



Estudio del proceso de transesterificación para la obtención de biodiesel a partir del aceite de palma en un reactor por lotes*

Warren Reategui Romero**, Fernando Javier Salas Barrera ***

Study of the transesterification process to obtain biodiesel from palm tree oil in a batch reactor

Estudo do processo de transesterificação para a obtenção de biodiesel a partir do azeite de palma num reator por lotes

RESUMEN

Introducción. Teóricamente para producir tres moles de etil-éster (biodiesel), deben reaccionar un mol de triglicérido con tres moles de alcohol etílico, pero este proceso se realiza en tres etapas: considerando la misma relación estequiométrica, primero una cadena de ácido graso se separa del triglicérido y se combina con el primer mol de alcohol etílico formando un mol de etil-éster y un mol de diglicérido. Luego una cadena de ácido graso se separa del diglicérido formado y se combina con el segundo mol de alcohol etílico formando una molécula de etil-éster y una molécula de monoglicérido, finalmente el monoglicérido formado se combina con el tercer mol de alcohol etílico formando una molécula de etil-éster y una molécula de glicerina, terminando de este modo el proceso de transesterificación. **Objetivo.** Estudiar el proceso de transesterificación del aceite de palma para la obtención de biodiesel en un reactor por lotes. **Materiales y métodos.** Para realizar el estudio mencionado, se

* Artículo derivado del proyecto de investigación "Estudio del proceso de transesterificación para la obtención de biodiesel a partir del aceite de palma en un reactor por lotes" financiado por la Universidad Nacional de Ingeniería (UNI) en las Facultades de Ingeniería Química y Textil (FIQT) y por la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana. ** Magister en Ciencias con Mención en Ingeniería de Petróleo y Gas Natural. Docente Facultad de Ingeniería Química y Textil, Universidad Nacional de Ingeniería. *** Ingeniero Químico. Docente de la Facultad de Ingeniería de Sistemas e Informática, Universidad Nacional de la Amazonía Peruana.

Correspondencia: Warren Reategui Romero, e-mail: wreategui@uni.edu.pe

Artículo recibido: 25/11/2012; Artículo aprobado: 01/06/2013

ha seleccionado un reactor por lotes como un volumen de control aplicándose en éste la ecuación general de transferencia de masa, ésta se simplificó teniendo en cuenta ciertas consideraciones aplicables al caso. Luego de la simplificación, la ecuación es aplicada a cada uno de los componentes que intervienen en el proceso de transesterificación (balance molar para cada componente), resultando un sistema de ecuaciones diferenciales (modelado fenomenológico) el cual es resuelto por el método de diferencias finitas, obteniéndose de esta manera las ecuaciones que relacionan la concentración versus el tiempo para cada uno de los componentes (solución del modelo). A manera de verificar las ecuaciones obtenidas, la misma ecuación general de transferencia de masa se aplica a una esfera hipotética que representa un elemento diferencial de la mezcla reaccionante, para esto se considera un $t=0$ donde se tiene las condiciones iniciales y luego para un $t=t$ donde la esfera estará compuesta por todos los componentes que intervienen en el proceso de transesterificación, de este último análisis se obtiene las mismas ecuaciones de la concentración versus el tiempo para cada uno de los componentes. **Resultados.** Se representa gráficamente la solución del modelo, donde se puede apreciar claramente las curvas de la concentración versus el tiempo para cada uno de los componentes, en estas curvas se puede observar en cuanto tiempo aproximadamente las reacciones químicas tienden a llegar al equilibrio. **Conclusión.** Mediante el modelado fenomenológico, se obtuvo la forma simplificada de la ecuación general de transferencia de masa para cada uno de los componentes del proceso de transesterificación en un reactor por lotes.

Palabras clave: transesterificación, diferencias finitas, biodiesel, triglicérido, alcohol, diglicérido, monoglicérido, glicerina.

