	5541.7	0.77315	160.25
	0.20852			
8	59478.	5823.7	3.4327	95.852
	1.2317			
9	53416.	4277.7	2.9733	66.619
	1.0543			

**** K-VALUES ****				
STAGE	WATER	DIACE-01		
1	0.16938E-01	0.52521E-02		
2	0.17103E-01	0.53218E-02		
8	0.78476E-01	0.25014E-01		
9	0.73073E-01	0.17430E-01		

**** MASS-X-PROFILE ****				
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.16405E-05	0.55863E-05	0.14086E-03	0.36593E-04
	0.36789E-04			
2	0.16388E-05	0.55699E-05	0.25108E-03	0.37749E-04
	0.36871E-04			
8	0.14450E-05	0.42269E-05	0.81894E-01	0.51040E-04
	0.11228E-03			

9	0.15237E-05	0.54498E-05	0.11946	0.69750E-04
---	-------------	-------------	---------	-------------

0.33061E-03

STAGE	WATER	DIACE-01
1	0.99305	0.67315E-02
2	0.99294	0.67302E-02
8	0.91182	0.61187E-02
9	0.87422	0.59188E-02

STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.66752	0.19107	0.66757E-03	0.36295E-01
2	0.66558	0.19067	0.11993E-02	0.37365E-01
8	0.18347	0.52551E-01	0.60015	0.10444E-01
9	0.15389	0.44080E-01	0.67160	0.87860E-02

0.46942E-04
0.47503E-04
0.29524E-03
0.65908E-03

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-301 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** MASS-Y-PROFILE ****		
STAGE	WATER	DIACE-01
1	0.10419	0.21900E-03
2	0.10492	0.22130E-03
8	0.15276	0.32675E-03
9	0.12079	0.19506E-03

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC

```

-----
INLETS   - 21      STAGE   8
          26      STAGE   9
OUTLETS  - 32      STAGE   1
          36      STAGE   1
          40      STAGE  11
    
```

PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***
IN OUT RELATIVE

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	0.178372E-01	0.178372E-01	
0.125991E-10	PROPY-01	0.673331E-02	0.673331E-02	-
0.228527E-10	ACETO-01	57.7576	57.7576	-
0.258345E-14	DIISO-01	0.445090E-01	0.445090E-01	-
0.737401E-13	ISOPR-01	0.379658	0.379658	-
0.687204E-14	WATER	337.139	337.139	
0.505816E-15	DIACE-01	0.351783	0.351783	
0.315599E-15	SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	395.697	395.697	
0.143654E-15	MASS (KG/HR)	9496.76	9496.76	-
0.114923E-14	ENTHALPY (KW)	-30797.1	-30269.4	-
0.171333E-01				

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	517.357	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	517.357	KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** INPUT DATA ****

**** INPUT PARAMETERS ****

NUMBER OF STAGES	11
ALGORITHM OPTION	STANDARD
INITIALIZATION OPTION	STANDARD
HYDRAULIC PARAMETER CALCULATIONS	NO
INSIDE LOOP CONVERGENCE METHOD	NEWTON
DESIGN SPECIFICATION METHOD	NESTED
MAXIMUM NO. OF OUTSIDE LOOP ITERATIONS	75
MAXIMUM NO. OF INSIDE LOOP ITERATIONS	10
MAXIMUM NUMBER OF FLASH ITERATIONS	30
FLASH TOLERANCE	0.000100000
OUTSIDE LOOP CONVERGENCE TOLERANCE	0.000100000

**** COL-SPECS ****

MOLAR REFLUX RATIO	0.63304
CONDENSER TEMPERATURE	C 30.0000
DISTILLATE TO FEED RATIO	0.15783

**** PROFILES ****

P-SPEC	STAGE	1	PRES, BAR	1.01325
TEMP-EST	STAGE	1	TEMP, C	30.0000
		2		56.6155
		3		56.8328
		4		57.0726
		5		57.3833
		6		57.8618
		7		58.8212
		8		61.8228
		9		81.5679
		10		97.5058
		11		99.8585

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

X-EST STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					
1	1.9206-04	1.0638-04	0.9392	7.1805-04	6.0388-03
5.3699-02					
2	8.8290-08	3.3882-07	0.9140	1.8690-04	9.9082-03
7.5876-02					
3	4.9472-08	1.5991-07	0.8883	1.1152-04	1.3231-02
9.8318-02					
4	4.8620-08	1.5424-07	0.8600	9.8759-05	1.5997-02
0.1240					
5	4.7238-08	1.4545-07	0.8243	9.3316-05	1.8120-02
0.1575					
6	4.4593-08	1.3136-07	0.7709	8.6326-05	1.9305-02
0.2098					
7	3.8003-08	1.0612-07	0.6646	7.2166-05	1.8474-02
0.3169					
8	1.6576-08	4.9264-08	0.3499	3.2796-05	1.0535-02
0.6393					
9	7.3616-10	4.9315-10	2.3899-02	2.7601-07	1.0977-03
0.9745					
10	3.7241-14	6.3902-14	1.6023-03	1.2084-09	1.3162-04
0.9978					
11	1.7263-18	7.3017-18	8.5676-05	4.3359-12	1.2203-05
0.9995					

X-EST STAGE	DIACE-01
1	MISSING
2	1.5000-18
3	3.2421-16
4	7.8311-14
5	2.0979-11
6	6.1636-09
7	1.9068-06
8	3.2113-04
9	4.8493-04
10	4.9185-04
11	4.0209-04

Y-EST STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					
1	0.6171	1.4071-02	0.3559	1.1298-03	9.7626-04
1.0826-02					
2	2.3931-04	1.0745-04	0.9392	7.1808-04	6.0384-03
5.3696-02					

3	1.3628-04	5.1765-05	0.9260	4.3943-04	8.0684-03
6.5330-02					
4	1.3693-04	5.1926-05	0.9126	4.0131-04	9.7944-03
7.6999-02					
5	1.3772-04	5.2222-05	0.8980	3.9635-04	1.1212-02
9.0192-02					
6	1.3878-04	5.2618-05	0.8799	3.9584-04	1.2270-02
0.1072					
7	1.4052-04	5.3270-05	0.8534	3.9608-04	1.2801-02
0.1332					
8	1.4449-04	5.4760-05	0.8030	3.9781-04	1.2205-02
0.1842					
9	4.0891-05	6.8916-06	0.4987	7.1945-05	1.1835-02
0.4892					
10	2.5690-09	1.7210-09	8.3186-02	9.6320-07	3.8004-03
0.9123					
11	1.2122-13	2.0799-13	5.0224-03	3.9237-09	4.0093-04
0.9939					

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

Y-EST	
STAGE	DIACE-01
1	MISSING
2	4.2813-21
3	7.9394-19
4	1.6933-16
5	4.0683-14
6	1.0821-11
7	3.1417-09
8	9.4553-07
9	1.2529-04
10	6.9116-04
11	6.9427-04

**** RESULTS ****

*** COMPONENT SPLIT FRACTIONS ***

	OUTLET STREAMS		
	32	36	40
COMPONENT:			
HYDROGEN	.34411	.65589	.15880E-13
PROPY-01	.20246E-01	.97975	.16867E-12
ACETO-01	.62010E-04	.99971	.22469E-03
DIISO-01	.25459E-03	.99975	.13203E-07
ISOPR-01	.26483E-04	.99020	.97780E-02
WATER	.26211E-06	.74997E-02	.99250
DIACE-01	0.0000	0.0000	1.0000

*** SUMMARY OF KEY RESULTS ***

TOP STAGE TEMPERATURE	C	30.0000
BOTTOM STAGE TEMPERATURE	C	99.9253
TOP STAGE LIQUID FLOW	KMOL/HR	117.258
BOTTOM STAGE LIQUID FLOW	KMOL/HR	334.979
TOP STAGE VAPOR FLOW	KMOL/HR	0.0099656
BOILUP VAPOR FLOW	KMOL/HR	191.855
MOLAR REFLUX RATIO		1.93119
MOLAR BOILUP RATIO		0.57274
CONDENSER DUTY (W/O SUBCOOL)	KW	-1,657.96
REBOILER DUTY	KW	2,185.61

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** MANIPULATED VARIABLES ****

CALCULATED VALUE	BOUNDS	
	LOWER	UPPER
DISTILLATE TO FEED RATIO 0.15345	0.14000	0.20000
MOLAR REFLUX RATIO 1.9312	0.10000	2.0000

**** DESIGN SPECIFICATIONS ****

NO	SPEC-TYPE	QUALIFIERS	UNIT	SPECIFIED VALUE
1	MOLE-FRAC	STREAMS: 40		0.99890
		COMPS: WATER		
		BASE-COMPS: HYDROGEN		
		PROPY-01		
		ACETO-01		
		DI ISO-01		
		ISOPR-01		
		WATER		
		DIACE-01		
2	MOLE-RECOV	STREAMS: 40		0.99250
		COMPS: WATER		
		BASE-STREAMS: 21		
		26		

**** MAXIMUM FINAL RELATIVE ERRORS ****

DEW POINT	0.67760E-06	STAGE=	8
BUBBLE POINT	0.66036E-04	STAGE=	8
COMPONENT MASS BALANCE	0.60257E-08	STAGE=	9 COMP=HYDROGEN
ENERGY BALANCE	0.59834E-05	STAGE=	8

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** PROFILES ****

NOTE REPORTED VALUES FOR STAGE LIQUID AND VAPOR RATES ARE THE FLOWS FROM THE STAGE INCLUDING ANY SIDE PRODUCT.

STAGE	TEMPERATURE C	PRESSURE BAR	ENTHALPY KJ/KMOL		HEAT DUTY KW
			LIQUID	VAPOR	
1	30.000	1.0132	-0.24841E+06	-79824.	-1657.9562
2	56.480	1.0132	-0.24578E+06	-0.21487E+06	
6	57.627	1.0132	-0.25132E+06	-0.21692E+06	
7	58.681	1.0132	-0.25593E+06	-0.21791E+06	
8	62.809	1.0132	-0.27239E+06	-0.21966E+06	
9	85.860	1.0132	-0.28106E+06	-0.22900E+06	
10	98.651	1.0132	-0.28043E+06	-0.23863E+06	
11	99.925	1.0132	-0.28028E+06	-0.23967E+06	2185.6133

STAGE RATE	FLOW RATE KMOL/HR		FEED RATE KMOL/HR			PRODUCT KMOL/HR
	LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR	MIXED	LIQUID
VAPOR						
1	178.0	0.9966E-02				60.7081
.99656-02						
2	129.7	178.0				
6	123.3	186.8				
7	116.4	184.0				
8	167.8	177.2			71.9201	
9	514.3	156.6			323.7766	
10	526.8	179.3				
11	335.0	191.9				334.9787

**** MASS FLOW PROFILES ****

STAGE RATE	FLOW RATE KG/HR		FEED RATE KG/HR			PRODUCT KG/HR
	LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR	MIXED	LIQUID
VAPOR						
1	0.1005E+05	0.2295				3426.5907
0.2294						
2	7251.	0.1005E+05				
6	6346.	0.1016E+05				
7	5484.	9773.				
8	5129.	8910.			3103.2120	

9	9678.	5452.	6393.5452
10	9580.	3608.	
11	6070.	3510.	6069.9369

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** MOLE-X-PROFILE ****				
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.19271E-03	0.10867E-03	0.95112	0.73298E-03
0.61925E-02				
2	0.85097E-07	0.37986E-06	0.93435	0.19587E-03
0.10155E-01				
6	0.32682E-07	0.10987E-06	0.80280	0.68100E-04
0.30819E-01				
7	0.28369E-07	0.87631E-07	0.68966	0.57843E-04
0.34333E-01				
8	0.94703E-08	0.29841E-07	0.29151	0.20544E-04
0.18845E-01				
9	0.51780E-09	0.31692E-09	0.15131E-01	0.14832E-06
0.14558E-02				
10	0.21510E-13	0.34192E-13	0.82490E-03	0.54631E-09
0.13805E-03				
11	0.84561E-18	0.33903E-17	0.38741E-04	0.17543E-11
0.11082E-04				

**** MOLE-X-PROFILE ****		
STAGE	WATER	DIACE-01
1	0.41649E-01	0.39159E-20
2	0.55299E-01	0.92514E-18
6	0.16632	0.94953E-08
7	0.27594	0.41515E-05
8	0.68891	0.70811E-03
9	0.98203	0.13836E-02
10	0.99772	0.13202E-02
11	0.99890	0.10502E-02

**** MOLE-Y-PROFILE ****				
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.61592	0.13680E-01	0.35939	0.11370E-02
0.10089E-02				
2	0.22719E-03	0.10943E-03	0.95109	0.73300E-03
0.61922E-02				
6	0.95521E-04	0.36130E-04	0.88696	0.28730E-03
0.19001E-01				
7	0.96973E-04	0.36672E-04	0.85172	0.28755E-03
0.22692E-01				
8	0.10071E-03	0.38066E-04	0.77924	0.28926E-03
0.24688E-01				
9	0.30862E-04	0.53183E-05	0.39623	0.49878E-04
0.20394E-01				

10	0.14853E-08	0.90907E-09	0.43330E-01	0.42544E-06
0.41553E-02				
11	0.59065E-13	0.93884E-13	0.21975E-02	0.14971E-08
0.35975E-03				

**** MOLE-Y-PROFILE ****

STAGE	WATER	DIACE-01
1	0.88671E-02	0.10258E-23
2	0.41647E-01	0.29314E-20
6	0.93617E-01	0.16154E-10
7	0.12517	0.63616E-08
8	0.19564	0.27286E-05
9	0.58269	0.59270E-03
10	0.95051	0.20065E-02
11	0.99565	0.17917E-02

**** K-VALUES ****

STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	3196.0	125.89	0.37786	1.5513
0.16292				
2	2669.8	288.07	1.0179	3.7423
0.60977				
6	2922.8	328.84	1.1048	4.2187
0.61653				
7	3418.3	418.48	1.2350	4.9712
0.66093				
8	10636.	1275.8	2.6733	14.082
1.3101				
9	59601.	16782.	26.188	336.32
14.009				
10	69050.	26587.	52.528	778.75
30.099				
11	69850.	27692.	56.724	853.41
32.462				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-302 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

		**** K-VALUES ****	
STAGE	WATER	DIACE-01	
1	0.21290	0.26195E-03	
2	0.75314	0.31686E-02	
6	0.56289	0.17013E-02	
7	0.45360	0.15323E-02	
8	0.28397	0.38540E-02	
9	0.59336	0.42844	
10	0.95268	1.5199	
11	0.99675	1.7061	

		**** MASS-X-PROFILE ****		
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.68827E-05	0.81015E-04	0.97870	0.13269E-02
0.65932E-02				
2	0.30691E-08	0.28599E-06	0.97090	0.35806E-03
0.10918E-01				
6	0.12797E-08	0.89805E-07	0.90569	0.13516E-03
0.35976E-01				
7	0.12143E-08	0.78298E-07	0.85050	0.12549E-03
0.43809E-01				
8	0.62473E-09	0.41091E-07	0.55405	0.68691E-04
0.37060E-01				
9	0.55468E-10	0.70868E-09	0.46699E-01	0.80530E-06
0.46491E-02				
10	0.23847E-14	0.79126E-13	0.26348E-02	0.30698E-08
0.45626E-03				
11	0.94073E-19	0.78733E-17	0.12417E-03	0.98919E-11
0.36754E-04				

		**** MASS-X-PROFILE ****	
STAGE	WATER	DIACE-01	
1	0.13293E-01	0.80588E-20	
2	0.17823E-01	0.19227E-17	
6	0.58200E-01	0.21424E-07	
7	0.10555	0.10239E-04	
8	0.40613	0.26916E-02	
9	0.94011	0.85403E-02	
10	0.98848	0.84337E-02	
11	0.99311	0.67321E-02	

		**** MASS-Y-PROFILE ****		
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.53919E-01	0.24999E-01	0.90647	0.50453E-02
0.26330E-02				

2	0.81143E-05	0.81584E-04	0.97870	0.13269E-02
0.65931E-02				
6	0.35413E-05	0.27961E-04	0.94741	0.53987E-03
0.21001E-01				
7	0.36803E-05	0.29052E-04	0.93129	0.55313E-03
0.25673E-01				
8	0.40362E-05	0.31847E-04	0.89980	0.58761E-03
0.29497E-01				
9	0.17872E-05	0.64291E-05	0.66110	0.14640E-03
0.35207E-01				
10	0.14879E-09	0.19010E-08	0.12506	0.21602E-05
0.12409E-01				
11	0.65085E-14	0.21595E-12	0.69767E-02	0.83616E-08
0.11818E-02				

**** MASS-Y-PROFILE ****

STAGE	WATER	DIACE-01
1	0.69372E-02	0.51745E-23
2	0.13293E-01	0.60329E-20
6	0.31017E-01	0.34511E-10
7	0.42453E-01	0.13912E-07
8	0.70071E-01	0.63014E-05
9	0.30156	0.19778E-02
10	0.85094	0.11583E-01
11	0.98047	0.11376E-01

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY USAGE: U-104 (WATER)

CONDENSER	2.8591+05		1.2654
TOTAL:	2.8591+05	KG/HR	1.2654 \$/HR

UTILITY USAGE: U-102 (STEAM)

REBOILER	3589.7092		14.9496
517.3573			
TOTAL:	3589.7092	KG/HR	14.9496 \$/HR
517.3573 CO2		KG/HR	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC

INLETS - 36 STAGE 20
OUTLETS - 44 STAGE 1
52 STAGE 1
11 STAGE 28

PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.	IN	OUT	RELATIVE
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
0.620536E-12	0.116993E-01	0.116993E-01	
0.472402E-12	0.659699E-02	0.659699E-02	-
0.105829E-13	57.7410	57.7410	
0.935631E-15	0.444976E-01	0.444976E-01	-
0.726494E-13	0.375936	0.375936	
0.190742E-12	2.52845	2.52845	-
	0.237727E-18	0.00000	0.00000
	0.00000	0.00000	0.00000
	0.00000	0.00000	0.00000
	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL BALANCE			
0.245789E-14	60.7082	60.7082	
0.809539E-14	3426.59	3426.59	
0.453408E-03	-4189.12	-4187.22	-

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	531.469	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	531.469	KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** INPUT DATA ****

**** INPUT PARAMETERS ****

NUMBER OF STAGES	28
ALGORITHM OPTION	STANDARD
INITIALIZATION OPTION	STANDARD
HYDRAULIC PARAMETER CALCULATIONS	NO
INSIDE LOOP CONVERGENCE METHOD	NEWTON
DESIGN SPECIFICATION METHOD	NESTED
MAXIMUM NO. OF OUTSIDE LOOP ITERATIONS	75
MAXIMUM NO. OF INSIDE LOOP ITERATIONS	10
MAXIMUM NUMBER OF FLASH ITERATIONS	30
FLASH TOLERANCE	0.000100000
OUTSIDE LOOP CONVERGENCE TOLERANCE	0.000100000

**** COL-SPECS ****

MOLAR REFLUX RATIO	3.30000
CONDENSER TEMPERATURE	C 30.0000
DISTILLATE TO FEED RATIO	0.97000

**** PROFILES ****

P-SPEC	STAGE 1	PRES, BAR	1.01325
--------	---------	-----------	---------

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

TEMP-EST	STAGE	TEMP, C
	1	30.0000
	2	56.1451
	3	56.1681
	4	56.1769
	5	56.1844
	6	56.1918
	7	56.1996
	8	56.2080
	9	56.2171
	10	56.2273
	11	56.2388
	12	56.2519
	13	56.2671
	14	56.2851
	15	56.3065
	16	56.3324
	17	56.3642
	18	56.4037
	19	56.4534
	20	56.5169
	21	56.6368
	22	56.8346
	23	57.1857
	24	57.8468
	25	59.1966
	26	62.2042
	27	68.6114
	28	78.9676

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

X-EST STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					
1	1.9071-04	1.1166-04	0.9877	7.5579-04	6.3933-05
1.1219-02					
2	7.3586-08	2.9463-07	0.9868	2.0922-04	1.0304-04
1.2905-02					
3	1.6433-08	6.3870-08	0.9853	8.9949-05	1.5259-04
1.4505-02					
4	1.6410-08	6.3772-08	0.9837	6.3952-05	2.1548-04
1.6049-02					
5	1.6405-08	6.4245-08	0.9821	5.8239-05	2.9540-04
1.7553-02					
6	1.6400-08	6.4816-08	0.9805	5.6931-05	3.9700-04
1.9036-02					
7	1.6396-08	6.5501-08	0.9789	5.6579-05	5.2626-04
2.0513-02					
8	1.6392-08	6.6322-08	0.9773	5.6436-05	6.9080-04
2.1998-02					
9	1.6389-08	6.7301-08	0.9755	5.6340-05	9.0038-04
2.3509-02					
10	1.6386-08	6.8466-08	0.9737	5.6258-05	1.1675-03
2.5060-02					
11	1.6384-08	6.9845-08	0.9718	5.6181-05	1.5083-03
2.6673-02					
12	1.6382-08	7.1464-08	0.9696	5.6108-05	1.9434-03
2.8366-02					
13	1.6382-08	7.3352-08	0.9673	5.6042-05	2.4995-03
3.0166-02					
14	1.6384-08	7.5533-08	0.9646	5.5981-05	3.2111-03
3.2105-02					
15	1.6387-08	7.8022-08	0.9616	5.5930-05	4.1229-03
3.4220-02					
16	1.6393-08	8.0826-08	0.9581	5.5890-05	5.2931-03
3.6562-02					
17	1.6402-08	8.3933-08	0.9539	5.5864-05	6.7981-03
3.9197-02					
18	1.6415-08	8.7311-08	0.9490	5.5857-05	8.7382-03
4.2217-02					
19	1.6433-08	9.0899-08	0.9429	5.5872-05	1.1246-02
4.5749-02					
20	1.6456-08	9.4599-08	0.9355	5.5914-05	1.4501-02
4.9977-02					
21	6.2944-12	4.0625-10	0.9238	1.5358-05	2.1994-02
5.4185-02					
22	2.4196-15	1.8938-12	0.9042	4.2578-06	3.4766-02
6.1026-02					

23	9.3704-19	9.4330-15	0.8704	1.1989-06	5.6958-02
7.2660-02					
24	3.6586-22	4.8685-17	0.8096	3.4559-07	9.6574-02
9.3830-02					
25	1.4176-25	2.4638-19	0.6948	1.0223-07	0.1689
0.1362					
X-EST					
STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					
26	MISSING	1.0801-21	0.4789	2.9499-08	0.2919
0.2292					
27	MISSING	2.9357-24	0.1872	6.1678-09	0.3865
0.4264					
28	4.9582-25	1.7115-23	1.8682-02	2.2363-10	0.1197
0.8616					

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

Y-EST STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					
1	0.6077	1.6614-02	0.3717	1.1477-03	1.0785-05
2.7878-03					
2	1.9336-04	1.1173-04	0.9877	7.5579-04	6.3933-05
1.1219-02					
3	4.3212-05	2.4134-05	0.9870	3.2589-04	9.4694-05
1.2545-02					
4	4.3182-05	2.3960-05	0.9858	2.3213-04	1.3365-04
1.3804-02					
5	4.3197-05	2.3969-05	0.9845	2.1174-04	1.8311-04
1.5017-02					
6	4.3213-05	2.3978-05	0.9833	2.0730-04	2.4594-04
1.6200-02					
7	4.3228-05	2.3987-05	0.9820	2.0633-04	3.2580-04
1.7365-02					
8	4.3244-05	2.3996-05	0.9808	2.0611-04	4.2739-04
1.8525-02					
9	4.3261-05	2.4006-05	0.9795	2.0605-04	5.5669-04
1.9692-02					
10	4.3278-05	2.4016-05	0.9781	2.0604-04	7.2137-04
2.0878-02					
11	4.3297-05	2.4028-05	0.9767	2.0603-04	9.3124-04
2.2097-02					
12	4.3317-05	2.4040-05	0.9752	2.0604-04	1.1989-03
2.3362-02					
13	4.3339-05	2.4053-05	0.9735	2.0606-04	1.5406-03
2.4691-02					
14	4.3364-05	2.4068-05	0.9716	2.0610-04	1.9772-03
2.6103-02					
15	4.3392-05	2.4086-05	0.9696	2.0615-04	2.5358-03
2.7623-02					
16	4.3424-05	2.4106-05	0.9672	2.0622-04	3.2513-03
2.9280-02					
17	4.3463-05	2.4129-05	0.9644	2.0632-04	4.1692-03
3.1115-02					
18	4.3508-05	2.4157-05	0.9612	2.0646-04	5.3492-03
3.3178-02					
19	4.3563-05	2.4190-05	0.9573	2.0664-04	6.8695-03
3.5539-02					
20	4.3631-05	2.4230-05	0.9526	2.0689-04	8.8337-03
3.8299-02					

Y-EST STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01	ISOPR-01
WATER					

21	1.6638-08	9.5647-08	0.9456	5.6534-05	1.3335-02
4.0980-02					
22	6.3645-12	4.1077-10	0.9339	1.5528-05	2.0907-02
4.5199-02					
23	2.4467-15	1.9151-12	0.9141	4.3056-06	3.3814-02
5.2055-02					
24	9.4767-19	9.5400-15	0.8800	1.2125-06	5.6247-02
6.3710-02					
25	3.7008-22	4.9250-17	0.8188	3.4960-07	9.6306-02
8.4921-02					
26	1.3507-25	2.4936-19	0.7031	1.0347-07	0.1695
0.1274					
27	MISSING	1.0945-21	0.4850	2.9886-08	0.2942
0.2209					
28	1.8937-20	4.8712-20	0.1897	6.2555-09	0.3904
0.4199					

 **** RESULTS ****

*** COMPONENT SPLIT FRACTIONS ***

COMPONENT :	OUTLET STREAMS		
	44	52	11
HYDROGEN	.48202E-01	.95180	0.0000
PROPY-01	.23550E-02	.99765	0.0000
ACETO-01	.59760E-05	.99900	.99609E-03
DI ISO-01	.24130E-04	.99998	.18582E-07
ISOPR-01	.30775E-07	.11478E-01	.98852
WATER	.10175E-05	.25756	.74244

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

*** SUMMARY OF KEY RESULTS ***

TOP STAGE TEMPERATURE	C	30.0000
BOTTOM STAGE TEMPERATURE	C	77.8693
TOP STAGE LIQUID FLOW	KMOL/HR	185.522
BOTTOM STAGE LIQUID FLOW	KMOL/HR	2.30635
TOP STAGE VAPOR FLOW	KMOL/HR	0.00092818
BOILUP VAPOR FLOW	KMOL/HR	202.611
MOLAR REFLUX RATIO		3.17665
MOLAR BOILUP RATIO		87.8492
CONDENSER DUTY (W/O SUBCOOL)	KW	-2,243.33
REBOILER DUTY	KW	2,245.23

**** MANIPULATED VARIABLES ****

CALCULATED	BOUNDS	
	LOWER	UPPER
VALUE		
DISTILLATE TO FEED RATIO	0.94000	0.99000
0.96201		
MOLAR REFLUX RATIO	1.0000	5.0000
3.1766		

**** DESIGN SPECIFICATIONS ****

NO	SPEC-TYPE	QUALIFIERS	UNIT	SPECIFIED
	CALCULATED			VALUE
1	MASS-FRAC	STREAMS: 52		0.99500
0.99500				
		COMPS: ACETO-01		
		BASE-COMPS: HYDROGEN		
		PROPY-01		
		ACETO-01		
		DIISO-01		
		ISOPR-01		
		WATER		
		DIACE-01		
		SODIU-01		
		POTAS-01		
		SODIU-02		
2	MOLE-RECOV	STREAMS: 52		0.99900
0.99900				
		COMPS: ACETO-01		
		BASE-STREAMS: 36		

**** MAXIMUM FINAL RELATIVE ERRORS ****

DEW POINT	0.27937E-04	STAGE= 27
BUBBLE POINT	0.18813E-03	STAGE= 27
COMPONENT MASS BALANCE	0.62602E-06	STAGE= 28 COMP=ACETO-01
ENERGY BALANCE	0.11886E-03	STAGE= 28

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** PROFILES ****

NOTE REPORTED VALUES FOR STAGE LIQUID AND VAPOR RATES ARE THE FLOWS FROM THE STAGE INCLUDING ANY SIDE PRODUCT.

STAGE	TEMPERATURE C	PRESSURE BAR	ENTHALPY KJ/KMOL		HEAT DUTY KW
			LIQUID	VAPOR	
1	30.000	1.0132	-0.24684E+06	-80690.	-2243.3316
2	56.145	1.0132	-0.24360E+06	-0.21373E+06	
19	56.427	1.0132	-0.24532E+06	-0.21467E+06	
20	56.481	1.0132	-0.24563E+06	-0.21482E+06	
21	56.600	1.0132	-0.24627E+06	-0.21514E+06	
22	56.794	1.0132	-0.24734E+06	-0.21566E+06	
27	68.113	1.0132	-0.28492E+06	-0.23441E+06	
28	77.869	1.0132	-0.28547E+06	-0.24502E+06	2245.2313

STAGE RATE	FLOW RATE KMOL/HR		FEED RATE KMOL/HR			PRODUCT KMOL/HR
	LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR	MIXED	LIQUID
VAPOR						
1	243.9	0.9282E-03				58.4009
.92818-03						
2	206.0	243.9				
19	203.5	262.3				
20	270.4	261.9			60.7081	
21	269.3	268.1				
22	267.5	267.0				
27	204.9	226.0				
28	2.306	202.6				2.3063

**** MASS FLOW PROFILES ****

STAGE RATE	FLOW RATE KG/HR		FEED RATE KG/HR			PRODUCT KG/HR
	LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR	MIXED	LIQUID
VAPOR						
1	0.1406E+05	0.2199E-01				3367.0769
.21988-01						
2	0.1186E+05	0.1406E+05				
19	0.1149E+05	0.1490E+05				
20	0.1524E+05	0.1486E+05			3426.5907	
21	0.1513E+05	0.1518E+05				

22	0.1496E+05	0.1507E+05
27	8776.	0.1135E+05
28	59.49	8716.

