

Desarrollo de un *software* para la simulación del proceso de transformación del aceite vegetal usado en un biocombustible

Yan C. Ordoñez Sánchez¹; Bárbara Bonilla Sánchez²; José Gandón Hernández³ y Marilyn García Díaz⁴

¹Centro de Ingeniería e Investigaciones Químicas (CIQ), Cuba. yancarlos@inor.ciq.minem.cu

²Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana (UH), Cuba. bbonillasnchz@gmail.com

^{3,4}Grupo de Ingeniería de los Alimentos, Facultad de Ingeniería Química, Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría (CUJAE), Cuba. gandon@quimica.cujae.edu.cu³; mgarcia@quimica.cujae.edu.cu⁴

Recibido: 17 sept. 2016

Aceptado: 20 oct. 2016

RESUMEN

El trabajo que se expone se fundamenta en el desarrollo del software Sitrans, para la simulación del proceso de transformación del aceite vegetal usado en un biocombustible. El objetivo de la investigación es predecir el porcentaje de conversión de ácidos grasos en ésteres metílicos con respecto al tiempo. Para lograr este objetivo, se resolvieron un conjunto de modelos desarrollados a partir de la implementación del método de Euler, el que fue programado en lenguaje CSharp y se utilizó como herramienta, para la interfaz gráfica de usuario, Microsoft Visual Studio 2010. La validación del software se realizó a través de los resultados experimentales obtenidos a escala de laboratorio, reportando porcentajes de ajuste mayores del 90%. Los resultados de la investigación confirman que el modelo computarizado, dentro de sus límites de aplicación, posee una precisión satisfactoria que permite predecir el porcentaje de conversión de ácidos grasos en ésteres metílicos.

PALABRAS CLAVE: Reacción de transesterificación; Biocombustible; Modelación matemática; Simulación

ABSTRACT

Development of a software for the simulation of the transformation process of the vegetable oil used in a biofuel. The work shown is based on the development of Sitrans software for the simulation of process of transformation of vegetable oil into a biofuel. The aim of the research is to predict the percentage of conversion of fatty acid methyl esters with respect to time. It was resolved to the set of models developed from the implementation of Euler's method, which was scheduled CSharp language used as Microsoft Visual Studio 2010 tool for graphical user interface. Software validation was performed through the experimental results obtained in laboratory scale, reporting percentages greater than 90% adjustment. The results of the investigation confirm that the computer model, within its limits of application, has a satisfactory precision that predicts the conversion rate of fatty acid methyl esters.

KEYWORDS: Transesterification reaction; Biofuel; Mathematical modeling; Simulation

INTRODUCCIÓN

Dentro de la amplia variedad de ramas que abarca actualmente la ingeniería química, la industria de producción de alimentos constituye una de las temáticas de mayor interés, debido a la directa influencia que ejerce sobre los consumidores. Está considerada como la rama de la industria encargada de la elaboración, transformación, preparación, conservación y envasado de los alimentos de consumo humano y animal, de ahí la importancia que se ha adjudicado.

Como parte de la industria alimenticia y de los servicios gastronómicos en general, aparece la elaboración de productos fritos o pre fritos, la que adquiere cada día más interés, debido a las cualidades sensoriales y de textura que experimentan los alimentos y la aparición de las denominadas comidas rápidas.

Los aceites comestibles, constituyen un elemento indispensable del proceso de fritura. Estos provienen tanto del reino animal como del vegetal, y aunque aportan un valor energético elevado, ácidos grasos insaturados y vitamina

E al organismo, no deben ser reutilizados incontroladamente en la elaboración de alimentos. Las altas temperaturas a que deben ser sometidos, dan lugar a la formación de compuestos de oxidación potencialmente tóxicos e incluso cancerígenos. Algunas de las dolencias más comunes del exceso de frituras tienen relación con el colon, problemas vasculares, e incluso, posible cáncer gástrico (Hurtado, 2009).

Debe mencionarse además que no solo la reutilización de estos aceites es un tema preocupante, sino también el incrementado impacto medioambiental que constituyen los vertimientos de este dañino producto al ecosistema. Los aceites usados representan uno de los mayores contaminantes del medio ambiente. Su acción nociva impacta en la calidad del aire, los suelos y las aguas; tal es el punto, que expertos en manejo de desechos peligrosos aseguran que un litro de aceite usado puede contaminar un millón de litros de agua (Caballero y otros, 2012).

