

NUEVOS MODELOS PARA PREDECIR EL PUNTO *FLASH* PARA ALCANOS PUROS

NEW MODELS TO PREDICT FLASH POINTS IN PURE ALKANES

Richart Vázquez-Román¹, Edna M. Valenzuela-Acosta¹ y Florianne Castillo-Borja*²

(1) Instituto Tecnológico de Celaya, Departamento de Ingeniería Química,
Av. Tecnológico s/n, 38010 Celaya, Gto. - México.

(2) Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica,
Av. López Mateos 1801 Ote., 20256 Aguascalientes, Ags. - México.

*autor de contacto (e-mail: floriannecb@gmail.com)

Recibido: 04/08/2010 - Evaluado: 26/08/2010 - Aceptado: 30/08/2010

RESUMEN

En este trabajo se desarrollan dos modelos predictivos de la temperatura normal de punto de inflamación. Los modelos propuestos consideran términos adimensionales en su expresión, los cuales han reducido el error en la predicción de la temperatura del punto de inflamación para alcanos. Se observó que la relación entre la temperatura en el punto de inflamación y la de ebullición aparentemente tienen poca variabilidad por lo cual se puede deducir una regla heurística. La dispersión del error con la regla heurística se reduce al incorporar las energías de evaporación y reacción en la correlación. Se desarrolló un método basado en contribución de grupos combinada con los grupos adimensionales propuestos para reducir aún más el error en la predicción de la temperatura del punto de inflamación, incluyendo la capacidad de distinguir la diferencia entre los isómeros. Los resultados obtenidos de los modelos propuestos son aceptables y mejoran a las correlaciones de uso actual.

ABSTRACT

Two models to predict the temperature at the normal flash point are developed in this work. The proposed models consider dimensionless terms in their expressions, which have reduced the error in predicting the flash point temperature for alkanes. It was firstly observed that the relationship between the flash point and boiling temperatures have seemingly little variability and hence a heuristic rule can be deduced. The dispersion of the error when predicting with the heuristic rule is reduced by incorporating the evaporation and reaction energies in the correlation. A method based on group contributions combined with the proposed dimensionless group is developed to further decrease the error in predicting flash point temperatures, including the ability to distinguish differences among isomers. The results of the proposed models are acceptable and improve currently used correlations.

Palabras clave: temperatura del punto de inflamación; alcanos; contribución de grupos; correlaciones

Keywords: flash point temperature; alkanes; group contributions method; correlations

INTRODUCCIÓN

En principio, una mezcla no se puede quemar cuando la composición es menor a la indicada por el límite inferior de inflamabilidad, LFL. La mezcla tampoco se quema cuando su composición es muy alta lo que conlleva a otro límite denominado límite superior de inflamabilidad, UFL. Así, una mezcla es inflamable cuando la composición se encuentra entre el LFL y el UFL (Crowl y Louvar, 2002). Por otro lado, el punto *flash* de un líquido inflamable se define como la temperatura en la cual la presión de vapor del líquido es tal que produce una concentración de vapor en el aire que debiera asumirse como el límite inferior de inflamabilidad (Lees, 1996). La razón es que este punto corresponde a la condición de temperatura más baja en que se produce una combustión espontánea del compuesto en presencia de una fuente de ignición. La consecuencia es que el sistema, en estas condiciones, puede llegar a iniciar un incendio o explosión por lo cual delimita las condiciones del proceso de combustión. La diferencia con el LFL es que este último se refiere a la temperatura de saturación mientras que el punto *flash* se refiere a una temperatura inferior al punto de ebullición (Prugh, 2008).

