



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA**

**SIMULACIÓN DE UN PROCESO DE PRODUCCIÓN DE  
BIODIESEL A PARTIR DE ACEITE DE PALMA MEDIANTE EL  
SOFTWARE DWSIM**

**Trabajo de Integración Curricular**

**Tipo:** Propuesta Tecnológica

Presentado para optar al grado académico de:

**INGENIERA QUÍMICA**

**AUTORA:** JULISA ANABEL HERRERA GUAILLA

**DIRECTOR:** Ing. DANIEL ANTONIO CHUQUÍN VASCO Mg.

Riobamba – Ecuador

2021

**©2020, Julisa Anabel Herrera Guilla**

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, Julisa Anabel Herrera Guaila, declaro que el presente trabajo de Integración Curricular es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autora asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de Integración Curricular; el patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.



Riobamba, 06 de septiembre de 2021

---

**Julisa Anabel Herrera Guaila**  
**020226959-3**

**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**CARRERA INGENIERÍA QUÍMICA**

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular: Tipo: Propuesta Tecnológica, “**SIMULACIÓN DE UN PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL A PARTIR DE ACEITE DE PALMA MEDIANTE EL SOFTWARE DWSIM**”, realizado por la señorita: **JULISA ANABEL HERRERA GUAILLA**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal autoriza su presentación.

	FIRMA	FECHA
Ing. César Arturo Puente Guijarro PhD. <b>PRESIDENTE DEL TRIBUNAL</b>	<b>CESAR ARTURO PUENTE GUIJARRO</b> <small>Firmado digitalmente porCESAR ARTURO PUENTE GUIJARRO DN: cn=CESAR ARTURO PUENTE GUIJARRO c=EC o=SECURITY DATA S.A. 1 ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE INFORMACION Motivo:Soy el autor de este documento Ubicación: Fecha:2021-12-13 18:00:05:00</small>	2021-12-13
Ing. Daniel Antonio Chuquin Vasco Mg. <b>DIRECTOR DE TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR</b>	 <small>Firmado electrónicamente por: <b>DANIEL ANTONIO CHUQUIN VASCO</b></small>	2021-12-17
Ing. Juan Pablo Chuquin Vasco Mg. <b>MIEMBRO DEL TRIBUNAL</b>	 <small>Firmado electrónicamente por: <b>JUAN PABLO CHUQUIN</b></small>	2021-12-17

## **DEDICATORIA**

Querida madre, desde el momento que empecé a gestarme dentro de su cuerpo me ha brindado lo mejor del mundo, cuan grande e importante ha sido su comprensión y apoyo incondicional para cumplir mis metas junto con mi adorado hermano, quien es una de las bases más importantes de mi ser, por inspirarme y demostrarme que el talento no es nada sin la dedicación y el sacrificio. Este logro es para ustedes por llenarme de la fortaleza suficiente para creer en mis sueños y convertirlos en realidad. De hoy en adelante seré su respaldo, los haré sentirse orgullosos con cada meta que siga cumpliendo, los amo y no me alcanzará la vida para agradecerles todas las cosas que han hecho por mí.

Julisa

## **AGRADECIMIENTO**

A Dios por siempre estar presente, ser mi guía, mi fortaleza y mi temple en mis momentos de debilidad y flaqueza.

A mi adorada madre, quien me ha inspirado y ha cultivado en mí principios y valores sin los cuales no habría podido llegar a donde estoy.

A nuestra prestigiosa Alma Mater, ESPOCH, que me ha permitido formarme profesionalmente y conocer a personas maravillosas que siempre me tendieron la mano.

Y de manera especial, a mi tutor, el Mtr. Daniel Chuquin por compartir sus conocimientos, motivarme a desarrollar este trabajo y apoyarme para culminarlo exitosamente.

Julisa

## TABLA DE CONTENIDOS

ÍNDICE DE TABLAS.....	ix
ÍNDICE DE FIGURAS.....	x
ÍNDICE DE GRÁFICOS.....	xi
ÍNDICE DE ANEXOS.....	xii
RESUMEN.....	xiii
SUMMARY.....	xiv

## CAPÍTULO I

1. INTRODUCCIÓN.....	1
1.1. Antecedentes.....	1
1.2. Planteamiento del problema.....	2
1.3. Justificación del proyecto.....	3
1.4. Objetivo general.....	4
1.5. Objetivos específicos.....	4
1.6. Alcance.....	4

## CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO.....	5
2.1. Estado del arte.....	5
2.1.1. <i>Biodiesel de primera generación</i> .....	5
2.1.2. <i>Biodiesel de segunda generación</i> .....	7
2.1.3. <i>Biodiesel de tercera generación</i> .....	10
2.1.4. <i>Investigaciones de producción de biodiesel a través de modelos computacionales</i> .....	11
2.1.5. <i>Simulación de procesos</i> .....	12
2.2. Bases teóricas.....	14
2.2.1. <i>Biodiesel</i> .....	14
2.2.1.1. <i>Características del Biodiesel</i> .....	14
2.2.1.2. <i>Materia Primas</i> .....	15
2.2.1.3. <i>Rutas de Producción</i> .....	16
2.2.1.4. <i>Transesterificación</i> .....	16
2.2.1.5. <i>Cinética de la reacción de transesterificación</i> .....	18
2.2.1.6. <i>Estándares y propiedades del biodiesel</i> .....	18

2.2.2.	<i>Aceites vegetales</i> .....	21
2.2.2.1.	<i>Caracterización Química</i> .....	21
2.2.3.	<i>DWSIM</i> .....	22
2.2.3.1.	<i>Modelos Termodinámicos</i> .....	23
2.2.3.2.	<i>Selección de Modelo Termodinámico</i> .....	24
2.3.	<b>Marco legal</b> .....	26
2.3.1.	<i>Constitución de la República del Ecuador establecida en 2008</i> .....	26
2.3.2.	<i>Plan Nacional para el Buen Vivir (2017-2021)</i> .....	27
2.3.3.	<i>Ley de Gestión Ambiental en el Ecuador</i> .....	27
2.3.4.	<i>Código Orgánico de la Producción, Comercio e Inversiones</i> .....	27
2.3.5.	<i>Reglamento Ambiental de Operaciones Hidrocarburíferas</i> .....	28
2.3.6.	<i>Decretos Ejecutivos</i> .....	28
2.3.7.	<i>Acuerdos Ministeriales</i> .....	28

### CAPÍTULO III

3.	<b>METODOLOGÍA</b> .....	29
3.1.	<b>Descripción del proceso de simulación</b> .....	30
3.1.1.	<i>Definición de los componentes en el simulador</i> .....	30
3.1.2.	<i>Selección de los modelos termodinámicos</i> .....	31
3.1.3.	<i>Sistema de unidades</i> .....	32
3.1.4.	<i>Definición de la reacción de transesterificación y condiciones operacionales</i> .....	32
3.1.5.	<i>Modelo de simulación</i> .....	33
3.2.	<b>Resultados</b> .....	34
3.2.1.	<i>Proceso de modelado</i> .....	34
3.2.2.	<i>Reactor de conversión</i> .....	36
3.2.3.	<i>Columna de destilación</i> .....	38
3.2.3.1.	<i>Balace de masa en el sistema de destilación</i> .....	40
3.2.3.2.	<i>Balace de energía en el sistema de destilación</i> .....	43
3.2.4.	<i>Reincorporación de etanol al proceso</i> .....	44
3.2.5.	<i>Columna de extracción</i> .....	44
3.2.6.	<i>Energía consumida y producida durante la operación del proceso</i> .....	47
3.2.7.	<i>Validación del modelo</i> .....	49
3.2.7.1.	<i>Calidad del biodiesel producido</i> .....	51

### CAPÍTULO IV



<b>4. GESTION DEL PROYECTO</b> .....	53
<b>4.1. Cronograma</b> .....	53
<b>4.2. Presupuesto</b> .....	54
<b>4.3. Talento humano</b> .....	54
<b>4.4. Recursos materiales</b> .....	54
<b>CONCLUSIONES</b> .....	55
<b>RECOMENDACIONES</b> .....	57
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	
<b>ANEXOS</b>	

## ÍNDICE DE TABLAS

<b>Tabla 1-2:</b> Especificaciones del Biodiesel .....	20
<b>Tabla 2-2:</b> Modelos de coeficientes de actividad para diferentes sistemas.....	24
<b>Tabla 3-2:</b> Aplicabilidad de métodos de coeficientes de actividad.....	25
<b>Tabla 4-2:</b> Paquetes básicos recomendados en función del tipo de proceso .....	25
<b>Tabla 1-3:</b> Composición típica del aceite de palma .....	30
<b>Tabla 2-3:</b> Condiciones operacionales y composiciones de las corrientes de Entrada y Salida del Reactor de Conversión.....	37
<b>Tabla 3-3:</b> Rendimiento obtenido .....	37
<b>Tabla 4-3:</b> Condiciones de operación de las corrientes de entrada y salida de la columna de destilación.....	39
<b>Tabla 5-3:</b> Composición másica de las corrientes de la columna de destilación .....	40
<b>Tabla 6-3:</b> Entalpía de las corrientes de la columna de destilación .....	43
<b>Tabla 7-3:</b> Entalpía de los dispositivos de la columna de destilación.....	43
<b>Tabla 8-3:</b> Corriente de etanol recuperado.....	44
<b>Tabla 9-3:</b> Condiciones de operación y composiciones másicas de las corrientes del extractor	46
<b>Tabla 10-3:</b> Corrientes de energía del proceso de síntesis de biodiesel .....	47
<b>Tabla 11-3:</b> Resumen de las condiciones de operación de las principales corrientes modeladas	49
<b>Tabla 12-3:</b> Validación de resultados de las líneas de flujo.....	50
<b>Tabla 13-3:</b> Validación de Resultados de las composiciones másicas de las corrientes.....	50
<b>Tabla 14-3:</b> Resultados de densidad y viscosidad para el biodiesel sintetizado .....	51
<b>Tabla 15-3:</b> Resultados de densidad y viscosidad reportados en la literatura .....	52
<b>Tabla 1-4:</b> Cronograma .....	53
<b>Tabla 2-4:</b> Presupuesto establecido para el desarrollo del proyecto .....	54

## ÍNDICE DE FIGURAS

<b>Figura 1-2.</b> Reacción de transesterificación con el uso de etanol. ....	16
<b>Figura 2-2.</b> Mecanismo de la reacción de transesterificación de un triglicérido.....	17
<b>Figura 3-2.</b> Estructura de un triglicérido .....	21
<b>Figura 1-3.</b> Pasos para desarrollar el proceso de modelación .....	29
<b>Figura 2-3.</b> Definición de los componentes para la simulación .....	31
<b>Figura 3-3.</b> Definición de modelos termodinámicos.....	31
<b>Figura 4-3.</b> Sistema de unidades empleado para la simulación .....	32
<b>Figura 5-3.</b> Definición de la reacción de transesterificación.....	33
<b>Figura 6-3.</b> Condiciones de la torre de destilación.....	41

## ÍNDICE DE GRÁFICOS

**Gráfico 1-3.** Diagrama del proceso de generación de biodiesel elaborado en DWSIM..... 35

**Gráfico 2-3.** Diagrama de energía para el proceso de síntesis de biodiesel ..... 48

## ÍNDICE DE ANEXOS

<b>ANEXO A. DESCARGA E INSTALACIÓN DE DWSIM.....</b>	<b>68</b>
<b>ANEXO B. CERTIFICADO DE CUMPLIMIENTO DE LA NORMATIVA .....</b>	<b>76</b>

## RESUMEN

El presente estudio se desarrolló con el objetivo de diseñar una simulación que comprende el proceso de producción de biodiesel a partir de aceite de palma (*Elaeis guineensis*), para lo cual se recurrió al software de licencia libre DWSIM, debido a que es un simulador específico para procesos químicos. La planta de síntesis de biodiesel se diseñó en función de la reacción de transesterificación empleando etanol (EtOH) para que ocurra la conversión en presencia de hidróxido de sodio (NaOH), en un reactor de conversión en condiciones normales, transformando tripalmitina en éster etílico de ácido palmítico (EtP) y glicerol con un porcentaje de conversión del 95%, para posteriormente llevar a una torre de destilación en donde se separan el EtP generado del alcohol no reaccionante; este alcohol se reintegra al proceso A, mientras que la corriente de fondos rica en biodiesel pasa a un absorbedor junto con una corriente de agua, separando el biodiesel del glicerol y los restos de alcohol y catalizador; permitiendo obtener biodiesel altamente puro 99,11%. El rendimiento alcanzado es de 87,29% de producción de biodiesel respecto al aceite y etanol empleados. Para la validación de los resultados se recurrió al cálculo del error porcentual entre los datos obtenidos y los datos reflejados en bibliografía desde fuentes de difusión de alto impacto, logrando como resultado un margen de error muy bajo para el proceso que se ha simulado. Se puede concluir que el proceso de transesterificación es efectivo para la síntesis de biodiesel por lo que el proceso simulado puede ser replicado para construir una planta a escala real. Es importante tener en cuenta que se deben modelar sistemas sencillos en estado dinámico para que puedan resolverse con facilidad, evitando la desestabilización del sistema al resolver un sinnúmero de operaciones a la vez.

**Palabras clave:** <INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA QUÍMICA>; <SIMULACIÓN>; <TRANSESTERIFICACIÓN>; <DESTILACIÓN>; <BIODIESEL>; <ACEITE DE PALMA (*Elaeis guineensis*)>; <PROTECCIÓN AMBIENTAL>; <DWSIM (SOFTWARE)>

LEONARDO  
FABIO MEDINA  
NUSTE

Firmado digitalmente por  
LEONARDO FABIO MEDINA  
NUSTE  
Fecha: 2021.08.02 12:27:11  
-05'00'



1481-DBRA-UTP-2021

## SUMMARY

The objective of this work was to design a simulation that includes the biodiesel production process from palm oil (*Elaeis guineensis*), for which the free license software DWSIM was used, since it is a specific simulator for chemical processes. The biodiesel synthesis plant was designed based on the transesterification reaction using ethanol (EtOH) so that the conversion occurs in the presence of sodium hydroxide (NaOH), in a conversion reactor under normal conditions, transforming tripalmitin in palmitic acid ethyl ester (PEt) and glycerol with a conversion percentage of 95%, to later take to a distillation tower where the PEt generated is separated from the non-reacting alcohol. This alcohol is reintegrated into process A, while the biodiesel rich bottom stream passes to an absorber together with a stream of water, separating the biodiesel from the glycerol and the remains of alcohol and catalyst, making it possible to obtain 99.11% highly pure biodiesel. The yield achieved is 87.29% of biodiesel production with respect to the oil and ethanol used. For the results validation, the calculation was used of the percentage error between the data obtained and the data reflected in the bibliography from high impact diffusion sources, achieving as a result a very low margin of error for the process that has been simulated. It can be concluded that the transesterification process is effective for the synthesis of biodiesel, so the simulated process can be replicated to build a full-scale plant. It is important to bear in mind that simple systems must be modeled in a dynamic state so that they can be easily solved, avoiding destabilization of the system by solving countless operations at the same time. It is important to keep in mind that simple systems must be modeled in a dynamic state so that they can be easily solved, avoiding destabilization of the system by solving countless operations at the same time.

**Keywords:** <ENGINEERING AND CHEMICAL TECHNOLOGY>; <SIMULATION>; <TRANSESTERIFICATION>; <DISTILLATION>; <BIODIESEL>; <PALM OIL (*Elaeis guineensis*)>; <ENVIRONMENTAL PROTECTION>; <DWSIM (SOFTWARE)>.

NANCI  
MARGARITA  
INCA  
CHUNATA

Firmado  
digitalmente por  
NANCI MARGARITA  
INCA CHUNATA  
Fecha: 2021.12.06  
07:10:29 -05'00'

# CAPÍTULO I

## 1. INTRODUCCIÓN

Durante los últimos años los problemas medioambientales que afronta el planeta han crecido desmesuradamente, haciendo que la calidad de vida de todos sus habitantes se vea afectada. El cambio más alarmante es el calentamiento global, el cual se produce por los gases de efecto invernadero, especialmente por el dióxido de carbono que se libera al quemar los combustibles tradicionales.

La fuente principal de las emisiones más contaminantes son los automotores, razón por la cual numerosas investigaciones han sido desarrolladas en post de encontrar las mejores opciones para mitigar sus consecuencias, a través de combustibles renovables asequibles y eficientes, los mismos que a la par suplen las demandas de las escasas reservas de combustibles fósiles actualmente existentes.

Una de las investigaciones más recurrentes es el desarrollo de biocombustibles a partir de aceites vegetales, aceites residuales y grasas animales por medio de transesterificación, debido a que sus características son muy similares a las del diesel y por tanto pueden ser empleadas en los motores de inyección existentes, demostrando altos rendimientos.

El biodiesel a partir de aceites vegetales se ha posicionado como una de las alternativas más viables gracias a que se puede emplear en los motores a diesel sin necesidad de modificación alguna. Además, posee ventajas importantes como son su biodegradabilidad y su bajo nivel de toxicidad. Lo que lo hace efectivo en la lucha contra la contaminación medioambiental, así como también el empleo de materias primas asequibles permite una producción continua eliminando el riesgo de desabastecimiento que se corre con las fuentes no renovables.

### 1.1. Antecedentes

La primera aparición pública de un combustible de origen vegetal en un motor de encendido por compresión, basado en el diseño del Dr. Rudolf Diesel, surgió en la Feria Mundial de 1900 en París, donde se empleó aceite de maní como combustible sin mostrar diferencias significativas en contraste con el uso de derivados del petróleo. Sin embargo, el bajo costo del petróleo permitió que sus fracciones destiladas sean empleadas como combustibles mayormente asequibles. Posteriormente en 1937 aparecieron los primeros estudios de producción de biodiesel por medio de catálisis básica en Bélgica. Entre 1930 y 1940 se expandió el uso de aceites vegetales como combustibles para situaciones de emergencia. Posteriormente con el estallido de la Segunda Guerra Mundial la importación de petróleo se vio limitada, dejando claro el hecho de que no se



puede depender de un combustible que no siempre estará disponible. Mas aún, no fue sino hasta finales del siglo XX que las investigaciones de combustibles alternativos que suplan las características y utilidades de los derivados del petróleo reduciendo los impactos ambientales tomaron auge (Ma and Hanna, 1999, pp. 1–2; Shay, 1993, pp. 227–228).

De acuerdo a los enunciados de Shay (1993, pp. 227–228) El biodiesel propiamente dicho empezó a producirse ampliamente alrededor de los años 90s, y aunque en un principio la razón principal parecía el cuidado del medio ambiente, también se debió a la sobreproducción agrícola, aunque el costo del aceite comestible era mucho mayor respecto al precio del diesel por lo que el gobierno tenía que elevar el subsidio al combustible notablemente.

En el año 2004 con la subida del petróleo se equipararon los precios de producción de diesel proveniente de la destilación de petróleo y biodiesel obtenido de la transesterificación de aceites vegetales y grasas animales, no obstante, la producción de biocombustibles no se expandió (Castro et al., 2007, pp. 40–41; Knothe and Razon, 2017, pp. 41).

Aunque en 1911 los motores de encendido por compresión podían alimentarse con aceites vegetales según Mishra y Goswami (2018, pp. 2), en la actualidad este hecho ya no es factible debido a las modificaciones que los motores han experimentado con el tiempo para ser afines a los destilados del petróleo, los cuales presentan una viscosidad inferior respecto a aquellos producidos a partir de aceites vegetales.

## **1.2. Planteamiento del problema**

El desarrollo tecnológico de la sociedad actual se ha logrado con el uso de recursos renovables y no renovables que el planeta tiene por ofrecer, no obstante, las reservas de recursos no renovables cada vez son más escasas debido a la creciente demanda en orden por mejorar la calidad de vida de la sociedad. El recurso no renovable más importante corresponde a la reserva de combustibles fósiles, los mismos que además de ser usados con desmesura han generado otro problema medioambiental, la emisión de gases contaminantes, los mismos que afectan la capa de ozono por el efecto invernadero y reducen la calidad de vida humana. (Demirbas, 2009, pp. 14)

Por todo lo mencionado anteriormente, día con día se buscan soluciones rentables y eficientes para reemplazar a los combustibles fósiles, es así que, para suplir el consumo energético de este recurso, se ha partido desde propuestas que involucran el uso de recursos renovables (energía solar, eólica, geotérmica e hidráulica) para generar energía limpia, hasta el empleo de aceites vegetales para el caso de combustibles líquidos, los mismos que han mostrado un alto rendimiento al momento de reemplazar a los combustibles tradicionales.

Los biocombustibles han sido ampliamente investigados durante los últimos años, los mismos que se han obtenido por métodos de pirólisis, microemulsión, y transesterificación, siendo

necesario posteriormente un proceso de destilación para obtener una corriente de biodiesel purificado. No obstante, desarrollar un proceso completo sin previo análisis puede no resultar económicamente factible, razón por la cual emplear softwares de código abierto representa una alternativa económica de predicción y estimación de datos reales de un proceso completo con condiciones de operación apropiadas (Mishra and Goswami, 2018, pp. 2–6).

Con estos antecedentes el presente trabajo se enfoca en el modelado y validación de un proceso de producción eficiente de Biodiesel a partir del aceite de palma usando el método de transesterificación, mediante un software de código abierto DWSIM (desarrollado para reproducir procesos químicos), considerando los datos y parámetros provenientes de artículos de alto impacto enfocados en el modelamiento del sistema previamente mencionado con el fin analizar la eficiencia del proceso, para establecer la aplicabilidad a una replicación en plantas reales.

### **1.3. Justificación del proyecto**

En nuestro país, el consumo de combustibles fósiles líquidos es relativamente elevado, generando un alto grado de contaminación del aire, es por ello que reemplazarlo por un biocombustible representaría una alternativa ecológica y sustentable para la reducción de contaminación atmosférica.

Sin embargo, llevar a cabo una de estas alternativas puede resultar arriesgado si no se conoce correctamente como ha de desarrollarse el procedimiento, es por ello que debería considerarse importante elaborar una simulación de los procesos físicos a desarrollar con el fin de determinar cuáles serán las condiciones óptimas de operación, y todos los equipos necesarios para obtener un rendimiento adecuado.

Diseñar un proceso y determinar las condiciones de trabajo apropiadas para obtener un rendimiento óptimo mediante softwares resulta un aporte importante para el desarrollo tecnológico y la educación ya que permite que futuros investigadores conozcan como efectuar trabajos similares en softwares libres como lo es DWSIM, y puedan replicarlos con facilidad.

Es por ello que este trabajo se enfocará en la simulación de un proceso de producción de biodiesel a partir del aceite de palma mediante el software DWSIM, con el fin de determinar las condiciones apropiadas de operación de una planta de este tipo y la utilidad de un software para la simulación. Este proyecto está relacionado con la línea de investigación de Ingeniería de Procesos, del programa de Ingeniería Química de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo, apoyado en otras asignaturas como Operaciones Unitarias, Control de Procesos e Ingeniería de Plantas; debido a que todas estas disciplinas se centran en la optimización, control y simulación de los procesos.

#### **1.4. Objetivo general**

Simular el proceso de obtención de biodiesel a partir de aceite de palma mediante el Software DWSIM como instrumento apropiado para la determinación de las condiciones de operación de una planta industrial.

#### **1.5. Objetivos específicos**

- Diseñar el proceso de producción de Biodiesel a partir del aceite de palma en un software de código abierto conocido como DWSIM.
- Determinar las condiciones óptimas de operación para obtener un proceso eficiente.
- Validar las variables del proceso obtenidas por el software de libre acceso DWSIM con datos reales obtenidos en estudios previos de mediano y alto impacto.

#### **1.6. Alcance**

El presente estudio requirió de datos reales de condiciones de operación como temperatura, presión, flujos y composiciones de cada una de las corrientes necesarias para la producción de biodiesel, por tal razón fue indispensable la revisión bibliográfica para determinar las principales propiedades físicas, y su relación con el proceso de producción. El estudio contempló el modelado completo de una planta de producción de biodiesel, es decir los equipos necesarios en función de las condiciones de operación citadas en bibliografía y el análisis completo del rendimiento de las corrientes obtenidas en función de la materia prima empleada, con la finalidad de determinar si la propuesta será efectiva para la puesta en escena física de una planta de producción de biodiesel con un margen de error inferior al 0,05%. Además, se pretende demostrar la efectividad del software de licencia libre DWSIM como herramienta de simulación para fomentar su uso dentro de la comunidad educativa.

## CAPÍTULO II

### 2. MARCO TEÓRICO

#### 2.1. Estado del arte

La producción de biodiesel se ha convertido en una solución sustentable para reemplazar a los combustibles fósiles sin alterar significativamente los motores y proporcionando emisiones amigables con el medio ambiente respecto a aquellas producidas por combustibles tradicionales, es así que la investigación en este campo ha resultado un factor clave para la determinación de medios y procesos que permiten la obtención de biocombustibles de calidad. Durante los últimos años se han investigado materias primas orgánicas para la producción de biodiesel debido al alto rendimiento y calidad que se obtiene al emplearlos en la síntesis (Kareem et al., 2017, pp. 1).

Por otro lado, el empleo de herramientas tecnológicas para predecir el comportamiento de las plantas de producción de biodiesel ha tomado gran importancia, debido a que optimizan el tiempo de prueba para poner en escena el proyecto, sin arriesgar la vida de operarios en plantas piloto. Algunos investigadores como Teixeira et al. (2015, pp. 2–7) y Gonçalves (2016, pp. 256–264) han presentado las condiciones de operación y los resultados obtenidos para la conversión de aceite de palma en biocombustible, así como también los paquetes termodinámicos empleados para desarrollar el modelado.

Europa es el mayor productor de biodiesel gracias a las políticas medioambientales que se han implementado en el continente; esta producción se basa principalmente en aceites vegetales como materia no obstante se pueden emplear otros materiales para la producción de biodiesel, es así que se los puede clasificar en biodiesel de primera, segunda y tercera generación (Mahlia et al., 2020, pp. 2–3; Pereira, 2019, pp. 78).