59.4918

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

STAGE	HYDROGEN	**** MOLE-X-PROFILE ****		
		PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.19067E-03	0.11269E-03	0.98771	0.76192E-03
0.73887E-04				
2	0.73447E-07	0.29837E-06	0.98685	0.21094E-03
0.11908E-03				
19	0.16885E-07	0.98403E-07	0.94759	0.58505E-04
0.11408E-01				
20	0.16919E-07	0.10285E-06	0.94147	0.58635E-04
0.14565E-01				
21	0.64807E-11	0.45658E-09	0.92964	0.16176E-04
0.21928E-01				
22	0.24945E-14	0.21836E-11	0.91004	0.45018E-05
0.34445E-01				
27	0.0000	0.38956E-23	0.20376	0.70164E-08
0.39561				
28	0.14368E-23	0.0000	0.24938E-01	0.35852E-09
0.16113				

STAGE	WATER	**** MOLE-X-PROFILE ****	
		PROPY-01	ACETO-01
1	0.11151E-01		
2	0.12823E-01		
19	0.40942E-01		
20	0.43902E-01		
21	0.48413E-01		
22	0.55513E-01		
27	0.40063		
28	0.81393		

STAGE	HYDROGEN	**** MOLE-Y-PROFILE ****		
		PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.60756	0.16738E-01	0.37176	0.11568E-02
0.12464E-04				
2	0.19298E-03	0.11276E-03	0.98771	0.76192E-03
0.73887E-04				
19	0.44623E-04	0.25228E-04	0.96044	0.21508E-03
0.69732E-02				
20	0.44680E-04	0.25264E-04	0.95653	0.21535E-03
0.88805E-02				
21	0.17065E-07	0.10374E-06	0.94936	0.59139E-04
0.13304E-01				
22	0.65366E-11	0.46052E-09	0.93746	0.16316E-04
0.20726E-01				

27	0.0000	0.13509E-20	0.50047	0.32153E-07
0.28861				
28	0.47630E-19	0.0000	0.20579	0.70922E-08
0.39828				

**** MOLE-Y-PROFILE ****

STAGE	WATER
1	0.27718E-02
2	0.11151E-01
19	0.32302E-01
20	0.34299E-01
21	0.37278E-01
22	0.41802E-01
27	0.21092
28	0.39593

**** K-VALUES ****

STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01
ISOPR-01				
1	3186.5	148.53	0.37639	1.5183
0.16870				
2	2627.5	377.92	1.0009	3.6120
0.62046				
19	2642.7	256.43	1.0136	3.6764
0.61128				
20	2640.9	245.68	1.0160	3.6728
0.60974				
21	2633.2	227.26	1.0212	3.6561
0.60674				
22	2620.5	210.94	1.0301	3.6245
0.60174				
27	6112.7	346.76	2.4551	4.5827
0.72950				
28	33150.	1966.6	8.2505	19.780
2.4714				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: C-303 MODEL: RADFRAC (CONTINUED)

**** K-VALUES ****

STAGE	WATER
1	0.24857
2	0.86962
19	0.78899
20	0.78131
21	0.77004
22	0.75308
27	0.52658
28	0.48645

**** MASS-X-PROFILE ****

STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.66668E-05	0.82253E-04	0.99500	0.13503E-02
0.77016E-04				
2	0.25716E-08	0.21807E-06	0.99549	0.37434E-03
0.12429E-03				
19	0.60283E-09	0.73334E-07	0.97469	0.10587E-03
0.12141E-01				
20	0.60523E-09	0.76804E-07	0.97033	0.10631E-03
0.15532E-01				
21	0.23252E-12	0.34196E-09	0.96099	0.29417E-04
0.23454E-01				
22	0.89917E-16	0.16430E-11	0.94510	0.82248E-05
0.37013E-01				
27	0.0000	0.38277E-23	0.27633	0.16740E-07
0.55514				
28	0.11228E-24	0.0000	0.56150E-01	0.14201E-08
0.37539				

**** MASS-X-PROFILE ****

STAGE	WATER
1	0.34844E-02
2	0.40122E-02
19	0.13063E-01
20	0.14035E-01
21	0.15523E-01
22	0.17883E-01
27	0.16853
28	0.56846

**** MASS-Y-PROFILE ****

STAGE	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DI ISO-01
ISOPR-01				
1	0.51700E-01	0.29732E-01	0.91144	0.49894E-02
0.31620E-04				

2	0.67476E-05	0.82299E-04	0.99500	0.13503E-02
0.77016E-04				
19	0.15835E-05	0.18688E-04	0.98197	0.38687E-03
0.73770E-02				
20	0.15877E-05	0.18740E-04	0.97929	0.38787E-03
0.94074E-02				
21	0.60761E-09	0.77105E-07	0.97391	0.10673E-03
0.14122E-01				
22	0.23344E-12	0.34331E-09	0.96456	0.29533E-04
0.22065E-01				
27	0.0000	0.11321E-20	0.57890	0.65429E-07
0.34543				
28	0.22319E-20	0.0000	0.27784	0.16844E-07
0.55636				

**** MASS-Y-PROFILE ****

STAGE	WATER
1	0.21079E-02
2	0.34844E-02
19	0.10244E-01
20	0.10892E-01
21	0.11862E-01
22	0.13341E-01
27	0.75677E-01
28	0.16580

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY USAGE: U-104 (WATER)

CONDENSER	3.8686+05	1.7121
TOTAL:	3.8686+05 KG/HR	1.7121 \$/HR

UTILITY USAGE: U-102 (STEAM)

REBOILER	3687.6274	15.3574
531.4695		
TOTAL:	3687.6274 KG/HR	15.3574 \$/HR
531.4695 CO2 KG/HR		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-101 MODEL: HEATER

INLET STREAM: 13
OUTLET STREAM: 14
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	RELATIVE
DIFF.			
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
HYDROGEN	0.331365E-23	0.331365E-23	0.00000
PROPY-01	0.00000	0.00000	0.00000
ACETO-01	0.575152E-01	0.575152E-01	0.00000
DIISO-01	0.826872E-09	0.826872E-09	0.00000
ISOPR-01	59.1296	59.1296	0.00000
WATER	27.0592	27.0592	0.00000
DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000
SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL BALANCE			
MOLE (KMOL/HR)	86.2463	86.2463	0.00000
MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27	0.00000
ENTHALPY (KW)	-7381.26	-5520.81	-0.252051

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	440.389	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	440.389	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE TP FLASH		
SPECIFIED TEMPERATURE	C	360.000
PRESSURE DROP	BAR	0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS		30
CONVERGENCE TOLERANCE		
0.000100000		

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	360.00
OUTLET PRESSURE	BAR	2.7000
HEAT DUTY	KW	1860.5
OUTLET VAPOR FRACTION		1.0000
PRESSURE-DROP CORRELATION PARAMETER		0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-101 MODEL: HEATER (CONTINUED)

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

	COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
17.908	ACETO-01	0.66687E-03	0.84689E-03	0.66687E-03	
20.060	DIISO-01	0.95873E-11	0.10869E-10	0.95873E-11	
16.558	ISOPR-01	0.68559	0.94164	0.68559	
124.07	WATER	0.31374	0.57510E-01	0.31374	

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY ID FOR GENERAL	U-101
RATE OF CONSUMPTION	1.1163+04 KG/HR
COST	28.4650 \$/HR
CO2 EQUIVALENT EMISSIONS	440.3888 KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-301 MODEL: HEATER

INLET STREAM: 18
OUTLET STREAM: 19
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	57.7422	57.7422	-
0.807029E-07	PROPY-01	0.798250	0.798250	-
0.759913E-07	ACETO-01	57.7476	57.7475	
0.204632E-05	DIISO-01	0.106433	0.106433	-
0.759728E-07	ISOPR-01	0.376351	0.376351	
0.646909E-06	WATER	27.9639	27.9640	-
0.257005E-05	DIACE-01	0.260099E-01	0.260098E-01	
0.204632E-05	SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	144.761	144.761	
0.289232E-06	MASS (KG/HR)	4044.27	4044.26	
0.137890E-05	ENTHALPY (KW)	-4141.21	-6133.17	0.324784

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE TP FLASH		
SPECIFIED TEMPERATURE	C	22.0000
PRESSURE DROP	BAR	0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS		30
CONVERGENCE TOLERANCE		
0.000100000		

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	22.000
OUTLET PRESSURE	BAR	1.1965
HEAT DUTY	KW	-1992.0
OUTLET VAPOR FRACTION		0.50318

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-301 MODEL: HEATER (CONTINUED)

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
HYDROGEN	0.39888	0.18082E-03	0.79254	
4383.0				
PROPY-01	0.55143E-02	0.82109E-04	0.10878E-01	
132.48				
ACETO-01	0.39892	0.62024	0.18040	
0.29085				
DIISO-01	0.73524E-03	0.55818E-03	0.91005E-03	
1.6304				
ISOPR-01	0.25998E-02	0.47898E-02	0.43748E-03	
0.91335E-01				
WATER	0.19317	0.37379	0.14838E-01	
0.39697E-01				
DIACE-01	0.17967E-03	0.36163E-03	0.17221E-07	
0.47621E-04				

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY ID FOR WATER	U-105
RATE OF CONSUMPTION	1.7121+05 KG/HR
COST	99.5978 \$/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-102 MODEL: HEATER

INLET STREAM: 24
OUTLET STREAM: 25
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	0.262583E-15	0.262765E-15	0.00000
	PROPY-01	0.105279E-14	0.105357E-14	-
0.739373E-03	ACETO-01	0.120301E-01	0.120411E-01	-
0.913701E-03	DIISO-01	0.544744E-09	0.545222E-09	-
0.876766E-03	ISOPR-01	0.344129E-02	0.344286E-02	-
0.454943E-03	WATER	310.184	310.183	
0.228998E-05	DIACE-01	0.326103	0.326102	
0.305509E-05	SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	310.525	310.525	
0.225019E-05	MASS (KG/HR)	5626.83	5626.82	
0.216447E-05	ENTHALPY (KW)	-24609.5	-24737.7	
0.518254E-02				

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	25.8060	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	25.8060	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE TP FLASH		
SPECIFIED TEMPERATURE	C	15.0000
PRESSURE DROP	BAR	0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS		30
CONVERGENCE TOLERANCE		
0.000100000		

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	15.000
OUTLET PRESSURE	BAR	1.5000
HEAT DUTY	KW	-128.26
OUTLET VAPOR FRACTION		0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-102 MODEL: HEATER (CONTINUED)

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
ACETO-01 0.53823	0.38741E-04	0.38741E-04	0.17926E-02	
DIISO-01 116.02	0.17543E-11	0.17543E-11	0.17498E-07	
ISOPR-01 0.14499	0.11082E-04	0.11082E-04	0.13813E-03	
WATER 0.11619E-01	0.99890	0.99890	0.99773	
DIACE-01 0.38003E-02	0.10502E-02	0.10502E-02	0.34309E-03	

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY ID FOR REFRIGERANT	U-103
RATE OF CONSUMPTION	1.1543+05 KG/HR
COST	1.2651 \$/HR
CO2 EQUIVALENT EMISSIONS	25.8060 KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-206 MODEL: HEATER

INLET STREAM: 40
OUTLET STREAM: 53
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	0.283261E-15	0.283261E-15	0.00000
	PROPY-01	0.113569E-14	0.113569E-14	0.00000
	ACETO-01	0.129775E-01	0.129775E-01	0.00000
	DIISO-01	0.587641E-09	0.587641E-09	0.00000
	ISOPR-01	0.371229E-02	0.371229E-02	0.00000
	WATER	334.610	334.610	0.00000
	DIACE-01	0.351783	0.351783	0.00000
	SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	334.979	334.979	0.00000
	MASS (KG/HR)	6069.94	6069.94	0.00000
	ENTHALPY (KW)	-26080.1	-26547.7	

0.176141E-01

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE TP FLASH		
SPECIFIED TEMPERATURE	C	35.0000
PRESSURE DROP	BAR	0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS		30
CONVERGENCE TOLERANCE		

0.000100000

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	35.000
OUTLET PRESSURE	BAR	1.0132
HEAT DUTY	KW	-467.61
OUTLET VAPOR FRACTION		0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: E-206 MODEL: HEATER (CONTINUED)

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
ACETO-01 2.8441	0.38741E-04	0.38741E-04	0.19565E-02	
DIISO-01 284.02	0.17543E-11	0.17543E-11	0.88473E-08	
ISOPR-01 0.95354	0.11082E-04	0.11082E-04	0.18764E-03	
WATER 0.56227E-01	0.99890	0.99890	0.99731	
DIACE-01 0.29458E-01	0.10502E-02	0.10502E-02	0.54932E-03	

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY ID FOR WATER	U-104
RATE OF CONSUMPTION	8.0640+04 KG/HR
COST	0.3569 \$/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: V-301 MODEL: FLASH2

INLET STREAM: 19
OUTLET VAPOR STREAM: 20
OUTLET LIQUID STREAM: 21
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

	IN	OUT	RELATIVE
DIFF.			
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
HYDROGEN	57.7422	57.7422	
0.246109E-15			
PROPY-01	0.798250	0.798250	0.00000
ACETO-01	57.7475	57.7475	
0.246086E-15			
DIISO-01	0.106433	0.106433	0.00000
ISOPR-01	0.376351	0.376351	
0.147498E-15			
WATER	27.9640	27.9640	
0.381138E-15			
DIACE-01	0.260098E-01	0.260098E-01	0.00000
SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL BALANCE			
MOLE (KMOL/HR)	144.761	144.761	0.00000
MASS (KG/HR)	4044.26	4044.26	
0.224885E-15			
ENTHALPY (KW)	-6133.17	-6133.17	
0.181699E-07			

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE PQ FLASH		
PRESSURE DROP	BAR	0.0
SPECIFIED HEAT DUTY	KW	0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS		30
CONVERGENCE TOLERANCE		0.000100000

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	22.000
--------------------	---	--------

OUTLET PRESSURE	BAR	1.1965
VAPOR FRACTION		0.50318

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: V-301 MODEL: FLASH2 (CONTINUED)

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
HYDROGEN	0.39888	0.18082E-03	0.79254	
4383.0				
PROPY-01	0.55143E-02	0.82109E-04	0.10878E-01	
132.48				
ACETO-01	0.39892	0.62024	0.18039	
0.29085				
DIISO-01	0.73524E-03	0.55818E-03	0.91005E-03	
1.6304				
ISOPR-01	0.25998E-02	0.47898E-02	0.43748E-03	
0.91335E-01				
WATER	0.19317	0.37379	0.14838E-01	
0.39697E-01				
DIACE-01	0.17967E-03	0.36163E-03	0.17221E-07	
0.47621E-04				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: P-101 MODEL: PUMP

 INLET STREAM: 12
 OUTLET STREAM: 13
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	0.331365E-23	0.331365E-23	0.00000
	PROPY-01	0.00000	0.00000	0.00000
	ACETO-01	0.575152E-01	0.575152E-01	0.00000
	DIISO-01	0.826872E-09	0.826872E-09	0.00000
	ISOPR-01	59.1296	59.1296	0.00000
	WATER	27.0592	27.0592	0.00000
	DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000
	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	86.2463	86.2463	0.00000
	MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27	0.00000
	ENTHALPY (KW)	-7382.01	-7381.26	-

0.101680E-03

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.260387	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.260387	KG/HR

*** INPUT DATA ***

OUTLET PRESSURE BAR	2.70000
DRIVER EFFICIENCY	1.00000

FLASH SPECIFICATIONS:

LIQUID PHASE CALCULATION	
NO FLASH PERFORMED	
MAXIMUM NUMBER OF ITERATIONS	30
TOLERANCE	0.000100000

*** RESULTS ***

VOLUMETRIC FLOW RATE CUM/HR	4.98586
PRESSURE CHANGE BAR	1.68675
NPSH AVAILABLE METER	11.8675
FLUID POWER KW	0.23361

BRAKE POWER KW	0.75061
ELECTRICITY KW	0.75061
PUMP EFFICIENCY USED	0.31123
NET WORK REQUIRED KW	0.75061
HEAD DEVELOPED METER	21.2046

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY ID FOR ELECTRICITY	U-106
RATE OF CONSUMPTION	0.7506 KW
COST	5.8172-02 \$/HR
CO2 EQUIVALENT EMISSIONS	0.2604 KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: R-TURTON MODEL: RPLUG

PROCESS SIDE:

INLET STREAM: F-TURTON
OUTLET STREAM: P-TURTON
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

COOLANT SIDE:

INLET STREAM: F-MSALT
OUTLET STREAM: O-MSALT
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

	***	MASS AND ENERGY BALANCE	***	
		IN	OUT	GENERATION
DIFF.				RELATIVE
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)				
0.00000	HYDROGEN	0.00000	34.9535	34.9535
0.00000	PROPY-01	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	ACETO-01	0.160000	35.1135	34.9535
0.00000	DIISO-01	0.00000	0.00000	0.00000
0.126423E-15	ISOPR-01	38.6400	3.68651	-34.9535 -
0.00000	WATER	19.0400	19.0400	0.00000
0.00000	DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	SODIU-01	412.967	412.967	0.00000
0.00000	POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000
0.00000	SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000
0.112392E-15	TOTAL BALANCE MOLE (KMOL/HR)	470.807	505.760	34.9535 -
0.963080E-15	MASS (KG/HR)	37774.4	37774.4	-
0.00000	ENTHALPY (KW)	-8288.34	-8288.34	

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

REACTOR TYPE:

COCURRENT COOLANT		
VAPOR FLUID PHASE		
REACTOR TUBE LENGTH	METER	6.1000
REACTOR DIAMETER	METER	0.51000E-01
REACTOR RISE	METER	0.0000
NUMBER OF REACTOR TUBES		448
REACTOR VOLUME	CUM	5.5826
PRESSURE DROP OPTION:		SPECIFIED
HOLDUP OPTION:		NO-SLIP
ERROR TOLERANCE		0.10000E-03
INTEGRATION METHOD		GEAR
CORRECTOR METHOD		NEWTON
INITIAL STEP SIZE FACTOR		0.10000E-01
CORRECTOR TOLERANCE FACTOR		0.10000
MAXIMUM NUMBER OF STEPS		1000

REACTION PARAGRAPH	ID: DEHYDFOR	TYPE: GENERAL
GLOBAL BASES:		
KBASIS		MOLE-GAMMA
CBASIS		MOLARITY
SBASIS		GLOBAL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: R-TURTON MODEL: RPLUG (CONTINUED)
STOICHIOMETRY:

REACTION NUMBER: 1
SUBSTREAM: MIXED
HYDROGEN 1.0000 ACETO-01 1.0000 ISOPR-01 -
1.0000

REACTION NUMBER: 2
SUBSTREAM: MIXED
HYDROGEN -1.0000 ACETO-01 -1.0000 ISOPR-01
1.0000

REAC-DATA ENTRIES:

REACTION NO	TYPE	PHASE	DELT C	BASIS
1	KINETIC	V	0.0000	MOLARITY
2	KINETIC	V	0.0000	MOLARITY

*** RESULTS ***

REACTOR DUTY	KW	793.26
RESIDENCE TIME	HR	0.26040E-02
REACTOR MINIMUM TEMPERATURE	C	223.79
REACTOR MAXIMUM TEMPERATURE	C	355.79

*** RESULTS PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	PRESSURE BAR	TEMPERATURE C	VAPOR FRAC	RES-TIME HR
0.0000	2.1600	234.00	1.0000	0.0000
0.61000	2.1350	268.53	1.0000	0.40679E-
03				
1.2200	2.1100	309.68	1.0000	0.71200E-
03				
1.8300	2.0850	335.26	1.0000	0.97729E-
03				
2.4400	2.0600	347.80	1.0000	0.12252E-
02				
3.0500	2.0350	352.92	1.0000	0.14647E-
02				
3.6600	2.0100	354.84	1.0000	0.16992E-
02				

02	4.2700	1.9850	355.52	1.0000	0.19301E-
02	4.8800	1.9600	355.74	1.0000	0.21578E-
02	5.4900	1.9350	355.79	1.0000	0.23824E-
02	6.1000	1.9100	355.79	1.0000	0.26040E-

LENGTH METER	DUTY KW	LIQUID HOLDUP
0.0000	0.0000	0.0000
0.61000	395.52	0.0000
1.2200	614.68	0.0000
1.8300	719.72	0.0000
2.4400	763.75	0.0000
3.0500	780.91	0.0000
3.6600	787.58	0.0000
4.2700	790.36	0.0000
4.8800	791.72	0.0000
5.4900	792.58	0.0000
6.1000	793.26	0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: R-TURTON MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	HYDROGEN	ACETO-01	ISOPR-01	WATER
0.0000	0.0000	0.27663E-02	0.66805	0.32918
0.61000	0.26157	0.26362	0.23173	0.24308
1.2200	0.33647	0.33830	0.10681	0.21842
1.8300	0.36214	0.36390	0.63985E-01	0.20997
2.4400	0.37078	0.37252	0.49570E-01	0.20713
3.0500	0.37387	0.37560	0.44412E-01	0.20611
3.6600	0.37512	0.37684	0.42338E-01	0.20570
4.2700	0.37572	0.37745	0.41328E-01	0.20550
4.8800	0.37610	0.37783	0.40692E-01	0.20538
5.4900	0.37641	0.37813	0.40187E-01	0.20528
6.1000	0.37668	0.37840	0.39728E-01	0.20519

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	HYDROGEN	ACETO-01	ISOPR-01	WATER
0.0000	0.0000	0.34747E-02	0.86827	0.12826
0.61000	0.15444E-01	0.44843	0.40787	0.12826
1.2200	0.22108E-01	0.64043	0.20921	0.12826
1.8300	0.24752E-01	0.71661	0.13038	0.12826
2.4400	0.25691E-01	0.74366	0.10239	0.12826
3.0500	0.26033E-01	0.75352	0.92189E-01	0.12826
3.6600	0.26172E-01	0.75751	0.88059E-01	0.12826
4.2700	0.26239E-01	0.75946	0.86042E-01	0.12826
4.8800	0.26282E-01	0.76069	0.84769E-01	0.12826
5.4900	0.26316E-01	0.76167	0.83758E-01	0.12826
6.1000	0.26347E-01	0.76256	0.82838E-01	0.12826

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION

BLOCK: R-TURTON MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** RESULTS PROFILE (COOLANT STREAM) ***

	LENGTH METER	PRESSURE BAR	TEMPERATURE C	VAPOR FRAC	RES-TIME HR
	0.0000	3.0000	407.00	0.0000	0.0000
03	0.61000	3.0000	381.68	0.0000	0.40679E-
03	1.2200	3.0000	367.57	0.0000	0.71200E-
03	1.8300	3.0000	360.79	0.0000	0.97729E-
02	2.4400	3.0000	357.94	0.0000	0.12252E-
02	3.0500	3.0000	356.83	0.0000	0.14647E-
02	3.6600	3.0000	356.40	0.0000	0.16992E-
02	4.2700	3.0000	356.22	0.0000	0.19301E-
02	4.8800	3.0000	356.13	0.0000	0.21578E-
02	5.4900	3.0000	356.07	0.0000	0.23824E-
02	6.1000	3.0000	356.03	0.0000	0.26040E-

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION

STREAM COSTS

ID	PRICE	COST
\$/HR		
41	5.0000-02 \$/KG	
22.1553		
10	1.0460 \$/KG	
4168.0766		
52	1.4010 \$/KG	
4717.2748		
29	5.0000 \$/KG	
872.8839		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION

10 11 12 13 14

18 19 20 21 22

STREAM ID	10	11	12	13	14
18	19	20	21	22	
FROM :	----	C-303	B2	P-101	E-
101	\$C-2	E-301	V-301	V-301	----
TO :		B2	B2	P-101	E-101
E-301	V-301	C-301	C-302	----	\$C-1

SUBSTREAM: MIXED

PHASE:		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
VAPOR	VAPOR	MIXED	VAPOR	LIQUID	LIQUID
COMPONENTS: KMOL/HR					
HYDROGEN		0.0	3.3137-24	3.3137-24	3.3137-24
3.3137-24	57.7422	57.7422	57.7292	1.3005-02	0.0
PROPY-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.7982	0.7982	0.7923	5.9053-03	0.0	0.0
ACETO-01		0.0	5.7515-02	5.7515-02	5.7515-02
5.7515-02	57.7476	57.7475	13.1400	44.6075	0.0
DIISO-01		0.0	8.2687-10	8.2687-10	8.2687-10
8.2687-10	0.1064	0.1064	6.6289-02	4.0144-02	0.0
ISOPR-01		58.7580	0.3716	59.1296	59.1296
59.1296	0.3764	0.3764	3.1866-02	0.3445	0.0
WATER		25.1820	1.8772	27.0592	27.0592
27.0592	27.9639	27.9640	1.0808	26.8831	39.9864
DIACE-01		0.0	0.0	0.0	0.0
2.6010-02	2.6010-02	1.2544-06	2.6009-02	0.0	0.0
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
COMPONENTS: MOLE FRAC					
HYDROGEN		0.0	1.4368-24	3.8421-26	3.8421-26
3.8421-26	0.3989	0.3989	0.7925	1.8082-04	0.0
PROPY-01		0.0	0.0	0.0	0.0
5.5143-03	5.5143-03	1.0878-02	8.2109-05	0.0	0.0
ACETO-01		0.0	2.4938-02	6.6687-04	6.6687-04
6.6687-04	0.3989	0.3989	0.1804	0.6202	0.0
DIISO-01		0.0	3.5852-10	9.5873-12	9.5873-12
9.5873-12	7.3524-04	7.3524-04	9.1005-04	5.5818-04	0.0
ISOPR-01		0.7000	0.1611	0.6856	0.6856
0.6856	2.5998-03	2.5998-03	4.3748-04	4.7898-03	0.0

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION

10 11 12 13 14

18 19 20 21 22 (CONTINUED)

STREAM ID	10	11	12	13	14
18	19	20	21	22	
COMPONENTS: STD CUM/HR					
HYDROGEN		0.0	1.7747-25	1.7747-25	1.7747-25
1.7747-25	3.0925	3.0925	3.0918	6.9651-04	0.0
PROPY-01		0.0	0.0	0.0	0.0
6.4544-02	6.4544-02	6.4066-02	4.7748-04	0.0	
ACETO-01		0.0	4.2559-03	4.2559-03	4.2559-03
4.2559-03	4.2731	4.2731	0.9723	3.3008	0.0
DIISO-01		0.0	1.1723-10	1.1723-10	1.1723-10
1.1723-10	1.5090-02	1.5090-02	9.3981-03	5.6915-03	0.0
ISOPR-01		4.4844	2.8362-02	4.5128	4.5128
4.5128	2.8723-02	2.8723-02	2.4320-03	2.6291-02	0.0
WATER		0.4545	3.3884-02	0.4884	0.4884
0.4884	0.5047	0.5047	1.9509-02	0.4852	0.7218
DIACE-01		0.0	0.0	0.0	0.0
3.2340-03	3.2340-03	1.5597-07	3.2338-03	0.0	0.0
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TOTAL CUM/HR		4.9390	6.6502-02	5.0055	5.0055
5.0055	7.9820	7.9820	4.1596	3.8224	0.7218
COMPONENTS: STD VOL FRAC					
HYDROGEN		0.0	2.6687-24	3.5456-26	3.5456-26
3.5456-26	0.3874	0.3874	0.7433	1.8222-04	0.0
PROPY-01		0.0	0.0	0.0	0.0
8.0862-03	8.0862-03	1.5402-02	1.2492-04	0.0	
ACETO-01		0.0	6.3997-02	8.5025-04	8.5025-04
8.5025-04	0.5353	0.5353	0.2338	0.8635	0.0
DIISO-01		0.0	1.7628-09	2.3420-11	2.3420-11
2.3420-11	1.8905-03	1.8905-03	2.2594-03	1.4890-03	0.0
ISOPR-01		0.9080	0.4265	0.9016	0.9016
0.9016	3.5985-03	3.5985-03	5.8469-04	6.8782-03	0.0
WATER		9.2030-02	0.5095	9.7577-02	9.7577-02
9.7577-02	6.3236-02	6.3236-02	4.6902-03	0.1269	1.0000
DIACE-01		0.0	0.0	0.0	0.0
4.0516-04	4.0516-04	3.7496-08	8.4601-04	0.0	0.0
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
TOTAL CUM/HR		4.9390	6.6502-02	5.0055	5.0055		
5.0055	7.9820	7.9820	4.1596	3.8224	0.7218		
COST:							
\$/HR		4168.0766	MISSING	MISSING	MISSING		
MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING	MISSING		
TOTAL FLOW:							
KMOL/HR		83.9400	2.3063	86.2463	86.2463		
86.2463	144.7607	144.7607	72.8405	71.9202	39.9864		
KG/HR		3984.7768	59.4919	4044.2687	4044.2687		
4044.2687	4044.2687	4044.2631	941.0511	3103.2120	720.3662		
CUM/HR		4.9141	7.1083-02	4.9859	4.9870		
1668.2842	7739.6682	1496.0409	1492.2386	3.8000	0.7319		
STATE VARIABLES:							
TEMP C		25.0000	77.8693	25.9698	26.1321		
360.0000	496.5208	22.0000	22.0000	22.0000	35.0000		
PRES BAR		1.0133	1.0133	1.0133	2.7000		
2.7000	1.1965	1.1965	1.1965	1.1965	1.0133		
VFRAC		0.0	0.0	0.0	0.0		
1.0000	1.0000	0.5032	1.0000	0.0	0.0		
LFRAC		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000		0.0
0.0	0.4968	0.0	1.0000	1.0000			
SFRAC		0.0	0.0	0.0	0.0		0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0			
ENTHALPY:							
KJ/KMOL		-3.0875+05	-2.8547+05	-3.0813+05	-3.0810+05	-	
2.3044+05	-1.0299+05	-1.5252+05	-4.2815+04	-2.6364+05	-2.8506+05		
KJ/KG		-6503.9686	-1.1067+04	-6571.0893	-6570.4211	-	
4914.3402	-3686.2943	-5459.4364	-3314.0123	-6110.0378	-1.5823+04		
KW		-7199.1288	-182.8853	-7382.0141	-7381.2635	-	
5520.8090	-4141.2125	-6133.1659	-866.2930	-5266.8730	-3166.2275		
ENTROPY:							
CAL/MOL-K		-87.4901	-47.2316	-86.3872	-86.3701	-	
40.5207	-7.0573	-35.4669	-9.2181	-62.0517	-38.3823		
CAL/GM-K		-1.8430	-1.8310	-1.8423	-1.8419	-	
0.8641	-0.2526	-1.2695	-0.7135	-1.4381	-2.1305		
DENSITY:							
KMOL/CUM		17.0814	32.4459	17.2982	17.2942		
5.1698-02	1.8704-02	9.6763-02	4.8813-02	18.9263	54.6346		
KG/CUM		810.8838	836.9367	811.1480	810.9583		
2.4242	0.5225	2.7033	0.6306	816.6315	984.2581		
AVG MW		47.4717	25.7948	46.8921	46.8921		
46.8921	27.9376	27.9376	12.9193	43.1480	18.0153		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION

24 25 26 27 28

29 32 36 40 41

STREAM ID	24	25	26	27	28
29	32	36	40	41	
FROM :	P-102	E-102	C-301	C-301	B1
B3	C-302	C-302	C-302	B4	
TO :	E-102	C-301	C-302	B1	B3
----	B1	C-303	E-206	----	

SUBSTREAM: MIXED

PHASE:	LIQUID	LIQUID	LIQUID	VAPOR	
VAPOR	VAPOR	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID
COMPONENTS: KMOL/HR					
HYDROGEN	2.6258-16	2.6276-16	4.8324-03	57.7243	
57.7305	57.7310	6.1379-03	1.1699-02	2.8326-16	2.0678-17
PROPY-01	1.0528-15	1.0536-15	8.2801-04	0.7915	
0.7917	0.7917	1.3633-04	6.5970-03	1.1357-15	8.2906-17
ACETO-01	1.2030-02	1.2041-02	13.1501	2.0037-03	
5.5852-03	5.9303-03	3.5815-03	57.7410	1.2977-02	9.4736-04
DIISO-01	5.4474-10	5.4522-10	4.3645-03	6.1924-02	
6.1936-02	6.1937-02	1.1331-05	4.4498-02	5.8764-10	4.2898-11
ISOPR-01	3.4413-03	3.4429-03	3.5173-02	1.3617-04	
1.4622-04	1.4623-04	1.0054-05	0.3759	3.7123-03	2.7100-04
WATER	310.1837	310.1830	310.2556	1.0082	
1.0083	1.0083	8.8366-05	2.5284	334.6102	24.4265
DIACE-01	0.3261	0.3261	0.3258	3.2865-04	
3.2865-04	3.2865-04	1.0222-26	2.3773-19	0.3518	2.5680-02
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

COMPONENTS: MOLE FRAC

HYDROGEN	8.4561-19	8.4620-19	1.4925-05	0.9687	
0.9687	0.9687	0.6159	1.9271-04	8.4561-19	8.4561-19
PROPY-01	3.3903-18	3.3929-18	2.5574-06	1.3283-02	
1.3283-02	1.3283-02	1.3680-02	1.0867-04	3.3903-18	3.3903-18
ACETO-01	3.8741-05	3.8777-05	4.0615-02	3.3626-05	
9.3715-05	9.9503-05	0.3594	0.9511	3.8741-05	3.8741-05
DIISO-01	1.7543-12	1.7558-12	1.3480-05	1.0392-03	
1.0392-03	1.0392-03	1.1370-03	7.3298-04	1.7543-12	1.7543-12
ISOPR-01	1.1082-05	1.1087-05	1.0863-04	2.2852-06	
2.4535-06	2.4536-06	1.0089-03	6.1925-03	1.1082-05	1.1082-05

WATER		0.9989	0.9989	0.9582	1.6919-02	
1.6918-02	1.6917-02	8.8671-03	4.1649-02	0.9989	0.9989	
DIACE-01		1.0502-03	1.0502-03	1.0062-03	5.5154-06	
5.5145-06	5.5144-06	1.0258-24	3.9159-21	1.0502-03	1.0502-03	
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		

COMPONENTS: KG/HR

HYDROGEN		5.2934-16	5.2970-16	9.7416-03	116.3653	
116.3777	116.3788	1.2373-02	2.3584-02	5.7102-16	4.1684-17	
PROPY-01		4.4302-14	4.4335-14	3.4843-02	33.3075	
33.3133	33.3139	5.7367-03	0.2776	4.7791-14	3.4887-15	
ACETO-01		0.6987	0.6993	763.7569	0.1164	
0.3244	0.3444	0.2080	3353.6001	0.7537	5.5023-02	
DIISO-01		5.5660-08	5.5709-08	0.4459	6.3272	
6.3284	6.3285	1.1578-03	4.5466	6.0043-08	4.3832-09	
ISOPR-01		0.2068	0.2069	2.1137	8.1832-03	
8.7874-03	8.7881-03	6.0422-04	22.5922	0.2231	1.6286-02	
WATER		5588.0460	5588.0332	5589.3421	18.1625	
18.1641	18.1642	1.5919-03	45.5507	6028.0970	440.0511	
DIACE-01		37.8801	37.8800	37.8420	3.8176-02	
3.8176-02	3.8176-02	1.1874-24	2.7614-17	40.8631	2.9830	
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		

COMPONENTS: MASS FRAC

HYDROGEN		9.4073-20	9.4139-20	1.5237-06	0.6675	
0.6667	0.6666	5.3919-02	6.8827-06	9.4073-20	9.4073-20	
PROPY-01		7.8733-18	7.8792-18	5.4498-06	0.1911	
0.1908	0.1908	2.4999-02	8.1015-05	7.8733-18	7.8733-18	
ACETO-01		1.2417-04	1.2429-04	0.1195	6.6757-04	
1.8584-03	1.9730-03	0.9065	0.9787	1.2417-04	1.2417-04	
DIISO-01		9.8919-12	9.9006-12	6.9750-05	3.6295-02	
3.6254-02	3.6250-02	5.0453-03	1.3269-03	9.8919-12	9.8919-12	
ISOPR-01		3.6754-05	3.6771-05	3.3061-04	4.6942-05	
5.0342-05	5.0340-05	2.6330-03	6.5932-03	3.6754-05	3.6754-05	
WATER		0.9931	0.9931	0.8742	0.1042	
0.1041	0.1040	6.9372-03	1.3293-02	0.9931	0.9931	
DIACE-01		6.7321-03	6.7320-03	5.9188-03	2.1900-04	
2.1871-04	2.1868-04	5.1745-24	8.0588-21	6.7321-03	6.7321-03	
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION

24 25 26 27 28

29 32 36 40 41 (CONTINUED)

STREAM ID	24	25	26	27	28
29	32	36	40	41	
COMPONENTS: STD CUM/HR					
HYDROGEN		1.4063-17	1.4073-17	2.5881-04	3.0916
3.0919	3.0919	3.2873-04	6.2659-04	1.5171-17	1.1075-18
PROPY-01		8.5125-17	8.5188-17	6.6950-05	6.3999-02
6.4010-02	6.4012-02	1.1023-05	5.3341-04	9.1828-17	6.7035-18
ACETO-01		8.9018-04	8.9100-04	0.9731	1.4827-04
4.1329-04	4.3882-04	2.6502-04	4.2726	9.6028-04	7.0101-05
DIISO-01		7.7231-11	7.7299-11	6.1878-04	8.7793-03
8.7809-03	8.7811-03	1.6065-06	6.3087-03	8.3313-11	6.0818-12
ISOPR-01		2.6264-04	2.6276-04	2.6844-03	1.0392-05
1.1160-05	1.1161-05	7.6735-07	2.8692-02	2.8332-04	2.0683-05
WATER		5.5988	5.5988	5.6001	1.8198-02
1.8199-02	1.8199-02	1.5950-06	4.5639-02	6.0397	0.4409
DIACE-01		4.0546-02	4.0546-02	4.0505-02	4.0863-05
4.0863-05	4.0863-05	1.2710-27	2.9558-20	4.3739-02	3.1930-03
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
TOTAL CUM/HR		5.6405	5.6405	6.6173	3.1828
3.1834	3.1834	6.0875-04	4.3544	6.0847	0.4442
COMPONENTS: STD VOL FRAC					
HYDROGEN		2.4933-18	2.4950-18	3.9112-05	0.9714
0.9713	0.9713	0.5400	1.4390-04	2.4933-18	2.4933-18
PROPY-01		1.5092-17	1.5103-17	1.0117-05	2.0108-02
2.0108-02	2.0108-02	1.8107-02	1.2250-04	1.5092-17	1.5092-17
ACETO-01		1.5782-04	1.5796-04	0.1470	4.6584-05
1.2983-04	1.3784-04	0.4354	0.9812	1.5782-04	1.5782-04
DIISO-01		1.3692-11	1.3704-11	9.3509-05	2.7584-03
2.7584-03	2.7584-03	2.6390-03	1.4488-03	1.3692-11	1.3692-11
ISOPR-01		4.6563-05	4.6585-05	4.0567-04	3.2652-06
3.5057-06	3.5059-06	1.2605-03	6.5891-03	4.6563-05	4.6563-05
WATER		0.9926	0.9926	0.8463	5.7175-03
5.7169-03	5.7168-03	2.6201-03	1.0481-02	0.9926	0.9926
DIACE-01		7.1884-03	7.1884-03	6.1211-03	1.2839-05
1.2837-05	1.2836-05	2.0879-24	6.7880-21	7.1884-03	7.1884-03
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
TOTAL CUM/HR		5.6405	5.6405	6.6173	3.1828		
3.1834	3.1834	6.0875-04	4.3544	6.0847	0.4442		
COST:							
\$/HR		MISSING	MISSING	MISSING	MISSING		
MISSING	872.8839	MISSING	MISSING	MISSING	22.1553		
TOTAL FLOW:							
KMOL/HR		310.5253	310.5246	323.7767	59.5884		
59.5984	59.5993	9.9656-03	60.7082	334.9787	24.4534		
KG/HR		5626.8316	5626.8194	6393.5452	174.3253		
174.5548	174.5768	0.2295	3426.5908	6069.9370	443.1054		
CUM/HR		5.7182	5.6077	6.7471	1409.9458		
1410.1999	1410.2236	0.2469	4.3691	6.6130	0.4503		
STATE VARIABLES:							
TEMP C		35.0255	15.0000	39.8285	15.0488		
15.0526	15.0530	30.0000	30.0000	99.9253	35.0000		
PRES BAR		1.5000	1.5000	1.0133	1.0133		
1.0133	1.0133	1.0133	1.0133	1.0133	1.0133		
VFRAC		0.0	0.0	0.0	1.0000		
1.0000	1.0000	1.0000	0.0	0.0	0.0		
LFRAC		1.0000	1.0000	1.0000	0.0		0.0
0.0	0.0	1.0000	1.0000	1.0000			
SFRAC		0.0	0.0	0.0	0.0		0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0			
ENTHALPY:							
KJ/KMOL		-2.8530+05	-2.8679+05	-2.8386+05	-4457.1432		-
4469.7454	-4470.9325	-7.9824+04	-2.4841+05	-2.8028+05	-2.8531+05		
KJ/KG		-1.5745+04	-1.5827+04	-1.4375+04	-1523.5542		-
1526.1085	-1526.3453	-3466.5028	-4401.1136	-1.5468+04	-1.5745+04		
KW		-2.4610+04	-2.4738+04	-2.5530+04	-73.7761		-
73.9971	-74.0179	-0.2210	-4189.1154	-2.6080+04	-1937.9837		
ENTROPY:							
CAL/MOL-K		-38.5143	-39.7014	-39.8651	-0.7074		-
0.7093	-0.7095	-17.6348	-72.2867	-35.0003	-38.5157		
CAL/GM-K		-2.1255	-2.1910	-2.0188	-0.2418		-
0.2422	-0.2422	-0.7658	-1.2807	-1.9315	-2.1255		
DENSITY:							
KMOL/CUM		54.3044	55.3746	47.9875	4.2263-02		
4.2262-02	4.2262-02	4.0368-02	13.8948	50.6548	54.3058		
KG/CUM		984.0163	1003.4085	947.5977	0.1236		
0.1238	0.1238	0.9296	784.2747	917.8842	984.0412		
AVG MW		18.1204	18.1204	19.7468	2.9255		
2.9289	2.9292	23.0273	56.4436	18.1204	18.1204		

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION

44 51 52 53 F-MSALT

F-TURTON O-MSALT P-TURTON

STREAM ID		44	51	52	53	F-
MSALT	F-TURTON	O-MSALT	P-TURTON			
FROM :		C-303	B4	C-303	E-206	----
----	R-TURTON	R-TURTON				
TO :		B3	P-102	----	B4	R-
TURTON	R-TURTON	----	----			

SUBSTREAM: MIXED

PHASE:		VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	
LIQUID	VAPOR	LIQUID	VAPOR			
COMPONENTS: KMOL/HR						
HYDROGEN		5.6393-04	2.6258-16	1.1135-02	2.8326-16	0.0
0.0	0.0	34.9535				
PROPY-01		1.5536-05	1.0528-15	6.5815-03	1.1357-15	0.0
0.0	0.0	0.0				
ACETO-01		3.4506-04	1.2030-02	57.6831	1.2977-02	0.0
0.1600	0.0	35.1135				
DIISO-01		1.0737-06	5.4474-10	4.4497-02	5.8764-10	0.0
0.0	0.0	0.0				
ISOPR-01		1.1569-08	3.4413-03	4.3151-03	3.7123-03	0.0
38.6400	0.0	3.6865				
WATER		2.5727-06	310.1837	0.6512	334.6102	0.0
19.0400	0.0	19.0400				
DIACE-01		0.0	0.3261	0.0	0.3518	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	
412.9669	0.0	412.9669	0.0			
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
COMPONENTS: MOLE FRAC						
HYDROGEN		0.6076	8.4561-19	1.9067-04	8.4561-19	0.0
0.0	0.0	0.3767				
PROPY-01		1.6738-02	3.3903-18	1.1269-04	3.3903-18	0.0
0.0	0.0	0.0				
ACETO-01		0.3718	3.8741-05	0.9877	3.8741-05	0.0
2.7663-03	0.0	0.3784				
DIISO-01		1.1568-03	1.7543-12	7.6192-04	1.7543-12	0.0
0.0	0.0	0.0				
ISOPR-01		1.2464-05	1.1082-05	7.3887-05	1.1082-05	0.0
0.6680	0.0	3.9728-02				

WATER		2.7718-03	0.9989	1.1151-02	0.9989	0.0
0.3292	0.0	0.2052				
DIACE-01		0.0	1.0502-03	0.0	1.0502-03	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	
1.0000	0.0	1.0000	0.0			
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
COMPONENTS: KG/HR						
HYDROGEN		1.1368-03	5.2934-16	2.2447-02	5.7102-16	0.0
0.0	0.0	70.4620				
PROPY-01		6.5375-04	4.4302-14	0.2770	4.7791-14	0.0
0.0	0.0	0.0				
ACETO-01		2.0041-02	0.6987	3350.2395	0.7537	0.0
9.2928	0.0	2039.3931				
DIISO-01		1.0971-04	5.5660-08	4.5465	6.0043-08	0.0
0.0	0.0	0.0				
ISOPR-01		6.9527-07	0.2068	0.2593	0.2231	0.0
2322.1063	0.0	221.5441				
WATER		4.6349-05	5588.0460	11.7322	6028.0970	0.0
343.0109	0.0	343.0109				
DIACE-01		0.0	37.8801	0.0	40.8631	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	
3.5100+04	0.0	3.5100+04	0.0			
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
COMPONENTS: MASS FRAC						
HYDROGEN		5.1700-02	9.4073-20	6.6668-06	9.4073-20	0.0
0.0	0.0	2.6347-02				
PROPY-01		2.9732-02	7.8733-18	8.2253-05	7.8733-18	0.0
0.0	0.0	0.0				
ACETO-01		0.9114	1.2417-04	0.9950	1.2417-04	0.0
3.4747-03	0.0	0.7626				
DIISO-01		4.9894-03	9.8919-12	1.3503-03	9.8919-12	0.0
0.0	0.0	0.0				
ISOPR-01		3.1620-05	3.6754-05	7.7016-05	3.6754-05	0.0
0.8683	0.0	8.2838-02				
WATER		2.1079-03	0.9931	3.4844-03	0.9931	0.0
0.1283	0.0	0.1283				
DIACE-01		0.0	6.7321-03	0.0	6.7321-03	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	
1.0000	0.0	1.0000	0.0			
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION

44 51 52 53 F-MSALT

F-TURTON O-MSALT P-TURTON (CONTINUED)

STREAM ID	44	51	52	53	F-
MSALT F-TURTON	O-MSALT	P-TURTON			
COMPONENTS: STD CUM/HR					
HYDROGEN	3.0203-05	1.4063-17	5.9638-04	1.5171-17	0.0
0.0 0.0	1.8720				
PROPY-01	1.2562-06	8.5125-17	5.3215-04	9.1828-17	0.0
0.0 0.0	0.0				
ACETO-01	2.5533-05	8.9018-04	4.2683	9.6028-04	0.0
1.1839-02 0.0	2.5983				
DIISO-01	1.5223-07	7.7231-11	6.3085-03	8.3313-11	0.0
0.0 0.0	0.0				
ISOPR-01	8.8297-10	2.6264-04	3.2933-04	2.8332-04	0.0
2.9490 0.0	0.2814				
WATER	4.6438-08	5.5988	1.1755-02	6.0397	0.0
0.3437 0.0	0.3437				
DIACE-01	0.0	4.0546-02	0.0	4.3739-02	0.0
0.0 0.0	0.0				
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	
16.6163 0.0	16.6163	0.0			
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0 0.0	0.0				
SODIU-02	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0 0.0	0.0				
TOTAL CUM/HR	5.7191-05	5.6405	4.2879	6.0847	
16.6163 3.3045	16.6163	5.0953			
COMPONENTS: STD VOL FRAC					
HYDROGEN	0.5281	2.4933-18	1.3909-04	2.4933-18	0.0
0.0 0.0	0.3674				
PROPY-01	2.1964-02	1.5092-17	1.2411-04	1.5092-17	0.0
0.0 0.0	0.0				
ACETO-01	0.4464	1.5782-04	0.9954	1.5782-04	0.0
3.5828-03 0.0	0.5099				
DIISO-01	2.6617-03	1.3692-11	1.4712-03	1.3692-11	0.0
0.0 0.0	0.0				
ISOPR-01	1.5439-05	4.6563-05	7.6805-05	4.6563-05	0.0
0.8924 0.0	5.5219-02				
WATER	8.1197-04	0.9926	2.7414-03	0.9926	0.0
0.1040 0.0	6.7448-02				
DIACE-01	0.0	7.1884-03	0.0	7.1884-03	0.0
0.0 0.0	0.0				
SODIU-01	0.0	0.0	0.0	0.0	
1.0000 0.0	1.0000	0.0			
POTAS-01	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0 0.0	0.0				

SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
TOTAL CUM/HR		5.7191-05	5.6405	4.2879	6.0847	
16.6163	3.3045	16.6163	5.0953			
COST:						
\$/HR		MISSING	MISSING	4717.2748	MISSING	
MISSING	MISSING	MISSING	MISSING			
TOTAL FLOW:						
KMOL/HR		9.2818-04	310.5253	58.4009	334.9787	
412.9669	57.8400	412.9669	92.7935			
KG/HR		2.1988-02	5626.8316	3367.0769	6069.9370	
3.5100+04	2674.4101	3.5100+04	2674.4101			
CUM/HR		2.2988-02	5.7181	4.3015	6.1684	
97.1520	1115.4441	95.0236	2536.1611			
STATE VARIABLES:						
TEMP C		30.0000	35.0000	30.0000	35.0000	
407.0000	234.0000	356.0291	355.7855			
PRES BAR		1.0133	1.0133	1.0133	1.0133	
3.0000	2.1600	3.0000	1.9100			
VFRAC		1.0000	0.0	0.0	0.0	0.0
1.0000	0.0	1.0000				
LFRAC		0.0	1.0000	1.0000	1.0000	
1.0000	0.0	1.0000	0.0			
SFRAC		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0				
ENTHALPY:						
KJ/KMOL		-8.0690+04	-2.8531+05	-2.4684+05	-2.8531+05	-
3.8074+04	-2.4403+05	-4.4989+04	-1.2133+05			
KJ/KG		-3406.0968	-1.5745+04	-4281.3145	-1.5745+04	-
447.9569	-5277.7011	-529.3172	-4209.8968			
KW		-2.0804-02	-2.4610+04	-4004.3098	-2.6548+04	-
4367.5799	-3920.7603	-5160.8429	-3127.4973			
ENTROPY:						
CAL/MOL-K		-18.2722	-38.5157	-73.3688	-38.5157	
352.9341	-44.9369	348.2824	-12.7608			
CAL/GM-K		-0.7713	-2.1255	-1.2726	-2.1255	
4.1524	-0.9719	4.0977	-0.4428			
DENSITY:						
KMOL/CUM		4.0377-02	54.3058	13.5769	54.3058	
4.2507	5.1854-02	4.3459	3.6588-02			
KG/CUM		0.9565	984.0412	782.7677	984.0412	
361.2896	2.3976	369.3819	1.0545			
AVG MW		23.6898	18.1204	57.6545	18.1204	
84.9947	46.2381	84.9947	28.8211			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 UTILITY SECTION

UTILITY USAGE: U-101 (GENERAL)

FIRED HEATER, INLET TEMP=1000 C, OUTLET TEMP=400 C
 INPUT DATA:

INLET TEMPERATURE	1000.0000	C
OUTLET TEMPERATURE	600.0000	C
HEAT TRANSFER COEFFICIENT	95.4428	KCAL/HR-SQM-K
CO2 DATA SOURCE	US-EPA-RULE-E9-5711	
CO2 FUEL SOURCE	NATURAL GAS	
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07	KG/CAL
THERMAL EFFICIENCY	0.8500	
HEATING VALUE	600.0000	KJ/KG
PRICE	1.7794-08	\$/CAL
INDEX TYPE	FUEL	

RESULT:

HEATING VALUE	600.0000	KJ/KG
INDEXED PRICE	1.7794-08	\$/CAL
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07	KG/CAL
TOTAL CO2 EMISSIONS	766.9678	KG/HR

THIS UTILITY IS PURCHASED

USAGE:

BLOCK ID	MODEL	DUTY	USAGE RATE	COST
CO2E EMISSIONS		KW	KG/HR	\$/HR
KG/HR				

E-104	HEATER	1379.6567	8277.9400	
21.1087	326.5790			
E-101	HEATER	1860.4545	1.1163+04	
28.4650	440.3888			

	TOTAL:	3240.1112	1.9441+04	
49.5737	766.9678			
=====				
=====				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 UTILITY SECTION

UTILITY USAGE: U-102 (STEAM)

LOW PRESSURE STEAM, INLET TEMP=125 C, OUTLET TEMP=124 C
 INPUT DATA:

INLET TEMPERATURE	125.0000	C
OUTLET TEMPERATURE	124.0000	C
INLET VAPOR FRACTION	1.0000	
OUTLET VAPOR FRACTION	0.0	
HEAT TRANSFER COEFFICIENT	5159.0714	KCAL/HR-SQM-K
CO2 DATA SOURCE		US-EPA-RULE-E9-5711
CO2 FUEL SOURCE		NATURAL GAS
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07	KG/CAL
THERMAL EFFICIENCY	0.8500	
PRICE	7.9549-09	\$/CAL
INDEX TYPE		FUEL

RESULT:

HEATING VALUE	2191.8790	KJ/KG
INDEXED PRICE	7.9549-09	\$/CAL
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07	KG/CAL
TOTAL CO2 EMISSIONS	1048.8267	KG/HR

THIS UTILITY IS PURCHASED

USAGE:

BLOCK ID	MODEL	DUTY	USAGE RATE	COST
CO2E EMISSIONS		KW	KG/HR	\$/HR
KG/HR				
-----		-----	-----	-----
C-302	RADFRAC	2185.6134	3589.7092	
14.9496	517.3573			
C-303	RADFRAC	2245.2314	3687.6274	
15.3574	531.4695			
-----		-----	-----	-----
	TOTAL:	4430.8447	7277.3365	
30.3070	1048.8267			
=====		=====	=====	
=====		=====	=====	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 UTILITY SECTION

UTILITY USAGE: U-103 (REFRIGERANT)

REFRIGERANT 1, INLET TEMP=-25 C, OUTLET TEMP=-24 C
 INPUT DATA:

INLET TEMPERATURE	-25.0000	C
OUTLET TEMPERATURE	-24.0000	C
HEAT TRANSFER COEFFICIENT	1117.7988	KCAL/HR-SQM-K
CO2 DATA SOURCE		US-EPA-RULE-E9-5711
CO2 FUEL SOURCE		NATURAL GAS
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07	KG/CAL
THERMAL EFFICIENCY	1.0000	
COOLING VALUE	4.0000	KJ/KG
PRICE	1.1472-08	\$/CAL
INDEX TYPE		FUEL

RESULT:

COOLING VALUE	4.0000	KJ/KG
INDEXED PRICE	1.1472-08	\$/CAL
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07	KG/CAL
TOTAL CO2 EMISSIONS	25.8060	KG/HR

THIS UTILITY IS PURCHASED

USAGE:

BLOCK ID	MODEL	DUTY	USAGE RATE	COST
CO2E EMISSIONS		KW	KG/HR	\$/HR
KG/HR				
E-102	HEATER	128.2579	1.1543+05	
1.2651	25.8060			
TOTAL:		128.2579	1.1543+05	
1.2651	25.8060			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
UTILITY SECTION

UTILITY USAGE: U-104 (WATER)

COOLING WATER, INLET TEMP=20 C, OUTLET TEMP=25 C
INPUT DATA:

INLET TEMPERATURE	20.0000	C
OUTLET TEMPERATURE	25.0000	C
INLET PRESSURE	1.0133	BAR
OUTLET PRESSURE	1.0133	BAR
HEAT TRANSFER COEFFICIENT	3224.4196	KCAL/HR-SQM-K
PRICE	8.8760-10	\$/CAL
INDEX TYPE	FUEL	

RESULT:

COOLING VALUE	20.8758	KJ/KG
INDEXED PRICE	8.8760-10	\$/CAL

THIS UTILITY IS PURCHASED

USAGE:

BLOCK ID	MODEL	DUTY KW	USAGE RATE KG/HR	COST \$/HR
-----	-----	-----	-----	-----
E-206	HEATER	467.6149	8.0640+04	
0.3569				
C-302	RADFRAC	1657.9563	2.8591+05	
1.2654				
C-303	RADFRAC	2243.3316	3.8686+05	
1.7121				
		-----	-----	-----
	TOTAL:	4368.9028	7.5341+05	
3.3343		=====	=====	
=====				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 UTILITY SECTION

UTILITY USAGE: U-105 (WATER)

INPUT DATA:

INLET TEMPERATURE	5.0000	C
OUTLET TEMPERATURE	15.0000	C
INLET PRESSURE	1.0133	BAR
OUTLET PRESSURE	1.0133	BAR
VISCOSITY	1.3278	CP
THERMAL CONDUCTIVITY	0.4987	KCAL-M/HR-SQM-K
DENSITY	0.9995	GM/CC
PRICE	5.8150-08	\$/CAL
INDEX TYPE		FUEL

RESULT:

COOLING VALUE	41.8837	KJ/KG
INDEXED PRICE	5.8150-08	\$/CAL

THIS UTILITY IS PURCHASED

USAGE:

BLOCK ID	MODEL	DUTY KW	USAGE RATE KG/HR	COST \$/HR
-----	-----	-----	-----	-----
E-301	HEATER	1991.9554	1.7121+05	
99.5978				
-----		-----	-----	-----
	TOTAL:	1991.9554	1.7121+05	
99.5978				
=====		=====	=====	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 UTILITY SECTION

UTILITY USAGE: U-106 (ELECTRICITY)

ELECTRICAL UTILITY
 INPUT DATA:

CO2 DATA SOURCE	US-EPA-RULE-E9-5711
CO2 FUEL SOURCE	NATURAL GAS
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07 KG/CAL
THERMAL EFFICIENCY	0.5800
PRICE	7.7500-02 \$/KWHR
INDEX TYPE	FUEL

RESULT:

INDEXED PRICE	7.7500-02 \$/KWHR
CO2 EMISSION FACTOR	2.3400-07 KG/CAL
TOTAL CO2 EMISSIONS	0.2604 KG/HR

THIS UTILITY IS PURCHASED

USAGE:

BLOCK ID	MODEL	DUTY	USAGE RATE	COST
CO2E EMISSIONS		KW	KW	\$/HR
KG/HR				
P-101	PUMP	0.7506	0.7506	
5.8172-02		0.2604		
TOTAL:		0.7506	0.7506	
5.8172-02		0.2604		
=====		=====	=====	=====
=====		=====	=====	=====