Algunos incendios y explosiones de líquidos relacionados con el punto *flash* han sido ampliamente documentados. Por ejemplo, una explosión ocurrió en una columna de destilación cuando se separaban líquidos de alto punto de ebullición cuyos puntos *flash* de los compuestos eran de 80°C hacia arriba (Kletz, 1975). Una serie de sucesos provocó que la mezcla llegara al punto *flash* generando la mezcla explosiva. Otro incidente en donde la mezcla manejada llegó a su punto *flash* ocasionando un incendio ocurrió durante la demolición de tuberías. Al realizar los cortes de los tubos, la temperatura se elevó haciendo que los residuos contenidos en las tuberías se evaporaran hasta alcanzar la temperatura del punto *flash* provocando un incendio que ocasionó quemaduras en el personal (Kletz, 1975). Así como estos casos, varios más han sido provocados a causa de la falta de conocimiento del punto *flash*; desafortunadamente no todos los incidentes se encuentran reportados.

Los métodos propuestos para estimar la temperatura del punto *flash* consisten en correlaciones propuestas tanto para componentes puros como para mezclas. Así, el desarrollo de los métodos teóricos termina basándose en información experimental aún para mezclas. Uno de estos trabajos propone una ecuación que ajusta los datos de la temperatura del punto *flash* con la temperatura de ebullición basados en 1221 componentes orgánicos y fracciones de petróleo (Satyanarayana y Rao, 1992). Algunas investigaciones se han desarrollado para familias de compuestos particulares como el caso de los alcanos. Por ejemplo, usando información para 44 alcanos se han aplicado métodos de contribución de grupos y redes neuronales para la predicción de punto *flash* (Yong et al., 2007a). En ese estudio se proponen 16 grupos funcionales que, desafortunadamente, no distinguen isomería en la predicción del punto *flash*. En el mismo año se desarrolló un estudio para la predicción del punto *flash* para 92 alcanos en donde se combinó el método QSPR usando contribución de grupos con redes neuronales (Yong et al., 2007b). Recientemente se desarrolló un trabajo para la predicción de punto *flash* en alcanos basado en el número de carbonos en el compuesto por lo que no se distingue la isomería (Mathieu, 2010).

La importancia de la predicción del punto *flash* es innegable. Se considera que, al tener acceso a la estimación del punto *flash*, se pueden prevenir accidentes. Por esta razón se proponen dos modelos para estimar el punto *flash* para alcanos en este trabajo.

METODOLOGÍA

El fenómeno de combustión se lleva a cabo cuando se alcanza la temperatura de punto *flash* de un líquido inflamable a presión atmosférica y en un medio abierto por lo cual, frecuentemente, no se tiene control alguno de lo que ocurre alrededor. El proceso de aparición de la temperatura de punto *flash* se observa cuando un líquido inflamable, al tener cerca una fuente de ignición, provoca que la temperatura del líquido inflamable circundante tienda a elevarse hasta producir suficiente vapor que, al mezclarse con el oxígeno del aire, resulta en una mezcla inflamable. Cuando la temperatura a la que se llega es tal que se tiene un flamazo momentáneo significa que se llegó a la temperatura mínima en la que el componente puede empezar a quemarse. En ese momento se dice que se encuentra en el punto *flash*.

En el desarrollo de los modelos propuestos para la predicción de punto *flash* en alcanos, las propiedades utilizadas son seleccionadas en base al fenómeno que ocurre. Dos propiedades que se ven involucradas en este punto y que no han sido incorporadas en las correlaciones típicas anteriores son el calor de vaporización y el calor de combustión. Así, la predicción de punto *flash* incluiría tanto la parte física como la parte química. En la parte física, la propiedad de mayor influencia y que ha sido usada es la temperatura normal de ebullición. El calor de evaporación es incluido en este trabajo porque determina la formación del vapor suficiente que, al mezclarse con oxígeno, puede producir el flamazo. En la parte química se incluye el calor de combustión o calor de reacción porque proporciona la energía necesaria para realizar la evaporación. Sólo una parte de esta energía es usada para evaporar el líquido y mantener el ciclo de combustión mientras que una proporción mayor de energía se disipa en el ambiente.

Los métodos propuestos en este trabajo se clasifican en dos tipos: basados en correlaciones directas y en contribuciones de grupos. En la estructura de los modelos, la temperatura de punto *flash* se divide por la temperatura de ebullición mientras que el calor de reacción se divide por el calor de vaporización para usar las propiedades en forma de grupos adimensionales. Así, la metodología empleada consiste simplemente en correlacionar los datos experimentales con las ecuaciones propuestas a través del método clásico de mínimos cuadrados. En este trabajo el ajuste se realiza con el método de optimización implementado directamente en Excel. Los resultados obtenidos con los modelos propuestos se describen a continuación.

