

**UNIVERSIDAD DE LAS FUERZAS ARMADAS ESPE**

**DEPARTAMENTO DE CIENCIAS DE LA ENERGÍA Y MECÁNICA**

**CARRERA DE PETROQUÍMICA**

**Tema:**

**“OBTENCIÓN DE MOLÉCULAS DE SOLVENTE, O  
FORMULACIONES DE MEZCLAS DE GASOLINA”**

**AUTORA: ALBÁN BALSECA, LILIANA CECIBEL**

**TUTOR: TUZA ALVARADO, PABLO VINICIO D. Sc.**



**INTRODUCCIÓN**

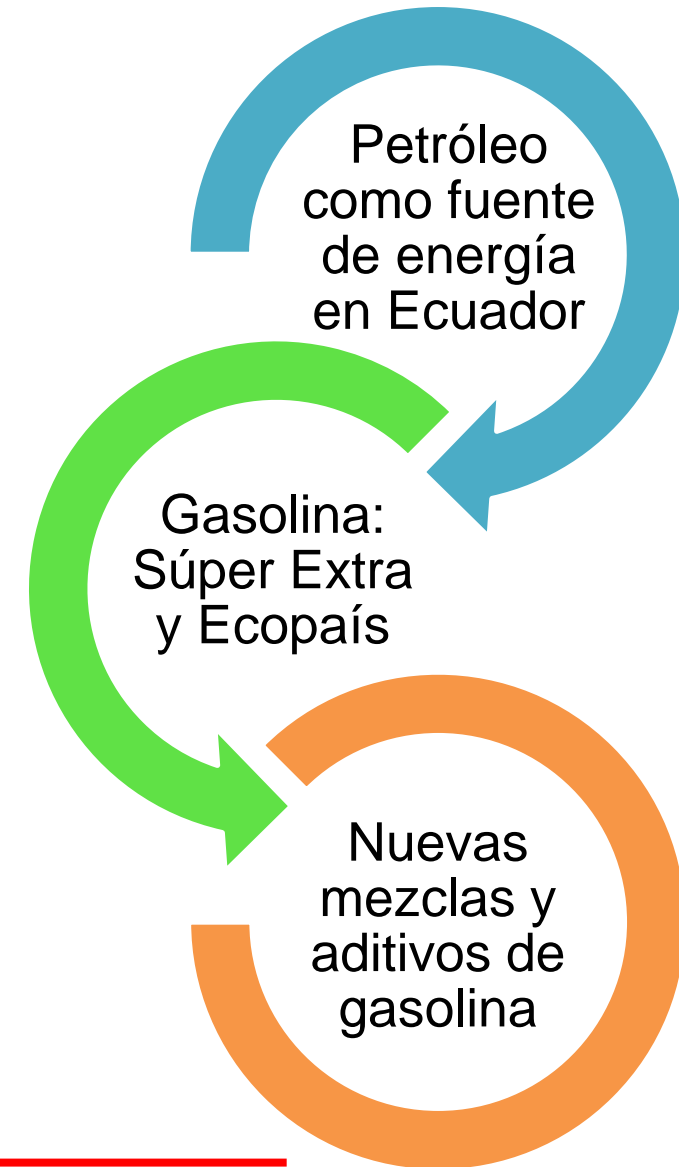
**OBJETIVOS**

**METODOLOGÍA**

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

**CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

# ANTECEDENTES



# PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA



**INTRODUCCIÓN**

**OBJETIVOS**

**METODOLOGÍA**

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

**CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

# OBJETIVOS

## OBJETIVO GENERAL

Obtener moléculas de solvente, o formulaciones de mezclas de gasolina.



# OBJETIVOS

## OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Colectar información de propiedades físicas de moléculas o grupos que permitan cumplir con las propiedades requeridas para un solvente o mezclas de gasolina.
- Obtener al menos una molécula nueva de solvente o una nueva mezcla de gasolina que presente características similares a las correspondientes reportadas en la literatura.