Las problemáticas anteriormente mencionadas han despertado toda una serie de interrogantes, acerca de cuál será la mejor alternativa para la utilización y aprovechamiento de este recurso, con vistas a causar el menor daño posible al medio ambiente. De ahí, que la transformación de este aceite residual en un biocombustible, sea una de las alternativas más difundidas en el mundo actual, pues representa una opción altamente atractiva debido a su repercusión tanto económica como social.

La producción de este biocombustible ocurre a partir de la reacción de transesterificación. La transesterificación se puede definir como la reacción mediante la cual los triglicéridos presentes en los aceites vegetales y grasas animales, se combinan con un alcohol de bajo peso molecular, usualmente metanol, en presencia de un catalizador adecuado, para formar una fase glicerina y una fase de ésteres grasos (metilester), la que será denominada a los efectos de esta investigación como un biocombustible.

Detrás de este aparentemente sencillo proceso, se esconden una serie de variables que complejizan esta operación al punto de convertirlo en un procedimiento orgánicamente engorroso. Algunas de estas variables son: la calidad de los reactivos, tipo y concentración del catalizador, temperatura y tiempo de reacción, intensidad de mezclado, entre otras.

Teniendo en cuenta los elementos mencionados, se hace necesario identificar la combinación más conveniente de las variables expuestas, con el objetivo de obtener los mayores rendimientos de la reacción al finalizar el proceso. En la experiencia práctica esto podría llegar a ser costoso, e incluso podrían derrocharse grandes cantidades de materiales reactivos sin llegar a obtenerse resultados satisfactorios. Por este motivo se requiere recurrir a una herramienta importante y útil con la que cuenta el análisis de procesos: la simulación. Es un método para desarrollar, modificar, analizar y probar sistemas o procesos sin la necesidad de su implementación física, una vez que el mismo ha sido validado.

Es por ello que, debido a la complejidad de las reacciones que tienen lugar en el proceso de transformación del aceite vegetal usado en un biocombustible, y al hecho de que en Cuba se encontraron pocas referencias de investigaciones respecto al tema, se hace necesario contar con una herramienta útil de simulación en la cual, además de profundizar en el conocimiento de los fenómenos que ocurren en este proceso de transformación, se permita calcular los rendimientos del mismo para diferentes condiciones de operación.

MATERIALES Y MÉTODOS

La investigación se basó en el análisis bibliográfico, experiencias prácticas de investigadores, un diseño de experimentos factorial 2^3 , el cual estudió los efectos de 3 factores en 10 corridas experimentales y a partir del análisis de varianza (ANOVA) se determinaron las variables estadísticamente significativas en el proceso, es decir, las de mayor impacto en el rendimiento del mismo, utilizando para ello STATGRAPHICS Centurión XVI. Las materias primas utilizadas fueron aceite de soya usado y metanol e hidróxido de sodio como catalizador. Las variables en estudio fueron temperatura, velocidad de agitación o intensidad de mezclado y relación molar alcohol:aceite, manteniendo constante la concentración del catalizador (0,3% con respecto al aceite) según (Hanna, 1998; Reynosos, 2010).

La variable temperatura se trabajó en un intervalo de 30°C a 50°C, pues aunque al incrementar la temperatura el rendimiento aumenta y el tiempo de reacción se reduce, se recomienda que la temperatura no exceda el punto de

ebullición del alcohol, porque se vaporiza y forma burbujas que limitan la reacción en las interfases alcohol-aceite-biodiesel, además de la aparición de reacciones secundarias (Rojas, 2009; Torossi, 2006).

En cuanto a la intensidad del mezclado según Rojas (2009), se ha encontrado altos rendimientos con velocidades de agitación de 360 a 600 rpm, esto se debe a que a velocidades superiores a 360 rpm se supera el valor mínimo del número de Reynolds de 10 000, garantizando que la transferencia de masa de los reactantes y productos no limite la velocidad de reacción. Por lo que este caso, se escogió un intervalo de 250 rpm a 500 rpm.

La relación molar alcohol:aceite es una de las variables más influyentes en el rendimiento de la reacción y en la viscosidad final del biodiesel. El alcohol más utilizado es el metanol debido a su polaridad y a su estructura de cadena corta, por lo que si bien la estequiometría para la reacción transesterificación requiere tres moles de alcohol por un mol de aceite (3:1), en la práctica se incrementa a 6:1 para desplazar el equilibrio hacia una mayor formación de ésteres metílicos. Una proporción mayor de alcohol dificultaría la posterior separación de glicerol debido a un aumento de su solubilidad, disminuyendo el rendimiento y aumentando los costos de producción (Torossi, 2006). Considerando estos elementos, en el presente estudio se trabajó en un intervalo de 3:1 a 6:1.