MODELO PROPUESTO DE CORRELACIÓN

Una búsqueda de datos permitió conocer el valor experimental para 82 alcanos tanto de la temperatura en el punto *flash* (T_f) como la temperatura normal de ebullición (T_b). Para detectar una posible tendencia, se construyó una gráfica del comportamiento del grupo adimensional de las temperaturas (T_f/T_b) como se indica en la Figura 1a. La misma información se muestra usando el peso molecular como variable independiente para observar el efecto de isomería (Figura 1b). El valor promedio para este grupo adimensional es 0.761 el cual puede usarse como heurística si sólo se conoce el punto normal de ebullición. El promedio absoluto del error usando esta heurística es de 1.4% en cuyo caso el error para algunos compuestos puede ser significativamente alto. La máxima diferencia entre la predicción y el valor experimental obtenido fue de 18 K la cual corresponde al butano. No existe una tendencia clara del error como se aprecia en la Figura 1b y, ciertamente, hay una diferencia muy grande entre el error para el butano y el del resto de los compuestos.

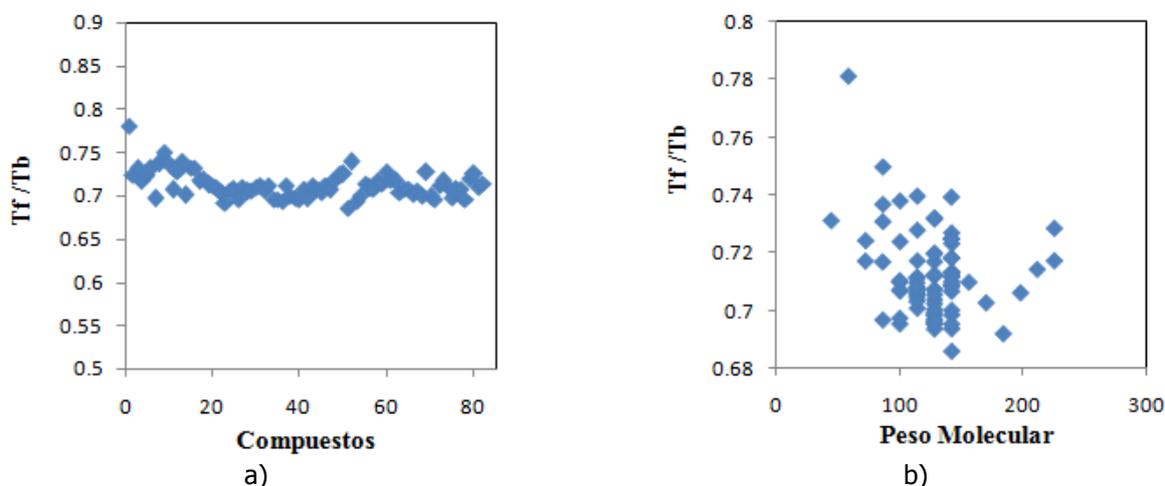


Fig. 1: (a) Comportamiento de T_f/T_b , (b) Comportamiento respecto al peso molecular

Considerando que el error obtenido con la heurística y con los modelos lineales de uso frecuente, el primer modelo propuesto incorpora la forma adimensional de los calores de evaporación y reacción a la relación adimensional anterior para tener:

$$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \right) \quad (1)$$

donde ΔH_r es el calor de reacción, ΔH_v el calor de vaporización y β_0 , β_1 son los parámetros para ajustar.