ABSTRACT

Introduction. Theoretically, for producing three moles of ethyl-ester (biodiesel) there must be a reaction between one mole of triglyceride and three moles of ethyl alcohol, but this process is developed in three stages: considering the same stoichiometric relationship, in first place a fatty acid chain is separated from the triglyceride and is combined with the first mole of ethyl alcohol, forming an ethyl-ester mole and a diglyceride mole. Then, a fatty acid chain is separated from the diglyceride previously formed and is combined with the second mole of ethyl alcohol, forming an ethyl-ester molecule and a glycerine molecule, thus finishing the transesterification process. **Objective.** To study transesterification process in palm tree oil in order to obtain biodiesel in a batch reactor. **Materials and methods.** In order to perform the study aforementioned, a batch reactor with a volume control has been selected and a general equation of mass transfer has been applied. The equation was simplified taking into account certain considerations pertinent for the case. After the simplification, the equation was applied to every component that intervene in the transesterification process (mole balance for each component), obtaining a differential equations system (phenomena modeling) which was solved by following the finite differences method, thus obtaining the equations that relate concentration vs the time for each component. **Results.** The solution of the model is shown graphically, and the graphic clearly shows the concentration curves vs the time for each component. In these curves it can be observed the approximate time required by each chemical reactions to reach balance. **Conclusion.** By the use of the phenomenological modeling, a simplified form of the mass transference general equation was obtained for each component of the transesterification process in a batch reactor.

Key words: Transesterification, finite differences, biodiesel, triglyceride, alcohol, diglyceride, monoglyceride, glycerine.

RESUMO

Introdução. Teoricamente para produzir três moles de etil-éster (biodiesel), devem reagir um mol de triglicéride com três moles de álcool etílico, mas este processo se realiza em três etapas: considerando a mesma relação estequiométrica, primeiro uma corrente de ácido gorduroso se separa do triglicéride e se combina com o primeiro mol de álcool etílico formando um mol de etil-éster e um mol de diglicérido. Depois uma corrente de ácido gorduroso se separa do diglicérido formado e se combina com o segundo mol de álcool etílico formando uma molécula de etil-éster e uma molécula de monoglicérido, finalmente o monoglicérido formado se combina com o terceiro mol de álcool etílico formando uma molécula de etil-éster e uma molécula de glicerina, terminando deste modo o processo de transesterificação. **Objetivo.** Estudar o processo de transesterificação do azeite de palma para a obtenção de biodiesel num reator por lotes. **Materiais e métodos.** Para realizar

o estudo mencionado, selecionou-se um reator por lotes como um volume de controle aplicando-se neste a equação geral de transferência de massa, esta se simplificou tendo-se em conta certas considerações aplicáveis ao caso. Depois da simplificação, a equação é aplicada a cada um dos componentes que intervêm no processo de transesterificação (balanço molar para cada componente), resultando um sistema de equações diferenciais (modelado fenomenológico) o qual é resolvido pelo método de diferenças finitas, obtendo-se desta maneira as equações que relacionam a concentración contra o tempo para cada um dos componentes (solução do modelo). A maneira de verificar as equações obtidas, a mesma equação geral de transferência de massa se aplica a uma esfera hipotética que representa um elemento diferencial da mistura reagida, para isto se considera um onde se tem as condições iniciais e depois para um onde a esfera estará composta por todos os componentes que intervêm no processo de transesterificação, desta última análise se obtém as mesmas equações da concentración contra o tempo para cada um dos componentes. **Resultados.** Representa-se graficamente a solución do modelo, onde se pode apreciar claramente as curvas da concentración contra o tempo para cada um dos componentes, nestas curvas se pode observar quanto tempo aproximadamente as reações químicas tendem a chegar ao equilibrio. **Conclusão.** Mediante o modelado fenomenológico, obteve-se a forma simplificada da equação geral de transferência de massa para cada um dos componentes do processo de transesterificação num reator por lotes.

Palavras importantes: transesterificação, diferenças finitas, biodiesel, triglicéride, álcool, diglicérido, monoglicérido, glicerina.

INTRODUCCIÓN

El biodiesel es un combustible producido a partir de materias primas renovables, (aceites vegetales y/o grasas animales) que puede ser usado puro B100, o mezclado con diesel de petróleo en diferentes proporciones, el más común el B20, tiene 20% de biodiesel y 80% de diesel (Biocombustibles Colombia, 2007). El biodiesel es obtenido mediante un proceso llamado transesterificación que consiste en la reacción entre las grasas (triglicéridos) presentes en un aceite vegetal con un alcohol de cadena corta que generalmente es metanol o etanol dando como productos los ésteres (biodiesel) y la glicerina. La cantidad total de triglicéridos representan la mayor composición del aceite vegetal o la grasa animal.