##### ***2.1.1. Biodiesel de primera generación***

Conocido también como biocombustible convencional, debido a que su línea de investigación se ha desarrollado a mayor escala respecto a otras materias primas. Se desarrolla a partir de materia prima virgen destinada principalmente a la alimentación, por lo que su uso ha generado polémicas mundiales al proyectar la reducción de las fuentes de estos alimentos y elevar sus costos astronómicamente (Zahan and Kano, 2018, pp. 11).

Principalmente se ha destinado los aceites de soya, girasol, palma, y colza como materia prima para el biodiesel de primera generación dando como resultado un rendimiento óptimo que suple la creciente búsqueda por encontrar combustibles no fósiles pese a las contradicciones existentes (alimentos o biocombustible) (Azad, A. et al., 2016, pp. 303-304).

Se han realizado numerosas investigaciones con el fin de encontrar las condiciones óptimas y las mejores vías para la obtención del biocombustible, empleando principalmente aceite de palma gracias a su alto contenido de ácidos palmítico y oleico, así como también debido a que el biocombustible obtenido presenta una viscosidad similar a la del diesel común por lo que se puede emplear directamente en los motores de encendido por compresión (Zahan and Kano, 2018, pp. 5–8; dos Santos et al., 2019, pp. 3–4).

Dos Santos et. al (2019, pp. 6–12) estudiaron el efecto del agua en condiciones subcríticas en el proceso de hidrólisis/esterificación para la obtención de biodiesel a partir de aceite de palma. La experimentación se llevó a cabo en dos etapas, en primer lugar, una hidrólisis no catalítica produciendo glicerol y FFAs a una presión de 40 bar, posteriormente los FFAs fueron esterificados con metanol con una relación molar 1:3 de FFAs: metanol a una temperatura de 65 °C y con el empleo de un 1% en masa de ácido sulfúrico como catalizador. El estudio permitió determinar que la temperatura óptima de operación para la hidrólisis resultó ser 250 °C obteniendo un rendimiento de 86,4% de conversión de FFAs, con un tiempo de residencia de 120 minutos. Además, el rendimiento del biodiesel obtenido mediante la reacción de esterificación reflejó un 99,1 % en peso, el cual resulta más puro ya que no ha tenido contacto con el glicerol que se separa en la etapa de hidrólisis.

Otro ejemplo del empleo de aceite de palma como materia prima para la obtención de FAEE es la investigación que desarrollaron Jegannathan et al (2010, pp. 2273–2277) con ayuda de la lipasa PS de *Burkholderia cepacia* encapsulada en carragenano como catalizador. La investigación arrojó las condiciones óptimas de operación, siendo estas 30 °C, relación molar aceite/metanol 1:7, 72 horas de reacción y un 52,5 % en peso de lipasa inmovilizada respecto al aceite de palma. Por otro lado, el catalizador sintetizado demostró ser altamente eficiente al no llegar a deformarse luego de su reutilización durante 10 ciclos consecutivos de producción. El empleo de lipasas para la producción enzimática de biodiesel es el nuevo tema de estudio debido a que las enzimas posteriormente pueden ser empleadas como biomasa para la generación de energía por medio de una fermentación aerobia. Un estudio similar fue la investigación desarrollada por Kareem et al. (2017, pp. 1–6) quienes decidieron emplear lipasas de *Aspergillus niger* como catalizador de la reacción de transesterificación de aceite de palma y aceite de palmiste, demostrando que las condiciones de operación más apropiadas para este sistema fueron 40 °C, una relación molar de 3:1 aceite/alcohol, y una carga enzimática del 5% en peso, logrando un rendimiento de biodiesel del 95% para el aceite de palma y un 86,04% para el aceite de palmiste.

Otro aceite comestible potencialmente usado para la producción de biodiesel es el aceite de mostaza, uno de los estudios más recientes se llevó a cabo con el uso de lipasas producidas por *Pseudomonas aeruginosa* debido a la habilidad de resistir a la inhibición provocada por los solventes orgánicos. El experimento se llevó a cabo dentro de un reactor a 37 °C con una relación

molar 1:9 aceite/metanol y un 10% en peso de catalizador. La producción de biodiesel a 37 °C representa una ventaja biológica sobre la síntesis química, lo que significa un consumo inferior de energía (Rana et al., 2019, pp. 2–7).

De la misma forma, la búsqueda de nuevos catalizadores biosustentables que permitan la síntesis de biodiesel a partir de aceites comestibles llevó al estudio de un catalizador heterogéneo reutilizable (CaO), el cual se obtuvo al calcinar la cáscara de huevo a 800 °C durante 2 horas. La recuperación del catalizador se logró gracias al proceso de centrifugación. Durante el experimento se empleó aceite de girasol/ metanol en una relación molar 1:9 a 60 °C, empleando un 3% de catalizador en peso respecto al aceite, con un tiempo de reacción de 3 horas. La investigación demostró que el proceso presenta un rendimiento del 96 %, el cual resultó ser el mejor rendimiento alcanzado respecto a la concentración del catalizador utilizado (Kara et al., 2019, pp. 2–5).

### ***2.1.2. Biodiesel de segunda generación***

Las fuentes de materia prima para este tipo de biodiesel corresponden a productos no comestibles tales como materiales lignocelulósicos y aceites no destinados al consumo, es por esta razón que reducen el dilema del empleo de productos alimenticios como combustibles. Sin embargo, generan una nueva controversia la cual consiste en el reemplazo de los campos de cultivo de productos alimentarios por cultivos que servirán como materia prima para la obtención de biodiesel de segunda generación, lo cual deriva en el mismo problema de los biocombustibles de primera generación al reducir las fuentes de productos agrícolas comestibles (Azad, A. et al., 2016, pp. 303-304).

Como materia prima de estos biocombustibles se emplean mayormente aceites de piñón, mahua, jojoba, tabanú, e incluso semillas de tabaco. El uso de estos materiales representa una producción más viable y amigable con el medio ambiente. No obstante, la materia prima con un alto potencial son los aceites esenciales. Es así que, Musthafa (2016, pp. 2995–2998) decidió estudiar el aceite esencial extraído de semillas de lima como potencial materia prima para la síntesis de biodiesel debido a un relativo bajo costo de obtención. El procedimiento consistió en emplear una relación molar 6:1 metanol/aceite en una temperatura de 60 °C con un tiempo de reacción de 2 horas y un 1 % en peso de KOH permitieron obtener un rendimiento del 92%. Demostrando así la factibilidad de emplear aceite esencial de semilla de lima (Mahlia et al., 2020, pp. 2–3).

En Indonesia la producción de aceite de palma comestible genera grandes cantidades de aceite de palma de baja calidad (SPO), el cual al ser un residuo posee un costo módico respecto a aceites vírgenes, a partir de este hecho Hidayat, (2017, pp. 2–6) estudió la implementación de ceniza de cascarilla de arroz modificada con Zirconio (Zr) como catalizador para la esterificación de ácidos grasos libres presentes en SPO como una solución a la corrosión, toxicidad y problemas

ambientales. El estudio logró demostrar que las condiciones óptimas de operación para la producción de biodiesel corresponden a una relación molar de metanol respecto a aceite es de 10:1, la cantidad de catalizador responde a 10% en peso y la temperatura a la cual procede la reacción es de 60°C.

Otro catalizador desarrollado para la obtención de FAEE a partir de ácidos grasos de los residuos de aceite de palma (PFAD), se logró sintetizar a partir de una pasta sulfonada de semillas de palma, la misma que fue desarrollada por Akinfalabi (2017, pp. 17–18), obteniendo como resultados un rendimiento del 97,8% con una temperatura de 60 °C con un tiempo de residencia de 2 horas, al emplear 2,5% en peso de catalizador respecto a la materia prima. Por otro lado, el catalizador sintetizado pudo ser reutilizado en subsecuentes ciclos de esterificación. Además, La investigación demostró que este catalizador es efectivo esencialmente para aquellas materias primas ricas en ácidos grasos libres.

Otro experimento desarrollado a partir de aceites no comestibles para sintetizar biocombustible fue el desarrollado por Vinayaka et al. (2018, pp. 4–8), el cual consistió en el empleo de una mezcla de aceite de nim y aceite de karanja como materia prima con una relación molar 6:1 metanol/aceite, 0,67 % en peso de NaOH, y un tiempo de reacción de 77 minutos, logrando un rendimiento de producción de biodiesel del 86,2 %, demostrando la viabilidad de los aceites de nim y karanja.

Los granos de semilla de té (*Camelia sinensis L. Kuntze*) también han sido procesadas para obtener aceite con el cual se puede sintetizar biodiesel debido a su alto contenido de ácido oleico, para la experimentación se decidió emplear KOH como catalizador con metanol. Aunque el rendimiento obtenido no se considera favorable debido a que apenas llega a 34,3 % en peso, el costo de producción de las semillas de té resulta favorable para una producción de biodiesel sustentable (Demirbas and Kinsara, 2017, pp. 2–6).

El aceite de ricino también ha sido empleado para la producción de biodiesel debido a que su cultivo no requiere demasiadas demandas, por lo que su costo de producción es asequible respecto a los cultivos de otras especies vegetales no comestibles. Mas aún el biodiesel obtenido presenta una viscosidad muy alta lo que significa que no puede ser empleado directamente en los motores de encendido por compresión. Para remediar este hecho se suele mezclar este aceite con petrodiesel hasta lograr las especificaciones determinadas por las normas estándar. Para su obtención se requiere una relación molar 6:1 metanol/aceite a 60 °C, y un 1% en peso de KOH como catalizador con un rendimiento obtenido del 75% en peso. Otro medio de obtención de biodiesel de aceite de ricino es empleando hidróxido de potasio como catalizador por medio de irradiación con microondas empleando una relación etanol aceite 8:1 con un 1,4 % en peso de catalizador. El rendimiento que alcanza este procedimiento es del 95 % cumpliendo los estándares

marcados por las normas internacionales (Keera et al., 2018, pp. 980–981; Thirugnanasambandham et al., 2016, pp. 2899–2901).

Los aceites residuales también forman parte de la materia prima para este grupo de biocombustibles, el aceite residual de cocina puede ser convertido en biodiesel en condiciones de 60 °C, con una relación molar 1:2,5 metanol/aceite en presencia del 1% de catalizador logrando un rendimiento del 80,2 %, mientras que al emplear Ácido Sulfúrico ( $H_2SO_4$ ) el rendimiento aumenta a un 83,7 %, según lo explica Sahar et al. (2018, pp. 221–223). Por otro lado, de acuerdo a la experimentación desarrollada por Yari et al. (2019, pp. 7–10) el aceite residual de pescado también puede ser empleado para la producción de biodiesel gracias a la energía de microondas empleando 1% en peso de catalizador, una relación metanol/aceite 6:1 y un tiempo de reacción de 25 minutos dentro del reactor.

También pueden ser convertidos en biodiesel residuos sólidos de curtiembre tomados de las instalaciones de tratamiento por medio de catálisis ácida, en primer lugar, se procede a secar los lodos para posteriormente obtener los ácidos grasos libres de la escoria por medio de una extracción con solventes, en este caso hexano. Con los ácidos grasos libres listos se procede a realizar las reacciones de esterificación y transesterificación respectivas en presencia de 2,5% en peso de  $H_2SO_4$ , a 65°C, durante 12 horas, con una proporción de 1:15 aceite/metanol, alcanzando un rendimiento del 98,2% como se indica en la investigación realizada por Balasubramanian et al. (2018, pp. 6–10). Mientras que por otro lado Booramurthy et al. (2019, pp. 4–7) explica que se puede obtener biodiesel de los residuos de la tenería empleando nanocatalizadores  $Fe - Mn - SO_4/ZrO_2$  (Zirconio dopado de Sulfato de Hierro y Manganeso) en una proporción del 6 % en peso a 65 °C, con una relación metanol/grasa de 12:1, logrando alcanzar un rendimiento del 96,6 %. La investigación permitió demostrar que el catalizador sintetizado puede ser empleado hasta cinco veces con un rendimiento superior al 90 %.

La piel de pollo es otro residuo sólido que puede ser convertido en FAEE, como lo explica Abid (2019, pp. 2–3) una vez que se han extraído los lípidos por cocción y extracción con cloroformo, se procede a la esterificación con ácido sulfúrico, además de una relación molar de hidróxido de sodio/metanol 1:3, a una temperatura de 64,7 °C, con un tiempo de reacción de 1h. De igual manera, la grasa de cerdo es un sólido que puede convertirse en biodiesel pasando por un proceso de extracción similar al de la piel de pollo, para posteriormente desarrollarse la reacción de transesterificación la misma que ocurre gracias a la acción del CaO (Óxido de Calcio) que actúa como catalizador en una proporción del 8% en peso, con una relación molar 1:9 alcohol/metanol a una temperatura de 65 °C durante 90 minutos, alcanzando un rendimiento del 92,5 % (Cherian et al., 2019, pp. 6–8).

Los estudios para la síntesis de biodiesel de segunda generación no solo se enfocan en la materia prima, sino también en catalizadores de bajo costo. Un ejemplo claro es el empleo de conchas



para obtener un catalizador rico en CaO , estudiado por Perea (2016, pp. 27–28) en el cual se establece que las conchas deben secarse a 100 °C por una hora, y posteriormente calcinarse a 900 °C por 2 horas, para emplearlas con aceite de camelina, el mismo que se calentó a 100 °C durante una hora para remover impurezas, y posteriormente se redujo su temperatura a 65 °C. La relación metanol/aceite fue 12:1, con un 1% en peso de catalizador durante dos horas. Durante la experimentación se demostró que el catalizador presentó estabilidad térmica y química para el correcto desarrollo de la transesterificación. Por otro lado, también se ha estudiado el empleo de lipasas inmovilizadas como catalizador, alcanzando un rendimiento máximo de este procedimiento del 72% a una temperatura de 50 °C, con una relación molar metanol/aceite 6:1 y 40 % en peso de enzima para que se desarrolle la reacción (Taher et al., 2019, pp. 2–4).

### **2.1.3. Biodiesel de tercera generación**

Este tipo de biodiesel permite mitigar los problemas asociados con los biocombustibles de primera y segunda generación (comida y terreno), debido a que emplea como materia prima a microalgas y microorganismos, los cuales permiten obtener un rendimiento relativamente alto en comparación con los cultivos tradicionales (Mahlia et al., 2020, pp. 2–3).

Gujjala et al. (2017, pp. 10–11) explica el procedimiento de síntesis de FAEE a través de microbios oleaginosos (organismos capaces de almacenar lípidos) debido a que pueden producir lípidos que posteriormente pueden ser transesterificados ésteres metílicos de ácidos grasos. Para este experimento se emplearon levaduras, mohos y microalgas a partir de los cuales se realiza una extracción con solventes. Las levaduras poseen un rendimiento elevado, y su crecimiento no se ve limitado por la ausencia de luz, sin embargo, las condiciones de operación deben estar en estricto control para evitar la contaminación con otras especies microbianas. Por otro lado, los hongos filamentosos son capaces de acumular hasta un 80% de lípidos por peso seco y su recolección es mucho más sencilla, puesto a que los hongos pueden cultivarse en forma de gránulos. Las microalgas teóricamente son el mejor camino para la obtención de lípidos, debido a que pueden crecer en aguas residuales, no obstante, mantener las condiciones óptimas para el desarrollo de las microalgas resulta costoso.

El biodiesel también puede ser obtenido de microalgas como *Spirulina máxima* luego de una extracción con solventes, posteriormente durante la reacción de esterificación se reduce los valores de acidez con KOH, las condiciones óptimas para este procedimiento son una relación metanol/aceite 12:1, a una temperatura de 60 °C, con una concentración de 1 % de ácido sulfúrico durante 90 minutos. Posteriormente ocurre una transesterificación alcalina, logrando un rendimiento del 86,1 % empleando una relación molar aceite/metanol 1:9, a 65 °C, con una concentración de 0,75 % en peso de KOH (Rahman et al., 2017, pp. 2–6).

Por otro lado, *Chlorella protothecoides* puede ser empleada como materia prima para la síntesis de biodiesel por medio de una transesterificación básica con 0,75 % en peso de KOH, a 68 °C, con una relación molar 6:1 metanol/aceite durante 88 minutos, alcanzado así un rendimiento del 98,6 %, como lo explica Yaşar (2018, pp. 2–3). Por otro lado, el empleo de la microalga *Chlorella minutissima* también alcanza un rendimiento alto al convertirse en biodiesel por medio de un reactor de cavitación hidrodinámica en el cual se trabaja a 4 bar de presión, con una relación molar aceite/alcohol 1:30, una concentración de catalizador de 1,3% y un tiempo de reacción 40 minutos, logrando un máximo rendimiento del 99 % (Thirugnanasambandham, 2018, pp. 6–7).

#### **2.1.4. Investigaciones de producción de biodiesel a través de modelos computacionales**

En los últimos años se han desarrollado modelos computacionales para evaluar la viabilidad de la implementación de plantas productoras de biodiesel a partir de distintos materiales con el objetivo de minimizar riesgos de operación de plantas piloto.

Es así que Basto (2016, pp. 46–62) desarrolló un modelo empleando reactores de película, para la conversión de aceite de palma en biodiesel con ayuda de metanol, en primer lugar se verifica que el aceite de palma solo contenga 3% de ácidos grasos libres, caso contrario se realiza un proceso de esterificación en presencia de ácido sulfúrico para reducir la acidez del aceite de palma con una relación molar 3:1 metanol: alcohol a 60°C, posteriormente se pasa al proceso de doble transesterificación con hidróxido de sodio como catalizador empleando 1% en peso con respecto al aceite, y una relación molar alcohol: aceite 6:1 con una temperatura de reacción de 60°C. una vez obtenido el producto de reacción se especifica que el experimento pasa a un decantador para separar el biodiesel del glicerol por decantación, para posteriormente purificar estos productos luego de neutralizar el catalizador básico con ácido sulfúrico y metanol. Después el metanol que no se ha empleado para la reacción se recupera al destilar las corrientes, el metanol obtenido se destila nuevamente y es recirculado al proceso para reducir costos. La corriente de biodiesel posteriormente debe ser lavada para remover las impurezas presentes (sales y jabones), la corriente liviana que se desprende de este proceso pasa nuevamente a una columna de destilación para remover el exceso de agua. El diseño se desarrolló para tres escenarios en el primero desarrollando el proceso de transesterificación convencional, el segundo empleando reactores de película para el proceso co-corriente y el tercero fue la transesterificación en el proceso de contracorriente todo esto se logró al emplear Aspen Plus. La ventaja de emplear estos reactores radica en la reducción de tiempos de residencia, así como los costos operativos, puesto que permite que el área de contacto entre los reactantes aumente facilitando el proceso. El rendimiento reportado para el primer caso varía entre 93 y 93,5%, para el segundo caso se logra un 95% y para el tercer caso un 93%.

Llanos (2017, pp. 24–40) modeló una planta de producción de biodiesel a través de la transesterificación catalítica, con aceite de palma como materia prima, e hidróxido de sodio como catalizador (1% p/p), en presencia de metanol como alcohol reaccionante en una relación molar 6:1 respecto al aceite, con un rango de temperatura entre 40 y 60°C. el diseño se realizó con dos reactores CSTR en serie con un tiempo de residencia de 15 minutos para cada uno logrando una pureza del 99,76% de biodiesel.

Así mismo Alvarães et. al (2019, pp. 3–7) elaboró un modelo de producción de biodiesel a partir de aceite de soya empleando el software UNISIM. El modelo de producción se desarrolló tomando como base a la trioleína y al metanol para obtener FAEE en presencia de hidróxido de sodio (NaOH), logrando una corriente de biodiesel con una pureza del 99,79% y una corriente de glicerol 99,62% pura. El proceso de transesterificación tiene en tres reactores CSTR, variando la composición de dioleína en la alimentación un 3%, 5% y 7% respectivamente mostrando que no existe una diferencia significativa en la composición del producto sintetizado, no obstante, se demostró una reducción significativa en el consumo energético.

Por otro lado, Souza et al. (2020, pp. 2–6) analizó los parámetros cinéticos y termodinámicos mediante el software Aspen Plus a partir del empleo de parámetros básicos reconocidos en la literatura. Es así que el diseño se elaboró a partir de una relación molar etanol: aceite 6:1, con un 1% en peso de hidróxido de sodio como catalizador para alcanzar una conversión superior al 96% entre un rango de temperatura de 333,15 a 353,15°C su aporte radicó en demostrar la viabilidad de los modelos termodinámicos para la predicción de coeficientes de actividad, demostrando que el modelo UNIF-Hir es el modelo más apropiado para el equilibrio líquido-líquido de sistemas que contiene aceite de palma, mientras que para sistemas que contienen biodiesel el modelo UNIF-Bess. Por otro lado, el modelo UNIF-N es la mejor opción para predecir los parámetros del equilibrio líquido vapor.

### ***2.1.5. Simulación de procesos***

La simulación permite predecir lo que ocurriría en un sistema real, además facilita la validación y la comprensión del comportamiento del sistema al variar los datos y las propiedades que componen el modelo. El objetivo de la simulación es encontrar las condiciones óptimas de operación para el sistema, sin necesidad de la implementación de una planta piloto. Además, permite experimentar diferentes rutas de producción sin poner en riesgo la vida de los operarios y demás personal dentro de la industria (Al-Megren and Xiao, 2016, pp. 169–170).

Los sistemas reales son complejos, por esta razón para simularlos se requiere omitir ciertos detalles (abstracción). Es así que, al desarrollar una simulación solo se necesitan ciertas condiciones esenciales (Downey, 2014, pp. 79–80).

El modelado computacional se basa en métodos, herramientas y formulaciones con el fin de resolver problemas complejos, que se desarrollan con una gran cantidad de variables y datos, logrando crear “modelos computacionales para situaciones en las que es imposible o muy costoso probar o medir las diversas soluciones posibles para un fenómeno utilizando modelos experimentales o soluciones analíticas” (Baptista et al., 2019, pp. 2–3).

Para su funcionamiento los simuladores de proceso contienen operaciones industriales y paquetes de información físico-química, lo que permite que modelen, simulen y controlen procesos. Los softwares están diseñados para ser intuitivos, y poseen un sin número de compuestos químicos, herramientas lógicas, operaciones y procesos unitarios, los mismos que permiten el diseño de procesos químicos en un entorno virtual (Brito, 2013, pp. 56–57).

Para llevar a cabo el proceso de simulación es necesaria la experiencia en el uso del programa a emplear, así como conocimiento sobre el sistema real que se desea modelar, puesto a que es indispensable partir de las variables de entrada del proceso. Además, los errores pueden causar problemas de diseño en los sistemas reales afectando a la seguridad de los procesos (Brito, 2013, pp. 56–57).

Brito (2013, pp. 57) manifiesta que no existe ningún programa de simulación perfecto debido a que ninguno posee todos los compuestos químicos existentes, y los valores de las propiedades que presentan son aproximados en la mayoría de los casos, por esta razón para determinar los compuestos y sus propiedades químicas y termodinámicas con la mayor precisión posible se recurre a métodos que faciliten el desarrollo de las simulaciones.

En los procesos de simulación no solo son necesarios los compuestos, también se necesita un paquete computacional, el cual asegura la fiabilidad del modelo. Existen diversos paquetes computacionales, entre los más relevantes están los paquetes termodinámicos que se encargan de evaluar las relaciones de equilibrio entre los componentes (equilibrio líquido-vapor, entalpía, etc.) (Brito, 2013, pp. 57–58).

Ventajas de la simulación:

Las ventajas más relevantes del proceso de acuerdo a lo que dicen Zahan y Kano (2018, pp. 3–5), así como también lo mencionan Mishra y Goswami (2018, pp. 10–14).

- Reduce el tiempo de investigación para determinar las características óptimas del sistema, simplificando costos.
- Se puede experimentar con condiciones extremas de operación, las cuales no podrían probarse en una planta real.
- Permite eliminar factores obsoletos e ingresar nuevos, para verificar el sistema. De esta forma se realizan comparaciones entre modelos existentes y se ensayan aquellos que aún no se encuentran en operación, para posteriormente recrearlos en un sistema real.

- Admite la modificación de variables para introducir o eliminar errores a voluntad.
- Facilita el estudio de control de procesos.
- Ayuda a determinar los efectos económicos de incrementos o disminuciones de los parámetros básicos del sistema.
- Permite analizar la estabilidad de los sistemas frente a las perturbaciones.

## **2.2. Bases teóricas**

### **2.2.1. Biodiesel**

*“Biocombustible biodegradable y renovable que se obtiene principalmente a través de la reacción de transesterificación de aceites vegetales y grasas animales utilizando un alcohol de cadena corta (en general, metanol o etanol), en presencia de un catalizador, que puede ser ácido, básico e incluso enzimático”* (Brito, 2013, pp. 18–19).

Según Parente (2003, pp. 13–15), “el biodiesel está compuesto por una mezcla de ésteres metílicos o etílicos de ácidos grasos, obtenidos de la reacción de transesterificación de cualquier triglicérido con un alcohol de cadena corta, que puede ser metanol o etanol”.

Existen posibilidades infinitas de obtención de biodiesel las cuales se han venido estudiando desde tiempos remotos, encontrando diversas rutas de producción. Actualmente, se conoce que el uso de metanol junto con un catalizador básico permite obtener los mejores resultados. Sin embargo, si se trata de la producción de biodiesel partiendo de aceites con niveles elevados de acidez y humedad es necesario emplear un catalizador ácido el cual permita la eliminación de agua, en caso de aplicarse un catalizador básico se llegaría a promover la formación de altos niveles de acidez y saponificación, haciendo inviable el proceso de obtención de biodiesel (Brito, 2013, pp. 37–40).

#### *2.2.1.1. Características del Biodiesel*

El biodiesel puede ser entendido como una mezcla de ésteres de alquilo, los mismos que han sido obtenidos desde triglicéridos (o triacilglicéridos) que contienen ácidos grasos de gran cadena con alcoholes de cadena corta, como metanol y etanol, por medio de la reacción de transesterificación (Brito, 2013, pp. 20–21).

Estos ésteres de alquilo (que son metilo o etilo en la mayoría de los casos) se usan como combustible en lugar de aceites vegetales vírgenes, debido a que tienen características fisicoquímicas y termodinámicas más cercanas a las del diesel del petróleo (Brito, 2013, pp. 20–21).

El uso de biodiesel en motores de combustión aporta varios beneficios a la máquina y al medio ambiente. Rodríguez citado en Brito (2013, pp. 25–40) enumera algunas ventajas técnicas del uso de biodiesel como combustible.