**INTRODUCCIÓN**

**OBJETIVOS**

**METODOLOGÍA**

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

**CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**



# METODOLOGÍA

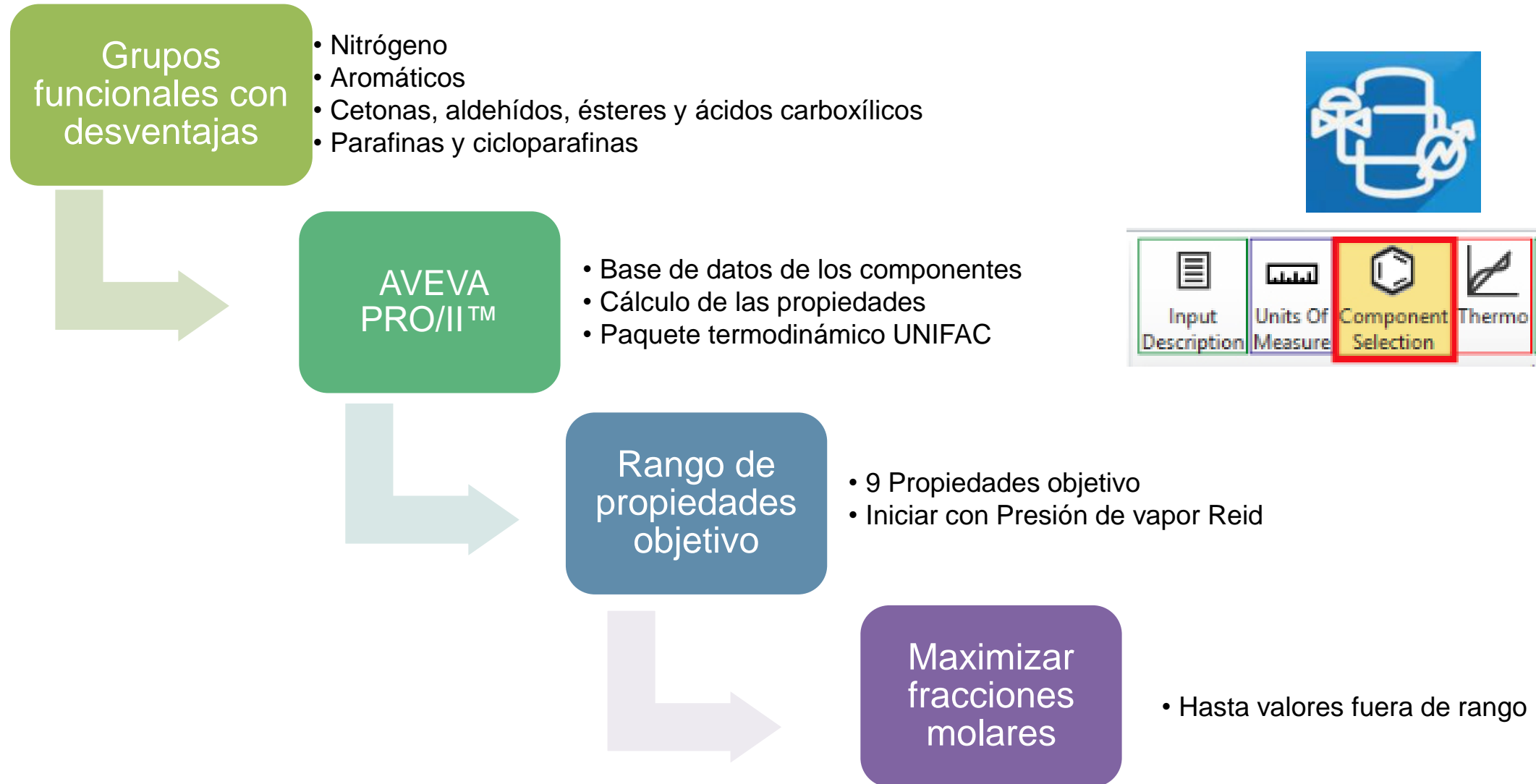
Definición del problema

Búsqueda en la literatura

Identificación del  
modelo de propiedad

Diseño de la mezcla  
y verificación

# Definición del problema



# Definición del problema

AVEVA PRO/II™

Función	Propiedad	Rango
Capacidad de ser quemado	Presión de Vapor Reid (kPa)	$45 \leq RVP \leq 60$
Inflamabilidad	Punto de inflamación de copa cerrada (K)	$T_f \leq 300$
Eficiencia del motor	Número de Octano	$RON \geq 92$
	Poder Calorífico Superior (kJ/mol)	$HHV \geq 4000$
Consistencia del flujo del combustible	Viscosidad (cP)	$0,30 \leq \eta \leq 0,60$
	Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	$0,720 \leq \rho \leq 0,775$
Toxicidad	Concentración Letal (mol/L)	$-\log(LC_{50}) < 3,08$
Estabilidad	Estabilidad	$\Delta G_{mix} < 0$
Aspecto ambiental	Contenido de Oxígeno (% p/p)	$2 \leq Wt_{O_2} \leq 20$