Además, la formación de la base de la glicerina, inmiscible con los ésteres juega un papel importante en el desplazamiento de la reacción hacia la derecha, alcanzándose conversiones cercanas al 100% (Biocombustibles Colombia, 2007). El proceso de transesterificación en forma general se muestra en la figura 1, este proceso se desarrolla en tres etapas, reaccionando 1 mol del total de triglicéridos con 3 moles de alcohol, (aunque en la práctica se añade el doble de la cantidad requerida teóricamente para desplazar la reacción hacia la formación del éster). Los triglicéridos son convertidos consecutivamente en diglicéridos, monoglicéridos y glicerina, en cada reacción un mol de éster es liberado (Biocombustibles Colombia, 2007; Díaz y Sotolongo, 2007).

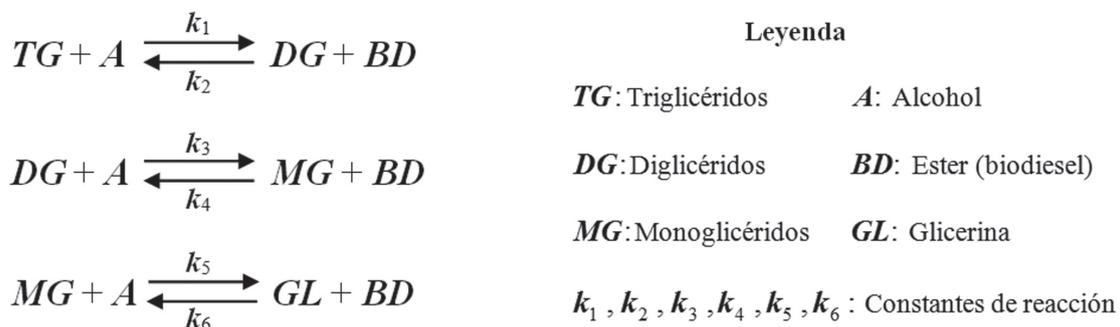


Figura 1. Esquema general del proceso de transesterificación

Para el presente trabajo, el estudio de la transesterificación está referido al aceite de palma con el alcohol etílico. De acuerdo a la tabla 1, el aceite de palma está compuesto por 88% en mol de triglicéridos (45% de tripalmitina, 33% de trioleina y 10% trilinoleina) y 12% en mol de un ácido graso libre (ácido palmítico). Como se puede ver en la figura 1 el ácido graso libre no reacciona con ningún otro componente.

Tabla 1. Composición química del aceite de palma

Componente	Fracción másica	Fracción molar	PM (kg/kmol)
Tripalmitina	0,4714	0,45	807,49
Trioleina	0,3752	0,33	885,61
Trilinoleina	0,1154	0,10	879,55
Ácido palmítico	0,0380	0,12	256,48
Total	1	1	774,35

Fuente: Biocombustibles Colombia, 2007; Díaz y Sotolongo, 2007; Zapata; et al, 2006; Gustav, 2006.

En el proceso de transesterificación interviene un catalizador básico (puede ser NaOH o KOH), el cual no se considera importante en el presente estudio, debido a que éste se agrega en una proporción muy pequeña, normalmente de 1 a 1,5% en peso con respecto a la cantidad de aceite. Además el catalizador se regenera al final del proceso de transesterificación. La utilización de un catalizador básico implica que el aceite y el alcohol deben ser anhidros para evitar que se produzca la saponificación y se formen jabones (Biocombustibles Colombia, 2007; Díaz y Sotolongo, 2007; Zapata; et al, 2006). Para el caso de la tripalmitina que es el componente principal de los triglicéridos en el aceite de palma, el proceso de transesterificación, es como se muestra en la figura 2. Este proceso es el mismo para cada uno de los triglicéridos del aceite de palma con respecto al alcohol etílico. Por ejemplo, si se tiene 10 moles de aceite de palma, según la proporción que se muestra en la tabla 1, el aceite contendrá la siguiente cantidad de triglicéridos y ácido graso libre: 4,5 moles de tripalmitina, 3,3 moles de trioleina, 1 mol de trilinoleina y 1,2 moles de ácido palmítico. Entonces, de acuerdo a la estequiometría la cantidad de alcohol etílico que reacciona teóricamente con cada uno de los triglicéridos es: 13,5 moles con la tripalmitina, 9,9 moles con la trioleina y 3 moles con la trilinoleina, resultando la cantidad total de alcohol etílico que se requiere para reaccionar con los 10 moles de aceite ($13,5 + 9,9 + 3$) moles = 26,4 moles, aunque en la práctica siempre se agrega el doble de la cantidad de alcohol requerido teóricamente.