- La propiedad lubricante del biodiesel es superior a la que posee el diesel del petróleo, razón por la cual aumenta la vida útil del motor y reduce los mantenimientos necesarios.
- La manipulación del biodiesel se considera más segura que la del diesel de petróleo, debido a que es una sustancia biodegradable, al poseer cantidades ínfimas de compuestos aromáticos y azufre.
- El biodiesel es considerado una forma de energía renovable, natural y sostenible.

#### *2.2.1.2. Materia Primas*

Durante los últimos años las crecientes investigaciones nos han permitido identificar que las materias primas empleadas en la producción de biodiesel son aceites vegetales, grasas animales y aceites-grasas residuales. Citando a los aceites vegetales más utilizados tenemos al aceite de soja, aceite de girasol, aceite de maní, aceite de canola, aceite de palma, etc. Mientras que las grasas animales más populares para este proceso son el sebo de res y la manteca de cerdo. Por otro lado, las grasas y aceites residuales más comunes son los aceites de vísceras de pescado y el aceite empleado para freír (Zahan and Kano, 2018, pp. 2–4; Brito, 2013, pp. 24–28).

En la producción de biodiesel la selección de materias primas se ve orientada de acuerdo a factores climáticos, económicos y geográficos. Es así que, en Estados Unidos, la materia prima más utilizada en la producción de biodiesel es el aceite de soya, mientras que en la Unión Europea se emplea principalmente aceite de canola, y en los países tropicales el aceite de palma es la elección más apropiada (Knothe et al., 2010, pp. 5–8; Mahlia et al., 2020, pp. 4–5).

Los aceites residuales han empezado a sobresalir como materias primas potenciales debido a su abundancia, precio bajo en el mercado y su enfoque de procesamiento como alternativa ambientalmente sustentable para la eliminación de los mismos. De acuerdo con Zahan y Kano (2018, pp. 6–7) estos aceites y grasas resultan de procesamientos domésticos, industrial y comercial, por lo tanto, sus fuentes de producción son variadas, así:

- Industrias que procesan productos alimenticios fritos.
- Cafeterías y cocinas industriales, donde la comida se prepara mediante el proceso de fritura.
- Alcantarillado municipal (rico en grasa).
- Aguas residuales de procesos de tenería.

### 2.2.1.3. Rutas de Producción

Las investigaciones de campo de la producción de biodiesel a partir de aceites vegetales y grasas animales han determinado cuatro métodos principales de producción, los cuales se enfocan en la reducción de la viscosidad de la materia prima, con el fin de facilitar su uso en motores diésel evitando los problemas operativos de formación de depósitos de carbono.

Según Pabby (2015, pp. 37–45), y Knothe et al. (2010, pp. 252–254) estos métodos son:

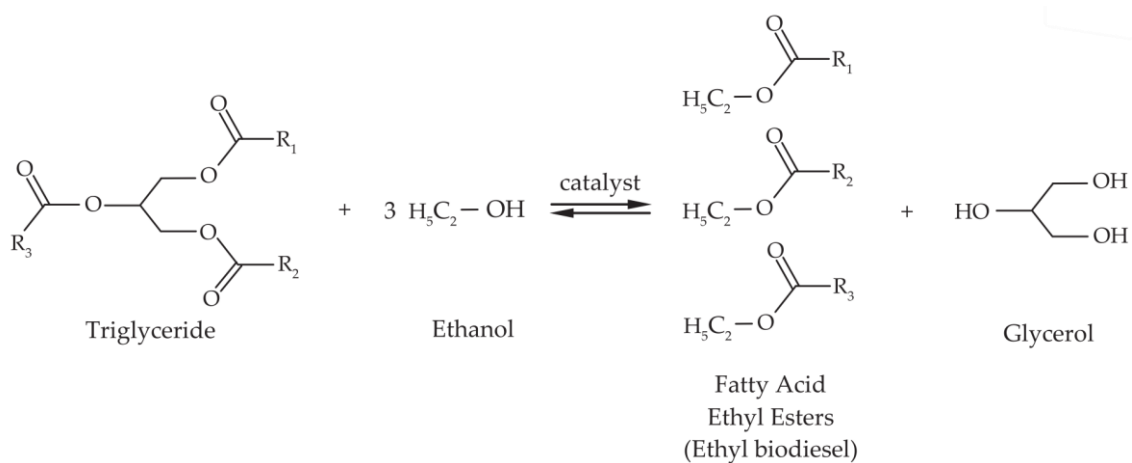
- Mezcla en varias proporciones con diésel de petróleo.
- Pirólisis
- Microemulsión
- Transesterificación

Aunque todos estos métodos ayudan a la producción de biocombustibles, el método más empleado es la transesterificación, además sólo a los productos sintetizados a partir de esta reacción se les conoce con el nombre de biodiesel (Athar and Zaidi, 2020, pp. 3–4).

### 2.2.1.4. Transesterificación

Conocida también como alcoholólisis, es una reacción en la que una molécula de triglicéridos reacciona con tres moléculas de un alcohol de cadena corta (metano o alcohol principalmente) produciendo tres moléculas de ésteres de alquilo y una molécula de glicerina (Kumbhar et al., 2020, pp. 3–6; Aransiola et al., 2014, pp. 6–7; Brito, 2013, pp. 35–43).

La transesterificación mediante catálisis básica (Figura 1) es el método más común empleado en la producción comercial de biodiesel, ya que esta ruta catalítica ofrece el mayor porcentaje de conversión y la mayor velocidad de reacción, aunque el producto generado también tiene una alta concentración de alcohol y catalizador (Okullo, 2017, pp. 57–58).



**Figura 1-2.** Reacción de transesterificación con el uso de etanol.

Fuente: (Okullo, 2017, pp. 57–58).

En esta reacción se sigue un mecanismo de equilibrio de tres etapas (Figura 2). En primer lugar, la molécula de triglicéridos reacciona con el alcohol formando una molécula de diglicéridos y una molécula de éster. Luego, la molécula de diglicéridos reacciona con el alcohol y forma una molécula de monoglicéridos además de una segunda molécula de éster, finalmente, la molécula de monoglicéridos reacciona con el alcohol para formar la tercera molécula éster y una molécula de glicerol (Brito, 2013, pp. 22–27).

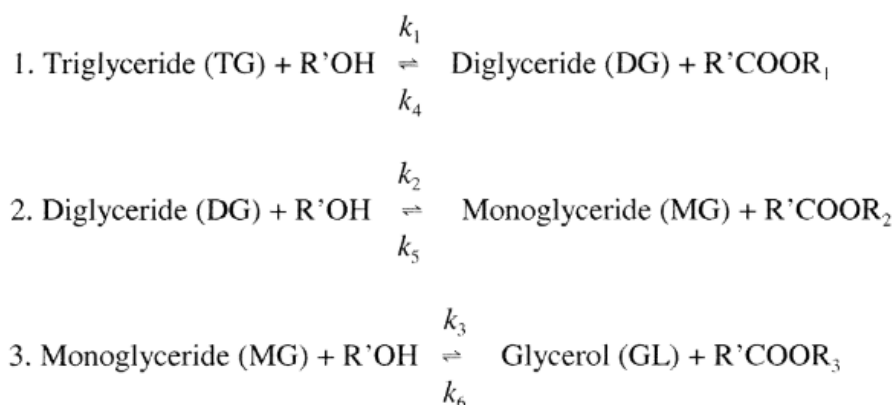


Figura 2-2. Mecanismo de la reacción de transesterificación de un triglicérido.

Fuente: (Ma and Hanna, 1999, pp. 8–9).

Algunas variables en el proceso de transesterificación resultan ser sumamente importantes. Por ejemplo, la elección del catalizador apropiado, porque de acuerdo con la calidad de la materia prima, ya sea aceite vegetal o grasa animal, determinadas sustancias presentes, como ácidos grasos libres y agua, puede retrasar la reacción e incluso la hacen poco viable puesto que conlleva a la formación de subproductos que son difíciles de separar. Es por ello que para las materias primas con bajos niveles de ácidos grasos libres y agua, se recomienda la transesterificación básica, debido a que permite una conversión más rápida de los triglicéridos en éster es (Brito, 2013, pp. 22–29).

Mas aún, para aceites y grasas residuales, la transesterificación ácida es más apropiada, debido a que evita que los ácidos grasos libres y el agua presentes en la materia prima promuevan la formación de jabón. No obstante, el uso de un catalizador ácido reduce en gran medida la velocidad de reacción y, por lo tanto, su rentabilidad económica se reduce (Brito, 2013, pp. 24–32).

Además del catalizador, el alcohol utilizado en la transesterificación interfiere en el proceso de síntesis. Se puede realizar la transesterificación con metanol, etanol, propanol, butanol y alcohol amílico, sin embargo, el metanol y el etanol son los más utilizados en los procesos industriales (Mahlia et al., 2020, pp. 3–4).

El predominio del uso de metanol y etanol no es aleatorio se debe principalmente a que poseen ventajas físicas y químicas sobre otros alcoholes y su costo es relativamente bajo. Ma y Hanna



(1999, pp. 7–8) señalan que el metanol reacciona rápidamente con los triglicéridos y disuelve con facilidad al catalizador básico lo que beneficia la reacción de transesterificación. No obstante, debido a su bajo punto de burbuja, existe un alto riesgo de explosión. Por otro lado, el empleo de etanol se considera favorable debido a que se obtiene un producto con un índice de cetano y propiedades lubricantes superiores, no obstante, su empleo promueve la dispersión de glicerina en el biodiesel haciendo difícil su separación (Lôbo et al., 2009, pp. 25–26).

### 2.2.1.5. Cinética de la reacción de transesterificación

La transesterificación catalizada con etanol se conoce como etanólisis de triglicéridos (TG), en donde una molécula de TG reacciona con tres moléculas de etanol (E), a través de tres reacciones reversibles que ocurren de manera secuencial: en primer lugar, ocurre una etanólisis parcial de TG generando diglicéridos (DG), luego los diglicéridos se reducen a monoglicéridos (MG) por una etanólisis parcial, finalmente la etanólisis parcial de MG forma glicerol (G). Durante cada una de las reacciones una molécula de ácido graso de etil éster (FAEE). El modelo cinético que se presenta consta de seis ecuaciones diferenciales, cada una con una constante de velocidad distinta (Narváez et al., 2015, pp. 338–339).

Aplicando la ley de velocidad a las ecuaciones de la figura 2:

$$\begin{aligned}\frac{d[\text{TG}]}{dt} &= -k_1[\text{TG}][\text{E}] + k_2[\text{DG}][\text{FAEE}] \\ \frac{d[\text{DG}]}{dt} &= k_1[\text{TG}][\text{E}] - k_2[\text{DG}][\text{FAEE}] - k_3[\text{DG}][\text{E}] + k_4[\text{MG}][\text{FAEE}] \\ \frac{d[\text{MG}]}{dt} &= k_3[\text{DG}][\text{E}] - k_4[\text{MG}][\text{FAEE}] - k_5[\text{MG}][\text{E}] + k_6[\text{G}][\text{FAEE}] \\ \frac{d[\text{FAEE}]}{dt} &= k_1[\text{TG}][\text{E}] - k_2[\text{DG}][\text{FAEE}] + k_3[\text{DG}][\text{E}] - k_4[\text{MG}][\text{FAEE}] + k_5[\text{MG}][\text{E}] \\ &\quad - k_6[\text{G}][\text{FAEE}] \\ \frac{d[\text{G}]}{dt} &= k_5[\text{MG}][\text{E}] - k_6[\text{G}][\text{FAEE}] \\ \frac{d[\text{E}]}{dt} &= -k_1[\text{TG}][\text{E}] + k_2[\text{DG}][\text{FAEE}] - k_3[\text{DG}][\text{E}] + k_4[\text{MG}][\text{FAEE}] - k_5[\text{MG}][\text{E}] \\ &\quad + k_6[\text{G}][\text{FAEE}]\end{aligned}$$

### 2.2.1.6. Estándares y propiedades del biodiesel

La comercialización del biodiesel resulta efectiva cuando éste cumple las especificaciones determinadas para cada país o región. Es así que, la norma referencial empleada en la Unión

Europea es la norma EN 14214:2008, mientras que en América se cumple con la norma ASTM 6751-07 (Moreau et al., 2008, pp. 8–10; Tang et al., 2008, pp. 12–13).

Las especificaciones de calidad dependen tanto de la composición de las materias primas como del proceso que se lleva a cabo para la conversión y purificación del biodiesel. Sahar et al.(2018, pp. 123–124), Ma y Hana (1999, pp. 3–5), Tang et al. (2008, pp. 1174–1175) Y Kumbhar et al.(2020, pp. 6–7) citan a las siguientes propiedades como las más importantes:

- Densidad a 15°C

Esta propiedad es una de las más importantes debido a que afecta al sistema de inyección del motor. Los esterres metílicos y etílicos (FAEE) considerados biodiesel poseen una densidad que toma valores entre 0,86 y 0,88 g/cm<sup>3</sup>. La densidad del biodiesel deriva de la materia prima empleada para su producción.

- Viscosidad a 40 °C

La viscosidad del combustible es sumamente importante en la combustión de un motor a diesel, debido a que es la propiedad que determina el cambio dinámico en el movimiento del fluido, dicho de otra manera, es la medida de la fricción interna del fluido.

- Flash Point

Conocido como punto de inflamación es muy importante debido a que se toma en cuenta para la seguridad y almacenamiento del biodiesel, es la temperatura mínima a la cual se enciende el combustible en presencia de una llama.

- Índice de Cetano

Es la cualidad que indica el periodo de ignición del combustible, y depende mayormente de la composición química del biodiesel.

- Índice de Yodo

El valor de Yodo indica el grado de insaturación del biodiesel, por lo que resulta importante conocerlo para determinar la estabilidad del aceite. Mide la cantidad de Yodo en gramos por 100 g de aceite. Si el índice de Yodo presenta un valor elevado se produce la polimerización del combustible debido a la formación de epóxido por la adición de oxígeno en los dobles enlaces.

- Estabilidad a la oxidación

La estabilidad frente a la oxidación se relaciona directamente con la composición del combustible y la cantidad de impurezas presentes en el mismo. La norma europea cita una estabilidad a la oxidación de 8 horas, mientras que para la norma americana solo son necesarias 3 horas para que el biodiesel cumpla con las especificaciones.

- Contenido de agua

El biodiesel es capaz de absorber pequeñas cantidades de agua. No obstante, si la cantidad de agua supera los límites establecidos en la normativa puede causar problemas en el motor y afectar a la estabilidad frente a la oxidación.

**Tabla 1-2:** Especificaciones del Biodiesel

PROPIEDAD	UNIDADES	ESPECIFICACIONES	
		ASTM 6751	EN 14214
Densidad a 15°C	g/cm <sup>3</sup>		0,86-0,90
Viscosidad cinemática a 40°C	mm <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>	1,9-6	3,5-5
Flash Point	°C	Mín. 93	Mín. 101
Punto de obstrucción de filtro en frío (POFF)	°C		Máx. 5 – Mín. -20
Punto de nube	°C	Sin Límites	No incluido
Contenido de azufre	mg/kg	Máx. 5,0	Máx. 10,0
Res. Carbonoso Conradson 100%	% (m/m)	Máx. 0,05	Máx. 0,3
Índice de cetano		Mín. 47	Mín. 51
Contenido en cenizas sulfatadas	% (m/m)	Máx. 0,02	Máx. 0,02
Contenido en agua	mg/kg		Máx. 500
Contaminación total	mg/kg		Máx. 24
Corrosión al cobre (3h/50°C)	Clasificación	Máx. N° 3	Clase 1
Estabilidad a la oxidación	Horas	Mín. 3	Mín. 8
Índice de acidez	mg KOH/g	Máx. 0,50	Máx. 0,50
Contenido de ésteres	% (m/m)		Mín. 96,5
Ester metílico de ácido linolénico	% (m/m)		Máx. 12
Esteres metílicos poliinsaturados	% (m/m)		Máx. 1,00
Contenido en metanol	% (m/m)		Máx. 0,20
Contenido en monoglicéridos	% (m/m)		Máx. 0,80
Contenido en diglicéridos	% (m/m)		Máx. 0,20
Contenido en triglicéridos	% (m/m)		Máx. 0,20
Glicerol libre	% (m/m)	Máx. 0,02	Máx. 0,02
Glicerol total	% (m/m)	Máx. 0,24	Máx. 0,25
Índice de yodo	g yodo/100 g		Máx. 120
Fósforo	mg/kg	Máx. 10	Máx. 4
Metales del grupo I (Na + K)	mg/kg	Máx. 5	Máx. 5
Metales del grupo II (Ca + Mg)	mg/kg	Máx. 5	Máx. 5

**Fuente:** (American Society for Testing and Materials, 2008; European Committee for Standardization, 2003)

**Realizado por:** Herrera, Julisa, 2020.

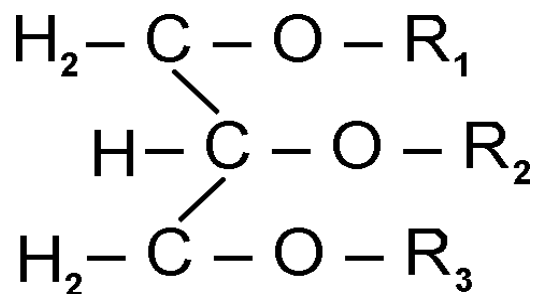
### 2.2.2. Aceites vegetales

Son sustancias que se extraen principalmente de semillas de plantas, y se encuentran constituidos en mayor medida de ácidos grasos y triglicéridos. Los aceites vegetales se usan para freír alimentos, producir pinturas, lubricantes, combustibles, productos farmacéuticos, entre otros productos. (Brito, 2013, pp. 36–37)

Los métodos modernos de producción de aceite se basan en la extracción química, promoviendo una producción rápida, económica y eficiente mediante solventes, principalmente se usa hexano. No obstante, existe otro método de producción conocido como extracción física, el cual es un procedimiento de carácter mecánico (Brito, 2013, pp. 36–37).

#### 2.2.2.1. Caracterización Química

Los aceites vegetales están compuestos en gran medida por triglicéridos, los cuales a su vez están formados por la unión entre tres ácidos grasos de gran cadena además de una molécula de glicerol. Los triglicéridos que a temperatura ambiente se encuentran en estado sólido, se conocen como grasas y se componen de ácidos grasos saturados, mientras que si su estado es líquidos a temperatura ambiente son denominados aceites, y están formados por ácidos grasos insaturados. Los triglicéridos pueden ser simples, si los tres grupos acilo unidos a la molécula de glicerol son iguales o mixtos si los grupos acilo son diferentes (Brito, 2013, pp. 26–31).



**Figura 3-2.** Estructura de un triglicérido<sup>1</sup>

Fuente: (Brito, 2013, pp. 26–31)

La composición de grasas y aceites se ve determinada por ácidos grasos libres, fosfolípidos, tocoferoles y esteroides. Los ácidos grasos libres dificultan la producción de biodiesel, puesto a que determinan el índice de acidez, el cual a su vez establece la viabilidad o inviabilidad de una ruta de producción de biodiesel (Brito, 2013, pp. 37–38).

---

<sup>1</sup> Los radicales R1, R2 y R3 representan los ácidos grasos que originaron los triglicéridos.

Los aceites tienen en su composición mayoritariamente ácidos grasos con cadenas de 12, 14, 16 y 18 átomos de carbono. Aunque la cantidad de carbonos es similar, la conformación de los ácidos grasos debido a presencia de dobles enlaces y funciones externas es completamente diversa (Brito, 2013, pp. 37–38).

El empleo de aceites vegetales puros como combustible tiene ventajas y desventajas, como lo expresa Rodríguez:

*Las ventajas más significativas se refieren a su alto poder calorífico, capacidad de renovación y ausencia de compuestos de azufre. Mientras que como desventajas figuran el hecho de que la combustión de aceites vegetales puros en motores puede generar problemas de combustión incompleta, disminución de capacidad de lubricación, formación de depósitos de carbono en los sistemas de inyección, etc. Estas desventajas se deben a ciertas propiedades físico químicas de los aceites, tales como su elevada viscosidad, densidad, presencia de ácidos grasos libres y la baja volatilidad. Además, se produce la formación de acroleína (sustancia tóxica y cancerígena) por la descomposición térmica de glicerol.* (Brito, 2013, pp. 24–25).

### **2.2.3. DWSIM**

El simulador de procesos químicos DWSIM nació gracias a Excel VBA en el año 2004 con un código simple, no obstante, fue en 2006 cuando Daniel Medeiros (su desarrollador) decidió presentarlo al público como un programa de código abierto y descarga completamente gratuita., compitiendo directamente con los softwares comerciales más potentes como Aspen-HYSYS (Medeiros, 2019, pp. 3).

DWSIM tiene una interfaz gráfica intuitiva, con una amplia biblioteca de compuestos, modelos termodinámicos, algoritmos flash y operaciones unitarias, razón por la cual es sencillo modelar distintos tipos de procesos químicos que pueden ser replicados a escala real, para optimizar procesos ya existentes sin necesidad de implementar una planta piloto, reduciendo así costos y eliminando los posibles riesgos que podrían afrontar operadores al probar condiciones para aumentar la eficiencia del proceso. “DWSIM es capaz de simular procesos de equilibrio de electrolitos en estado estacionario, vapor-líquido, vapor-líquido-líquido, sólido-líquido y acuoso” (Medeiros, 2019, pp. 5)

Los paquetes de propiedades más empleados que se encuentran disponibles en el software son “Peng-Robinson, Chao-Seader, Grayson-Streed, gas ideal, UNIFAC, Soave-Redlich-Kwong, Lee-Kesler y otros”. Tiene una biblioteca de componentes para búsqueda instantánea; herramienta de generación de gráficos y curvas; detección automática de errores; disponibilidad para usar en dispositivos móviles; interfaz simple para usuarios con poco conocimiento de programación; gestión de flujos de materiales, reacciones químicas y creación de componentes; diseñar una representación esquemática del proceso, etc.” (Baptista et al., 2019, pp. 2–3).

### 2.2.3.1. Modelos Termodinámicos

Estos Modelos son funciones matemáticas derivadas del equilibrio del sistema, los mismos que permiten valorar el comportamiento termodinámico tanto de sustancias puras como mezclas bajo determinadas condiciones (Presión, Temperatura, etc.). Los modelos termodinámicos pueden ser: modelos especiales (usados en mayor medida por la industria petrolera), como: “Chao-Seader, API sour-water method, etc.”; ecuaciones de estado, como: “Peng Robinson, Redlich-Kwong-Soave, ecuación del gas ideal, Predictive SRK, etc.”; y modelos de coeficiente de actividad, tales como: “Flory-Huggins, UNIQUAC, UNIFAC, Van Laar, NRTL y Wilson”. (Pimentel, 2013, pp. 1–2).

Ecuaciones de estado. – permiten el cálculo de los coeficientes de fugacidad, siendo las más empleadas:

- Redlich-Kwong-Soave (SRK) y variantes: Usada esencialmente para procesos hidrocarbúricos y gases ligeros a presión atmosférica (Pimentel, 2013, pp. 9–10).
- Peng Robinson (PR) y sus variantes: al igual que SRK goza de una amplia aceptación en la industria petroquímica, posee dos variantes Standard y UniSim Design. Standard garantiza mayor exactitud para sistemas con gas natural, mientras que UniSim Design es una versión mejorada que representa mejor el equilibrio líquido vapor de sistemas complejos (Pimentel, 2013, pp. 10–11).

Modelos de coeficientes de actividad. – empleados para determinar las propiedades de la fase líquida del sistema. No pueden emplearse para hacer extrapolaciones o generalizaciones para sistemas no probados. Los modelos de coeficientes de actividad más empleados son:

- Ecuaciones de Margules: No se conocen fundamentos teóricos para esta ecuación, no obstante, es útil para estimaciones rápidas para ELV y ELL (Pimentel, 2013, pp. 13–14).
- Ecuación de Wilson: Representa con eficacia soluciones líquidas no ideales, exceptuando mezclas poco miscibles (Pimentel, 2013, pp. 13–14).
- NRTL: Aplicable a mezclas multicomponentes. Permite modelar sistemas donde se deben resolver simultáneamente equilibrios líquido-vapor y líquido-líquido (Pimentel, 2013, pp. 13–14).
- UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical): Similar a NRTL predice el equilibrio líquido-líquido, líquido-vapor, líquido-líquido-vapor, con un menor número de datos para desarrollar la simulación. Es aplicable a sistemas no ideales que contienen agua, hidrocarburos halogenados, aminas, ésteres, aldehídos, nitrilos y alcoholes (Pimentel, 2013, pp. 13–14).
- UNIFAC: Útil para calcular el equilibrio líquido-vapor con precisión, cuando no se cuenta con datos experimentales (Pimentel, 2013, pp. 13–14).

### 2.2.3.2. Selección de Modelo Termodinámico

La correcta elección del modelo termodinámico determinará la validez de los datos obtenidos, ya que si el modelo no es el apropiado los resultados obtenidos no serán aplicables en los sistemas reales. Para elegir el modelo termodinámico debe considerarse la naturaleza de la mezcla, el rango de presión y temperatura al cual trabaja el sistema, la miscibilidad de las mezclas y la disponibilidad de los datos.

Para un sistema con una temperatura reducida superior a 0,75 con fases líquidas miscibles, puede emplearse las ecuaciones de estado SRK o PR, por el contrario, si la temperatura reducida es inferior a 0,75 se debe emplear una ecuación de estado para la fase de vapor y un modelo para calcular la fase líquida (Pimentel, 2013, pp. 5–6).

Si se trata de una sola fase líquida es óptimo emplear los modelos NRTL (si hay presencia de agua de mezclas orgánicas), Margules (mezclas de hidrocarburos aromáticos, o Wilson (para las demás mezclas) (Pimentel, 2013, pp. 5–6).

Si el equilibrio es líquido-líquido el modelo NRTL es la mejor alternativa, siempre y cuando se posea los coeficientes de interacción, caso contrario es necesario utilizar el modelo de coeficientes de actividad UNIFAC para predecir los coeficientes (Pimentel, 2013, pp. 6–7).

