



Revista EIA
ISSN 1794-1237
e-ISSN 2463-0950
Año XIX/ Volumen 19/ Edición N.38
Junio-Diciembre de 2022
Reia3809 pp. 1-16

Publicación científica semestral
Universidad EIA, Envigado, Colombia

**PARA CITAR ESTE ARTÍCULO /
TO REFERENCE THIS ARTICLE /**

Cardona Palacio, L. F. (2022).
Modelación de la viscosidad dinámica
de Fluidos Newtonianos a partir de la
Teoría de Eyring y la Energía Libre de
Helmholtz Residual.
Revista EIA, 19(38), Reia3809.
pp. 1-16. [https://doi.org/10.24050/
reia.v19i38.1535](https://doi.org/10.24050/reia.v19i38.1535)

✉ *Autor de correspondencia:*

Cardona Palacio, L. F. (Luis Fernando):
Ingeniero Químico, Magíster en
Ingeniería, Magíster en Matemáticas
Aplicadas, Doctor en Ingeniería.
Correo electrónico:
luis.cardonapa@amigo.edu.co

Recibido: 02-06-2021
Aceptado: 22-11-2021
Disponible online: 01-06-2022

Modelación de la viscosidad dinámica de Fluidos Newtonianos a partir de la Teoría de Eyring y la Energía Libre de Helmholtz Residual

LUIS FERNANDO CARDONA PALACIO¹

1. Universidad Católica Luis Amigó

Resumen

En este trabajo se modela la viscosidad dinámica de fluidos newtonianos a partir de la teoría de Eyring junto con la energía libre de Helmholtz residual. Para la estimación de esta energía se utiliza una versión modificada de la ecuación cúbica de estado de Peng-Robinson. Los datos pseudo-experimentales han sido obtenidos a partir de dos bases de datos (DIPPR y NIST) más utilizadas en el desarrollo de modelos termodinámicos, donde los datos de la DIPPR son utilizados para obtener los parámetros y generalización del modelo y la NIST para evaluar las capacidades predictivas de la generalización. Los parámetros ajustables del modelo se han determinado a partir de datos en la zona coexistencia líquido-vapor para n-alcanos y n-alcoholes. Posteriormente estos parámetros se han generalizado utilizando expresiones matemáticas simples que dependen del peso molecular de cada sustancia. Se evalúan las capacidades predictivas del modelo en condiciones de una sola fase líquida y vapor. Las desviaciones absolutas durante el proceso de correlación son menores de 3,27%, mientras que en el proceso de predicción son menores de 5,60%. El modelo generalizado es extendido a mezclas binarias utilizando una regla de mezcla simple sin y con coeficientes de interacción. Los datos experimentales de mezclas binarias son obtenidos de diferentes trabajos desarrollados en la literatura, con desviaciones absolutas de 8,19% (sin coeficientes de interacción binaria) y 3,45% (con coeficientes de interacción binaria), respectivamente. Finalmente, el modelo es comparado con otros en la literatura utilizando un análisis de varianza que logre establecer si hay una diferencia estadísticamente significativa entre las desviaciones de los modelos utilizados en la comparación. Los resultados estadísticos muestran que el modelo desarrollado en este trabajo proporciona resultados aceptables.

Palabras clave: viscosidad, energía libre de Helmholtz, ecuación de estado, sustancias puras, mezclas, Peng-Robinson, teoría de Eyring, saturación, líquido, vapor, alcanos, alcoholes.

Modeling the dynamic viscosity of Newtonian Fluids using the Eyring's Theory and the Residual Helmholtz Free Energy

Abstract

In this work, the dynamic viscosity of Newtonian fluids is modeled using Eyring's theory and the residual Helmholtz free energy. In order to estimate this energy, a modified Peng-Robinson cubic equation of state is applied. The pseudo-experimental data have been obtained from two databases (DIPPR and NIST databses) most commonly used in the development of thermodynamic models, where DIPPR data are used to obtain the parameters and generalization of the model and the NIST data are used to evaluate the predictive capabilities of the generalization procedure. The adjustable parameters of the model have been determined from data in the liquid and vapor coexistence for n-alkanes and n-alcohols. Later these parameters have been generalized using simple mathematical expressions that depend on the molecular weight of each substance. The predictive capabilities of the model are evaluated in the liquid and vapor single-phases. The absolute deviations during the correlation process are below 3.27%, while in the prediction process they are below 5.60%. The generalized model is extended to binary mixtures using a simple mixture rule with one interaction parameter. The experimental data of the mixtures are obtained from different literature works and the absolute deviations are around 8.19% (without binary interaction coefficients) and 3.45% (with binary interaction coefficients). Finally, the model is compared with others in the literature using an analysis of variance in order to establish if there is a statistically significant difference between the deviations of the models used in the comparison. The statistical results show that the model developed in this work provides acceptable results.

Key Words: viscosity, Helmholtz free energy, equation of state, pure substances, mixtures, Peng-Robinson, Eyring's theory, saturated, liquid, vapor, alkanes, alcohols.

1. Introducción

La problemática ambiental relacionada con la contaminación de agua, aire y suelo son un tema de interés mundial ya que afecta la salud y el bienestar de los seres humanos. Por lo tanto, uno de los mayores desafíos de la sociedad en estos momentos es tener procesos ambientalmente amigables que mitiguen el impacto ambiental. Por tal motivo, es un momento clave para que los ingenieros logren generar nuevos procesos o mejorar los ya existentes para disminuir la contaminación. En el diseño y optimización de procesos es fundamental el conocimiento de las propiedades fisicoquímicas y de transporte. En particular, la viscosidad es una propiedad de transporte requerida en el diseño de diferentes equipos como separadores, torres de destilación, reactores, intercambiadores de calor, entre otros. Para realizar una apropiada predicción de esta propiedad se tienen diferentes modelos, entre los que se destacan los teóricos, semi-teóricos, empíricos Bonyadi y Rostami (2017) y redes neuronales e inteligencia artificial Valderrama, Muñoz y Rojas (2011).

Los modelos teóricos son desarrollados a partir de termodinámica estadística y son utilizados en condiciones de fase vapor, sin embargo, al extenderlos a fase líquida proporcionan resultados no adecuados. Los modelos semi-teóricos son

desarrollados principalmente a partir de la teoría de Eyring Martins, Cardoso y Barcia (2003), al realizar diferentes aproximaciones a la energía de activación y tienen la ventaja de que sus parámetros se pueden determinar utilizando datos experimentales. No obstante, se tienen pocos modelos generalizados. Los modelos empíricos se fundamentan en la observación experimental tal como el concepto de similitud geométrica Valderrama, Cardona y Rojas (2019), no obstante modelos multiparámetros son usualmente obtenidos. Finalmente, las redes neuronales e inteligencia artificial se basan en la capacidad de aprendizaje y predicción de los sistemas biológicos Valderrama, Muñoz y Rojas (2011). No obstante, los modelos obtenidos tienen muchos parámetros.

