

**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**

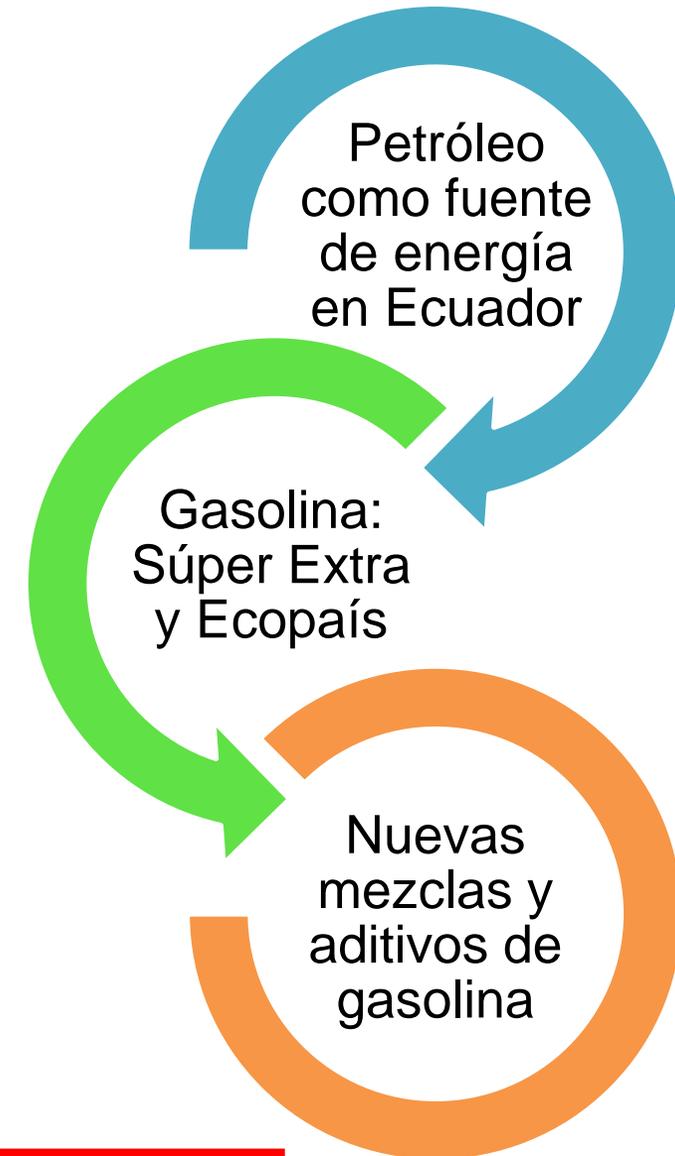
**OBJETIVOS**

**METODOLOGÍA**

**ANÁLISIS DE RESULTADOS**

**CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES**

# ANTECEDENTES



# PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

- Disminución de reservas del petróleo
- Calentamiento global
- Crecimiento del sector automotriz
- Fluctuación de los precios
- Diseño de mezclas de gasolina con ventaja competitiva al mercado actual