Para verificar que el modelo de solución escogido es el adecuado Sheppard recomienda elaborar gráficos xy de presión o temperatura para cada par de compuestos de la mezcla y observar que no existan anomalías como fracciones planas y picos agudos (Pimentel, 2013, pp. 6–7).

La tabla a continuación muestra la recomendación de modelos termodinámicos de coeficientes de actividad propuesta por Virtual Materials, una empresa proveedora de paquetes termodinámicos, para distintos tipos de sistemas.

**Tabla 2-2:** Modelos de coeficientes de actividad para diferentes sistemas

TIPO DE MEZCLA	MODELO RECOMENDADO
Tabla Compuestos orgánicos con presencia de agua	NRTL
Alcoholes o en mezclas con fenoles	Ecuación de Wilson
Alcoholes, cetonas y éteres	Ecuaciones de Margules
Hidrocarburos C4 – C18	Ecuación de Wilson
Hidrocarburos aromáticos	Ecuaciones de Margules

**Fuente:** (Pimentel, 2013, pp. 6–7).

La tabla a continuación presenta la posibilidad de extrapolación y la aplicabilidad de métodos de coeficientes de actividad.

**Tabla 3-2:** Aplicabilidad de métodos de coeficientes de actividad

SISTEMA	Margules	Van Laar	Wilson	NRTL	UNIQUAC
Mezclas binarias	A	A	A	A	A
Mezclas multicomponentes	AL	AL	A	A	A
Sistemas azeotrópicos	A	A	A	A	A
Equilibrio líquido-líquido	A	A	NA	A	A
Sistemas diluidos	?	?	A	A	A
Sistemas autoasociativos	?	?	A	A	A
Polímeros	NA	NA	NA	NA	A
Extrapolación	?	?	B	B	B

Fuente: (Pimentel, 2013, pp. 6-7).

Donde:

A: Aplicable

NA: No aplicable

AL: Aplicación limitada

?: Cuestionable

B: Bueno

De acuerdo al tipo de proceso se pueden recomendar paquetes termodinámicos, como lo muestra la siguiente tabla:

**Tabla 4-2:** Paquetes básicos recomendados en función del tipo de proceso

TIPO DE PROCESO	PAQUETE TERMODINÁMICO RECOMENDADO
Deshidratación de TEG	PR
Acuoso ácido	Sour PR
Procesamiento de gas criogénico	PR, PRSV
Separación de aire	PR, PRSV
Torres atmosféricas de crudo	PR y sus variantes, Grayson Streed (GS)
Torres a vacío	PR y sus variantes, GS, Braun K10, Esso
Torres de etileno	Lee Kesler Plocker
Sistemas con alto contenido de H <sub>2</sub>	PR, Zudkevitch-Joffee (ZJ), GS
Reservorios	PR y sus variantes
Sistemas de vapor	ASME Steam, Chao Seader, GS
Inhibición de hidratos	PR
Productos químicos	Modelos de actividad, PRSV



Alquilación de HF	PRSV, NRTL
Hidrocarburos-agua (alta solubilidad del agua en HC)	Kabadi Danner
Separaciones de hidrocarburos Aromáticos	PR, SRK Wilson, NRTL, UNIQUAC
Hidrocarburos sustituidos (cloruro de vinilo, acrilonitrilo)	PR, SRK
Producción de éter (MTBE, ETBE, ter-amil metil éter TAME)	Wilson, NRTL, UNIQUAC
Plantas de etilbenceno / estireno	PR, SRK o Wilson, NRTL, UNIQUAC (según la tecnología de producción)
Producción de ácido tereftálico	Wilson, NRTL, UNIQUAC
Planta de amoníaco	PR, SRK

Fuente: (Pimentel, 2013, pp. 6–7).

### 2.3. Marco legal

El Estado debe garantizar un marco legal que regula las actividades de los biocombustibles, es así que se detallan a continuación los instrumentos políticos y normativos vigentes más relevantes.

#### 2.3.1. Constitución de la República del Ecuador establecida en 2008

El artículo 14 establece como principio fundamental que “el Estado reconoce el derecho de la población a vivir en un ambiente sano y ecológicamente equilibrado, que garantice la sostenibilidad y el buen vivir, *sumak kawsay*” («Constitución de la República del Ecuador» 2008, pp. 14).

En su Artículo 313 cita que el Estado administrará, regulará, controlará y gestionará los sectores estratégicos, los cuales se caracterizan por su relevancia social, política, económica; siguiendo políticas de sostenibilidad ambiental y prevención. “Se considera sector estratégico a la energía en todas sus formas” («Constitución de la República del Ecuador» 2008, pp. 145).

El Artículo 396 dictamina que, en casos de certidumbre de daños o dudas respecto a los impactos ambientales incluso sin evidencia de daño, el Estado ha de garantizar la aplicación de medidas protectoras oportunas para la reducción de impactos ambientales negativos («Constitución de la República del Ecuador» 2008, pp. 188).

En el Artículo 413 se dispone que el Estado se encargará de promover el uso de tecnologías limpias y energías renovables garantizando la eficiencia energética sin afectar la soberanía

alimentaria, el derecho al agua o el equilibrio ecológico de los ecosistemas («Constitución de la República del Ecuador» 2008).

El Artículo 414 decreta que el Estado debe adoptar medidas que ayuden a combatir el cambio climático, reduciendo las emisiones de gases de efecto invernadero, así como también la deforestación y la contaminación atmosférica, promoviendo así la conservación de bosques y vegetación; y protegiendo a los grupos más vulnerables de la población («Constitución de la República del Ecuador» 2008).

### **2.3.2. *Plan Nacional para el Buen Vivir (2017-2021)***

En su Objetivo 3 asegura el cumplimiento de los derechos tanto de la naturaleza como de las futuras generaciones promoviendo el cambio de la matriz energética para reducir las emisiones contaminantes y conservar el patrimonio natural. Además, se garantizan incentivos a al sector privado y asociativo que investigue el empleo de energías renovables y no convencionales («Plan Nacional para el Buen Vivir» 2017, pp. 45).

La Política 5.7 del PNBV cita: “Fomentar la producción nacional con responsabilidad social y ambiental, promoviendo el manejo eficiente de los recursos naturales y el uso de tecnologías duraderas y ambientalmente limpias, para garantizar el abastecimiento de bienes y servicios de calidad” («Plan Nacional para el Buen Vivir» 2017, pp. 60).

### **2.3.3. *Ley de Gestión Ambiental en el Ecuador***

Expedida el 10 de septiembre de 2004, es el documento legal más importante para la protección del ambiente ecuatoriano dado que orienta las acciones de la población en relación a la conservación y restauración del equilibrio ecológico, así como la mitigación de la contaminación y daños al ambiente, obteniendo beneficios económicos («Ley de Gestión Ambiental, Codificación 19» 2004, pp. 1–10).

De igual manera dictamina estrategias generales y específicas para promover la gestión ambiental tales como licencias ambientales, procedimientos y normas para identificar, evaluar y prevenir impactos ambientales («Ley de Gestión Ambiental, Codificación 19» 2004, pp. 1–10).

### **2.3.4. *Código Orgánico de la Producción, Comercio e Inversiones***

Generado para todas las actividades productivas que se desarrollen en el país, es decir todos aquellos bienes y servicios lícitos socialmente necesarios y ambientalmente sustentables («Código Orgánico de la Producción, Comercio e Inversiones» 2018, pp. 1–92).

En su Artículo 4, literal c textualmente establece: “Fomentar la producción nacional, comercio y consumo sustentable de bienes y servicios, con responsabilidad social y ambiental, así como su comercialización y uso de tecnologías ambientalmente limpias y de energías alternativas” («Código Orgánico de la Producción, Comercio e Inversiones» 2018, pp. 4).

Los Artículos 234 y 236 disponen que se deberán establecer medidas de producción más limpia y uso de fuentes de energía alternativa con el fin de prevenir y controlar la contaminación («Código Orgánico de la Producción, Comercio e Inversiones» 2018, pp. 70–71).

### **2.3.5. *Reglamento Ambiental de Operaciones Hidrocarburíferas***

El Reglamento ambiental de Operaciones Hidrocarburíferas (2020, pp. 2–48) en su Artículo 57 instituye las normas operacionales para la comercialización de mezclas de hidrocarburos.

### **2.3.6. *Decretos Ejecutivos***

El Decreto Ejecutivo 1215 (2001), Artículo 67, literal d, indica que se promoverá el empleo de aditivos oxigenados, que se obtengan de materia prima renovable («Decreto Ejecutivo 1215» 2001).

En el Decreto Ejecutivo 2332 (2004) se fijó el interés nacional en la producción de combustibles amigables con el ambiente (generados a partir de materias primas renovables), del mismo modo los biocombustibles generados gracias a la producción agrícola («Decreto Ejecutivo 1215» 2001).

En 2007 se creó el Consejo Nacional de Biocombustibles, el cual define políticas y programas de manejo, industrialización y comercialización de biocombustibles, sin embargo, en 2009, por Decreto Ejecutivo 1831 el presidente de la República dispuso su supresión destinando sus funciones al Ministerio de Coordinación de la Producción, Empleo y Competitividad («Decreto Ejecutivo 1831» 2009).

El Decreto Ejecutivo 1303 (2012) en su artículo 1 cita: “Declárese de interés nacional el desarrollo de biocombustibles en el país como medio para el impulso del fomento agrícola. La producción, el uso y el consumo de biocombustibles responderán a una estrategia inclusiva de desarrollo rural, precautelando la soberanía alimentaria y sostenibilidad ambiental”.

### **2.3.7. *Acuerdos Ministeriales***

Acuerdo Ministerial 00135 (2010) destinado a reglamentar las actividades de comercialización de biocombustibles con combustibles fósiles.

## CAPÍTULO III

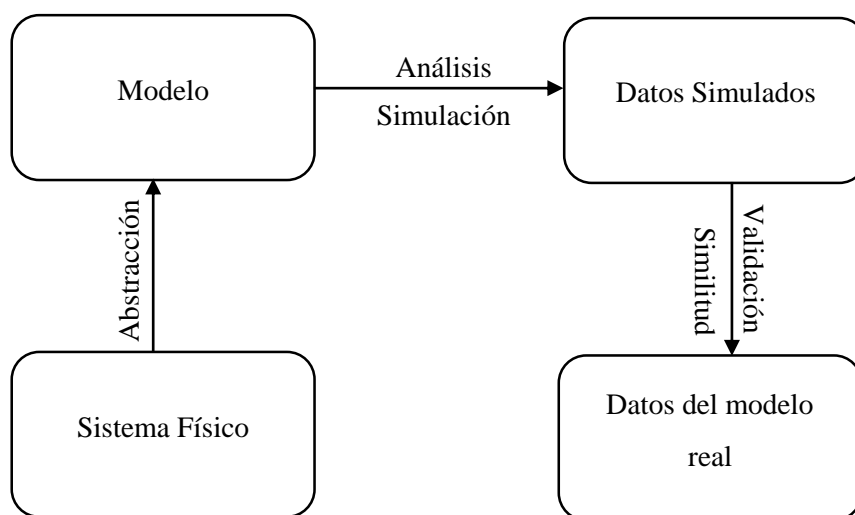
### 3. METODOLOGÍA

El presente trabajo de Integración Curricular es de carácter explicativo experimental debido a que se desarrolló a partir de datos recopilados en artículos que se han enfocado en el estudio de la síntesis de biodiesel a partir de aceites vegetales, y las condiciones necesarias para que se lleve a cabo este proceso, además de los parámetros computacionales que se han empleado para estudiar la simulación del proceso de obtención de FAEE.

El punto central de la investigación es replicar las condiciones operacionales (temperatura, presión, radio reflujo, relación alcohol/aceite) empleadas por Teixeira et al. (2015, pp. 796–798) para corroborar el rendimiento que se obtiene en la producción de biodiesel logrando estimar la factibilidad de recrear la planta en la vida real y compararlo con otros autores.

El desarrollo del presente trabajo se llevó a cabo por medio de los métodos de investigación cualitativo y cuantitativo. El enfoque cualitativo se refiere a las técnicas de investigación bibliográfica y estudios de casos, mientras que el enfoque cuantitativo se basa en la simulación (modelado). La simulación se efectuó mediante el uso de un software de simulación de procesos conocido como DWSIM, el cual es un software de interfaz libre.

La metodología empleada fue desarrollada a partir del trabajo realizado por Teixeira et. al (2015, pp. 796–798) donde se explica la simulación del proceso de obtención de biodiesel a partir de aceite de palma. El proceso se ejecutó por el método convencional con catalizador básico y etanol para llevar a cabo el proceso de transesterificación en el software DWSIM demostrando una producción sostenible con un alto rendimiento.



**Figura 1-3.** Pasos para desarrollar el proceso de modelación

Fuente: (Downey, 2014, pp. 80–81).

### 3.1. Descripción del proceso de simulación

#### 3.1.1. Definición de los componentes en el simulador

Esta simulación se basa en la obtención de biodiesel a partir de aceite de palma, el mismo que está formado por una mezcla de glicéridos (diglicéridos y triglicéridos). En este caso se tomó a la tripalmitina (PPP)<sup>2</sup> - triglicérido de los ácidos palmítico y mirístico debido a la complejidad de modelar correctamente el perfil completo del aceite. Este triglicérido (PPP) es el agente principal de la reacción de transesterificación, generando el Éster etílico del Ácido Palmítico (ETP). La tabla 1 muestra la composición del aceite de palma, aceite vegetal empleado para esta investigación.

**Tabla 1-3:** Composición típica del aceite de palma

ÁCIDO GRASO	COMPOSICIÓN PORCENTUAL	TRIGLICÉRIDO
Mirístico	1,0	TRIPALMITINA
Palmítico	42,8	
Esteárico	4,5	TRISTEARINA
Oleico	40,5	TRIOLEÍNA
Linoleico	10,1	
Linolénico	0,2	TRILINOLEÍNA
Láurico	0,1	

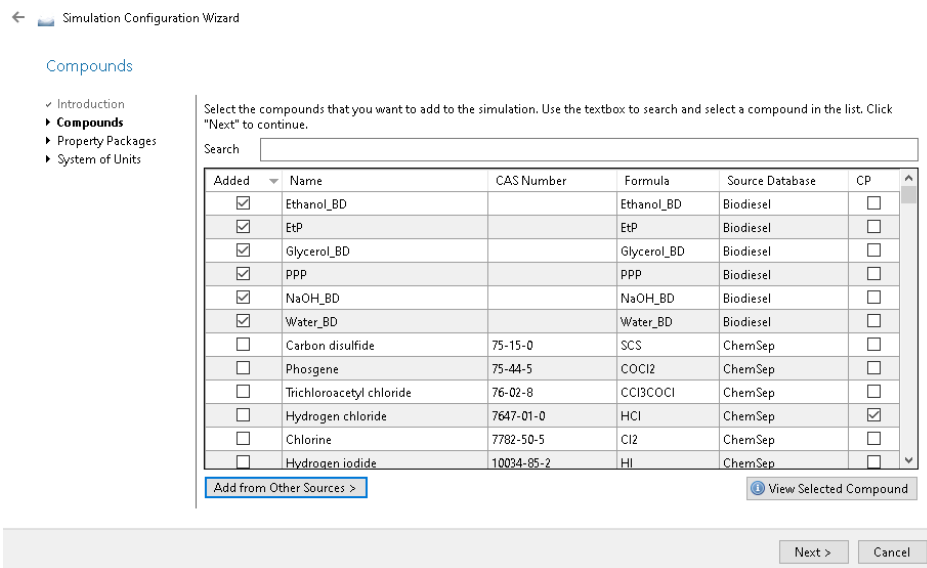
**Fuente:** (Ma and Hanna, 1999, pp. 8–9).

**Realizado por:** Herrera, Julisa, 2020.

Además, para alcanzar un buen rendimiento se empleó Hidróxido de Sodio (NaOH) para facilitar la reacción de transesterificación. Los productos de esta reacción son un monoéster de cadena larga (ETP) y glicerol. No obstante, también se emplea agua para lavar el biodiesel producido y obtener un producto más puro. Al conocer estos datos, se procede a ingresarlos en el simulador como se muestra en la Figura 2-3.

---

<sup>2</sup> “Triéster de glicerol y ácido palmítico”(Ash and Ash, 2018, pp. 864–865)

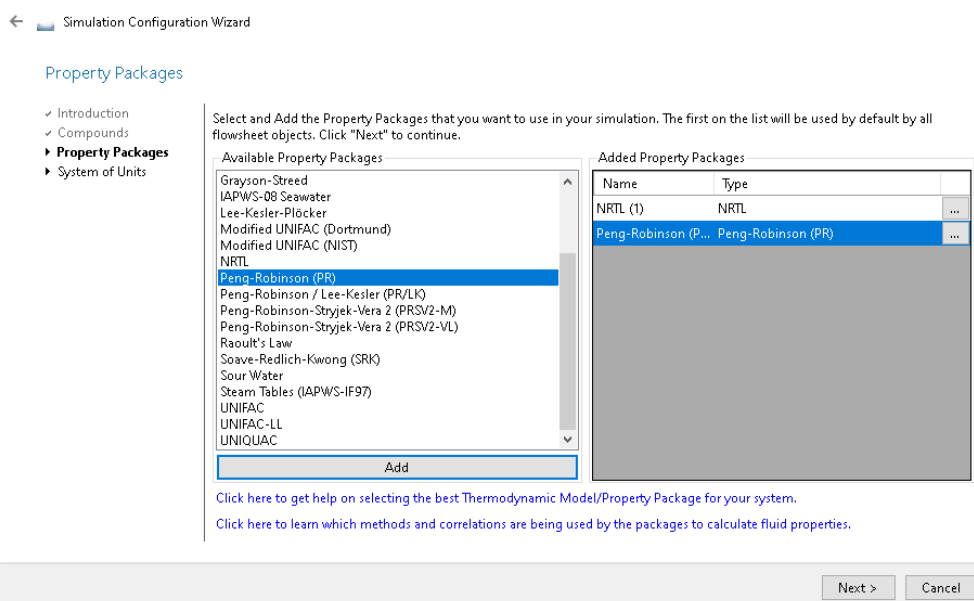


**Figura 2-3.** Definición de los componentes para la simulación

Fuente: DWSIM, 2020.

### 3.1.2. Selección de los modelos termodinámicos

Las especies químicas involucradas en este proceso nos llevan a emplear el modelo NRTL (non – random two-liquids) para calcular las propiedades de la fase líquida de la mezcla debido a la presencia de compuestos polares (glicerina y etanol), mientras que el modelo PR (Peng – Robinson) fue empleado para la fase vapor, de acuerdo a lo reportado en la literatura (Teixeira et al., 2015, pp. 796–797; Gebremariam and Marchetti, 2021, pp. 3–5; Souza et al., 2020, pp. 2–3).



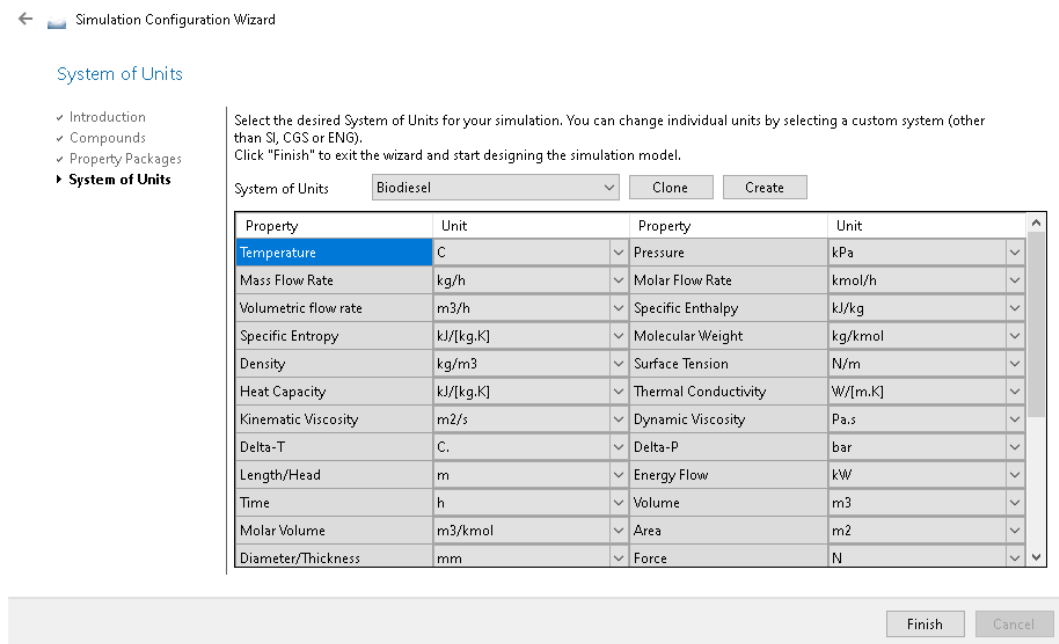
**Figura 3-3.** Definición de modelos termodinámicos

Fuente: DWSIM, 2020.

Los coeficientes de actividad de la modelación del proceso de obtención de biodiesel se estimaron con el modelo termodinámico UNIFAC.

### 3.1.3. Sistema de unidades

Posteriormente se elige, o se crea el conjunto de unidades requeridas para la simulación. Figura 4-3.



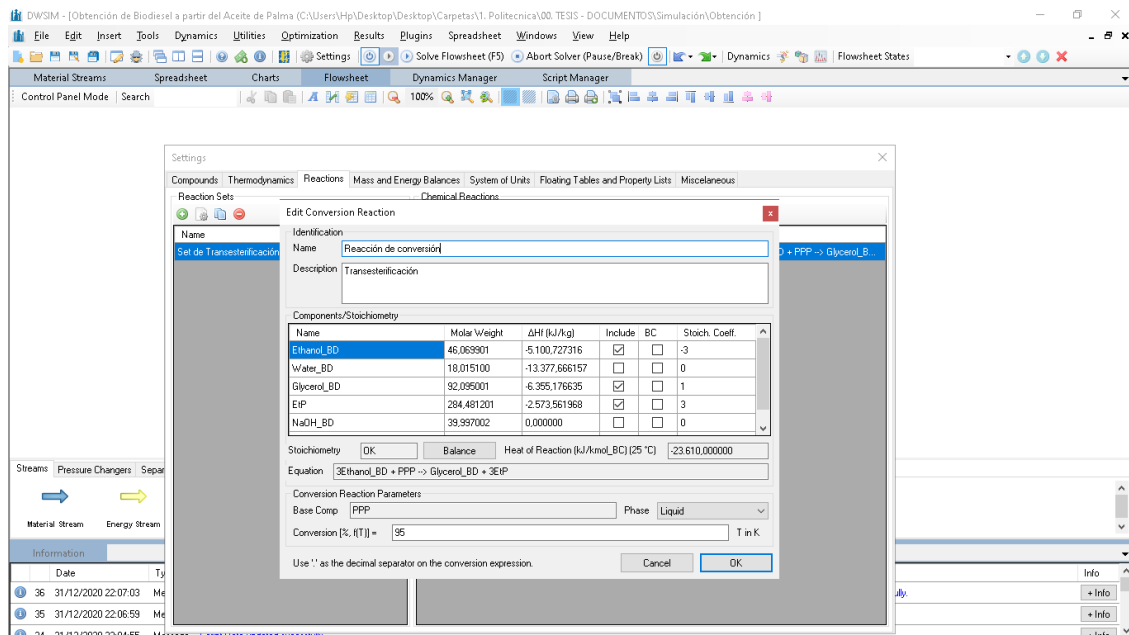
**Figura 4-3.** Sistema de unidades empleado para la simulación

Fuente: DWSIM, 2020.

### 3.1.4. Definición de la reacción de transesterificación y condiciones operacionales

Es importante conocer las reacciones químicas que ocurren en el proceso, en este caso solo se tiene la reacción de transesterificación, la misma que se agrega en la sección de configuración en la pestaña reacciones (Figura 5-3). Es importante respetar la estequiometría de la reacción para lograr el desarrollo de la simulación.

La información detallada de la reacción de transesterificación para la tripalmitina, así como las condiciones de operación para los equipos más relevantes se tomaron de Teixeira et. al (2015, pp. 796–798).



**Figura 5-3.** Definición de la reacción de transesterificación

**Fuente:** DWSIM, 2020.

La operación de la planta de producción parte de la conversión de 1 kg/h de Tripalmitina (para efectos de comparación) el mismo que ingresa a temperatura ambiente, junto con una corriente de etanol tanto reciclado como nuevo, e Hidróxido de Sodio (NaOH) como catalizador.

### 3.1.5. Modelo de simulación

El modelamiento del proceso de obtención de biodiesel a partir de aceite de palma se llevó a cabo en el simulador de código abierto DWSIM de acuerdo a la experimentación desarrollada por Teixeira, Emmi y Castro (2015, pp. 797–798).

Para iniciar el procedimiento se parte de la corriente de alcohol (Etanol) mezclada con la corriente de catalizador (NaOH). Posteriormente esta corriente se mezcla con la corriente de Tripalmitina (Aceite de Palma) para seguidamente ser bombeada al reactor, donde ocurre la conversión de triglicéridos en ésteres simples.

Ésta nueva corriente llega a una Columna de destilación donde se recupera una proporción del alcohol (EtOH Reciclado) el cual se enfría a través del COOL - 000 y se reintegra al proceso a través de un mezclador (MIX - 002) con alcohol virgen (EtOH). Por otro lado, los fondos (Biodiesel + Impurezas) de la columna de destilación pasan a una columna de absorción (Extractor Líquido-Líquido) para purificar el biodiesel a obtener (FONDOS), esta corriente posteriormente pasa por un separador para liberar el agua presente y finalmente obtener BIODIESEL PURIFICADO.



La reacción de transesterificación ocurre a una presión de 101,325 KPa y utiliza un 10 % en peso de catalizador (NaOH) respecto al aceite de palma.

