

Modelado de propiedades termofísicas para mezclas de dibenzotiofeno con distintos disolventes
orgánicos de uso común en la hidrodesulfuración

German Eduardo Hernández Rivera y Laura Giselle Caballero Fuentes

Trabajo de Grado para optar el título de Ingeniero Químico

Modalidad de Trabajo de Investigación

Director

Hernando Guerrero Amaya

Ph.D. en Electroquímica, Ciencia y Tecnología

Codirector

Dayra Lisseth Riaño Núñez

Magíster en Ingeniería Química

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas

Escuela de Ingeniería Química

Bucaramanga

2024

Dedicatoria

A mis padres y abuelos, quienes han apoyado todos mis sueños, me han brindado su amor incondicional, y han vivido junto a mí el camino para llegar a este punto, son el motor de mi vida. Este logro también es suyo.

-Laura

A mis padres por su apoyo incondicional; he llegado hasta aquí porque heredé lo mejor de ustedes, persistencia, trabajo duro, pasión y mucha curiosidad. A mi hermana por su cariño y cuidado. A mis sobrinas por ser el apoyo que mi corazón necesitaba en los días difíciles. A cada maestro que he tenido a lo largo de mi vida, que con sus enseñanzas contribuyeron a convertirme en el hombre y profesional que soy ahora.

-German

Agradecimientos

A la UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER, por abrirnos sus puertas y brindarnos una educación íntegra y de calidad, llena de experiencias enriquecedoras.

A la ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA, sus profesores y administrativos, quienes dispusieron de su empeño para formarnos como profesionales capaces, éticos y autocríticos.

Al profesor HERNANDO GUERRERO AMAYA, por confiarnos esta línea de investigación, guiarnos y apoyarnos en este proceso.

A la ingeniera DAYRA RIAÑO NÚÑEZ, por su orientación, paciencia y compromiso en este trabajo.

A FABIAN, por su compañía y apoyo a lo largo de mi estancia en la universidad, que hizo de esta experiencia un grato recuerdo, convirtiéndose en el mejor regalo que la UIS me otorgó.

A MARIA, JULIAN, ELENA y mis compañeros de trabajo por sus enseñanzas, amistad, apoyo y guía durante mi estancia en el CENIVAM.

A KATHERIN, LUISA, TATIANA, LAURA, ALEJANDRA, SEBASTIAN, BRISA, CONNY, DANIELA, PAULA, JENNIFER, MANUEL y cada compañero con el que compartí momentos inolvidables, su amistad y apoyo fue fundamental en esta etapa de mi vida, nunca los olvidaré.

Tabla de contenido

Introducción	13
1. Objetivos	15
1.1 Objetivo General	15
1.2 Objetivos Específicos.....	15
2. Estado Del Arte	16
3. Metodología	17
3.1 Identificación De Modelos.....	18
3.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros	18
3.2.1 Ajuste De Parámetros Mediante Métodos De Optimización	18
3.2.2 Elección Del Método De Optimización Que Mejor Ajuste A Cada Modelo	18
3.3 Predicción De Datos Y Validación De Modelos	19
3.3.1 Predicción De Datos Y Validación De Modelos A Partir De Datos Experimentales Recopilados.....	19
3.3.2 Comparativos Y Análisis De Datos.....	19
4. Resultados	19
4.1 Viscosidad	19
4.1.1 Modelos De Viscosidad	20
4.1.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros De Modelos De Viscosidad	22
4.1.3 Validación De Modelos Y Comparativos.....	26
4.2 Densidad	29

4.2.1 Modelos De Densidad.....	30
4.2.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros De Modelos De Densidad.....	33
4.2.3 Validación De Modelos Y Comparativos.....	36
4.3 Velocidad Del Sonido	39
4.3.1 Modelos De Velocidad Del Sonido.....	39
4.3.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros De Modelos De Velocidad Del Sonido	40
4.3.3 Validación De Modelos Y Comparativos.....	41
5. Conclusiones	42
6. Recomendaciones	43
Referencias Bibliográficas.....	44
Apéndices.....	49

Lista de tablas

Tabla 1	<i>Parámetros y métodos de optimización para Grunberg-Nissan</i>	23
Tabla 2	<i>Parámetros y métodos de optimización para Avramov- Milchev.....</i>	23
Tabla 3	<i>Parámetros y métodos de optimización para Waterton.....</i>	24
Tabla 4	<i>Parámetros y métodos de optimización para Jouyban-Acree</i>	24
Tabla 5	<i>Parámetros y métodos de optimización para McAllister</i>	25
Tabla 6	<i>Parámetros y métodos de optimización para Eyring y Hirschfelder</i>	26
Tabla 7	<i>SSRES de modelos de viscosidad para el primer grupo de concentraciones estudiadas</i>	28
Tabla 8	<i>Parámetros y métodos de optimización para Redlich-Kister.....</i>	33
Tabla 9	<i>Parámetros y métodos de optimización para NRTL</i>	34
Tabla 10	<i>Parámetros y métodos de optimización para TRIDEN</i>	35
Tabla 11	<i>Parámetros y métodos de optimización para VTPR.....</i>	36
Tabla 12	<i>SSRES de modelos de densidad para el primer grupo de concentraciones estudiadas</i>	38
Tabla 13	<i>Parámetros y métodos de optimización para Daridon</i>	40
Tabla 14	<i>Parámetros y métodos de optimización para Grunberg-Nissan</i>	49
Tabla 15	<i>Parámetros y métodos de optimización para Avramov-Michely.....</i>	50
Tabla 16	<i>Parámetros y métodos de optimización para Waterton.....</i>	51
Tabla 17	<i>Parámetros y métodos de optimización para Jouyban-Acree</i>	52
Tabla 18	<i>Parámetros y métodos de optimización para McAllister</i>	53
Tabla 19	<i>Parámetros y métodos de optimización para Eyring-Hirschfelder.....</i>	54
Tabla 20	<i>Parámetros y métodos de optimización para Redlich-Kister.....</i>	55
Tabla 21	<i>Parámetros y métodos de optimización para NRTL</i>	56
Tabla 22	<i>Parámetros y métodos de optimización para TRIDEN</i>	57

Tabla 23 <i>Parámetros y métodos de optimización para VTPR</i>	58
Tabla 24 <i>Parámetros y métodos de optimización para Daridon</i>	59
Tabla 25 <i>SSRES de modelos de viscosidad para el segundo grupo de concentraciones estudiadas</i>	73
Tabla 26 <i>SSRES de modelos de viscosidad para el tercer grupo de concentraciones estudiadas</i>	73
Tabla 27 <i>SSRES de modelos de densidad para el segundo grupo de concentraciones estudiadas</i>	74
Tabla 28 <i>SSRES de modelos de densidad para el tercer grupo de concentraciones estudiadas</i> .	75
Tabla 29 <i>SSRES de modelo de velocidad del sonido para el segundo grupo de concentraciones estudiadas</i>	75
Tabla 30 <i>SSRES de modelo de velocidad del sonido para el tercer grupo de concentraciones estudiadas</i>	76

Lista de figuras

Figura 1 <i>Diagrama de flujo de la metodología empleada</i>	17
Figura 2 <i>Gráfica de modelos de viscosidad ajustados en comparación con datos experimentales recopilados</i>	27
Figura 3 <i>Gráfica de modelos de densidad ajustados en comparación con datos experimentales recopilados</i>	37
Figura 4 <i>Gráfica de modelos de densidad ajustados en comparación con datos experimentales recopilados</i>	41
Figura 5 <i>Gráficas de modelos de viscosidad ajustados para el segundo grupo de composiciones estudiadas</i>	61
Figura 6 <i>Gráficas de modelos de viscosidad ajustados para el tercer grupo de composiciones estudiadas</i>	62
Figura 7 <i>Gráficas de residuales de modelos de viscosidad para el primer grupo de composiciones estudiadas</i>	63
Figura 8 <i>Gráficas de residuales de modelos de viscosidad para el segundo grupo de composiciones estudiadas</i>	64
Figura 9 <i>Gráficas de residuales de modelos de viscosidad para el tercer grupo de composiciones estudiadas</i>	65
Figura 10 <i>Gráficas de modelos de densidad para el segundo grupo de composiciones estudiadas</i>	66
Figura 11 <i>Gráficas de modelos de densidad ajustados para el tercer grupo de composiciones estudiadas</i>	67

Figura 12 <i>Gráficas de residuales de modelos de densidad para el primer grupo de composiciones estudiadas</i>	68
Figura 13 <i>Gráficas de residuales de modelos de densidad para el segundo grupo de composiciones estudiadas</i>	69
Figura 14 <i>Gráficas de residuales de modelos de densidad para el tercer grupo de composiciones estudiadas</i>	70
Figura 15 <i>Gráficas del modelo de velocidad del sonido para el segundo grupo de composiciones estudiadas</i>	71
Figura 16 <i>Gráficas del modelo de velocidad del sonido para el tercer grupo de composiciones estudiadas</i>	72
Figura 17 <i>Código QR GitHub para ver scripts desarrollados para el trabajo de investigación</i>	77

Lista De Apéndices

Apéndice A. <i>Resultados De Viscosidad Obtenidos Para Los Grupos De Mezclas Estudiadas Restantes</i>	49
Apéndice B. <i>Gráficos Obtenidos Para Los Grupos De Mezclas Estudiadas Restantes.....</i>	61
Apéndice C. <i>SSRES Obtenidos Para Los Grupos De Mezclas Estudiadas Restantes.....</i>	73
Apéndice D. <i>Scripts Desarrollados.....</i>	77

Resumen

Título: Modelado de propiedades termofísicas para mezclas de dibenzotiofeno con distintos disolventes orgánicos de uso común en la hidrodesulfuración*

Autor: German Eduardo Hernández Rivera, Laura Giselle Caballero Fuentes**

Palabras Clave: Modelado, Solventes, Mezcla, Propiedades, Termofísicas, Optimización, Hidrocarburos

Descripción: La presencia de compuestos azufrados en productos petrolíferos constituye un desafío global dado que el combustible se considera indispensable en cualquier industria. La hidrodesulfurización es una tecnología ampliamente usada que nace de la búsqueda de alternativas que permitan solucionar este problema; el uso de solventes orgánicos en la desulfuración es común, puesto que su presencia favorece la eficiencia de remoción, sin embargo, existen pocos estudios en la literatura sobre el modelamiento de propiedades termofísicas de mezclas de solventes orgánicos con compuestos azufrados. Este trabajo de investigación tiene como propósito modelar el comportamiento de la viscosidad, densidad, y velocidad del sonido de mezclas binarias de Dibenzotiofeno con Ciclohexano, Benceno, Tolueno, y n-Octano, a distintas temperaturas y presión ambiente. La metodología empleada comprende una fase de revisión bibliográfica, en la cual se identificaron modelos representativos para cada propiedad a modelar; una fase de ajuste de parámetros de los modelos seleccionados, para lo cual se emplearon métodos de optimización en el software Python; y una fase final de predicción de datos y validación de los modelos, empleando datos experimentales recopilados (Moreno y Cáceres, 2023). Para la viscosidad se encontró que todos los modelos seleccionados se ajustaban satisfactoriamente a las mezclas estudiadas, sin embargo, los modelos con mejores resultados fueron Eyring-Hirschfelder y Waterton, seguidos de McAllister y Gumberg-Nissan. Para la densidad se encontró que los modelos NTRL, Redlich-Kister, y TRIDEN presentan un buen ajuste, siendo TRIDEN el modelo con mejores resultados, sin embargo, el modelo VTPR presenta un comportamiento que difiere de los datos experimentales recopilados, por lo que se consideró como un modelo no representativo para las condiciones presentadas en este estudio. Finalmente, para la velocidad del sonido se realizó el modelado de la correlación de Daridon, obteniendo resultados que se ajustan satisfactoriamente a los datos experimentales en el rango de temperaturas estudiado.

*Trabajo de Grado

** Facultad de Ingenierías Fisicoquímicas. Escuela de Ingeniería Química. Director: Hernando Guerrero Amaya, Ingeniero Químico, Ph.D. Codirectora: Dayra Lisseth Riaño Núñez, Magíster en Ingeniería Química

Abstract

Title: Modeling of thermophysical properties for mixtures of dibenzothiophene with different organic solvents commonly used in hydrodesulfurization*

Author: German Eduardo Hernández Rivera, Laura Giselle Caballero Fuentes**

Key Words: Modeling, Solvents, Mixture, Properties, Thermophysical, Optimization, Hydrocarbons

Description: The presence of sulfur compounds in petroleum products represents a challenge globally since fuel is considered indispensable in any industry; hydrodesulfurization is a widely used technology that arises from the search for alternatives to obtain sulfur-free fuels. The use of organic solvents in desulfurization is common, as their presence promotes removal efficiency; however, there are few studies in the literature on the modeling of thermophysical properties of mixtures of organic solvents with sulfur compounds. This research aims to model the behavior of density, viscosity, and sound velocity of binary mixtures of Dibenzothiophene with Cyclohexane, Benzene, Toluene, and Octane, at different temperatures and ambient pressure. The methodology employed includes a literature review phase, in which representative models were identified for each property to be modeled; a phase of parameter adjustment of the selected models, for which optimization methods in Python were used; and a final phase of data prediction and model validation, using collected experimental data (Moreno y Cáceres, 2023). For viscosity, it was found that all selected models adjusted satisfactorily to the studied mixtures, however, the models with the most accurate results were Eyring-Hirschfelder and Waterton, followed by McAllister and Gumberg-Nissan. For density, it was found that the NTRL, Redlich-Kister, and TRIDEN models present a good fit, with TRIDEN being the model with the best results, however, the VTPR model presents a behavior that differs from the collected experimental data, so it was considered as a non-representative model for the conditions presented in this study. Finally, for the speed of sound, the modeling of the Daridon correlation achieved satisfactory results that fit well with the experimental data within the studied temperature range.

*Final Degree Work

**Faculty of Physicochemical Engineering. School of Chemical Engineering. Director: Hernando Guerrero Amaya, Chemical Engineer, Ph.D. Co-Director: Dayra Lisseth Riaño Núñez, Chemical Engineer, MS.

Introducción

Los combustibles fósiles tienen un papel indispensable en el funcionamiento de la sociedad como la conocemos, formando parte inherente de cualquier industria al ser usado para labores de transporte o generación de energía, permitiendo la movilidad de la población, e interviniendo en el desarrollo de la economía de un país. Sin embargo, la presencia de azufre en los combustibles usados tiene un efecto adverso en el medio ambiente, así como en la salud de la población, ya que causa la liberación de óxidos de azufre (SO_x), los provocan causan diversos problemas como la lluvia ácida, problemas respiratorios, daños en cultivos, contribución en la acidificación de mares, entre otros (International Maritime Organization [IMO], 2020), generando un gran problema a resolver: cubrir la demanda combustibles sin crear problemas ambientales que puedan afectar la calidad de vida de la población y el medio ambiente. Entre los compuestos azufrados presentes en el crudo se encuentra el Dibenzotiofeno, el cual es usado como compuesto modelo en esta investigación, dado que representa la mayor proporción de azufre de tiofeno en el petróleo y sus destilados, además de ser uno de los compuestos organosulfurados más difíciles de eliminar (Maass et al., 2014). Como alternativas de solución ante esta problemática, se desarrollaron procesos de desulfurización, entre los cuales se encuentra la hidrodeshulfuración (HDS), que es actualmente la más usada en la industria, y la desulfurización extractiva, para los cuales resulta útil el uso de solventes orgánicos (León Galindo & Ortega, 2013); sin embargo, en la literatura actual, se encuentran pocos estudios sobre el modelamiento de propiedades termofísicas de mezclas de Dibenzotiofeno con solventes orgánicos.

Las propiedades termofísicas son importantes y ampliamente usadas en el campo de la ingeniería química, siendo útiles para el diseño de procesos en la industria alimenticia como la pasteurización (Pérez Colas et al., 2021), en aplicaciones de transferencia de calor en metales

(Roque-Villalonga et al., 2023), en la mecánica de fluidos, en la simulación de procesos, entre otras; por esta razón resulta útil poder predecir los cambios que sufren estas propiedades durante la interacción de distintos compuestos a condiciones establecidas. Además, resulta poco práctica la determinación experimental de estas propiedades, puesto que involucran procedimientos complejos y una gran cantidad de parámetros y condiciones a probar, por lo que la obtención de modelos matemáticos que permitan predecir el comportamiento de estas propiedades es de gran valor (Yuling et al., 2020). Dado que las interacciones moleculares entre los compuestos generan variaciones en las propiedades termofísicas respecto a las propiedades de los compuestos puros (Montaño Montoya, 2011), se hace necesario encontrar formas de cuantificar y predecir estos nuevos comportamientos con el fin de lograr una mayor exactitud al momento de realizar diseños basados en estas propiedades. Existen diversas formas de predecir las propiedades termofísicas de una mezcla, entre ellas se encuentran la predicción de propiedades mediante modelos empíricos, semi empíricos, ecuaciones de estado, y correlaciones.

Este trabajo de investigación tiene como objetivo modelar el comportamiento de propiedades termofísicas para mezclas binarias de Dibenzotiofeno con cuatro solventes orgánicos: Ciclohexano, Benceno, Tolueno y n-Octano, a diferentes temperaturas y presión atmosférica. Por lo tanto, como objeto de estudio se establece ¿Cuáles son los modelos más apropiados para describir el comportamiento de propiedades termofísicas como la viscosidad, densidad, y velocidad del sonido para mezclas binarias de Dibenzotiofeno con distintos solventes orgánicos a distintas condiciones de temperatura?