Una alternativa para describir la viscosidad dinámica de fluidos newtonianos es utilizar la teoría de Eyring (modelo semi-teórico) junto con la energía libre de Helmholtz residual. Este modelo se originó a partir de las formulaciones presentadas por Martins, Cardoso y Barcia (2003) quienes relacionaron la energía de activación con la energía libre de Helmholtz residual. Los autores utilizaron las ecuaciones cúbicas de estado de Peng-Robinson, Soave-Redlich-Kwong y Peng-Robinson-Stryjek-Vera Valderrama (2003) para estimar la energía de Helmholtz residual de un conjunto de sustancias principalmente conformada por hidrocarburos. Los resultados indicaron que las desviaciones fueron similares y menores de 1,30% para las tres ecuaciones cúbicas de estado en condiciones de alta presión. Años más tarde, Liu, et al. (2017) realizaron una modificación a la ecuación propuesta por Martins, Cardoso y Barcia (2003) con el propósito de mejorar el desempeño del modelo en condiciones de baja temperatura y presión. Estos autores analizaron 30 fluidos utilizando la ecuación de Soave-Redlich-Kwong Valderrama (2003) en un intervalo de temperatura entre 65 K y 460 K y presiones superiores de 253,1 MPa con desviaciones promedio de 3,70%. De acuerdo con una revisión realizada en la literatura no se tienen más estudios sobre este modelo y no se han evaluado la capacidad de generalización y su extensión a mezclas.

En el presente trabajo se generaliza el modelo de viscosidad de Liu, et al. (2017) utilizando expresiones matemáticas simples. A partir de datos de saturación se estiman las constantes asociadas a los parámetros y se valida en condiciones diferentes a saturación. Posteriormente, se extiende el modelo a mezclas utilizando una regla de mezcla simple sin parámetros de interacción binaria y con los parámetros calculados a partir de datos experimentales. Finalmente, se compara el modelo generalizado con otros en la literatura científica.

2. Marco teórico y metodología

A continuación, se expone el modelo de viscosidad, la ecuación de estado y la metodología propuesta en la presente investigación:

2.1. Modelo de viscosidad

El modelo semi-empírico obtenido a partir de la teoría de Eyring desarrollado por Liu, et al. (2017) es utilizado en este trabajo y su expresión matemática es:

$$\mu = \mu_0 \left[1 + \exp(a_1 + b_1 T_r^{c_1}) P + \exp(a_2 + b_2 T_r^{c_2}) P^2 \right] \exp\left(\frac{A^R}{RT}\right) \quad (1)$$

En la Ecuación (1), μ es la viscosidad en Pa·s, μ_0 es la viscosidad del gas diluido en Pa·s, T es la temperatura en Kelvin, P es la presión en Pascal (Pa), R es la constante de los gases ideales en $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ y A^R es la energía libre de Helmholtz residual (A^R en $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$). Además, A^R se estimada como: $A^R_{(T,P)} = A_{(T,P)} - A^{Gl}_{(T,P)}$ y A^{Gl} es la energía libre de Helmholtz en la condición de gas ideal. En particular, para este trabajo A^R se calcula a partir de una modificación de la ecuación de estado de Peng-Robinson propuesto por Forero y Velásquez. (2019). Para el cálculo de la viscosidad de gas diluido se utiliza la ecuación de Chung et al. Poling, Prausnitz y O’Connell (2001). Las propiedades críticas, el factor acéntrico y el momento dipolar necesarios para el modelo de Chung et al. Poling, Prausnitz y O’Connell (2001) son obtenidos a partir de los valores recomendados como aceptados por la base de datos de la DIPPR Daubert (1998). El modelo de viscosidad dinámica es consistente en unidades, donde: A^R está en $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}$, T en Kelvin, P en Pa, μ y μ_0 en Pa·s, $a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2$ son adimensionales.

2.2 Modelo de ecuación de estado

Para calcular propiedades termodinámicas, los ingenieros emplean ecuaciones de estado (EoS) ya que les posibilita representar el equilibrio de fases en amplios intervalos de temperatura y presión y al mismo tiempo se pueden calcular propiedades térmicas y volumétricas. Entre los diferentes enfoques de ecuaciones de estado que se han desarrollado en los últimos años se encuentran las ecuaciones cúbicas del tipo van der Waals. Estas ecuaciones semi-empíricas son las más utilizadas por los ingenieros para realizar predicciones semicuantitativas de equilibrio de fases, simular y diseñar diferentes tipos de procesos químicos Valderrama (2003). La popularidad de estas ecuaciones se debe a su simplicidad, la cual permite realizar cálculos rápidos y relativamente confiables en amplios intervalos de temperatura y presión. Recientemente, Forero y Velásquez (2019) desarrollan una versión modificada de la ecuación de Peng-Robinson y ha sido generalizada y aplicada en el diseño de procesos industriales Benabithe, et al. (2020). Los resultados reportados muestran las excelentes capacidades predictivas del modelo tanto para sustancias puras como su extensión a mezclas. Por estas razones se ha seleccionado la versión modificada de la ecuación de estado de Peng-Robinson para describir la energía libre de Helmholtz residual de sustancias puras. En la Tabla 1 se muestra un resumen del modelo de ecuación de estado.

Tabla 1. Ecuaciones matemáticas del modelo de ecuación de estado PVT.
Fuente: Forero y Velásquez (2019).

Descripción	Ecuaciones matemáticas	Nº
Forma explícita de la EoS	$P = \frac{RT}{v+c-b} - \frac{a}{v^2 + 2v(c+b) + c^2 + 2cb - b^2}$	(A1)
Parámetros de la EoS	$a_i = a_{ci}\alpha_i = 0,45723553 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}} \exp \left[H_{i1} \left(1 - \left(\frac{T}{T_{ci}} \right)^{H_{21}} \right) \right]$ $b_i = 0,07779607 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}}$ $c_i = [v_{PR} - v_{EXP}]_{T_{ci}^{\#}=0,7}$	(A2)
Ecuaciones generalizadas	$\omega_i = -1 - \log \frac{p^{sat}}{p_c} \Big _{T_r=0,7}, \quad \chi_i = \log \frac{p^{sat}}{p_c} \Big _{T_r=0,6} + 1,7\omega_i + 1,552$ $H_{21} = \frac{\gamma_{ci}}{\beta_{ci} - 1} + \beta_{ci}; \quad H_{11} = \frac{\beta_{ci} - 1}{H_{21}}$ $\beta_{ci} = 1,34695 + 1,49228\omega_i + 1,4252\chi_i - 0,12039\omega_i^2 + 2,8166\chi_i^2 + 0,312707\omega_i\chi_i$ $\gamma_{ci} = -0,37592 - 1,44144\omega_i + 6,20445\chi_i - 0,67473\omega_i^2 + 15,586\chi_i^2 - 0,70582\omega_i\chi_i$	(A3)
Ecuación de la energía libre de Helmholtz residual	$A^R = \Delta H^R - P\Delta V^R - T\Delta S^R$	(A4)