**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

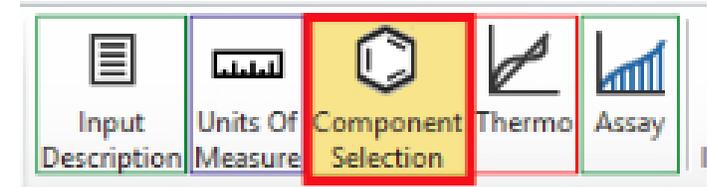
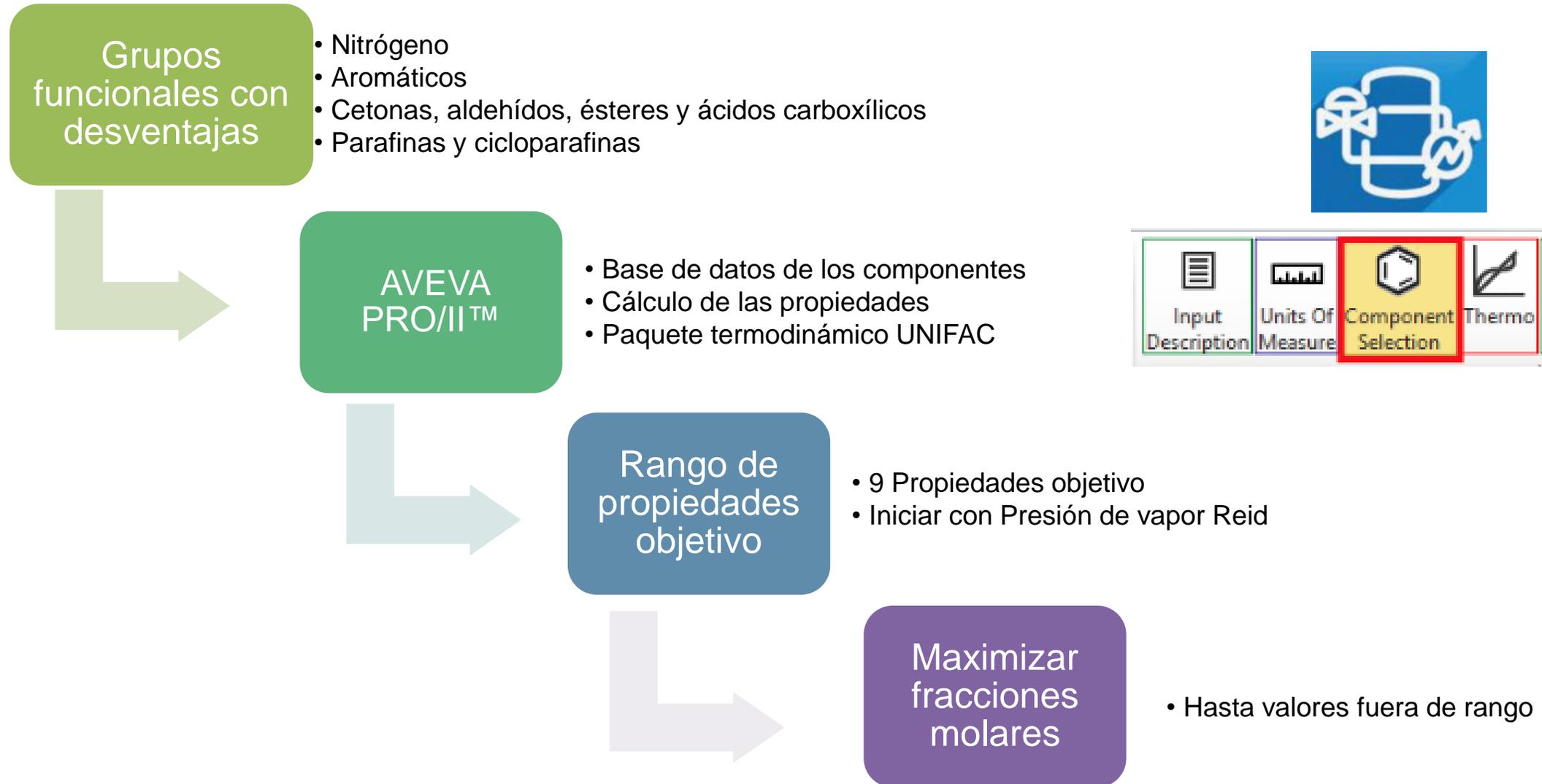
Definición del problema

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<br>(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)          |

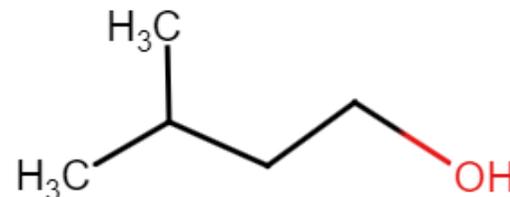
## Diseño de la mezcla ternaria

| Fracción molar        |                         | Componente           | HHV<br>(kJ/mol) | $\eta$<br>(cP) | Wt <sub>O<sub>2</sub></sub><br>(%) | -Log (LC <sub>50</sub> )<br>(mol/L) | $\rho$<br>(g/cm <sup>3</sup> ) | RVP<br>(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.