Para la obtención del modelo matemático se siguió la Estrategia general de la modelación matemática sugerida por Viera (Viera, 1988). El desarrollo del modelo y su posterior simulación estuvo dirigido a la primera etapa del proceso, la cual enmarca la obtención del biocombustible en el reactor diseñado en la facultad de Ingeniería Química como resultado de otros investigadores (Cruz, 2013), el cual cuenta con una chaqueta de intercambio de calor como sistema de calentamiento para garantizar la temperatura necesaria en la reacción. Cuenta además con un sistema de agitación de paletas rectas para incrementar la transferencia de calor y lograr un buen mezclado. También posee una tapa que tiene dos orificios; uno para el acople del agitador y otro por donde se vierte el metóxido y a su vez se controla la temperatura de operación. Su capacidad efectiva es de un litro.

El reactor se puede considerar como un reactor discontinuo de mezcla perfecta, por lo tanto la composición es igual en cualquier punto del mismo. En consecuencia, el sistema compuesto por el reactor se puede considerar como un todo, además el proceso ocurre en estado no estacionario e isotérmico.

- a) Modelo para la determinación del tiempo que demora el proceso en alcanzar la condición isotérmica.

$$\frac{dT_R}{dt} = \frac{U \cdot \left(\frac{\pi D_{ext}^2}{4} + \pi L D_{ext} \right) (T_M - T_R)}{TG \cdot V_{aceite} \cdot C_p}$$

(Ec 1)

Donde:

T_R : temperatura de la reacción, K

U : coeficiente global de transferencia de calor, $W/(m^2 \cdot ^\circ C)$

D_{ext} : diámetro exterior del reactor, m

L : altura del reactor, m

T_M : temperatura del medio de calentamiento, K

T_G : concentración del aceite usado, mol/L

V_{aceite} : volumen de aceite usado a procesar, L

C_p : calor específico del aceite usado, J/kg·K

- b) Modelo para la determinación del volumen de biocombustible obtenido en el proceso y el tiempo del mismo.

$$\frac{dC_i}{dt} = r_{i,av}$$

(Ec 2)

Como se puede observar el balance de masa obtenido en la ecuación 2 queda solamente en función de la velocidad de la reacción del proceso, por lo que a partir de la figura 1 se obtiene el modelo matemático para cada una de las especies involucradas en la reacción de transesterificación, los cuales se muestran a continuación:

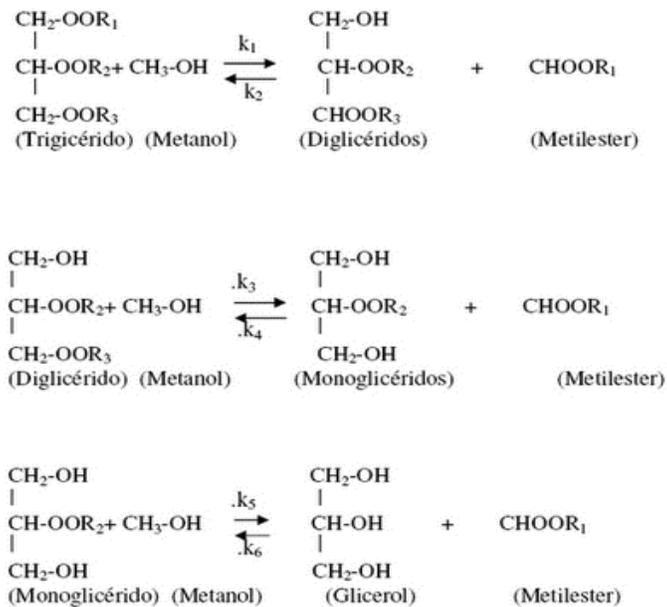


Figura 1. Reacción de transesterificación
Fuente: (Noureddini y Zhu, 1997)

Triglicérido:

$$\frac{d(TG)}{dt} = -k_1 \cdot (TG) \cdot (M) + k_2 \cdot (DG) \cdot (B)$$

(Ec 3)

Diglicérido:

$$\frac{d(DG)}{dt} = -k_3 \cdot (DG) \cdot (M) + k_4 \cdot (MG) \cdot (B) + k_1 \cdot (TG) \cdot (M) - k_2 \cdot (DG) \cdot (B)$$

(Ec 4)

Monoglicérido:

$$\frac{d(MG)}{dt} = -k_5 \cdot (MG) \cdot (M) + k_6 \cdot (GL) \cdot (B) + k_3 \cdot (DG) \cdot (M) - k_4 \cdot (MG) \cdot (B)$$