1. Objetivos

1.1 Objetivo General

Modelar el comportamiento de las propiedades termofísicas para mezclas binarias de dibenzotiofeno con disolventes orgánicos de uso común en el proceso de hidrodesulfuración en función de la temperatura con el tratamiento de datos experimentales.

1.2 Objetivos Específicos

- Identificar los modelos existentes más representativos para sistemas de mezcla.
- Desarrollar el modelamiento de las propiedades termofísicas a partir de modelos teóricos, empíricos o semi-empíricos.
- Predecir el comportamiento de las propiedades termofísicas para mezclas binarias a distintas temperaturas y presión ambiente.

2. Estado Del Arte

Verma et al. (2018) estudiaron doce sistemas binarios de isómeros de butanol con hidrocarburos como el ciclohexano, benceno y tolueno, en un rango de composición específico, a una temperatura de 308.15 K. De manera general, la viscosidad de estas mezclas binarias fue correlacionada con una mayor exactitud mediante el modelo de Grunberg-Nissan.

Sirbu et al. (2019) estudiaron las propiedades termofísicas de las mezclas binarias de n-hexadecano con n-propilbenceno y sec-butilbenceno a un rango de temperatura de (298.15–318.15) K y 0.1 MPa de presión. Para las propiedades de exceso utilizaron un modelo polinomial basado en la ecuación de Redlich-Kister. El índice de refracción se evaluó mediante algunas reglas de mezcla teóricas como Lorentz-Lorentz, Gladstone-Dale, entre otras. Los resultados fueron analizados desde el punto de vista de las interacciones moleculares entre los componentes de las mezclas y sus efectos estructurales.

Govinda Rao et al. (2018) investigaron el modelado de la velocidad del sonido en mezclas binarias líquidas de N-metilformamida con anilina a temperaturas de 303.15 K, 308.15 K, y 313.15 K utilizando modelos como Nomoto, impedancia, relación de mezcla ideal, Junjie, entre otros. Los modelos que mejor se ajustaron utilizando la prueba de Chi-cuadrado fueron el de impedancia y la relación de Nomoto.

Shahabi-Ghahfarokhy et al. (2022) indagaron en el uso de ecuaciones cubicas de estado (EOS) y de algoritmos con redes neuronales para realizar el modelado de la densidad tanto de hidrocarburos puros como de mezclas binarias en un rango de temperatura de hasta 522 K y presión de hasta 275 MPa. Las EOS que presentaron una mejor correlación con los datos experimentales basándose en los valores de error cuadrático medio o RMSE por su sigla en inglés, error estándar

(SE) y R^2 para las mezclas binarias de hidrocarburos fueron la ecuación de Zudkevitch-Joffe y Peng-Robinson de tres parámetros.

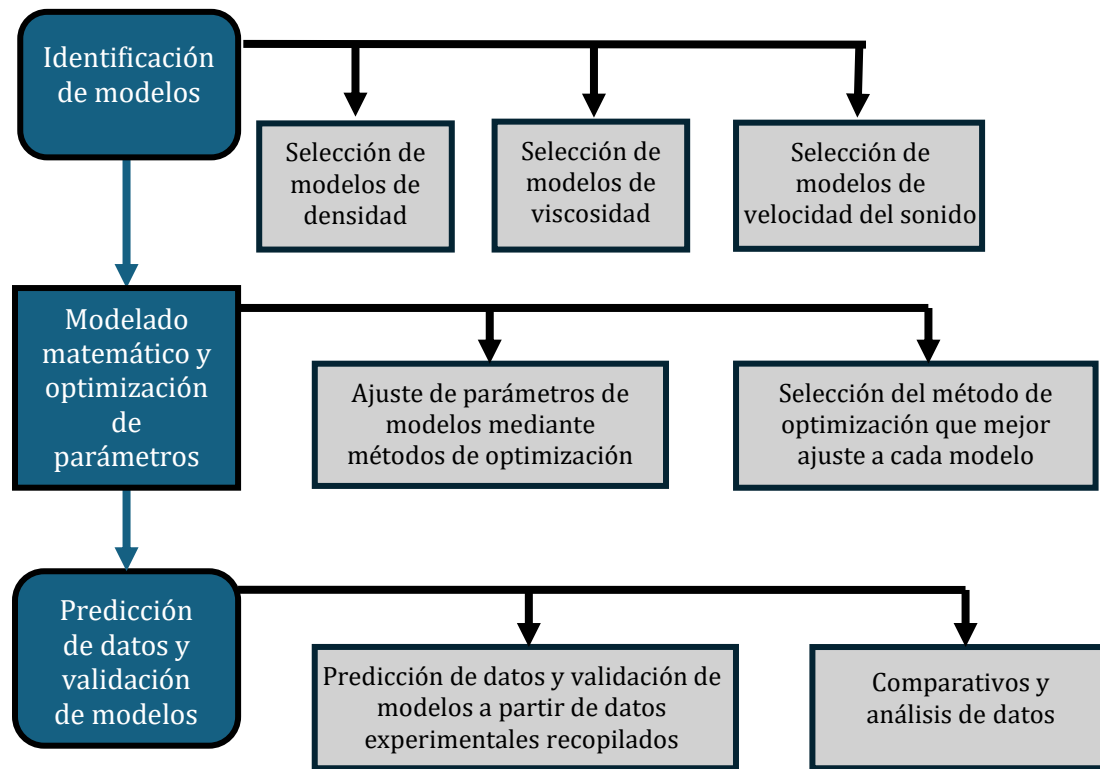
Gajardo-Parra et al. (2020) modelaron la densidad y la viscosidad para una mezcla binaria de anisol con dodecano y hexadecano en un rango de temperaturas 293.15 a 333.15 K a 101.3 kPa utilizando Peng-Robinson con la regla de mezcla de Hidon-Vidal modificada. La densidad de las mezclas con desviaciones absolutas promedio que van del 0.59 al 11.75%, y la viscosidad del 0.1 al 13.2%.

3. Metodología

A continuación, se muestra el diagrama de flujo con la metodología empleada.

Figura 1

Diagrama de flujo de la metodología empleada



3.1 Identificación De Modelos

Se realizó una búsqueda literaria a partir de la cual se identificaron modelos, ecuaciones y correlaciones para describir cada propiedad estudiada a diferentes temperaturas y presión atmosférica.

3.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros

3.2.1 Ajuste De Parámetros Mediante Métodos De Optimización

El ajuste de parámetros y modelado matemático se realizó con el software de uso libre PYTHON, a partir de la creación de un código en el que se desarrollaron matemáticamente los modelos a ajustar y el uso de métodos de optimización pertenecientes al paquete de optimización de la librería SciPy (Virtanen et al., 2020); adicionalmente, se usó la base de datos denominada NIST Thermodata Engine disponible a través del software ASPEN PLUS para la obtención de datos de viscosidad y densidad del Dibenzotiofeno puro (Chirico et al., 1991), así como el uso de funciones pertenecientes a modelos que hacen parte del paquete termodinámico de la librería de diseño de ingeniería química ChEDL llamado Thermo (Caleb Bell, 2016-2023). En esta investigación, se emplearon principalmente los métodos de Nelder-Mead, Powell, Conjugate Gradient Algorithm (CG), Constrained Optimization By Linear Approximation (COBYLA) y Truncated Newton (TNC) (SciPy, 2020).

3.2.2 Elección Del Método De Optimización Que Mejor Ajuste A Cada Modelo

La elección del mejor método de optimización para cada modelo se realizó mediante la comparación entre la suma de los cuadrados de los residuales SSRES, de manera que cada modelo pudo ser ajustado de la mejor manera posible.

3.3 Predicción De Datos Y Validación De Modelos

3.3.1 Predicción De Datos Y Validación De Modelos A Partir De Datos Experimentales

Recopilados

Una vez optimizados los parámetros de los modelos elegidos para cada propiedad, se realizó una predicción de datos a las temperaturas estudiadas para posteriormente contrastar los datos obtenidos con los datos experimentales pertenecientes a la tesis presentada por Moreno y Cáceres (2023).

3.3.2 Comparativos Y Análisis De Datos

Para cada propiedad se realizó una comparativa visual en el cual se observan las tendencias de cada modelo estudiado, así como su acoplamiento a los datos experimentales recopilados (Moreno y Cáceres, 2023). Adicionalmente, se usó como función a optimizar la suma de los cuadrados de los residuales (SSRES) para ajustar los modelos estudiados a los datos experimentales recopilados, y al mismo tiempo identificar con mayor exactitud el mejor modelo para describir cada propiedad.

$$SSRES = \sum_{i=1}^{nT} (PT(T_i)_{cal} - PT(T_i)_{exp})^2 \quad (Ec.1)$$

Donde PT hace referencia a la propiedad termofísica evaluada y nT hace referencia al número de temperaturas (T) totales a evaluar.

Finalmente, se realizó un análisis de las predicciones obtenidas con el fin de comprender su comportamiento y determinar su viabilidad en el modelado de cada propiedad.

4. Resultados

4.1 Viscosidad

4.1.1 Modelos De Viscosidad

Mauro et al. (2009) estudiaron la viscosidad en líquidos formadores de vidrio, realizando una recopilación sobre algunos modelos que predicen exitosamente la viscosidad de mezclas binarias de líquidos, entre los cuales se encuentran algunos modelos usados en esta investigación. Caso similar es el de la investigación sobre viscosidad en sistemas binarios realizada por Haghighbakhsh et al. (2021), donde analizaron la viscosidad de mezclas orgánicas líquidas y modelaron su comportamiento para diferentes presiones y composiciones.

Según Grunberg y Nissan (1949), la viscosidad de una mezcla puede describirse mediante una correlación que integre las viscosidades de los compuestos puros, sus composiciones molares y un parámetro de interacción binaria dependiente de la temperatura:

$$\ln(\eta_{mix}) = x_1 \ln(\eta_1) + x_2 \ln(\eta_2) + x_1 x_2 G_{ij} \quad (\text{Ec.2})$$

Donde x_1 y x_2 son las composiciones molares de los compuestos, η_{mix} es la viscosidad de la mezcla, η_1 y η_2 son las viscosidades de los compuestos puros y G_{ij} es el parámetro de interacción binaria dependiente de la temperatura que puede ser descrito como:

$$G_{ij} = G_1 + G_2 T \quad (\text{Ec.3})$$

Donde G_1 y G_2 son los parámetros por optimizar.

Por otra parte, Avramov y Milchev (1988) propusieron un modelo de viscosidad de tres parámetros que cubre exitosamente un amplio rango de temperaturas:

$$\log_{10}(\eta(T, x)) = \log_{10}(\eta_{\infty}(x)) + \frac{\tau(x)^{\alpha(x)}}{T} \quad (\text{Ec.4})$$

Donde $\eta_{\infty}(x)$, $\tau(x)$, y $\alpha(x)$ son parámetros dependientes de la composición que deben ser ajustados según la mezcla a estudiar.

Otro modelo similar fue el propuesto por Waterton (1932), el cual fue desarrollado con un enfoque de restricción para la entropía configuracional:

$$\log_{10}(\eta(T, x)) = \log_{10}(\eta_{\infty}(x)) + \left(\frac{K(x)}{T}\right)^{\frac{C(x)}{T}} \quad (\text{Ec.5})$$

Donde $\eta_{\infty}(x)$, $K(x)$, y $C(x)$ son parámetros por optimizar según la mezcla.

Jouyban et al. (2013) presentaron un modelo simple denominado Modelo Jouyban-Acree para mezclas, el cual describe la viscosidad de una mezcla binaria como:

$$\ln(\eta_{mix}) = x_1 \ln(\eta_1) + x_2 \ln(\eta_2) + A_o \left(\frac{x_1 x_2}{T}\right) + A_1 \left(\frac{x_1 x_2 (x_1 - x_2)}{T}\right) + A_2 \left(\frac{x_1 x_2 (x_1 - x_2)^2}{T}\right) \quad (\text{Ec.6})$$

Donde x_1 y x_2 son las composiciones molares de los componentes puros, η_1 y η_2 son las viscosidades dinámicas de los mismos, y A_o , A_1 , y A_2 son los parámetros por optimizar.

McAllister (1960) presenta un modelo robusto de cuatro cuerpos que considera una mayor cantidad de parámetros de interacción dependientes de la temperatura entre los compuestos de la mezcla:

$$\begin{aligned} \ln(\eta_{mix}) = & x_1^4 \ln(\eta_1) + 4x_1^3 x_2 \ln(\eta_{1112}) + 6x_1^2 x_2^2 \ln(\eta_{1122}) + 4x_2^3 x_1 \ln(\eta_{2221}) + \\ & x_2^4 \ln(\eta_2) - \ln\left(x_1 + x_2 \frac{Mw_2}{Mw_1}\right) + 4x_1^3 x_2 \ln\left(\frac{3 + \frac{Mw_2}{Mw_1}}{4}\right) + 6x_1^2 x_2^2 \ln\left(\frac{1 + \frac{Mw_2}{Mw_1}}{2}\right) + \\ & 4x_2^3 x_1 \ln\left(\frac{1 + \frac{3Mw_2}{Mw_1}}{4}\right) + x_2^4 \ln\left(\frac{Mw_2}{Mw_1}\right) \end{aligned} \quad (\text{Ec.7})$$

Donde x_1 y x_2 , η_1 y η_2 , Mw_1 y Mw_2 son las composiciones molares, viscosidades dinámicas y pesos moleculares de los respectivos compuestos puros, mientras que η_{1112} , η_{1122} , y η_{2221} son los parámetros de interacción que se pueden definir como:

$$\eta_{1112} = K_1 + K_2T \quad (\text{Ec.8})$$

$$\eta_{1122} = K_3 + K_4T \quad (\text{Ec.9})$$

$$\eta_{2221} = K_5 + K_6T \quad (\text{Ec.10})$$

Otro modelo ampliamente usado es la versión simplificada de la correlación de Eyring y Hirschfelder para la viscosidad de una mezcla en función de la temperatura:

$$\ln(\mu) = ER \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_A} \right) \quad (\text{Ec.11})$$

Donde ER y T_A son parámetros por ajustar.

4.1.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros De Modelos De Viscosidad

Como se mencionó en la metodología, el software de uso libre utilizado para el modelado matemático, así como para el ajuste de parámetros es PYTHON; adicionalmente, los datos de viscosidad del Dibenzotiofeno puro se obtuvieron mediante la base de datos NIST Thermodata Engine disponible en ASPEN PLUS (Chirico et al., 1991), mientras que los métodos de optimización usados pertenecen a la librería SciPy (Virtanen et al., 2020).

A continuación, se observan los métodos de optimización que mejores resultados obtuvieron en el ajuste de parámetros de los modelos de viscosidad estudiados, junto con los parámetros obtenidos para cada modelo.

Tabla 1*Parámetros y métodos de optimización para Grunberg-Nissan*

Método de optimización	Nelder-Mead, CG	
Mezclas evaluadas	Parámetros	
	G ₁	G ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	-0.7050	0.0194
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	0.9969	0.0170
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	-1.7526	0.0243
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	0.7223	0.0114

Nota. Los datos de viscosidad del Dibenzotiofeno puro fueron extraídos de la base de datos NIST Thermodata Engine disponible en ASPEN PLUS (Chirico et al., 1991). Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

Tabla 2*Parámetros y métodos de optimización para Avramov- Milchev*

Método de optimización	CG		
Mezclas evaluadas	Parámetros		
	η_{∞}	τ	α
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	0.1294	281.5249	2.7515
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	0.1197	266.4166	2.8303
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	0.1090	260.5774	2.3640
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	0.0501	302.3501	1.5998

Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

Tabla 3

Parámetros y métodos de optimización para Waterton

Método de optimización	CG		
Mezclas evaluadas	Parámetros		
	η_{∞}	K	C
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	0.0244	313.2336	121.1417
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	0.0218	318.2784	94.4514
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	0.0323	274.4231	92.3080
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	0.0327	250.8607	107.8956

Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

Tabla 4

Parámetros y métodos de optimización para Jouyban-Acree

Método de optimización	COBYLA, Nelder-Mead
------------------------	---------------------

Mezclas evaluadas	Parámetros		
	A ₀	A ₁	A ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	625.9464	-608.3037	595.0966
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	716.0415	-938.6929	373.5913
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	666.5487	-873.8343	347.8256
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	481.4683	-465.0920	451.6745

Nota. Los datos de viscosidad del Dibenzotiofeno puro fueron extraídos de la base de datos NIST Thermodata Engine disponible en ASPEN PLUS (Chirico et al., 1991). Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

Tabla 5

Parámetros y métodos de optimización para McAllister

Método de optimización	Nelder-Mead, TNC					
	Parámetros					
Mezclas evaluadas	K ₁	K ₂	K ₃	K ₄	K ₅	K ₆
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	-58.5204	744.1002	2145.8827	-5.5032	6.0604	-0.0155
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	-0.8667	24.1034	-16.8138	3.5216	6.0575	-0.0157
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	-0.9701	59.2940	-23.2854	0.3251	4.1401	-0.0100
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	-4.2486	0.0362	359.9243	-0.9041	2.9352	-0.0074

Nota. Los datos de viscosidad del Dibenzotiofeno puro fueron extraídos de la base de datos NIST Thermodata Engine disponible en ASPEN PLUS (Chirico et al., 1991). Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

Tabla 6

Parámetros y métodos de optimización para Eyring y Hirschfelder

Método de optimización	Nelder-Mead	
Mezclas evaluadas	Parámetros	
	ER	T _A
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	1465.6618	293.0277
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	1280.8359	269.6431
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	1094.4202	259.5224
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	1085.2868	253.4948