Método de contribución grupal

*Nota. Tomado de Systematic Methodology for Design of Tailor-Made Blended Products: Fuels and Other Blended Products (p.65) por N. A. Yunus, (2014), Technical University of Denmark.*

# Propiedades físicas de la gasolina

## Presión de vapor Reid (RVP)

- Es un ensayo empírico para determinar la presión, de los vapores o componentes livianos del crudo a una temperatura de 100 °F.

## Densidad

- Cantidad de masa por unidad de volumen.

## Viscosidad

- Se relaciona con fuerzas que se oponen al movimiento durante su fluidez y deformación.

# Propiedades físicas de la gasolina

## Poder calorífico superior (HHV)

- Es el calor liberado durante la combustión completa de una unidad de combustible

$$HHV = \sum_i^{NG1} N_i C_i + w \sum_i^{NG2} M_j D_j + z \sum_i^{NG3} O_k E_k$$

Diagrama de la ecuación de HHV con tres grupos de términos:

- 1ro:  $\sum_i^{NG1} N_i C_i$  (rojo)
- 2do:  $w \sum_i^{NG2} M_j D_j$  (azul)
- 3ro:  $z \sum_i^{NG3} O_k E_k$  (naranja)

## Punto de inflamación de copa cerrada ( $T_f$ )

- Es la temperatura más baja a la que un líquido puede formar una mezcla inflamable con oxígeno cerca de la superficie del líquido.

## Número de Octano de Investigación (RON)

- Representa el rendimiento durante la conducción del vehículo cuando la aceleración es relativamente frecuente.

# Propiedades físicas de la gasolina

## Concentración Letal ( $-\log LC_{50}$ )

- Estadística para sustancias de la que se puede esperar que cause muerte del 50% de animales durante la exposición por un límite de tiempo.

$$-\log_{10} LC_{50} = \sum_{i=1}^{ng} n_i \alpha_i$$

## Contenido de oxígeno ( $Wt_{O_2}$ )

- Se añaden especies oxigenadas para mejorar el octanaje y reducir el CO.

$$\%Wt_{O_2} = \frac{n \times PA_{O_2}}{PM_i} \times 100$$

## Estabilidad ( $\Delta G_{mix}$ )

- Comprueba la miscibilidad de fase de una mezcla líquida binaria.

$$\frac{\Delta G}{RT} = \frac{G^E}{RT} + \sum_i^{NC} x_i \ln(x_i) < 0$$

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_i^{NC} x_i \ln(\gamma_i)$$

**INTRODUCCIÓN**

**OBJETIVOS**

**METODOLOGÍA**

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

**CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

# Búsqueda en la literatura

Mezclas binarias repostadas por la literatura

Fracción molar		Componente	RVP (kPa)	Referencia
$x_{\text{Gasolina}}$	$x_{\text{componente}}$			
0,65	0,35	Metil etil éter	59,85	Knothe et al. (2010)
0,75	0,25	Dimetil éter	47,10	Semelsberger et al. (2006)
0,65	0,35	Dietil éter	59,61	Srivastva (2021)
0,61	0,39	Etil isopropil éter	48,48	Trainer (1960)
0,8	0,2	Metil isobutil éter	45,75	Smith & Gross (2012)
0,55	0,45	Metil terbutil éter	45,05	Herrera (2018)
0,91	0,09	Dimetilamina	60,01	Sinnott et al. (2019)
0,67	0,33	Isobutilamina	34,26	Maloney et al. (2014)
0,67	0,33	Isopropilamina	57,28	Heinemann & Heinemann, (1968)
0,42	0,58	Alilamina	45,39	Reid & Burgess (2015)
0,42	0,58	Terbutilamina	51,60	Fazal et al. (2016)
0,54	0,46	Metil terbutil éter	57,00	Yunus (2014)
0,54	0,46	Metil secbutil éter	49,00	Yunus (2014)
0,75	0,25	Metil Tetrahidrofurano	45,00	Yunus (2014)
0,81	0,19	Tetrahidrofurano	50,00	Yunus (2014)
0,92	0,08	Etanol	48,00	Yunus (2014)
0,68	0,32	Metil isopropil éter	58,22	Seider et al. (2017)