El modelo reportado en la Tabla 1 se encuentra generalizado a partir del factor acéntrico (ω , adimensional) y el factor polar de Halm-Stiel, x Forero y Velásquez (2019). De las ecuaciones listadas en la Tabla 1 se tienen las siguientes características: 1) el subíndice i representa la sustancia a evaluar; 2) la función alfa (α_i , ver Tabla 1 fila 3) es aquella propuesta por Heyen Valderrama (2003) donde H_{1i} y H_{2i} corresponden a los parámetros ajustables; 3) el parámetro de traslación, c_p , se calcula como la diferencia entre el volumen molar no trasladado y el volumen experimental a $T_r^L = 0,7$ ($T_r = T/T_c$, donde T es la temperatura y T_c es la temperatura crítica en Kelvin); 4) el factor de compresibilidad (Z , ver Tabla 1 fila 5) se estima como $Z = P \cdot v \cdot R^{-1} \cdot T^{-1}$; 5) La energía libre de Helmholtz residual (ver Tabla 1, fila 5) depende de la entalpía residual (Δ^{HR}), volumen molar residual (Δ^{VR}) y la entropía residual (Δ^{SR}), para su estimación se recurre a diferentes expresiones matemáticas que son obtenidas a partir de un proceso de derivación e integración descrito en diferentes textos de termodinámica Poling, Prausnitz y O'Connell (2001) Elliott y Lira (2012); 6) el modelo es consistente en unidades, donde T es la temperatura en Kelvin, P es la presión en kPa, w, c, Z son adimensionales, v es el volumen molar en $\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1}$, A^R en $\text{kJ} \cdot \text{kmol}^{-1}$.

2.3 Metodología

La siguiente metodología es desarrollada en este trabajo y se detalla a continuación:

2.3.1. Selección de datos

El modelo de viscosidad requiere de 6 parámetros que dependen de la fase (líquida o vapor) que se encuentre la sustancia y deben ser determinados utilizando datos experimentales. Los datos son clasificados en tres categorías así: 1) un primer conjunto de datos de saturación obtenidos a partir de los valores reportados como recomendados y aceptados por la base de datos de la DIPPR Daubert (1998); 2) un segundo grupo conformado por datos en la región de una sola fase (tanto líquida como vapor) a partir de los valores reportados por la base de datos de la NIST-REFPROP 8 Lemmon, et al. (2007); 3) el último grupo lo conforman los datos experimentales de mezclas obtenidas por la información reportada por diferentes autores en la literatura. Los datos obtenidos a partir de cualquiera de estas dos bases de datos son conocidos como datos *pseudo-experimentales* y han utilizados ampliamente en procesos de validación y generación de nuevos modelos termodinámicos Varzandeh, Stenby y Yan (2017) Cardona, Forero y Velásquez (2019) Bloxham, et al. (2020) Forero y Velásquez (2019). Las sustancias trabajadas en esta investigación corresponden a n-alcanos y n-alcoholes que son de importancia en la industria química y petroquímica en la formación de compuestos oxigenados como aditivos en la gasolina. Estos compuestos (alcoholes) se utilizan como potenciadores del octano en la gasolina en lugar de plomo generando una reducción de las emisiones contaminantes principalmente de monóxido de carbono Pouloupoulos y Philippopoulos (2003). Para los n-alcanos se toman las sustancias desde el metano hasta el eicosano y para n-alcoholes desde el metanol hasta el 1-tetradecanol. Las incertidumbres experimentales varían entre el 5% y 10%. Aquellas sustancias con incertidumbres experimentales reportadas por la base de datos de la DIPPR superiores al 10% no se tienen en cuenta para el proceso de determinación de parámetros. Estos valores de incertidumbre son obtenidos a partir de la información recopilada por cada uno de los autores que proporcionan los datos experimentales como los materiales y métodos, el tipo de dato y el proceso de experimentación en cuanto a las incertidumbres de los equipos de medición Bloxham, et al. (2020).

2.3.2. Determinación de parámetros

Para la determinación de los 6 parámetros que tiene el modelo sólo se toman los datos de saturación. Se utilizan 22 datos (11 para líquido y 11 para vapor) igualmente espaciados. Para cada valor de temperatura y presión de saturación se estima la energía libre de Helmholtz residual (A^R en kJ/kmol) asociada al modelo propuesto por Liu, et al. (2017). El proceso de optimización se da a partir del método del Gradiente Reducido Generalizado Lasdon, et al. (1978), junto con la siguiente función objetivo a minimizar dada por la siguiente ecuación matemática:

$$F.O. = \frac{1}{NS} \sum_{j=1}^{NS} \left[\frac{1}{ND_j} \sum_{i=1}^{ND_j} \left| \frac{\mu_{exp_i} - \mu_{cal}(\vec{X})_i}{\mu_{exp_i}} \right| \right] \quad (2)$$

Donde $\mathbf{X} = \{a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2\}$. En la Ecuación (2), $F.O.$ es la suma total de la desviación absoluta relativa de la viscosidad de la fase líquida o vapor, NS es el número de sustancias, ND_j es el número de datos de viscosidad de cada sustancia, μ_{exp} y μ_{cal} representan las viscosidades experimental y calculada y \mathbf{X} es el vector de parámetros del modelo que depende de cada sustancia (i) y de la fase (líquido o vapor). Además, se estima la desviación absoluta relativa ($AAD\mu$, Ecuación (3)), la desviación relativa ($AD\mu$, Ecuación (4)), el valor máximo de la desviación absoluta relativa ($MD\mu$, Ecuación (5)), así:

$$AAD\mu = \frac{100}{ND} \sum_{i=1}^{ND} \left| \frac{\mu_{cal} - \mu_{exp}}{\mu_{exp}} \right| \quad (3)$$

$$AD\mu = \frac{100}{ND} \sum_{i=1}^{ND} \left(\frac{\mu_{cal} - \mu_{exp}}{\mu_{exp}} \right) \quad (4)$$

$$MD\mu = \text{valor máximo de } 100 \cdot \left| \frac{\mu_{cal} - \mu_{exp}}{\mu_{exp}} \right| \quad (5)$$