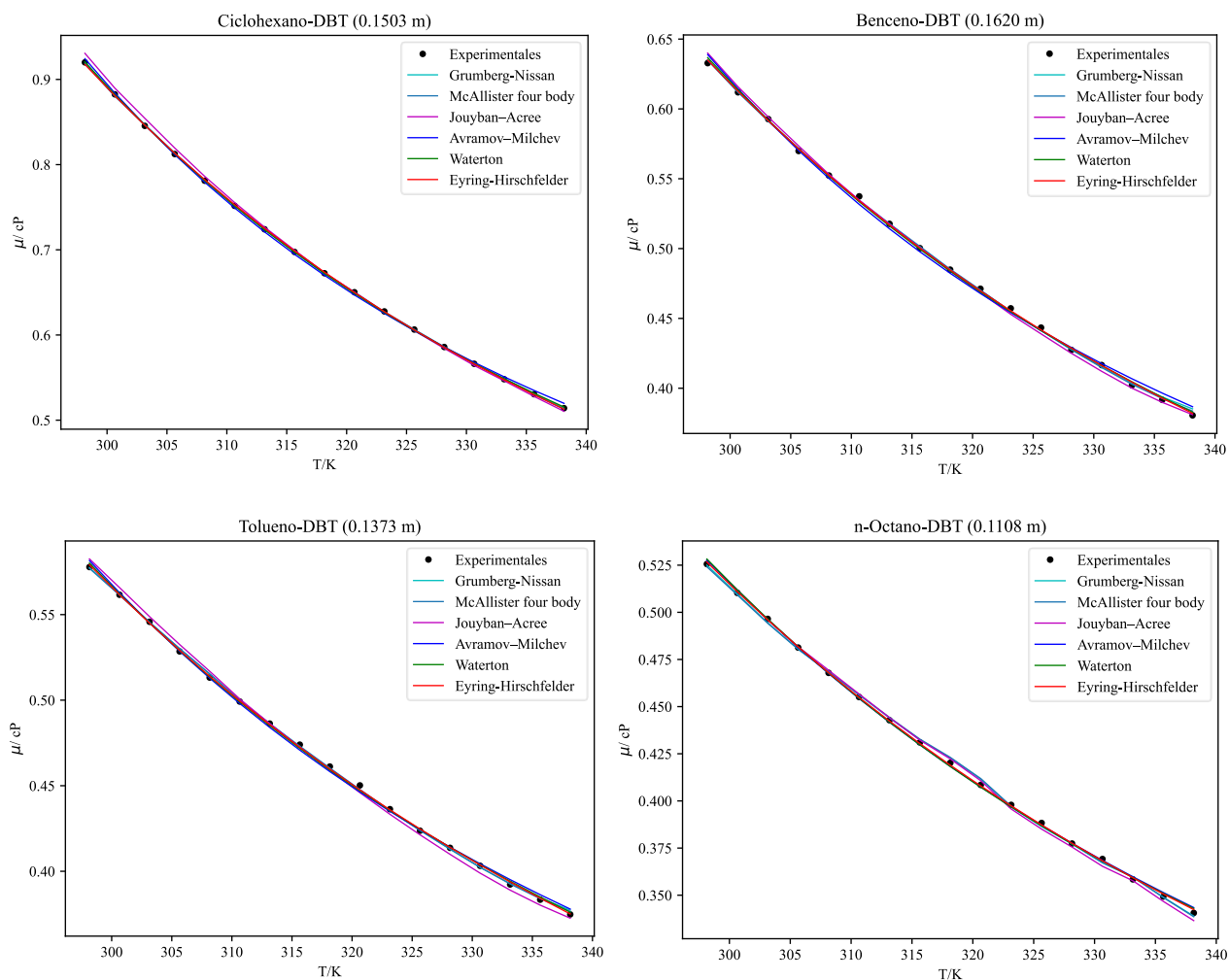
Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

4.1.3 Validación De Modelos Y Comparativos

A continuación, se muestran los diagramas generados para cada mezcla estudiada, donde se pueden observar el comportamiento de los modelos de viscosidad estudiados en relación con los datos experimentales recopilados.

Figura 2

Gráfica de modelos de viscosidad ajustados en comparación con datos experimentales recopilados



Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice B**.

Se puede observar en la **Figura 2** que, en general, todos los modelos tienen un comportamiento visiblemente cercano a los datos experimentales, sin embargo, vale la pena resaltar que para las temperaturas más externas ($T < 310$ K, $T > 325$ K), el modelo de Jouyban-Acree

presenta una visible discrepancia con los datos experimentales para los solventes cíclicos usados (Ciclohexano, Benceno y Tolueno), mientras que para el caso del n-Octano, presenta una desviación mayor a partir de los 325 K, así como un cambio en la tendencia del modelado de la mezcla con n-Octano entre los 315 K y 320 K, siendo, en general, el modelo que más difícilmente describe la viscosidad de las mezclas estudiadas. Un comportamiento similar entre los 315 K y 320 K se presenta para el caso del n-Octano con los modelos de McAllister y Grumberg-Nissan, sin embargo, para las temperaturas restantes, así como para los demás solventes, presenta un buen ajuste a los datos. Por otro lado, Avramov-Milchev presenta un buen ajuste en todas las mezclas para temperaturas menores a 330 K, a partir de esta temperatura se puede observar una desviación respecto a los datos. Finalmente, los modelos que mejor se ajustan en todos los casos son los modelos de Waterton y Eyring-Hirschfelder.

A continuación, se muestra una comparativa cuantitativa entre los modelos estudiados, donde se usa el parámetro estadístico SSRES para identificar el modelo que mejor ajuste de datos presenta.

Tabla 7

SSRES de modelos de viscosidad para el primer grupo de concentraciones estudiadas

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.1503 m)	Benceno + DBT (0.1602 m)	Tolueno + DBT (0.1373 m)	n-Octano + DBT (0.1108 m)
Gumberg-Nissan	$8.59 \cdot 10^{-6}$	$6.45 \cdot 10^{-5}$	$2.74 \cdot 10^{-5}$	$4.02 \cdot 10^{-5}$
Jouyban-Acree	$3.81 \cdot 10^{-4}$	$1.71 \cdot 10^{-4}$	$1.80 \cdot 10^{-4}$	$8.19 \cdot 10^{-5}$
McAllister	$1.31 \cdot 10^{-5}$	$4.25 \cdot 10^{-5}$	$2.19 \cdot 10^{-5}$	$4.87 \cdot 10^{-5}$
Avramov-Milchev	$1.35 \cdot 10^{-4}$	$2.20 \cdot 10^{-4}$	$8.56 \cdot 10^{-5}$	$3.15 \cdot 10^{-5}$
Waterton	$9.73 \cdot 10^{-6}$	$7.14 \cdot 10^{-5}$	$3.63 \cdot 10^{-5}$	$3.25 \cdot 10^{-5}$
Eyring-Hirschfelder	$1.95 \cdot 10^{-5}$	$3.86 \cdot 10^{-5}$	$1.98 \cdot 10^{-5}$	$1.25 \cdot 10^{-5}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice C**.

Como se puede observar en la **Tabla 7**, en la mayoría de los casos el modelo de Eyring-Hirschfelder presenta un mejor ajuste, mientras que, para el caso del Ciclohexano, es Gumberg-Nissan el modelo que menor SSRES presenta, sin embargo, puede apreciarse que los demás modelos, a excepción de Jouyban-Acree y Avramov-Milchev presentan SSRES similares a los de Eyring-Hirschfelder. Esto nos permite afirmar que, para el caso de la viscosidad, es altamente recomendable el uso de Eyring-Hirschfelder de manera general para el estudio de mezclas de DBT con solventes orgánicos en un amplio rango de temperaturas, mientras que, para solventes orgánicos de cadena larga como el n-Octano, es desaconsejable el uso de modelos como Avramov-Milchev o Jouyban-Acree.

Este análisis se realizó también para las dos composiciones restantes estudiadas para las mismas mezclas presentadas, cuyas gráficas de residuales y SSRES se pueden observar en el **Apéndice B** y en el **Apéndice C** respectivamente; en general, no se presenta una variación importante respecto al primer caso presentado, siendo Eyring-Hirschfelder el modelo con mejor SSRES en la mayoría de los casos, sin embargo, en el caso puntual de la mezcla Tolueno-DBT (0.2785 m), se aprecia que el modelo que muestra un mayor SSRES es, precisamente, Eyring-Hirschfelder, sin embargo, los modelos recomendados anteriormente, como lo son McAllister (recomendado para solventes cíclicos) y Waterton, siguen manteniendo un buen comportamiento para esta mezcla.

4.2 Densidad

4.2.1 Modelos De Densidad

La densidad de una mezcla puede establecerse mediante su relación con el volumen de exceso; este volumen representa la desviación del volumen de la mezcla respecto a la idealidad, o en su defecto, a un comportamiento lineal. En su investigación, Montaña Montoya (2011) define el volumen de exceso de una mezcla binaria en términos de la densidad:

$$V^E = V^{mix} - \sum_i x_i V_i = \sum_i x_i M_i \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_i} \right) \quad (\text{Ec.12})$$

Donde x_i , M_i , ρ_i son las composiciones molares, pesos moleculares y densidades de los respectivos componentes puros, y ρ es la densidad de la mezcla.

A partir de la anterior expresión, se puede definir la densidad de una mezcla binaria como:

$$\rho = \frac{\sum_i x_i M_i}{V^E + \sum_i \frac{x_i M_i}{\rho_i}} \quad (\text{Ec.13})$$

Diversos autores han usado la correlación de Redlich-Kister para modelar exitosamente el volumen de exceso de mezclas líquidas (Pinto y Knuutlia, 2019; Montaña Montoya, 2011). Esta correlación en forma de polinomio puede ser reducida a cuatro parámetros que definen el volumen de exceso de la siguiente forma:

$$\overline{V^E} = x_1 x_2 \sum_{i=0} A_i (x_1 - x_2)^i \quad (\text{Ec.14})$$

Donde x_1 y x_2 son las composiciones molares de los componentes, mientras que A_i representa el parámetro de Redlich-Kister. Para asegurar un mejor ajuste respecto a la temperatura, Pinto et al. (2014, como se citó en Pinto y Knuutlia, 2019), propuso la siguiente definición para el parámetro de Redlich-Kister:

$$A_i = a_i + b_i T \quad (\text{Ec.15})$$

Donde a_i y b_i son parámetros por ajustar.

El volumen de exceso también puede ser descrito mediante un enfoque basado en un modelo de energía de Gibbs en exceso, un ejemplo muy conocido es el modelo NRTL (Renon y Prausnitz, 1968, como lo indican Pinto y Knuutlia, 2019), el cual presenta el volumen de exceso como una función de la composición y temperatura:

$$\overline{V}^E = RT \sum_{i=1}^{nC} x_i \frac{\sum_{j=1}^{nC} \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^{nC} G_{ki} x_k} \quad (\text{Ec.16})$$

Donde nC representa el número de compuestos, el cual en caso de una mezcla binaria corresponde a 2, x_i es la composición molar del compuesto respectivo, R es un parámetro fijo de valor 8.314, y τ_{ji} , G_{ji} son parámetros que se definen como:

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \tau_{ji}) \quad (\text{Ec.17})$$

$$\tau_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T}; \tau_{ii} = 0 \quad (\text{Ec.18})$$

Donde a_{ij} , b_{ij} , α_{ij} son parámetros binarios por ajustar

Por otro lado, Ihmels y Gmehling (2001, como se citó en Riaño Nuñez, 2023) desarrollaron una correlación de 10 parámetros para describir el comportamiento de la densidad en líquidos en función de la presión y la temperatura denominada TRIDEN, por sus siglas en inglés Tridimensional Density, logrando modelar exitosamente la densidad en amplios rangos de temperaturas y presiones llegando hasta el punto crítico de la solución. Esta correlación se compone de dos ecuaciones:

$$\text{Modified Tait: } \rho(T, p) = \frac{\rho_0}{1 - C_T \ln \frac{B_T(T) + p}{B_T(T) + p_0}} \quad (\text{Ec.19})$$

Donde $B_T(T)$ es un parámetro dependiente de la temperatura que puede ser descrito como:

$$B_T(T) = b_0 + b_1 \frac{T}{E_T} + b_2 \left(\frac{T}{E_T} \right)^2 + b_3 \left(\frac{T}{E_T} \right)^3 \quad (\text{Ec.20})$$

Mientras que ρ_0 se define mediante la siguiente ecuación:

$$\text{Modified Rackett} \quad \rho_0 = \frac{A_R}{B_R \left(1 + \left(1 - \frac{T}{C_R} \right)^{D_R} \right)} \quad (\text{Ec.21})$$

Otra forma de definir la densidad en una mezcla es a través de ecuaciones de estado, sin embargo, debido a la no idealidad que se presenta en las propiedades dada por las interacciones entre los compuestos, se requiere una modificación que tenga en cuenta estos cambios. Bajo esta premisa se crearon ecuaciones modificadas a partir de ecuaciones de estado como lo es la Predictive-Soave-Redlich-Kwong , o PSRK por sus siglas en inglés, la cual fue desarrollada por Holderbaum y Gimehling (1991, como se citó en Riaño Nuñez, 2023), sin embargo, años más tarde Ahlers y Gimehling (2001) desarrollaron una nueva ecuación basada en la ecuación de estado de Peng Robinson con el objetivo de mejorar las predicciones realizadas, llamando a esta nueva ecuación Volume Translated Peng Robinson, la cual incluye la definición de volumen de traslación propuesta por Peneloux (1982, como se citó en Montaña Montoya, 2011); el volumen de traslación es un parámetro que mejora significativamente la predicción de densidades en líquidos pues tiene en cuenta el volumen molar experimental y el volumen calculado mediante la ecuación de estado de Peng-Robinson, asemejándose a la definición de una propiedad en exceso. La librería Thermo (Caleb Bell, 2022) ofrece una versión del modelo VTPR con la definición de parámetros como correlación del factor acéntrico propuesta por Pina-Martinez (2018). Adicionalmente, esta librería cuenta con una amplia base de datos que permite consultar las propiedades críticas para cada sustancia en la mezcla y los parámetros de interacción binaria k_{ij} .

$$P = \frac{RT}{v+c-b} - \frac{a \alpha(T)}{(v+c)(v+c+b)+b(v+c-b)} \quad (\text{Ec.22})$$

$$a\alpha = \sum_i \sum_j x_i x_j (a\alpha)_{ij} \quad (\text{Ec.23})$$

$$(a\alpha)_{ij} = (1 - kij) \sqrt{(a\alpha)_i (a\alpha)_j} \quad (\text{Ec.24})$$

$$a_i = 0.45724 \frac{R^2 T_{c,i}^2}{P_{c,i}} \quad (\text{Ec.25})$$

$$\alpha_i = (1 + k_i (1 - \sqrt{T_{r,i}}))^2 \quad (\text{Ec.26})$$

$$b = \sum_i x_i b_i \quad (\text{Ec.27})$$

$$b_i = 0.07780 \frac{RT_{c,i}}{P_{c,i}} \quad (\text{Ec.28})$$

$$k_i = 0.3919 + 1.4996\omega - 0.2721\omega^2 + 0.1063\omega^3 \quad (\text{Ec.29})$$

4.2.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros De Modelos De Densidad

A continuación, se observan los métodos de optimización que mejores resultados obtuvieron en el ajuste de parámetros de los modelos de densidad estudiados, junto con los parámetros obtenidos para cada modelo.

Tabla 8

Parámetros y métodos de optimización para Redlich-Kister

Método de optimización	Powell			
Mezclas evaluadas	Parámetros			
	a ₁	a ₂	b ₁	b ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	6411.5716	-22.1761	560.0570	1761.5620
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	6048.3753	-30.0693	522.0587	1761.6911

Mezclas evaluadas	Parámetros			
	a ₁	a ₂	b ₁	b ₂
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	5763.6803	-1.9976	402.7124	1754.2238
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	5221.2553	-7.0361	403.3182	1754.1238

Nota. Los datos de densidad del Dibenzotiofeno puro fueron extraídos de la base de datos NIST Thermodata Engine disponible en ASPEN PLUS (Chirico et al., 1991). Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor dirijase al **Apéndice A**.