(Ec 5)

Biodiesel:

$$\frac{d(B)}{dt} = k_1 \cdot (TG) \cdot (M) - k_2 \cdot (DG) \cdot (B) + k_3 \cdot (DG) \cdot (M) - k_4 \cdot (MG) \cdot (B) + k_5 \cdot (MG) \cdot (M) - k_6 \cdot (GL) \cdot (B)$$

(Ec 6)

Glicerina:

$$\frac{d(GL)}{dt} = k_5 \cdot (MG) \cdot (M) - k_6 \cdot (GL) \cdot (B)$$

(Ec 7)

Metanol:

$$\frac{d(M)}{dt} = -k_1 \cdot (TG) \cdot (M) + k_2 \cdot (DG) \cdot (B) - k_3 \cdot (DG) \cdot (M) + k_4 \cdot (MG) \cdot (B) - k_5 \cdot (MG) \cdot (M) + k_6 \cdot (GL) \cdot (B)$$

(Ec 8)

Las expresiones entre paréntesis representan las concentraciones molares de cada uno de los componentes de la reacción: (TG) triglicéridos; (DG) diglicéridos; (MG) monoglicéridos; (GL) glicerina; (M) metanol; (B) ésteres metílicos (biodiesel). Las variables k_1 , k_2 , k_3 , k_4 , k_5 y k_6 son constantes de la reacción en el sentido que se indica en la figura 1.

Los valores de las constantes de reacción y energía de activación fueron tomados según Nouredini y Zhu (Nouredini y Zhu 1997).

La influencia de la temperatura en las constantes de reacción fue determinada de acuerdo con la ecuación de Arrhenius, la cual se muestra en la ecuación 9:

$$k_i^{T_R} = k_i^{50^{\circ}C} e^{\frac{Ea_i}{R} \left(\frac{1}{323} - \frac{1}{T_R} \right)}$$

(Ec 9)

Como los modelos matemáticos obtenidos son ecuaciones diferenciales ordinarias, se decidió aplicar el método numérico iterativo de Euler, debido a que el mismo es una técnica de paso simple, de sencillo y seguro procedimiento. A pesar de ello, se pudiera usar el método de Runge Kutta de cuarto orden, o el método numérico basado en la sustitución de las derivadas por sus equivalentes en diferencias finitas (discretización explícita), los cuales son métodos apropiados para resolver este tipo de ecuaciones y ampliamente utilizados porque son de rápida convergencia. Sin embargo, al aplicar estos métodos y compararlos con el método numérico iterativo de Euler, se observa que la convergencia de la solución para la estabilidad del sistema de ecuaciones es muy similar, por lo que se decidió aplicar el mencionado anteriormente.

Modelo para la obtención de un buen mezclado del proceso

El procedimiento de mezclado en el proceso comienza una vez que el agua de calentamiento alcanza la temperatura de trabajo fijada en el termostato, mientras es recirculada en el sistema.

Mediante el empleo del STATGRAPHICS CENTURION XVI se obtuvo un modelo de ajuste del tipo regresión polinomial, con el objetivo de conocer la dependencia del coeficiente global de transferencia de calor con la agitación del proceso para diferentes revoluciones por minuto, partiendo de los resultados experimentales realizados en trabajos anteriores (Cruz, 2013). A continuación, se muestra el modelo obtenido y sus parámetros estadísticos:

$$U = 550,88 - 0,64208 \cdot rpm + 8,8384 \cdot 10^{-4} \cdot rpm^2 \quad (\text{Ec } 10)$$

Dicho modelo presenta un coeficiente de determinación $R^2=98,4\%$, por lo que el modelo se ajusta a los datos experimentales, reflejando la eficiente relación entre las dos variables en estudio. Las otras tres pruebas de calidad de ajuste del modelo a tener en cuenta que fueron analizadas detalladamente, afirman que se puede utilizar, pues el parámetro Durbin-Watson que examina los residuos, indica que no existe una correlación serial en los residuos, ya que el valor-P es mayor que 0,05. Todos los parámetros son significativos y el análisis de varianza realizado para conocer la bondad de ajuste del modelo resultó satisfactorio.

Este modelo es válido solo para intervalos de velocidades de agitación entre los 250 rpm y 500 rpm, por ser el intervalo de velocidades en el cual se encontraban los datos empleados para el ajuste del modelo, según lo reportado por Cruz (Cruz 2013).