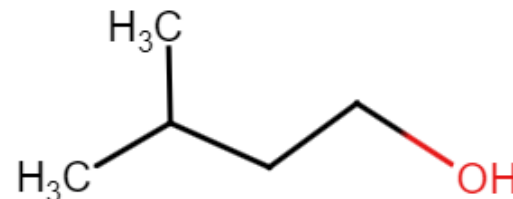
## Diseño de la mezcla ternaria

Fracción molar		Componente	HHV (kJ/mol)	$\eta$ (cP)	Wt <sub>O<sub>2</sub></sub> (%)	-Log (LC <sub>50</sub> ) (mol/L)	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	RVP (kPa)
$x_{\text{Gasolina}}$	$x_{\text{componente}}$							
0,6762	0,3238	Metil isopropil éter	4000	0,37	6,99	2,91	0,7246	78,67

Nota. Tomado de Product and Process Design Principles (4ta ed.) (p.107) por Seider, W. D., Seader, J., Lewin, D. R., & Widagdo, S. (2017), John Wiley & Sons, Inc.

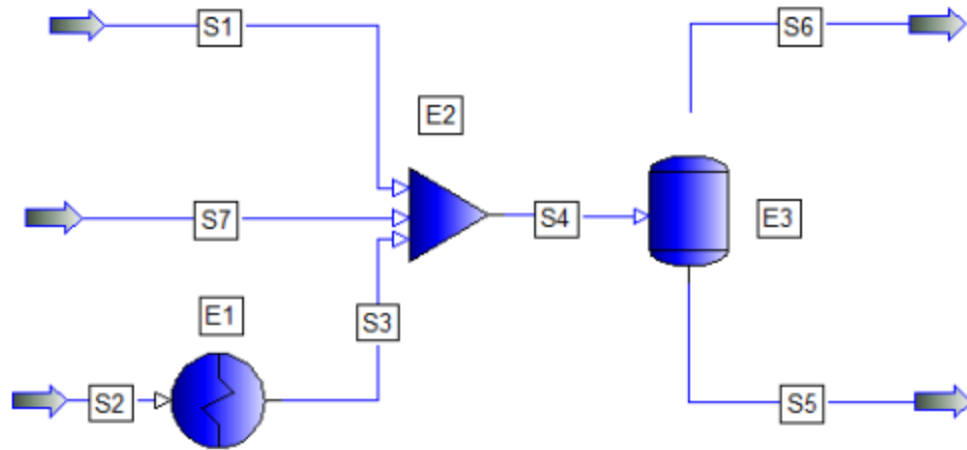


### Alcohol Isoamílico



Fracciones molares  
maximizadas para la  
mezcla ternaria

°n	Fracciones molares		
	$x_{\text{Gasolina}}$	$x_{\text{Metil isopropil éter}}$	$x_{\text{Alcohol isoamilico}}$
1	0,6718	0,3182	0,010
2	0,665	0,315	0,020
3	0,6582	0,3118	0,030
4	0,6515	0,3085	0,040
5	0,6447	0,3053	0,050
6	0,6379	0,3021	0,060
7	0,6243	0,2957	0,080
8	0,6175	0,2925	0,090
9	0,6107	0,2893	0,100
10	0,6073	0,2877	0,105
11	0,6072	0,2876	0,1052
12	0,6071	0,2876	0,1053
13	0,6071	0,2875	0,1054



## Curva de destilación ASTM D86

Assay data for stream S1

Distillation  
 True Boiling Point  
 **ASTM D86**  
 ASTM D1160  
 ASTM D2887

D86 Basis  
 Liquid Volume  
 Weight

Pressure: 101,325 kPa  
 Correct for Cracking  
 (Recommended for API 63 and Edmister-Okamoto Interconversion only)

Gravity Data  
 API Gravity  
 **Specific Gravity**  
 Watson K-Factor

Average: 0,75  
 Gravity Curve...