Tabla 9

Parámetros y métodos de optimización para NRTL

Método de optimización	Powell					
Mezclas evaluadas	Parámetros					
	a ₁₂	a ₂₁	b ₁₂	b ₂₁	α ₁₂	α ₂₁
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	-17.2872	0.7542	-209.0816	-348.2398	0.1992	-1.0326
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	-18.6115	2.4053	-737.3661	307.0918	0.1662	0.2094
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	-18.2624	0.9077	-924.5286	146.8431	0.1571	0.2706
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	-17.7615	1.1183	-878.2718	64.9173	0.1576	0.3758

Nota. Los datos de densidad del Dibenzotiofeno puro fueron extraídos de la base de datos NIST Thermodata Engine disponible en ASPEN PLUS (Chirico et al., 1991). Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

Tabla 10

Parámetros y métodos de optimización para TRIDEN

Método de optimización	Nelder-Mead									
Mezclas evaluadas	Parámetros									
	A _R	B _R	C _R	C _T	D _R	E _T	b ₀	b ₁	b ₂	b ₃
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	0.021	0.137	407.468	0.062	0.259	166.752	177.873	11.110	-27.623	5.030
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	0.018	0.120	450.621	0.087	0.266	94.904	174.401	13.008	-33.185	5.083
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	0.021	0.132	441.199	0.088	0.241	94.619	164.530	11.591	-30.068	4.462
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	0.024	0.153	566.294	0.076	0.362	86.047	122.389	10.912	-30.617	4.850

Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

Tabla 11*Parámetros y métodos de optimización para VTPR*

Método de optimización	Nelder-Mead	
Mezclas evaluadas	Parámetros	
	C ₁	C ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.1503 m)	-4.7375*10 ⁻⁶	-5.6250*10 ⁻⁷
Benceno + Dibenzotiofeno (0.1602 m)	-4.1000*10 ⁻⁶	-2.7000*10 ⁻⁶
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.1373 m)	-4.9062*10 ⁻⁶	5.6250*10 ⁻⁸
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1108 m)	-5.8103*10 ⁻⁶	4.7751*10 ⁻⁶

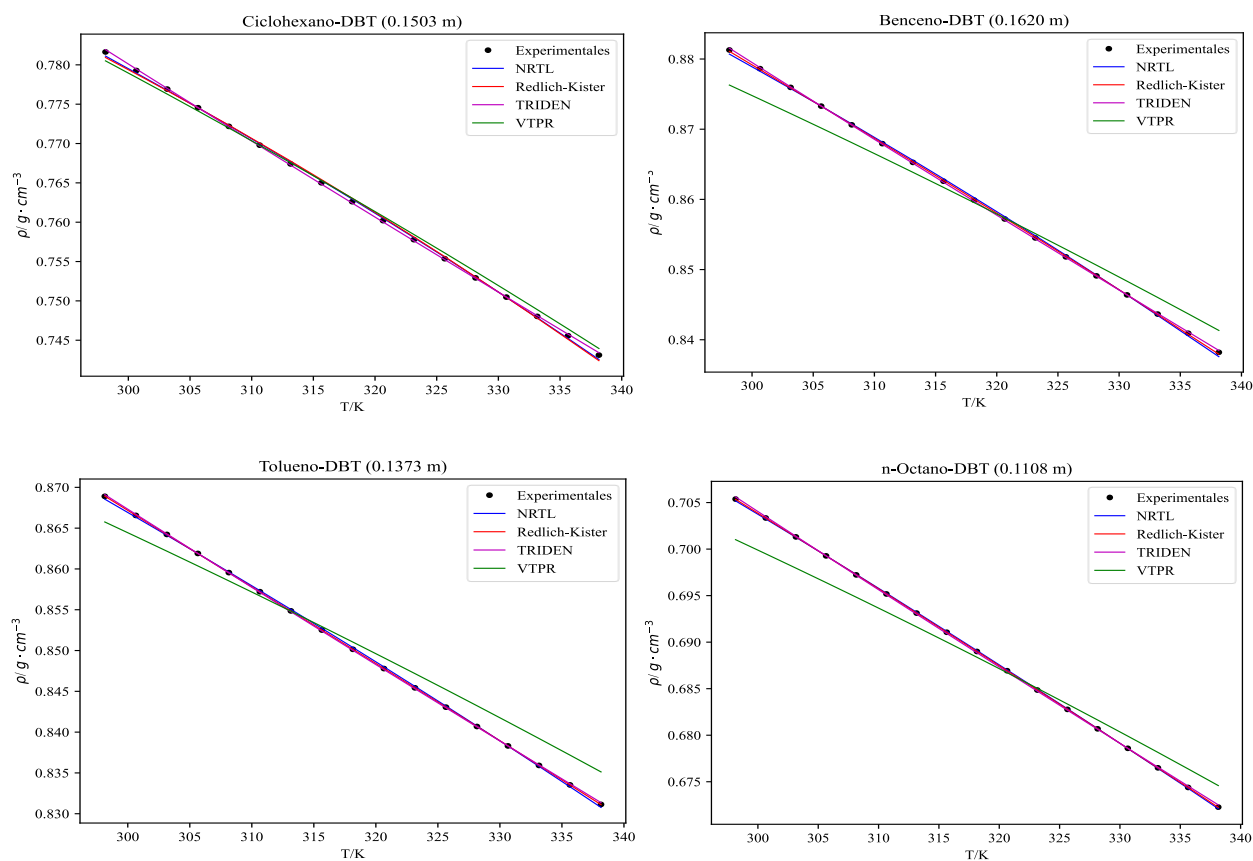
Nota. Las propiedades críticas de los compuestos puros fueron extraídas de la librería Thermo: Chemical properties component of Chemical Engineering Design Library (ChEDL) (2016-2023). Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

4.2.3 Validación De Modelos Y Comparativos

A continuación, se muestran los diagramas generados para cada mezcla estudiada, donde se pueden observar el comportamiento de los modelos de densidad estudiados en relación con los datos experimentales recopilados.

Figura 3

Gráfica de modelos de densidad ajustados en comparación con datos experimentales recopilados



Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al Apéndice B.

Como se puede observar en la **Figura 3**, los modelos de Redlich-Kister, NRTL y TRIDEN presentan un muy buen ajuste para las tres mezclas estudiadas, mientras que el modelo VTPR presenta altas desviaciones entre los datos experimentales y los predichos. A diferencia de la viscosidad, para la densidad no parece existir uno o varios modelos que se comporten de manera diferente frente a un solvente de cadena lineal como el n-Octano, sin embargo, el modelo VTPR

es el único que muestra una variación significativa respecto a la mezcla estudiada, ya que en el caso del Ciclohexano el error disminuye en comparación con las demás mezclas.

Este comportamiento se puede deber a la naturaleza del modelo, la cual está basada en una ecuación de estado, siendo más difícil para el modelo predecir propiedades en líquidos como la densidad, mientras que los demás modelos estudiados son correlaciones matemáticas, las cuales tienen un origen más empírico que teórico, lo que les facilita la predicción de datos. Adicionalmente, las reglas de mezcla empleadas para el modelo VTPR son sencillas, lo que puede inducir error en el modelo al asumir un comportamiento lineal en la mezcla.

Para esclarecer cuales modelos presentan un mejor ajuste en cada caso evaluado, a continuación, se presentan los resultados de los SSRES asociados a cada uno.

Tabla 12

SSRES de modelos de densidad para el primer grupo de concentraciones estudiadas

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.1503 m)	Benceno + DBT (0.1602 m)	Tolueno + DBT (0.1373 m)	n-Octano + DBT (0.1108 m)
Redlich-Kister	$1.43 \cdot 10^{-6}$	$1.80 \cdot 10^{-6}$	$6.19 \cdot 10^{-7}$	$1.50 \cdot 10^{-7}$
NRTL	$2.44 \cdot 10^{-6}$	$2.69 \cdot 10^{-7}$	$2.72 \cdot 10^{-9}$	$3.28 \cdot 10^{-9}$
TRIDEN	$4.36 \cdot 10^{-7}$	$3.38 \cdot 10^{-7}$	$2.26 \cdot 10^{-7}$	$2.67 \cdot 10^{-7}$
VTPR	$7.80 \cdot 10^{-6}$	$1.12 \cdot 10^{-4}$	$9.00 \cdot 10^{-5}$	$8.16 \cdot 10^{-5}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice C**.

Como se puede observar en la **Tabla 12**, el modelo NRTL presenta, en su mayoría, los mejores ajustes, seguido por el modelo TRIDEN. Si bien Redlich-Kister no presenta valores de

SSRES grandes, los modelos con un trasfondo termodinámico como TRIDEN y NRTL predicen de mejor manera las densidades de las mezclas.

Como se mencionó anteriormente, el modelo VTPR usado es el que más error produce, lo cual se ve reflejado en la **Tabla 12**, donde se puede apreciar que, a pesar de tener un SSRES menor a cero en todos los casos, el valor es siempre superior en comparación con los demás modelos para cada mezcla estudiada, lo que explica la lejanía del comportamiento del modelo respecto a los datos experimentales presentados por Moreno y Cáceres (2023). Adicionalmente, es importante aclarar que esta diferencia entre el modelo VTPR con los datos experimentales es más evidente en la **Figura 3** que en la **Tabla 12**, lo cual se debe a la escala de la propiedad estudiada, pues en la gráfica se observa claramente la diferencia entre valores de densidad con 0.05 unidades de distancia, por lo que al calcular el SSRES del modelo el valor obtenido es menor a 0 pese a ser evidente el mal ajuste que el modelo presenta.

4.3 Velocidad Del Sonido

4.3.1 Modelos De Velocidad Del Sonido

La velocidad del sonido es una propiedad termofísica que se ve afectada por la presión y temperatura a la que el fluido se encuentra sometido; para describir esta propiedad en un amplio rango de temperaturas y presiones, Daridon et al. (1995, como se citó en Queimada, Coutinho, Marrucho, & Daridon, 2006) propusieron una robusta correlación de nueve parámetros, la cual en términos de temperatura y presión reducidas se describe como:

$$\frac{1}{u} = \frac{A_0 + A_1 T_r + A_2 T_r^2 + A_3 T_r^3 + B P_r + C P_r^2 + D P_r^3}{1 + E_1 T_r + F P_r} \quad (\text{Ec. 30})$$

Donde $A_0, A_1, A_2, A_3, B, C, D, E_1$, y F , son los parámetros para ajustar.

4.3.2 Modelado Matemático Y Optimización De Parámetros De Modelos De Velocidad Del

Sonido

A continuación, se observan los métodos de optimización que mejores resultados obtuvieron en el ajuste de parámetros de los modelos de densidad estudiados, junto con los parámetros obtenidos para cada modelo.

Tabla 13

Parámetros y métodos de optimización para Daridon

Método de optimización	Nelder-Mead								
Mezclas evaluadas	Parámetros								
	A ₀	A ₁	A ₂	A ₃	B	C	D	E ₁	F
Ciclohexano + DBT (0.1503 m)	9.58 *10 ⁻⁹	-4.72 *10 ⁻⁷	-1.88 *10 ⁻⁶	5.57 *10 ⁻⁶	5.57 *10 ⁻⁷	5.22 *10 ⁻⁶	-2.25 *10 ⁻⁷	-1.80 *10 ⁻⁵	-5.60 *10 ⁻⁴
Benceno + DBT (0.1602 m)	4.63 *10 ⁻⁷	-2.95 *10 ⁻⁷	-1.83 *10 ⁻⁶	5.47 *10 ⁻⁶	-6.89 *10 ⁻⁸	9.54 *10 ⁻¹⁰	-2.25 *10 ⁻⁷	1.62 *10 ⁻⁴	3.64 *10 ⁻⁴
Tolueno + DBT (0.1373 m)	4.27 *10 ⁻⁷	-2.28 *10 ⁻⁷	-1.40 *10 ⁻⁶	5.16 *10 ⁻⁶	-1.84 *10 ⁻⁷	2.98 *10 ⁻⁷	-2.47 *10 ⁻⁷	2.59 *10 ⁻⁴	-2.01 *10 ⁻⁴
n-Octano + DBT (0.1108 m)	5.04 *10 ⁻⁷	-4.05 *10 ⁻⁷	-2.57 *10 ⁻⁶	7.28 *10 ⁻⁶	6.29 *10 ⁻⁹	5.69 *10 ⁻⁷	-1.32 *10 ⁻¹⁰	6.94 *10 ⁻⁵	-2.51 *10 ⁻⁴

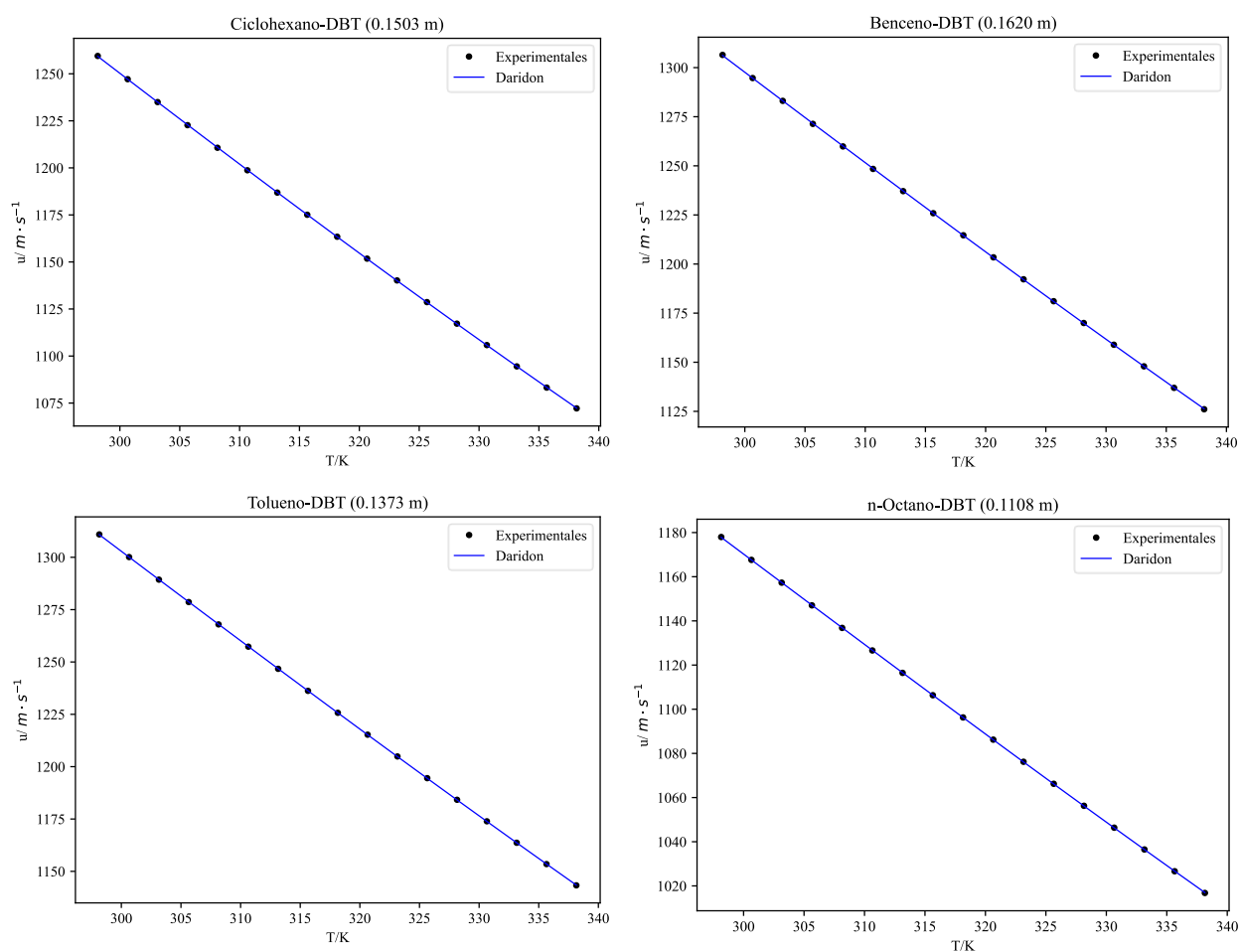
Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice A**.

4.3.3 Validación De Modelos Y Comparativos

A continuación, se muestran los diagramas generados para cada mezcla estudiada, donde se pueden observar el comportamiento de los modelos de velocidad del sonido estudiados en relación con los datos experimentales recopilados.

Figura 4

Gráfica de modelos de densidad ajustados en comparación con datos experimentales recopilados



Nota. Los resultados mostrados corresponden a solo uno de los tres grupos de mezclas estudiadas

por Moreno y Cáceres (2023), si desea ver los resultados para los grupos restantes por favor diríjase al **Apéndice B**.

Como se puede observar en la **Figura 4**, la correlación de Daridon sigue satisfactoriamente el comportamiento de los datos experimentales, sin presentar ninguna anomalía a lo largo de las temperaturas estudiadas; el satisfactorio ajuste de esta correlación puede ser atribuido a la linealidad mostrada por los datos experimentales, siendo más sencillo para la correlación adecuarse a este comportamiento aún si se trata de una ecuación pensada para hidrocarburos de cadena lineal larga que, en este caso, se extrapoló al uso de mezclas con solventes principalmente cíclicos.

5. Conclusiones

Para la viscosidad de mezclas de hidrocarburos existe una mayor variedad de modelos disponibles, entre los cuales el modelo de Eyring-Hirschfelder presentó de manera general un mejor ajuste a los datos experimentales de mezclas binarias de solventes orgánicos con DBT a diferentes temperaturas estudiadas en esta investigación. Adicionalmente, los modelos de Warrington, McAllister, y Gumbert-Nissan mostraron ser modelos igualmente eficientes para la predicción de datos de viscosidad en mezclas líquidas, siendo estos dos últimos modelos más recomendables para modelar mezclas con solventes de cadena cíclica.

Para la densidad de mezclas de hidrocarburos los modelos con enfoque termodinámico como NRTL y TRIDEN se recomiendan ampliamente, pues son los que mejores resultados obtuvieron en la predicción de densidades, sin embargo, correlaciones como Redlich-Kister presentan resultados cercanos a la realidad, que, si bien no son tan precisas como los obtenidos por los modelos previamente mencionados, son resultados que emulan satisfactoriamente la propiedad real de la mezcla. Finalmente, para las condiciones del estudio realizado el modelo VTPR usado

es desaconsejable, ya que al ser un modelo basado en una ecuación de estado su predicción de propiedades como la densidad es menos precisa, además requiere de reglas de mezcla más robustas que representen mejor el comportamiento de la mezcla.

Para la velocidad del sonido, el modelo de Daridon mostró un excelente ajuste a los datos experimentales, por lo que su uso para modelar la velocidad del sonido de mezclas de compuestos orgánicos líquidos es recomendable para las condiciones estudiadas.

6. Recomendaciones

Para futuros estudios sobre propiedades termofísicas de mezclas binarias de solventes orgánicos con DBT, o estudios de naturaleza similar, se aconseja realizar mediciones a los componentes puros, ya que las reglas de mezcla involucradas en algunos modelos, y en algunos casos los modelos mismos, suelen requerir estos datos, los cuales en ocasiones son difíciles de encontrar en la literatura; adicionalmente, se recomienda tener en cuenta el tipo de moléculas usadas y las condiciones del estudio, ya que existe una dificultad para medir propiedades de compuestos que se encuentren en estado sólido a las condiciones de estudio.