2.3.3 Proceso de generalización

Inicialmente, se determinan los parámetros del modelo iguales para ambas fases. Los valores iniciales se toman como el promedio de los valores iniciales de las sustancias comunes reportadas por Liu, et al. (2017) y las $AAD\mu$ con estos valores se encuentran entre 76,55% y 150,83%. Al realizar el proceso de optimización, los valores de $AAD\mu$ para la fase líquida es de 2,85% mientras para la fase vapor es de 1876,16%, es decir, el modelo solo es capaz de describir una fase. Para solucionar lo anteriormente expuesto diferentes autores plantean utilizar parámetros diferentes para cada fase Fan y Wang (2006) Cardona, Forero y Velásquez (2019). En este trabajo se toman valores diferentes de los parámetros tanto para la fase líquida como vapor a partir del proceso de optimización detallado en los párrafos anteriores. Con el conjunto de parámetros óptimos se grafican en términos del peso molecular. El peso molecular es

un descriptor molecular simple de estimar y es utilizado para generalizar modelos de transporte (viscosidad o conductividad térmica) Poling, Prausnitz y O'Connell (2001). Para la fase líquida los parámetros a_2 , b_2 y c_2 tienen un comportamiento constante mientras que los parámetros a_1 , b_1 y c_1 tienen un comportamiento cuadrático (polinomio de grado 2, $y_i = m \cdot M^2 + n \cdot M + p$ donde $y_i = \{a_i, b_i, c_i\}$ y m, n, p son constantes de la ecuación). Por otro lado, todos los parámetros en fase vapor son constantes para todas las sustancias. Posteriormente, se realiza de nuevo el proceso de minimización utilizando la función objetivo dada por la Ecuación (2) y estimando para todas las sustancias los valores de m, n, p, a_2, b_2 y c_2 . En la Tabla 2 se muestra los valores de las constantes del modelo generalizado de viscosidad. A este conjunto de valores de los parámetros ajustados se le conoce como proceso de correlación.

Tabla 2. Tabla de generalización de los parámetros del modelo de viscosidad.
Fuente: elaboración propia.

Familia orgánica	Parámetros	Fase líquida			Fase vapor
		m	n	p	Constantes
n-alcanos	a_1	$-1,5139 \cdot 10^{-4}$	$5,7904 \cdot 10^{-2}$	-27,4748	-26,6605
	b_1	$1,2046 \cdot 10^{-4}$	$-4,0432 \cdot 10^{-2}$	12,1720	6,6636
	c_1	$1,1081 \cdot 10^{-5}$	$-5,3451 \cdot 10^{-3}$	-0,6589	-0,9077
	a_2	0	0	$-3,6879 \cdot 10^1$	-44,7848
	b_2	0	0	6,0586	5,7075
	c_2	0	0	-1,1411	-1,1377
n-alcoholes	a_1	$-1,0919 \cdot 10^{-4}$	$5,3776 \cdot 10^{-2}$	-28,0629	-26,6537
	b_1	$1,1570 \cdot 10^{-4}$	$-5,3468 \cdot 10^{-2}$	13,1003	6,6970
	c_1	$1,2109 \cdot 10^{-5}$	$-6,2134 \cdot 10^{-3}$	$-9,1851 \cdot 10^{-1}$	-0,9039
	a_2	0	0	-39,7920	-44,7848
	b_2	0	0	$-2,6818 \cdot 10^{-1}$	5,7075
	c_2	0	0	-3,2011	-1,1378
metano	a_1	0	0	-21,9287	-26,6605
	b_1	0	0	7,3086	6,6636
	c_1	0	0	-1,0252	-0,9077
	a_2	0	0	-37,6408	-44,7848
	b_2	0	0	5,7188	5,7075
	c_2	0	0	-1,1717	-1,1377
metanol	a_1	0	0	-22,4616	-26,6537
	b_1	0	0	7,6524	6,6970
	c_1	0	0	-1,3248	-0,9039
	a_2	0	0	-51,1136	-44,7848
	b_2	0	0	6,5847	5,7075
	c_2	0	0	-1,1363	-1,1378

2.3.4. Predicción del modelo en la región de una sola fase

Con los valores estimados de los parámetros óptimos se analiza la capacidad que tiene el modelo en realizar predicción en condiciones diferentes a la de saturación. Es importante aclarar que los datos experimentales son obtenidos de la base de datos de la NIST-REFPROP 8 y corresponden a condiciones de líquido y vapor en la región monofásica. El rango de temperaturas evaluados se encuentra entre 95 K y 440 K y presiones entre 0,1 kPa y 9800 kPa.

2.4. Extensión del modelo a mezclas

El modelo generalizado de viscosidad es extendido a mezclas binarias utilizando la regla de mezcla simple propuesta por Grunberg y Nissan Poling, Prausnitz y O'Connell (2001) y la expresión matemática se ilustra en la Ecuación 6.

$$\ln \mu_m = x_1 \ln \mu_1 + x_2 \ln \mu_2 + x_1 x_2 G_{12} \quad (6)$$

Donde $G_{12} \neq 0$, $G_{12} = 0$. En la Ecuación (6), μ_m es la viscosidad de la mezcla en Pa•s, μ_i es la viscosidad del componente puro en Pa•s, x_i es la composición de la sustancia i (adimensional). La Ecuación (6) tiene dos términos que representan lo ideal y no ideal. El primer término está relacionado con el concepto de solución ideal en razón que cada uno de los componentes de la mezcla le aporta a la misma, la viscosidad de manera individual y proporcional a la cantidad de componente de la solución Poling, Prausnitz y O'Connell (2001). El segundo término está relacionado con la no idealidad y tiene un parámetro de interacción G_{12} . G_{12} presenta valores constantes para mezclas del tipo polar/no-polar (ej. alcano/alcohol) y no-polar/no-polar (ej. alcano/alcano), en este trabajo se evalúa la regla de mezcla sin parámetros de interacción ($G_{12}=0$) y con parámetros de interacción estimados a partir de datos experimentales ($G_{12} \neq 0$). Los datos experimentales son obtenidos a partir de diferentes autores en la literatura y corresponden alcano/alcano Assael, et al. (1992) Abdulagatov y Azizov (2006) Chevalier, Petrino y Gaston-Bonhomme (1990), alcohol/alcano Sastry y Raj (1996) Sastry y Valand (1998), alcohol/alcohol Kumagai y Yokoyama (1998) Cano-Gómez, et al. (2015) Hussein y Asfour (2009) y corresponden aquellos trabajos que reporten una incertidumbre experimental inferior a 5%.

3. Resultados

Se exponen a continuación los resultados obtenidos tanto en la zona de saturación, en la región monofásica y en mezclas binarias.

3.1. Resultados en la condición de saturación

En la Tabla 3 se muestran el conjunto de sustancias utilizadas en el proceso de correlación. En esta Tabla la columna 2 y 3 hace referencia a los intervalos de temperatura y presión, las columnas 4-6 a las desviaciones obtenidas para el líquido saturado y 7-9 a vapor saturado. En total, 660 datos en la curva de coexistencia líquido y vapor son utilizados durante la correlación (330 datos para el líquido saturado y 330 datos para el vapor saturado). En general, las desviaciones absolutas promedio obtenidas en la zona de líquido saturado ($AAD\mu$) son de 3,27% ($MD\mu=15,30\%$), mientras que en vapor saturado son de 3,24% ($MD\mu=10,23\%$). Por otro lado, las desviaciones relativas promedio ($AD\mu$) tomando ambas fases (líquida y vapor) son de 1,28%. En la Figura 1 se ilustra la capacidad de correlación del modelo para describir los datos reportados por la DIPPR Daubert (1998). Los resultados presentados en la Tabla 3 y Figura 1 muestran las apropiadas capacidades del modelo para describir la viscosidad con bajas desviaciones promedio.