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1

PROPERTIES ALONG A FLASH CURVE FOR THE MIXTURE: (KMOL/HR)
ISOPR-01 1.000 , WATER 1.000 ,

STATE SPECIFICATIONS:
VAPOR FRACTION: 0.000

VARIED VARIABLE(S): PRES MOLEFRAC

PROPERTY SET(S): \$PS-TXY

3 PHASE PV FLASHES WERE PERFORMED.

PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! TEMP      ! KVL       ! KVL       !
GAMMA      !
!          !          ! TOTAL     ! TOTAL     ! TOTAL     !
LIQUID 1   !
!          ! ISOPR-01  !          ! ISOPR-01  ! WATER     !
ISOPR-01   !
!          !          !          !          !          !
!          !          ! C         !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.0     ! 100.0178 ! 33.4595 ! 1.0000 !
17.4647 !
! 1.0133 ! 2.0000-02 ! 90.5819 ! 15.1466 ! 0.7113 !
10.9960 !
! 1.0133 ! 4.0000-02 ! 87.1756 ! 9.8753 ! 0.6302 !
8.1276 !
! 1.0133 ! 6.0000-02 ! 85.4194 ! 7.3347 ! 0.5957 !
6.4488 !
! 1.0133 ! 8.0000-02 ! 84.3588 ! 5.8370 ! 0.5794 !
5.3433 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.1000 ! 83.6506 ! 4.8503 ! 0.5722 !
4.5622 !
! 1.0133 ! 0.1200 ! 83.1417 ! 4.1521 ! 0.5702 !
3.9828 !
! 1.0133 ! 0.1400 ! 82.7540 ! 3.6328 ! 0.5714 !
3.5372 !
! 1.0133 ! 0.1600 ! 82.4442 ! 3.2318 ! 0.5749 !
3.1848 !
! 1.0133 ! 0.1800 ! 82.1869 ! 2.9134 ! 0.5800 !
2.8998 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.2000 ! 81.9662 ! 2.6546 ! 0.5863 !
2.6650 !
! 1.0133 ! 0.2200 ! 81.7718 ! 2.4405 ! 0.5937 !
2.4687 !
! 1.0133 ! 0.2400 ! 81.5970 ! 2.2605 ! 0.6019 !
2.3023 !

```

!	1.0133	!	0.2600	!	81.4372	!	2.1073	!	0.6109	!	
2.1597	!	1.0133	!	0.2800	!	81.2892	!	1.9755	!	0.6206	!
2.0363	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.3000	!	81.1507	!	1.8610	!	0.6310	!
1.9288	!	1.0133	!	0.3200	!	81.0202	!	1.7608	!	0.6420	!
1.8342	!	1.0133	!	0.3400	!	80.8964	!	1.6724	!	0.6536	!
1.7506	!	1.0133	!	0.3600	!	80.7787	!	1.5940	!	0.6659	!
1.6763	!	1.0133	!	0.3800	!	80.6666	!	1.5242	!	0.6787	!
1.6099	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.4000	!	80.5596	!	1.4616	!	0.6923	!
1.5503	!	1.0133	!	0.4200	!	80.4576	!	1.4053	!	0.7065	!
1.4966	!	1.0133	!	0.4400	!	80.3606	!	1.3545	!	0.7215	!
1.4480	!	1.0133	!	0.4600	!	80.2685	!	1.3086	!	0.7371	!
1.4040	!	1.0133	!	0.4800	!	80.1814	!	1.2670	!	0.7536	!
1.3640	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.5000	!	80.0997	!	1.2291	!	0.7709	!
1.3276	!	1.0133	!	0.5200	!	80.0234	!	1.1947	!	0.7890	!
1.2943	!	1.0133	!	0.5400	!	79.9530	!	1.1634	!	0.8081	!
1.2639	!	1.0133	!	0.5600	!	79.8888	!	1.1350	!	0.8282	!
1.2361	!	1.0133	!	0.5800	!	79.8312	!	1.1091	!	0.8494	!
1.2106	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.6000	!	79.7808	!	1.0855	!	0.8717	!
1.1873	!	1.0133	!	0.6200	!	79.7382	!	1.0642	!	0.8953	!
1.1659	!	1.0133	!	0.6400	!	79.7039	!	1.0449	!	0.9201	!
1.1463	!	1.0133	!	0.6600	!	79.6789	!	1.0276	!	0.9465	!
1.1284	!	1.0133	!	0.6800	!	79.6637	!	1.0121	!	0.9744	!
1.1120	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!											

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! TEMP      ! KVL       ! KVL       !
GAMMA      !
!           !           ! TOTAL     ! TOTAL     ! TOTAL     !
LIQUID 1   !
! ISOPR-01  !           ! ISOPR-01  ! WATER     !
ISOPR-01   !
!           !           !           !           !           !
! BAR       ! C         !           !           !           !
!           !           !           !           !           !
!           !           !           !           !           !
!=====!=====!=====!=====!=====!=====
=====!
! 1.0133 ! 0.7000 ! 79.6595 ! 0.9983 ! 1.0040 !
1.0970 !
! 1.0133 ! 0.7200 ! 79.6672 ! 0.9862 ! 1.0355 !
1.0834 !
! 1.0133 ! 0.7400 ! 79.6880 ! 0.9758 ! 1.0690 !
1.0710 !
! 1.0133 ! 0.7600 ! 79.7231 ! 0.9669 ! 1.1048 !
1.0598 !
! 1.0133 ! 0.7800 ! 79.7740 ! 0.9597 ! 1.1430 !
1.0497 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.8000 ! 79.8424 ! 0.9540 ! 1.1839 !
1.0407 !
! 1.0133 ! 0.8200 ! 79.9300 ! 0.9500 ! 1.2279 !
1.0326 !
! 1.0133 ! 0.8400 ! 80.0390 ! 0.9476 ! 1.2752 !
1.0256 !
! 1.0133 ! 0.8600 ! 80.1717 ! 0.9469 ! 1.3263 !
1.0194 !
! 1.0133 ! 0.8800 ! 80.3307 ! 0.9480 ! 1.3816 !
1.0142 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.9000 ! 80.5193 ! 0.9509 ! 1.4416 !
1.0098 !
! 1.0133 ! 0.9200 ! 80.7408 ! 0.9559 ! 1.5070 !
1.0062 !
! 1.0133 ! 0.9400 ! 80.9993 ! 0.9631 ! 1.5784 !
1.0035 !

```

```

!      1.0133 !      0.9600 !      81.2996 !      0.9726 !      1.6569 !
1.0015 !
!      1.0133 !      0.9800 !      81.6471 !      0.9848 !      1.7433 !
1.0004 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      1.0000 !      82.0483 !      1.0000 !      1.8391 !
1.0000 !
-----
-----
-----

```

```

! PRES      ! MOLEFRAC  ! GAMMA     ! GAMMA     ! GAMMA     ! KVL2
!
!           !           ! LIQUID 1  ! LIQUID 2  ! LIQUID 2  !
TOTAL      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER     ! ISOPR-01  ! WATER     !
ISOPR-01   !
!           !           !           !           !           !
!
! BAR       !           !           !           !           !
!
!           !           !           !           !           !
!

```

```

!=====!=====!=====!=====!=====!=====
=====!

```

```

!      1.0133 !      0.0      !      1.0000 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      2.0000-02 !      1.0037 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      4.0000-02 !      1.0123 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      6.0000-02 !      1.0241 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      8.0000-02 !      1.0383 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!

```

```

!      1.0133 !      0.1000 !      1.0543 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1200 !      1.0719 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1400 !      1.0908 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1600 !      1.1110 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1800 !      1.1324 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
-----
-----

```


ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! GAMMA      ! GAMMA      ! GAMMA      ! KVL2
!
!           !           ! LIQUID 1   ! LIQUID 2   ! LIQUID 2   !
TOTAL      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER      ! ISOPR-01   ! WATER      !
ISOPR-01  !
!           !           !           !           !           !
! BAR       !           !           !           !           !
!
!           !           !           !           !           !
!
!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.2000 ! 1.1549 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2200 ! 1.1785 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2400 ! 1.2033 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2600 ! 1.2291 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2800 ! 1.2560 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.3000 ! 1.2840 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3200 ! 1.3133 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3400 ! 1.3437 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3600 ! 1.3754 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3800 ! 1.4084 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.4000 ! 1.4427 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.4200 ! 1.4784 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.4400 ! 1.5156 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !

```

!	1.0133	!	0.4600	!	1.5543	!	MISSING	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4800	!	1.5946	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.5000	!	1.6366	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5200	!	1.6803	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5400	!	1.7259	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5600	!	1.7735	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5800	!	1.8231	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.6000	!	1.8749	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6200	!	1.9289	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6400	!	1.9853	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6600	!	2.0443	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6800	!	2.1060	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.7000	!	2.1704	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7200	!	2.2379	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7400	!	2.3086	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7600	!	2.3826	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7800	!	2.4601	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.8000	!	2.5414	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8200	!	2.6267	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8400	!	2.7162	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8600	!	2.8103	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8800	!	2.9090	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	-----								

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! GAMMA      ! GAMMA      ! GAMMA      ! KVL2
!
!           !           ! LIQUID 1   ! LIQUID 2   ! LIQUID 2   !
TOTAL      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER      ! ISOPR-01   ! WATER      !
ISOPR-01   !
!           !           !           !           !           !
! BAR       !           !           !           !           !
!
!           !           !           !           !           !
!
!

```

```

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.9000 ! 3.0129 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9200 ! 3.1221 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9400 ! 3.2369 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9600 ! 3.3578 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9800 ! 3.4851 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 1.0000 ! 3.6191 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
-----
-----

```

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! KVL2      ! BETA      ! MOLEFRAC  !
MOLEFRAC   !
!           !           ! TOTAL     ! TOTAL     ! VAPOR      !
VAPOR      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER     !           ! ISOPR-01   !
WATER      !
!           !           !           !           !           !
! BAR       !           !           !           !           !
!
!

```

```

!           !           !           !           !           !
!
!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
!      1.0133 !      0.0      !      MISSING !      1.0000 !      0.0      !
1.0000 !
!      1.0133 !      2.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.3029 !
0.6971 !
!      1.0133 !      4.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.3950 !
0.6050 !
!      1.0133 !      6.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.4401 !
0.5599 !
!      1.0133 !      8.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.4670 !
0.5330 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      0.1000 !      MISSING !      1.0000 !      0.4850 !
0.5150 !
!      1.0133 !      0.1200 !      MISSING !      1.0000 !      0.4983 !
0.5017 !
!      1.0133 !      0.1400 !      MISSING !      1.0000 !      0.5086 !
0.4914 !
!      1.0133 !      0.1600 !      MISSING !      1.0000 !      0.5171 !
0.4829 !
!      1.0133 !      0.1800 !      MISSING !      1.0000 !      0.5244 !
0.4756 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      0.2000 !      MISSING !      1.0000 !      0.5309 !
0.4691 !
!      1.0133 !      0.2200 !      MISSING !      1.0000 !      0.5369 !
0.4631 !
!      1.0133 !      0.2400 !      MISSING !      1.0000 !      0.5425 !
0.4575 !
!      1.0133 !      0.2600 !      MISSING !      1.0000 !      0.5479 !
0.4521 !
!      1.0133 !      0.2800 !      MISSING !      1.0000 !      0.5531 !
0.4469 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      0.3000 !      MISSING !      1.0000 !      0.5583 !
0.4417 !
!      1.0133 !      0.3200 !      MISSING !      1.0000 !      0.5635 !
0.4365 !
!      1.0133 !      0.3400 !      MISSING !      1.0000 !      0.5686 !
0.4314 !
!      1.0133 !      0.3600 !      MISSING !      1.0000 !      0.5739 !
0.4261 !
!      1.0133 !      0.3800 !      MISSING !      1.0000 !      0.5792 !
0.4208 !
-----
-----

```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! KVL2      ! BETA      ! MOLEFRAC  !
MOLEFRAC  !
!          !          ! TOTAL     ! TOTAL     ! VAPOR      !
VAPOR     !
!          ! ISOPR-01  ! WATER     !          ! ISOPR-01  !
WATER     !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
! BAR      !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.4000 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.5846 !
0.4154 !
! 1.0133 ! 0.4200 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.5902 !
0.4098 !
! 1.0133 ! 0.4400 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.5960 !
0.4040 !
! 1.0133 ! 0.4600 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6020 !
0.3980 !
! 1.0133 ! 0.4800 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6081 !
0.3919 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.5000 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6146 !
0.3854 !
! 1.0133 ! 0.5200 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6213 !
0.3787 !
! 1.0133 ! 0.5400 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6283 !
0.3717 !
! 1.0133 ! 0.5600 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6356 !
0.3644 !
! 1.0133 ! 0.5800 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6433 !
0.3567 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.6000 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6513 !
0.3487 !
! 1.0133 ! 0.6200 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6598 !
0.3402 !
! 1.0133 ! 0.6400 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6687 !
0.3313 !

```

!	1.0133 !	0.6600 !	MISSING !	1.0000 !	0.6782 !
0.3218 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.6800 !	MISSING !	1.0000 !	0.6882 !
0.3118 !	!	!	!	!	!
!-----+	-----+	-----+	-----+	-----+	-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7000 !	MISSING !	1.0000 !	0.6988 !
0.3012 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7200 !	MISSING !	1.0000 !	0.7101 !
0.2899 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7400 !	MISSING !	1.0000 !	0.7221 !
0.2779 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7600 !	MISSING !	1.0000 !	0.7349 !
0.2651 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7800 !	MISSING !	1.0000 !	0.7485 !
0.2515 !	!	!	!	!	!
!-----+	-----+	-----+	-----+	-----+	-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8000 !	MISSING !	1.0000 !	0.7632 !
0.2368 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8200 !	MISSING !	1.0000 !	0.7790 !
0.2210 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8400 !	MISSING !	1.0000 !	0.7960 !
0.2040 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8600 !	MISSING !	1.0000 !	0.8143 !
0.1857 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8800 !	MISSING !	1.0000 !	0.8342 !
0.1658 !	!	!	!	!	!
!-----+	-----+	-----+	-----+	-----+	-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9000 !	MISSING !	1.0000 !	0.8558 !
0.1442 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9200 !	MISSING !	1.0000 !	0.8794 !
0.1206 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9400 !	MISSING !	1.0000 !	0.9053 !
9.4707-02 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9600 !	MISSING !	1.0000 !	0.9337 !
6.6275-02 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9800 !	MISSING !	1.0000 !	0.9651 !
3.4867-02 !	!	!	!	!	!
!-----+	-----+	-----+	-----+	-----+	-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	1.0000 !	MISSING !	1.0000 !	1.0000 !
0.0 !	!	!	!	!	!
-----+	-----+	-----+	-----+	-----+	-----+
-----!	!	!	!	!	!

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! MOLEFRAC  ! MOLEFRAC  ! MOLEFRAC  !
MOLEFRAC  !
!          !          ! LIQUID 1  ! LIQUID 1  ! LIQUID 2  !
LIQUID 2  !
! ISOPR-01 ! ISOPR-01  ! WATER    ! ISOPR-01  !
WATER     !
!          !          !          !          !
! BAR      !          !          !          !
!          !          !          !          !
!          !          !          !          !
!          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.0    ! 0.0    ! 1.0000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 2.0000-02 ! 2.0000-02 ! 0.9800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 4.0000-02 ! 4.0000-02 ! 0.9600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 6.0000-02 ! 6.0000-02 ! 0.9400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 8.0000-02 ! 8.0000-02 ! 0.9200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.1000 ! 0.1000 ! 0.9000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1200 ! 0.1200 ! 0.8800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1400 ! 0.1400 ! 0.8600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1600 ! 0.1600 ! 0.8400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1800 ! 0.1800 ! 0.8200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.2000 ! 0.2000 ! 0.8000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2200 ! 0.2200 ! 0.7800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2400 ! 0.2400 ! 0.7600 ! MISSING !
MISSING !

```

!	1.0133	!	0.2600	!	0.2600	!	0.7400	!	MISSING	!	
MISSING	!	1.0133	!	0.2800	!	0.2800	!	0.7200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----!									
-----!	!	1.0133	!	0.3000	!	0.3000	!	0.7000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3200	!	0.3200	!	0.6800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3400	!	0.3400	!	0.6600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3600	!	0.3600	!	0.6400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3800	!	0.3800	!	0.6200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----!									
-----!	!	1.0133	!	0.4000	!	0.4000	!	0.6000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4200	!	0.4200	!	0.5800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4400	!	0.4400	!	0.5600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4600	!	0.4600	!	0.5400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4800	!	0.4800	!	0.5200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----!									
-----!	!	1.0133	!	0.5000	!	0.5000	!	0.5000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5200	!	0.5200	!	0.4800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5400	!	0.5400	!	0.4600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5600	!	0.5600	!	0.4400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5800	!	0.5800	!	0.4200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----!									
-----!	!	1.0133	!	0.6000	!	0.6000	!	0.4000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6200	!	0.6200	!	0.3800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6400	!	0.6400	!	0.3600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6600	!	0.6600	!	0.3400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6800	!	0.6800	!	0.3200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----!									
-----!											

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-1 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC !
MOLEFRAC  !
!          ! LIQUID 1 ! LIQUID 1 ! LIQUID 2 !
LIQUID 2  !
! ISOPR-01 ! ISOPR-01 ! WATER    ! ISOPR-01 !
WATER     !
!          !          !          !          !
! BAR      !          !          !          !
!          !          !          !          !
!          !          !          !          !
!          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.7000 ! 0.7000 ! 0.3000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7200 ! 0.7200 ! 0.2800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7400 ! 0.7400 ! 0.2600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7600 ! 0.7600 ! 0.2400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7800 ! 0.7800 ! 0.2200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.8000 ! 0.8000 ! 0.2000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8200 ! 0.8200 ! 0.1800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8400 ! 0.8400 ! 0.1600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8600 ! 0.8600 ! 0.1400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8800 ! 0.8800 ! 0.1200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.9000 ! 0.9000 ! 0.1000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9200 ! 0.9200 ! 8.0000-02 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9400 ! 0.9400 ! 6.0000-02 ! MISSING !
MISSING !

```

! 1.0133 ! 0.9600 ! 0.9600 ! 4.0000-02 ! MISSING !
MISSING !

! 1.0133 ! 0.9800 ! 0.9800 ! 2.0000-02 ! MISSING !
MISSING !

!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!

! 1.0133 ! 1.0000 ! 1.0000 ! 0.0 ! MISSING !
MISSING !

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2

PROPERTIES ALONG A FLASH CURVE FOR THE MIXTURE: (KMOL/HR)
ISOPR-01 1.000 , WATER 1.000 ,

STATE SPECIFICATIONS:
VAPOR FRACTION: 0.000

VARIED VARIABLE(S): PRES MOLEFRAC

PROPERTY SET(S): \$PS-TXY

3 PHASE PV FLASHES WERE PERFORMED.

PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! TEMP      ! KVL       ! KVL       !
GAMMA      !
!          !          ! TOTAL     ! TOTAL     ! TOTAL     !
LIQUID 1   !
!          ! ISOPR-01  !          ! ISOPR-01  ! WATER     !
ISOPR-01   !
!          !          !          !          !          !
!          !          ! C         !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.0    ! 100.0178 ! 33.4595 ! 1.0000 !
17.4647 !
! 1.0133 ! 2.0000-02 ! 90.5819 ! 15.1466 ! 0.7113 !
10.9960 !
! 1.0133 ! 4.0000-02 ! 87.1756 ! 9.8753 ! 0.6302 !
8.1276 !
! 1.0133 ! 6.0000-02 ! 85.4194 ! 7.3347 ! 0.5957 !
6.4488 !
! 1.0133 ! 8.0000-02 ! 84.3588 ! 5.8370 ! 0.5794 !
5.3433 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.1000 ! 83.6506 ! 4.8503 ! 0.5722 !
4.5622 !
! 1.0133 ! 0.1200 ! 83.1417 ! 4.1521 ! 0.5702 !
3.9828 !
! 1.0133 ! 0.1400 ! 82.7540 ! 3.6328 ! 0.5714 !
3.5372 !
! 1.0133 ! 0.1600 ! 82.4442 ! 3.2318 ! 0.5749 !
3.1848 !
! 1.0133 ! 0.1800 ! 82.1869 ! 2.9134 ! 0.5800 !
2.8998 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.2000 ! 81.9662 ! 2.6546 ! 0.5863 !
2.6650 !
! 1.0133 ! 0.2200 ! 81.7718 ! 2.4405 ! 0.5937 !
2.4687 !
! 1.0133 ! 0.2400 ! 81.5970 ! 2.2605 ! 0.6019 !
2.3023 !

```

!	1.0133	!	0.2600	!	81.4372	!	2.1073	!	0.6109	!	
2.1597	!	1.0133	!	0.2800	!	81.2892	!	1.9755	!	0.6206	!
2.0363	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.3000	!	81.1507	!	1.8610	!	0.6310	!
1.9288	!	1.0133	!	0.3200	!	81.0202	!	1.7608	!	0.6420	!
1.8342	!	1.0133	!	0.3400	!	80.8964	!	1.6724	!	0.6536	!
1.7506	!	1.0133	!	0.3600	!	80.7787	!	1.5940	!	0.6659	!
1.6763	!	1.0133	!	0.3800	!	80.6666	!	1.5242	!	0.6787	!
1.6099	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.4000	!	80.5596	!	1.4616	!	0.6923	!
1.5503	!	1.0133	!	0.4200	!	80.4576	!	1.4053	!	0.7065	!
1.4966	!	1.0133	!	0.4400	!	80.3606	!	1.3545	!	0.7215	!
1.4480	!	1.0133	!	0.4600	!	80.2685	!	1.3086	!	0.7371	!
1.4040	!	1.0133	!	0.4800	!	80.1814	!	1.2670	!	0.7536	!
1.3640	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.5000	!	80.0997	!	1.2291	!	0.7709	!
1.3276	!	1.0133	!	0.5200	!	80.0234	!	1.1947	!	0.7890	!
1.2943	!	1.0133	!	0.5400	!	79.9530	!	1.1634	!	0.8081	!
1.2639	!	1.0133	!	0.5600	!	79.8888	!	1.1350	!	0.8282	!
1.2361	!	1.0133	!	0.5800	!	79.8312	!	1.1091	!	0.8494	!
1.2106	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.6000	!	79.7808	!	1.0855	!	0.8717	!
1.1873	!	1.0133	!	0.6200	!	79.7382	!	1.0642	!	0.8953	!
1.1659	!	1.0133	!	0.6400	!	79.7039	!	1.0449	!	0.9201	!
1.1463	!	1.0133	!	0.6600	!	79.6789	!	1.0276	!	0.9465	!
1.1284	!	1.0133	!	0.6800	!	79.6637	!	1.0121	!	0.9744	!
1.1120	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!											

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! TEMP      ! KVL       ! KVL       !
GAMMA      !
!          !          ! TOTAL     ! TOTAL     ! TOTAL     !
LIQUID 1   !
!          ! ISOPR-01  !          ! ISOPR-01  ! WATER     !
ISOPR-01   !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
! BAR       !          ! C         !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.7000 ! 79.6595 ! 0.9983 ! 1.0040 !
1.0970 !
! 1.0133 ! 0.7200 ! 79.6672 ! 0.9862 ! 1.0355 !
1.0834 !
! 1.0133 ! 0.7400 ! 79.6880 ! 0.9758 ! 1.0690 !
1.0710 !
! 1.0133 ! 0.7600 ! 79.7231 ! 0.9669 ! 1.1048 !
1.0598 !
! 1.0133 ! 0.7800 ! 79.7740 ! 0.9597 ! 1.1430 !
1.0497 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.8000 ! 79.8424 ! 0.9540 ! 1.1839 !
1.0407 !
! 1.0133 ! 0.8200 ! 79.9300 ! 0.9500 ! 1.2279 !
1.0326 !
! 1.0133 ! 0.8400 ! 80.0390 ! 0.9476 ! 1.2752 !
1.0256 !
! 1.0133 ! 0.8600 ! 80.1717 ! 0.9469 ! 1.3263 !
1.0194 !
! 1.0133 ! 0.8800 ! 80.3307 ! 0.9480 ! 1.3816 !
1.0142 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.9000 ! 80.5193 ! 0.9509 ! 1.4416 !
1.0098 !
! 1.0133 ! 0.9200 ! 80.7408 ! 0.9559 ! 1.5070 !
1.0062 !
! 1.0133 ! 0.9400 ! 80.9993 ! 0.9631 ! 1.5784 !
1.0035 !

```

```

!      1.0133 !      0.9600 !      81.2996 !      0.9726 !      1.6569 !
1.0015 !
!      1.0133 !      0.9800 !      81.6471 !      0.9848 !      1.7433 !
1.0004 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      1.0000 !      82.0483 !      1.0000 !      1.8391 !
1.0000 !
-----
-----

```

```

-----
-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! GAMMA     ! GAMMA     ! GAMMA     ! KVL2
!
!           !           ! LIQUID 1  ! LIQUID 2  ! LIQUID 2  !
TOTAL      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER     ! ISOPR-01  ! WATER     !
ISOPR-01  !
!           !           !           !           !           !
!
! BAR       !           !           !           !           !
!
!           !           !           !           !           !
!

```

```

!=====!=====!=====!=====!=====!=====
=====!

```

```

!      1.0133 !      0.0      !      1.0000 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      2.0000-02 !      1.0037 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      4.0000-02 !      1.0123 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      6.0000-02 !      1.0241 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      8.0000-02 !      1.0383 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!

```

```

!      1.0133 !      0.1000 !      1.0543 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1200 !      1.0719 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1400 !      1.0908 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1600 !      1.1110 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
!      1.0133 !      0.1800 !      1.1324 !      MISSING !      MISSING !
MISSING !
-----
-----

```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! GAMMA      ! GAMMA      ! GAMMA      ! KVL2
!
!           !           ! LIQUID 1   ! LIQUID 2   ! LIQUID 2   !
TOTAL      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER      ! ISOPR-01   ! WATER      !
ISOPR-01   !
!           !           !           !           !           !
! BAR      !           !           !           !           !
!
!           !           !           !           !           !
!
!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.2000 ! 1.1549 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2200 ! 1.1785 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2400 ! 1.2033 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2600 ! 1.2291 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2800 ! 1.2560 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.3000 ! 1.2840 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3200 ! 1.3133 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3400 ! 1.3437 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3600 ! 1.3754 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.3800 ! 1.4084 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.4000 ! 1.4427 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.4200 ! 1.4784 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.4400 ! 1.5156 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !

```


!	1.0133	!	0.4600	!	1.5543	!	MISSING	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4800	!	1.5946	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.5000	!	1.6366	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5200	!	1.6803	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5400	!	1.7259	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5600	!	1.7735	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.5800	!	1.8231	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.6000	!	1.8749	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6200	!	1.9289	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6400	!	1.9853	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6600	!	2.0443	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.6800	!	2.1060	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.7000	!	2.1704	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7200	!	2.2379	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7400	!	2.3086	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7600	!	2.3826	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.7800	!	2.4601	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----								
-----!	!	1.0133	!	0.8000	!	2.5414	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8200	!	2.6267	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8400	!	2.7162	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8600	!	2.8103	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	1.0133	!	0.8800	!	2.9090	!	MISSING	!	MISSING
MISSING	!	-----								
-----	!	-----								

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! GAMMA      ! GAMMA      ! GAMMA      ! KVL2
!
!           !           ! LIQUID 1   ! LIQUID 2   ! LIQUID 2   !
TOTAL      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER      ! ISOPR-01   ! WATER      !
ISOPR-01   !
!           !           !           !           !           !
! BAR       !           !           !           !           !
!
!           !           !           !           !           !
!
!

```

```

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.9000 ! 3.0129 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9200 ! 3.1221 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9400 ! 3.2369 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9600 ! 3.3578 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9800 ! 3.4851 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 1.0000 ! 3.6191 ! MISSING ! MISSING !
MISSING !
-----
-----

```

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC  ! KVL2      ! BETA      ! MOLEFRAC  !
MOLEFRAC   !
!           !           ! TOTAL     ! TOTAL     ! VAPOR     !
VAPOR      !
!           ! ISOPR-01  ! WATER     !           ! ISOPR-01  !
WATER      !
!           !           !           !           !           !
! BAR       !           !           !           !           !
!
!

```

```

!           !           !           !           !           !
!
!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
!      1.0133 !      0.0      !      MISSING !      1.0000 !      0.0      !
1.0000 !
!      1.0133 !      2.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.3029 !
0.6971 !
!      1.0133 !      4.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.3950 !
0.6050 !
!      1.0133 !      6.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.4401 !
0.5599 !
!      1.0133 !      8.0000-02 !      MISSING !      1.0000 !      0.4670 !
0.5330 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      0.1000 !      MISSING !      1.0000 !      0.4850 !
0.5150 !
!      1.0133 !      0.1200 !      MISSING !      1.0000 !      0.4983 !
0.5017 !
!      1.0133 !      0.1400 !      MISSING !      1.0000 !      0.5086 !
0.4914 !
!      1.0133 !      0.1600 !      MISSING !      1.0000 !      0.5171 !
0.4829 !
!      1.0133 !      0.1800 !      MISSING !      1.0000 !      0.5244 !
0.4756 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      0.2000 !      MISSING !      1.0000 !      0.5309 !
0.4691 !
!      1.0133 !      0.2200 !      MISSING !      1.0000 !      0.5369 !
0.4631 !
!      1.0133 !      0.2400 !      MISSING !      1.0000 !      0.5425 !
0.4575 !
!      1.0133 !      0.2600 !      MISSING !      1.0000 !      0.5479 !
0.4521 !
!      1.0133 !      0.2800 !      MISSING !      1.0000 !      0.5531 !
0.4469 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
!      1.0133 !      0.3000 !      MISSING !      1.0000 !      0.5583 !
0.4417 !
!      1.0133 !      0.3200 !      MISSING !      1.0000 !      0.5635 !
0.4365 !
!      1.0133 !      0.3400 !      MISSING !      1.0000 !      0.5686 !
0.4314 !
!      1.0133 !      0.3600 !      MISSING !      1.0000 !      0.5739 !
0.4261 !
!      1.0133 !      0.3800 !      MISSING !      1.0000 !      0.5792 !
0.4208 !
-----
-----

```

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC ! KVL2      ! BETA      ! MOLEFRAC !
MOLEFRAC   !          ! TOTAL     ! TOTAL     ! VAPOR     !
!          !          !          !          !          !
VAPOR      ! ISOPR-01 ! WATER     !          ! ISOPR-01 !
!          !          !          !          !          !
WATER      !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
! BAR      !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !
!          !          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.4000 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.5846 !
0.4154 !
! 1.0133 ! 0.4200 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.5902 !
0.4098 !
! 1.0133 ! 0.4400 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.5960 !
0.4040 !
! 1.0133 ! 0.4600 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6020 !
0.3980 !
! 1.0133 ! 0.4800 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6081 !
0.3919 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.5000 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6146 !
0.3854 !
! 1.0133 ! 0.5200 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6213 !
0.3787 !
! 1.0133 ! 0.5400 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6283 !
0.3717 !
! 1.0133 ! 0.5600 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6356 !
0.3644 !
! 1.0133 ! 0.5800 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6433 !
0.3567 !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.6000 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6513 !
0.3487 !
! 1.0133 ! 0.6200 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6598 !
0.3402 !
! 1.0133 ! 0.6400 ! MISSING ! 1.0000 ! 0.6687 !
0.3313 !