A pesar de que en este estudio los resultados obtenidos para la densidad con el modelo VTPR usado no fueron satisfactorios, diversos autores han usado modelos de tipo VTPR con resultados exitosos, por lo que se recomienda, para investigaciones futuras de la misma naturaleza que esta, evaluar el uso de reglas de mezcla de mayor complejidad que se ajusten de mejor manera al comportamiento de la mezcla estudiada, adicionalmente, se recomienda evaluar desarrollos diferentes de modelos tipo VTPR, como puede ser el usado por Montaña Montoya (2011), que involucró la parte residual de la energía de Gibbs de exceso e implementó reglas de mezcla más robustas.

Referencias Bibliográficas

- Ahlers, J., & Gmehling, J. (2001). Development of an universal group contribution equation of state I . Prediction of liquid densities for pure compounds with a volume translated Peng – Robinson equation of state. 191, 177–188.
- Avramov, I., & Milchev, A. (1988). Effect of disorder on diffusion and viscosity in condensed systems. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 104(2), 253–260.
- Caleb Bell and Contributors. (2016-2023). Thermo: Chemical properties component of Chemical Engineering Design Library (ChEDL). Recuperado de <https://github.com/CalebBell/thermo>.
- Gajardo-Parra, N. F., Campos-Franzani, M. I., Hernández, A., Escalona, N., & Canales, R. I. (2020). Density and Viscosity of Binary Mixtures Composed of Anisole with Dodecane, Hexadecane, Decalin, or 1,4-Dioxane: Experiments and Modeling. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 65(4). <https://doi.org/10.1021/acs.jced.9b01159>
- Grunberg, L., & Nissan, A. H. (1949). Mixture law for viscosity. *Nature*.
- Govinda Rao, K., Nagarjuna, A., Babu, S., & Kalimulla, T. (2018). Speed of sound studies of the binary liquid mixtures of N-methyl formamide with aniline at different temperatures. *Materials Today: Proceedings*, 5(13). <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2018.08.073>
- Haghighbakhsh, R., Duarte, A. R. C., & Raeissi, S. (2021). Viscosity investigations on the binary systems of (1 chcl: 2 ethylene glycol) des and methanol or ethanol. *Molecules*, 26(18), 5513.
- Holderbaum, T., & Gmehling, J. (1991). PSRK: A Group Contribution Equation of State Based on UNIFAC. *Fluid Phase Equilibria*, 70(2–3), 251–265. [https://doi.org/10.1016/0378-3812\(91\)85038-V](https://doi.org/10.1016/0378-3812(91)85038-V)

- Ihmels, E. C., & Gmehling, J. (2001). Densities of toluene, carbon dioxide, carbonyl sulfide, and hydrogen sulfide over a wide temperature and pressure range in the sub- and supercritical state. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 40(20), 4470–4477. <https://doi.org/10.1021/ie001135g>
- Jouyban, A., Soleymani, J., Jafari, F., Khoubnasabjafari, M., & Acree, W. E. (2013). Mathematical representation of viscosity of ionic liquid + molecular solvent mixtures at various temperatures using the Jouyban–Acree model. *Journal of Chemical Engineering Data*, 58(5), 1523–1528.
- LEÓN GALINDO, A. J., & ORTEGA, M. K. (2013). ESTUDIO DEL PROCESO DE DESULFURACIÓN DE PETRÓLEO Y SU APLICACIÓN EN LOS CRUDOS PESADOS Y EXTRAPESADOS.
- Maass, D., de Oliveira, D., de Souza, A. A. U., & Souza, S. M. A. G. U. (2014). Biodesulfurization of a System Containing Synthetic Fuel Using *Rhodococcus erythropolis* ATCC 4277. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 174(6). <https://doi.org/10.1007/s12010-014-1189-3>
- Mauro, J. C., Yue, Y., Ellison, A. J., Gupta, P. K., & Allan, D. C. (2009). Viscosity of glass-forming liquids.
- McAllister, R. A. (1960). The viscosity of liquid mixtures. *AIChE Journal*, 6(4), 427–431.
- Montaño Montoya, D. F. (2011). Propiedades termofísicas de sistemas cloroalcano-éter: estudio experimental y mediante métodos de contribución de grupos [Tesis doctoral, Universidad de Zaragoza].

Moreno Berrocal, N., & Cáceres Guevara, M. C. (2023). Evaluación de propiedades termofísicas de mezclas binarias formadas por solventes orgánicos con dibenzotiofeno de uso común en la hidrodeshulfuración. Universidad Industrial de Santander.

Organización Marítima Internacional. (2020). Sulphur 2020. IMO. Recuperado de <https://www.imo.org/es/MediaCentre/HotTopics/Paginas/Sulphur-2020.aspx>

Peneloux, A., Rauzy, E., & Freze, R. (1982). A consistent correction for Redlich-Kwong-Soave volumes. *Fluid Phase Equilibria*, 8, 7-23.

Pérez Colas, M., Nápoles García, M. F., & de la Cruz Aragonese, M. D. L. (2021). ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMOFÍSICAS DE LA CERVEZA EMBOTELLADA, BAJO CONDICIONES DE PASTEURIZACIÓN. *Centro Azúcar*, 48(1), 105-116.

Pina-Martinez, A., Privat, R., Jaubert, J.-N., & Peng, D.-Y. (2018). Updated versions of the generalized Soave -function suitable for the Redlich-Kwong and Peng-Robinson equations of state. *Fluid Phase Equilibria*. <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2018.12.007>.

Pinto, D. D., & Knuutila, H. K. (2019). Density calculations of aqueous amine solutions using an excess Gibbs based model. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 36, 1075-1087.

Pinto, D. D., Monteiro, J. G. S., Johnsen, B., Svendsen, H. F., & Knuutila, H. (2014). Density measurements and modelling of loaded and unloaded aqueous solutions of MDEA (N-methyldiethanolamine), DMEA (N,N-dimethylethanolamine), DEEA (diethylethanolamine) and MAPA (N-methyl-1,3-diaminopropane). *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 25, 173-185. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijggc.2014.04.017>

- Queimada, A. J., Coutinho, J. A. P., Marrucho, I. M., & Daridon, J. L. (2006). Corresponding-states modeling of the speed of sound of long-chain hydrocarbons. *International journal of thermophysics*, 27, 1095-1109.
- Riaño Núñez, D. L. (2023). Evaluation of thermophysical properties of heterocyclic and polycyclic compounds for in situ upgrading applications [Tesis de maestría, Universidad Industrial de Santander].
- Roque-Villalonga, G., Camaraza-Medina, Y., García-Morales, O. F., Retirado-Mediaceja, Y., & Rubio-Gonzalez, A. M. (2023). Modelación empírica de propiedades termofísicas de aceros inoxidables austeníticos. *Ingeniería Mecánica*, 26(1), 16-24.
- Shahabi-Ghahfarokhy, A., Nakhaei-Kohani, R., Nait Amar, M., & Hemmati-Sarapardeh, A. (2022). Modelling density of pure and binary mixtures of normal alkanes: Comparison of hybrid soft computing techniques, gene expression programming, and equations of state. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 208. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2021.109737>
- Sirbu, F., Dragoescu, D., Shchamialiou, A., & Khasanshin, T. (2019). Densities, speeds of sound, refractive indices, viscosities and their related thermodynamic properties for n-hexadecane + two aromatic hydrocarbons binary mixtures at temperatures from 298.15 K to 318.15 K. *Journal of Chemical Thermodynamics*, 128. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2018.08.036>
- Verma, S., Gahlyan, S., Rani, M., & Maken, S. (2018). Transport Properties and Modeling of Viscosity for Binary Mixtures of Butanol Isomers + Hydrocarbons. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 43(11). <https://doi.org/10.1007/s13369-018-3276-1>
- Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., Haberland, M., Reddy, T., Cournapeau, D., Burovski, E., Peterson, P., Weckesser, W., Bright, J., van der Walt, S. J., Brett, M., Wilson, J., Millman, K. J., Mayorov, N., Nelson, A. R. J., Jones, E., Kern, R., Larson, E., Carey, C. J.,

- Polat, İ., Feng, Y., Moore, E. W., VanderPlas, J., Laxalde, D., Perktold, J., Cimrman, R., Henriksen, I., Quintero, E. A., Harris, C. R., Archibald, A. M., Ribeiro, A. H., Pedregosa, F., van Mulbregt, P., & SciPy 1.0 Contributors. (2020). SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python. *Nature Methods*, 17(3), 261-272.
- Waterton, S. C. (1932). The viscosity-temperature relationship and some inferences on the nature of molten and of plastic glass. *Journal of the Society of Glass Technology*, 16(4), 244–249.
- W., Youliang, J., Huaqing, Z., Fan, Z., & George, K. (2020). CALTPP: A general program to calculate thermophysical properties. *Journal of Materials Science and Technology*, 42. <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2019.12.005>

Apéndice A. Resultados De Viscosidad Obtenidos Para Los Grupos De Mezclas Estudiadas

Restantes

A continuación, se presentan los parámetros calculados de cada modelo de viscosidad para los restantes dos grupos de composiciones de las mezclas estudiadas.

Tabla 14

Parámetros y métodos de optimización para Grunberg-Nissan

Método de optimización	Nelder-Mead, CG	
Mezclas evaluadas	Parámetros	
	G ₁	G ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	0.2071	0.0161
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	2.4958	0.0113
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	0.9951	0.0142
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	0.3030	0.0127
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	-0.0369	0.0166
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	1.1733	0.0159
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	1.3294	0.0141
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	0.2300	0.0132

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 15

Parámetros y métodos de optimización para Avramov-Michelyv

Método de optimización	CG		
Mezclas evaluadas	Parámetros		
	η_{∞}	τ	α
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	0.1143	287.6966	2.5560
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	0.0927	278.0178	2.3982
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	0.1512	250.9862	3.0445
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	0.0501	302.3501	1.5998
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	0.1046	292.5875	2.4245
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	0.0657	298.6759	1.9636
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	0.0227	405.3934	1.1507
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	0.1395	249.6524	2.9843

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 16*Parámetros y métodos de optimización para Waterton*

Método de optimización	CG		
Mezclas evaluadas	Parámetros		
	η_{∞}	K	C
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	0.0251	307.5204	125.0433
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	0.0275	268.1195	126.1135
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	0.0148	471.4315	3.4974
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	0.0252	317.2563	65.5701
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	0.0100	533.6680	28.9808
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	0.0169	389.7905	58.6870
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	0.0183	414.9477	25.5903
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	0.0337	249.9018	107.8993

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 17*Parámetros y métodos de optimización para Jouyban-Acree*

Método de optimización	COBYLA, Nelder-Mead		
Mezclas evaluadas	Parámetros		
	A ₀	A ₁	A ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	597.6892	-783.0552	311.7811
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	689.5038	-903.8790	359.7620
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	625.5240	-819.9397	326.5266
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	481.4683	-465.0920	451.6745
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	595.3229	-779.9089	310.5222
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	709.1356	-929.2589	370.0045
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	666.5487	-873.8343	347.8256
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	499.4745	-487.4598	454.7155

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 18*Parámetros y métodos de optimización para McAllister*

Método de optimización	Nelder-Mead, TNC					
Mezclas evaluadas	Parámetros					
	K ₁	K ₂	K ₃	K ₄	K ₅	K ₆
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	15.4040	779.6494	326.7849	35.6527	5.3594	-0.0140
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	2.2548	-0.0004	94.8497	-0.2801	5.6105	-0.0142
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	-1.2323	47.1192	-14.9069	2.8835	3.9134	-0.0099
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	0.1197	0.1269	-5.4973	12.5982	2.5262	-0.0064
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	1.2316	222.5834	24.4366	21.4782	4.8937	-0.0128
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	0.1105	0.0381	-3.1388	9.3033	4.8006	-0.0124
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	-0.9240	20.1084	-15.8966	4.8736	3.9098	-0.0099
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	3.5670	-0.0088	280.1067	-0.6925	2.5754	-0.0064

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 19*Parámetros y métodos de optimización para Eyring-Hirschfelder*

Método de optimización	Nelder-Mead	
Mezclas evaluadas	Parámetros	
	ER	T _A
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	1470.4498	293.7512
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	1288.8102	270.8041
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	1107.1983	260.7526
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	1088.9195	254.2456
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	1469.8796	294.3646
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	1280.9658	271.8331
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	-231.4242	165455.3134
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	1085.6147	254.7883

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

A continuación, se presentan los parámetros calculados de cada modelo de densidad para los restantes dos grupos de composiciones de las mezclas estudiadas.

Tabla 20*Parámetros y métodos de optimización para Redlich-Kister*

Método de optimización	Powell			
Mezclas evaluadas	Parámetros			
	a ₁	a ₂	b ₁	b ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	4318.4678	-13.5052	251.2255	1758.2030
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	4071.6864	-19.0409	234.3829	1758.3238
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	3887.2731	7.3725	180.8441	1754.0479
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	3523.5782	4.8393	181.1383	1754.0002
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	3281.5325	-12.8854	144.2801	1761.2887
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	3132.2318	19.4389	134.4326	1762.4303
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	2949.0910	-2.2268	103.9671	1758.8916
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	2698.7002	-5.1435	102.5750	1757.2785

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 21*Parámetros y métodos de optimización para NRTL*

Método de optimización	Powell					
Mezclas evaluadas	Parámetros					
	a_{12}	a_{21}	b_{12}	b_{21}	α_{12}	α_{21}
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	-16.0196	-0.3907	-1121.5626	-56.8043	0.1351	-0.0496
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	-15.3172	0.0504	-592.1527	-16.1073	0.1656	-8.8761
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	-16.2747	-0.7596	-1687.5132	-187.5329	0.0958	0.0239
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	-14.9479	-0.1106	-1057.5226	-43.8364	0.1338	-0.4312
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	-13.3816	0.0307	-488.2093	-9.5636	0.1655	-18.7082
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	-13.6003	-0.0937	-1004.1049	-58.5161	0.1277	-0.3418
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	-12.9901	-0.0355	-1011.6634	-47.7698	0.1235	-1.1893
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	-13.1912	-0.3208	-1291.2553	-61.0581	0.0971	-0.8964

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 22
Parámetros y métodos de optimización para TRIDEN

Método de optimización	Nelder-Mead									
Mezclas evaluadas	Parámetros									
	A _R	B _R	C _R	C _T	D _R	E _T	b ₀	b ₁	b ₂	b ₃
Ciclohexano + DBT (0.2277 m)	0.018	0.124	425.942	0.117	0.256	102.856	169.537	12.435	-32.015	5.041
Benceno + DBT (0.2452 m)	0.017	0.116	468.890	0.083	0.271	95.290	174.135	12.976	-34.416	5.119
Tolueno + DBT (0.2080 m)	0.019	0.127	449.221	0.087	0.240	95.964	171.079	12.259	-30.911	4.720
n-Octano + DBT (0.1678 m)	0.024	0.153	497.229	0.099	0.317	109.008	117.144	6.880	-18.991	6.199
Ciclohexano + DBT (0.3044 m)	0.018	0.127	434.392	0.107	0.262	102.899	170.347	12.493	-31.619	5.143
Benceno + DBT (0.3284 m)	0.024	0.137	382.082	0.093	0.237	94.082	176.981	12.770	-30.828	4.369
Tolueno + DBT (0.2785 m)	0.020	0.128	468.913	0.089	0.250	96.778	169.639	12.499	-32.076	4.822
n-Octano + DBT (0.2247 m)	0.024	0.155	407.013	0.204	0.262	35.901	41.396	43.577	31.811	-5.011

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 23*Parámetros y métodos de optimización para VTPR*

Método de optimización	Nelder-Mead	
Mezclas evaluadas	Parámetros	
	C ₁	C ₂
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.2277 m)	$-4.7375 \cdot 10^{-6}$	$-5.6250 \cdot 10^{-7}$
Benceno + Dibenzotiofeno (0.2452 m)	$-4.0500 \cdot 10^{-6}$	$-2.5500 \cdot 10^{-6}$
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2080 m)	$-4.9047 \cdot 10^{-6}$	$1.1719 \cdot 10^{-7}$
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.1678 m)	$-5.6170 \cdot 10^{-6}$	$5.1873 \cdot 10^{-6}$
Ciclohexano + Dibenzotiofeno (0.3044 m)	$-4.7375 \cdot 10^{-6}$	$-5.6250 \cdot 10^{-7}$
Benceno + Dibenzotiofeno (0.3284 m)	$-4.0500 \cdot 10^{-6}$	$-2.5500 \cdot 10^{-6}$
Tolueno + Dibenzotiofeno (0.2785 m)	$-4.8375 \cdot 10^{-6}$	$3.3750 \cdot 10^{-7}$
n-Octano + Dibenzotiofeno (0.2247 m)	$-5.5085 \cdot 10^{-6}$	$5.3509 \cdot 10^{-6}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

A continuación, se presentan los parámetros calculados del modelo de velocidad del sonido estudiado para los restantes dos grupos de composiciones de las mezclas.