3.2. Resultados en la región de una sola fase

Se evalúa la capacidad que tiene el modelo en realizar predicciones en condiciones diferentes al ajuste. Para tal fin se toman los datos *pseudo-experimentales* reportados como recomendados y aceptados por la NIST-REFPROP Lemmon, et al. (2007) tanto en fase líquida como vapor. En la Tabla 4 se muestran los intervalos de temperatura, presión y viscosidad y las desviaciones discretizadas dependiendo de la fase (líquido o vapor) para cada sustancia. En total, 780 datos *pseudo-experimentales* son utilizados en el proceso de predicción donde 390 datos corresponden al líquido y 390 datos al vapor. Los resultados muestran que las desviaciones absolutas promedio en la fase líquida son de 5,60% ($MD\mu=19,93\%$), mientras que en fase vapor son de 2,74% ($MD\mu=8,18\%$). La desviación relativa promedio se encuentra entre -2,10% (fase líquida) y -1,96% (fase vapor), valores que tienden a cero, lo que implica que los errores se encuentran bien distribuidos entre valores positivos y negativos. La Figura 2 ilustra las capacidades predictivas del modelo. A partir de todos los resultados anteriores se evidencia que el modelo generalizado es capaz de describir la viscosidad dinámica de n-alcenos y n-alcoholes con una baja desviación.

Tabla 3. Intervalos de temperatura, presión y desviaciones en la curva de coexistencia de líquido y vapor para n-alcenos. Fuente: elaboración propia.

Sustancia	Intervalos de temperatura y presión		Desviaciones de líquido saturado			Desviaciones de vapor saturado		
	ΔT (K)	ΔP (kPa)	$AD\mu$	$AAD\mu$	$MD\mu$	$AD\mu$	$AAD\mu$	$MD\mu$
metano	92,72 - 115,59	15,09 - 138,35	0,07	0,19	0,63	0,73	0,73	1,70
etano	152,66 - 244,26	12,03 - 1100,17	-0,47	0,94	3,88	0,74	0,74	2,25
propano	203,41 - 314,36	24,65 - 1409,58	-3,18	4,09	5,44	0,85	1,32	3,76
butano	191,3 - 382,61	0,96 - 1830,37	4,50	4,51	13,45	-0,38	2,17	4,93
pentano	281,82 - 422,73	35,8 - 1580,44	4,02	4,03	10,95	-0,63	1,84	3,60
hexano	314,71 - 370,55	39,75 - 228,45	-1,53	5,29	10,99	-3,25	3,25	3,39
heptano	324,12 - 405,15	19,58 - 247,84	-0,27	6,02	11,83	0,39	0,39	0,78
octano	284,35 - 352,59	0,82 - 22,8	6,38	6,38	7,26	3,99	3,99	4,56
nonano	327,03 - 398,38	2,95 - 48,97	2,46	2,54	3,76	3,63	3,63	4,88
decano	339,74 - 413,86	2,12 - 39,53	0,30	0,52	0,84	1,72	1,72	2,46
undecano	351,45 - 428,13	1,58 - 32,9	-0,49	0,57	2,11	3,11	3,11	4,32
dodecano	361,9 - 440,86	1,17 - 27,11	-2,42	2,42	3,77	4,07	4,07	5,67
tridecano	371,25 - 452,25	0,85 - 22,29	-5,62	5,62	8,31	6,46	6,46	8,13
tetradecano	381,15 - 464,31	0,68 - 19,35	0,08	0,75	2,08	7,33	7,33	9,10
pentadecano	389,4 - 474,36	0,51 - 16,21	-0,56	0,64	2,35	6,10	6,10	8,02
hexadecano	397,65 - 484,41	0,41 - 14,08	0,80	0,92	1,53	1,71	1,72	3,80
heptadecano	404,8 - 493,12	0,3 - 11,71	2,80	2,80	3,55	3,84	3,84	5,98
octadecano	410,85 - 500,49	0,23 - 9,9	3,85	3,85	4,75	2,58	2,58	4,66
nonadecano	416,9 - 507,86	0,18 - 8,45	-0,48	0,68	2,51	1,61	1,64	3,67
eicosano	422,4 - 514,56	0,13 - 7,03	-4,04	4,04	6,99	0,72	1,13	2,75
metanol	256,25 - 410	1,23 - 1000,96	-0,04	0,80	2,79	1,78	1,78	3,14
etanol	257 - 411,2	0,47 - 715,27	1,60	1,60	5,31	-4,10	4,10	6,18
1-pentanol	264,65 - 323,46	0,02 - 1,93	-7,21	7,21	15,30	2,68	2,68	3,44
1-hexanol	305,15 - 366,18	0,18 - 8,19	-7,27	7,27	11,72	1,54	1,54	1,77
1-heptanol	303,65 - 366,91	0,05 - 3,92	3,56	4,01	6,01	4,90	4,90	5,54
1-octanol	293,63 - 358,88	0,01 - 1,14	1,91	2,69	3,77	4,67	4,67	5,51
1-nonanol	301,82 - 368,89	0,005 - 0,961	-0,27	0,62	1,34	3,96	3,96	4,87
1-undecanol	316,62 - 365,87	0,003 - 0,185	-2,34	7,64	15,11	-0,92	0,92	0,99
1-tridecanol	344,98 - 403,7	0,01 - 0,47	5,65	5,65	13,10	8,96	8,96	10,23
1-tetradecanol	351,09 - 410,85	0,01 - 0,39	0,09	3,92	10,49	5,99	5,99	6,22
general	92,72 - 514,56	0,003 - 1830,37	0,06	3,27	15,30	2,49	3,24	10,23

Figura 1. Comparación entre las viscosidades de líquido calculadas y experimentales durante el proceso de correlación en la zona de saturación. La línea sólida corresponde al modelo generalizado y los círculos, cuadrados y rectángulos corresponden a datos experimentales. a) líquido saturado, b) vapor saturado. Fuente: elaboración propia.