Desafortunadamente, la lista de 82 alcanos se reduce a 48 debido a la falta de información experimental. De hecho, se tuvieron que estimar algunas propiedades con ASPEN para tener la información completa. El método de Peng-Robinson fue usado para estimar las propiedades termodinámicas en ASPEN. Las Tablas 1a y 1b contienen los datos usados en este trabajo indicando la fuente. El resultado del ajuste indica valores de 0.7259 y -0.00007149 para β_0 y β_1 , respectivamente, con un error absoluto promedio de 1.54%. La Figura 2 muestra la distribución del error y las Tablas 2a y 2b contienen las predicciones con este modelo.

Tabla 1a: Datos de los 48 alcanos.

No.	Compuesto	Tf ¹ (K)	Tb (K)	ΔH_v (BTU/lb)	ΔH_r (BTU/lb)	PM
1	Butano	213	272.63 ³	165.99 ³	-19700 ⁴	58.1
2	Heptano	269	371.57 ³	137.60 ³	-19200 ⁴	100.2
3	Hexano	250	341.88 ³	144.85 ³	-19200 ⁴	86.2
4	Octano	286	398.82 ³	131.73 ³	-20500 ⁴	114.2
5	Pentano	224	309.21 ³	153.67 ³	-19400 ⁴	72.2
6	Propano	169	231.06 ³	183.01 ³	-19962 ⁵	44.1
7	2,2-dimetilbutano	225	322.88 ³	131.79 ³	-19323 ⁵	86.2
8	2,3-dimetilbutano	244	331.41 ³	137.13 ³	-19135 ⁶	86.2
9	2-metilpentano	250	333.41 ³	139.40 ³	-19157 ⁶	86.2
10	2,4-dimetilpentano	261	353.65 ³	127.84 ³	-19263 ⁵	100.2
11	3-metilhexano	258	365.00 ³	133.82 ³	-19310 ⁵	100.2
12	2,3-dimetilhexano	283	388.75 ³	124.88 ³	-19241 ⁵	114.2
13	2,4-dimetilhexano	283	382.58 ³	122.23 ³	-19220 ⁵	114.2
14	2,2,4-trimetilpentano	261	372.39 ³	116.75 ³	-19057 ⁶	114.2
15	2,2-dimetilheptano	297	405.84 ³	115.98 ³	-19155 ⁵	128.3
16	2,6-dimetilheptano	299	408.36 ³	117.66 ³	-19166 ⁵	128.3
17	N-nonano	304	423.96 ³	124.36 ³	-19100 ⁶	128.3
18	2,2,5-trimetilhexano	286	397.24 ³	112.57 ³	-19134 ⁵	128.3
19	N-decano	319	447.30 ³	119.65 ³	-19073 ⁶	142.3
20	2-metilnonano	314	440.15 ³	116.64 ³	-19152 ⁵	142.3
21	N-undecano	333	468.63 ³	116.95 ³	-19048 ⁶	156.3
22	N-dodecano	344	489.47 ³	112.26 ³	-19027 ⁶	170.3
23	N-tridecano	352	508.61 ³	107.96 ³	-19006 ⁶	184.4
24	N-tetradecano	372	526.72 ³	102.82 ³	-18991 ⁶	198.4
25	3-etilpentano	255	366.62 ³	133.04 ³	-19339 ⁵	100.0
26	2,2-dimetilpentano	250	352.34 ³	125.55 ³	-19269 ⁵	100.0
27	2,2,3-trimetilpentano	270	382.99 ³	121.03 ³	-19242 ⁵	114.0

Tabla 1b: Datos de los 48 alcanos (continuación).