Tabla 24

Parámetros y métodos de optimización para Daridon

Método de optimización	Nelder-Mead								
Mezclas evaluadas	Parámetros								
	A ₀	A ₁	A ₂	A ₃	B	C	D	E ₁	F
Ciclohexano + DBT (0.2277 m)	7.11 *10 ⁻⁷	-1.41 *10 ⁻⁶	-3.01 *10 ⁻⁷	4.68 *10 ⁻⁶	9.79 *10 ⁻⁷	-3.53 *10 ⁻⁶	-1.07 *10 ⁻⁶	1.19 *10 ⁻⁵	1.89 *10 ⁻³
Benceno + DBT (0.2452 m)	4.98 *10 ⁻⁷	-3.57 *10 ⁻⁷	-1.42 *10 ⁻⁶	5.04 *10 ⁻⁶	-3.38 *10 ⁻⁷	-1.75 *10 ⁻⁸	2.99 *10 ⁻⁷	5.03 *10 ⁻⁵	1.10 *10 ⁻³
Tolueno + DBT (0.2080 m)	4.27 *10 ⁻⁷	-2.28 *10 ⁻⁷	-1.40 *10 ⁻⁶	5.15 *10 ⁻⁶	-1.82 *10 ⁻⁷	3.07 *10 ⁻⁷	-2.50 *10 ⁻⁷	2.63 *10 ⁻⁴	-2.04 *10 ⁻⁴
n-Octano + DBT (0.1678 m)	4.81 *10 ⁻⁷	-1.49 *10 ⁻⁷	-2.84 *10 ⁻⁶	7.33 *10 ⁻⁶	-5.42 *10 ⁻⁸	4.45 *10 ⁻⁷	2.12 *10 ⁻⁸	2.24 *10 ⁻⁴	-3.83 *10 ⁻⁴
Ciclohexano + DBT (0.3044 m)	5.33 *10 ⁻⁷	-1.82 *10 ⁻⁷	-2.13 *10 ⁻⁶	5.56 *10 ⁻⁶	-3.39 *10 ⁻⁷	-1.25 *10 ⁻⁷	-9.55 *10 ⁻¹⁰	1.36 *10 ⁻⁴	4.29 *10 ⁻⁴
Benceno + DBT (0.3284 m)	9.50 *10 ⁻⁷	-4.80 *10 ⁻⁷	-5.65 *10 ⁻⁶	1.02 *10 ⁻⁵	-1.63 *10 ⁻⁷	1.69 *10 ⁻⁹	4.71 *10 ⁻⁸	2.29 *10 ⁻⁵	6.50 *10 ⁻⁴

Mezclas evaluadas	Parámetros								
	A ₀	A ₁	A ₂	A ₃	B	C	D	E ₁	F
Tolueno + DBT (0.2785 m)	4.27 *10 ⁻⁷	-2.28 *10 ⁻⁷	-1.40 *10 ⁻⁶	5.15 *10 ⁻⁶	-1.84 *10 ⁻⁷	3.28 *10 ⁻⁷	-2.43 *10 ⁻⁷	2.53 *10 ⁻⁴	-1.99 *10 ⁻⁴
n-Octano + DBT (0.2247 m)	4.24 *10 ⁻⁷	2.39 *10 ⁻⁸	-3.23 *10 ⁻⁶	7.61 *10 ⁻⁶	-3.28 *10 ⁻⁸	6.72 *10 ⁻⁷	-1.47 *10 ⁻⁷	2.21 *10 ⁻⁴	-2.05 *10 ⁻⁵

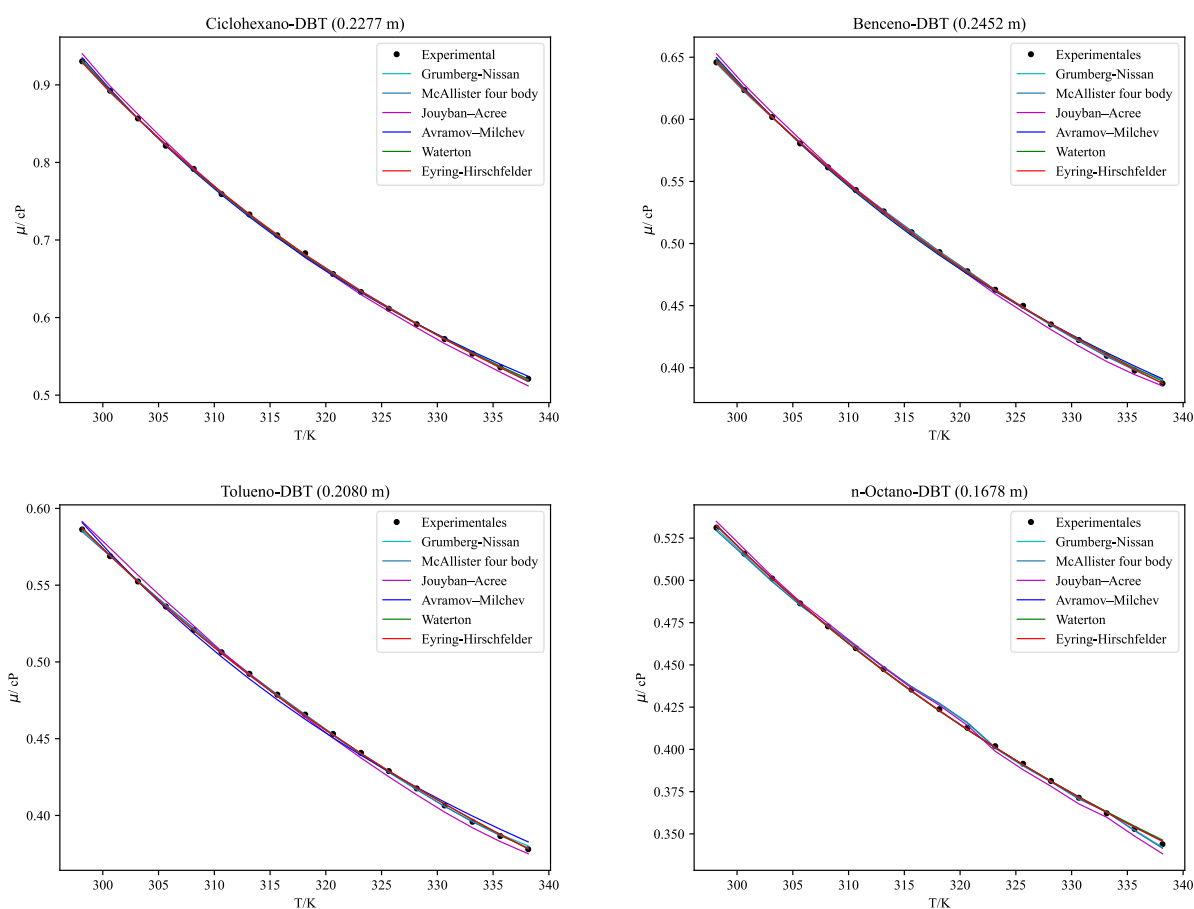
Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Apéndice B. Gráficos Obtenidos Para Los Grupos De Mezclas Estudiadas Restantes

A continuación, se muestran las gráficas de los modelos de viscosidad obtenidas para los restantes dos grupos de composiciones de las mezclas estudiadas, así como los gráficos de residuales obtenidos para los modelos en cada caso.

Figura 5

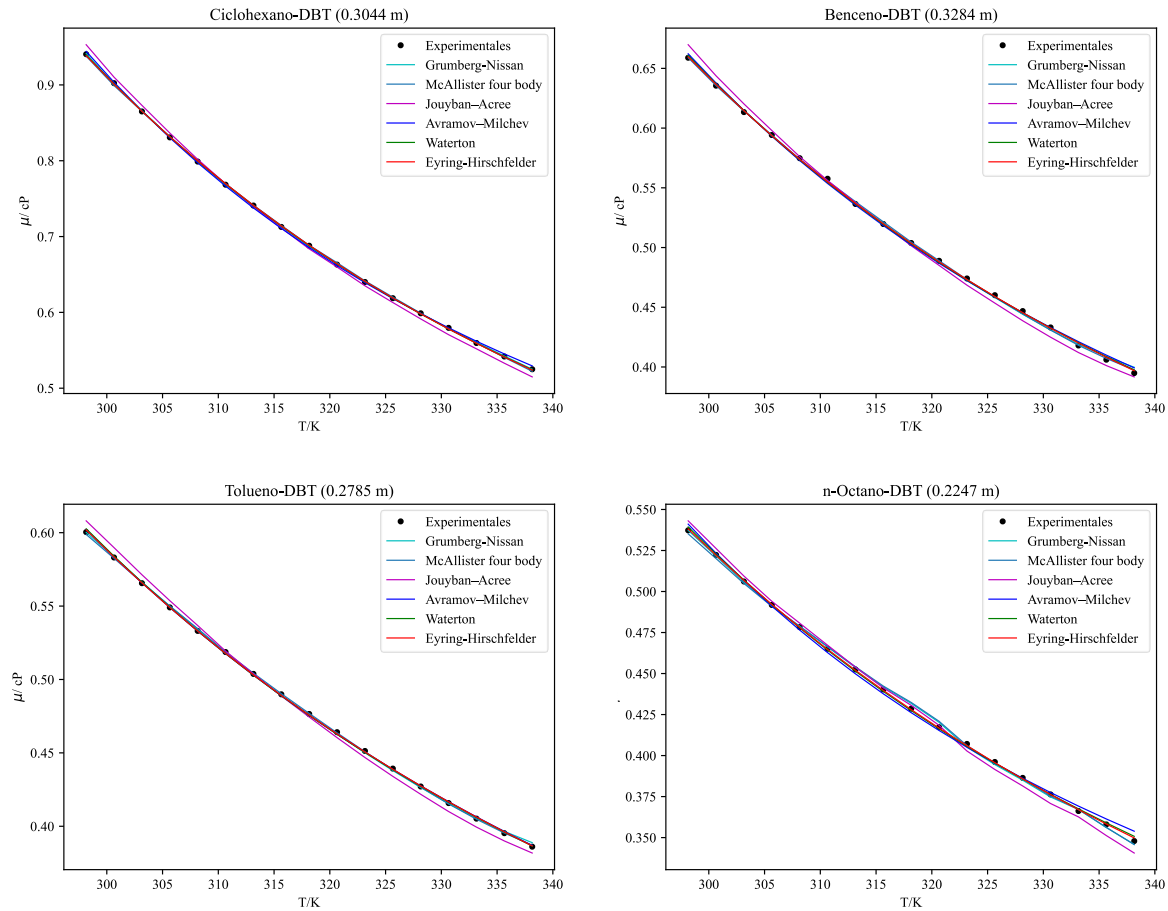
Gráficas de modelos de viscosidad ajustados para el segundo grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 6

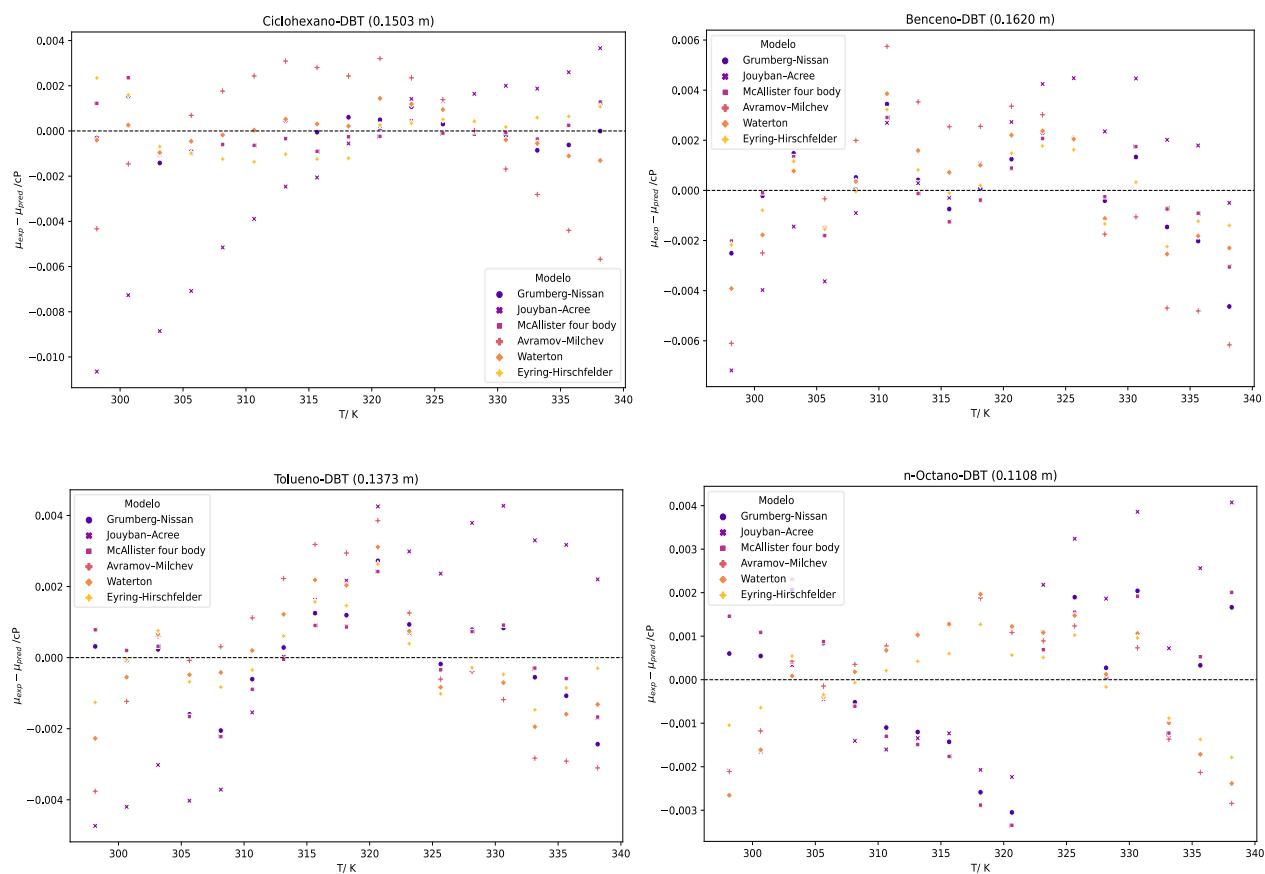
Gráficas de modelos de viscosidad ajustados para el tercer grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 7

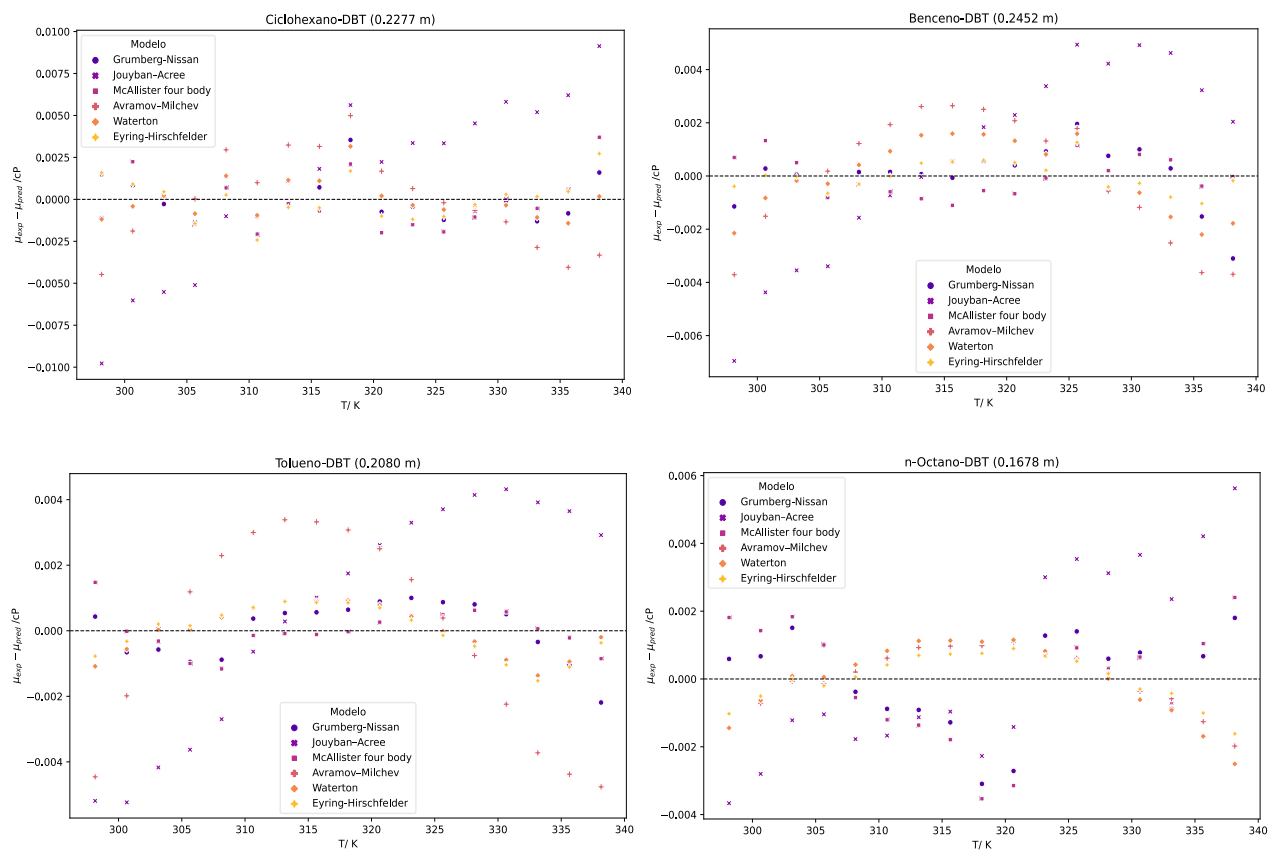
Gráficas de residuales de modelos de viscosidad para el primer grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 8