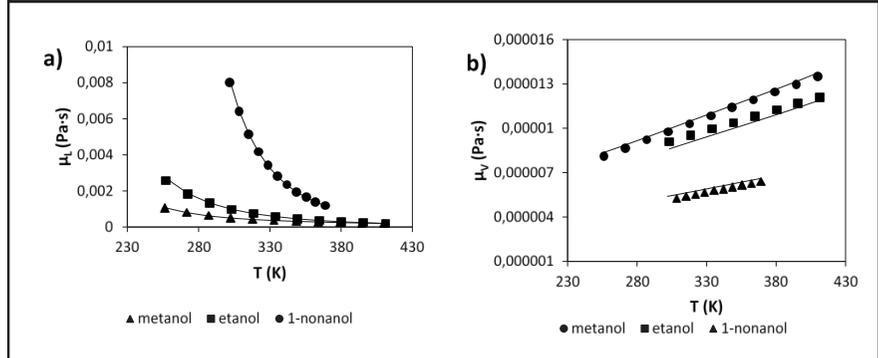
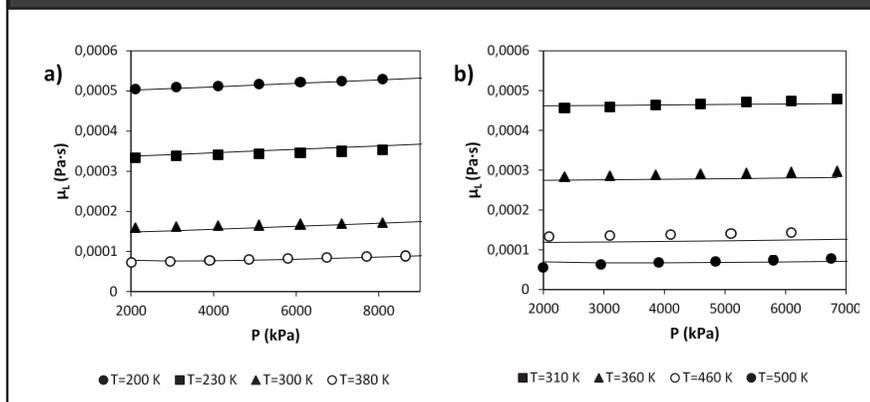


Tabla 4. Intervalos de temperatura, presión y desviaciones en la región monofásica de líquido y vapor. Fuente: elaboración propia.

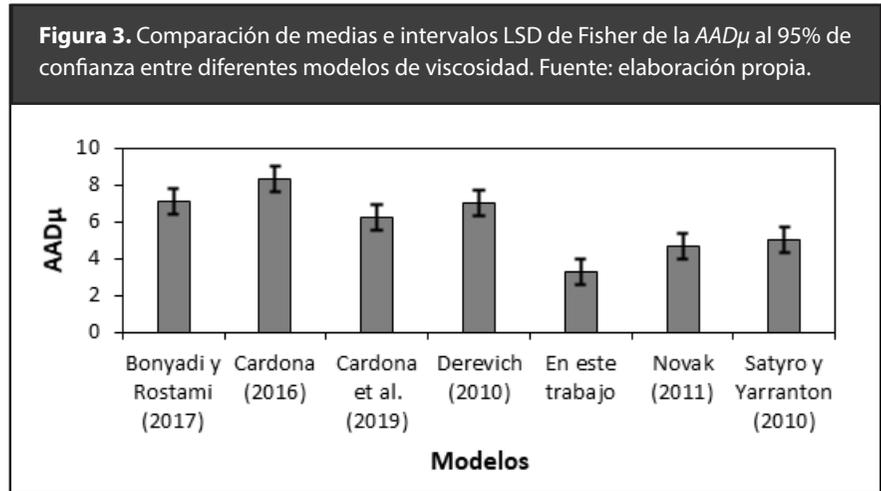
Sustancia	Intervalos de temperatura y presión		Desviaciones en fase líquida			Desviaciones en vapor	
	ΔT (K)	ΔP (kPa)	AD μ	AAD μ	MD μ	AD μ	AAD μ
metano	95 - 180	1 - 9700	-2,48	3,32	10,07	-1,19	1,20
etano	130 - 250	0,1 - 9800	2,33	8,39	19,72	-1,67	1,72
propano	190 - 340	1 - 9100	-2,26	5,47	14,07	0,63	1,19
butano	200 - 380	0,1 - 9600	-1,05	2,51	11,24	-0,06	0,60
pentano	250 - 420	1 - 9600	1,27	8,64	15,81	-2,91	2,91
hexano	290 - 340	1 - 8650	2,60	3,39	9,30	-5,06	5,06
heptano	300 - 360	1 - 7750	2,48	3,02	7,85	-2,33	2,33
octano	300 - 550	1 - 9600	-0,71	2,22	5,34	-4,09	4,09
nonano	300 - 398	0,1 - 5500	-4,69	4,82	10,63	-4,11	4,11
decano	300 - 400	0,1 - 5500	-7,66	7,66	10,98	-5,39	5,39
dodecano	350 - 440	0,1 - 4600	-9,35	9,35	13,17	1,44	1,44
metanol	250 - 460	0,1 - 18400	-1,62	6,66	17,68	2,43	2,43
etanol	250 - 420	0,1 - 9100	-6,15	7,36	19,93	-3,21	3,21
general	95 - 550	0,1 - 18400	-2,10	5,60	19,93	-1,96	2,74

Figura 2. Comparación entre las viscosidades de líquido calculadas y experimentales durante el proceso de correlación en la zona monofásica. La línea sólida corresponde al modelo generalizado y los círculos, cuadrados y rectángulos corresponden a datos experimentales. a) butano y b) octano. Fuente: elaboración propia.



3.3. Discusión

Con el propósito de comparar los resultados obtenidos con otros modelos existentes en la literatura se realiza un análisis de varianza de la $AAD\mu$ para establecer si hay una diferencia estadísticamente significativa entre las $AAD\mu$ de los modelos utilizados en la comparación. Los modelos utilizados en la comparación son: Bonyadi y Rostami (2017), Cardona (2016), Cardona, Forero y Velásquez (2019), Derevich (2010), Novak (2011) y Satyro y Yarranton (2010). La comparación es realizada utilizando las mismas sustancias, n-alcános entre 1 y 10 carbonos y para modelos que han sido generalizados. La Figura 3 ilustra los resultados de este análisis. Las barras de error corresponden a los intervalos de LSD de Fisher, donde si un par medias son iguales sus intervalos se solapan el 95% de las veces, en caso contrario (medias que no se solapan) el par de medias tienen una diferencia estadísticamente significativa con un nivel de significancia del 5%. De los resultados de la Figura 3 se observan dos grupos. Un primer grupo conformado por los modelos de Bonyadi y Rostami (2017), Cardona (2016), Cardona, Forero y Velásquez (2019) y Derevich (2010), y un segundo grupo formado por los modelos propuestos por Novak (2011), Satyro y Yarranton (2010) y el desarrollado en este trabajo. Los modelos que pertenecen a cada grupo no presentan diferencias estadísticamente significativas al 95% de nivel de confianza. No obstante, entre el primer y el segundo grupo se tienen diferencias estadísticamente significativas, siendo los modelos que pertenecen al segundo grupo los que presentan menores valores de $AAD\mu$. No obstante, los modelos de Novak (2011) y Satyro y Yarranton (2010) son aplicables a hidrocarburos y no ha sido extendido a alcoholes. El autor ha verificado que se cumplen los supuestos de normalidad y homocedasticidad requeridos para la realización de esta prueba. Trabajos futuros son necesarios para extender el modelo a más familias orgánicas como alquenos, aromáticos, cetonas, ésteres, entre otros.