Cut	Percent Distilled	Temperature F
Copy		
Paste		
Insert		
Reset		
1	10	170,6
2	50	249,8
3	90	374
4	100	437
5		
6		
7		
8		
9		
10		

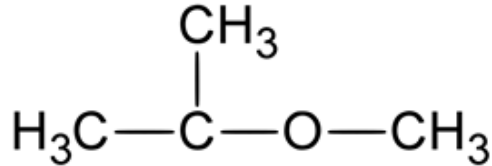
## UNIFAC

Propiedades	Corrientes			
	S1 <sup>a</sup>	S3 <sup>b</sup>	S7 <sup>c</sup>	S5 <sup>d</sup>
Temperatura (°C)	15,5	15,5	15,5	15,5
Flujo molar (lbmol/hr)	0,286	0,6071	0,1053	1,00
Presión (kPa)	55,50	14,11	0,20	28,11
RVP (psi)	12,65	4,20	-0,07	7,52
Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	0,72	0,75	0,81	0,75
Viscosidad (cP)	0,19	0,55	5,02	0,60
Punto de inflamación de copa cerrada (°C)	-39,04	-28,64	23,38	-29,05
Masa molecular (g/mol)	74,12	107,09	88,15	96,32
Fase de la corriente	líquido	Mezcla	líquido	líquido

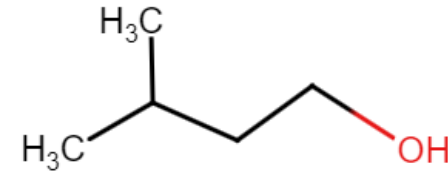
Nota. <sup>a</sup> Corriente del metil isopropil éter, <sup>b</sup> corriente de gasolina, <sup>c</sup> corriente del alcohol isoamílico, <sup>d</sup> Corriente del destilado de la mezcla.

# Poder calorífico superior (HHV)

$$HHV = \sum_i^{NG1} N_i C_i + w \sum_i^{NG2} M_j D_j + z \sum_i^{NG3} O_k E_k$$



Grupo	N <sub>i</sub>	C <sub>i</sub>	N <sub>i</sub> C <sub>i</sub>
CH <sub>3</sub>	3	710,682	2132,047
CH	1	580,845	580,845
O	1	-174,637	-174,637
<b>Total</b>			<b>2538,254</b>



Grupo	N <sub>i</sub>	C <sub>i</sub>	N <sub>i</sub> C <sub>i</sub>
CH <sub>3</sub>	2	710,68	1421,36
CH	1	580,84	580,84
CH <sub>2</sub>	2	652,84	1305,68
OH	1	-133,37	-133,37
<b>Total</b>			<b>3174,52</b>

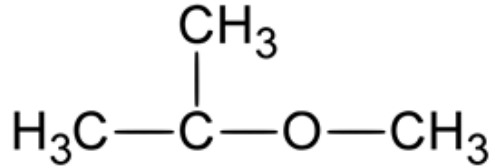
Regla de mezcla lineal

$$\zeta = \sum_{i=1}^n x_i \zeta_i$$

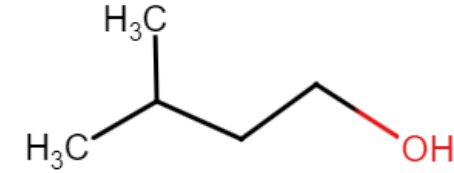
Componente	Fracción molar $x_i$	HHV puro $\zeta_i$	HHV (kJ/mol)
Metil isopropil éter	0,2876	2536,25	730,00
Alcohol isoamílico	0,1053	3174,52	334,28
Gasolina	0,6071	4883,44 <sup>a</sup>	346,73
<b>Total</b>			<b>4029,12</b>

# Concentración Letal

$$-\log_{10} LC_{50} = \sum_{i=1}^{ng} n_i \alpha_i$$



Grupo	$n_i$	$\alpha_i$	$n_i \alpha_i$
CH <sub>3</sub> -	3,00	0,62	1,85
-CH<	1,00	0,15	0,15
-O-	1,00	-0,24	-0,24
<b>Total</b>			<b>1,76</b>



Grupo	$n_i$	$\alpha_i$	$n_i \alpha_i$
CH <sub>3</sub> -	2,00	0,62	1,23
-CH <sub>2</sub> -	2,00	0,45	0,89
-CH<	1,00	0,15	0,15
-OH	1,00	-0,21	-0,21
<b>Total</b>			<b>2,07</b>