Determinación de la condición de parada de la iteración del algoritmo

Al principio la reacción es muy rápida, pero después se torna extremadamente lenta. Primero la mitad de los triglicéridos se convierte en diglicéridos, después en monoglicéridos y finalmente en biocombustible. La velocidad de la reacción disminuye progresivamente y nunca se completa del todo. Cuando la reacción se retarda demasiado, llega el momento en el cual no es factible continuar alargando la misma, puesto que la obtención de biodiesel en el tiempo es muy pequeña con relación al costo económico al cual asciende la prolongación del proceso de la reacción. Teniendo en cuenta estos elementos fue necesario determinar una condición de parada de la iteración, con la cual no se prolongara innecesariamente la reacción y que a la vez, aportara rendimientos elevados.

De esta forma fue analizado el comportamiento de la reacción, graficando la diferencia de las variaciones en las concentraciones de biocombustible obtenido (ΔB) y el rendimiento del proceso con respecto al tiempo, como se muestra en la figura 2.

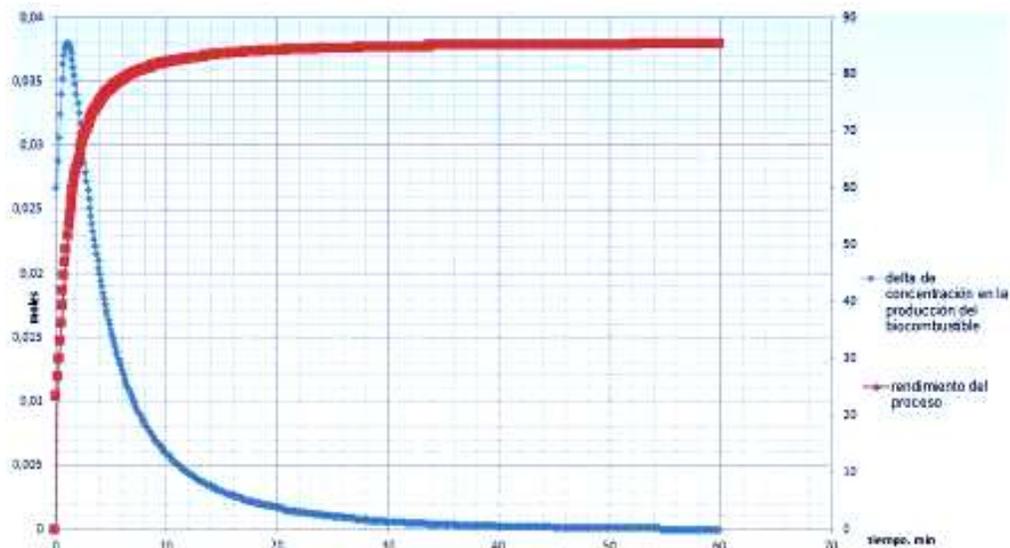


Figura 2. Determinación de la condición de parada de la iteración del algoritmo

Fuente: Elaboración propia

Como se puede apreciar, para el valor de $\Delta B < 0,001$ comienza a observarse un comportamiento constante, lo cual provoca que el rendimiento del proceso no aumente significativamente. Es por ello que, para estas condiciones se decide detener la reacción, tomando como criterio el ΔB .

En el software desarrollado denominado Sitrans, se utilizó como herramienta Microsoft Visual Studio Express 2010 y el lenguaje de programación CSharp. Sitrans se confeccionó siguiendo un proceso de planificación, uso y revisión. El mismo tiene una interfaz gráfica de usuario atractiva y sencilla, haciendo que la operación del sistema sea de fácil comprensión, como se puede observar en la figura 3.



Figura 3. Pantalla principal del software
Fuente: Elaboración propia

La validación del software es una etapa útil y necesaria, con la cual se identifican los puntos débiles y fuertes de todo sistema. Es por ello que, se comprobaron los resultados de los cálculos obtenidos mediante el uso del programa computacional Sitrans y los resultados obtenidos experimentalmente en el laboratorio, utilizando el método del error relativo.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En las figuras 4 y 5 se muestran el Análisis de Varianza y el diagrama de Pareto respectivamente, para el rendimiento del proceso. Se puede observar que las variables en estudio son estadísticamente significativas, pues su valor de P es menor que 0,05 con un nivel de confianza del 95%.