```

!	1.0133 !	0.6600 !	MISSING !	1.0000 !	0.6782 !
0.3218 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.6800 !	MISSING !	1.0000 !	0.6882 !
0.3118 !	!	!	!	!	!
!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7000 !	MISSING !	1.0000 !	0.6988 !
0.3012 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7200 !	MISSING !	1.0000 !	0.7101 !
0.2899 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7400 !	MISSING !	1.0000 !	0.7221 !
0.2779 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7600 !	MISSING !	1.0000 !	0.7349 !
0.2651 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.7800 !	MISSING !	1.0000 !	0.7485 !
0.2515 !	!	!	!	!	!
!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8000 !	MISSING !	1.0000 !	0.7632 !
0.2368 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8200 !	MISSING !	1.0000 !	0.7790 !
0.2210 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8400 !	MISSING !	1.0000 !	0.7960 !
0.2040 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8600 !	MISSING !	1.0000 !	0.8143 !
0.1857 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.8800 !	MISSING !	1.0000 !	0.8342 !
0.1658 !	!	!	!	!	!
!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9000 !	MISSING !	1.0000 !	0.8558 !
0.1442 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9200 !	MISSING !	1.0000 !	0.8794 !
0.1206 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9400 !	MISSING !	1.0000 !	0.9053 !
9.4707-02 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9600 !	MISSING !	1.0000 !	0.9337 !
6.6275-02 !	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	0.9800 !	MISSING !	1.0000 !	0.9651 !
3.4867-02 !	!	!	!	!	!
!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+	!-----+
-----!	!	!	!	!	!
!	1.0133 !	1.0000 !	MISSING !	1.0000 !	1.0000 !
0.0 !	!	!	!	!	!
-----+	-----+	-----+	-----+	-----+	-----+
-----!	-----!	-----!	-----!	-----!	-----!

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2 (CONTINUED)

```

-----
! PRES      ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC !
MOLEFRAC !
!          ! LIQUID 1 ! LIQUID 1 ! LIQUID 2 !
LIQUID 2 !
! ISOPR-01 ! ISOPR-01 ! WATER    ! ISOPR-01 !
WATER    !
!          !          !          !          !
! BAR      !          !          !          !
!          !          !          !          !
!          !          !          !          !
!          !          !          !          !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.0    ! 0.0    ! 1.0000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 2.0000-02 ! 2.0000-02 ! 0.9800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 4.0000-02 ! 4.0000-02 ! 0.9600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 6.0000-02 ! 6.0000-02 ! 0.9400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 8.0000-02 ! 8.0000-02 ! 0.9200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.1000 ! 0.1000 ! 0.9000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1200 ! 0.1200 ! 0.8800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1400 ! 0.1400 ! 0.8600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1600 ! 0.1600 ! 0.8400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.1800 ! 0.1800 ! 0.8200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.2000 ! 0.2000 ! 0.8000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2200 ! 0.2200 ! 0.7800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.2400 ! 0.2400 ! 0.7600 ! MISSING !
MISSING !

```

!	1.0133	!	0.2600	!	0.2600	!	0.7400	!	MISSING	!	
MISSING	!	1.0133	!	0.2800	!	0.2800	!	0.7200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.3000	!	0.3000	!	0.7000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3200	!	0.3200	!	0.6800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3400	!	0.3400	!	0.6600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3600	!	0.3600	!	0.6400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.3800	!	0.3800	!	0.6200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.4000	!	0.4000	!	0.6000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4200	!	0.4200	!	0.5800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4400	!	0.4400	!	0.5600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4600	!	0.4600	!	0.5400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.4800	!	0.4800	!	0.5200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.5000	!	0.5000	!	0.5000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5200	!	0.5200	!	0.4800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5400	!	0.5400	!	0.4600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5600	!	0.5600	!	0.4400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.5800	!	0.5800	!	0.4200	!	MISSING	!
MISSING	!	!-----+-----+-----+-----+-----+-----									
-----!	!	1.0133	!	0.6000	!	0.6000	!	0.4000	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6200	!	0.6200	!	0.3800	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6400	!	0.6400	!	0.3600	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6600	!	0.6600	!	0.3400	!	MISSING	!
MISSING	!	1.0133	!	0.6800	!	0.6800	!	0.3200	!	MISSING	!
MISSING	!	-----									

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PHYSICAL PROPERTY TABLES SECTION

FLASH CURVE TABLE: BINRY-2 (CONTINUED)

```

-----
! PRES          ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC ! MOLEFRAC !
MOLEFRAC !
!              ! LIQUID 1 ! LIQUID 1 ! LIQUID 2 !
LIQUID 2 !
! ISOPR-01     ! ISOPR-01 ! WATER    ! ISOPR-01 !
WATER     !
!              !              !              !              !
! BAR          !              !              !              !
!              !              !              !              !
!              !              !              !              !
!              !              !              !              !

!===== !===== !===== !===== !===== !=====
=====!
! 1.0133 ! 0.7000 ! 0.7000 ! 0.3000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7200 ! 0.7200 ! 0.2800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7400 ! 0.7400 ! 0.2600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7600 ! 0.7600 ! 0.2400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.7800 ! 0.7800 ! 0.2200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.8000 ! 0.8000 ! 0.2000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8200 ! 0.8200 ! 0.1800 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8400 ! 0.8400 ! 0.1600 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8600 ! 0.8600 ! 0.1400 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.8800 ! 0.8800 ! 0.1200 ! MISSING !
MISSING !
!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!
! 1.0133 ! 0.9000 ! 0.9000 ! 0.1000 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9200 ! 0.9200 ! 8.0000-02 ! MISSING !
MISSING !
! 1.0133 ! 0.9400 ! 0.9400 ! 6.0000-02 ! MISSING !
MISSING !

```


! 1.0133 ! 0.9600 ! 0.9600 ! 4.0000-02 ! MISSING !
MISSING !

! 1.0133 ! 0.9800 ! 0.9800 ! 2.0000-02 ! MISSING !
MISSING !

!-----+-----+-----+-----+-----+-----
-----!

! 1.0133 ! 1.0000 ! 1.0000 ! 0.0 ! MISSING !
MISSING !

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 FLOWSHEET SECTION (HIERARCHY: R-201)

FLOWSHEET CONNECTIVITY BY STREAMS

FLOWSHEET SECTION GLOBAL

STREAM	SOURCE	DEST	STREAM	SOURCE	DEST
11	\$C-1	SUB1-101	MS-IN	----	SR-201
11EQ	----	S1-101EQ	12	SUB1-101	SR-201
PRODUCTS	SUB2-101	\$C-2	13	SR-201	SUB2-101
MS-OUT	SR-201	E-104	13EQ	SR-101EQ	S2-101EQ
12EQ	S1-101EQ	SR-101EQ	PRODEQ	S2-101EQ	----
MS	E-104	----			

FLOWSHEET CONNECTIVITY BY BLOCKS

FLOWSHEET SECTION GLOBAL

BLOCK	INLETS	OUTLETS
SUB1-101	11	12
SUB2-101	13	PRODUCTS
SR-201	12 MS-IN	13 MS-OUT
SR-101EQ	12EQ	13EQ
S1-101EQ	11EQ	12EQ
S2-101EQ	13EQ	PRODEQ
E-104	MS-OUT	MS

FLOWSHEET SECTION BALANCE: GLOBAL

DIFF.	*** MASS AND ENERGY BALANCE ***			GENERATION	RELATIVE
	IN	OUT			
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)				
0.00000	HYDROGEN	0.662731E-23	115.496	115.496	
0.00000	PROPY-01	0.00000	1.59650	1.59650	
0.00000	ACETO-01	0.115030	115.507	115.392	
0.00000	DIISO-01	0.165374E-08	0.212867	0.212867	
0.441238E-16	ISOPR-01	118.259	0.740678	-117.519	-
0.00000	WATER	54.1184	55.9278	1.80937	
0.00000	DIACE-01	0.00000	0.520251E-01	0.520251E-01	
0.00000	SODIU-01	23.0959	23.0959	0.00000	

POTAS-01	124.375	124.375	0.00000
0.00000			
SODIU-02	201.635	201.635	0.00000
0.00000			
TOTAL BALANCE			
MOLE (KMOL/HR)	521.599	638.640	117.041
0.00000			
MASS (KG/HR)	36538.2	36538.2	
0.796531E-15			
ENTHALPY (KW)	-1591.15	1194.36	-
1.75063			

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	326.579	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	326.579	KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: E-104 MODEL: HEATER

 INLET STREAM: MS-OUT
 OUTLET STREAM: MS
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

*** MASS AND ENERGY BALANCE ***

DIFF.		IN	OUT	RELATIVE
	CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)			
	HYDROGEN	0.00000	0.00000	0.00000
	PROPY-01	0.00000	0.00000	0.00000
	ACETO-01	0.00000	0.00000	0.00000
	DIISO-01	0.00000	0.00000	0.00000
	ISOPR-01	0.00000	0.00000	0.00000
	WATER	0.00000	0.00000	0.00000
	DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000
	SODIU-01	23.0959	23.0959	0.00000
	POTAS-01	124.375	124.375	0.00000
	SODIU-02	201.635	201.635	0.00000
	TOTAL BALANCE			
	MOLE (KMOL/HR)	349.107	349.107	0.00000
	MASS (KG/HR)	28449.7	28449.7	0.00000
	ENTHALPY (KW)	8096.93	9476.58	-0.145586

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	326.579	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	326.579	KG/HR

*** INPUT DATA ***

TWO PHASE TP FLASH		
SPECIFIED TEMPERATURE	C	525.000
PRESSURE DROP	BAR	0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS		30
CONVERGENCE TOLERANCE		
0.000100000		

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	525.00
OUTLET PRESSURE	BAR	3.0000
HEAT DUTY	KW	1379.7
OUTLET VAPOR FRACTION		0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: E-104 MODEL: HEATER (CONTINUED)

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
SODIU-01 0.54068E-79	0.66157E-01	0.66157E-01	0.66157E-01	
POTAS-01 0.63640E-79	0.35627	0.35627	0.35627	
SODIU-02 0.51966E-79	0.57758	0.57758	0.57758	

*** ASSOCIATED UTILITIES ***

UTILITY ID FOR GENERAL	U-101
RATE OF CONSUMPTION	8277.9400 KG/HR
COST	21.1087 \$/HR
CO2 EQUIVALENT EMISSIONS	326.5790 KG/HR

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: S1-101EQ MODEL: RSTOIC

 INLET STREAM: 11EQ
 OUTLET STREAM: 12EQ
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

	*** MASS AND ENERGY BALANCE ***		***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)				
0.00000 HYDROGEN	0.331365E-23	0.00000	0.00000	
0.00000 PROPY-01	0.00000	0.798250	0.798250	
0.00000 ACETO-01	0.575152E-01	0.575152E-01	0.00000	
0.00000 DIISO-01	0.826872E-09	0.106433	0.106433	
0.00000 ISOPR-01	59.1296	58.1185	-1.01112	
0.00000 WATER	27.0592	27.9639	0.904683	
0.00000 DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000	
TOTAL BALANCE				
0.00000 MOLE (KMOL/HR)	86.2463	87.0446	0.798250	
0.224885E-15 MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27		
0.798265E-01 ENTHALPY (KW)	-5546.86	-5104.08		-

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***
 STOICHIOMETRY MATRIX:

REACTION # 1:
SUBSTREAM MIXED :
PROPY-01 1.00 ISOPR-01 -1.00 WATER 1.00

REACTION # 2:
SUBSTREAM MIXED :
DIISO-01 1.00 ISOPR-01 -2.00 WATER 1.00

REACTION CONVERSION SPECS: NUMBER= 2

REACTION # 1:
SUBSTREAM:MIXED KEY COMP:ISOPR-01 CONV FRAC: 0.1350E-01

REACTION # 2:
SUBSTREAM:MIXED KEY COMP:ISOPR-01 CONV FRAC: 0.3600E-02

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: S1-101EQ MODEL: RSTOIC (CONTINUED)

TWO PHASE PQ FLASH
 PRESSURE DROP BAR 0.0
 SPECIFIED HEAT DUTY KW 0.0
 MAXIMUM NO. ITERATIONS 30
 CONVERGENCE TOLERANCE 0.000100000
 SIMULTANEOUS REACTIONS
 GENERATE COMBUSTION REACTIONS FOR FEED SPECIES NO

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE C 346.13
 OUTLET PRESSURE BAR 1.0132
 VAPOR FRACTION 1.0000

REACTION EXTENTS:

REACTION NUMBER	REACTION EXTENT KMOL/HR
1	0.79825
2	0.10643

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
63226. PROPY-01	0.91706E-02	0.26372E-04	0.91706E-02	
45.954 ACETO-01	0.66076E-03	0.14581E-03	0.66076E-03	
50.817 DIISO-01	0.12227E-02	0.23214E-03	0.12227E-02	
41.869 ISOPR-01	0.66769	0.64254	0.66769	
297.68 WATER	0.32126	0.35706	0.32126	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: S2-101EQ MODEL: RSTOIC

INLET STREAM: 13EQ
OUTLET STREAM: PRODEQ
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

	*** MASS AND ENERGY BALANCE ***		***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)				
0.00000 HYDROGEN	57.7542	57.7542	0.00000	
0.00000 PROPY-01	0.798250	0.798250	0.00000	
0.122906E-15 ACETO-01	57.8117	57.7597	-0.520305E-01	-
0.00000 DIISO-01	0.106433	0.106433	0.00000	
0.00000 ISOPR-01	0.364327	0.364327	0.00000	
0.00000 WATER	27.9639	27.9639	0.00000	
0.00000 DIACE-01	0.00000	0.260153E-01	0.260153E-01	
0.00000 SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000	
TOTAL BALANCE				
0.00000 MOLE (KMOL/HR)	144.799	144.773	-0.260153E-01	
0.00000 MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27		
0.219631E-15 ENTHALPY (KW)	-4141.01	-4141.01		-

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***
STOICHIOMETRY MATRIX:

REACTION # 1:
SUBSTREAM MIXED :
ACETO-01 -2.00 DIACE-01 1.00

REACTION CONVERSION SPECS: NUMBER= 1
REACTION # 1:
SUBSTREAM:MIXED KEY COMP:ACETO-01 CONV FRAC: 0.9000E-03

TWO PHASE PQ FLASH
PRESSURE DROP BAR 0.0
SPECIFIED HEAT DUTY KW 0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS 30
CONVERGENCE TOLERANCE 0.000100000
SIMULTANEOUS REACTIONS
GENERATE COMBUSTION REACTIONS FOR FEED SPECIES NO

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: S2-101EQ MODEL: RSTOIC (CONTINUED)

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	496.52
OUTLET PRESSURE	BAR	1.1965
VAPOR FRACTION		1.0000

REACTION EXTENTS:

REACTION NUMBER	REACTION EXTENT KMOL/HR
1	0.26015E-01

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F(I)	X(I)	Y(I)	K(I)
HYDROGEN	0.39893	0.19099E-04	0.39893	
151.41				
PROPY-01	0.55138E-02	0.27333E-05	0.55138E-02	
5934.0				
ACETO-01	0.39897	0.10818	0.39897	
68.616				
DIISO-01	0.73518E-03	0.24027E-04	0.73518E-03	
56.073				
ISOPR-01	0.25165E-02	0.12932E-02	0.25165E-02	
70.781				
WATER	0.19316	0.88245	0.19316	
396.74				
DIACE-01	0.17970E-03	0.80284E-02	0.17970E-03	
20.033				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG

INLET STREAM: 12EQ
OUTLET STREAM: 13EQ
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

	*** MASS AND ENERGY BALANCE ***		***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)				
0.00000 HYDROGEN	0.00000	57.7542	57.7542	
0.00000 PROPY-01	0.798250	0.798250	0.00000	
0.122906E-15 ACETO-01	0.575152E-01	57.8117	57.7542	
0.00000 DIISO-01	0.106433	0.106433	0.00000	
0.525326E-16 ISOPR-01	58.1185	0.364327	-57.7542	
0.00000 WATER	27.9639	27.9639	0.00000	
0.00000 DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000	
TOTAL BALANCE				
0.196284E-15 MOLE (KMOL/HR)	87.0446	144.799	57.7542	
0.179683E-12 MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27		
0.188685 ENTHALPY (KW)	-5104.08	-4141.01		-

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG (CONTINUED)
STOICHIOMETRY:

REACTION NUMBER: 1
SUBSTREAM: MIXED
HYDROGEN 1.0000 ACETO-01 1.0000 ISOPR-01 -
1.0000

REACTION NUMBER: 2
SUBSTREAM: MIXED
HYDROGEN -1.0000 ACETO-01 -1.0000 ISOPR-01
1.0000

REAC-DATA ENTRIES:

REACTION NO	TYPE	PHASE	DELT C	BASIS
1	KINETIC	V	0.0000	MOLARITY
2	KINETIC	V	0.0000	MOLARITY

*** RESULTS ***

REACTOR DUTY	KW	963.06
RESIDENCE TIME	HR	0.70458E-03
REACTOR MINIMUM TEMPERATURE	C	496.46
REACTOR MAXIMUM TEMPERATURE	C	496.46

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** RESULTS PROFILE (PROCESS STREAM) ***

	LENGTH METER	PRESSURE BAR	TEMPERATURE C	VAPOR FRAC	RES-TIME HR
	0.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.0000
05	0.10000	1.1965	496.46	1.0000	0.39210E-
05	0.20000	1.1965	496.46	1.0000	0.74505E-
04	0.30000	1.1965	496.46	1.0000	0.10972E-
04	0.40000	1.1965	496.46	1.0000	0.14492E-
04	0.50000	1.1965	496.46	1.0000	0.18013E-
04	0.60000	1.1965	496.46	1.0000	0.21534E-
04	0.70000	1.1965	496.46	1.0000	0.25055E-
04	0.80000	1.1965	496.46	1.0000	0.28576E-
04	0.90000	1.1965	496.46	1.0000	0.32097E-
04	1.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.35618E-
04	1.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.39138E-
04	1.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.42659E-
04	1.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.46180E-
04	1.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.49701E-
04	1.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.53222E-
04	1.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.56743E-
04	1.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.60264E-
04	1.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.63784E-
04	1.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.67305E-
04	2.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.70826E-

04	2.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.74347E-
04	2.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.77868E-
04	2.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.81389E-
04	2.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.84910E-
04	2.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.88430E-
04	2.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.91951E-
04	2.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.95472E-
04	2.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.98993E-
04	2.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.10251E-
03	3.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.10603E-
03	3.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.10956E-
03	3.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.11308E-
03	3.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.11660E-
03	3.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.12012E-
03	3.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.12364E-
03	3.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.12716E-
03	3.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.13068E-
03	3.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.13420E-
03	3.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.13772E-
03	4.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.14124E-
03	4.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.14476E-
03	4.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.14828E-
03	4.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.15181E-
03	4.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.15533E-
03	4.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.15885E-
03	4.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.16237E-
03	4.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.16589E-

03	4.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.16941E-
03	4.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.17293E-
03	5.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.17645E-
03	5.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.17997E-
03	5.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.18349E-
03	5.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.18701E-
03	5.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.19054E-
03	5.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.19406E-
03	5.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.19758E-
03	5.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.20110E-
03	5.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.20462E-
03	5.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.20814E-
03	6.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.21166E-
03	6.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.21518E-
03	6.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.21870E-
03	6.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.22222E-
03	6.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.22574E-
03	6.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.22926E-
03	6.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.23279E-
03	6.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.23631E-
03	6.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.23983E-
03	6.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.24335E-
03	7.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.24687E-
03	7.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.25039E-
03	7.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.25391E-
03	7.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.25743E-
03	7.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.26095E-

03	7.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.26447E-
03	7.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.26799E-
03	7.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.27151E-
03	7.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.27504E-
03	7.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.27856E-
03	8.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.28208E-
03	8.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.28560E-
03	8.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.28912E-
03	8.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.29264E-
03	8.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.29616E-
03	8.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.29968E-
03	8.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.30320E-
03	8.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.30672E-
03	8.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.31024E-
03	8.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.31376E-
03	9.0000	1.1965	496.46	1.0000	0.31729E-
03	9.1000	1.1965	496.46	1.0000	0.32081E-
03	9.2000	1.1965	496.46	1.0000	0.32433E-
03	9.3000	1.1965	496.46	1.0000	0.32785E-
03	9.4000	1.1965	496.46	1.0000	0.33137E-
03	9.5000	1.1965	496.46	1.0000	0.33489E-
03	9.6000	1.1965	496.46	1.0000	0.33841E-
03	9.7000	1.1965	496.46	1.0000	0.34193E-
03	9.8000	1.1965	496.46	1.0000	0.34545E-
03	9.9000	1.1965	496.46	1.0000	0.34897E-
03	10.000	1.1965	496.46	1.0000	0.35249E-
03	10.100	1.1965	496.46	1.0000	0.35602E-

03	10.200	1.1965	496.46	1.0000	0.35954E-
03	10.300	1.1965	496.46	1.0000	0.36306E-
03	10.400	1.1965	496.46	1.0000	0.36658E-
03	10.500	1.1965	496.46	1.0000	0.37010E-
03	10.600	1.1965	496.46	1.0000	0.37362E-
03	10.700	1.1965	496.46	1.0000	0.37714E-
03	10.800	1.1965	496.46	1.0000	0.38066E-
03	10.900	1.1965	496.46	1.0000	0.38418E-
03	11.000	1.1965	496.46	1.0000	0.38770E-
03	11.100	1.1965	496.46	1.0000	0.39122E-
03	11.200	1.1965	496.46	1.0000	0.39474E-
03	11.300	1.1965	496.46	1.0000	0.39827E-
03	11.400	1.1965	496.46	1.0000	0.40179E-
03	11.500	1.1965	496.46	1.0000	0.40531E-
03	11.600	1.1965	496.46	1.0000	0.40883E-
03	11.700	1.1965	496.46	1.0000	0.41235E-
03	11.800	1.1965	496.46	1.0000	0.41587E-
03	11.900	1.1965	496.46	1.0000	0.41939E-
03	12.000	1.1965	496.46	1.0000	0.42291E-
03	12.100	1.1965	496.46	1.0000	0.42643E-
03	12.200	1.1965	496.46	1.0000	0.42995E-
03	12.300	1.1965	496.46	1.0000	0.43347E-
03	12.400	1.1965	496.46	1.0000	0.43699E-
03	12.500	1.1965	496.46	1.0000	0.44052E-
03	12.600	1.1965	496.46	1.0000	0.44404E-
03	12.700	1.1965	496.46	1.0000	0.44756E-
03	12.800	1.1965	496.46	1.0000	0.45108E-

03	12.900	1.1965	496.46	1.0000	0.45460E-
03	13.000	1.1965	496.46	1.0000	0.45812E-
03	13.100	1.1965	496.46	1.0000	0.46164E-
03	13.200	1.1965	496.46	1.0000	0.46516E-
03	13.300	1.1965	496.46	1.0000	0.46868E-
03	13.400	1.1965	496.46	1.0000	0.47220E-
03	13.500	1.1965	496.46	1.0000	0.47572E-
03	13.600	1.1965	496.46	1.0000	0.47925E-
03	13.700	1.1965	496.46	1.0000	0.48277E-
03	13.800	1.1965	496.46	1.0000	0.48629E-
03	13.900	1.1965	496.46	1.0000	0.48981E-
03	14.000	1.1965	496.46	1.0000	0.49333E-
03	14.100	1.1965	496.46	1.0000	0.49685E-
03	14.200	1.1965	496.46	1.0000	0.50037E-
03	14.300	1.1965	496.46	1.0000	0.50389E-
03	14.400	1.1965	496.46	1.0000	0.50741E-
03	14.500	1.1965	496.46	1.0000	0.51093E-
03	14.600	1.1965	496.46	1.0000	0.51445E-
03	14.700	1.1965	496.46	1.0000	0.51797E-
03	14.800	1.1965	496.46	1.0000	0.52150E-
03	14.900	1.1965	496.46	1.0000	0.52502E-
03	15.000	1.1965	496.46	1.0000	0.52854E-
03	15.100	1.1965	496.46	1.0000	0.53206E-
03	15.200	1.1965	496.46	1.0000	0.53558E-
03	15.300	1.1965	496.46	1.0000	0.53910E-
03	15.400	1.1965	496.46	1.0000	0.54262E-
03	15.500	1.1965	496.46	1.0000	0.54614E-

03	15.600	1.1965	496.46	1.0000	0.54966E-
03	15.700	1.1965	496.46	1.0000	0.55318E-
03	15.800	1.1965	496.46	1.0000	0.55670E-
03	15.900	1.1965	496.46	1.0000	0.56022E-
03	16.000	1.1965	496.46	1.0000	0.56375E-
03	16.100	1.1965	496.46	1.0000	0.56727E-
03	16.200	1.1965	496.46	1.0000	0.57079E-
03	16.300	1.1965	496.46	1.0000	0.57431E-
03	16.400	1.1965	496.46	1.0000	0.57783E-
03	16.500	1.1965	496.46	1.0000	0.58135E-
03	16.600	1.1965	496.46	1.0000	0.58487E-
03	16.700	1.1965	496.46	1.0000	0.58839E-
03	16.800	1.1965	496.46	1.0000	0.59191E-
03	16.900	1.1965	496.46	1.0000	0.59543E-
03	17.000	1.1965	496.46	1.0000	0.59895E-
03	17.100	1.1965	496.46	1.0000	0.60247E-
03	17.200	1.1965	496.46	1.0000	0.60600E-
03	17.300	1.1965	496.46	1.0000	0.60952E-
03	17.400	1.1965	496.46	1.0000	0.61304E-
03	17.500	1.1965	496.46	1.0000	0.61656E-
03	17.600	1.1965	496.46	1.0000	0.62008E-
03	17.700	1.1965	496.46	1.0000	0.62360E-
03	17.800	1.1965	496.46	1.0000	0.62712E-
03	17.900	1.1965	496.46	1.0000	0.63064E-
03	18.000	1.1965	496.46	1.0000	0.63416E-
03	18.100	1.1965	496.46	1.0000	0.63768E-
03	18.200	1.1965	496.46	1.0000	0.64120E-

03	18.300	1.1965	496.46	1.0000	0.64473E-
03	18.400	1.1965	496.46	1.0000	0.64825E-
03	18.500	1.1965	496.46	1.0000	0.65177E-
03	18.600	1.1965	496.46	1.0000	0.65529E-
03	18.700	1.1965	496.46	1.0000	0.65881E-
03	18.800	1.1965	496.46	1.0000	0.66233E-
03	18.900	1.1965	496.46	1.0000	0.66585E-
03	19.000	1.1965	496.46	1.0000	0.66937E-
03	19.100	1.1965	496.46	1.0000	0.67289E-
03	19.200	1.1965	496.46	1.0000	0.67641E-
03	19.300	1.1965	496.46	1.0000	0.67993E-
03	19.400	1.1965	496.46	1.0000	0.68345E-
03	19.500	1.1965	496.46	1.0000	0.68698E-
03	19.600	1.1965	496.46	1.0000	0.69050E-
03	19.700	1.1965	496.46	1.0000	0.69402E-
03	19.800	1.1965	496.46	1.0000	0.69754E-
03	19.900	1.1965	496.46	1.0000	0.70106E-
03	20.000	1.1965	496.46	1.0000	0.70458E-

LENGTH METER	DUTY KW	LIQUID HOLDUP
0.0000	0.0000	0.0000
0.10000	942.23	0.0000
0.20000	962.40	0.0000
0.30000	963.03	0.0000
0.40000	963.06	0.0000
0.50000	963.06	0.0000
0.60000	963.07	0.0000
0.70000	963.07	0.0000
0.80000	963.06	0.0000
0.90000	963.06	0.0000
1.0000	963.07	0.0000
1.1000	963.07	0.0000
1.2000	963.07	0.0000
1.3000	963.06	0.0000
1.4000	963.06	0.0000

1.5000	963.06	0.0000
1.6000	963.06	0.0000
1.7000	963.06	0.0000
1.8000	963.06	0.0000
1.9000	963.06	0.0000
2.0000	963.06	0.0000
2.1000	963.06	0.0000
2.2000	963.06	0.0000
2.3000	963.06	0.0000
2.4000	963.06	0.0000
2.5000	963.06	0.0000
2.6000	963.06	0.0000
2.7000	963.06	0.0000
2.8000	963.06	0.0000
2.9000	963.06	0.0000
3.0000	963.06	0.0000
3.1000	963.06	0.0000
3.2000	963.06	0.0000
3.3000	963.06	0.0000
3.4000	963.06	0.0000
3.5000	963.06	0.0000
3.6000	963.06	0.0000
3.7000	963.06	0.0000
3.8000	963.06	0.0000
3.9000	963.06	0.0000
4.0000	963.06	0.0000
4.1000	963.06	0.0000
4.2000	963.06	0.0000
4.3000	963.06	0.0000
4.4000	963.06	0.0000
4.5000	963.06	0.0000
4.6000	963.06	0.0000
4.7000	963.06	0.0000
4.8000	963.06	0.0000
4.9000	963.06	0.0000
5.0000	963.06	0.0000
5.1000	963.06	0.0000
5.2000	963.06	0.0000
5.3000	963.06	0.0000
5.4000	963.06	0.0000
5.5000	963.06	0.0000
5.6000	963.06	0.0000
5.7000	963.06	0.0000
5.8000	963.06	0.0000
5.9000	963.06	0.0000
6.0000	963.06	0.0000
6.1000	963.06	0.0000
6.2000	963.06	0.0000
6.3000	963.06	0.0000
6.4000	963.06	0.0000
6.5000	963.06	0.0000
6.6000	963.06	0.0000
6.7000	963.06	0.0000
6.8000	963.06	0.0000