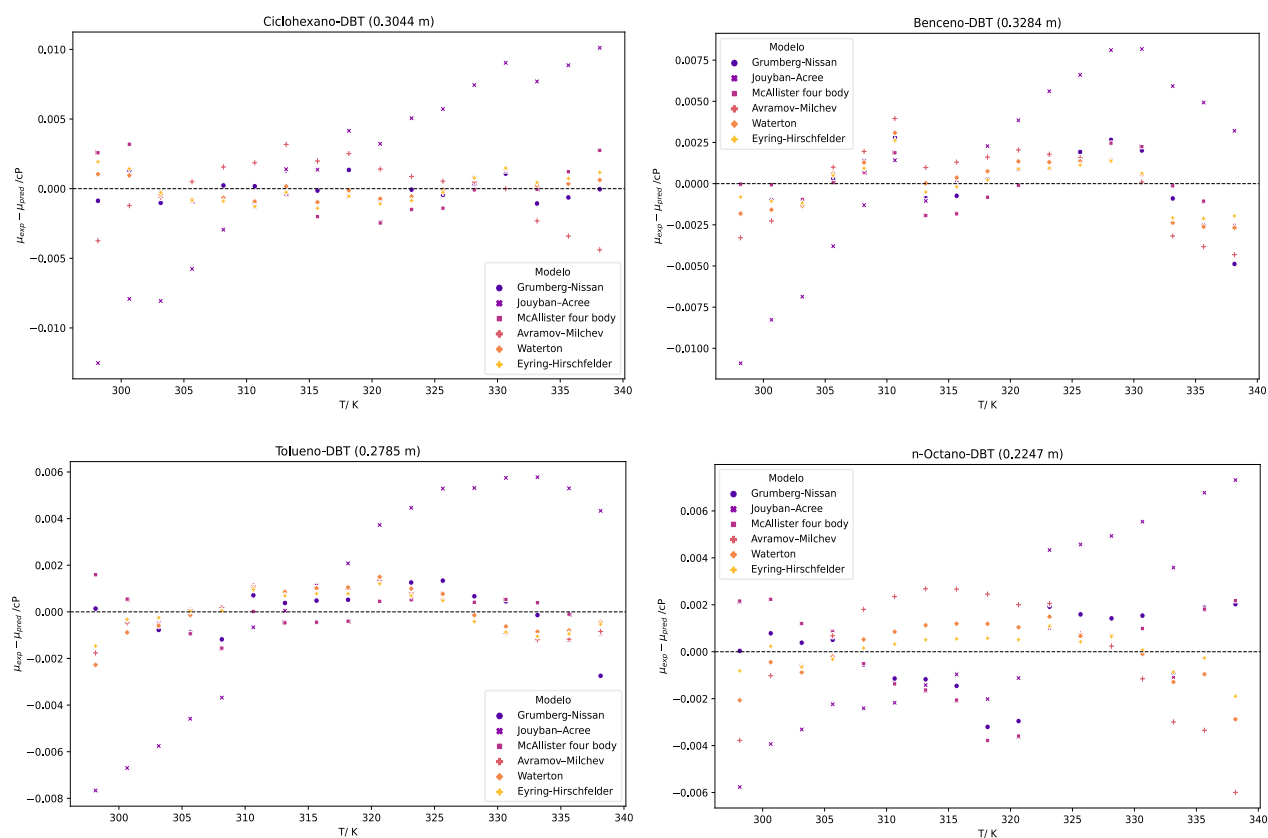
Gráficas de residuales de modelos de viscosidad para el segundo grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 9

Gráficas de residuales de modelos de viscosidad para el tercer grupo de composiciones estudiadas

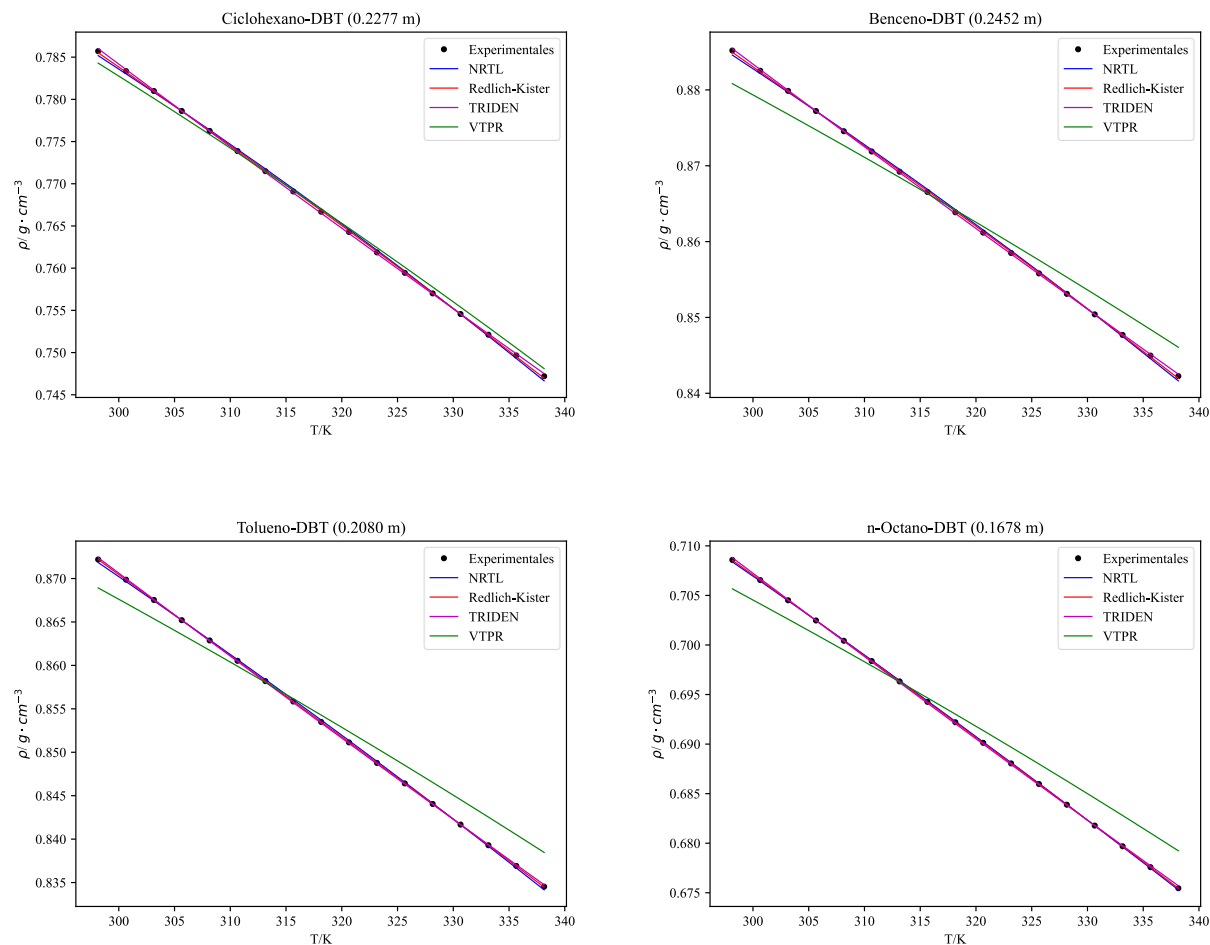


Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

A continuación, se muestran las gráficas de los modelos de densidad obtenidas para los restantes dos grupos de composiciones de las mezclas estudiadas, así como los gráficos de residuales obtenidos para los modelos en cada caso.

Figura 10

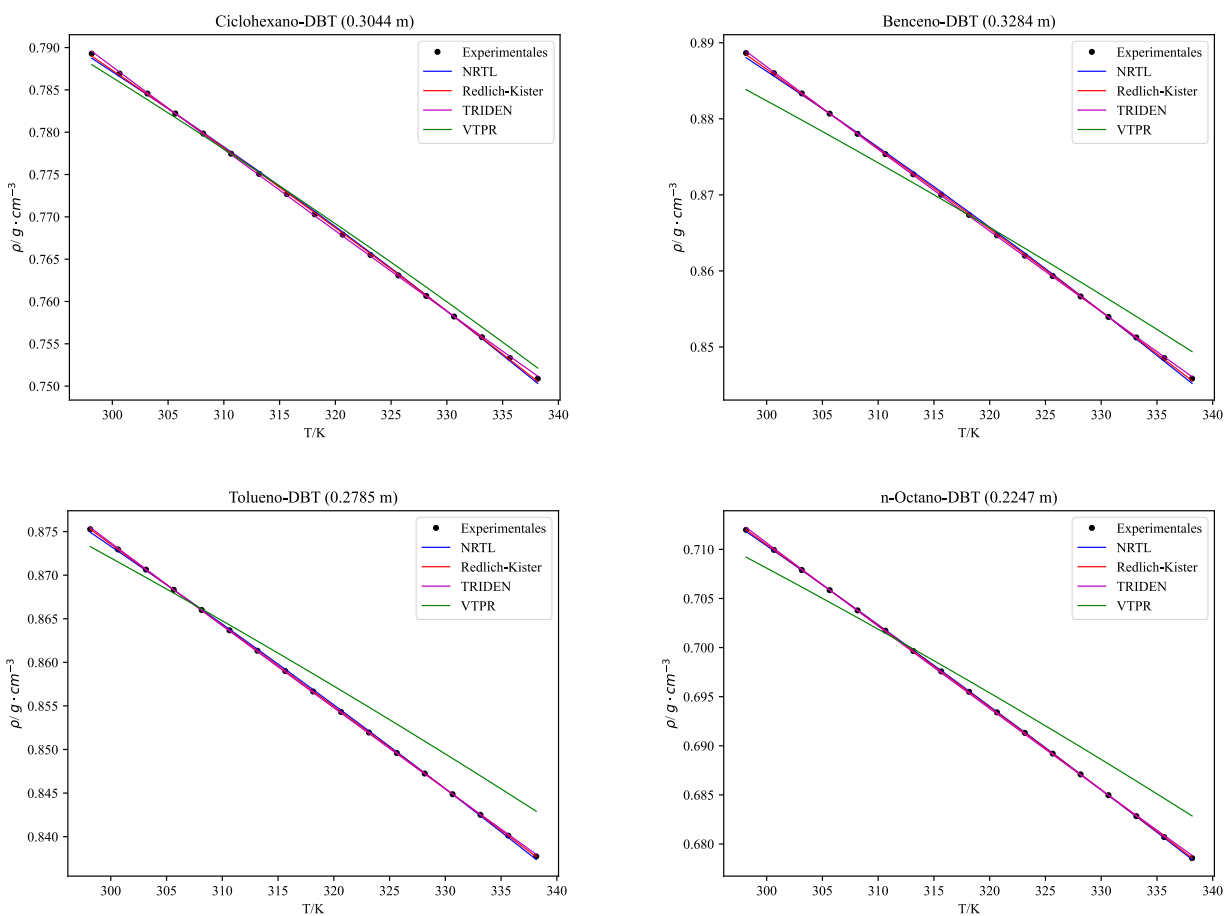
Gráficas de modelos de densidad para el segundo grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 11

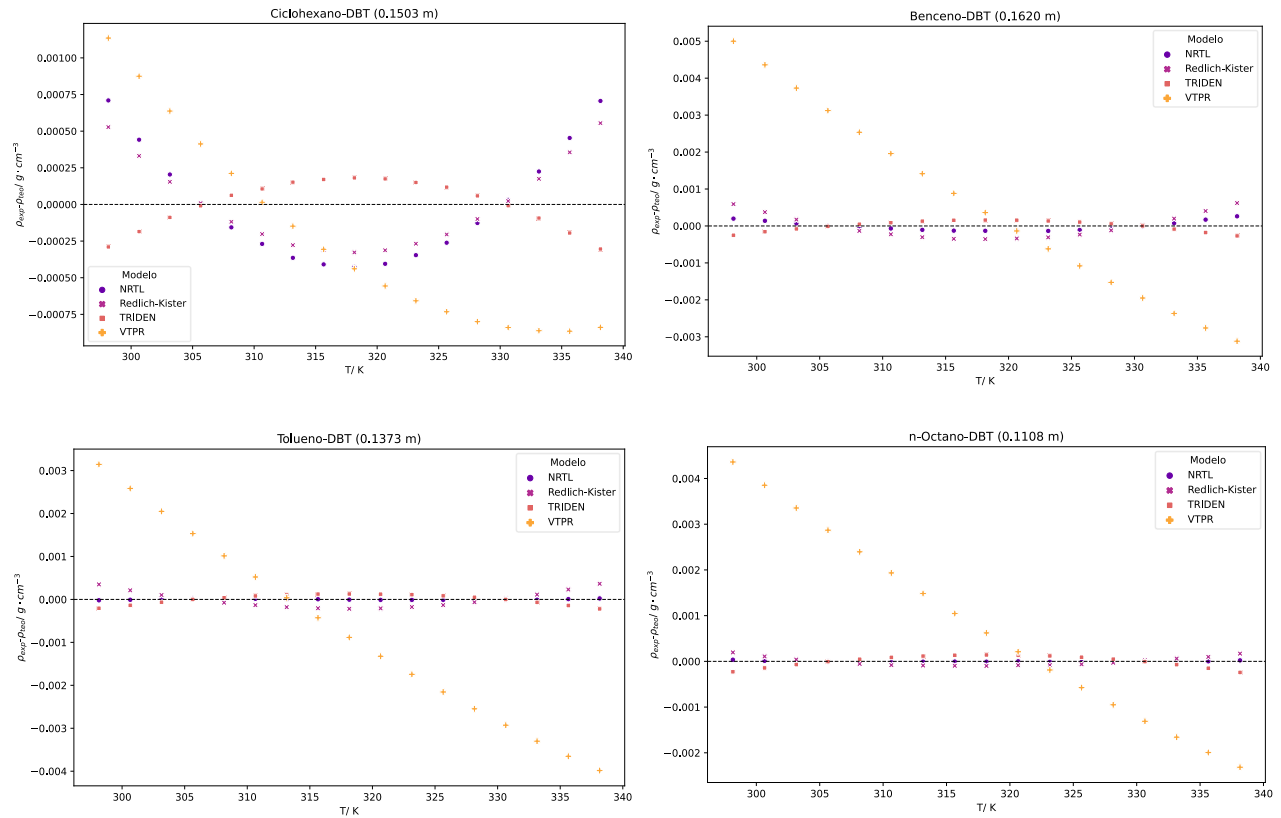
Gráficas de modelos de densidad ajustados para el tercer grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 12

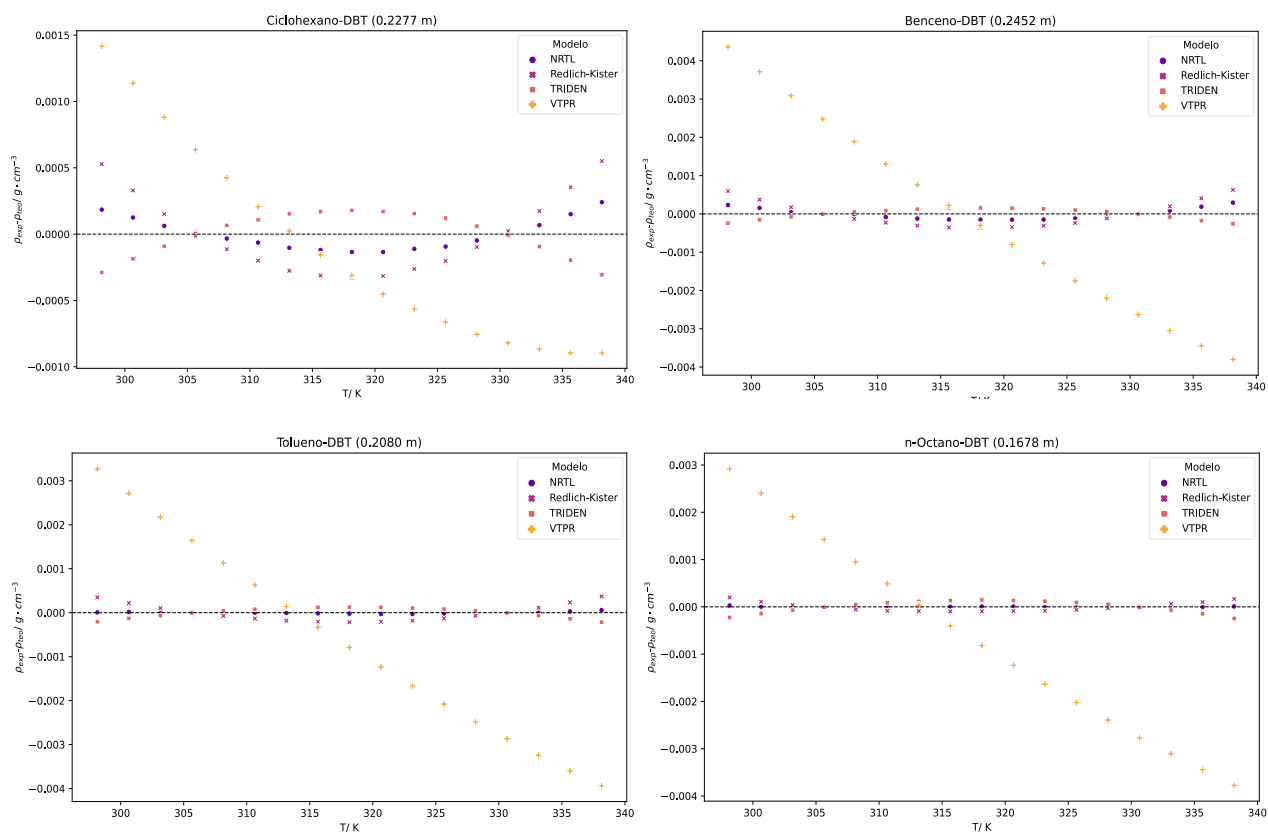
Gráficas de residuales de modelos de densidad para el primer grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 13