Regla de mezcla lineal

$$\zeta = \sum_{i=1}^n x_i \zeta_i$$

Componente	Fracción molar $x_i$	$-\log(LC_{50})$ puro $\zeta_i$	$-\log(LC_{50})$ (mol/L)
Metil isopropil éter	0,2876	1,76	0,51
Alcohol isoamílico	0,1053	2,07	0,22
Gasolina	0,6071	3,33 <sup>a</sup>	2,02
<b>Total</b>			<b>2,75</b>

# Contenido de Oxígeno

$$\%Wt_{O_2} = \frac{n \times PA_{O_2}}{PM_i} \times 100$$

Regla de mezcla lineal

$$\zeta = \sum_{i=1}^n x_i \zeta_i$$

Componente	Masa molecular (g/mol)	Fracción molar $x_i$	Wt <sub>O<sub>2</sub></sub> puro $\zeta_i$	Wt <sub>O<sub>2</sub></sub> (%)
Metil isopropil éter	74,122	0,2876	21,59	6,20
Alcohol isoamílico	88,150	0,1053	18,15	1,91
Gasolina	107,093	0,6071	0	0
			<b>Total</b>	<b>8,12</b>

## Propiedades objetivo de la mezcla de gasolina para todas fracciones maximizadas

n	Fracción molar			Propiedades objetivo						Observaciones
	$x_A$	$x_B$	$x_C$	RVP (KPa)	$\eta$ (cP)	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	-LogLC50 (mol/L)	HHV (kJ/mol)	Wt <sub>O2</sub> (%)	
1	0,6718	0,3182	0,01	57,47	0,42	0,74	2,82	4120,14	7,05	Dentro del rango
2	0,6650	0,3150	0,02	56,76	0,44	0,74	2,81	4110,59	7,16	Dentro del rango
3	0,6582	0,3118	0,03	56,76	0,44	0,75	2,80	4101,04	7,27	Dentro del rango
4	0,6515	0,3085	0,04	56,76	0,44	0,75	2,80	4091,49	7,39	Dentro del rango
5	0,6447	0,3053	0,05	54,82	0,49	0,75	2,79	4081,94	7,50	Dentro del rango
6	0,6379	0,3021	0,06	52,10	0,59	0,75	2,78	4072,39	7,61	Dentro del rango
7	0,6243	0,2957	0,08	52,10	0,59	0,75	2,77	4053,28	7,83	Dentro del rango
8	0,6175	0,2925	0,09	52,09	0,59	0,75	2,76	4043,73	7,95	Dentro del rango
9	0,6107	0,2893	0,10	52,09	0,59	0,75	2,75	4034,18	8,06	Dentro del rango
10	0,6073	0,2877	0,105	51,85	0,60	0,75	2,75	4029,40	8,12	Dentro del rango
11	0,6072	0,2876	0,1052	51,84	0,60	0,75	2,75	4029,2	8,12	Dentro del rango
12	0,6071	0,2876	0,1053	51,83	0,60	0,75	2,75	4029,12	8,12	Dentro del rango
13	0,6071	0,2875	0,1054	51,83	0,61 <sup>a</sup>	0,75	2,75	4029,02	8,12	Fuera del rango

Nota.  $x_A$ : Fracción molar de la gasolina,  $x_B$ : Fracción molar del Metil isopropil éter,  $x_C$ : Fracción molar del Alcohol isoamílico,

<sup>a</sup>Viscosidad de la mezcla n°13 fuera del rango proporcionado por la Tabla 2.

## Número de octano de Investigación (RON)

Regla de mezcla lineal

$$\zeta = \sum_{i=1}^n x_i \zeta_i$$

Componente	Fracción molar $x_i$	RON puro $\zeta_i$	RON
Metil isopropil éter	0,2876	105,00 <sup>a</sup>	30,20
Alcohol isoamílico	0,1053	98,80 <sup>b</sup>	10,40
Gasolina	0,6071	95,00 <sup>c</sup>	57,67
<b>Total</b>			<b>98,28</b>



## Pseudocomponentes de la gasolina

x: 0,6071

Componente	Fracción molar componente	Fracción molar componente en gasolina
Butano	0,11057	0,0671
Heptano	0,12281	0,0746
Iso-octano	0,46163	0,2803
1-penteno	0,05055	0,0307
Metilciclopentano	0,09830	0,0597
Tolueno	0,15614	0,0948

$$\frac{\Delta G}{RT} = \frac{G^E}{RT} + \sum_i^{NC} x_i \ln(x_i) < 0$$

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_i^{NC} x_i \ln(\gamma_i)$$

Mezcla binaria	$\sum_i^{NC} x_i \ln(\gamma_i)$	$\sum_i^{NC} x_i \ln(x_i)$	$\frac{\Delta G}{RT}$	Cumple
n-butano - Metil isopropil éter	0,1124	-0,5397	-0,4273	Si
n-butano - Alcohol isoamílico	0,1699	-0,4184	-0,2484	Si
Metil isopropil éter - Alcohol isoamílico	0,0986	-0,5954	-0,4968	Si