6.9000	963.06	0.0000
7.0000	963.06	0.0000
7.1000	963.06	0.0000
7.2000	963.06	0.0000
7.3000	963.06	0.0000
7.4000	963.06	0.0000
7.5000	963.06	0.0000
7.6000	963.06	0.0000
7.7000	963.06	0.0000
7.8000	963.06	0.0000
7.9000	963.06	0.0000
8.0000	963.06	0.0000
8.1000	963.06	0.0000
8.2000	963.06	0.0000
8.3000	963.06	0.0000
8.4000	963.06	0.0000
8.5000	963.06	0.0000
8.6000	963.06	0.0000
8.7000	963.06	0.0000
8.8000	963.06	0.0000
8.9000	963.06	0.0000
9.0000	963.06	0.0000
9.1000	963.06	0.0000
9.2000	963.06	0.0000
9.3000	963.06	0.0000
9.4000	963.06	0.0000
9.5000	963.06	0.0000
9.6000	963.06	0.0000
9.7000	963.06	0.0000
9.8000	963.06	0.0000
9.9000	963.06	0.0000
10.000	963.06	0.0000
10.100	963.06	0.0000
10.200	963.06	0.0000
10.300	963.06	0.0000
10.400	963.06	0.0000
10.500	963.06	0.0000
10.600	963.06	0.0000
10.700	963.06	0.0000
10.800	963.06	0.0000
10.900	963.06	0.0000
11.000	963.06	0.0000
11.100	963.06	0.0000
11.200	963.06	0.0000
11.300	963.06	0.0000
11.400	963.06	0.0000
11.500	963.06	0.0000
11.600	963.06	0.0000
11.700	963.06	0.0000
11.800	963.06	0.0000
11.900	963.06	0.0000
12.000	963.06	0.0000
12.100	963.06	0.0000
12.200	963.06	0.0000

12.300	963.06	0.0000
12.400	963.06	0.0000
12.500	963.06	0.0000
12.600	963.06	0.0000
12.700	963.06	0.0000
12.800	963.06	0.0000
12.900	963.06	0.0000
13.000	963.06	0.0000
13.100	963.06	0.0000
13.200	963.06	0.0000
13.300	963.06	0.0000
13.400	963.06	0.0000
13.500	963.06	0.0000
13.600	963.06	0.0000
13.700	963.06	0.0000
13.800	963.06	0.0000
13.900	963.06	0.0000
14.000	963.06	0.0000
14.100	963.06	0.0000
14.200	963.06	0.0000
14.300	963.06	0.0000
14.400	963.06	0.0000
14.500	963.06	0.0000
14.600	963.06	0.0000
14.700	963.06	0.0000
14.800	963.06	0.0000
14.900	963.06	0.0000
15.000	963.06	0.0000
15.100	963.06	0.0000
15.200	963.06	0.0000
15.300	963.06	0.0000
15.400	963.06	0.0000
15.500	963.06	0.0000
15.600	963.06	0.0000
15.700	963.06	0.0000
15.800	963.06	0.0000
15.900	963.06	0.0000
16.000	963.06	0.0000
16.100	963.06	0.0000
16.200	963.06	0.0000
16.300	963.06	0.0000
16.400	963.06	0.0000
16.500	963.06	0.0000
16.600	963.06	0.0000
16.700	963.06	0.0000
16.800	963.06	0.0000
16.900	963.06	0.0000
17.000	963.06	0.0000
17.100	963.06	0.0000
17.200	963.06	0.0000
17.300	963.06	0.0000
17.400	963.06	0.0000
17.500	963.06	0.0000
17.600	963.06	0.0000

17.700	963.06	0.0000
17.800	963.06	0.0000
17.900	963.06	0.0000
18.000	963.06	0.0000
18.100	963.06	0.0000
18.200	963.06	0.0000
18.300	963.06	0.0000
18.400	963.06	0.0000
18.500	963.06	0.0000
18.600	963.06	0.0000
18.700	963.06	0.0000
18.800	963.06	0.0000
18.900	963.06	0.0000
19.000	963.06	0.0000
19.100	963.06	0.0000
19.200	963.06	0.0000
19.300	963.06	0.0000
19.400	963.06	0.0000
19.500	963.06	0.0000
19.600	963.06	0.0000
19.700	963.06	0.0000
19.800	963.06	0.0000
19.900	963.06	0.0000
20.000	963.06	0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

	LENGTH METER	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01
02	0.0000	0.0000	0.91706E-02	0.66076E-03	0.12227E-
03	0.10000	0.39362	0.55608E-02	0.39403	0.74144E-
03	0.20000	0.39869	0.55143E-02	0.39909	0.73525E-
03	0.30000	0.39885	0.55129E-02	0.39925	0.73505E-
03	0.40000	0.39886	0.55128E-02	0.39925	0.73504E-
03	0.50000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	0.60000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	0.70000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	0.80000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	0.90000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	1.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

03	2.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	2.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	3.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

03	4.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	4.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	5.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	6.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

03	7.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	7.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	8.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.0000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.1000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.2000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.3000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.4000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.5000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.6000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.7000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.8000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	9.9000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

03	10.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	10.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	11.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

03	12.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	12.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	13.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	14.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

03	15.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	15.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	16.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	17.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

03	18.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	18.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.100	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.200	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.300	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.400	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.500	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.600	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.700	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.800	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	19.900	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-
03	20.000	0.39886	0.55128E-02	0.39926	0.73504E-

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	ISOPR-01	WATER
0.0000	0.66769	0.32126
0.10000	0.11244E-01	0.19480
0.20000	0.27935E-02	0.19318
0.30000	0.25311E-02	0.19313
0.40000	0.25178E-02	0.19312
0.50000	0.25167E-02	0.19312
0.60000	0.25153E-02	0.19312
0.70000	0.25156E-02	0.19312
0.80000	0.25166E-02	0.19312
0.90000	0.25161E-02	0.19312
1.0000	0.25156E-02	0.19312
1.1000	0.25154E-02	0.19312
1.2000	0.25154E-02	0.19312
1.3000	0.25159E-02	0.19312
1.4000	0.25163E-02	0.19312
1.5000	0.25163E-02	0.19312
1.6000	0.25163E-02	0.19312
1.7000	0.25163E-02	0.19312
1.8000	0.25164E-02	0.19312
1.9000	0.25164E-02	0.19312
2.0000	0.25163E-02	0.19312
2.1000	0.25161E-02	0.19312
2.2000	0.25160E-02	0.19312
2.3000	0.25160E-02	0.19312
2.4000	0.25160E-02	0.19312
2.5000	0.25161E-02	0.19312
2.6000	0.25161E-02	0.19312
2.7000	0.25161E-02	0.19312
2.8000	0.25161E-02	0.19312
2.9000	0.25161E-02	0.19312
3.0000	0.25161E-02	0.19312
3.1000	0.25161E-02	0.19312
3.2000	0.25161E-02	0.19312
3.3000	0.25161E-02	0.19312
3.4000	0.25161E-02	0.19312
3.5000	0.25161E-02	0.19312
3.6000	0.25161E-02	0.19312
3.7000	0.25161E-02	0.19312
3.8000	0.25161E-02	0.19312
3.9000	0.25161E-02	0.19312
4.0000	0.25161E-02	0.19312

4.1000	0.25161E-02	0.19312
4.2000	0.25161E-02	0.19312
4.3000	0.25161E-02	0.19312
4.4000	0.25161E-02	0.19312
4.5000	0.25161E-02	0.19312
4.6000	0.25161E-02	0.19312
4.7000	0.25161E-02	0.19312
4.8000	0.25161E-02	0.19312
4.9000	0.25161E-02	0.19312
5.0000	0.25161E-02	0.19312
5.1000	0.25161E-02	0.19312
5.2000	0.25161E-02	0.19312
5.3000	0.25161E-02	0.19312
5.4000	0.25161E-02	0.19312
5.5000	0.25161E-02	0.19312
5.6000	0.25161E-02	0.19312
5.7000	0.25161E-02	0.19312
5.8000	0.25161E-02	0.19312
5.9000	0.25161E-02	0.19312
6.0000	0.25161E-02	0.19312
6.1000	0.25161E-02	0.19312
6.2000	0.25161E-02	0.19312
6.3000	0.25161E-02	0.19312
6.4000	0.25161E-02	0.19312
6.5000	0.25161E-02	0.19312
6.6000	0.25161E-02	0.19312
6.7000	0.25161E-02	0.19312
6.8000	0.25161E-02	0.19312
6.9000	0.25161E-02	0.19312
7.0000	0.25161E-02	0.19312
7.1000	0.25161E-02	0.19312
7.2000	0.25161E-02	0.19312
7.3000	0.25161E-02	0.19312
7.4000	0.25161E-02	0.19312
7.5000	0.25161E-02	0.19312
7.6000	0.25161E-02	0.19312
7.7000	0.25161E-02	0.19312
7.8000	0.25161E-02	0.19312
7.9000	0.25161E-02	0.19312
8.0000	0.25161E-02	0.19312
8.1000	0.25161E-02	0.19312
8.2000	0.25161E-02	0.19312
8.3000	0.25161E-02	0.19312
8.4000	0.25161E-02	0.19312
8.5000	0.25161E-02	0.19312
8.6000	0.25161E-02	0.19312
8.7000	0.25161E-02	0.19312
8.8000	0.25161E-02	0.19312
8.9000	0.25161E-02	0.19312
9.0000	0.25161E-02	0.19312
9.1000	0.25161E-02	0.19312
9.2000	0.25161E-02	0.19312
9.3000	0.25161E-02	0.19312
9.4000	0.25161E-02	0.19312

9.5000	0.25161E-02	0.19312
9.6000	0.25161E-02	0.19312
9.7000	0.25161E-02	0.19312
9.8000	0.25161E-02	0.19312
9.9000	0.25161E-02	0.19312
10.000	0.25161E-02	0.19312
10.100	0.25161E-02	0.19312
10.200	0.25161E-02	0.19312
10.300	0.25161E-02	0.19312
10.400	0.25161E-02	0.19312
10.500	0.25161E-02	0.19312
10.600	0.25161E-02	0.19312
10.700	0.25161E-02	0.19312
10.800	0.25161E-02	0.19312
10.900	0.25161E-02	0.19312
11.000	0.25161E-02	0.19312
11.100	0.25161E-02	0.19312
11.200	0.25161E-02	0.19312
11.300	0.25161E-02	0.19312
11.400	0.25161E-02	0.19312
11.500	0.25161E-02	0.19312
11.600	0.25161E-02	0.19312
11.700	0.25161E-02	0.19312
11.800	0.25161E-02	0.19312
11.900	0.25161E-02	0.19312
12.000	0.25161E-02	0.19312
12.100	0.25161E-02	0.19312
12.200	0.25161E-02	0.19312
12.300	0.25161E-02	0.19312
12.400	0.25161E-02	0.19312
12.500	0.25161E-02	0.19312
12.600	0.25161E-02	0.19312
12.700	0.25161E-02	0.19312
12.800	0.25161E-02	0.19312
12.900	0.25161E-02	0.19312
13.000	0.25161E-02	0.19312
13.100	0.25161E-02	0.19312
13.200	0.25161E-02	0.19312
13.300	0.25161E-02	0.19312
13.400	0.25161E-02	0.19312
13.500	0.25161E-02	0.19312
13.600	0.25161E-02	0.19312
13.700	0.25161E-02	0.19312
13.800	0.25161E-02	0.19312
13.900	0.25161E-02	0.19312
14.000	0.25161E-02	0.19312
14.100	0.25161E-02	0.19312
14.200	0.25161E-02	0.19312
14.300	0.25161E-02	0.19312
14.400	0.25161E-02	0.19312
14.500	0.25161E-02	0.19312
14.600	0.25161E-02	0.19312
14.700	0.25161E-02	0.19312
14.800	0.25161E-02	0.19312

14.900	0.25161E-02	0.19312
15.000	0.25161E-02	0.19312
15.100	0.25161E-02	0.19312
15.200	0.25161E-02	0.19312
15.300	0.25161E-02	0.19312
15.400	0.25161E-02	0.19312
15.500	0.25161E-02	0.19312
15.600	0.25161E-02	0.19312
15.700	0.25161E-02	0.19312
15.800	0.25161E-02	0.19312
15.900	0.25161E-02	0.19312
16.000	0.25161E-02	0.19312
16.100	0.25161E-02	0.19312
16.200	0.25161E-02	0.19312
16.300	0.25161E-02	0.19312
16.400	0.25161E-02	0.19312
16.500	0.25161E-02	0.19312
16.600	0.25161E-02	0.19312
16.700	0.25161E-02	0.19312
16.800	0.25161E-02	0.19312
16.900	0.25161E-02	0.19312
17.000	0.25161E-02	0.19312
17.100	0.25161E-02	0.19312
17.200	0.25161E-02	0.19312
17.300	0.25161E-02	0.19312
17.400	0.25161E-02	0.19312
17.500	0.25161E-02	0.19312
17.600	0.25161E-02	0.19312
17.700	0.25161E-02	0.19312
17.800	0.25161E-02	0.19312
17.900	0.25161E-02	0.19312
18.000	0.25161E-02	0.19312
18.100	0.25161E-02	0.19312
18.200	0.25161E-02	0.19312
18.300	0.25161E-02	0.19312
18.400	0.25161E-02	0.19312
18.500	0.25161E-02	0.19312
18.600	0.25161E-02	0.19312
18.700	0.25161E-02	0.19312
18.800	0.25161E-02	0.19312
18.900	0.25161E-02	0.19312
19.000	0.25161E-02	0.19312
19.100	0.25161E-02	0.19312
19.200	0.25161E-02	0.19312
19.300	0.25161E-02	0.19312
19.400	0.25161E-02	0.19312
19.500	0.25161E-02	0.19312
19.600	0.25161E-02	0.19312
19.700	0.25161E-02	0.19312
19.800	0.25161E-02	0.19312
19.900	0.25161E-02	0.19312
20.000	0.25161E-02	0.19312

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01
0.0000	0.0000	0.83058E-02	0.82598E-03	0.26890E-
02				
0.10000	0.28165E-01	0.83058E-02	0.81229	0.26890E-
02				
0.20000	0.28768E-01	0.83058E-02	0.82966	0.26890E-
02				
0.30000	0.28787E-01	0.83058E-02	0.83021	0.26890E-
02				
0.40000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83023	0.26890E-
02				
0.50000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
0.60000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
0.70000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
0.80000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
0.90000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				
1.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02				

02	2.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	2.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	3.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-

02	4.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	4.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	5.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	6.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-

02	7.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	7.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	8.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.0000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.1000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.2000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.3000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.4000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.5000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.6000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.7000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.8000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	9.9000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-

02	10.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	10.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	11.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-

02	12.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	12.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	13.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	14.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-

02	15.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	15.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	16.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	17.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-

02	18.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	18.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.100	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.200	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.300	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.400	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.500	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.600	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.700	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.800	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	19.900	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-
02	20.000	0.28788E-01	0.83058E-02	0.83024	0.26890E-

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-101EQ MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	ISOPR-01	WATER
0.0000	0.86361	0.12457
0.10000	0.23985E-01	0.12457
0.20000	0.60090E-02	0.12457
0.30000	0.54459E-02	0.12457
0.40000	0.54174E-02	0.12457
0.50000	0.54151E-02	0.12457
0.60000	0.54119E-02	0.12457
0.70000	0.54127E-02	0.12457
0.80000	0.54148E-02	0.12457
0.90000	0.54136E-02	0.12457
1.0000	0.54128E-02	0.12457
1.1000	0.54122E-02	0.12457
1.2000	0.54123E-02	0.12457
1.3000	0.54134E-02	0.12457
1.4000	0.54141E-02	0.12457
1.5000	0.54142E-02	0.12457
1.6000	0.54141E-02	0.12457
1.7000	0.54143E-02	0.12457
1.8000	0.54144E-02	0.12457
1.9000	0.54145E-02	0.12457
2.0000	0.54143E-02	0.12457
2.1000	0.54138E-02	0.12457
2.2000	0.54136E-02	0.12457
2.3000	0.54136E-02	0.12457
2.4000	0.54136E-02	0.12457
2.5000	0.54137E-02	0.12457
2.6000	0.54137E-02	0.12457
2.7000	0.54137E-02	0.12457
2.8000	0.54137E-02	0.12457
2.9000	0.54137E-02	0.12457
3.0000	0.54137E-02	0.12457
3.1000	0.54137E-02	0.12457
3.2000	0.54137E-02	0.12457
3.3000	0.54137E-02	0.12457
3.4000	0.54137E-02	0.12457
3.5000	0.54137E-02	0.12457
3.6000	0.54137E-02	0.12457
3.7000	0.54137E-02	0.12457
3.8000	0.54137E-02	0.12457
3.9000	0.54137E-02	0.12457
4.0000	0.54137E-02	0.12457

4.1000	0.54137E-02	0.12457
4.2000	0.54137E-02	0.12457
4.3000	0.54137E-02	0.12457
4.4000	0.54137E-02	0.12457
4.5000	0.54137E-02	0.12457
4.6000	0.54137E-02	0.12457
4.7000	0.54137E-02	0.12457
4.8000	0.54137E-02	0.12457
4.9000	0.54137E-02	0.12457
5.0000	0.54137E-02	0.12457
5.1000	0.54137E-02	0.12457
5.2000	0.54137E-02	0.12457
5.3000	0.54137E-02	0.12457
5.4000	0.54137E-02	0.12457
5.5000	0.54137E-02	0.12457
5.6000	0.54137E-02	0.12457
5.7000	0.54137E-02	0.12457
5.8000	0.54137E-02	0.12457
5.9000	0.54137E-02	0.12457
6.0000	0.54137E-02	0.12457
6.1000	0.54137E-02	0.12457
6.2000	0.54137E-02	0.12457
6.3000	0.54137E-02	0.12457
6.4000	0.54137E-02	0.12457
6.5000	0.54137E-02	0.12457
6.6000	0.54137E-02	0.12457
6.7000	0.54137E-02	0.12457
6.8000	0.54137E-02	0.12457
6.9000	0.54137E-02	0.12457
7.0000	0.54137E-02	0.12457
7.1000	0.54137E-02	0.12457
7.2000	0.54137E-02	0.12457
7.3000	0.54137E-02	0.12457
7.4000	0.54137E-02	0.12457
7.5000	0.54137E-02	0.12457
7.6000	0.54137E-02	0.12457
7.7000	0.54137E-02	0.12457
7.8000	0.54137E-02	0.12457
7.9000	0.54137E-02	0.12457
8.0000	0.54137E-02	0.12457
8.1000	0.54137E-02	0.12457
8.2000	0.54137E-02	0.12457
8.3000	0.54137E-02	0.12457
8.4000	0.54137E-02	0.12457
8.5000	0.54137E-02	0.12457
8.6000	0.54137E-02	0.12457
8.7000	0.54137E-02	0.12457
8.8000	0.54137E-02	0.12457
8.9000	0.54137E-02	0.12457
9.0000	0.54137E-02	0.12457
9.1000	0.54137E-02	0.12457
9.2000	0.54137E-02	0.12457
9.3000	0.54137E-02	0.12457
9.4000	0.54137E-02	0.12457

9.5000	0.54137E-02	0.12457
9.6000	0.54137E-02	0.12457
9.7000	0.54137E-02	0.12457
9.8000	0.54137E-02	0.12457
9.9000	0.54137E-02	0.12457
10.000	0.54137E-02	0.12457
10.100	0.54137E-02	0.12457
10.200	0.54137E-02	0.12457
10.300	0.54137E-02	0.12457
10.400	0.54137E-02	0.12457
10.500	0.54137E-02	0.12457
10.600	0.54137E-02	0.12457
10.700	0.54137E-02	0.12457
10.800	0.54137E-02	0.12457
10.900	0.54137E-02	0.12457
11.000	0.54137E-02	0.12457
11.100	0.54137E-02	0.12457
11.200	0.54137E-02	0.12457
11.300	0.54137E-02	0.12457
11.400	0.54137E-02	0.12457
11.500	0.54137E-02	0.12457
11.600	0.54137E-02	0.12457
11.700	0.54137E-02	0.12457
11.800	0.54137E-02	0.12457
11.900	0.54137E-02	0.12457
12.000	0.54137E-02	0.12457
12.100	0.54137E-02	0.12457
12.200	0.54137E-02	0.12457
12.300	0.54137E-02	0.12457
12.400	0.54137E-02	0.12457
12.500	0.54137E-02	0.12457
12.600	0.54137E-02	0.12457
12.700	0.54137E-02	0.12457
12.800	0.54137E-02	0.12457
12.900	0.54137E-02	0.12457
13.000	0.54137E-02	0.12457
13.100	0.54137E-02	0.12457
13.200	0.54137E-02	0.12457
13.300	0.54137E-02	0.12457
13.400	0.54137E-02	0.12457
13.500	0.54137E-02	0.12457
13.600	0.54137E-02	0.12457
13.700	0.54137E-02	0.12457
13.800	0.54137E-02	0.12457
13.900	0.54137E-02	0.12457
14.000	0.54137E-02	0.12457
14.100	0.54137E-02	0.12457
14.200	0.54137E-02	0.12457
14.300	0.54137E-02	0.12457
14.400	0.54137E-02	0.12457
14.500	0.54137E-02	0.12457
14.600	0.54137E-02	0.12457
14.700	0.54137E-02	0.12457
14.800	0.54137E-02	0.12457

14.900	0.54137E-02	0.12457
15.000	0.54137E-02	0.12457
15.100	0.54137E-02	0.12457
15.200	0.54137E-02	0.12457
15.300	0.54137E-02	0.12457
15.400	0.54137E-02	0.12457
15.500	0.54137E-02	0.12457
15.600	0.54137E-02	0.12457
15.700	0.54137E-02	0.12457
15.800	0.54137E-02	0.12457
15.900	0.54137E-02	0.12457
16.000	0.54137E-02	0.12457
16.100	0.54137E-02	0.12457
16.200	0.54137E-02	0.12457
16.300	0.54137E-02	0.12457
16.400	0.54137E-02	0.12457
16.500	0.54137E-02	0.12457
16.600	0.54137E-02	0.12457
16.700	0.54137E-02	0.12457
16.800	0.54137E-02	0.12457
16.900	0.54137E-02	0.12457
17.000	0.54137E-02	0.12457
17.100	0.54137E-02	0.12457
17.200	0.54137E-02	0.12457
17.300	0.54137E-02	0.12457
17.400	0.54137E-02	0.12457
17.500	0.54137E-02	0.12457
17.600	0.54137E-02	0.12457
17.700	0.54137E-02	0.12457
17.800	0.54137E-02	0.12457
17.900	0.54137E-02	0.12457
18.000	0.54137E-02	0.12457
18.100	0.54137E-02	0.12457
18.200	0.54137E-02	0.12457
18.300	0.54137E-02	0.12457
18.400	0.54137E-02	0.12457
18.500	0.54137E-02	0.12457
18.600	0.54137E-02	0.12457
18.700	0.54137E-02	0.12457
18.800	0.54137E-02	0.12457
18.900	0.54137E-02	0.12457
19.000	0.54137E-02	0.12457
19.100	0.54137E-02	0.12457
19.200	0.54137E-02	0.12457
19.300	0.54137E-02	0.12457
19.400	0.54137E-02	0.12457
19.500	0.54137E-02	0.12457
19.600	0.54137E-02	0.12457
19.700	0.54137E-02	0.12457
19.800	0.54137E-02	0.12457
19.900	0.54137E-02	0.12457
20.000	0.54137E-02	0.12457

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG

 PROCESS SIDE:

INLET STREAM: 12
 OUTLET STREAM: 13
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

 COOLANT SIDE:

INLET STREAM: MS-IN
 OUTLET STREAM: MS-OUT
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

	***	MASS AND ENERGY BALANCE	***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
CONVENTIONAL COMPONENTS				
(KMOL/HR)				
HYDROGEN	0.00000	57.7422	57.7422	
0.00000				
PROPY-01	0.798250	0.798250	0.00000	
0.00000				
ACETO-01	0.575152E-01	57.7997	57.7422	
0.00000				
DIISO-01	0.106433	0.106433	0.00000	
0.00000				
ISOPR-01	58.1185	0.376351	-57.7422	
0.101245E-15				
WATER	27.9639	27.9639	0.00000	
0.00000				
DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000				
SODIU-01	23.0959	23.0959	0.00000	
0.00000				
POTAS-01	124.375	124.375	0.00000	
0.00000				
SODIU-02	201.635	201.635	0.00000	
0.00000				
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR)	436.151	493.893	57.7422	-
0.115092E-15				
MASS (KG/HR)	32493.9	32493.9		-
0.214961E-13				
ENTHALPY (KW)	3955.71	3955.71		
0.344879E-15				

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***

FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***

REACTOR TYPE:

COUNTERCURRENT COOLANT
VAPOR FLUID PHASE

REACTOR TUBE LENGTH	METER	3.6576
REACTOR DIAMETER	METER	0.46000E-01
REACTOR RISE	METER	0.0000
NUMBER OF REACTOR TUBES		400
REACTOR VOLUME	CUM	2.4314
PRESSURE DROP OPTION:		FRICTIONAL

CORRELATION

FRICTIONAL CORRELATION:		ERGUN
HOLDUP OPTION:		NO-SLIP
COOLANT OUTLET TEMPERATURE	C	443.28
ERROR TOLERANCE		0.10000E-03
INTEGRATION METHOD		GEAR
CORRECTOR METHOD		NEWTON
INITIAL STEP SIZE FACTOR		0.10000E-01
CORRECTOR TOLERANCE FACTOR		0.10000
MAXIMUM NUMBER OF STEPS		1000

REACTION PARAGRAPH ID: DEHYDFOR TYPE: GENERAL

GLOBAL BASES:

KBASIS	MOLE -GAMMA
CBASIS	MOLARITY
SBASIS	GLOBAL

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG (CONTINUED)
STOICHIOMETRY:

REACTION NUMBER: 1
SUBSTREAM: MIXED
HYDROGEN 1.0000 ACETO-01 1.0000 ISOPR-01 -
1.0000

REACTION NUMBER: 2
SUBSTREAM: MIXED
HYDROGEN -1.0000 ACETO-01 -1.0000 ISOPR-01
1.0000

REAC-DATA ENTRIES:

REACTION NO	TYPE	PHASE	DELT C	BASIS
1	KINETIC	V	0.0000	MOLARITY
2	KINETIC	V	0.0000	MOLARITY

*** RESULTS ***

REACTOR DUTY	KW	1379.6
RESIDENCE TIME	HR	0.31355E-03
REACTOR MINIMUM TEMPERATURE	C	271.55
REACTOR MAXIMUM TEMPERATURE	C	496.46
COOLANT INLET TEMPERATURE	C	525.00
COOLANT INLET VAPOR FRACTION		0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** RESULTS PROFILE (PROCESS STREAM) ***

	LENGTH METER	PRESSURE BAR	TEMPERATURE C	VAPOR FRAC	RES-TIME HR
	0.0000	2.7000	356.17	1.0000	0.0000
05	0.36576E-01	2.6936	297.78	1.0000	0.58830E-
04	0.73152E-01	2.6872	282.10	1.0000	0.11692E-
04	0.10973	2.6808	275.37	1.0000	0.17429E-
04	0.14630	2.6742	272.45	1.0000	0.23088E-
04	0.18288	2.6676	271.55	1.0000	0.28664E-
04	0.21946	2.6608	271.81	1.0000	0.34156E-
04	0.25603	2.6540	272.79	1.0000	0.39564E-
04	0.29261	2.6470	274.23	1.0000	0.44887E-
04	0.32918	2.6399	275.96	1.0000	0.50127E-
04	0.36576	2.6327	277.88	1.0000	0.55285E-
04	0.40234	2.6254	279.93	1.0000	0.60362E-
04	0.43891	2.6179	282.07	1.0000	0.65361E-
04	0.47549	2.6104	284.28	1.0000	0.70282E-
04	0.51206	2.6027	286.52	1.0000	0.75128E-
04	0.54864	2.5948	288.80	1.0000	0.79899E-
04	0.58522	2.5868	291.10	1.0000	0.84598E-
04	0.62179	2.5787	293.42	1.0000	0.89226E-
04	0.65837	2.5705	295.76	1.0000	0.93784E-
04	0.69494	2.5621	298.12	1.0000	0.98274E-
03	0.73152	2.5536	300.50	1.0000	0.10270E-

03	0.76810	2.5449	302.90	1.0000	0.10705E-
03	0.80467	2.5361	305.33	1.0000	0.11135E-
03	0.84125	2.5272	307.77	1.0000	0.11558E-
03	0.87782	2.5181	310.23	1.0000	0.11975E-
03	0.91440	2.5089	312.72	1.0000	0.12386E-
03	0.95098	2.4995	315.23	1.0000	0.12791E-
03	0.98755	2.4900	317.77	1.0000	0.13190E-
03	1.0241	2.4803	320.34	1.0000	0.13583E-
03	1.0607	2.4705	322.93	1.0000	0.13971E-
03	1.0973	2.4605	325.56	1.0000	0.14353E-
03	1.1339	2.4504	328.21	1.0000	0.14730E-
03	1.1704	2.4400	330.90	1.0000	0.15102E-
03	1.2070	2.4296	333.63	1.0000	0.15468E-
03	1.2436	2.4190	336.38	1.0000	0.15830E-
03	1.2802	2.4082	339.18	1.0000	0.16186E-
03	1.3167	2.3972	342.01	1.0000	0.16537E-
03	1.3533	2.3861	344.87	1.0000	0.16884E-
03	1.3899	2.3748	347.77	1.0000	0.17226E-
03	1.4265	2.3633	350.71	1.0000	0.17563E-
03	1.4630	2.3517	353.69	1.0000	0.17895E-
03	1.4996	2.3398	356.70	1.0000	0.18223E-
03	1.5362	2.3278	359.75	1.0000	0.18546E-
03	1.5728	2.3156	362.84	1.0000	0.18865E-
03	1.6093	2.3033	365.95	1.0000	0.19180E-
03	1.6459	2.2907	369.09	1.0000	0.19491E-
03	1.6825	2.2779	372.26	1.0000	0.19797E-
03	1.7191	2.2650	375.46	1.0000	0.20099E-