No.	Compuesto	Tf ¹ (K)	Tb (K)	ΔHv (BTU/lb)	ΔHv (BTU/lb)	PM
28	3-etilhexano	278	391.7 ³	126.80 ³	-19276 ⁵	114.0
29	3-metilheptano	279	392 ³	128.11 ³	-19268 ⁵	114.0
30	3,3-dimetilhexano	272	385.12 ³	122.84 ³	-19243 ⁵	114.0
31	2,5-dimetilhexano	271	382.26 ³	123.19 ³	-19232 ⁵	114.0
32	3-metiloctano	297	417.37 ³	122.02 ³	-19236 ⁵	128.0
33	2,2,3,4-tetrametilpentano	284	406.16 ³	109.89 ³	-19234 ⁵	128.0
34	2,2,4,4-tetrametilpentano	276	395.43 ³	109.07 ³	-19211 ⁵	128.0
35	2,2,3-trimetilhexano	288	406.75 ³	114.97 ³	-19219 ⁵	128.0
36	Hexadecano	408	560 ³	99.72 ³	-18999 ⁶	226.0
37	2-metilbutano	216	301 ²	174.79 ⁵	-19168 ⁶	72.0
38	2,3,3-trimetilpentano	273	387.9 ²	121.94 ³	-19126 ⁶	114.0
39	2-metilheptano	277	390.8 ²	125.84 ³	-19275 ⁵	114.0
40	2,2-dimetilhexano	269	380 ²	121.82 ³	-19242 ⁵	114.0
41	5-metilnonano	312	438.1 ⁵	115.43 ³	-19197 ⁵	142.0
42	3-metilpentano	241	336.4 ²	143.77 ³	-19422 ⁵	86.0
43	2,3-dimetilpentano	258	362.9 ²	130.83 ³	-19159 ⁶	100.0
44	2,2,3-trimetilbutano	247	354 ²	124.33 ³	-19295 ⁵	100.0
45	2,3,4-trimetilpentano	273	386.6 ²	122.78 ³	-19268 ⁵	114.0
46	3,4-dimetilhexano	277	390.9 ²	125.37 ³	-19285 ⁵	114.0
47	2,2,4-trimetilhexano	288	399.7 ²	112.63 ³	-19212 ⁵	128.0
48	Pentadecano	388	543.8 ²	104.00 ³	-19013 ⁶	212.0
1 (Yong et al., 2007b) 2 (Reid et al., 1987) 3 (Barrufet, 2010)				4 (AIChE, 1994) 5 AspenPlus 6 (Maloney, 2007)		

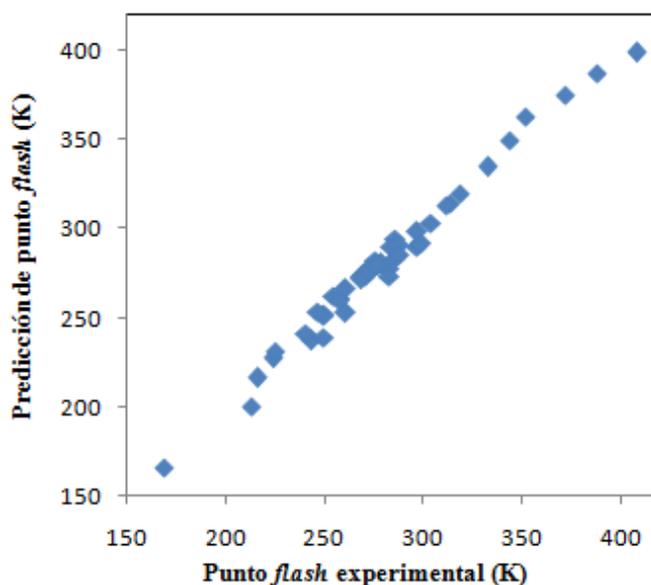


Fig. 2: Predicción del punto flash de 48 alcanos usando la Ecuación (1).

MODELO PROPUESTO BASADO EN CONTRIBUCIÓN DE GRUPOS

El método de contribución de grupos es también utilizado en este trabajo para la predicción del punto *flash* en alcanos. Este método, usado en su primer orden, presenta dificultades para diferenciar entre los isómeros debido a que tienen los mismos grupos funcionales y en la misma cantidad, ej. el 2-metil-hexano y 3-metil-hexano. En estos casos el método de primer orden predice el mismo valor de la propiedad para cada componente. La solución clásica consiste en desarrollar un orden mayor en los grupos funcionales que consiste básicamente en detectar el tipo de grupo vecino y/o el vecino del vecino (Constantinou et al., 1995; Harper et al., 1999; Marrero y Gani, 2001; d'Anterrosches y Gani, 2005; Ceriani et al., 2009; Satyanarayana et al., 2009). Desafortunadamente la complejidad se incrementa sustancialmente y no existen datos suficientes para realizar una correlación suficientemente aceptable para diferenciar el valor de las propiedades para estos isómeros. En consecuencia, en este trabajo se propone una combinación del esquema de contribución de grupos con la propuesta convencional de ecuaciones empíricas como las indicadas en la sección anterior.