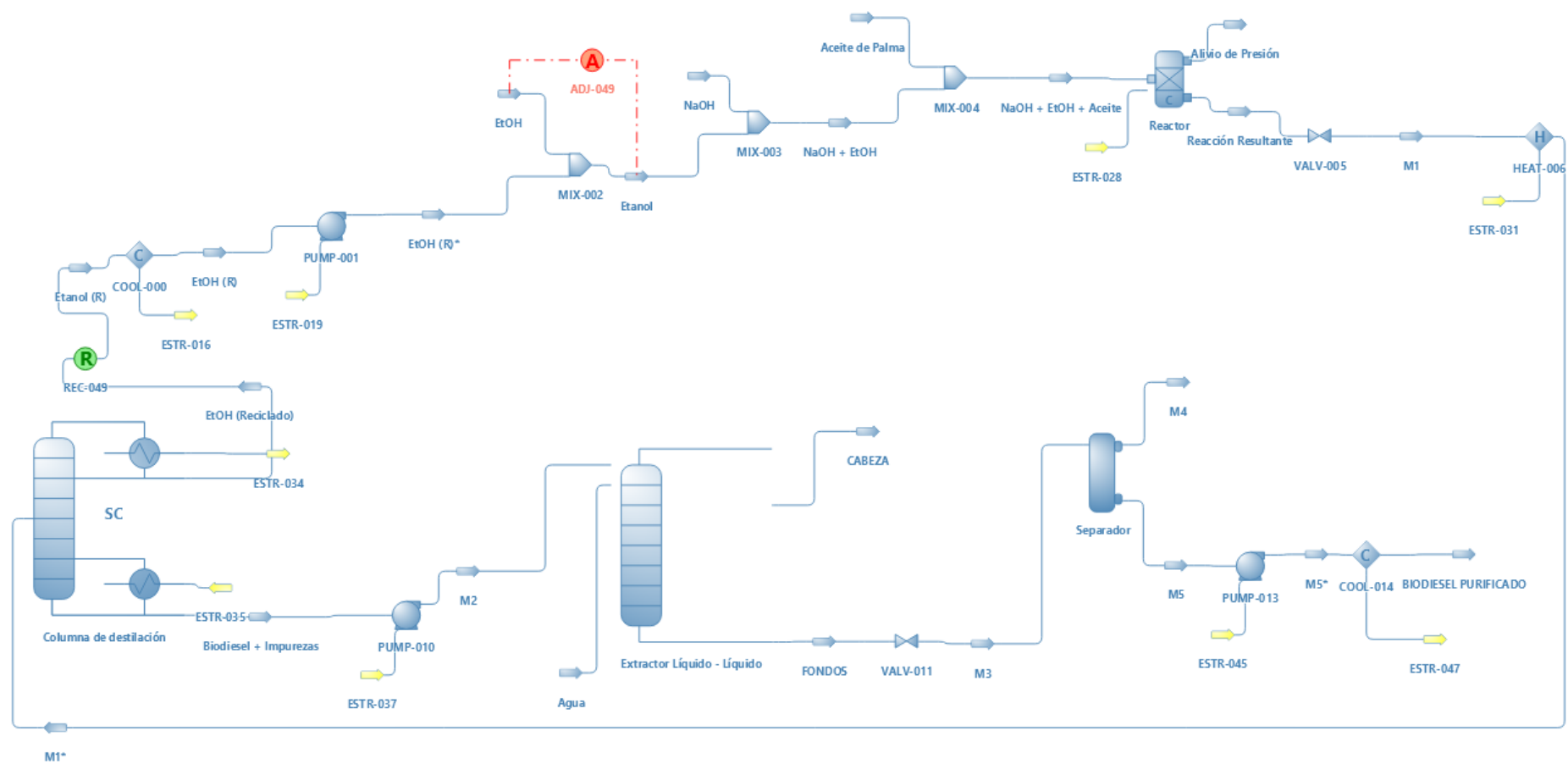
La relación molar aceite: etanol se obtuvo de la recopilación bibliográfica, siendo esta 1:6, conociendo que la estequiometría de la reacción requiere de 3 moléculas de alcohol por cada molécula de ácido graso para generar 3 moléculas de ésteres libres y una molécula de glicerol.

La columna de destilación se empleó para recuperar el etanol, mientras que la columna de absorción se usó para separar el biodiesel producido de la glicerina. La temperatura de ebullición del etanol (78,4 °C a 1 atm) es menor que la temperatura de ebullición de éster metílico de ácido graso (320 °C a 1 atm) y también es menor que la de la de la glicerina (300 °C a 1 atm), esta gran diferencia entre los puntos de ebullición facilita la separación de componentes por medio de la destilación, la cual requiere menos de doce platos teóricos para generar FAEE de alta pureza (superior a 90 % en peso). La extracción líquido-líquido permitió la separación de agua, glicerol, etanol y catalizador del biodiesel generado.

## **3.2. Resultados**

### **3.2.1. *Proceso de modelado***

El gráfico 1-3 muestra el proceso modelado. Como se mencionó con anterioridad, el proceso se diseñó al recrear las condiciones operacionales empleadas por Teixeira et. al (2015, pp. 796–798). Es así que el proceso inicia con una mezcla aceite: etanol que tiene una relación molar 6:1, la cual ingresa a un reactor de conversión en conjunto con un 1% en masa de catalizador (NaOH) respecto al aceite, la mezcla ingresa a 62,29 ° C a presión atmosférica y se convierte en EtP y glicerol.



**Gráfico 1-3.** Diagrama del proceso de generación de biodiesel elaborado en DWSIM

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

### 3.2.2. *Reactor de conversión*

El proceso de transesterificación del aceite de palma ocurre dentro de un reactor en presencia de etanol, empleando una relación molar 6:1, la cual permite un rendimiento entre el 75 y 80% de FAEE según Martínez et. al (2006, pp. 2–3).

Las condiciones operacionales de entrada al reactor que se emplearon en el modelado de la planta de producción de biodiesel, así como las fracciones másicas de las corrientes de entrada y salida para una conversión del 95% de aceite de PPP en EtP se encuentran en la tabla 2-3 y los porcentajes de conversión obtenidos en la reacción se muestran en la tabla 3-3.

*Object: Reactor*

Energy Stream: ESTR-028

Heat Flow: 0 kW

*Material Stream: Aceite de Palma*

Calculation results for Material Stream Aceite de Palma

Compounds: (PPP)

Specification: Temperature and Pressure (TP)

- Temperature: 60 °C
- Pressure: 101,325 kPa
- Property Package: NRTL

*Material Stream: NaOH + EtOH*

Calculation results for Material Stream NaOH + EtOH

Compounds: (Ethanol\_BD, Glycerol\_BD, EtP, NaOH\_BD)

- Temperature: 24,14 °C
- Pressure: 101,325 kPa
- Property Package: NRTL

*Material Stream: Mezcla Resultante*

Calculation results for Material Stream Aceite de Palma

Compounds: (Ethanol\_BD, Glycerol\_BD, EtP, NaOH\_BD, PPP)

- Temperature: 83,726 °C
- Pressure: 101,325 kPa
- Property Package: NRTL

**Tabla 2-3:** Condiciones operacionales y composiciones de las corrientes de Entrada y Salida del Reactor de Conversión

	ENTRADA		SALIDA	
	Aceite de Palma	NaOH + EtOH	Mezcla Resultante	
Temperature	60,000000	24,140931	83,726257	C
Pressure	101,325000	101,325000	101,325000	kPa
Mass Flow	807,331604	284,508358	1091,839962	kg/h
Molar Flow	1,000000	6,201924	7,201941	kmol/h
Specific Enthalpy	-243,953411	-1043,766766	-431,823512	kJ/kg
Specific Entropy	-0,323184	-2,857203	-0,712085	kJ/ [kg. K]
<b>MASS FRACTION</b>				
Ethanol_BD	0,000000	0,971569	0,132914	
Water_BD	0,000000	0,000000	0,000000	
Glycerol_BD	0,000000	0,000032	0,080139	
EtP	0,000000	0,000031	0,742583	
NaOH_BD	0,000000	0,028369	0,007392	
PPP	1,000000	0,000000	0,036971	
<b>MOLAR FRACTION</b>				
Ethanol_BD	0,000000	0,967442	0,437383	
Water_BD	0,000000	0,000000	0,000000	
Glycerol_BD	0,000000	0,000016	0,131923	
EtP	0,000000	0,000005	0,395732	
NaOH_BD	0,000000	0,032538	0,028020	
PPP	1,000000	0,000000	0,006943	

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

**Tabla 3-3:** Rendimiento obtenido

COMPONENTE	% CONVERSIÓN
Ethanol_BD	47,499878
PPP	94,999988

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

La mezcla resultante de la reacción de transesterificación que sale del reactor reduce su presión en la válvula VALV-000 hasta 30 Psi y luego se envía a la columna de destilación donde se recupera el alcohol no reaccionante por la cabeza, mientras que por el fondo se separan los productos obtenidos del reactor. Para que la simulación funcione correctamente se emplea el modelo termodinámico Peng Robinson, no obstante, se observan diferencias en la temperatura de salida respecto a los resultados obtenidos por Teixeira et al. (2015, pp. 800–802), lo cual se debe al

paquete termodinámico empleado para calcular el factor acéntrico de los componentes y las versiones de DWSIM empleadas, afectando así a la composición final de la corriente del biodiesel.

### 3.2.3. *Columna de destilación*

Una vez que la corriente M1\* ingresa a la columna de destilación ocurre la separación de etanol y productos de la reacción de transesterificación por diferencia de peso y volatilidad gracias a la presión y temperatura a la que opera la columna. La tabla 4-3 muestra las condiciones operacionales y las composiciones de las corrientes de la columna de destilación.

*Object: Columna de destilación*

Minimum Reflux Ratio: 9,000142	Stripping Vapor:34,607031
Minimum Number of Stages: 2	Rectify Vapor: 34,607027
Actual Number of Stages: 5	Energy Stream: ESTR-034
Optimal Feed Stage: 2	Heat Flow: 403,500 kW
Stripping Liquid: 38,662874	Energy Stream: ESTR-035
Rectify Liquid: 31,460933	Heat Flow: 513,722 kW

*Material Stream: M1\**

Calculation results for Material Stream M1

Compounds: (Ethanol\_BD, Glycerol\_BD, EtP, NaOH\_BD, PPP)

Specification: Temperature and Pressure (TP)

- Temperature: 44,67 °C
- Pressure: 30 kPa
- Property Package: NRTL

*Material Stream: EtOH (Reciclado)*

Calculation results for Material Stream EtOH (Reciclado)

Compounds: (Ethanol\_BD, Glycerol\_BD, EtP)

- Temperature: 50,324 °C
- Pressure: 30 kPa
- Property Package: Peng Robinson

*Material Stream: Biodiesel + Impurezas*

Calculation results for Material Stream Biodiesel + Impurezas

Compounds: (Glycerol\_BD, EtP, NaOH\_BD, PPP)

- Temperature: 201,881 °C
- Pressure: 30 kPa

- Property Package: NRTL

**Tabla 4-3:** Condiciones de operación de las corrientes de entrada y salida de la columna de destilación

<b>DESTILADO</b>				
<b>Object</b>	<b>M1*</b>	<b>EtOH (Reciclado)</b>	<b>Biodiesel + Impurezas</b>	<b>Units</b>
Temperature	44,670000	50,323899	201,881328	C
Pressure	30,000000	30,000000	30,000000	kPa
Mass Flow	1091,83996 2	144,952599	946,887175	kg/h
Molar Flow	7,201941	3,146093	4,055843	kmol/h
Specific Enthalpy	-499,441993	19,699301	-159,857586	kJ/kg
Specific Entropy	-0,912447	0,284881	-0,049233	kJ/ [kg. K]
<b>MASS FRACTION</b>				
Ethanol_BD	0,132914	0,999868	0,000197	
Water_BD	0,000000	0,000000	0,000000	
Glycerol_BD	0,080139	0,000070	0,092397	
EtP	0,742583	0,000062	0,856251	
NaOH_BD	0,007392	0,000000	0,008524	
PPP	0,036971	0,000000	0,042631	
<b>MOLAR FRACTION</b>				
Ethanol_BD	0,437383	0,999954	0,001000	
Water_BD	0,000000	0,000000	0,000000	
Glycerol_BD	0,131923	0,000035	0,234227	
EtP	0,395732	0,000010	0,702691	
NaOH_BD	0,028020	0,000000	0,049754	
PPP	0,006943	0,000000	0,012328	

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

$$\text{Recuperación de etanol} = \frac{\text{Etanol reciclado}}{\text{Etanol que ingresa a la columna de destilación}} * 100 \quad \mathbf{1-3}$$

$$\text{Recuperación de etanol} = \frac{\text{EtOH (Reciclado)} * x_{\text{EtOH}}}{M1 * x_{\text{EtOH}}} * 100 \quad \mathbf{2-3}$$

$$\text{Recuperación de etanol} = \frac{144,933465}{145,120817} * 100$$

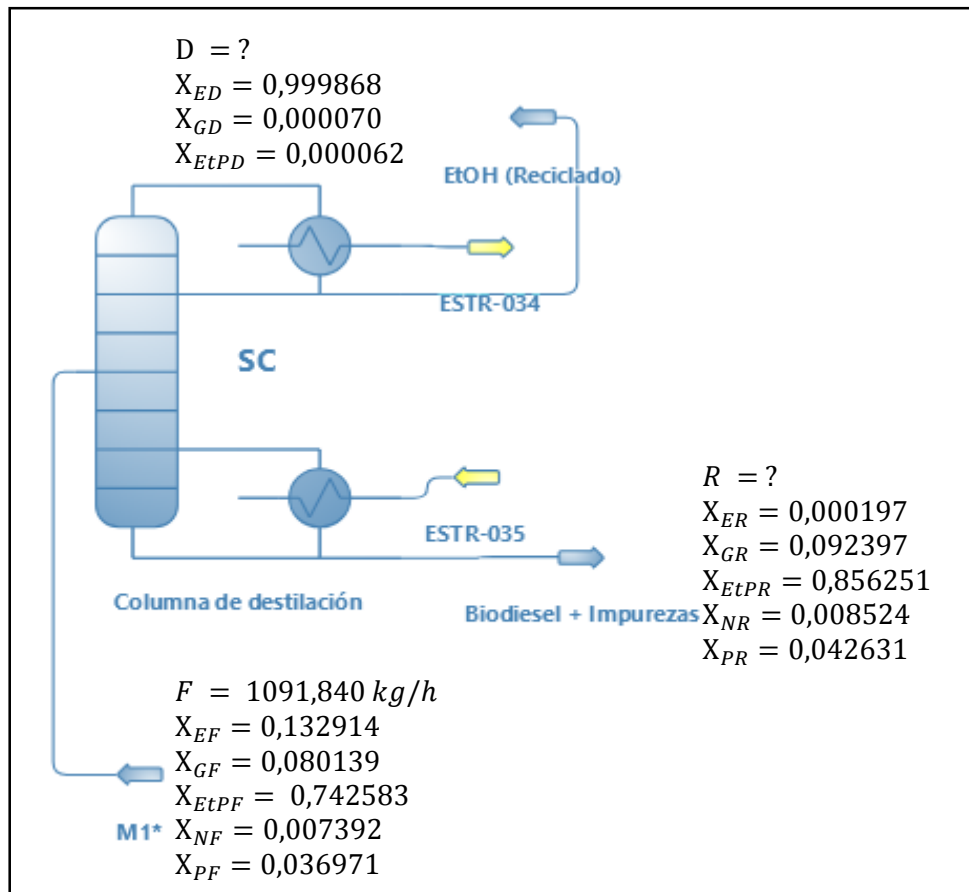
$$\text{Recuperación de etanol} = 99,87 \%$$

### 3.2.3.1. Balance de masa en el sistema de destilación

**Tabla 5-3:** Composición másica de las corrientes de la columna de destilación

Denominación	Parámetro	Valor	Unidades
<b>ALIMENTACIÓN - M1*</b>			
F	Flujo másico de la alimentación.	1091,839962	kg/h
$X_{EF}$	Fracción másica de etanol en la alimentación.	0,132914	
$X_{GF}$	Fracción másica de glicerol en la alimentación.	0,080139	
$X_{EtPF}$	Fracción másica de EtP en la alimentación.	0,742583	
$X_{NF}$	Fracción másica de NaOH en la alimentación.	0,007392	
$X_{PF}$	Fracción másica de PPP en la alimentación.	0,036971	
<b>DESTILADO - EtOH (Reciclado)</b>			
$X_{ED}$	Fracción másica de etanol en el destilado.	0,999868	
$X_{GD}$	Fracción másica de glicerol en el destilado.	0,000070	
$X_{EtPD}$	Fracción másica de EtP en el destilado.	0,000062	
<b>RESIDUOS - Biodiesel + Impurezas</b>			
$X_{ER}$	Fracción másica del etanol en el residuo.	0,000197	
$X_{GR}$	Fracción másica de glicerol en el residuo.	0,092397	
$X_{EtPR}$	Fracción másica de EtP en la el residuo.	0,856251	
$X_{NR}$	Fracción másica de NaOH en el residuo	0,008524	
$X_{PR}$	Fracción másica de PPP en el residuo.	0,042631	

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.



**Figura 6-3.** Condiciones de la torre de destilación

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

*Balance global de materia*

$$F = D + R$$

3-3

Donde:

F = Flujo de la corriente de alimentación

D = Flujo de la corriente de destilado

R = Flujo de la corriente de residuo

*Flujo de alimentación*

$$\dot{F} = 1091,840 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

4-3

Donde:

$\dot{F}$  = Flujo másico de alimentación (kg/h)



*Balance por componentes (PPP)*

5-3

$$\dot{F} * X_{PF} = \dot{D} * X_{PD} + \dot{R} * X_{PR}$$

Donde:

$\dot{D}$  = Flujo másico del destilado (kg/h)

$\dot{R}$  = Flujo másico del residuo (kg/h)

$X_{PD}$  = Fracción másica del PPP en el destilado

$X_{PR}$  = Fracción másica del PPP en el residuo

Reemplazando datos en la ecuación 5

$$1091,840 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * 0,036971 = \dot{D} * 0,0 + \dot{R} * 0,042631$$

$$40,366415 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \dot{D} * 0,0 + \dot{R} * 0,042631$$

$$\dot{R} = \frac{40,366415 \text{ kg}}{0,042631 \text{ h}}$$

$$\dot{R} = 946,879 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

*Balance por componentes (ETANOL)*

6-3

$$\dot{F} * X_{EF} = \dot{D} * X_{ED} + \dot{R} * X_{ER}$$

Donde:

$\dot{D}$  = Flujo másico del destilado (kg/h)

$\dot{R}$  = Flujo másico del residuo (kg/h)

$X_{ED}$  = Fracción másica del etanol en el destilado

$X_{ER}$  = Fracción másica del etanol en el residuo

Reemplazando datos en la ecuación 6

$$1091,840 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * 0,132914 = \dot{D} * 0,999868 + 946,879 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * 0,000197$$

$$145,120817 \frac{\text{kg}}{\text{h}} = \dot{D} * 0,999868 + 0,186535 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

$$\dot{D} = \frac{(145,120817 - 0,186535) \text{ kg}}{0,999868 \text{ h}}$$

$$\dot{D} = 144,953 \frac{\text{kg}}{\text{h}}$$

3.2.3.2. Balance de energía en el sistema de destilación

**Tabla 6-3:** Entalpía de las corrientes de la columna de destilación

Object	M1*	EtOH (Reciclado)	Biodiesel + Impurezas	
<b>Specific Enthalpy (Mixture)</b>	-499,441993	19,699301	-159,857586	kJ/kg

Realizado por: Herrera, Julisa, 2021.

**Tabla 7-3:** Entalpía de los dispositivos de la columna de destilación

	Reboiler	Condensador	
<b>Energy flow</b>	1849400,168400	1452601,076400	kJ/h

Realizado por: Herrera, Julisa, 2021.

*Balance global de energía*

7-7

$$\dot{F} * H_F + Qr = \dot{D} * H_D + \dot{R} * H_R + Qc$$

Donde:

$H_F$  = Entalpía de la corriente de alimentación

$H_D$  = Entalpía de la corriente de destilado

$H_R$  = Entalpía de la corriente de residuo

$Qr$  = Calor cedido por el reboiler

$Qc$  = Calor perdido en el condensador

Reemplazando datos en la ecuación 7

$$\begin{aligned}
 & 1091,840 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * \left( -499,441993 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}} \right) + Qr \\
 & = 144,953 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * \left( 19,699301 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}} \right) + 946,879 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * \left( -159,857586 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}} \right) \\
 & \quad + 1452601,076400 \frac{\text{kJ}}{\text{h}} \\
 Qr & = 2855,464898 \frac{\text{kJ}}{\text{h}} - 151367,102006 \frac{\text{kJ}}{\text{h}} + 1452601,076400 \frac{\text{kJ}}{\text{h}} + 545310,745637 \frac{\text{kJ}}{\text{h}} \\
 Qr & = 1849400,184929 \frac{\text{kJ}}{\text{h}}
 \end{aligned}$$

### 3.2.4. Reincorporación de etanol al proceso

Una vez obtenida la corriente de destilado (EtOH (Reciclado)) de la columna, ésta pasa por un operador de recuperación, para que el flujo pueda ser reintegrado al proceso con la mayor pureza posible, como se muestra en la tabla 8-3.

**Tabla 8-3:** Corriente de etanol recuperado

<b>RECUPERACIÓN DE ETANOL</b>		
<b>Object</b>	<b>EtOH (Reciclado)</b>	<b>Etanol (R)</b>
Temperature	50,324	51,176 C
Pressure	30,000	30,000 kPa
Mass Flow	144,953	141,105 kg/h
Molar Flow	3,146	3,063 kmol/h
Specific Enthalpy (Mixture)	19,699301	19,082868 kJ/kg
Specific Entropy (Mixture)	0,284881	0,283516 kJ/ [kg. K]
<b>MASS FRACTION</b>		
Ethanol_BD	0,999868	0,999874
Water_BD	0,000000	0,000000
Glycerol_BD	0,000070	0,000064
EtP	0,000062	0,000062
NaOH_BD	0,000000	0,000000
PPP	0,000000	0,000000
<b>MOLAR FRACTION</b>		
Ethanol_BD	0,999954	0,999958
Water_BD	0,000000	0,000000
Glycerol_BD	0,000035	0,000032
EtP	0,000010	0,000010
NaOH_BD	0,000000	0,000000
PPP	0,000000	0,000000

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

### 3.2.5. Columna de extracción

Por otro lado, la corriente de fondo (Biodiesel + impurezas) de la columna de destilación se bombea hacia el extractor líquido-líquido donde ingresa a la par una corriente de agua que actúa como solvente para purificar el biodiesel obtenido al separarlo del glicerol que se ha generado

como producto secundario de la reacción, así como de las trazas de catalizador y alcohol no reaccionantes. Se empleo el método NRTL debido a las características de la corriente, además para que la columna opere correctamente se usa en modo “Extractor”, logrando así que actúe como extractor líquido-líquido.

*Object: Extractor Líquido - Líquido*

Actual Number of Stages: 11

*Material Stream: Agua*

Calculation results for Material Stream Agua

Compounds: (Water\_BD)

Specification: Temperature and Pressure (TP)

- Temperature: 60 °C
- Pressure: 101,325 kPa
- Mass Flow: 963,070 kg/h
- Property Package: NRTL

*Material Stream:M2*

Calculation results for Material Stream M2

Compounds: (Glycerol\_BD, EtP, NaOH\_BD, PPP)

- Temperature: 202,139 °C
- Pressure: 101,325 kPa
- Property Package: NRTL

*Material Stream: CABEZA*

Calculation results for Material Stream CABEZA

Compounds: (Ethanol\_BD, Water\_BD, Glycerol\_BD, EtP, NaOH\_BD, PPP)

- Temperature: 100, 218 °C
- Pressure: 101,325 kPa
- Property Package: NRTL

*Material Stream: FONDOS*

Calculation results for Material Stream FONDOS

Compounds: (Ethanol\_BD, Water\_BD, EtP, PPP)

- Temperature: 60,48 °C
- Pressure: 101,325 kPa

- Property Package: NRTL

**Tabla 9-3:** Condiciones de operación y composiciones másicas de las corrientes del extractor

<b>EXTRACTOR LÍQUIDO – LÍQUIDO</b>					
<b>Object</b>	<b>AGUA</b>	<b>M2</b>	<b>FONDOS</b>	<b>CABEZA</b>	
Temperature	60,000000	202,139334	60,484317	100,217638	C
Pressure	101,325000	101,325000	101,32500	101,325000	kPa
Mass Flow	963,070000	946,887175	819,387689	1090,556150	kg/h
Molar Flow	53,459041	4,055843	2,837249	54,677636	kmol/h
Specific Enthalpy	-2445,709448	-159,727145	-274,186670	-2092,470519	kJ/kg
Specific Entropy	-6,509480	-0,048912	-0,475070	-5,393296	kJ/ [kg. K]
<b>MASS FRACTION</b>					
Ethanol_BD	0,000000	0,045593	0,000064	0,000123	
Water_BD	1,000000	0,954129	0,000000	0,883102	
Glycerol_BD	0,000000	0,000000	0,000000	0,080215	
EtP	0,000000	0,000278	0,976350	0,009869	
NaOH_BD	0,000000	0,000000	0,000000	0,007400	
PPP	0,000000	0,000000	0,023586	0,019291	
<b>MOLAR FRACTION</b>					
Ethanol_BD	0,000000	0,001000	0,000401	0,000053	
Water_BD	1,000000	0,000000	0,000001	0,977716	
Glycerol_BD	0,000000	0,234227	0,000000	0,017372	
EtP	0,000000	0,702691	0,991161	0,000692	
NaOH_BD	0,000000	0,049754	0,000000	0,003690	
PPP	0,000000	0,012328	0,008437	0,000477	

**Realizado por:** Herrera, Julisa, 2020.

Con esta operación se logra satisfactoriamente separar el glicerol (CABEZA), y la corriente de FONDOS.

Posteriormente la corriente atraviesa por un separador (SEP – 000), para purificar la corriente de biodiesel obtenido, una vez atravesado este proceso la corriente rica en ésteres etílicos es enfriada para poder ser liberada del proceso. Cabe resaltar que la corriente de FONDOS resultante del extractor presenta una composición inferior al 0,2% en peso de alcohol, lo que evidencia que se cumplen las especificaciones dictadas por ASTM para este parámetro en el biodiesel.