- 
- 
- 
- 

Mezcla binaria	$\sum_i^{NC} x_i \ln(\gamma_i)$	$\sum_i^{NC} x_i \ln(x_i)$	$\frac{\Delta G}{RT}$	Cumple
Tolueno - Metil isopropil éter	0,0753	-0,5817	-0,5064	Si
Tolueno - Alcohol isoamílico	0,1569	-0,4604	-0,3035	Si
Metil isopropil éter - Alcohol isoamílico	0,0986	-0,5954	-0,4968	Si

## Verificación basada en modelos

Propiedad	Rango	Valor
Fracción molar Metil isopropil éter	-	0,2876
Fracción molar Alcohol isoamílico	-	0,1053
Fracción molar Gasolina	-	0,6071
Presión de Vapor Reid (kPa)	$45 \leq RVP \leq 60$	51,83
Punto de inflamación de copa cerrada (K)	$T_f \leq 300$	234,11
Número de Octano	$RON \geq 92$	98,28
Poder Calorífico Superior (kJ/mol)	$HHV \geq 4000$	4029,01
Viscosidad (cP)	$0,30 \leq \eta \leq 0,60$	0,60
Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	$0,720 \leq \rho \leq 0,775$	0,75
Concentración Letal (mol/L)	$-\log(LC_{50}) < 3,08$	2,75
Estabilidad	$\Delta G_{mix} < 0$	Si
Contenido de Oxígeno (%)	$2 \leq Wt_{O_2} \leq 20$	8,12

Comparación de los resultados de mezcla candidata a gasolina con la mezcla reportada

Propiedad	Nueva mezcla	Mezcla reportada Seider et al. (2017)
Fracción molar Metil isopropil éter	0,2876	0,3238
Fracción molar Alcohol isoamílico	0,1053	-
Fracción molar Gasolina	0,6071	0,6762
Presión de Vapor Reid (kPa)	51,83	78,67
Punto de inflamación de copa cerrada (K)	234,11	-
Número de Octano	98,28	-
Poder Calorífico Superior (kJ/mol)	4029,01	4000
Viscosidad (cP)	0,60	0,37
Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	0,75	0,72
Concentración Letal (mol/L)	2,75	2,91
Estabilidad	Si	-
Contenido de Oxígeno (%)	8,12	6,99

**INTRODUCCIÓN**

**OBJETIVOS**

**METODOLOGÍA**

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

**CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

# CONCLUSIONES

- Se encontraron moléculas candidatas a mezcla con la gasolina como el metil isopropil éter y alcohol isoamílico que no han sido reportadas previamente por la bibliografía, la cual se determinó usando la base de datos de los componentes del simulador AVEVA PRO/II™. Al adicionar alcohol isoamílico a la mezcla binaria de metil isopropil éter con gasolina, evidenció una reducción en la presión de vapor Reid (RVP).
- La mezcla candidata de gasolina con porcentaje molar de 28,76% de metil isopropil éter, 10,53% de alcohol isoamílico, y 60,71% de gasolina y presenta 51,83 kPa de presión de vapor Reid, 234,11 K para el punto de inflamación de copa cerrada, 4029,12 kJ/mol de poder calorífico superior, 0,60 cP y 0,75 g/cm<sup>3</sup> correspondientes a la viscosidad y densidad. Además, presenta 2,75 mol/L como medida de concentración letal, 98,28 de número de octano de investigación y 8,12% de contenido de oxígeno.
- El análisis de estabilidad de la mezcla binaria mostró miscibilidad entre los componentes de la gasolina, el alcohol isoamílico y el metil isopropil éter.