Fuente	Suma de Cuadrados	Gl	Cuadrado Medio	Razón-F	Valor-P
A: Temperatura	253,125	1	253,125	72,70	0,0001
B: Velocidad de agitación	21,125	1	21,125	6,07	0,0489
C: relación molar alcohol/aceite	57,7587	1	57,7587	16,59	0,0066
Error total	20,8913	6	3,48188		
Total (corr.)	352,9	9			

Figura 4. Análisis de Varianza para el Rendimiento

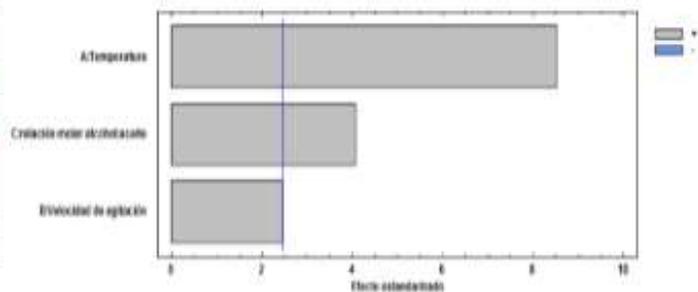


Figura 5. Diagrama de Pareto Estandarizado para el Rendimiento

En la tabla 1 se muestran los resultados obtenidos en la simulación y experimentación, así como el error relativo y porcentaje de ajustes promedio del proceso. El error relativo y porcentaje de ajuste, se determinaron a partir de las expresiones 11 y 12 respectivamente.

$$Error_{relativo} = \left[\left(\frac{\text{Resultado}_{experimental} - \text{Resultado}_{Sitrans}}{\text{Resultado}_{experimental}} \right) \cdot 100 \right]$$

(Ec 11)

$$\%_{Ajuste}(Sitrans) = 100 - Error_{relativo}$$

(Ec 12)

# de exp.	Temp. (°C)	Veloc. de agit. (rpm)	Rel. molar alcohol:aceite	Rend. Exp. (%)	Rend. Sitrans (%)	Error rel. (%)	% ajuste
1	30	250	3:1	77	72	6,5	93,5
2	30	500	3:1	80	74	7,5	92,5
3	50	250	6:1	93	85	8,6	91,4
4	30	500	6:1	85	80	5,9	94,1
5	30	250	6:1	82	77	6,1	93,9
6	50	500	3:1	90	83	7,8	92,2
7	50	500	6:1	98	90	8,2	91,8
8	50	250	3:1	88	80	9,1	90,9
9	40	375	4:1	89	81	9	91
10	40	375	4:1	89	81	9	91
% total prom.						7,77	92,9
Desv. Estand.						1,23	1,23

Tabla 1. Comparación de los resultados experimentales del rendimiento del proceso con los del software Sitrans

Al comparar los rendimientos del proceso obtenidos por el software con los resultados experimentales, se observa cierta diferencia, debido a que dicha investigación no contó con el estudio de la cinética de la reacción y los valores supuestos para las constantes de velocidad y sus respectivas energías de activación. Por este motivo, fueron tomados de la literatura según Nouredini y Zhu (Nouredini y Zhu, 1997) para 50°C, lo que indica que el modelo propuesto por Arrhenius puede que no sea el más adecuado para la reacción estudiada en esta investigación. De acuerdo con Sarbatly (Sarbatly 2000), esta situación se puede presentar debido a que en algunos casos la ecuación de Arrhenius no es adecuada para modelar reacciones complejas o de múltiples etapas, como las desarrolladas en este estudio. En consecuencia, para calcular las energías de activación en estas situaciones, hay que utilizar ecuaciones modificadas de Arrhenius, que permitan un ajuste adecuado de las energías de activación con las constantes de velocidad a diferentes temperaturas.

Si bien existen numerosos estudios acerca de la cinética de la reacción de transesterificación de ésteres con alcohol, muy pocos involucran la utilización de aceites vegetales. A esta situación se le suma que los estudios existentes acerca de la cinética de la reacción de transesterificación de aceites vegetales y ácidos grasos, se caracterizan por sus resultados disímiles y controversiales. Por lo general, los métodos de estudio de esta cinética se han caracterizado por tener dos tipos de enfoques complementarios entre sí: el empírico, en el cual a partir de una serie de datos experimentales se busca establecer el orden de reacción; y el teórico, en el que se propone una serie de mecanismos de reacción y se deriva una serie de ecuaciones de reacción. Los dos enfoques son necesarios para establecer un modelo predictivo (Ávila y otros, 2008).

Sin embargo, hay que tener en cuenta que las reacciones de transesterificación de ácidos grasos no solo están influenciadas por factores cinéticos, sino además por otros como son las limitaciones de transferencia de masa y cambios de polaridad en la reacción (Nouredini y Zhu, 1997; Freedman y otros, 1984; Freedman y otros, 1986). Además, es posible que la existencia de reacciones competitivas como las de formación de metóxido y saponificación, altere la manera como ocurre la reacción.