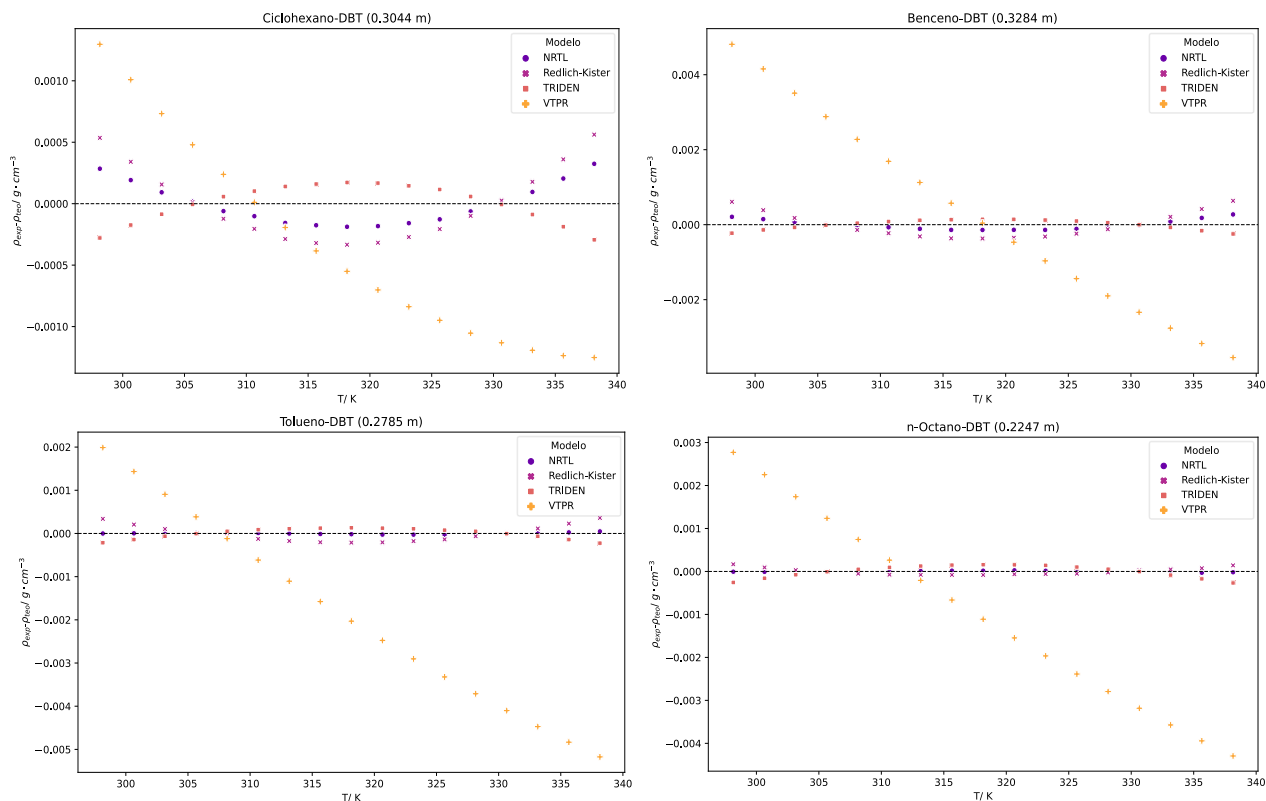
Gráficas de residuales de modelos de densidad para el segundo grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 14

Gráficas de residuales de modelos de densidad para el tercer grupo de composiciones estudiadas

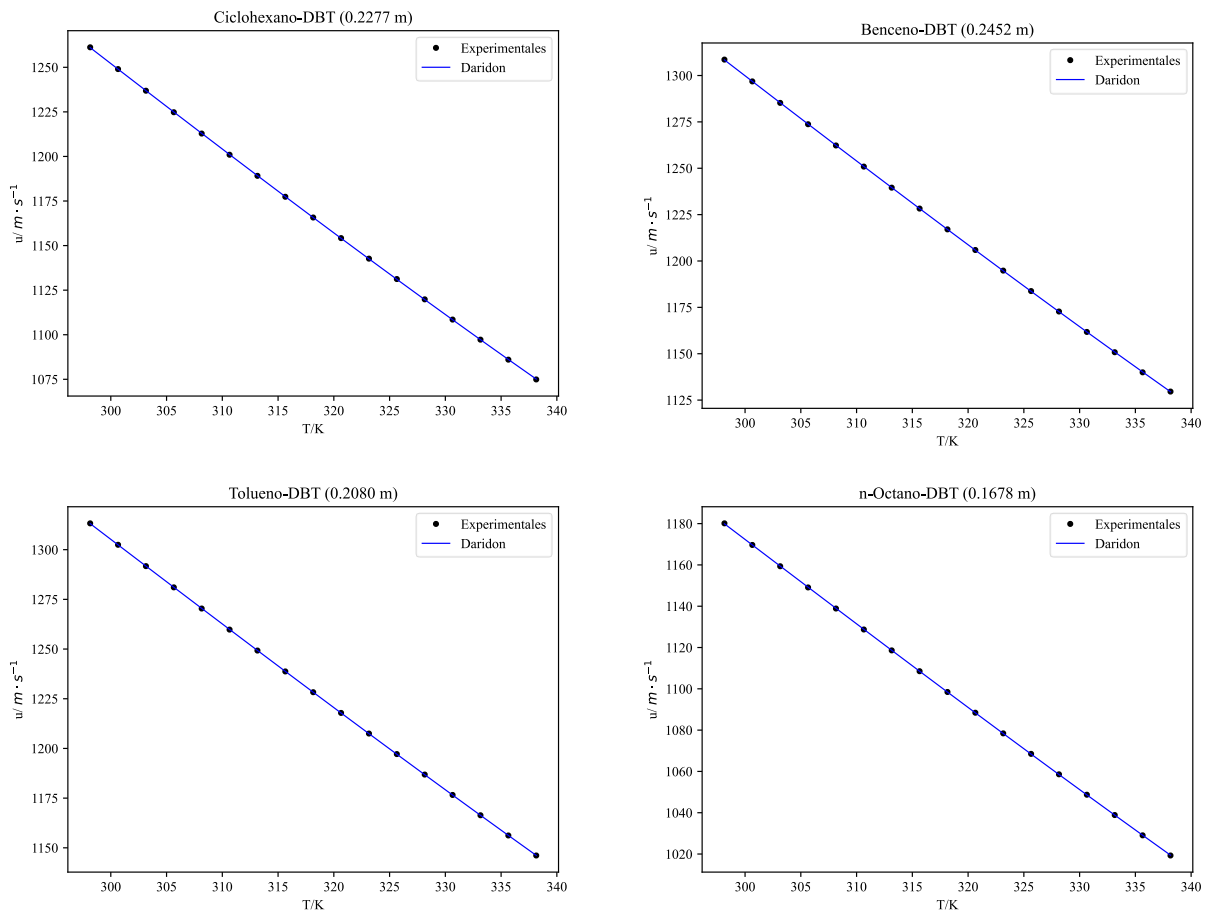


Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

A continuación, se muestran las gráficas del modelo de velocidad del sonido estudiado obtenidas para los restantes dos grupos de composiciones de las mezclas.

Figura 15

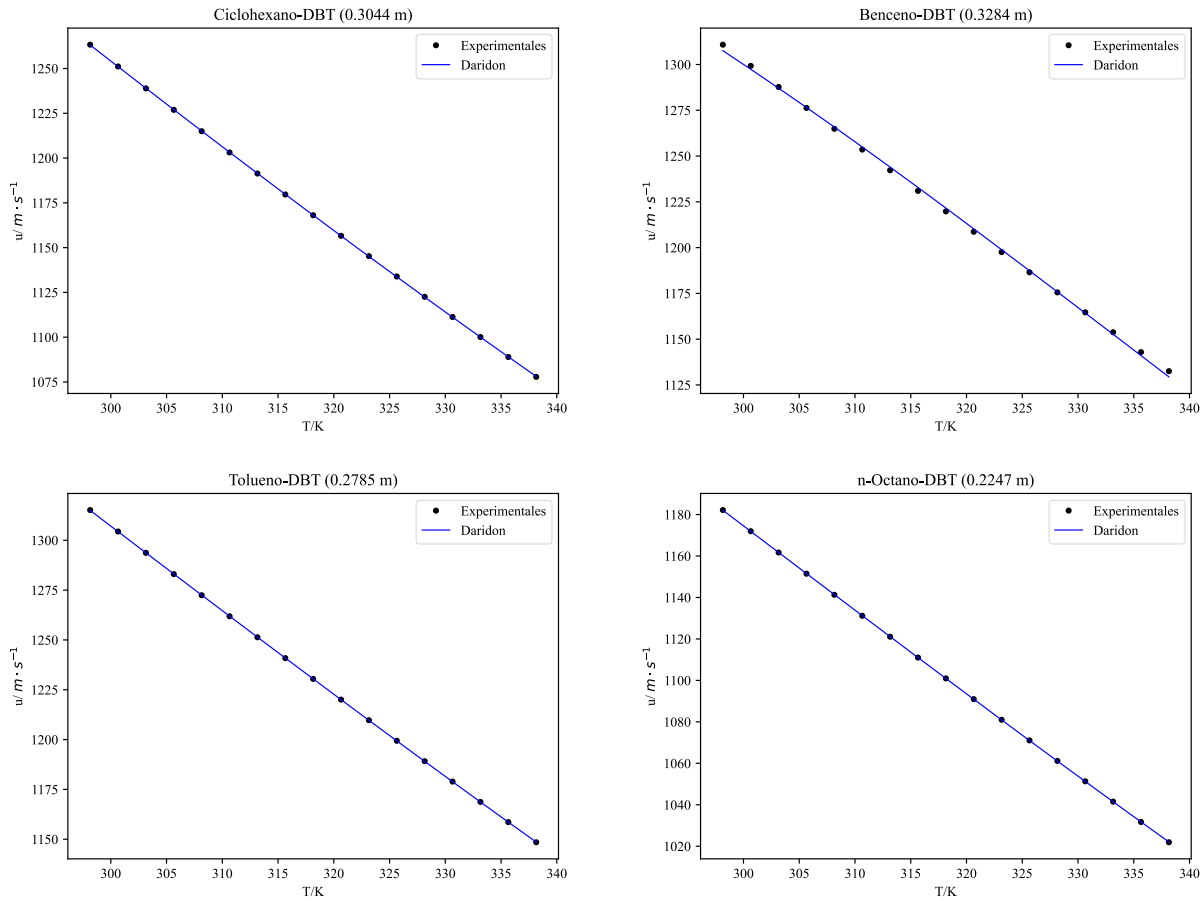
Gráficas del modelo de velocidad del sonido para el segundo grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Figura 16

Gráficas del modelo de velocidad del sonido para el tercer grupo de composiciones estudiadas



Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Apéndice C. SSRES Obtenidos Para Los Grupos De Mezclas Estudiadas Restantes

A continuación, se presentan los SSRES calculados para los modelos estudiados de viscosidad.

Tabla 25

SSRES de modelos de viscosidad para el segundo grupo de concentraciones estudiadas

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.2277 m)	Benceno + DBT (0.2452 m)	Tolueno + DBT (0.2080 m)	n-Octano + DBT (0.1678 m)
Gumberg-Nissan	$2.86 \cdot 10^{-5}$	$2.08 \cdot 10^{-5}$	$1.32 \cdot 10^{-5}$	$3.34 \cdot 10^{-5}$
Jouyban-Acree	$4.61 \cdot 10^{-4}$	$2.17 \cdot 10^{-4}$	$2.01 \cdot 10^{-4}$	$1.39 \cdot 10^{-4}$
McAllister	$4.46 \cdot 10^{-5}$	$8.85 \cdot 10^{-6}$	$6.69 \cdot 10^{-6}$	$4.80 \cdot 10^{-5}$
Avramov-Milchev	$1.20 \cdot 10^{-4}$	$8.55 \cdot 10^{-5}$	$1.42 \cdot 10^{-4}$	$1.40 \cdot 10^{-5}$
Waterton	$2.18 \cdot 10^{-5}$	$2.96 \cdot 10^{-5}$	$9.11 \cdot 10^{-6}$	$1.98 \cdot 10^{-5}$
Eyring-Hirschfelder	$2.63 \cdot 10^{-5}$	$5.42 \cdot 10^{-6}$	$9.40 \cdot 10^{-6}$	$8.57 \cdot 10^{-6}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 26

SSRES de modelos de viscosidad para el tercer grupo de concentraciones estudiadas

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.3044 m)	Benceno + DBT (0.3284 m)	Tolueno + DBT (0.2785 m)	n-Octano + DBT (0.2247 m)
Gumberg-Nissan	$1.14 \cdot 10^{-5}$	$6.68 \cdot 10^{-5}$	$1.88 \cdot 10^{-5}$	$4.42 \cdot 10^{-5}$
Jouyban-Acree	$7.95 \cdot 10^{-4}$	$5.51 \cdot 10^{-4}$	$3.81 \cdot 10^{-4}$	$2.91 \cdot 10^{-4}$

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.3044 m)	Benceno + DBT (0.3284 m)	Tolueno + DBT (0.2785 m)	n-Octano + DBT (0.2247 m)
McAllister	$4.51 \cdot 10^{-5}$	$3.43 \cdot 10^{-5}$	$9.50 \cdot 10^{-6}$	$6.03 \cdot 10^{-5}$
Avramov-Milchev	$8.19 \cdot 10^{-5}$	$9.87 \cdot 10^{-5}$	$1.47 \cdot 10^{-5}$	$1.12 \cdot 10^{-4}$
Waterton	$9.11 \cdot 10^{-6}$	$4.72 \cdot 10^{-5}$	$1.61 \cdot 10^{-5}$	$2.55 \cdot 10^{-5}$
Eyring- Hirschfelder	$1.82 \cdot 10^{-5}$	$2.94 \cdot 10^{-5}$	$1.07 \cdot 10^{-1}$	$8.75 \cdot 10^{-6}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

A continuación, se presentan los SSRES calculados para los modelos estudiados de densidad.

Tabla 27

SSRES de modelos de densidad para el segundo grupo de concentraciones estudiadas

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.2277 m)	Benceno + DBT (0.2452 m)	Tolueno + DBT (0.2080 m)	n-Octano + DBT (0.1678 m)
Redlich-Kister	$1.42 \cdot 10^{-6}$	$1.82 \cdot 10^{-6}$	$6.28 \cdot 10^{-7}$	$1.49 \cdot 10^{-7}$
NRTL	$2.29 \cdot 10^{-7}$	$3.45 \cdot 10^{-7}$	$8.77 \cdot 10^{-9}$	$1.78 \cdot 10^{-9}$
TRIDEN	$4.39 \cdot 10^{-7}$	$3.19 \cdot 10^{-7}$	$2.17 \cdot 10^{-7}$	$2.69 \cdot 10^{-7}$
VTPR	$9.39 \cdot 10^{-6}$	$1.07 \cdot 10^{-4}$	$8.99 \cdot 10^{-5}$	$7.94 \cdot 10^{-5}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 28*SSRES de modelos de densidad para el tercer grupo de concentraciones estudiadas*

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.3044 m)	Benceno + DBT (0.3284 m)	Tolueno + DBT (0.2785 m)	n-Octano + DBT (0.2247 m)
Redlich-Kister	$1.49 \cdot 10^{-6}$	$1.91 \cdot 10^{-6}$	$5.97 \cdot 10^{-7}$	$1.05 \cdot 10^{-7}$
NRTL	$4.66 \cdot 10^{-7}$	$3.00 \cdot 10^{-7}$	$6.91 \cdot 10^{-9}$	$3.70 \cdot 10^{-9}$
TRIDEN	$3.99 \cdot 10^{-7}$	$2.76 \cdot 10^{-7}$	$2.34 \cdot 10^{-7}$	$3.36 \cdot 10^{-7}$
VTPR	$1.30 \cdot 10^{-5}$	$1.13 \cdot 10^{-4}$	$1.42 \cdot 10^{-4}$	$9.63 \cdot 10^{-5}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

A continuación, se presentan los SSRES calculados para el modelo estudiado de velocidad del sonido.

Tabla 29*SSRES de modelo de velocidad del sonido para el segundo grupo de concentraciones estudiadas*

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.2277 m)	Benceno + DBT (0.2452 m)	Tolueno + DBT (0.2080 m)	n-Octano + DBT (0.1678 m)
Daridon	$2.30 \cdot 10^{-1}$	$1.71 \cdot 10^{-1}$	$6.79 \cdot 10^{-2}$	$1.59 \cdot 10^{-1}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Tabla 30

SSRES de modelo de velocidad del sonido para el tercer grupo de concentraciones estudiadas

Modelo	Ciclohexano + DBT (0.3044 m)	Benceno + DBT (0.3284 m)	Tolueno + DBT (0.2785 m)	n-Octano + DBT (0.2247 m)
Daridon	$3.23 \cdot 10^{-1}$	$4.67 \cdot 10^1$	$9.19 \cdot 10^{-2}$	$7.41 \cdot 10^{-2}$

Nota. Los resultados mostrados corresponden a uno de los tres grupos de mezclas estudiadas por Moreno y Cáceres (2023)

Apéndice D. Scripts Desarrollados

A continuación, se muestra el QR correspondiente al GitHub en el cual se encuentran los scripts desarrollados para este trabajo de investigación, si desea ver el código por favor ingrese al siguiente **enlace** o escanee el código QR mostrado en la Figura 17.

Figura 17

Código QR GitHub para ver scripts desarrollados para el trabajo de investigación