03	1.7556	2.2519	378.67	1.0000	0.20398E-
03	1.7922	2.2385	381.90	1.0000	0.20692E-
03	1.8288	2.2250	385.14	1.0000	0.20982E-
03	1.8654	2.2113	388.39	1.0000	0.21269E-
03	1.9020	2.1973	391.64	1.0000	0.21552E-
03	1.9385	2.1832	394.89	1.0000	0.21831E-
03	1.9751	2.1688	398.13	1.0000	0.22106E-
03	2.0117	2.1543	401.36	1.0000	0.22378E-
03	2.0483	2.1395	404.56	1.0000	0.22646E-
03	2.0848	2.1245	407.75	1.0000	0.22911E-
03	2.1214	2.1093	410.90	1.0000	0.23172E-
03	2.1580	2.0938	414.02	1.0000	0.23430E-
03	2.1946	2.0782	417.10	1.0000	0.23685E-
03	2.2311	2.0623	420.14	1.0000	0.23936E-
03	2.2677	2.0462	423.14	1.0000	0.24184E-
03	2.3043	2.0298	426.08	1.0000	0.24429E-
03	2.3409	2.0132	428.97	1.0000	0.24671E-
03	2.3774	1.9964	431.81	1.0000	0.24909E-
03	2.4140	1.9793	434.60	1.0000	0.25145E-
03	2.4506	1.9620	437.32	1.0000	0.25377E-
03	2.4872	1.9444	439.99	1.0000	0.25606E-
03	2.5237	1.9266	442.60	1.0000	0.25832E-
03	2.5603	1.9085	445.15	1.0000	0.26055E-
03	2.5969	1.8901	447.63	1.0000	0.26275E-
03	2.6335	1.8715	450.06	1.0000	0.26493E-
03	2.6700	1.8525	452.43	1.0000	0.26707E-
03	2.7066	1.8334	454.73	1.0000	0.26918E-

03	2.7432	1.8139	456.98	1.0000	0.27126E-
03	2.7798	1.7941	459.16	1.0000	0.27332E-
03	2.8164	1.7740	461.29	1.0000	0.27534E-
03	2.8529	1.7536	463.36	1.0000	0.27733E-
03	2.8895	1.7328	465.38	1.0000	0.27930E-
03	2.9261	1.7118	467.34	1.0000	0.28124E-
03	2.9627	1.6904	469.24	1.0000	0.28314E-
03	2.9992	1.6686	471.09	1.0000	0.28502E-
03	3.0358	1.6465	472.88	1.0000	0.28687E-
03	3.0724	1.6240	474.63	1.0000	0.28869E-
03	3.1090	1.6011	476.32	1.0000	0.29047E-
03	3.1455	1.5778	477.97	1.0000	0.29223E-
03	3.1821	1.5541	479.56	1.0000	0.29396E-
03	3.2187	1.5299	481.11	1.0000	0.29566E-
03	3.2553	1.5053	482.62	1.0000	0.29733E-
03	3.2918	1.4802	484.08	1.0000	0.29896E-
03	3.3284	1.4546	485.49	1.0000	0.30057E-
03	3.3650	1.4285	486.87	1.0000	0.30214E-
03	3.4016	1.4018	488.20	1.0000	0.30369E-
03	3.4381	1.3746	489.49	1.0000	0.30520E-
03	3.4747	1.3467	490.74	1.0000	0.30667E-
03	3.5113	1.3181	491.96	1.0000	0.30812E-
03	3.5479	1.2889	493.14	1.0000	0.30953E-
03	3.5844	1.2589	494.28	1.0000	0.31091E-
03	3.6210	1.2281	495.39	1.0000	0.31225E-
03	3.6576	1.1965	496.46	1.0000	0.31355E-

LENGTH

DUTY

LIQUID HOLDUP

METER	KW	
0.0000	0.0000	0.0000
0.36576E-01	15.641	0.0000
0.73152E-01	35.110	0.0000
0.10973	56.041	0.0000
0.14630	77.708	0.0000
0.18288	99.770	0.0000
0.21946	122.03	0.0000
0.25603	144.39	0.0000
0.29261	166.76	0.0000
0.32918	189.10	0.0000
0.36576	211.38	0.0000
0.40234	233.59	0.0000
0.43891	255.70	0.0000
0.47549	277.70	0.0000
0.51206	299.60	0.0000
0.54864	321.37	0.0000
0.58522	343.03	0.0000
0.62179	364.56	0.0000
0.65837	385.96	0.0000
0.69494	407.23	0.0000
0.73152	428.36	0.0000
0.76810	449.35	0.0000
0.80467	470.20	0.0000
0.84125	490.90	0.0000
0.87782	511.45	0.0000
0.91440	531.84	0.0000
0.95098	552.07	0.0000
0.98755	572.14	0.0000
1.0241	592.03	0.0000
1.0607	611.76	0.0000
1.0973	631.30	0.0000
1.1339	650.66	0.0000
1.1704	669.82	0.0000
1.2070	688.79	0.0000
1.2436	707.56	0.0000
1.2802	726.12	0.0000
1.3167	744.47	0.0000
1.3533	762.59	0.0000
1.3899	780.49	0.0000
1.4265	798.16	0.0000
1.4630	815.59	0.0000
1.4996	832.76	0.0000
1.5362	849.69	0.0000
1.5728	866.35	0.0000
1.6093	882.75	0.0000
1.6459	898.88	0.0000
1.6825	914.74	0.0000
1.7191	930.31	0.0000
1.7556	945.59	0.0000
1.7922	960.58	0.0000
1.8288	975.28	0.0000
1.8654	989.67	0.0000
1.9020	1003.8	0.0000

1.9385	1017.6	0.0000
1.9751	1031.0	0.0000
2.0117	1044.2	0.0000
2.0483	1057.1	0.0000
2.0848	1069.7	0.0000
2.1214	1081.9	0.0000
2.1580	1093.9	0.0000
2.1946	1105.5	0.0000
2.2311	1116.9	0.0000
2.2677	1127.9	0.0000
2.3043	1138.7	0.0000
2.3409	1149.2	0.0000
2.3774	1159.4	0.0000
2.4140	1169.3	0.0000
2.4506	1178.9	0.0000
2.4872	1188.3	0.0000
2.5237	1197.4	0.0000
2.5603	1206.3	0.0000
2.5969	1214.9	0.0000
2.6335	1223.2	0.0000
2.6700	1231.4	0.0000
2.7066	1239.2	0.0000
2.7432	1246.9	0.0000
2.7798	1254.3	0.0000
2.8164	1261.5	0.0000
2.8529	1268.5	0.0000
2.8895	1275.3	0.0000
2.9261	1281.9	0.0000
2.9627	1288.3	0.0000
2.9992	1294.6	0.0000
3.0358	1300.6	0.0000
3.0724	1306.4	0.0000
3.1090	1312.1	0.0000
3.1455	1317.6	0.0000
3.1821	1323.0	0.0000
3.2187	1328.2	0.0000
3.2553	1333.2	0.0000
3.2918	1338.1	0.0000
3.3284	1342.8	0.0000
3.3650	1347.4	0.0000
3.4016	1351.9	0.0000
3.4381	1356.2	0.0000
3.4747	1360.4	0.0000
3.5113	1364.5	0.0000
3.5479	1368.4	0.0000
3.5844	1372.3	0.0000
3.6210	1376.0	0.0000
3.6576	1379.6	0.0000

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

	LENGTH METER	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01
02	0.0000	0.0000	0.91706E-02	0.66076E-03	0.12227E-
02	0.36576E-01	0.10840	0.81765E-02	0.10899	0.10902E-
02	0.73152E-01	0.14092	0.78783E-02	0.14148	0.10504E-
02	0.10973	0.16030	0.77005E-02	0.16086	0.10267E-
02	0.14630	0.17444	0.75709E-02	0.17499	0.10094E-
03	0.18288	0.18587	0.74661E-02	0.18640	0.99548E-
03	0.21946	0.19570	0.73759E-02	0.19623	0.98346E-
03	0.25603	0.20451	0.72951E-02	0.20503	0.97269E-
03	0.29261	0.21261	0.72208E-02	0.21313	0.96277E-
03	0.32918	0.22021	0.71511E-02	0.22072	0.95349E-
03	0.36576	0.22742	0.70850E-02	0.22793	0.94467E-
03	0.40234	0.23431	0.70218E-02	0.23482	0.93624E-
03	0.43891	0.24095	0.69609E-02	0.24145	0.92812E-
03	0.47549	0.24736	0.69021E-02	0.24786	0.92028E-
03	0.51206	0.25357	0.68452E-02	0.25407	0.91269E-
03	0.54864	0.25960	0.67899E-02	0.26009	0.90532E-
03	0.58522	0.26545	0.67362E-02	0.26594	0.89817E-
03	0.62179	0.27113	0.66841E-02	0.27162	0.89122E-
03	0.65837	0.27666	0.66335E-02	0.27714	0.88446E-
03	0.69494	0.28203	0.65842E-02	0.28250	0.87790E-

03	0.73152	0.28724	0.65364E-02	0.28771	0.87152E-
03	0.76810	0.29231	0.64900E-02	0.29277	0.86533E-
03	0.80467	0.29723	0.64449E-02	0.29769	0.85931E-
03	0.84125	0.30200	0.64011E-02	0.30246	0.85348E-
03	0.87782	0.30663	0.63586E-02	0.30709	0.84781E-
03	0.91440	0.31113	0.63174E-02	0.31158	0.84232E-
03	0.95098	0.31548	0.62774E-02	0.31593	0.83699E-
03	0.98755	0.31970	0.62387E-02	0.32015	0.83183E-
03	1.0241	0.32378	0.62013E-02	0.32423	0.82684E-
03	1.0607	0.32773	0.61651E-02	0.32818	0.82201E-
03	1.0973	0.33155	0.61301E-02	0.33199	0.81735E-
03	1.1339	0.33523	0.60963E-02	0.33567	0.81284E-
03	1.1704	0.33878	0.60638E-02	0.33922	0.80850E-
03	1.2070	0.34220	0.60324E-02	0.34264	0.80432E-
03	1.2436	0.34549	0.60022E-02	0.34592	0.80030E-
03	1.2802	0.34865	0.59732E-02	0.34908	0.79643E-
03	1.3167	0.35169	0.59454E-02	0.35211	0.79272E-
03	1.3533	0.35459	0.59188E-02	0.35502	0.78917E-
03	1.3899	0.35737	0.58933E-02	0.35780	0.78577E-
03	1.4265	0.36003	0.58689E-02	0.36045	0.78253E-
03	1.4630	0.36255	0.58458E-02	0.36297	0.77943E-
03	1.4996	0.36496	0.58237E-02	0.36538	0.77649E-
03	1.5362	0.36724	0.58028E-02	0.36766	0.77370E-
03	1.5728	0.36940	0.57830E-02	0.36982	0.77106E-
03	1.6093	0.37145	0.57642E-02	0.37186	0.76856E-
03	1.6459	0.37338	0.57465E-02	0.37379	0.76620E-
03	1.6825	0.37519	0.57299E-02	0.37560	0.76398E-

03	1.7191	0.37690	0.57142E-02	0.37731	0.76190E-
03	1.7556	0.37850	0.56996E-02	0.37891	0.75994E-
03	1.7922	0.37999	0.56859E-02	0.38040	0.75812E-
03	1.8288	0.38138	0.56731E-02	0.38179	0.75641E-
03	1.8654	0.38268	0.56612E-02	0.38309	0.75482E-
03	1.9020	0.38388	0.56501E-02	0.38429	0.75335E-
03	1.9385	0.38500	0.56399E-02	0.38541	0.75199E-
03	1.9751	0.38604	0.56304E-02	0.38644	0.75072E-
03	2.0117	0.38699	0.56216E-02	0.38740	0.74955E-
03	2.0483	0.38788	0.56135E-02	0.38828	0.74847E-
03	2.0848	0.38869	0.56060E-02	0.38910	0.74747E-
03	2.1214	0.38944	0.55992E-02	0.38985	0.74655E-
03	2.1580	0.39014	0.55928E-02	0.39054	0.74571E-
03	2.1946	0.39077	0.55870E-02	0.39118	0.74493E-
03	2.2311	0.39136	0.55816E-02	0.39176	0.74421E-
03	2.2677	0.39190	0.55766E-02	0.39230	0.74355E-
03	2.3043	0.39240	0.55720E-02	0.39280	0.74294E-
03	2.3409	0.39286	0.55678E-02	0.39326	0.74238E-
03	2.3774	0.39329	0.55639E-02	0.39369	0.74186E-
03	2.4140	0.39368	0.55603E-02	0.39408	0.74138E-
03	2.4506	0.39404	0.55570E-02	0.39444	0.74093E-
03	2.4872	0.39437	0.55539E-02	0.39478	0.74052E-
03	2.5237	0.39469	0.55511E-02	0.39509	0.74015E-
03	2.5603	0.39497	0.55484E-02	0.39537	0.73979E-
03	2.5969	0.39524	0.55460E-02	0.39564	0.73947E-
03	2.6335	0.39549	0.55437E-02	0.39589	0.73916E-
03	2.6700	0.39572	0.55416E-02	0.39612	0.73888E-

03	2.7066	0.39594	0.55396E-02	0.39634	0.73861E-
03	2.7432	0.39614	0.55378E-02	0.39654	0.73837E-
03	2.7798	0.39633	0.55360E-02	0.39673	0.73814E-
03	2.8164	0.39651	0.55344E-02	0.39690	0.73792E-
03	2.8529	0.39667	0.55329E-02	0.39707	0.73772E-
03	2.8895	0.39683	0.55315E-02	0.39723	0.73753E-
03	2.9261	0.39697	0.55301E-02	0.39737	0.73735E-
03	2.9627	0.39711	0.55288E-02	0.39751	0.73718E-
03	2.9992	0.39724	0.55276E-02	0.39764	0.73702E-
03	3.0358	0.39737	0.55265E-02	0.39777	0.73686E-
03	3.0724	0.39749	0.55254E-02	0.39788	0.73672E-
03	3.1090	0.39760	0.55244E-02	0.39800	0.73658E-
03	3.1455	0.39770	0.55234E-02	0.39810	0.73645E-
03	3.1821	0.39780	0.55225E-02	0.39820	0.73633E-
03	3.2187	0.39790	0.55216E-02	0.39830	0.73621E-
03	3.2553	0.39799	0.55208E-02	0.39839	0.73610E-
03	3.2918	0.39808	0.55199E-02	0.39848	0.73599E-
03	3.3284	0.39817	0.55192E-02	0.39856	0.73589E-
03	3.3650	0.39825	0.55184E-02	0.39864	0.73579E-
03	3.4016	0.39833	0.55177E-02	0.39872	0.73569E-
03	3.4381	0.39840	0.55170E-02	0.39880	0.73560E-
03	3.4747	0.39847	0.55163E-02	0.39887	0.73551E-
03	3.5113	0.39854	0.55157E-02	0.39894	0.73543E-
03	3.5479	0.39861	0.55151E-02	0.39901	0.73534E-
03	3.5844	0.39868	0.55145E-02	0.39908	0.73526E-
03	3.6210	0.39874	0.55139E-02	0.39914	0.73518E-
03	3.6576	0.39881	0.55133E-02	0.39921	0.73510E-

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MOLE FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	ISOPR-01	WATER
0.0000	0.66769	0.32126
0.36576E-01	0.48690	0.28643
0.73152E-01	0.43268	0.27599
0.10973	0.40035	0.26976
0.14630	0.37677	0.26522
0.18288	0.35772	0.26155
0.21946	0.34132	0.25839
0.25603	0.32663	0.25556
0.29261	0.31312	0.25296
0.32918	0.30045	0.25052
0.36576	0.28843	0.24820
0.40234	0.27692	0.24598
0.43891	0.26585	0.24385
0.47549	0.25516	0.24179
0.51206	0.24480	0.23980
0.54864	0.23476	0.23786
0.58522	0.22500	0.23598
0.62179	0.21552	0.23415
0.65837	0.20631	0.23238
0.69494	0.19736	0.23066
0.73152	0.18866	0.22898
0.76810	0.18021	0.22735
0.80467	0.17201	0.22577
0.84125	0.16404	0.22424
0.87782	0.15632	0.22275
0.91440	0.14882	0.22131
0.95098	0.14156	0.21991
0.98755	0.13453	0.21855
1.0241	0.12772	0.21724
1.0607	0.12113	0.21597
1.0973	0.11477	0.21475
1.1339	0.10863	0.21356
1.1704	0.10271	0.21242
1.2070	0.97001E-01	0.21132
1.2436	0.91514E-01	0.21027
1.2802	0.86242E-01	0.20925
1.3167	0.81185E-01	0.20828
1.3533	0.76338E-01	0.20734
1.3899	0.71703E-01	0.20645
1.4265	0.67277E-01	0.20560
1.4630	0.63061E-01	0.20479

1.4996	0.59052E-01	0.20401
1.5362	0.55246E-01	0.20328
1.5728	0.51640E-01	0.20259
1.6093	0.48230E-01	0.20193
1.6459	0.45014E-01	0.20131
1.6825	0.41985E-01	0.20073
1.7191	0.39141E-01	0.20018
1.7556	0.36475E-01	0.19966
1.7922	0.33984E-01	0.19918
1.8288	0.31660E-01	0.19874
1.8654	0.29497E-01	0.19832
1.9020	0.27487E-01	0.19793
1.9385	0.25623E-01	0.19757
1.9751	0.23898E-01	0.19724
2.0117	0.22302E-01	0.19693
2.0483	0.20829E-01	0.19665
2.0848	0.19469E-01	0.19639
2.1214	0.18216E-01	0.19615
2.1580	0.17061E-01	0.19592
2.1946	0.15998E-01	0.19572
2.2311	0.15018E-01	0.19553
2.2677	0.14116E-01	0.19536
2.3043	0.13284E-01	0.19520
2.3409	0.12517E-01	0.19505
2.3774	0.11809E-01	0.19491
2.4140	0.11156E-01	0.19479
2.4506	0.10552E-01	0.19467
2.4872	0.99928E-02	0.19456
2.5237	0.94749E-02	0.19446
2.5603	0.89943E-02	0.19437
2.5969	0.85481E-02	0.19428
2.6335	0.81330E-02	0.19420
2.6700	0.77468E-02	0.19413
2.7066	0.73869E-02	0.19406
2.7432	0.70503E-02	0.19400
2.7798	0.67346E-02	0.19394
2.8164	0.64396E-02	0.19388
2.8529	0.61634E-02	0.19383
2.8895	0.59041E-02	0.19378
2.9261	0.56592E-02	0.19373
2.9627	0.54272E-02	0.19368
2.9992	0.52076E-02	0.19364
3.0358	0.50005E-02	0.19360
3.0724	0.48041E-02	0.19356
3.1090	0.46179E-02	0.19353
3.1455	0.44410E-02	0.19349
3.1821	0.42726E-02	0.19346
3.2187	0.41120E-02	0.19343
3.2553	0.39586E-02	0.19340
3.2918	0.38114E-02	0.19337
3.3284	0.36706E-02	0.19334
3.3650	0.35351E-02	0.19332
3.4016	0.34045E-02	0.19329
3.4381	0.32787E-02	0.19327

3.4747	0.31571E-02	0.19325
3.5113	0.30392E-02	0.19322
3.5479	0.29249E-02	0.19320
3.5844	0.28137E-02	0.19318
3.6210	0.27052E-02	0.19316
3.6576	0.25993E-02	0.19314

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	HYDROGEN	PROPY-01	ACETO-01	DIISO-01
0.0000	0.0000	0.83058E-02	0.82598E-03	0.26890E-
02				
0.36576E-01	0.52752E-02	0.83058E-02	0.15281	0.26890E-
02				
0.73152E-01	0.71169E-02	0.83058E-02	0.20587	0.26890E-
02				
0.10973	0.82828E-02	0.83058E-02	0.23946	0.26890E-
02				
0.14630	0.91679E-02	0.83058E-02	0.26496	0.26890E-
02				
0.18288	0.99054E-02	0.83058E-02	0.28621	0.26890E-
02				
0.21946	0.10557E-01	0.83058E-02	0.30498	0.26890E-
02				
0.25603	0.11154E-01	0.83058E-02	0.32219	0.26890E-
02				
0.29261	0.11716E-01	0.83058E-02	0.33837	0.26890E-
02				
0.32918	0.12252E-01	0.83058E-02	0.35383	0.26890E-
02				
0.36576	0.12772E-01	0.83058E-02	0.36879	0.26890E-
02				
0.40234	0.13277E-01	0.83058E-02	0.38337	0.26890E-
02				
0.43891	0.13773E-01	0.83058E-02	0.39764	0.26890E-
02				
0.47549	0.14260E-01	0.83058E-02	0.41167	0.26890E-
02				
0.51206	0.14740E-01	0.83058E-02	0.42549	0.26890E-
02				
0.54864	0.15213E-01	0.83058E-02	0.43912	0.26890E-
02				
0.58522	0.15679E-01	0.83058E-02	0.45257	0.26890E-
02				
0.62179	0.16140E-01	0.83058E-02	0.46584	0.26890E-
02				
0.65837	0.16595E-01	0.83058E-02	0.47894	0.26890E-
02				
0.69494	0.17043E-01	0.83058E-02	0.49186	0.26890E-
02				

02	0.73152	0.17485E-01	0.83058E-02	0.50460	0.26890E-
02	0.76810	0.17921E-01	0.83058E-02	0.51715	0.26890E-
02	0.80467	0.18350E-01	0.83058E-02	0.52951	0.26890E-
02	0.84125	0.18772E-01	0.83058E-02	0.54168	0.26890E-
02	0.87782	0.19188E-01	0.83058E-02	0.55365	0.26890E-
02	0.91440	0.19596E-01	0.83058E-02	0.56541	0.26890E-
02	0.95098	0.19997E-01	0.83058E-02	0.57695	0.26890E-
02	0.98755	0.20390E-01	0.83058E-02	0.58828	0.26890E-
02	1.0241	0.20775E-01	0.83058E-02	0.59937	0.26890E-
02	1.0607	0.21152E-01	0.83058E-02	0.61023	0.26890E-
02	1.0973	0.21520E-01	0.83058E-02	0.62084	0.26890E-
02	1.1339	0.21880E-01	0.83058E-02	0.63120	0.26890E-
02	1.1704	0.22230E-01	0.83058E-02	0.64130	0.26890E-
02	1.2070	0.22571E-01	0.83058E-02	0.65113	0.26890E-
02	1.2436	0.22903E-01	0.83058E-02	0.66069	0.26890E-
02	1.2802	0.23225E-01	0.83058E-02	0.66996	0.26890E-
02	1.3167	0.23536E-01	0.83058E-02	0.67893	0.26890E-
02	1.3533	0.23838E-01	0.83058E-02	0.68762	0.26890E-
02	1.3899	0.24128E-01	0.83058E-02	0.69599	0.26890E-
02	1.4265	0.24408E-01	0.83058E-02	0.70406	0.26890E-
02	1.4630	0.24677E-01	0.83058E-02	0.71181	0.26890E-
02	1.4996	0.24935E-01	0.83058E-02	0.71923	0.26890E-
02	1.5362	0.25181E-01	0.83058E-02	0.72633	0.26890E-
02	1.5728	0.25416E-01	0.83058E-02	0.73310	0.26890E-
02	1.6093	0.25640E-01	0.83058E-02	0.73955	0.26890E-
02	1.6459	0.25853E-01	0.83058E-02	0.74567	0.26890E-
02	1.6825	0.26054E-01	0.83058E-02	0.75147	0.26890E-

02	1.7191	0.26244E-01	0.83058E-02	0.75695	0.26890E-
02	1.7556	0.26423E-01	0.83058E-02	0.76211	0.26890E-
02	1.7922	0.26591E-01	0.83058E-02	0.76695	0.26890E-
02	1.8288	0.26749E-01	0.83058E-02	0.77149	0.26890E-
02	1.8654	0.26896E-01	0.83058E-02	0.77574	0.26890E-
02	1.9020	0.27034E-01	0.83058E-02	0.77970	0.26890E-
02	1.9385	0.27162E-01	0.83058E-02	0.78339	0.26890E-
02	1.9751	0.27281E-01	0.83058E-02	0.78681	0.26890E-
02	2.0117	0.27391E-01	0.83058E-02	0.78999	0.26890E-
02	2.0483	0.27493E-01	0.83058E-02	0.79293	0.26890E-
02	2.0848	0.27588E-01	0.83058E-02	0.79566	0.26890E-
02	2.1214	0.27675E-01	0.83058E-02	0.79817	0.26890E-
02	2.1580	0.27756E-01	0.83058E-02	0.80050	0.26890E-
02	2.1946	0.27830E-01	0.83058E-02	0.80264	0.26890E-
02	2.2311	0.27899E-01	0.83058E-02	0.80462	0.26890E-
02	2.2677	0.27962E-01	0.83058E-02	0.80645	0.26890E-
02	2.3043	0.28021E-01	0.83058E-02	0.80814	0.26890E-
02	2.3409	0.28075E-01	0.83058E-02	0.80970	0.26890E-
02	2.3774	0.28125E-01	0.83058E-02	0.81114	0.26890E-
02	2.4140	0.28171E-01	0.83058E-02	0.81247	0.26890E-
02	2.4506	0.28214E-01	0.83058E-02	0.81370	0.26890E-
02	2.4872	0.28253E-01	0.83058E-02	0.81484	0.26890E-
02	2.5237	0.28290E-01	0.83058E-02	0.81590	0.26890E-
02	2.5603	0.28324E-01	0.83058E-02	0.81689	0.26890E-
02	2.5969	0.28356E-01	0.83058E-02	0.81780	0.26890E-
02	2.6335	0.28386E-01	0.83058E-02	0.81865	0.26890E-
02	2.6700	0.28413E-01	0.83058E-02	0.81944	0.26890E-

02	2.7066	0.28439E-01	0.83058E-02	0.82018	0.26890E-
02	2.7432	0.28463E-01	0.83058E-02	0.82088	0.26890E-
02	2.7798	0.28485E-01	0.83058E-02	0.82152	0.26890E-
02	2.8164	0.28506E-01	0.83058E-02	0.82213	0.26890E-
02	2.8529	0.28526E-01	0.83058E-02	0.82270	0.26890E-
02	2.8895	0.28545E-01	0.83058E-02	0.82323	0.26890E-
02	2.9261	0.28562E-01	0.83058E-02	0.82374	0.26890E-
02	2.9627	0.28579E-01	0.83058E-02	0.82422	0.26890E-
02	2.9992	0.28595E-01	0.83058E-02	0.82467	0.26890E-
02	3.0358	0.28609E-01	0.83058E-02	0.82510	0.26890E-
02	3.0724	0.28623E-01	0.83058E-02	0.82550	0.26890E-
02	3.1090	0.28637E-01	0.83058E-02	0.82589	0.26890E-
02	3.1455	0.28649E-01	0.83058E-02	0.82625	0.26890E-
02	3.1821	0.28662E-01	0.83058E-02	0.82660	0.26890E-
02	3.2187	0.28673E-01	0.83058E-02	0.82693	0.26890E-
02	3.2553	0.28684E-01	0.83058E-02	0.82725	0.26890E-
02	3.2918	0.28695E-01	0.83058E-02	0.82755	0.26890E-
02	3.3284	0.28705E-01	0.83058E-02	0.82785	0.26890E-
02	3.3650	0.28714E-01	0.83058E-02	0.82813	0.26890E-
02	3.4016	0.28724E-01	0.83058E-02	0.82840	0.26890E-
02	3.4381	0.28733E-01	0.83058E-02	0.82866	0.26890E-
02	3.4747	0.28742E-01	0.83058E-02	0.82891	0.26890E-
02	3.5113	0.28750E-01	0.83058E-02	0.82915	0.26890E-
02	3.5479	0.28758E-01	0.83058E-02	0.82939	0.26890E-
02	3.5844	0.28766E-01	0.83058E-02	0.82962	0.26890E-
02	3.6210	0.28774E-01	0.83058E-02	0.82985	0.26890E-
02	3.6576	0.28782E-01	0.83058E-02	0.83007	0.26890E-

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** TOTAL MASS FRACTION PROFILE (PROCESS STREAM) ***

LENGTH METER	ISOPR-01	WATER
0.0000	0.86361	0.12457
0.36576E-01	0.70635	0.12457
0.73152E-01	0.65145	0.12457
0.10973	0.61669	0.12457
0.14630	0.59031	0.12457
0.18288	0.56832	0.12457
0.21946	0.54890	0.12457
0.25603	0.53109	0.12457
0.29261	0.51436	0.12457
0.32918	0.49835	0.12457
0.36576	0.48288	0.12457
0.40234	0.46780	0.12457
0.43891	0.45302	0.12457
0.47549	0.43851	0.12457
0.51206	0.42421	0.12457
0.54864	0.41011	0.12457
0.58522	0.39619	0.12457
0.62179	0.38246	0.12457
0.65837	0.36891	0.12457
0.69494	0.35554	0.12457
0.73152	0.34236	0.12457
0.76810	0.32937	0.12457
0.80467	0.31658	0.12457
0.84125	0.30399	0.12457
0.87782	0.29160	0.12457
0.91440	0.27943	0.12457
0.95098	0.26749	0.12457
0.98755	0.25577	0.12457
1.0241	0.24429	0.12457
1.0607	0.23306	0.12457
1.0973	0.22208	0.12457
1.1339	0.21136	0.12457
1.1704	0.20091	0.12457
1.2070	0.19074	0.12457
1.2436	0.18085	0.12457
1.2802	0.17126	0.12457
1.3167	0.16197	0.12457
1.3533	0.15299	0.12457
1.3899	0.14432	0.12457
1.4265	0.13597	0.12457
1.4630	0.12796	0.12457