Así, el modelo se convierte en una extensión del anterior para incorporar la contribución de cuatro grupos funcionales:

$$\frac{T_f}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \right) + \alpha_1 \sum n_1 + \alpha_2 \sum n_2 + \alpha_3 \sum n_3 + \alpha_4 \sum n_4 \quad (2)$$

donde β_0 y β_1 junto con a_1 , a_2 , a_3 y a_4 son los parámetros a ajustar mientras que las n_1 , n_2 , n_3 y n_4 son los grupos funcionales indicados en la Tabla 3 y la suma indica el total de cada grupo funcional en la molécula. Los resultados obtenidos indican valores para β_0 y β_1 de 0.8182 y -0.00004, respectivamente, con un promedio absoluto del error de 1.63%. Las predicciones y errores obtenidos se han incluido en las Tablas 2a y 2b y su forma gráfica en la Figura 3.

Tabla 2a: Predicción de punto *flash* para 48 alcanos.

No.	Compuesto	Tf con Ecuación 1 (K)	Desviación (K)	Tf con Ecuación 2 (K)	Desviación (K)
1	Butano	200.22	-12.78	204.56	-8.44
2	Heptano	273.48	4.48	270.36	1.36
3	Hexano	251.44	1.44	251.35	1.35
4	Octano	294.02	8.02	287.01	1.01
5	Pentano	227.25	3.25	229.67	5.67
6	Propano	165.93	-3.07	177.16	8.16
7	2,2-dimetilbutano	231.00	6.00	237.40	12.40
8	2,3-dimetilbutano	237.27	-6.73	243.58	-0.42
9	2-metilpentano	238.75	-11.25	247.89	-2.11
10	2,4-dimetilpentano	252.91	-8.09	259.65	-1.35
11	3-metilhexano	261.19	3.19	268.82	10.82
12	2,3-dimetilhexano	277.92	-5.08	282.64	-0.36
13	2,4-dimetilhexano	273.42	-9.58	284.21	1.21
14	2,2,4-trimetilpentano	265.98	4.98	267.68	6.68
15	2,2-dimetilheptano	289.81	-7.19	289.84	-7.16
16	2,6-dimetilheptano	291.68	-7.32	298.08	-0.92
17	N-nonano	303.11	-0.89	307.30	3.30
18	2,2,5-trimetilhexano	283.54	-2.46	286.66	0.66
19	N-decano	319.61	0.61	321.07	2.07

Tabla 2b: Predicción de punto *flash* para 48 alcanos (continuación).

No.	Compuesto	Tf con Ecuación 1 (K)	Desviación (K)	Tf con Ecuación 2 (K)	Desviación (K)
20	2-metilnonano	314.35	0.35	314.90	0.90
21	N-undecano	334.73	1.73	333.04	0.04
22	N-dodecano	349.39	5.39	344.42	0.42
23	N-tridecano	362.81	10.81	354.31	2.31
24	N-tetradecano	375.40	3.40	363.28	-8.72
25	3-etilpentano	262.33	7.33	270.02	15.02
26	2,2-dimetilpentano	251.90	1.90	256.59	6.59
27	2,2,3-trimetilpentano	273.67	3.67	275.24	5.24
28	3-etilhexano	280.09	2.09	285.75	7.75
29	3-metilheptano	280.34	1.34	285.94	6.94
30	3,3-dimetilhexano	275.25	3.25	277.71	5.71
31	2,5-dimetilhexano	273.22	2.22	277.95	6.95
32	3-metiloctano	298.27	1.27	300.47	3.47
33	2,2,3,4-tetrametilpentano	289.76	5.76	295.64	11.64
34	2,2,4,4-tetrametilpentano	282.07	6.07	281.57	5.57
35	2,2,3-trimetilhexano	290.41	2.41	294.02	6.02
36	Hexadecano	398.89	-9.11	402.47	-5.53
37	2-metilbutano	216.15	0.15	213.53	-2.47
38	2,3,3-trimetilpentano	277.23	4.23	279.24	6.24
39	2-metilheptano	279.41	2.41	279.42	2.42
40	2,2-dimetilhexano	271.56	2.56	269.84	0.84
41	5-metilnonano	312.85	0.85	312.40	0.40
42	3-metilpentano	240.95	-0.05	237.39	-3.61
43	2,3-dimetilpentano	259.64	1.64	258.46	0.46
44	2,2,3-trimetilbutano	253.05	6.05	246.16	-0.84
45	2,3,4-trimetilpentano	276.30	3.30	268.85	-4.15
46	3,4-dimetilhexano	279.46	2.46	274.16	-2.84
47	2,2,4-trimetilhexano	285.28	-2.72	283.02	-4.98
48	Pentadecano	387.65	-0.35	383.41	-4.59