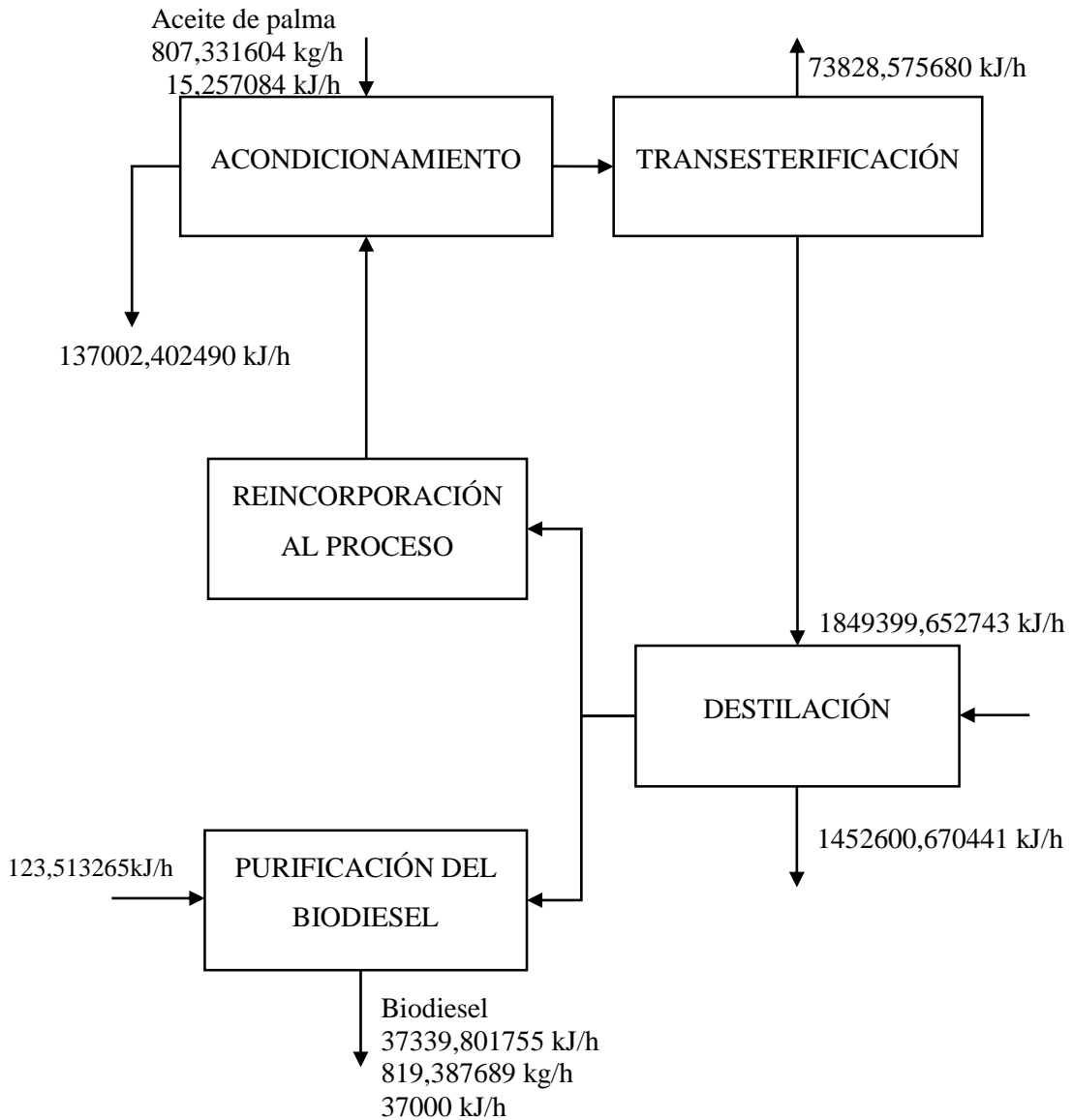
### 3.2.6. Energía consumida y producida durante la operación del proceso

El modelo de simulación para la síntesis de biodiesel se desarrolló gracias al empleo de equipos (reactor, intercambiadores de calor, columna de destilación, columna de absorción, separador y dispositivos (bombas, operadores lógicos) en donde la energía se consume y se libera para alcanzar los parámetros definidos para el proceso. En este apartado se pretende determinar la relación existente entre la energía fósil consumida necesaria para la producción de biodiesel y la energía producida. Para lo cual se tomó como valor referencial 37MJ/kg según las investigaciones de Damanik et al. (2017, pp. 4–5), Mishra y Goswami (2018, pp. 12–13), Sahar et al. (2018, pp. 224–225) como poder calorífico del biodiesel generado, no obstante, otros investigadores como Silva et al. (2007, pp. 76–77) Ajiwe et al. (2003, pp. 22–23) y Oliveira y da Silva (2013, pp. 75–76) han establecido valores entre 39 a 45 MJ/kg como poder calorífico para el biodiesel.

**Tabla 10-3:** Corrientes de energía del proceso de síntesis de biodiesel

OBJECT		Energy Flow		
		Energía Consumida	Energía Liberada	
<b>COOL-014</b>	ESTR-047	-	37.339,801755	kJ/h
<b>PUMP-013</b>	ESTR-045	-	-	kJ/h
<b>PUMP-010</b>	ESTR-037	123,513265	-	kJ/h
<b>Reboiler</b>	ESTR-035	1.849.399,652743	-	kJ/h
<b>Condensador</b>	ESTR-034	-	1.452.600,670441	kJ/h
<b>HEAT-006</b>	ESTR-031	-	73.828,575680	kJ/h
<b>Reactor</b>	ESTR-028	-	-	kJ/h
<b>PUMP-001</b>	ESTR-019	15,257084	-	kJ/h
<b>COOL-000</b>	ESTR-016	-	137.002,402490	kJ/h

Realizado por: Herrera, Julisa, 2021.



**Gráfico 2-3.** Diagrama de energía para el proceso de síntesis de biodiesel

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

Estimando el poder calorífico del biodiesel generado:

$$819,387,689 \frac{\text{kg}}{\text{h}} * 37,000 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}} = 173,777,145,036,6 \text{ kJ/h}$$

A partir del cálculo se puede afirmar que el poder calorífico del biodiesel sintetizado supera en gran medida a la energía que se consume para su producción, más aún no se han tomado en cuenta los consumos energéticos en el cultivo de la palma y su transporte.

Como se puede apreciar en el gráfico 2-3 es necesario un consumo energético en los procesos de acondicionamiento (15,257,084 kJ/h), destilación (184,939,652,743 kJ/h) y purificación del biodiesel generado (29,5006 kJ/h) calculando un total de 184,953,423,092 kJ/h, a la par se libera

energía en forma de calor durante el desarrollo del proceso que puede ser recuperada a la cual se suma el valor calorífico del biodiesel generado, sumando un total de 1737771,450366 kJ/h.

$$\frac{15,257084 + 1849.399,652743 + 123,513265}{137002,402490 + 73828,575680 + 1452600,670441 + 37339,801755} = 1,087470$$

El cálculo desarrollado muestra que la energía consumida supera en un 8,74% a la energía liberada, no obstante, el valor reportado no incluye el poder calorífico del biodiesel.

**Tabla 11-3:** Resumen de las condiciones de operación de las principales corrientes modeladas

CONDICIONES FINALES DE OPERACIÓN								
Object	Aceite de Palma	Etanol	NaOH	Reacción Resultante	EtOH (Reciclado)	Biodiesel + Impurezas	BIOD. PURIFIC.	
Temp.	60,0000	25,0109	25,0000	83,7263	50,3239	201,8813	25,0000	C
Pressure	101,3250	101,3250	101,3250	101,3250	30,0000	30,0000	101,3250	kPa
Mass Flow	807,3316	276,4372	8,0712	1091,8400	144,9526	946,8872	819,3877	kg/h
Molar Flow	1,0000	6,0001	0,2018	7,2019	3,1461	4,0558	2,8372	kmol /h
Energy Flow	-54,7087	-73,0850	-9,4040	-130,9673	0,7932	-42,0464	-72,7792	kW

Realizado por: Herrera, Julisa, 2021.

### 3.2.7. Validación del modelo

Para la validación del modelo, se trabajó con datos obtenidos de los experimentos desarrollados por Teixeira et al. Por esta razón fue necesario un análisis de las condiciones empleadas en las distintas etapas del proceso, así como también de los modelos termodinámicos empleados y sus correspondientes parámetros de interacción entre componentes.

Las líneas principales de flujos y composiciones establecidas en bibliografía son los datos tomados en cuenta para validar el modelo comparando los resultados obtenidos en la simulación gracias a la fórmula del error porcentual.

$$E(\%) = \text{abs} \left( \frac{\text{Valor referencial} - \text{Valor experimental}}{\text{Valor referencial}} \right) \quad \mathbf{8-3}$$

Donde:

Valor referencial = Valor referencial de Bibliografía

Valor experimental = Valor obtenido en el modelo de simulación desarrollado



**Tabla 12-3:** Validación de resultados de las líneas de flujo

CORRIENTE	VALOR		% ERROR
	REFERENCIAL	EXPERIMENTAL	
<b>Aceite de Palma</b>	807,300	807,300	0,0000
<b>EtOH + NaOH</b>	284,500	284,500	0,0000
<b>M1*</b>	1091,820	1091,840	1,83E-05
<b>M2</b>	982,680	946,880	0,0364
<b>CABEZA</b>	1064,000	1090,550	0,0250
<b>FONDOS</b>	901,100	819,387	0,0906
<b>BIODIESEL PURIFICADO</b>	823,860	819,380	0,0054

Realizado por: Herrera, Julisa, 2021.

**Tabla 13-3:** Validación de Resultados de las composiciones másicas de las corrientes

CORRIENTE	COMPONENTE	VALOR		% ERROR
		REFERENCIAL	EXPERIMENTAL	
<b>Aceite</b>	Etanol	0,0000	0,0000	0,0000
	Glicerol	0,0000	0,0000	0,0000
	NaOH	0,0000	0,0000	0,0000
	EtP	0,0000	0,0000	0,0000
	PPP	1,0000	1,0000	0,0000
<b>EtOH + NaOH</b>	Etanol	0,9716	0,9716	0,0000
	Glicerol	0,0000	0,0000	0,0000
	NaOH	0,0284	0,0284	0,0000
	EtP	0,0000	0,0000	0,0000
	PPP	0,0000	0,0000	0,0000
<b>M1*</b>	Etanol	0,1329	0,1329	0,0000
	Glicerol	0,0801	0,0801	0,0000
	NaOH	0,0074	0,0074	0,0000
	EtP	0,7426	0,7426	0,0000
	PPP	0,0369	0,0369	0,0000
<b>M2*</b>	Etanol	0,0366	0,0001	0,9973
	Glicerol	0,0890	0,0924	0,0382
	NaOH	0,0000	0,0085	0,0000
	EtP	0,8251	0,8562	0,0377
	PPP	0,0411	0,0426	0,0365

<b>CABEZA</b>	Etanol	0,0409	0,0001	0,9976
	Glicerol	0,0994	0,0802	0,1932
	H <sub>2</sub> O	0,8376	0,8831	0,0543
	NaOH	0,0092	0,0074	0,1957
	EtP	0,0003	0,0099	32,0000*
	PPP	0,0127	0,0193	0,5197
<b>FONDOS</b>	Etanol	0,0000	0,0001	0,0000
	Glicerol	0,0000	0,0000	0,0000
	H <sub>2</sub> O	0,2263	0,0000	1,0000*
	NaOH	0,0000	0,0000	0,0000
	EtP	0,7468	0,9763	0,3073
	PPP	0,0269	0,0236	0,1227
<b>BIODIESEL PURIFICADO</b>	Etanol	0,0000	0,0001	0,0000
	Glicerol	0,0000	0,0000	0,0000
	H <sub>2</sub> O	0,0003	0,0000	1,0000*
	NaOH	0,0000	0,0000	0,0000
	EtP	0,9642	0,9764	0,0127
	PPP	0,0355	0,0236	0,3352

\* Los elevados valores de error porcentual se deben a que las fracciones másicas de los componentes son ínfimas.

Realizado por: Herrera, Julisa, 2021.

### 3.2.7.1. Calidad del biodiesel producido

La viscosidad del biodiesel obtenido se puede ver en la tabla 14-3 para 15 °C, así como también la viscosidad cinemática a 40°C mediante el modelo desarrollado. Esta propiedad fue definida mediante el modelo termodinámico NRTL para la corriente final de la simulación. Además, en la tabla 15-3 se puede observar los mismos parámetros definidos en la bibliografía, así como también el rango establecido por las normas ASTM D6751 y EN14214.

**Tabla 14-3:** Resultados de densidad y viscosidad para el biodiesel sintetizado

<b>Densidad (15 °C)</b>	863,615	Kg/m <sup>3</sup>
<b>Viscosidad cinemática (40 °C)</b>	1,000	cSt

Realizado por: Herrera, Julisa, 2021.

**Tabla 15-3:** Resultados de densidad y viscosidad reportados en la literatura

	<b>Dey et. al</b>	<b>ASTM D6751</b>	<b>EN 14214</b>	
<b>Densidad (15 °C)</b>	878	-	860 – 900	Kg/m <sup>3</sup>
<b>Viscosidad cinemática (40 °C)</b>	4,87	1,9 – 6,0	3,5 – 5,0	cSt

**Fuente:** (European Committee for Standardization, 2003; American Society for Testing and Materials, 2008; Dey et al., 2021).

**Realizado por:** Herrera, Julisa, 2021.

Dentro de las propiedades más importantes de los combustibles se encuentra la viscosidad, debido a que determina la fluidez del biodiesel en el sistema de inyección de combustible. Uno de los problemas más graves asociados a esta propiedad es la combustión incompleta que se produce cuando la viscosidad presenta un valor elevado, además genera depósitos que obstruyen la boquilla del sistema de inyección de combustible.

Por otro lado, si el valor de la viscosidad es demasiado bajo se genera un desgaste desmesurado de la bomba de inyección, así como también pérdidas de combustible desde el inyector, el cual sería el caso de la simulación generada para la producción de biodiesel como se muestra en la tabla 15 (Kara et al., 2019, pp. 2–4).

Otra propiedad relevante es la densidad del combustible dado que los motores de inyección emplean un sistema de medición volumétrico para determinar la cantidad de combustible en el tanque, además si presenta un valor demasiado alto el consumo de combustible incrementa, el chorro de inyección se ve modificado y por consiguiente la penetración del combustible también se ve afectada, mientras que un valor bajo de densidad permite reducir las emisiones de MP (material particulado). La tabla 15 muestra que el valor obtenido gracias al modelo desarrollado en DWSIM se encuentra dentro de los límites establecidos por la norma EN 14214 y se aproxima al valor estándar normado por la ASTM-D6751 (Knothe, 2010, pp. 494–495; Graboski and McCormick, 1998, pp. 128–130; Cheah, 2004, pp. 8–11).

El rendimiento del biodiesel obtenido a través del proceso de simulación se obtuvo de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \text{Rendimiento} &= \frac{\text{Biodiesel}}{\text{Aceite} + \text{alcohol reaccionante}} * 100 && \mathbf{9-3} \\ \text{Rendimiento} &= \frac{819,387689}{807,331604 + 131,316341} * 100 \\ \text{Rendimiento} &= \mathbf{87,29 \%} \end{aligned}$$

El rendimiento obtenido en el proceso de simulación es similar al obtenido en investigaciones desarrolladas por distintos autores. Por lo que se puede afirmar que el proceso es eficaz y se puede reproducir a una planta real para la síntesis de biocombustible.

## CAPÍTULO IV

### 4. GESTION DEL PROYECTO

#### 4.1. Cronograma

**Tabla 1-4:** Cronograma

ACTIVIDAD	TIEMPO																			
	FEBRERO				MARZO				ABRIL				MAYO				JUNIO			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Revisión Bibliográfica	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Elaboración del Anteproyecto									X	X										
Determinación de Variables									X	X	X	X								
Simulación del Proceso de producción de Biodiesel	X	X	X	X	X	X	X	X												
Obtención de datos experimentales									X	X	X	X	X							
Análisis de resultados obtenidos														X	X	X				
Estudio Técnico y Económico											X	X	X							
Redacción del trabajo final de Integración Curricular	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Análisis de Costos							X	X	X	X			X	X						
Revisión del documento final											X	X	X	X	X	X	X	X		
Defensa de los resultados obtenidos																				X

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

## 4.2. Presupuesto

Es necesario estimar la inversión necesaria para iniciar con el desarrollo del proyecto, la cuál es la siguiente:

**Tabla 2-4:** Presupuesto establecido para el desarrollo del proyecto

<b>PRESUPUESTO</b>			
<b>ACTIVIDAD</b>	<b>MONTO</b>	<b>FUENTE DE FINANCIAMIENTO</b>	
		<b>INTERNA</b>	<b>EXTERNA</b>
DWSIM - Clases	\$100	X	
Impresión del documento final	\$30	X	
Copias e Impresiones	\$100	X	
Empastados	\$80	X	
Otros (Energía Eléctrica/Internet)	\$100	X	
Gastos Extras	\$41	X	
<b>TOTAL</b>	<b>\$451</b>		

Realizado por: Herrera, Julisa, 2020.

## 4.3. Talento humano

La gestión del presente trabajo se logró gracias al aporte de conocimientos y experiencias del equipo de trabajo que permitió validar el proyecto.

Los colaboradores del trabajo fueron:

- Director de tesis
- Miembro
- Investigadora

## 4.4. Recursos materiales

Para llevar a cabo el desarrollo de esta propuesta tecnológica el único equipo empleado fue una laptop con el Software DWSIM.

## CONCLUSIONES

Este trabajo recoge los resultados de una simulación por computadora para la producción de biodiesel a partir de aceite de palma a través del proceso de transesterificación en un reactor de conversión y su posterior purificación en una columna de destilación y una columna de extracción líquido-líquido.

El modelado se llevó a cabo considerando que el proceso se encuentra en estado estacionario. Para el proceso de transesterificación se consideró un reactor de conversión adiabático con el fin de maximizar la selectividad de la reacción y consecuentemente su porcentaje de conversión. En cuanto a la etapa de purificación se llevó a cabo en una columna de destilación y un extractor líquido-líquido, considerando las fracciones molares del componente pesado en el destilado y el componente ligero en la corriente de fondos.

El diseño presentado en este trabajo resulta ser altamente sensible a los cambios debido a la cantidad de interacciones necesarias en cada uno de los dispositivos necesarios para estimar los resultados de la simulación. A continuación, se presentan las principales conclusiones obtenidas en este trabajo.

- El uso un Software de licencia abierta para modelar procesos representa una enorme ventaja, debido a que es posible comunicarse con el desarrollador del sistema por alguna falla del programa, se pueden encontrar ejemplos de procesos simples y complejos sin costo alguno, la instalación se lleva a cabo de manera sencilla al tener una conexión de internet estable para evitar pérdidas de tiempo por caídas de internet y que el proceso deba reiniciarse; por otro lado al igual que los softwares privados posee una colección de componentes con sus respectivas propiedades y paquetes termodinámicos apropiados para todo tipo de sistemas.
- El modelado del proceso se llevó a cabo gracias al Software DWSIM, debido a las características que presenta el programa para la realización del proyecto, el diseño se centró en cuatro equipos principales: un reactor de conversión, en donde se lleva a cabo la reacción de transesterificación básica; una columna de destilación, la cual permite la separación de etanol de la mezcla; un extractor Líquido-Líquido, el mismo que permite la separación de biodiesel de agua y glicerol; además de un separador. Estos equipos se encuentran conectados con bombas (PUMP), intercambiadores de calor (COOL – HEAT) y válvulas (VALV), para adaptar los flujos a las condiciones apropiadas para cada equipo, así como también un operador lógico de reciclado (REC) para permitir que el etanol destilado reingrese al proceso evitando un gasto innecesario al consumir mayores cantidades de alcohol.
- Las condiciones de operación se establecieron gracias a la compilación bibliográfica realizada para establecer las distintas vías de obtención de biodiesel. Determinando así que para el reactor de conversión es favorable emplear una relación molar etanol: aceite 6:1, con una concentración de catalizador equivalente al 1% en peso de aceite, por otro lado, la columna

de destilación que recibe el producto obtenido del reactor de conversión opera a 30 kPa, mientras que la columna de absorción trabaja a temperatura atmosférica. El empleo de estas condiciones permite un rendimiento de etanol respecto al aceite empleado del 87,29 %.

- El empleo de etanol en la reacción de transesterificación influye en el rendimiento del biodiesel, puesto a que en caso de emplear metanol se obtienen rendimientos superiores en un 5 a 10 %, además algunas propiedades del biodiesel también se ven afectadas como es el caso de la viscosidad, la cual supera al valor establecido en la norma EN 14214.
- La validación del modelo de simulación del proceso de obtención de biodiesel, se llevó a cabo a partir del cálculo manual del balance de materia con los datos generados en el software, demostrando la congruencia entre los datos obtenidos en la simulación y los datos que se obtuvieron del cálculo manual. Además, se compararon los datos generados por el simulador con los datos citados en bibliografía, evidenciando la similitud entre los datos con un margen de error muy corto, el cuál puede ser explicado por la naturaleza del modelo empleado para la simulación. Por estas razones, se puede afirmar que los datos generados son confiables y que el diseño se puede aplicar en una planta real para la síntesis de biodiesel.

## RECOMENDACIONES

- Es importante que para futuras investigaciones en el software de licencia abierta DWSIM, se aprenda el funcionamiento del software antes de iniciar el modelado, así como también las características y el proceso a simular, los parámetros que rigen el sistema, el estado de las especies a emplear, para poder facilitar la elección del tipo de paquete termodinámico para la solución del sistema, con el fin de obtener los mejores resultados posibles.
- Se debe tomar en cuenta que al diseñar el proceso es importante elaborar un esquema sencillo puesto que en estado dinámico un sistema complejo es mucho más difícil de estabilizar, debido al sin número de operaciones internas que debe realizar el software para obtener la respuesta del sistema.
- Para trabajos futuros se sugiere que se desarrollen simulaciones con alternativas diferentes para la producción de biodiesel como procesos enzimáticos y supercríticos. Además, se recomienda considerar otros triacilglicéridos en la composición de la materia prima para obtener resultados que se aproximen de mejor manera a la realidad.



## BIBLIOGRAFÍA

**ABID, M., TOUZANI, A., et al.** "Synthesis of biodiesel from chicken's skin waste by homogeneous transesterification". *International Journal of Sustainable Engineering* [en línea], 2019, (Marruecos) 12 (4), pp. 272–280. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 19397046. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/19397038.2018.1521883>.

**Acuerdo Ministerial N° 00135.** *Reglamento para la autorización de actividades de comercialización de mezclas de combustibles líquidos derivados de los hidrocarburos con biocombustibles.*

**AJIWE, V.I.E., AJIBOLA, V.O., et al.** "Biodiesel fuels from palm oil, palm oil methylester and ester-diesel blends". *Bulletin of the Chemical Society of Ethiopia* [en línea], 2003, (Nigeria) 17 (1), pp. 19–26. [Consulta: 06 julio 2021] ISSN 10113924. Disponible en: <https://www.ajol.info/index.php/bcse/article/view/61725>.

**AKINFALABI, S.I., RASHID, U., et al.** "Synthesis of biodiesel from palm fatty acid distillate using sulfonated palm seed cake catalyst". *Renewable Energy* [en línea], 2017, (Malasia) 111 pp. 611–619. [Consulta: 17 noviembre 2020]. ISSN 18790682. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2017.04.056>.

**AL-MEGREN, H. y XIAO, T.** *Petrochemical Catalyst Materials, Processes, and Emerging Technologies* [en línea]. Oxford - Reino Unido: IGI Global, 2016. [Consulta: 3 diciembre 2020]. Disponible en: <https://app.knovel.com/hotlink/khtml/id:kt010YQYY1/petrochemical-catalyst/safety-enhancement-in>.

**AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS D-6751.** *Standard Specifications for Biodiesel Fuel Blend Stock (B100) for Middle Distillate.*

**ARANSIOLA, E.F., OJUMU, T. v., et al.** "A review of current technology for biodiesel production: State of the art.". *Biomass and Bioenergy* [en línea], 2014, (África) 61 pp. 276–297. [Consulta: 30 noviembre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2013.11.014>.

**ASH, M. & ASH, I.** *Handbook of Solvents* [en línea]. 3ª ed. Marburgo - Alemania: Synapse Information Resources, Inc., 2018. [Consulta: 15 diciembre 2020]. Disponible en: <https://app.knovel.com/hotlink/khtml/id:kt011EYGD1/handbook-solvents-3rd/tripalmitin>.

**ATHAR, M. & ZAIDI, S.** "A review of the feedstocks, catalysts, and intensification techniques for sustainable biodiesel production". *Journal of Environmental Chemical Engineering* [en línea], 2020, (India) pp. 104523. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 22133437. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104523>.

**AZAD, A. K. RASUL, M. G., et al.** "Prospects, feedstocks and challenges of biodiesel production from beauty leaf oil and castor oil: a nonedible oil sources in Australia.". *Renew Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2016, (Australia) 61, pp. 302–318. [Consulta: 7 noviembre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.04.013>.

**BALASUBRAMANIAN, R., SIRCAR, A., et al.** "Conversion of bio-solids (scum) from tannery effluent treatment plant into biodiesel". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* [en línea], 2018, (India) 40 (8), pp. 959–967. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2018.1468507>.

**BAPTISTA, A., AMARAL, C., et al.** "Estudo comparativo da obtenção de biodiesel a partir de óleo de mamona em laboratório e no simulador de processos químicos DWSIM". *Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica* [en línea], 2019, (Brasil), pp. 1–6. [Consulta: 6 febrero 2020]. Disponible en: [https://pdfs.semanticscholar.org/6f57/81a1aac2be947f66cbbb6fa5cb5d495474af.pdf?\\_ga=2.70677392.1478079571.1621394041-1984752732.1621394041](https://pdfs.semanticscholar.org/6f57/81a1aac2be947f66cbbb6fa5cb5d495474af.pdf?_ga=2.70677392.1478079571.1621394041-1984752732.1621394041).

**BASTO, María.** Simulación y evaluación económica del proceso de producción de biodiésel a partir del aceite de palma, empleando reactores de película líquida-líquida operados en contracorriente y co-corriente [en línea] (Trabajo de titulación). (Maestría). Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. 2016. pp. 63 – 84. [Consulta: 3 junio 2021]. Disponible en: <http://bdigital.unal.edu.co/55612/7/53108542.2016.pdf%0Ahttp://www.bdigital.unal.edu.co/55612/7/53108542.2016.pdf>.