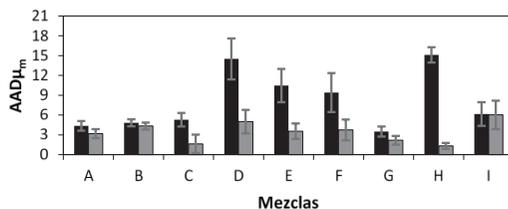
3.4. Extensión del modelo a mezclas

El modelo se extiende a mezcla binarias utilizando la ecuación propuesta por Grunberg y Nissan Poling, Prausnitz y O'Connell (2001). En total, 9 mezclas son estudiadas que representan 330 datos experimentales. Las mezclas incluyen sistemas formados por alcano/alcano, alcohol/alcano y alcohol/alcohol. El rango de temperaturas varía entre 273,15 K y 473,46 K y presiones entre 100 kPa y 71740 kPa en todo el rango de composición (x_1 entre 0 y 1). En la Tabla 5 se observan las mezclas estudiadas en esta investigación junto con las desviaciones con $G_{12} = 0$ y $G_{12} \neq 0$. Las desviaciones absolutas promedio sin coeficientes de interacción son de 8,19% con un valor máximo de 24,38%. Al calcular los coeficientes de interacción las desviaciones absolutas disminuyen hasta un valor de 3,45% con un valor máximo de 13,72%. Este comportamiento se ilustra en la Figura 4. En conclusión, para las mezclas evaluadas del tipo alcohol/alcano y alcohol/alcohol son necesarias las estimaciones del coeficiente de interacción binaria para mejorar la precisión del modelo.

Tabla 5. Intervalos de temperatura, presión y desviaciones de utilizando la regla de mezcla de Grunberg y Nissan. Fuente: elaboración propia.

Mezcla	N	ΔT (K)	ΔP (kPa)	Δx _i	Sin parámetros de interacción, $G_{12}=0$			Con parámetros de interacción, $G_{12} \neq 0$			
					ARD μ_m	AARD μ_m	MD μ_m	G_{12}	ARD μ_m	AARD μ_m	MD μ_m
(1) heptano+ (2) hexano	62	303,15-323,23	100-71740	0,36-0,67	-3,26	4,37	12,29	0,1325	-0,31	3,2	9,67
(1) heptano+ (2) octano	122	298,15-473,46	100-10000	0,28-0,79	-2,39	4,84	10,93	0,1300	0,27	4,34	10,39
(1) hexano+ (2) octano	9	298,15-298,15	100	0,1-0,9	5,3	5,30	7,89	-0,2165	1,2	1,64	5,72
(1) 1-heptanol+ (2) hexano	22	303,15-317,15	100	0,03-0,96	13,77	14,5	24,38	-0,7366	1,58	5,01	13,29
(1) 1-heptanol+ (2) heptano	22	303,15-317,15	100	0,04-0,97	9,24	10,46	22,33	-0,5960	-0,35	3,56	10,22
(1) metanol+ (2) pentano	11	298,15-298,15	100	0-1	7,78	9,42	14,53	-0,5091	-0,26	3,76	7,51
(1) metanol+ (2) etanol	28	273,15-333,15	100	0-1	-3,17	3,52	6,45	0,2191	-0,52	2,19	6,45
(1) etanol+ (2) 1-heptanol	36	293,15-308,15	100	0,1-0,9	-15,11	15,11	19,89	0,8664	-0,55	1,34	6,35
(1) 1-heptanol+ (2) 1-undecanol	18	293,15-298,15	100	0,12-0,89	0,06	6,17	12,65	0,0866	1,71	6,03	13,72
General	330	273,15-473,46	100-71740	0-1	1,36	8,19	24,38		0,31	3,45	13,72

Figura 4. Desviaciones absolutas relativas promedio de cada mezcla utilizando la ecuación de Grunberg y Nissan. ■: sin coeficientes de interacción ($G_{12}=0$), ■: con coeficientes de interacción ($G_{12} \neq 0$). Las barras de error indican el intervalo al 95% de confianza de la AAD μ_m . Fuente: elaboración propia.



- A) (1) heptano+(2) hexano
- B) (1) heptano+ (2) octano
- C) (1) hexano+ (2) octano
- D) (1) 1-heptanol+(2) hexano
- E) (1) 1-heptanol+(2) heptano
- F) (1) metanol+(2) pentano
- G) (1) metanol+(2) etanol
- H) (1) etanol+(2) 1-heptanol
- I) (1) 1-heptanol+(2) 1-undecanol

4. Conclusiones

De acuerdo con los resultados presentados en este trabajo, se pueden extraer las siguientes conclusiones: 1) Los parámetros del modelo han sido generalizados utilizando el peso molecular de n-alcános y n-alcoholes; 2) Las desviaciones absolutas relativas promedio durante el proceso de correlación para la fase líquida son de 3,27% ($MD\mu=15,30\%$), mientras que para la fase vapor son de 3,24% ($MD\mu=10,23\%$); 3) Las desviaciones absolutas promedio durante el proceso de predicción en la región de una sola fase es para la líquida de 5.60% ($MD\mu=19,93\%$) y 2,74% para la fase vapor ($MD\mu=8,18\%$); 4) El modelo se extiende a mezclas utilizando la regla de mezcla simple de Grunberg y Nissan y las desviaciones para $G_{12}=0$ son de 8,19% ($MD\mu=24,38\%$) y para $G_{12}\neq 0$ es de 3,45% ($MD\mu=13,72\%$). Para las mezclas analizadas del tipo alcano/alcano, alcohol/alcano y alcohol/alcohol los resultados muestran que es necesario el uso del coeficiente de interacción binaria G_{12} para mejorar la descripción de la viscosidad.

Agradecimientos

El autor agradece a la Universidad Católica Luis Amigó sede Medellín (Colombia) por el apoyo en la realización de la presente investigación.