Tabla 3: Grupos funcionales y parámetros para los 48 alcanos.

n_i	Grupo	a_i	n_i	Grupo	a_i
1	CH3-	-0.0242924	3	=CH=	0.0071968
2	-CH2-	-0.0072769	4	-C□	0.0156201

Los resultados de los modelos (1) y (2) superan a los obtenidos con modelos anteriores incluyendo los publicados recientemente como el de Mathieu (2010), Satyanarayana y Rao (1992), Yong et al., (2007b) y Yong et al. (2007a), Cabe señalar que el modelo reportado no permite diferenciar el valor calculado entre isómeros ya que tienen los mismos grupos funcionales y estiman así el mismo valor. Los modelos propuestos en este trabajo si predicen valores diferentes para cada componente aunque este tenga el mismo número de grupos funcionales siendo esto una gran ventaja con respecto a los modelos existentes.

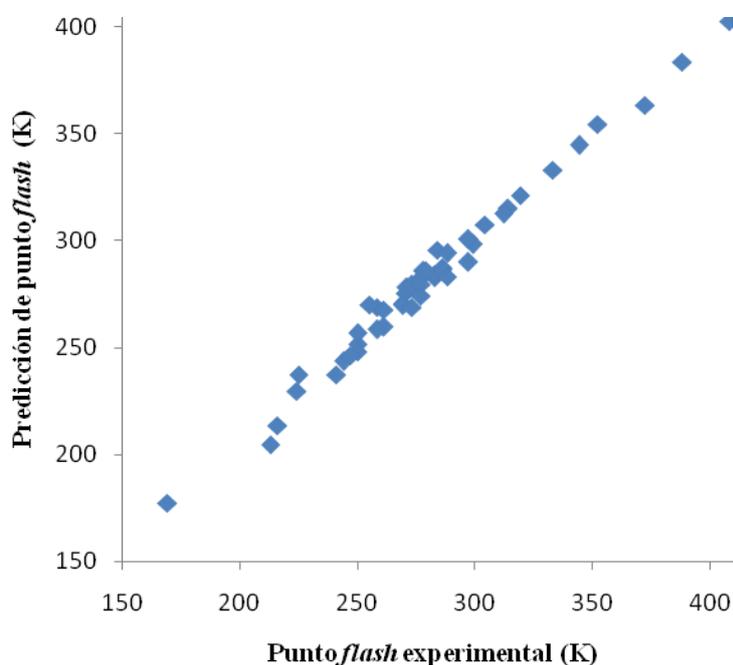


Fig. 3: Predicción del punto *flash* de 48 alcanos usando la Ecuación (2).

CONCLUSIONES

En este trabajo se han propuesto modelos usando correlaciones puras y combinadas con contribuciones de grupos para la predicción del punto *flash* de alcanos puros. Se propuso la inclusión de dos propiedades, el calor de reacción y el calor de evaporación normales, cuyo resultado favoreció la predicción y proporcionó mayor consistencia a los modelos al incluir un efecto químico a los modelos existentes. Los resultados indican una mejor predicción de la temperatura del punto *flash* que la obtenida con los modelos existentes donde frecuentemente la temperatura en este punto solo depende de la temperatura de ebullición del compuesto.