Como se explicó anteriormente, una de las tareas más complicadas de esta operación, es lograr también una adecuada relación entre la variable tiempo y rendimiento del proceso, pues de ahí entonces estará determinado el adecuado equilibrio entre el análisis técnico y económico del mismo. Por ejemplo, de realizarse la operación para las condiciones del experimento 3, el programa da por finalizada la reacción a los 25,5 minutos, correspondiendo a un rendimiento de 85%. Si la reacción se extendiera por 60 minutos el rendimiento solo se incrementaría en un 2,5%, beneficio que no resulta significativo comparado con el alto costo económico al cual asciende la prolongación del tiempo de reacción. A escala de laboratorio, esto pudiera no influir mucho en el aspecto económico, pero, a escala industrial esto sí podría incurrir en grandes gastos innecesarios de electricidad y otros recursos. Aunque verdaderamente esta decisión queda a elección del usuario, pues todo depende de lo que se desee realizar.

Debido a que el objetivo que se persigue en esta investigación es el tratamiento a un residual de la industria alimentaria y no la producción en esencia de un biocombustible, la condición de parada se asumió para un tiempo al cual se obtiene un rendimiento aceptable.

En la figura 6 se muestran los resultados de algunas de las ventanas que ofrece el software para unas condiciones determinadas.

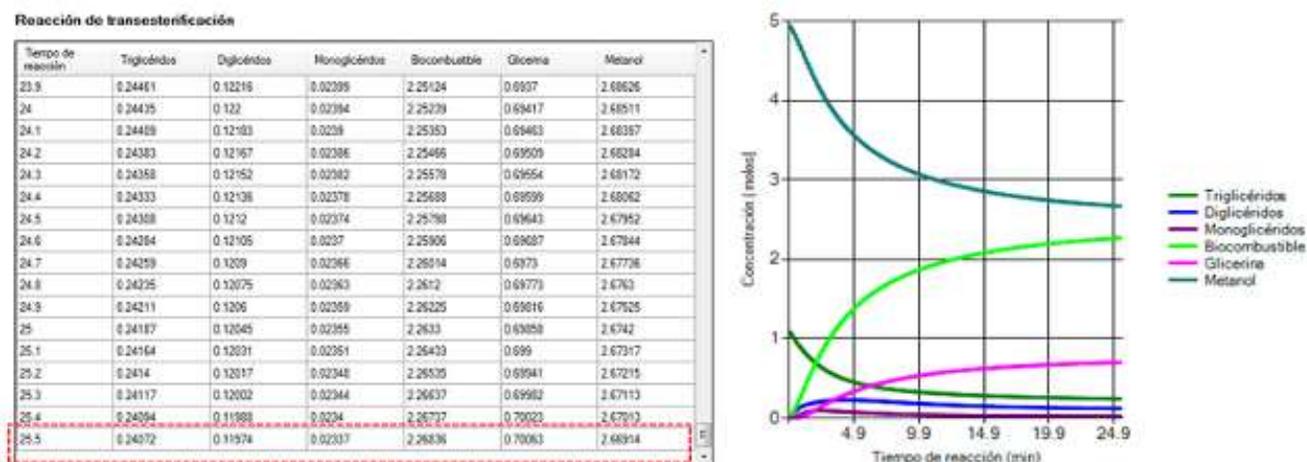


Figura 6. Ventana de resultados del software
Fuente: Elaboración propia

Como se puede observar en la figura 6 se presenta una curva típica de transesterificación del aceite vegetal usado a 50°C. En esta curva se muestra la tasa de consumo de los triglicéridos (TG) a medida que se forman los ésteres metílicos (B) y los productos intermedios, monoglicéridos (MG) y diglicéridos (DG). En general, la tasa de reacción de metilester se caracteriza por una rápida formación al inicio de la reacción, que luego va decreciendo hasta alcanzar el equilibrio. El aumento de la concentración de metilésteres está acompañado por un aumento en la formación de glicerina (GL). Sin embargo, la proporción relativa de formación de glicerina no siempre es la misma que la del metilester, lo cual se debe a la aparición de productos intermedios como monoglicéridos (MG) y diglicéridos (DG).

Teniendo en cuenta los elementos analizados, el software Sitrans puede ser utilizado para la simulación del proceso de transformación del aceite vegetal usado en un biocombustible con fines docentes e investigativo, con un porcentaje de ajuste promedio mayor de 90%. Esto confirma que el modelo computarizado, dentro de sus límites de aplicación, posee una precisión satisfactoria. Además, se verificó la programación de los modelos realizados, con el objetivo de garantizar que tanto la aplicación como su implementación, fueran correctas.