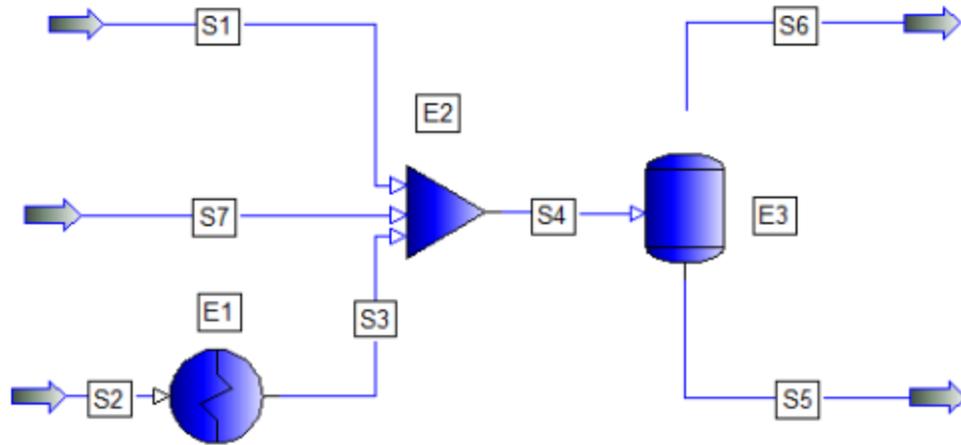


### Alcohol Isoamílico



Fracciones molares  
maximizadas para la  
mezcla ternaria

| °n | Fracciones molares    |                                   |                                 |
|----|-----------------------|-----------------------------------|---------------------------------|
|    | $x_{\text{Gasolina}}$ | $x_{\text{Metil isopropil éter}}$ | $x_{\text{Alcohol isoamílico}}$ |
| 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                          |



UNIFAC

## 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     |                   |               |

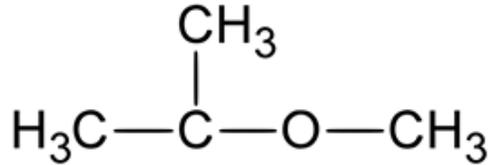


| Propiedades                               | Corrientes      |                 |                 |                 |
|---|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
|   | S1 <sup>a</sup> | S3 <sup>b</sup> | S7 <sup>c</sup> | S5 <sup>d</sup> |
| Temperatura (°C)                          | 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         |

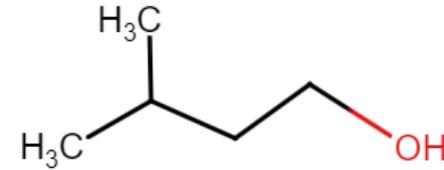
Nota. <sup>a</sup> Corriente del metil isopropil éter, <sup>b</sup> corriente de gasolina, <sup>c</sup> corriente del alcohol isoamílico, <sup>d</sup> Corriente del destilado de la mezcla.

# 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>                |

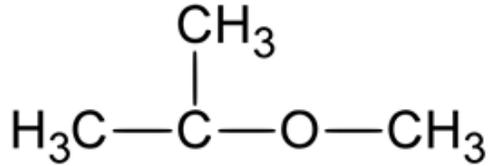
Regla de mezcla lineal

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

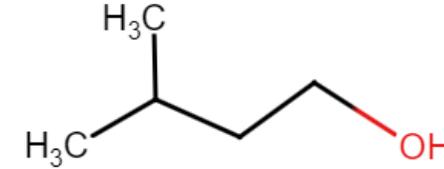
| Componente           | Fracción molar<br>$x_i$ | HHV puro<br>$\zeta_i$ | HHV<br>(kJ/mol) |
|----------------------|-------------------------|-----------------------|-----------------|
| Metil isopropil éter | 0,2876                  | 2536,25               | 730,00          |
| Alcohol isoamílico   | 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<br>$x_i$ | $-\log(LC_{50})$ puro<br>$\zeta_i$ | $-\log(LC_{50})$<br>(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<br>(g/mol) | Fracción molar<br>$x_i$ | Wt <sub>O<sub>2</sub></sub> puro<br>$\zeta_i$ | Wt <sub>O<sub>2</sub></sub><br>(%) |
|----------------------|---------------------------|-------------------------|---|------------------------------------|
| 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<br>$x_i$ | RON puro<br>$\zeta_i$ | 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