Referencias bibliográficas

- Assael, M. J.; Charitidou, E.; Dymond, J. H.; Papadaki, M. (1992). Viscosity and thermal conductivity of binary n-heptane+n-alkane mixtures. *International Journal of Thermophysics*, 13(2), pp. 237-249 <https://doi.org/10.1007/BF00504434>
- Abdulagatov, I. M.; Azizov, N. D. (2006). (p, ρ , T, x) and viscosity measurements of {x1n-heptane+(1-x1) n-octane} mixtures at high temperatures and high pressures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 38(11), pp. 1402-1415 <https://doi.org/10.1016/j.jct.2006.01.012>
- Benabithe, Z. Z.; Vanegas, D.; Montoya, J. C. R.; Velásquez, J. A. (2020). Caso de estudio de la destilación etanol-agua en operación continua y discontinua y su simulación con ecuaciones cúbicas de estado y modelos de actividad. *Tecnológicas*, 23(49), pp. 223-249 <https://doi.org/10.22430/22565337.1638>
- Bonyadi, M.; Rostami, M. (2017). A new viscosity model based on Soave-Redlich-Kwong equation of state. *Fluid Phase Equilibria*, 451, pp. 40-47 <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2017.07.009>
- Bloxham, J. C.; Redd, M. E.; Giles, N. F.; Knotts IV, T. A.; Wilding, W. V. (2021). Proper Use of the DIPPR 801 Database for Creation of Models, Methods, and Processes. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 66(1), pp. 3-10 <https://doi.org/10.1021/acs.jced.0c00641>
- Cardona, L. F. (2016). Calculation of the viscosity of hydrocarbons based on the cubic equation of state of Jarrahian-Heidaryan. *Revista Mexicana De Ingeniería Química*, 15(3), pp. 1019-1025.
- Cano-Gómez, J. J.; Iglesias-Silva, G. A.; Castrejón-González, E. O.; Ramos-Estrada, M.; Hall, K. R. (2015). Density and viscosity of binary liquid mixtures of ethanol+ 1-hexanol and ethanol+ 1-heptanol from (293.15 to 328.15) K at 0.1 MPa. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 60(7), pp. 1945-1955 <https://doi.org/10.1021/je501133u>
- Cardona, L. F.; Forero, L. A.; Velásquez, J. A. (2019). Modelamiento de la Viscosidad con Base en una Ecuación Cúbica μ_{TP} del Tipo Peng-Robinson. *Información Tecnológica*, 30(4), pp. 259-272 <http://dx.doi.org/10.4067/S0718-07642019000400259>
- Chevalier, J. L. E.; Petrino, P. J.; Gaston-Bonhomme, Y. H. (1990). Viscosity and density of some

- aliphatic, cyclic, and aromatic hydrocarbons binary liquid mixtures. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 35(2), pp. 206-212 <https://doi.org/10.1021/je00060a034>
- Daubert, T. E. (1998). Evaluated equation forms for correlating thermodynamic and transport properties with temperature. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 37(8), pp. 3260-3267 <https://doi.org/10.1021/ie9708687>
- Derevich, I. V. (2010). Thermodynamic model of viscosity of hydrocarbons and their mixtures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(19-20), pp. 3823-3830 <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.04.035>
- Elliott, J. R.; Lira, C. T. (2012). *Introductory chemical engineering thermodynamics* (2a ed.), Nueva York, Prentice Hall, pp. 257-400.
- Fan, T. B.; Wang, L. S. (2006). A viscosity model based on Peng-Robinson equation of state for light hydrocarbon liquids and gases. *Fluid Phase Equilibria*, 247(1-2), pp. 59-69 <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2006.06.008>
- Forero, L. A.; Velásquez, J. A. (2019). Representación Simultánea del Equilibrio Líquido-Vapor, el Volumen Molar y la Entalpía de Exceso de Mezclas Complejas mediante una Ecuación de Estado tipo Peng-Robinson. *Información Tecnológica*, 30(6), pp. 21-34 <http://dx.doi.org/10.4067/S0718-07642019000600021>
- Hussein, N. M.; Asfour, A. F. A. (2009). Densities and kinematic viscosities of ten binary 1-alkanol liquid systems at temperatures of (293.15 and 298.15) K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 54(10), pp. 2948-2952 <https://doi.org/10.1021/je800497u>
- Kumagai, A.; Yokoyama, C. (1998). Liquid viscosity of binary mixtures of methanol with ethanol and 1-propanol from 273.15 to 333.15 K. *International Journal of Thermophysics*, 19(1), pp. 3-13 <https://doi.org/10.1023/A:1021438800094>
- Lasdon, L. S.; Waren, A. D.; Jain, A., Ratner, M. (1978). Design and testing of a generalized reduced gradient code for nonlinear programming. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 4(1), pp. 34-50 <https://doi.org/10.1145/355769.355773>
- Lemmon, E. W.; Huber, M. L.M.; McLinden, M. O. (2007). NIST standard reference database 23: reference fluid thermodynamic and transport properties-REFPROP. (version 8.0) [Online]. NIST-REFPROP 8. Available at: https://www.nist.gov/publications/nist-standard-reference-database-23-reference-fluid-thermodynamic-and-transport-0?pub_id=50520 (Accessed: 01 April 2021)
- Liu, X.; Zhu, C.; He, M.; Zhang, Y. (2017). Correlation for viscosities of pure liquids at high pressures. *Journal of Molecular Liquids*, 231, pp. 404-410 <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2017.02.026>
- Martins, R. J.; Cardoso, M. J. D. M.; Barcia, O. E. (2003). A new model for calculating the viscosity of pure liquids at high pressures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 42(16), pp. 3824-3830 <https://doi.org/10.1021/ie021017o>
- Novak, L. T. (2011). Fluid viscosity-residual entropy correlation. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 9(1), pp. 1-27 <https://doi.org/10.2202/1542-6580.2839>
- Poulopoulos, S. G.; Philippopoulos, C. J. (2003). The effect of adding oxygenated compounds to gasoline on automotive exhaust emissions. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 125(1), pp. 344-350 <https://doi.org/10.1115/1.1501076>
- Poling, B. E.; Prausnitz, J. M.; O'Connell, J. P. (2001). *Properties of gases and liquids* (5a ed.), Nueva York, McGraw-Hill Education, pp. 9.1-9.97.
- Sastry, N. V.; Raj, M. M. (1996). Densities, speeds of sound, viscosities, dielectric constants, and refractive indices for 1-heptanol+ hexane and+ heptane at 303.15 and 313.15 K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 41(3), pp. 612-618 <https://doi.org/10.1021/je950172p>
- Sastry, N. V.; Valand, M. K. (1998). Densities, viscosities, and relative permittivities for pentane+ 1-alcohols (C1 to C12) at 298.15 K. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 43(2), pp. 152-157 <https://doi.org/10.1021/je9701801>
- Satyro, M. A.; Yarranton, H. W. (2010). Expanded fluid-based viscosity correlation for hydrocarbons using an equation of state. *Fluid Phase Equilibria*, 298(1), pp. 1-11 <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2010.06.023>

- Valderrama, J. O. (2003). The state of the cubic equations of state. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 42(8), pp. 1603-1618 <https://doi.org/10.1021/ie020447b>
- Valderrama, J. O.; Muñoz, J. M.; Rojas, R. E. (2011). Viscosity of ionic liquids using the concept of mass connectivity and artificial neural networks. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 28(6), pp. 1451-1457 <https://doi.org/10.1007/s11814-010-0512-0>
- Varzandeh, F.; Stenby, E. H.; Yan, W. (2017). General approach to characterizing reservoir fluids for EoS models using a large PVT database. *Fluid Phase Equilibria*, 433, pp. 97-111 <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2016.10.018>
- Valderrama, J. O.; Cardona, L. F.; Rojas, R. E. (2019). Correlation and prediction of ionic liquid viscosity using Valderrama-Patel-Teja cubic equation of state and the geometric similitude concept. Part I: pure ionic liquids. *Fluid Phase Equilibria*, 497, pp. 164-177 <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2019.04.034>