1.4996	0.12028	0.12457
1.5362	0.11293	0.12457
1.5728	0.10592	0.12457
1.6093	0.99249E-01	0.12457
1.6459	0.92914E-01	0.12457
1.6825	0.86916E-01	0.12457
1.7191	0.81250E-01	0.12457
1.7556	0.75911E-01	0.12457
1.7922	0.70896E-01	0.12457
1.8288	0.66196E-01	0.12457
1.8654	0.61803E-01	0.12457
1.9020	0.57705E-01	0.12457
1.9385	0.53890E-01	0.12457
1.9751	0.50345E-01	0.12457
2.0117	0.47058E-01	0.12457
2.0483	0.44012E-01	0.12457
2.0848	0.41195E-01	0.12457
2.1214	0.38590E-01	0.12457
2.1580	0.36185E-01	0.12457
2.1946	0.33965E-01	0.12457
2.2311	0.31916E-01	0.12457
2.2677	0.30025E-01	0.12457
2.3043	0.28279E-01	0.12457
2.3409	0.26666E-01	0.12457
2.3774	0.25176E-01	0.12457
2.4140	0.23799E-01	0.12457
2.4506	0.22523E-01	0.12457
2.4872	0.21342E-01	0.12457
2.5237	0.20246E-01	0.12457
2.5603	0.19228E-01	0.12457
2.5969	0.18283E-01	0.12457
2.6335	0.17402E-01	0.12457
2.6700	0.16582E-01	0.12457
2.7066	0.15817E-01	0.12457
2.7432	0.15101E-01	0.12457
2.7798	0.14430E-01	0.12457
2.8164	0.13802E-01	0.12457
2.8529	0.13213E-01	0.12457
2.8895	0.12661E-01	0.12457
2.9261	0.12139E-01	0.12457
2.9627	0.11644E-01	0.12457
2.9992	0.11175E-01	0.12457
3.0358	0.10733E-01	0.12457
3.0724	0.10313E-01	0.12457
3.1090	0.99152E-02	0.12457
3.1455	0.95372E-02	0.12457
3.1821	0.91769E-02	0.12457
3.2187	0.88335E-02	0.12457
3.2553	0.85052E-02	0.12457
3.2918	0.81903E-02	0.12457
3.3284	0.78887E-02	0.12457
3.3650	0.75985E-02	0.12457
3.4016	0.73188E-02	0.12457
3.4381	0.70493E-02	0.12457

3.4747	0.67886E-02	0.12457
3.5113	0.65359E-02	0.12457
3.5479	0.62908E-02	0.12457
3.5844	0.60522E-02	0.12457
3.6210	0.58196E-02	0.12457
3.6576	0.55924E-02	0.12457

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SR-201 MODEL: RPLUG (CONTINUED)

*** RESULTS PROFILE (COOLANT STREAM) ***

	LENGTH METER	PRESSURE BAR	TEMPERATURE C	VAPOR FRAC	RES-TIME HR
	0.0000	3.0000	443.28	0.0000	0.0000
05	0.36576E-01	3.0000	444.24	0.0000	0.58830E-
04	0.73152E-01	3.0000	445.44	0.0000	0.11692E-
04	0.10973	3.0000	446.72	0.0000	0.17429E-
04	0.14630	3.0000	448.05	0.0000	0.23088E-
04	0.18288	3.0000	449.40	0.0000	0.28664E-
04	0.21946	3.0000	450.76	0.0000	0.34156E-
04	0.25603	3.0000	452.13	0.0000	0.39564E-
04	0.29261	3.0000	453.49	0.0000	0.44887E-
04	0.32918	3.0000	454.86	0.0000	0.50127E-
04	0.36576	3.0000	456.21	0.0000	0.55285E-
04	0.40234	3.0000	457.56	0.0000	0.60362E-
04	0.43891	3.0000	458.91	0.0000	0.65361E-
04	0.47549	3.0000	460.24	0.0000	0.70282E-
04	0.51206	3.0000	461.57	0.0000	0.75128E-
04	0.54864	3.0000	462.89	0.0000	0.79899E-
04	0.58522	3.0000	464.20	0.0000	0.84598E-
04	0.62179	3.0000	465.50	0.0000	0.89226E-
04	0.65837	3.0000	466.79	0.0000	0.93784E-
04	0.69494	3.0000	468.07	0.0000	0.98274E-
03	0.73152	3.0000	469.34	0.0000	0.10270E-

03	0.76810	3.0000	470.61	0.0000	0.10705E-
03	0.80467	3.0000	471.86	0.0000	0.11135E-
03	0.84125	3.0000	473.10	0.0000	0.11558E-
03	0.87782	3.0000	474.33	0.0000	0.11975E-
03	0.91440	3.0000	475.55	0.0000	0.12386E-
03	0.95098	3.0000	476.76	0.0000	0.12791E-
03	0.98755	3.0000	477.96	0.0000	0.13190E-
03	1.0241	3.0000	479.15	0.0000	0.13583E-
03	1.0607	3.0000	480.32	0.0000	0.13971E-
03	1.0973	3.0000	481.49	0.0000	0.14353E-
03	1.1339	3.0000	482.64	0.0000	0.14730E-
03	1.1704	3.0000	483.78	0.0000	0.15102E-
03	1.2070	3.0000	484.90	0.0000	0.15468E-
03	1.2436	3.0000	486.02	0.0000	0.15830E-
03	1.2802	3.0000	487.11	0.0000	0.16186E-
03	1.3167	3.0000	488.20	0.0000	0.16537E-
03	1.3533	3.0000	489.27	0.0000	0.16884E-
03	1.3899	3.0000	490.33	0.0000	0.17226E-
03	1.4265	3.0000	491.37	0.0000	0.17563E-
03	1.4630	3.0000	492.39	0.0000	0.17895E-
03	1.4996	3.0000	493.41	0.0000	0.18223E-
03	1.5362	3.0000	494.40	0.0000	0.18546E-
03	1.5728	3.0000	495.38	0.0000	0.18865E-
03	1.6093	3.0000	496.34	0.0000	0.19180E-
03	1.6459	3.0000	497.29	0.0000	0.19491E-
03	1.6825	3.0000	498.21	0.0000	0.19797E-
03	1.7191	3.0000	499.12	0.0000	0.20099E-

03	1.7556	3.0000	500.02	0.0000	0.20398E-
03	1.7922	3.0000	500.89	0.0000	0.20692E-
03	1.8288	3.0000	501.75	0.0000	0.20982E-
03	1.8654	3.0000	502.59	0.0000	0.21269E-
03	1.9020	3.0000	503.41	0.0000	0.21552E-
03	1.9385	3.0000	504.21	0.0000	0.21831E-
03	1.9751	3.0000	504.99	0.0000	0.22106E-
03	2.0117	3.0000	505.76	0.0000	0.22378E-
03	2.0483	3.0000	506.50	0.0000	0.22646E-
03	2.0848	3.0000	507.23	0.0000	0.22911E-
03	2.1214	3.0000	507.94	0.0000	0.23172E-
03	2.1580	3.0000	508.63	0.0000	0.23430E-
03	2.1946	3.0000	509.31	0.0000	0.23685E-
03	2.2311	3.0000	509.96	0.0000	0.23936E-
03	2.2677	3.0000	510.60	0.0000	0.24184E-
03	2.3043	3.0000	511.22	0.0000	0.24429E-
03	2.3409	3.0000	511.83	0.0000	0.24671E-
03	2.3774	3.0000	512.41	0.0000	0.24909E-
03	2.4140	3.0000	512.98	0.0000	0.25145E-
03	2.4506	3.0000	513.54	0.0000	0.25377E-
03	2.4872	3.0000	514.08	0.0000	0.25606E-
03	2.5237	3.0000	514.60	0.0000	0.25832E-
03	2.5603	3.0000	515.11	0.0000	0.26055E-
03	2.5969	3.0000	515.60	0.0000	0.26275E-
03	2.6335	3.0000	516.08	0.0000	0.26493E-
03	2.6700	3.0000	516.55	0.0000	0.26707E-
03	2.7066	3.0000	517.00	0.0000	0.26918E-

03	2.7432	3.0000	517.44	0.0000	0.27126E-
03	2.7798	3.0000	517.86	0.0000	0.27332E-
03	2.8164	3.0000	518.28	0.0000	0.27534E-
03	2.8529	3.0000	518.68	0.0000	0.27733E-
03	2.8895	3.0000	519.06	0.0000	0.27930E-
03	2.9261	3.0000	519.44	0.0000	0.28124E-
03	2.9627	3.0000	519.81	0.0000	0.28314E-
03	2.9992	3.0000	520.16	0.0000	0.28502E-
03	3.0358	3.0000	520.50	0.0000	0.28687E-
03	3.0724	3.0000	520.84	0.0000	0.28869E-
03	3.1090	3.0000	521.16	0.0000	0.29047E-
03	3.1455	3.0000	521.48	0.0000	0.29223E-
03	3.1821	3.0000	521.78	0.0000	0.29396E-
03	3.2187	3.0000	522.08	0.0000	0.29566E-
03	3.2553	3.0000	522.36	0.0000	0.29733E-
03	3.2918	3.0000	522.64	0.0000	0.29896E-
03	3.3284	3.0000	522.91	0.0000	0.30057E-
03	3.3650	3.0000	523.17	0.0000	0.30214E-
03	3.4016	3.0000	523.42	0.0000	0.30369E-
03	3.4381	3.0000	523.67	0.0000	0.30520E-
03	3.4747	3.0000	523.91	0.0000	0.30667E-
03	3.5113	3.0000	524.14	0.0000	0.30812E-
03	3.5479	3.0000	524.36	0.0000	0.30953E-
03	3.5844	3.0000	524.58	0.0000	0.31091E-
03	3.6210	3.0000	524.79	0.0000	0.31225E-
03	3.6576	3.0000	525.00	0.0000	0.31355E-

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SUB1-101 MODEL: RSTOIC

INLET STREAM: 11
OUTLET STREAM: 12
PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
HENRY-COMPS ID: HC-1

	*** MASS AND ENERGY BALANCE ***		***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
CONVENTIONAL COMPONENTS (KMOL/HR)				
0.00000 HYDROGEN	0.331365E-23	0.00000	0.00000	
0.00000 PROPY-01	0.00000	0.798250	0.798250	
0.00000 ACETO-01	0.575152E-01	0.575152E-01	0.00000	
0.00000 DIISO-01	0.826872E-09	0.106433	0.106433	
0.00000 ISOPR-01	59.1296	58.1185	-1.01112	
0.00000 WATER	27.0592	27.9639	0.904683	
0.00000 DIACE-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000 SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000	
TOTAL BALANCE				
0.00000 MOLE (KMOL/HR)	86.2463	87.0446	0.798250	
0.224885E-15 MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27		
0.00000 ENTHALPY (KW)	-5520.81	-5520.81		

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***
STOICHIOMETRY MATRIX:

REACTION # 1:
SUBSTREAM MIXED :
PROPY-01 1.00 ISOPR-01 -1.00 WATER 1.00

REACTION # 2:
SUBSTREAM MIXED :
DIISO-01 1.00 ISOPR-01 -2.00 WATER 1.00

REACTION CONVERSION SPECS: NUMBER= 2

REACTION # 1:
SUBSTREAM:MIXED KEY COMP:ISOPR-01 CONV FRAC: 0.1350E-01

REACTION # 2:
SUBSTREAM:MIXED KEY COMP:ISOPR-01 CONV FRAC: 0.3600E-02

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SUB1-101 MODEL: RSTOIC (CONTINUED)

TWO PHASE PQ FLASH		
PRESSURE DROP	BAR	0.0
SPECIFIED HEAT DUTY	KW	0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS		30
CONVERGENCE TOLERANCE		0.000100000
SIMULTANEOUS REACTIONS		
GENERATE COMBUSTION REACTIONS FOR FEED SPECIES		NO

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	356.17
OUTLET PRESSURE	BAR	2.7000
VAPOR FRACTION		1.0000

REACTION EXTENTS:

REACTION NUMBER	REACTION EXTENT KMOL/HR
1	0.79825
2	0.10643

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F (I)	X (I)	Y (I)	K (I)
29695. PROPY-01	0.91706E-02	0.36264E-04	0.91706E-02	
17.740 ACETO-01	0.66076E-03	0.18828E-03	0.66076E-03	
19.918 DIISO-01	0.12227E-02	0.28873E-03	0.12227E-02	
16.396 ISOPR-01	0.66769	0.64083	0.66769	
120.65 WATER	0.32126	0.35866	0.32126	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
 U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SUB2-101 MODEL: RSTOIC

 INLET STREAM: 13
 OUTLET STREAM: PRODUCTS
 PROPERTY OPTION SET: WILS-RK WILSON / REDLICH-KWONG
 HENRY-COMPS ID: HC-1

	*** MASS AND ENERGY BALANCE ***		***	
	IN	OUT	GENERATION	RELATIVE
DIFF.				
CONVENTIONAL COMPONENTS				
(KMOL/HR)				
HYDROGEN	57.7422	57.7422	0.00000	
0.00000				
PROPY-01	0.798250	0.798250	0.00000	
0.00000				
ACETO-01	57.7997	57.7476	-0.520197E-01	
0.122932E-15				
DIISO-01	0.106433	0.106433	0.00000	
0.00000				
ISOPR-01	0.376351	0.376351	0.00000	
0.00000				
WATER	27.9639	27.9639	0.00000	
0.00000				
DIACE-01	0.00000	0.260099E-01	0.260099E-01	
0.00000				
SODIU-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000				
POTAS-01	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000				
SODIU-02	0.00000	0.00000	0.00000	
0.00000				
TOTAL BALANCE				
MOLE (KMOL/HR)	144.787	144.761	-0.260099E-01	
0.00000				
MASS (KG/HR)	4044.27	4044.27		
0.00000				
ENTHALPY (KW)	-4141.21	-4141.21		
0.219620E-15				

*** CO2 EQUIVALENT SUMMARY ***		
FEED STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
PRODUCT STREAMS CO2E	0.00000	KG/HR
NET STREAMS CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
UTILITIES CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR
TOTAL CO2E PRODUCTION	0.00000	KG/HR

*** INPUT DATA ***
 STOICHIOMETRY MATRIX:

REACTION # 1:
SUBSTREAM MIXED :
ACETO-01 -2.00 DIACE-01 1.00

REACTION CONVERSION SPECS: NUMBER= 1
REACTION # 1:
SUBSTREAM:MIXED KEY COMP:ACETO-01 CONV FRAC: 0.9000E-03

TWO PHASE PQ FLASH
PRESSURE DROP BAR 0.0
SPECIFIED HEAT DUTY KW 0.0
MAXIMUM NO. ITERATIONS 30
CONVERGENCE TOLERANCE 0.000100000
SIMULTANEOUS REACTIONS
GENERATE COMBUSTION REACTIONS FOR FEED SPECIES NO

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
U-O-S BLOCK SECTION (HIERARCHY: R-201)

BLOCK: SUB2-101 MODEL: RSTOIC (CONTINUED)

*** RESULTS ***

OUTLET TEMPERATURE	C	496.52
OUTLET PRESSURE	BAR	1.1965
VAPOR FRACTION		1.0000

REACTION EXTENTS:

REACTION NUMBER	REACTION EXTENT KMOL/HR
1	0.26010E-01

V-L PHASE EQUILIBRIUM :

COMP	F(I)	X(I)	Y(I)	K(I)
HYDROGEN	0.39888	0.19106E-04	0.39888	
151.39				
PROPY-01	0.55143E-02	0.27352E-05	0.55143E-02	
6110.3				
ACETO-01	0.39892	0.10820	0.39892	
68.621				
DIISO-01	0.73524E-03	0.24060E-04	0.73524E-03	
56.074				
ISOPR-01	0.25998E-02	0.13366E-02	0.25998E-02	
70.784				
WATER	0.19317	0.88239	0.19317	
396.63				
DIACE-01	0.17967E-03	0.80308E-02	0.17967E-03	
20.032				

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION (HIERARCHY: R-201)

11 11EQ 12 12EQ 13

13EQ MS MS-IN MS-OUT PRODEQ

STREAM ID	11	11EQ	12	12EQ	13
13EQ MS	MS-IN	MS-OUT	PRODEQ		
FROM :	SC-1	----	SUB1-101	S1-101EQ	SR-
201 SR-101EQ	E-104	----	SR-201	S2-101EQ	
TO :	SUB1-101	S1-101EQ	SR-201	SR-101EQ	
SUB2-101	S2-101EQ	----	SR-201	E-104	----

SUBSTREAM: MIXED

PHASE:		VAPOR	VAPOR	VAPOR	VAPOR	
VAPOR	VAPOR	LIQUID	LIQUID	LIQUID	VAPOR	
COMPONENTS: KMOL/HR						
HYDROGEN		3.3137-24	3.3137-24	0.0	0.0	
57.7422	57.7542	0.0	0.0	0.0	57.7542	
PROPY-01		0.0	0.0	0.7982	0.7982	
0.7982	0.7982	0.0	0.0	0.0	0.7982	
ACETO-01		5.7515-02	5.7515-02	5.7515-02	5.7515-02	
57.7997	57.8117	0.0	0.0	0.0	57.7597	
DIISO-01		8.2687-10	8.2687-10	0.1064	0.1064	
0.1064	0.1064	0.0	0.0	0.0	0.1064	
ISOPR-01		59.1296	59.1296	58.1185	58.1185	
0.3764	0.3643	0.0	0.0	0.0	0.3643	
WATER		27.0592	27.0592	27.9639	27.9639	
27.9639	27.9639	0.0	0.0	0.0	27.9639	
DIACE-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	2.6015-02		
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	23.0959	23.0959	23.0959	0.0		
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	124.3754	124.3754	124.3754	0.0		
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	201.6353	201.6353	201.6353	0.0		
COMPONENTS: MOLE FRAC						
HYDROGEN		3.8421-26	3.8421-26	0.0	0.0	
0.3988	0.3989	0.0	0.0	0.0	0.3989	
PROPY-01		0.0	0.0	9.1706-03	9.1706-03	
5.5133-03	5.5128-03	0.0	0.0	0.0	5.5138-03	
ACETO-01		6.6687-04	6.6687-04	6.6076-04	6.6076-04	
0.3992	0.3993	0.0	0.0	0.0	0.3990	
DIISO-01		9.5873-12	9.5873-12	1.2227-03	1.2227-03	
7.3510-04	7.3504-04	0.0	0.0	0.0	7.3518-04	
ISOPR-01		0.6856	0.6856	0.6677	0.6677	
2.5993-03	2.5161-03	0.0	0.0	0.0	2.5165-03	

WATER		0.3137	0.3137	0.3213	0.3213		
0.1931	0.1931	0.0	0.0	0.0	0.1932		
DIACE-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	1.7970-04			
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	6.6157-02	6.6157-02	6.6157-02	0.0			
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.3563	0.3563	0.3563	0.0			
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.5776	0.5776	0.5776	0.0			
COMPONENTS: KG/HR							
HYDROGEN		6.6799-24	6.6799-24	0.0	0.0		
116.4013	116.4255	0.0	0.0	0.0	116.4255		
PROPY-01		0.0	0.0	33.5909	33.5909		
33.5909	33.5909	0.0	0.0	0.0	33.5909		
ACETO-01		3.3405	3.3405	3.3405	3.3405		
3357.0070	3357.7054	0.0	0.0	0.0	3354.6835		
DIISO-01		8.4487-08	8.4487-08	10.8750	10.8750		
10.8750	10.8750	0.0	0.0	0.0	10.8750		
ISOPR-01		3553.4489	3553.4489	3492.6850	3492.6850		
22.6172	21.8946	0.0	0.0	0.0	21.8946		
WATER		487.4793	487.4793	503.7774	503.7774		
503.7774	503.7774	0.0	0.0	0.0	503.7774		
DIACE-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	3.0219			
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	1963.0276	1963.0276	1963.0276	0.0			
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	1.2575+04	1.2575+04	1.2575+04	0.0			
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	1.3912+04	1.3912+04	1.3912+04	0.0			
COMPONENTS: MASS FRAC							
HYDROGEN		1.6517-27	1.6517-27	0.0	0.0		
2.8782-02	2.8788-02	0.0	0.0	0.0	2.8788-02		
PROPY-01		0.0	0.0	8.3058-03	8.3058-03		
8.3058-03	8.3058-03	0.0	0.0	0.0	8.3058-03		
ACETO-01		8.2598-04	8.2598-04	8.2598-04	8.2598-04		
0.8301	0.8302	0.0	0.0	0.0	0.8295		
DIISO-01		2.0891-11	2.0891-11	2.6890-03	2.6890-03		
2.6890-03	2.6890-03	0.0	0.0	0.0	2.6890-03		
ISOPR-01		0.8786	0.8786	0.8636	0.8636		
5.5924-03	5.4137-03	0.0	0.0	0.0	5.4137-03		
WATER		0.1205	0.1205	0.1246	0.1246		
0.1246	0.1246	0.0	0.0	0.0	0.1246		
DIACE-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	7.4721-04			
SODIU-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	6.9000-02	6.9000-02	6.9000-02	0.0			
POTAS-01		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.4420	0.4420	0.4420	0.0			
SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.4890	0.4890	0.4890	0.0			

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION (HIERARCHY: R-201)

11 11EQ 12 12EQ 13

13EQ MS MS-IN MS-OUT PRODEQ (CONTINUED)

STREAM ID		11	11EQ	12	12EQ	13
13EQ	MS	MS-IN	MS-OUT	PRODEQ		
COMPONENTS: STD CUM/HR						
		1.7747-25	1.7747-25	0.0	0.0	
3.0925	3.0932	0.0	0.0	0.0	3.0932	
		0.0	0.0	6.4544-02	6.4544-02	
6.4544-02	6.4544-02	0.0	0.0	0.0	6.4544-02	
		4.2559-03	4.2559-03	4.2559-03	4.2559-03	
4.2770	4.2778	0.0	0.0	0.0	4.2740	
		1.1723-10	1.1723-10	1.5090-02	1.5090-02	
1.5090-02	1.5090-02	0.0	0.0	0.0	1.5090-02	
		4.5128	4.5128	4.4356	4.4356	
2.8723-02	2.7806-02	0.0	0.0	0.0	2.7806-02	
		0.4884	0.4884	0.5047	0.5047	
0.5047	0.5047	0.0	0.0	0.0	0.5047	
		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	3.2346-03		
		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.9293	0.9293	0.9293	0.0		
		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	37.1766	37.1766	37.1766	0.0		
		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	6.9201	6.9201	6.9201	0.0		
		5.0055	5.0055	5.0243	5.0243	
7.9826	7.9832	45.0260	45.0260	45.0260	7.9826	
COMPONENTS: STD VOL FRAC						
		3.5456-26	3.5456-26	0.0	0.0	
0.3874	0.3875	0.0	0.0	0.0	0.3875	
		0.0	0.0	1.2846-02	1.2846-02	
8.0856-03	8.0849-03	0.0	0.0	0.0	8.0856-03	
		8.5025-04	8.5025-04	8.4707-04	8.4707-04	
0.5358	0.5359	0.0	0.0	0.0	0.5354	
		2.3420-11	2.3420-11	3.0033-03	3.0033-03	
1.8903-03	1.8902-03	0.0	0.0	0.0	1.8903-03	
		0.9016	0.9016	0.8828	0.8828	
3.5982-03	3.4830-03	0.0	0.0	0.0	3.4833-03	
		9.7577-02	9.7577-02	0.1005	0.1005	
6.3231-02	6.3226-02	0.0	0.0	0.0	6.3231-02	
		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	4.0521-04		
		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	2.0639-02	2.0639-02	2.0639-02	0.0		
		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.8257	0.8257	0.8257	0.0		

SODIU-02		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.1537	0.1537	0.1537	0.0		0.0
TOTAL CUM/HR		5.0055	5.0055	5.0243	5.0243	
7.9826	7.9832	45.0260	45.0260	45.0260	7.9826	
TOTAL FLOW:						
KMOL/HR		86.2463	86.2463	87.0446	87.0446	
144.7868	144.7988	349.1066	349.1066	349.1066	144.7728	
KG/HR		4044.2687	4044.2687	4044.2687	4044.2687	
4044.2687	4044.2687	2.8450+04	2.8450+04	2.8450+04	4044.2687	
CUM/HR		1668.2842	4396.3592	1673.4781	4646.6653	
7740.4287	7741.0725	103.3000	103.2998	99.0544	7740.3120	
STATE VARIABLES:						
TEMP C		360.0000	350.0000	356.1720	496.4583	
496.4583	496.4583	525.0000	524.9966	443.2815	496.5208	
PRES BAR		2.7000	1.0133	2.7000	1.1965	
1.1965	1.1965	3.0000	3.0000	3.0000	1.1965	
VFRAC		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	
1.0000	1.0000	0.0	0.0	0.0	1.0000	
LFRAC		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	1.0000	1.0000	1.0000	0.0		
SFRAC		0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0		
ENTHALPY:						
KJ/KMOL		-2.3044+05	-2.3153+05	-2.2833+05	-2.1109+05	-
1.0297+05	-1.0295+05	9.7723+04	9.7722+04	8.3496+04	-1.0297+05	
KJ/KG		-4914.3402	-4937.5323	-4914.3402	-4543.3861	-
3686.2943	-3686.1159	1199.1596	1199.1520	1024.5789	-3686.1159	
KW		-5520.8090	-5546.8631	-5520.8090	-5104.0762	-
4141.2125	-4141.0120	9476.5838	9476.5237	8096.9271	-4141.0120	
ENTROPY:						
CAL/MOL-K		-40.5207	-38.9980	-39.9060	-32.4010	-
7.0541	-7.0519	344.4125	344.4122	338.3398	-7.0551	
CAL/GM-K		-0.8641	-0.8317	-0.8589	-0.6974	-
0.2525	-0.2525	4.2263	4.2263	4.1518	-0.2526	
DENSITY:						
KMOL/CUM		5.1698-02	1.9618-02	5.2014-02	1.8733-02	
1.8705-02	1.8705-02	3.3795	3.3795	3.5244	1.8704-02	
KG/CUM		2.4242	0.9199	2.4167	0.8704	
0.5225	0.5224	275.4083	275.4088	287.2127	0.5225	
AVG MW		46.8921	46.8921	46.4620	46.4620	
27.9326	27.9303	81.4928	81.4928	81.4928	27.9353	

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION (HIERARCHY: R-201)

PRODUCTS

STREAM ID PRODUCTS
FROM : SUB2-101
TO : \$C-2

SUBSTREAM: MIXED

PHASE: VAPOR

COMPONENTS: KMOL/HR

HYDROGEN	57.7422
PROPY-01	0.7982
ACETO-01	57.7476
DIISO-01	0.1064
ISOPR-01	0.3764
WATER	27.9639
DIACE-01	2.6010-02
SODIU-01	0.0
POTAS-01	0.0
SODIU-02	0.0

COMPONENTS: MOLE FRAC

HYDROGEN	0.3989
PROPY-01	5.5143-03
ACETO-01	0.3989
DIISO-01	7.3524-04
ISOPR-01	2.5998-03
WATER	0.1932
DIACE-01	1.7967-04
SODIU-01	0.0
POTAS-01	0.0
SODIU-02	0.0

COMPONENTS: KG/HR

HYDROGEN	116.4013
PROPY-01	33.5909
ACETO-01	3353.9857
DIISO-01	10.8750
ISOPR-01	22.6172
WATER	503.7774
DIACE-01	3.0213
SODIU-01	0.0
POTAS-01	0.0
SODIU-02	0.0

COMPONENTS: MASS FRAC

HYDROGEN	2.8782-02
PROPY-01	8.3058-03
ACETO-01	0.8293
DIISO-01	2.6890-03
ISOPR-01	5.5924-03
WATER	0.1246

DIACE-01	7.4706-04
SODIU-01	0.0
POTAS-01	0.0
SODIU-02	0.0
COMPONENTS: STD CUM/HR	
HYDROGEN	3.0925
PROPY-01	6.4544-02

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
STREAM SECTION (HIERARCHY: R-201)

PRODUCTS (CONTINUED)

STREAM ID	PRODUCTS
ACETO-01	4.2731
DIIISO-01	1.5090-02
ISOPR-01	2.8723-02
WATER	0.5047
DIACE-01	3.2340-03
SODIU-01	0.0
POTAS-01	0.0
SODIU-02	0.0
TOTAL CUM/HR	7.9820
COMPONENTS: STD VOL FRAC	
HYDROGEN	0.3874
PROPY-01	8.0862-03
ACETO-01	0.5353
DIIISO-01	1.8905-03
ISOPR-01	3.5985-03
WATER	6.3236-02
DIACE-01	4.0516-04
SODIU-01	0.0
POTAS-01	0.0
SODIU-02	0.0
TOTAL CUM/HR	7.9820
TOTAL FLOW:	
KMOL/HR	144.7607
KG/HR	4044.2687
CUM/HR	7739.6682
STATE VARIABLES:	
TEMP C	496.5208
PRES BAR	1.1965
VFRAC	1.0000
LFRAC	0.0
SFRAC	0.0
ENTHALPY:	
KJ/KMOL	-1.0299+05
KJ/KG	-3686.2943
KW	-4141.2125
ENTROPY:	
CAL/MOL-K	-7.0573
CAL/GM-K	-0.2526
DENSITY:	
KMOL/CUM	1.8704-02
KG/CUM	0.5225
AVG MW	27.9376

ACETONE PRODUCTION FROM ISOPROPANOL DEHYDROGENATION
PROBLEM STATUS SECTION

BLOCK STATUS

```
*****  
***  
*  
*  
* Calculations were completed normally  
*  
*  
* All Unit Operation blocks were completed normally  
*  
*  
* All streams were flashed normally  
*  
*  
* All Utility blocks were completed normally  
*  
*  
* All Convergence blocks were completed normally  
*  
*  
* All Sensitivity blocks were completed normally  
*  
*  
* All Calculator blocks were completed normally  
*  
*  
* All Property Tables were completed normally  
*  
*  
* Properties estimation was completed normally  
*  
*  
*  
*****  
***
```