# CONCLUSIONES

- El método de contribución grupal calcula valores aproximados de las propiedades de los componentes que no están disponibles en la literatura o en el simulador AVEVA PRO/II™, como el metil isopropil éter y el alcohol isoamílico entre otros, usando la estructura molecular de la especie química.
- En la simulación AVEVA PRO/II™, el paquete termodinámico UNIFAC permitió estimar propiedades como la presión de vapor Reid, viscosidad, punto de inflamación de copa cerrada y la realización del Test de estabilidad.
- La base de datos de Pro/II no permitió encontrar mezclas binarias candidatas a gasolina que no hayan sido reportadas en la literatura usando el criterio de la presión de vapor Reid.

# RECOMENDACIONES

- Evaluar la nueva mezcla de gasolina obtenida bajo condiciones experimentales con un motor combustión interna de encendido a chispa optimizando las propiedades con diversos procesos, con el fin de comparar las propiedades teóricas obtenidas.
- Realizar un análisis económico de la mezcla metil isopropil éter, alcohol isoamílico y gasolina para todas las fracciones maximizadas por la presente investigación.
- Se propone evaluar el impacto ambiental que genera la nueva mezcla de gasolina mediante la examinación de los límites permitidos de emisiones de contaminantes producidos como el monóxido de carbono y óxidos de nitrógeno sustentados en la Norma Técnica Ecuatoriana.

# BIBLIOGRAFÍA

Agencia de Regulación y Control de Energía y Recursos Naturales no Renovables [ARC]. (2021, November 11). *Precios de combustibles*. Gobierno de La República Del Ecuador.

<https://www.controlrecursosyenergia.gob.ec/precios-combustibles/>

Agencia para Sustancias Tóxicas y el Registro de Enfermedades [ATSDR]. (2022). *ToxFAQs-Óxidos de nitrógeno (monóxido de nitrógeno, dióxido de nitrógeno, etc.) (Nitrogen Oxides)*. Departamento de Salud y Servicios Humanos EE.UU. [https://www.atsdr.cdc.gov/es/toxfaqs/es\\_tfacts175.html](https://www.atsdr.cdc.gov/es/toxfaqs/es_tfacts175.html)

Alkidas, A. (1980). Heat Transfer Characteristics of a Spark-Ignition Engine. *Ironmaking and Steelmaking*, 102, 189–193. <https://doi.org//10.1115/1.3244258>

AVEVA. (2020). *User Manual AVEVA™ SimSci PRO/II Process Engineering (Version 10.2)* [Computer software]. AVEVA™ PRO/II™ Simulation. <https://www.aveva.com/en/products/pro-ii-simulation/>



# BIBLIOGRAFÍA

Banco Central del Ecuador. (2021). *Reporte del sector petrolero: IV Trimestre del 2020*. <https://www.bce.ec/>

Empresa Nacional del Petróleo. (2022). *Presión de Vapor Reid (RVP)*.

[https://www.enap.cl/pag/237/1116/p\\_t](https://www.enap.cl/pag/237/1116/p_t)

EP Petroecuador. (2022). *Cifras Institucionales y Estados Financieros del Sector Hidrocarburífero del Ecuador* . <https://www.eppetroecuador.ec/?p=3721>

Gil Chaves, I., Guevara López, J., García Zapata, L., & Leguizamón Robayo, A Rodríguez Niño, G. (2016).

*Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering* (1st ed.). Cham: Springer.

[https://doi.org/10.1007/978-3-319-14812-0\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-14812-0_1)

GlobalPetrolPrices. (2022). *Los precios de la gasolina y el diesel por país* .

<https://es.globalpetrolprices.com/>

# BIBLIOGRAFÍA

- Hukkerikar, A. S., Kalakul, S., Sarup, B., Young, D. M., Sin, G., & Gani, R. (2012). Estimation of environment-related properties of chemicals for design of sustainable processes: Development of group-contribution+ (GC +) property models and uncertainty analysis. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 52(11), 2823–2839. <https://doi.org/10.1021/ci300350r>
- Marrero, J., & Gani, R. (2002). Group-contribution-based estimation of octanol/water partition coefficient and aqueous solubility. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 41(25), 6623–6633. <https://doi.org/10.1021/ie0205290>
- Seider, W. D., Lewin, D. R., Seader, J. D., Widagdo, S., Gani, R., & Ng, K. M. (2017). *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation* (4th ed.). John Wiley & Sons, Inc.
- Yunus, N. A. B. (2014). *Systematic Methodology for Design of Tailor-Made Blended Products: Fuels and Other Blended Products (tesis doctoral)*. Technical University of Denmark, Department of Chemical and Biochemical Engineering.

# GRACIAS