**BOORAMURTHY, V.K., KASIMANI, R., et al.** "Biodiesel Production from Tannery Waste using a Nano Catalyst (Ferric-Manganese Doped Sulphated Zirconia)". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* [en línea], 2019, (India), pp. 2-6 [Consulta: 20 October 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2019.1639849>.

**BRITO, Felipe.** Desenvolvimento de usina de produção de biodiesel a partir de óleo de fritura usando simuladores de processo: aspectos operacionais e ambientais [en línea] (Trabajo de

titulación). (Maestría). Universidad Federal de Ceará, Fortaleza, Brasil. 2013. pp. 68-91. [Consulta: 27 enero 2020]. Disponible en: [http://www.repositorio.ufc.br/bitstream/riufc/7672/1/2013\\_dis\\_fobrito.pdf](http://www.repositorio.ufc.br/bitstream/riufc/7672/1/2013_dis_fobrito.pdf).

**CASTRO, P., COELLO, J., et al.** *Opciones para la producción y uso de biodiésel en el Perú* [en línea]. Lima, Perú: Soluciones Prácticas - ITDG, 2007. [Consulta: 25 octubre 2020]. Disponible en: <https://core.ac.uk/download/pdf/48030234.pdf>.

**CHEAH, S.,** 2004. *Analysis of engine performance using palm oil methyl ester.* [en línea]. (Trabajo de titulación). Universidad del Sur de Queensland, Queensland, Australia. 2004. pp. 17-22. [Consulta: 28 febrero 2021]. Disponible en: [https://www.researchgate.net/publication/279425367\\_Analysis\\_of\\_engine\\_performance\\_using\\_palm\\_oil\\_methyl\\_ester](https://www.researchgate.net/publication/279425367_Analysis_of_engine_performance_using_palm_oil_methyl_ester).

**CHERIAN, E., YAZHINI, D., et al.** "Production of biodiesel from pork fat using alumina-doped calcium oxide nanocomposite as heterogeneous catalyst". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* [en línea], 2019, (India) pp. 1386–1395. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2019.1637971>.

**Código Orgánico de la Producción, Comercio e Inversiones.** *Registro oficial suplemento 351 de 29-dic.2010.*

**Constitución de la República del Ecuador.** *Registro oficial Nro. 449. 2008.*

**DAMANIK, N., ONG, H. et al.** "Biodiesel production from Calophyllum inophyllum–palm mixed oil". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* [en línea], 2017, (Indonesia) 39 (12), pp. 1283–1289. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2017.1324537>.

**Decreto Ejecutivo 1215.** *Registro oficial 2001.*

**Decreto Ejecutivo 2332.** *Registro oficial 2004.*

**Decreto Ejecutivo 1831.** *Registro oficial 2009.*

**Decreto Ejecutivo 1303.** *Registro oficial 2012.*

**DEMIRBAS, A.** "Progress and recent trends in biodiesel fuels". *Energy Conversion and Management* [en línea], 2009, (Turquía) 50 (1), pp. 14–34. [Consulta: 25 octubre 2020]. ISSN 01968904. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2008.09.001>.

**DEMIRBAS, A. & KINSARA, R.** "Cost analysis of biodiesel from kernel oil of tea seed". *Energy Sources, Part B: Economics, Planning and Policy* [en línea], 2017, (Arabia) 12 (5), pp. 480–486. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 15567257. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567249.2016.1198846>.

**DEY, S., REANG, N., et al.** "A comprehensive study on prospects of economy, environment, and efficiency of palm oil biodiesel as a renewable fuel". *Journal of Cleaner Production* [en línea], 2021, (India) 286, pp. 6-17. [Consulta: 20 febrero 2021]. ISSN 09596526. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.124981>.

**DOS SANTOS, L., HATANAKA, R., et al.** "Production of biodiesel from crude palm oil by a sequential hydrolysis/esterification process using subcritical water". *Renewable Energy* [en línea], 2019, (Brasil) 130, pp. 633–640. [Consulta: 21 octubre 2021]. ISSN 18790682. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.06.102>.

**DOWNEY, A.** *Physical Modeling in MATLAB* [en línea]. Kentucky - Estados Unidos: Green Tea Press, 2014. [Consulta: 3 diciembre 2020]. Disponible en: <http://greenteapress.com/matlab/PhysicalModelingInMatlab3.pdf>.

**EUROPEAN COMMITTEE FOR STANDARDIZATION.** *Standard EN 14214*, 2003.

**GEBREMARIAM, S.N. and MARCHETTI, J.M.** "Process simulation and techno-economic performance evaluation of alternative technologies for biodiesel production from low value non-edible oil". *Biomass and Bioenergy* [en línea], 2021, 149, pp. 2-9 [Consulta: 21 octubre 2021]. ISSN 18732909. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2021.106102>.

**GONÇALVES, A.L., TAKAKURA, A.K., et al.** "Simulação Da Produção Contínua E Purificação Do Biodiesel De Óleo De Palma Usando Aspen Hysys". *Revista Brasileira de Energias Renováveis*, 2016, (Brasil) 5 (2), pp. 256–264. [Consulta: 21 diciembre 2020]. Disponible en: <https://www.researchgate.net/publication/309619607>

**GRABOSKI, M. & MCCORNICK, R.** "Combustion of fat and vegetable oil derived fuels in diesel engines". *Science* [en línea], 1998, (Estados Unidos) 24 (2), pp. 125–164. [Consulta: 28 febrero 2021]. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S0360-1285\(97\)00034-8](https://doi.org/10.1016/S0360-1285(97)00034-8).

**GUJJALA, L., KUMAR, S., et al.** "Biodiesel from oleaginous microbes: opportunities and challenges". *Biofuels* [en línea], 2017, (India) 10 (1), pp. 45–59. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 17597277. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17597269.2017.1402587>.

**HIDAYAT, A. & SUTRISNO, B.** "Esterification free fatty acid in sludge palm oil using ZrO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> – rice husk ash catalyst". *AIP Conference Proceedings* [en línea], 2017 (Indonesia), pp. 1–6. [Consulta: 9 noviembre 2020]. Disponible en: <http://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.4982275>.

**JEGANNATHAN, K., JUN-YEE, L., et al.** "Production of biodiesel from palm oil using liquid core lipase encapsulated in κ-carrageenan". *Fuel* [en línea], 2010, (Malasia) 89 (9), pp. 2272–2277. [Consulta: 21 octubre 2020]. ISSN 00162361. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.03.016>

**KARA, K., OUANJI, F., et al.** "Biodiesel synthesis from vegetable oil using eggshell waste as a heterogeneous catalyst". *Biofuels* [en línea], 2019, (Marruecos) [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 17597277. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17597269.2019.1580972>.

**KAREEM, S., FALOKUN, E., et al.** "Enzymatic biodiesel production from palm oil and palm kernel oil using free lipase". *Egyptian Journal of Petroleum* [en línea], 2017, (Nigeria) 26 (3), pp. 635–642. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 20902468. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2016.09.002>.

**KEERA, S., EL SABAGH, S., et al.** "Castor oil biodiesel production and optimization". *Egyptian Journal of Petroleum* [en línea], 2018, (Egiptpo) 27 (4), pp. 979–984. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 20902468. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.ejpe.2018.02.007>.

**KNOTHE, G.** "Calidad del biodiesel y la norma astm". *Palmas* [en línea], 2010, (Estados Unidos) 31, pp. 164-169. [Consulta: 28 febrero 2021]. Disponible en: <https://studylib.es/doc/6546989/162-calidad-del-combustible-biodiésel-y-la-norma-astm>.

**KNOTHE, G., KRAHL, J., et al.** *The biodiesel Handbook* [en línea]. 2ª ed. Massachusetts-Estados Unidos: AOCS Publishing, 2010. [Consulta: 27 enero 2020]. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/book/9781893997622/the-biodiesel-handbook#book-info>.

**KNOTHE, G. & RAZON, L.** "Biodiesel fuels". *Progress in Energy and Combustion Science* [en línea], 2017, (Filipinas) 58, pp. 36–59. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 03601285. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.pecs.2016.08.001%0A%0A>.

**KUMBHAR, V., PANDEY, A., et al.** "An overview of production, properties and prospects of Tamarind Seed Oil Biodiesel as an Engine Fuel". *International Journal of Ambient Energy* [en línea], 2020, (India) pp. 1–14. [Consulta: 26 January 2020]. ISSN 0143-0750. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/01430750.2020.1824946>.

**Ley de Gestión Ambiental, Codificación 19**, 2004. (Ecuador).

**LLANOS, Lorena.** Simulación de una planta de obtención de biodiesel mediante transesterificación catalítica homogénea de trioleína de aceite de palma [en línea] (Trabajo de titulación). (Maestría). Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México. 2017. pp. 24-54. [Consulta: 3 junio 2021]. Disponible en: <http://tesis.ipn.mx/handle/123456789/28546>.

**LÔBO, I., FERREIRA, S., et al.** "Biodiesel: parâmetros de qualidade e métodos analíticos". *Química Nova* [en línea], 2009, (Brasil) 32 (6), pp. 1596–1608. [Consulta: 4 febrero 2020]. Disponible en: [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0100-40422009000600044](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-40422009000600044).

**MA, F. & HANNA, M.** "Biodiesel production: a review". *Bioresource Technology* [en línea], 1999, (Estados Unidos) 70 (1), pp. 1–15. [Consulta: 1 febrero 2020]. ISSN 09608524. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(99\)00025-5](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(99)00025-5).

**MAHLIA, T.M.I., SYAZMI, Z.A.H.S., et al.** "Patent landscape review on biodiesel production: Technology updates". *Renewable and Sustainable Energy Reviews* [en línea], 2020, (Indonesia) 118, pp. 2-7. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 18790690. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109526%0A%0A>.

**MARTÍNEZ, O., SÁNCHEZ, F., et al.** "Producción de ésteres etílicos a partir de aceite de palma RBD". *Ingeniería e Investigación* [en línea], 2006, (Colombia) 27 (2), pp. 34–43. [Consulta: 30 enero 2021]. ISSN 0120-5609. Disponible en: [http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0120-56092007000200005%0Ahttp://www.redalyc.org/html/643/64326302/](http://www.scielo.org.co/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0120-56092007000200005%0Ahttp://www.redalyc.org/html/643/64326302/).

**MEDEIROS, Daniel.** *DWSIM* [blog]. [Consulta: 6 febrero 2020]. Disponible en: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>.

**MISHRA, V.K. & GOSWAMI, R.** "A review of production, properties and advantages of biodiesel". *Biofuels* [en línea], 2018, (India) 9 (2), pp. 273–289. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 17597277. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17597269.2017.1336350>.

**MOREAU, R., SCOTT, K., et al.** "The identification and quantification of steryl glucosides in precipitates from commercial biodiesel". *JAOCS, Journal of the American Oil Chemists' Society* [en línea], 2008, (Estados Unidos) 85 (8), pp. 761–770. [Consulta: 9 abril 2021]. ISSN 0003021X. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s11746-008-1264-4%0A%0A>.

**MUSTHAFA, M.** "Production of biodiesel from Citrus limetta seed oil". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* [en línea], 2016, (India) 38 (20), pp. 2994–3000. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2015.1135205>.

**NARVÁEZ, P., NORIEGA, M., et al.** "Kinetics of palm oil ethanolysis". *Energy* [en línea], 2015, (Colombia) 83, pp. 337–342. ISSN 03605442. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2015.02.029>.

**OKULLO, A.** "Process Simulation of Biodiesel Production from Jatropha Curcas Seed Oil". *American Journal of Chemical Engineering* [en línea], 2017, (Uganda) 5 (4), pp. 56-57. [Consulta: 30 enero 2021]. ISSN 2330-8605. Disponible en: <https://doi.org/10.11648/j.ajche.20170504.12>.

**OLIVEIRA, A., MARTINEZ, D., et al.** "Simulation and optimization of a continuous biodiesel plant using nonlinear programming". *Energy* [en línea], 2019, (Brasil) 189, pp. 2-10. [Consulta: 04 junio 2021]. ISSN 03605442. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.116305>.

**OLIVEIRA, L.E. & DA SILVA, M.L.C.P.,** 2013. "Comparative study of calorific value of rapeseed, soybean, jatropha curcas and crambe biodiesel". *International Conference on Renewable Energy and Power Quality* [en línea]. (Brasil): s.n., pp. 679–682. [Consulta: 24 junio 2021]. DOI 10.24084/repqj11.411. Disponible en: <https://doi.org/10.24084/repqj11.411>.

**PABBY, A.K., RIZVI, S.S.H., et al.** *Handbook of Membrane Separations - Chemical, Pharmaceutical, Food, and Biotechnological Applications* [en línea]. 2ª ed. Florida - Estados

Unidos: Taylor & Francis, 2015. [Consulta: 12 mayo 2021]. Disponible en: <https://xurl.es/ww0cm>.

**PARENTE, E.** *Biodiesel: uma aventura tecnologica num país engraçado* [en línea]. Fortaleza-Brasil: Tecbio, 2003. [Consulta: 1 febrero 2020]. Disponible en: <http://www.xitizap.com/Livro-Biodiesel.pdf>.

**PEREA, A., KELLY, T., et al.** "Utilization of waste seashells and Camelina sativa oil for biodiesel synthesis". *Green Chemistry Letters and Reviews* [en línea], 2016, (Estados Unidos) 9 (1), pp. 27–32. [Consulta: 20 October 2020]. ISSN 17517192. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17518253.2016.1142004>.

**PEREIRA, J.** *Optimization of Biodiesel, Methanol and Methane Production and Air Quality Improvement* [en línea]. Lisboa - Portugal: Energies, 2019. [Consulta: 20 octubre 2020]. Disponible en: <https://doi.org/10.3390/books978-3-03928-101-5>.

**PIMENTEL, I.**, 2013. "Selección de Modelos Termodinámicos". [en línea]. (Venezuela): [Consulta: 6 febrero 2020]. Disponible en: <https://es.scribd.com/doc/131337501/Seleccion-Modelos-Termodinamicos>.

**Plan Nacional para el Buen Vivir**, 2017. (Ecuador). ISBN 9789942074485.

**RAHMAN, M., AZIZ, M., et al.** "Biodiesel production from microalgae Spirulina maxima by two step process: Optimization of process variable". *Journal of Radiation Research and Applied Sciences* [en línea], 2017, (Malasia) 10 (2), pp. 140–147. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 1687-8507. Disponible en: [https://www.mendeley.com/catalogue/af3e9cd5-b809-31e2-90a6-70b81e04641a/?utm\\_source=desktop&utm\\_medium=1.19.8&utm\\_campaign=open\\_catalog&userDocumentId=%7Bbd21acf2-aa51-3633-ae3d-278c21299843%7D](https://www.mendeley.com/catalogue/af3e9cd5-b809-31e2-90a6-70b81e04641a/?utm_source=desktop&utm_medium=1.19.8&utm_campaign=open_catalog&userDocumentId=%7Bbd21acf2-aa51-3633-ae3d-278c21299843%7D).

**RANA, Q., IRFAN, M., et al.** "Bio-catalytic transesterification of mustard oil for biodiesel production". *Biofuels* [en línea], 2019, (Pakistan) pp. 1–8. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 17597277. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17597269.2019.1655907>.

**Reglamento Ambiental de Operaciones Hidrocarburíferas en el Ecuador**. 2020. (Ecuador)



**SAHAR, SADAF, S., et al.** "Biodiesel production from waste cooking oil: An efficient technique to convert waste into biodiesel". *Sustainable Cities and Society* [en línea], 2018, (Pakistan) 41 pp. 220–226. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 22106707. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.scs.2018.05.037%0A%0A>.

**SHAY, E.G.** "Diesel fuel from vegetable oils: Status and opportunities". *Biomass and Bioenergy* [en línea], 1993, (Estados Unidos) 4 (4), pp. 227–242. [Consulta: 25 octubre 2020]. ISSN 09619534. Disponible en: [https://doi.org/10.1016/0961-9534\(93\)90080-N](https://doi.org/10.1016/0961-9534(93)90080-N).

**SILVA, E., DA COSTA, R., et al.** "el balance energético en la producción de biodiésel de aceite de palma". *Palmas* [en línea], 2007, (Colombia) 28 (271), pp. 73–79. [Consulta: 06 junio 2021]. Disponible en: <https://publicaciones.fedepalma.org/index.php/palmas/article/view/1292>.

**SOUZA, M., HIRATA, G., et al.** "Evaluation of kinetics and thermodynamic parameters for simulation of palm oil biodiesel production". *Fluid Phase Equilibria* [en línea], 2020, (Brasil) 525 pp. 2–6. [Consulta: 10 julio 2021]. ISSN 03783812. Disponible en: <https://doi.org/10.1016/j.fluid.2020.112792>.

**TAHER, H., NASHEF, E., et al.** "Enzymatic production of biodiesel from waste oil in ionic liquid medium". *Biofuels* [en línea], 2019, (Emiratos Árabes Unidos) 10 (4), pp. 463–472. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 17597277. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17597269.2017.1316145>.

**TANG, H., DE GUZMAN, R.C., et al.** "Formation of insolubles in palm oil-, yellow grease-, and soybean oil-based biodiesel blends after cold soaking at 4 °c". *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society* [en línea], 2008, (Estados Unidos) 85 (12), pp. 1173–1182. [Consulta: 9 abril 2021]. ISSN 0003021X. Disponible en: <https://doi.org/10.1007/s11746-008-1303-1>.

**TEIXEIRA, N., EMMI, M., et al.** "Simulação Do Processo De Produção De Biodiesel De Óleo De Palma Utilizando Os Softwares ASPEN HYSYS E DWSIM". *A Atuação dos Profissionais da Química frente aos Desafios Atuais* [en línea], 2015, (Brasil): Encontro de Profissionais da Química da Amazônia, pp. 796–803. [Consulta: 13 diciembre 2020]. Disponible en: <https://n9.cl/pvosm>

**THIRUGNANASAMBANDHAM, K.** "Biodiesel production from *Chlorella minutissima* microalgae: Kinetic and mathematical modeling". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization*

and Environmental Effects [en línea], 2018, (China) 40 (12), pp. 1461–1468. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2018.1477872>.

**THIRUGNANASAMBANDHAM, K., SHINE, K., et al.** "Biodiesel production from castor oil using potassium hydroxide as a catalyst: Simulation and validation". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* [en línea], 2016, (India) 38 (19), pp. 2898–2905. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2016.1179363>.

**VINAYAKA, A., MAHANTY, B., et al.** "Biodiesel production by transesterification of a mixture of pongamia and neem oils". *Biofuels* [en línea], 2018, (India) pp. 1–9. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 17597277. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/17597269.2018.1464874>.

**YARI, N., MOSTAFAEI, M., et al.** "Energy indicators for microwave-assisted biodiesel production from waste fish oil". *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects* [en línea], 2019, (Irán), pp. 2-9. [Consulta: 19 octubre 2020]. ISSN 15567230. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15567036.2019.1649324>.

**YAŞAR, F. & ALTUN, Ş.** "Biodiesel properties of microalgae (*Chlorella protothecoides*) oil for use in diesel engines". *International Journal of Green Energy* [en línea], 2018, (Turquía) 15 (14), pp. 941–946. [Consulta: 19 Octubre 2020]. ISSN 15435083. Disponible en: <https://doi.org/10.1080/15435075.2018.1529589>.

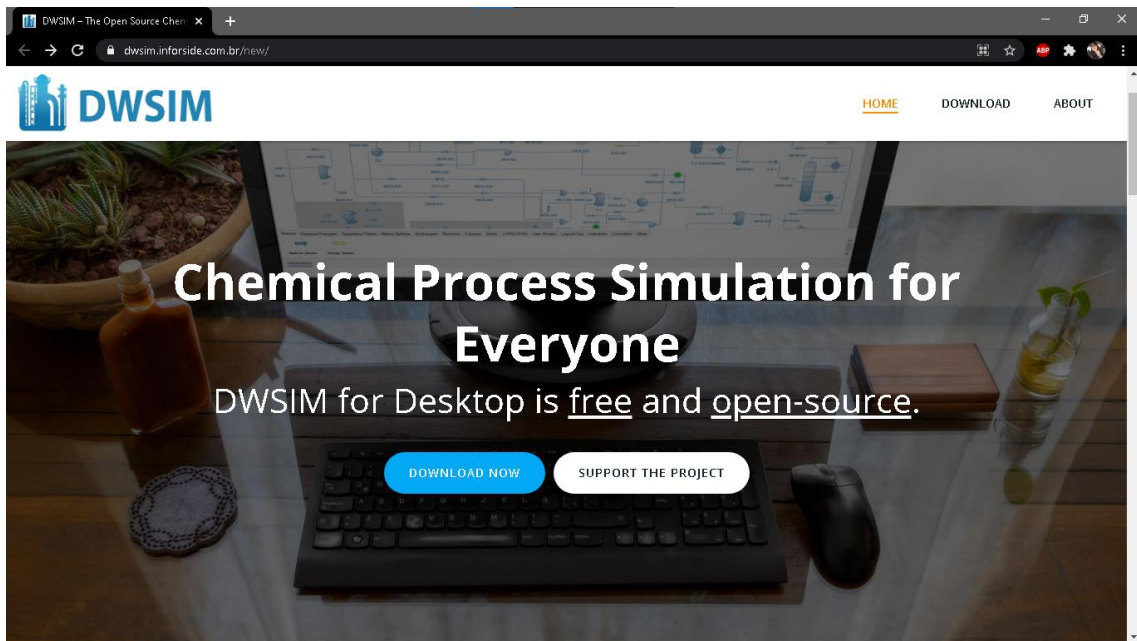
**ZAHAN, K.A. & KANO, M.** "Biodiesel production from palm oil, its by-products, and mill effluent: A review". *Energies* [en línea], 2018, (Malasia) 11 (8), pp. 3-15. [Consulta: 20 octubre 2020]. ISSN 19961073. Disponible en: <https://doi.org/10.3390/en11082132>

## ANEXOS

### ANEXO A. DESCARGA E INSTALACIÓN DE DWSIM

#### Descargar DWSIM

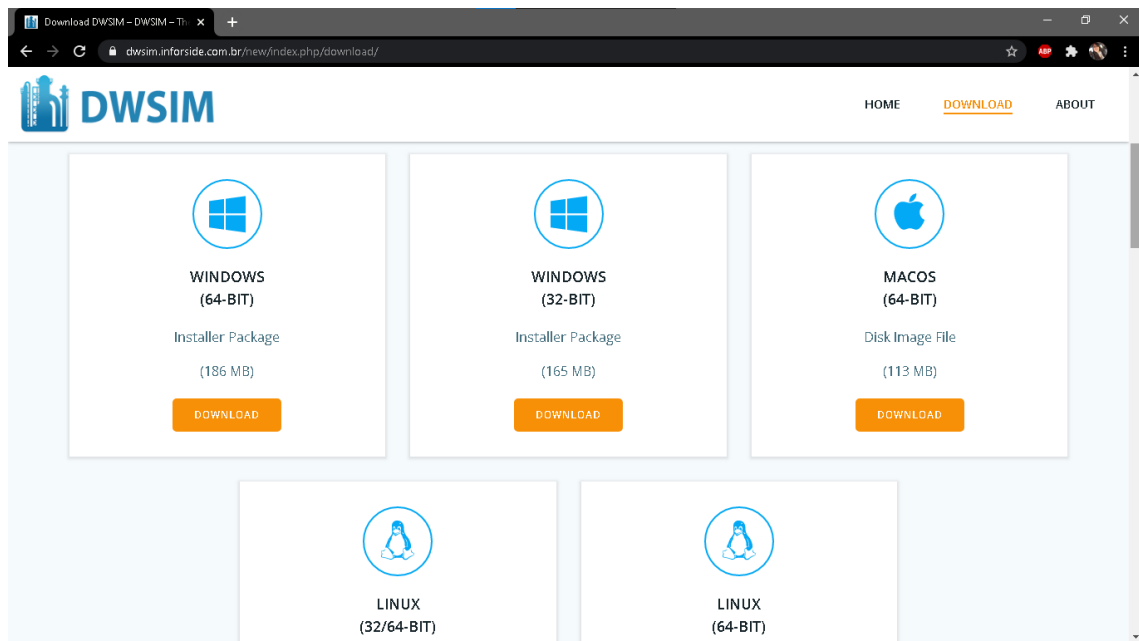
Para acceder al software de licencia abierta DWSIM es necesario acceder al sitio web <https://dwsim.inforside.com.br/new/> donde se encuentra el botón “DOWNLOAD NOW” en color azul, al cual le damos click para empezar el proceso de des carga.



**Figura 1.** Pantalla principal de descarga de DWSIM

**Fuente:** <https://dwsim.inforside.com.br/new/>.

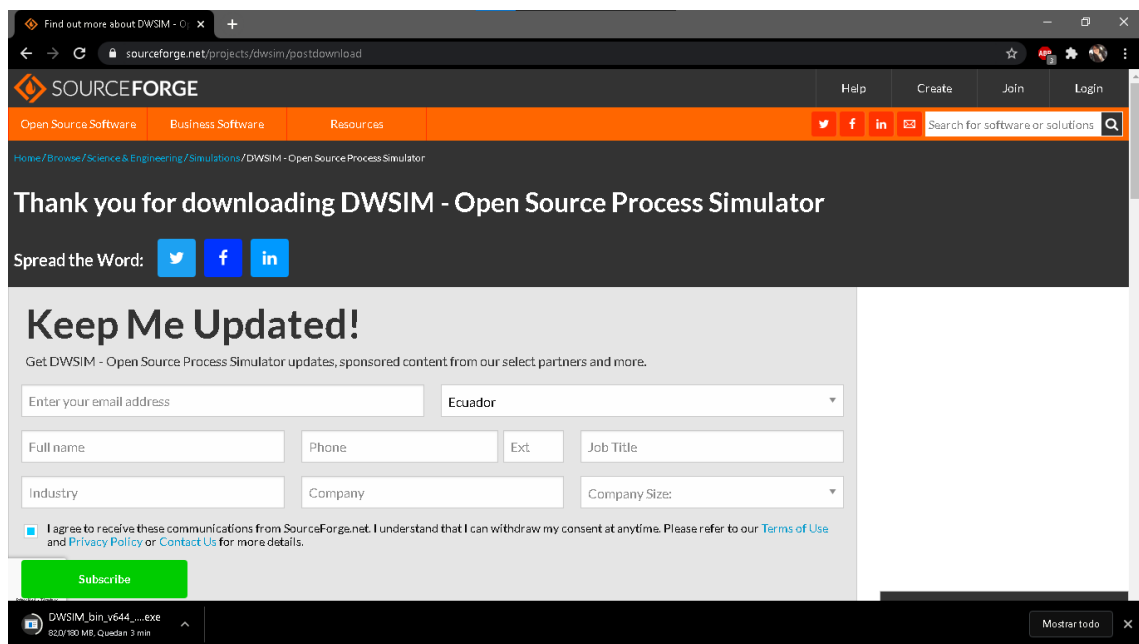
Al cargarse la nueva página, se pueden visualizar las opciones de descarga para los distintos sistemas operativos (WINDOWS, MACOS y LINUX), en nuestro caso seleccionamos la opción para Windows (64-BIT) de acuerdo a nuestro procesador. (Ver Figura 2)



**Figura 2. Selección del sistema operativo y el procesador.**

Fuente: <https://dwsim.inforside.com.br/new/>.