El modelo basado en contribución de grupos combinado con la inclusión de otras propiedades termodinámicas evita el problema clásico de isomería. La evidencia numérica indica una mejoría adicional a la obtenida con otros modelos propuestos y usando la misma estrategia se observó que la desviación es mayor a la obtenida en este trabajo.

REFERENCIAS

AIChE-American Institute of Chemical Engineers (1994); Dow's Fire & Explosion Index Hazard Classification Guide. 7^a ed. New York, Wiley-AIChE, 88p.

Barrufet, M.A. (2010). Pure substances. Consultado el 2/15/2010 en la página http://www.pe.tamu.edu/barrufet/public_html/PETE310/.

Ceriani, R., Gani, R.; Meirelles, A.J.A. (2009); *Prediction of heat capacities and heats of vaporization of organic liquids by group contribution methods*. Fluid Phase Equilibria: 283(1-2), 49-55.

- Constantinou, L.; Gani, R.; O'Connell, J. P. (1995); *Estimation of the acentric factor and the liquid molar volume at 298 K using a new group contribution method*. Fluid Phase Equilibria: 103(1), 11-22.
- Crowl, D.A.; Louvar J.F. (2002); *Chemical process safety: Fundamentals with applications*. 1a ed. New Jersey, Prentice Hall, 528 p.
- d'Anterrosches, L.; Gani, R. (2005); *Group contribution based process flowsheet synthesis, design and modelling*. Fluid Phase Equilibria: 228-229, 141-146.
- Harper, P.M., Gani, R.; Kolar, P.; Ishikawa, T. (1999); *Computer-aided molecular design with combined molecular modeling and group contribution*. Fluid Phase Equilibria: 158-160, 337-347.
- Kletz, T.A. (1975); *Some Fires and Explosions in Liquids of High Flash Point*. Journal of Hazardous Materials: 1, 165-170.
- Lees, F.P. (1996); *Loss prevention in the process industries: Hazard identification, assessment and control*. 2ª ed. Oxford, Butterworth-Heinemann, 3000p.
- Maloney, J.O. (2007); *Perry's Chemical Engineers' Handbook 8/E Section 1: Conversion Factors and Mathematical Symbols*. 8ª ed. New York, McGraw-Hill Professional, 24p.
- Marrero, J.; Gani, R. (2001); *Group-contribution based estimation of pure component properties*. Fluid Phase Equilibria: 183-184, 183-208.
- Mathieu, D. (2010); *Inductive modeling of physico-chemical properties: Flash point of alkanes*. Journal of Hazardous Materials: 179(1-3), 1161-1164.
- Prugh, R.W. (2008); *The relationship between flash point and LFL with application to hybrid mixtures*. Process Safety Progress: 27(2), 156-163.
- Reid, R.C., Prausnitz, J.M.; Poling, B.E. (1987); *The Properties of Gases and Liquids*. 1ª ed. Nueva York, McGraw-Hill, 741p.
- Satyanarayana, K.; Rao P.G. (1992); *Improved Equation to Estimate Flash Points of Organic Compounds*. Journal of Hazardous Materials: 32, 81-85.
- Satyanarayana, K.C., Abildskov, J.; Gani, R. (2009); *Computer-aided polymer design using group contribution plus property models*. Computers & Chemical Engineering: 33(5), 1004-1013.
- Yong, P.; Juncheng, J.; Zhirong W. (2007a); *Prediction of the Flash Points of Alkanes by Group Bond Contribution Method Using Artificial Neural Network*. Front. Chem. Eng. China: 1, 390-394.
- Yong, P., Juncheng, J.; Zhirong W. (2007b); *Quantitative Structure-Property Relationship Studies for Predicting Flash Points of Alkanes Using Group Bond Contribution Method with Back-Propagation Neural Network*. Journal of Hazardous Materials: 147, 424-430.