No obstante, para llegar a conclusiones más precisas, se hace necesario realizar en otras investigaciones estudios más rigurosos del proceso, con el objetivo de incluir parámetros que no se han considerado en esta investigación.

Para el estudio de las limitaciones se tuvo en cuenta cómo afectan los cambios que no se describen en las ecuaciones y que son parámetros de control en la operación del proceso.

Así, en el proceso estudiado los modelos desarrollados quedarían restringidos con las siguientes limitaciones:

- 1) Es aplicable a sistemas que procesan volumen igual a 1L de aceite.

2) El intervalo de trabajo de las velocidades de agitación es de 250 rpm a 500 rpm, así como el de temperatura es de 30°C a 55°C.

CONSIDERACIONES

1) Todos los reactivos se consideran anhidros.

2) Con relación a los productos del proceso se considera que el biocombustible contiene aproximadamente un 25% del metanol en exceso y la glicerina el 75% restante.

CONCLUSIONES

La complejidad de las reacciones que tienen lugar en el proceso de transformación del aceite vegetal usado en un biocombustible, así como la necesidad de profundizar en el conocimiento de los fenómenos que ocurren en este proceso de transformación, justificaron el uso de la simulación como una herramienta adecuada para dar respuesta a la problemática presentada.

Los modelos matemáticos obtenidos satisfacen la simulación del proceso de conversión de ácidos grasos en ésteres metílicos con respecto al tiempo. Sitrans constituye una herramienta útil para el estudio de la influencia de las variables del proceso: temperatura, velocidad de agitación y relación molar alcohol – aceite.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Ávila, A., Bula, A. y Sanjuán, H. (2008). "Cinética de la transesterificación de la oleína de palma africana con etanol". INCI v.33 n.3 Caracas. Recuperado de: www.scielo.org.ve/pdf/inci/v33n3/art15.pdf
2. Caballero Moreno, E.A., Vidal López, J.C., Morgan López, C.A., Espinosa Ovando, M. y Roblero González, I.A. (2012). "Aceites reciclados de cocina como materia prima de próxima generación para la obtención de biodiesel en Chiapas", Ide@s CONCYTEG, 7 (85), pp. 895-910.
3. Cruz, Y. (2013). "Diseño de un reactor para la obtención de un biocombustible a partir de aceite usado". Trabajo de diploma para optar por el título de ingeniero químico. Facultad de Ingeniería Química. ISPJAE, La Habana.
4. Freedman, B., Pryde E. y Mounts, T. (1984). *Variables affecting the yields of fatty esters from transesterified vegetable oils*. J. Am. Oil Chem. Soc. 61: 1638-1643.
5. Freedman, B., Butterfield, R. y Pryde, E. (1986) *Transesterification kinetics of soybean oil*. J. Am. Oil Chem. Soc. 63: 1375-1380.
6. Hanna, M. y MA, F (1998). *Biodiesel fuel from animal fat. Ancillary studies on transesterification of beef tallow*. Industrial Engineering Chemical Research. Págs. 3768-3771.
7. Hurtado Suatena, AC (2009). "La fritura de los alimentos: el aceite de fritura."Revista Perspectiva en Nutrición Humana". 11: 39 - 53. Recuperado de: <https://aprendeenlinea.udea.edu.co/revistas/index.php/nutricion/article/view/9390>
8. Noureddini, H. y Zhu, D. (1997). *Kinetics of transesterification of soybean oil*. J. Am. Oil Chem. Soc. 74: 1457-1463.
9. Reynosos J, y Monesterolo, V (2010). Aplicación de métodos de contribución por grupos para estimación de propiedades de biomoléculas de importancia en la industria. Universidad Tecnológica Nacional. Córdoba, Argentina.
10. Rojas, A.F y otros. (2009). "Variables de operación en el proceso de transesterificación de aceites vegetales: una revisión- catálisis química", Revista Ingeniería e investigación, Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia, Vol. 29, No. 3 (17-22).
11. Sarbatly, R. (2000). "On the phenomenon of variable activation energy for condensed phase reactions", Roy. Soc. Chem. / CNRS 24: 913-917.

12. Torossi, B.F.D. (2006). "Reacciones en contexto: la transesterificación en la producción de biodiesel a partir de aceites de fritura usados", Facultad de Bromatología, Universidad Nacional de Entre Ríos, Argentina.
13. Viera, B.R. (1988) "Modelación matemática para ingenieros químicos". Editorial Pueblo y Educación, La Habana.