Una vez seleccionado el sistema operativo, la descarga inicia automáticamente, (Ver Figura 3) y nos redirige a la página de registro para mantenernos informados y obtener todas las actualizaciones del sistema.



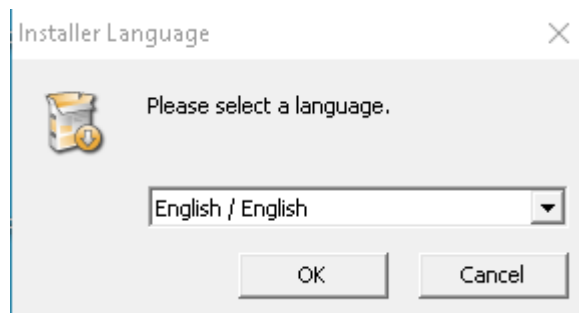
**Figura 3. Página de registro de DWSIM**

Fuente: <https://sourceforge.net/projects/dwsim/postdownload>.

### **Instalación de DWSIM**

En este apartado se explica el procedimiento a seguir para la instalación de DWSIM en Windows 10 (la instalación en otras versiones de Windows es similar).

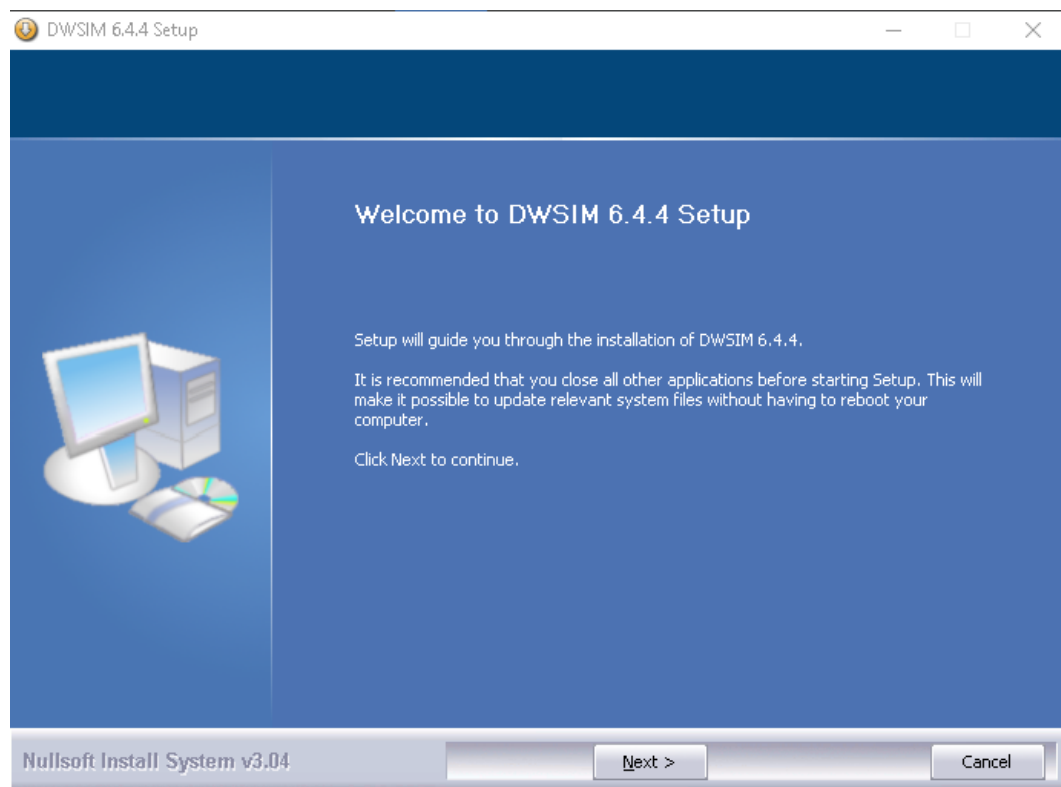
Después de que la descarga ha finalizado, se procede a ejecutar la aplicación y se pide permisos de administrador, a lo cual es necesario darle click en Si y aparecerá la pantalla que muestra la figura 4, en donde se debe elegir el idioma (inglés o portugués) y presionar el botón OK.



**Figura 4.** Selección del idioma para DWSIM

**Fuente:** DWSIM instalador.

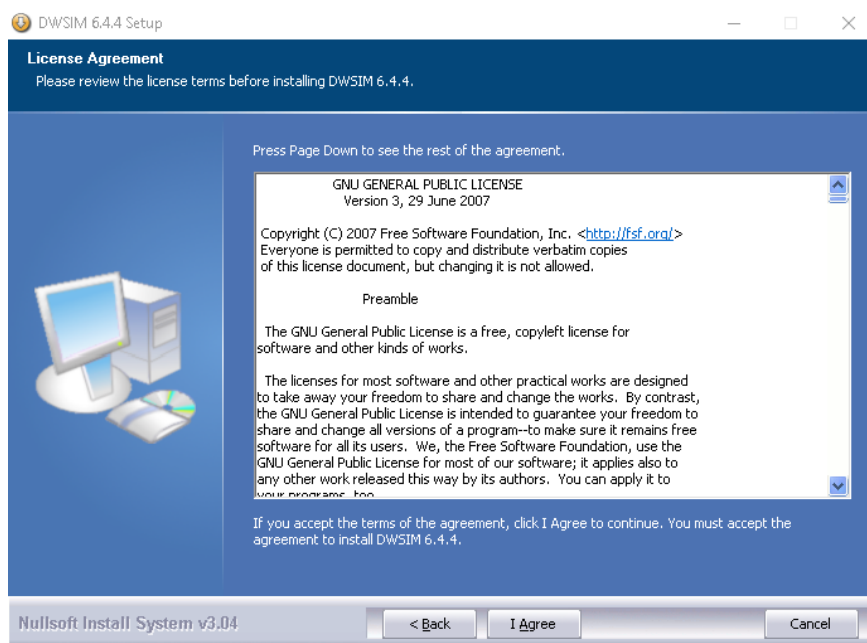
Después aparece el cuadro de diálogo de bienvenida para la instalación del software como se muestra en la figura 5, en el cual se debe dar clic a la opción “Next”.



**Figura 5.** Ventana de bienvenida a la configuración del Software DWSIM.

**Fuente:** DWSIM instalador.

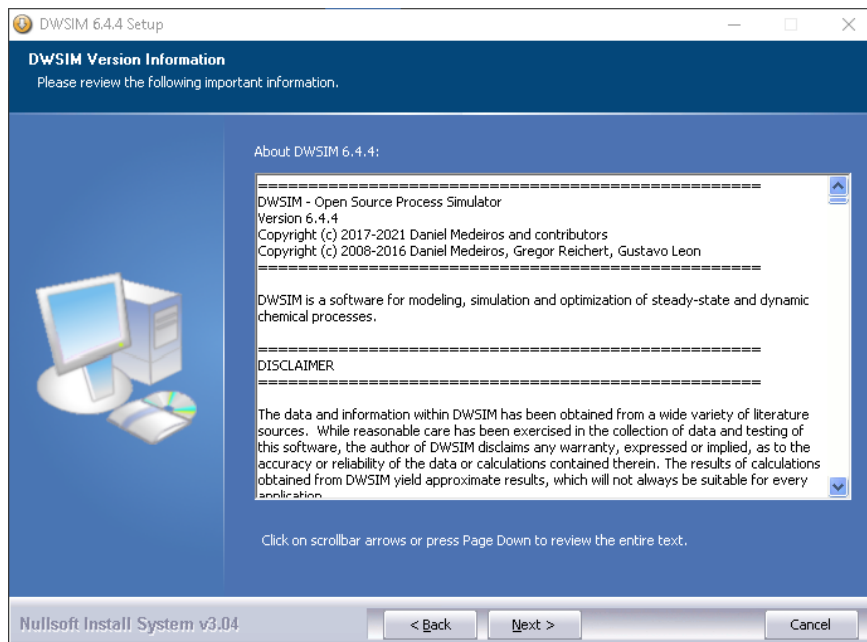
Una vez aceptada la opción aparece el cuadro de acuerdo de licencia para poder ejecutar la aplicación de DWSIM como muestra la Figura 6 en la cual se debe dar click en “I Agree”.



**Figura 6.** Acuerdo de licencia del Software DWSIM.

**Fuente:** DWSIM instalador.

Posteriormente al acuerdo de licencia aparece la ventana que muestra la Figura 7, la cual muestra información relevante acerca de la versión del software y la compatibilidad con el equipo, aquí es necesario darle clic en “Next” y así poder continuar con el proceso de instalación.



**Figura 7.** Información Relevante acerca de DWSIM.

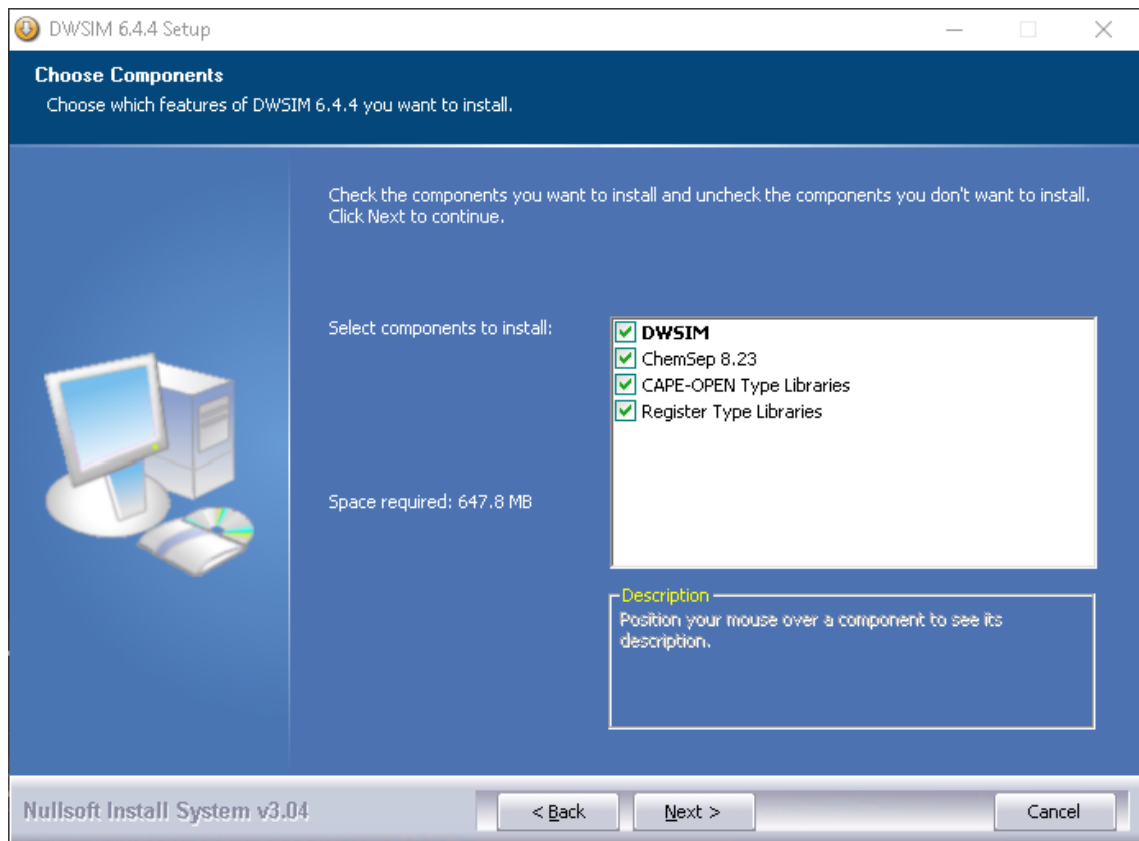
**Fuente:** DWSIM instalador.

Luego aparece la pantalla que indica la figura 8, en la cual se dan a elegir los componentes del software que se quieren instalar en el procesador. La tabla 1 muestra las funciones de cada componente.

**Tabla 1:** Componentes del paquete de Instalación de DWSIM

<b>APLICACIÓN</b>	<b>FUNCIÓN</b>
DWSIM	Software de modelamiento, simulación y optimización de procesos químicos en estado estacionario y dinámico.
ChemSep	Herramienta de simulación para operaciones de destilación, absorción y extracción con una interface intuitiva.
CAPE-OPEN Type Libraries	Interfaz de interoperabilidad que permite compartir sistemas de unidades, paquetes termodinámicos, así como lo entornos de simulación de procesos entre los componentes de CAPE-OPEN como DWSIM y ChemSep.
Register Type Libraries	Registro a la Biblioteca de DWSIM para acceder a la automatización del modelo de los objetos que componen la simulación

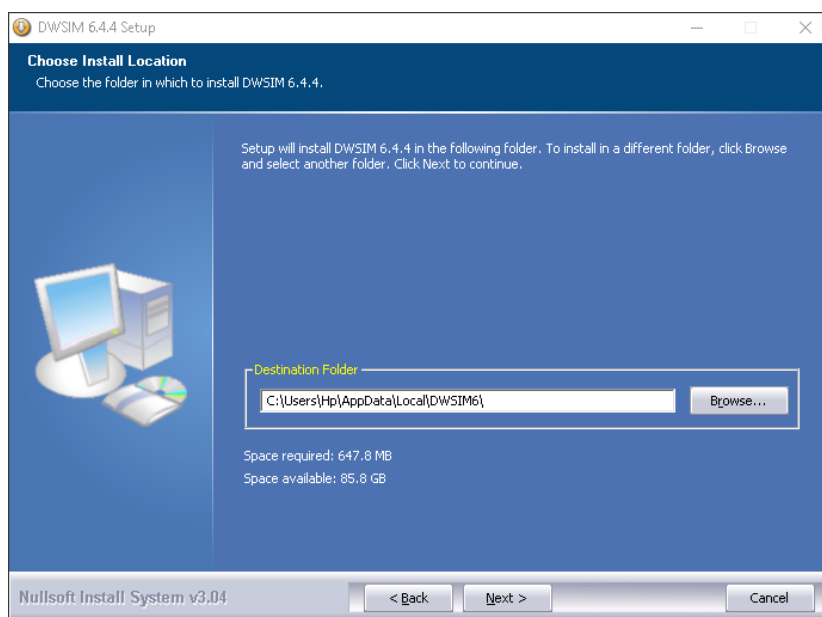
**Fuente:** DWSIM instalador.



**Figura 8.** Componentes para la instalación de DWSIM.

**Fuente:** DWSIM instalador.

Luego aparece la ventana de selección de la carpeta donde se va a instalar la aplicación, tal como muestra la figura 9, luego de seleccionar la carpeta se da click en “Next” para continuar con la instalación del software.

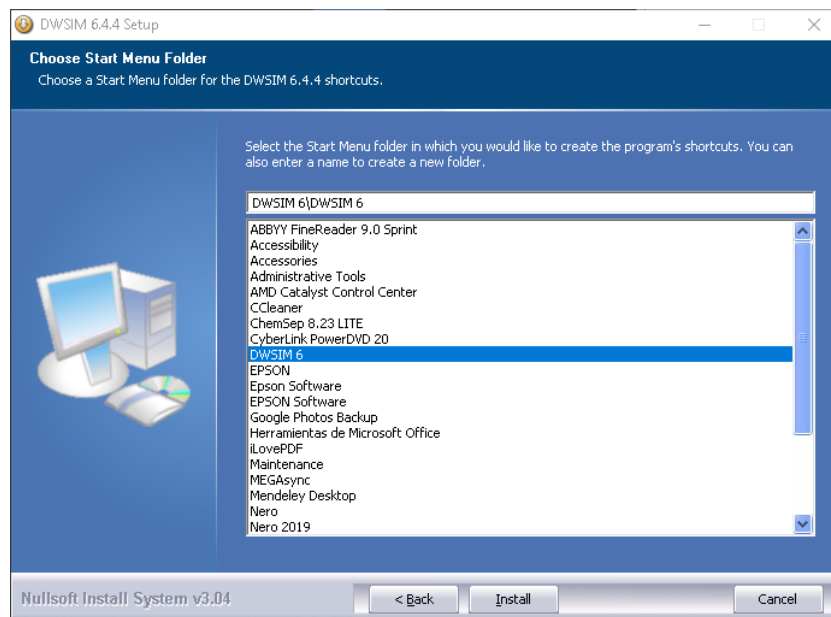


**Figura 9.** Locación de la Instalación del Software.

**Fuente:** DWSIM instalador.



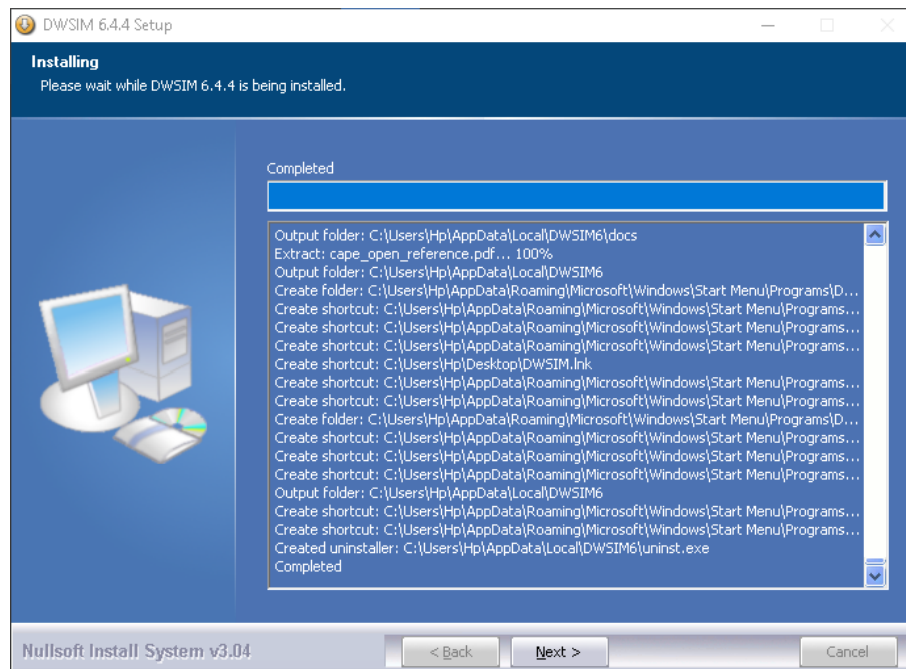
Posteriormente se debe elegir la carpeta en donde se va a instalar la aplicación y donde aparecerán los accesos directos de cada componente, como muestra la figura 10 y dar clic en “Install”



**Figura 10.** Selección de la carpeta principal donde se alojarán todos los componentes del Software.

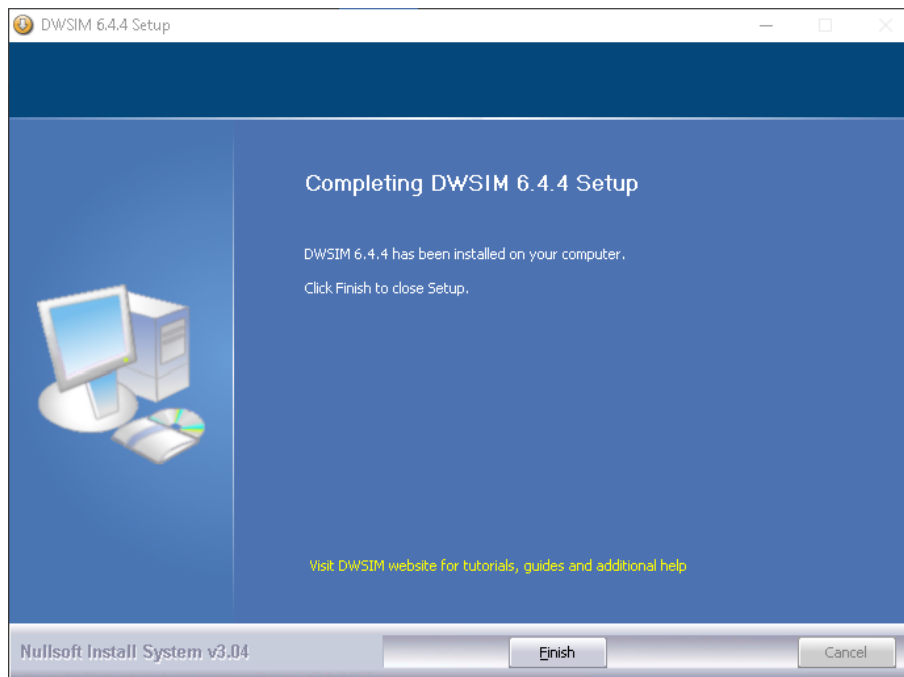
**Fuente:** DWSIM instalador.

Finalmente, como muestra la figura 11 se selecciona el botón “Next” una vez que se ha completado la instalación y aparece la ventana de la figura 12.



**Figura 11.** Instalación del software DWSIM.

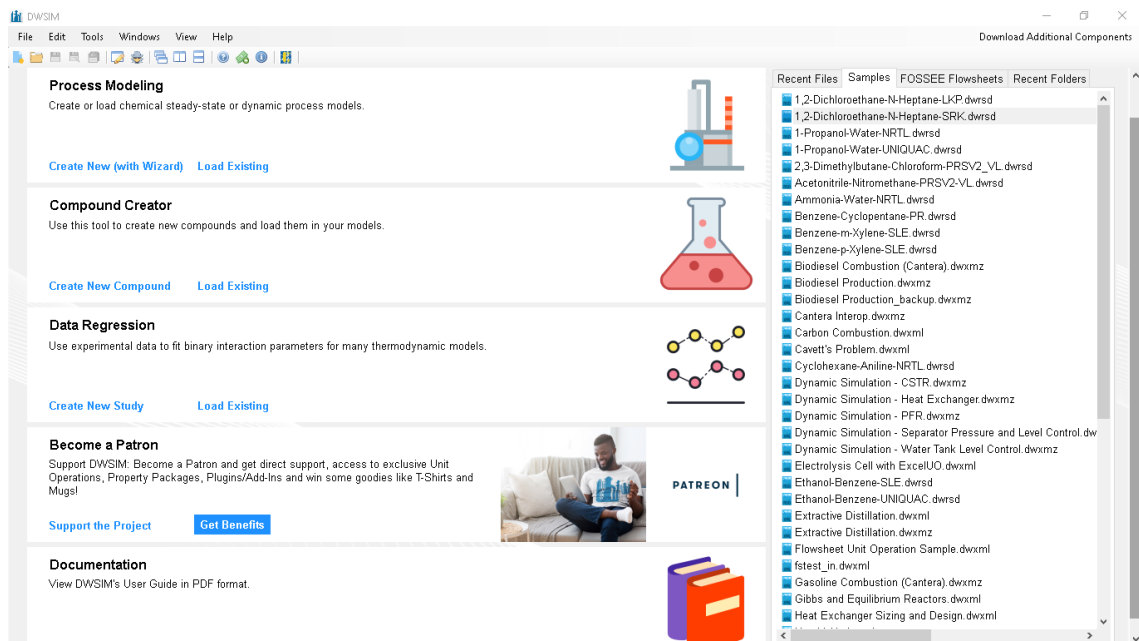
**Fuente:** DWSIM instalador.



**Figura 12.** Ventana de finalización de la Instalación.

**Fuente:** DWSIM instalador.

Una vez presionado el botón “Finish” la instalación del software se ha completado y puede ser empleado para crear la simulación.



**Figura 13.** Ventana de inicio del simulador

**Fuente:** Software DWSIM.

**ANEXO B. CERTIFICADO DE CUMPLIMIENTO DE LA NORMATIVA**



**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO**

**DIRECCIÓN DE BIBLIOTECAS Y RECURSOS DEL APRENDIZAJE**  
**UNIDAD DE PROCESOS TÉCNICOS Y ANÁLISIS BIBLIOGRÁFICO Y DOCUMENTAL**

**REVISIÓN DE NORMAS TÉCNICAS, RESUMEN Y BIBLIOGRAFÍA**

**Fecha de entrega:** 29 / 11 / 2021

<b>INFORMACIÓN DEL AUTOR/A (S)</b>
<b>Nombres – Apellidos:</b> <i>Julisa Anabel Herrera Guaila</i>
<b>INFORMACIÓN INSTITUCIONAL</b>
<b>Facultad:</b> <i>Ciencias</i>
<b>Carrera:</b> <i>Ingeniería Química</i>
<b>Título a optar:</b> <i>Ingeniera Química</i>
<b>f. Analista de Biblioteca responsable:</b> <i>Ing. Leonardo Medina Ñuste MSc.</i>

**LEONARDO  
FABIO MEDINA  
NUSTE**

Firmado digitalmente por LEONARDO  
FABIO MEDINA NUSTE  
Nombre de reconocimiento (DN): c=EC,  
o=BANCO CENTRAL DEL ECUADOR,  
ou=ENTIDAD DE CERTIFICACION DE  
INFORMACION-ECIBCE, I=QUITO,  
serialNumber=0000621485, cn=LEONARDO  
FABIO MEDINA NUSTE  
Fecha: 2021.11.29 17:17:07 -05'00'



**1481-DBRA-UTP-2021**