MATERIALES Y MÉTODOS

Primeramente, se aplica la ecuación general de transferencia de masa para un componente *i* del proceso de transesterificación, considerando como volumen de control al reactor por lotes (figura 3), para lo cual se ha tenido en cuenta las siguientes consideraciones:

- No existe entrada y salida de materia al reactor durante todo el tiempo que dura el proceso de transesterificación.
- Se considera al reactor por lotes como un volumen de control adiabático e isotérmico.
- La mezcla reaccionante en el reactor por lotes está completamente agitada, de manera que la concentración de cada uno de los componentes es uniforme.
- El número de moles totales y el volumen de la mezcla reaccionante en el reactor por lotes son constantes, en consecuencia lo será la concentración total.
- Las concentraciones de cada uno de los componentes a excepción del ácido graso libre varían con el tiempo.

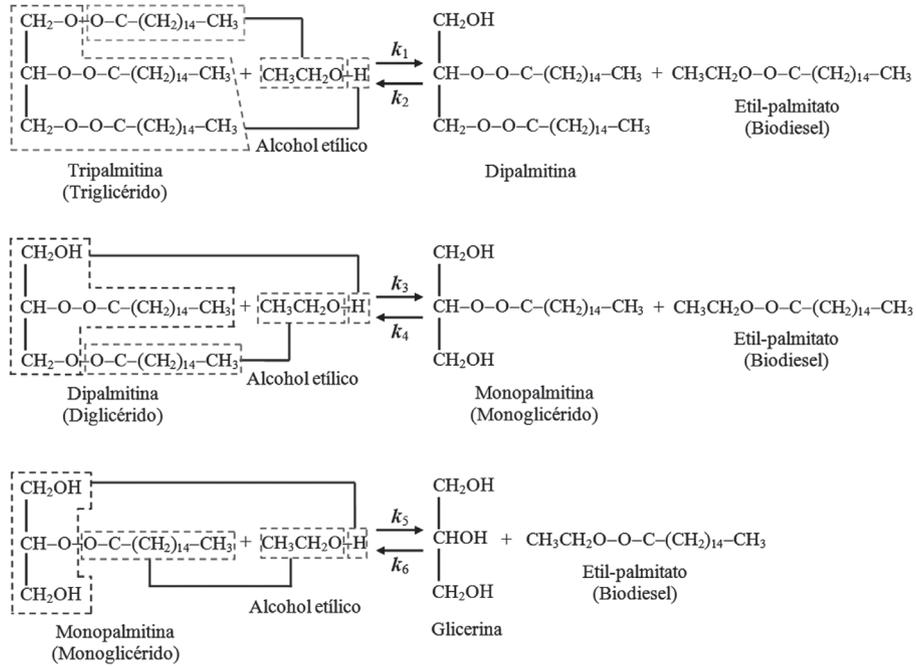


Figura 2. Esquema del proceso de transesterificación para la tripalmitina

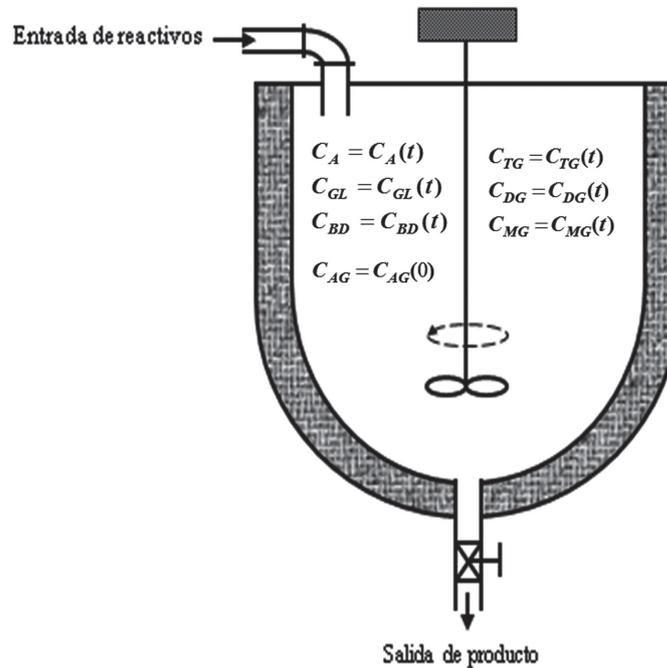


Figura 3. Reactor por lotes para el proceso de transesterificación

La ecuación general de transferencia de masa, para un componente i del proceso de transesterificación es como se muestra en la ecuación (1) (Bird, Stewart y Lightfoot, 1980; Carrasco, 2005).

$$\frac{dC_i}{dt} = -(\nabla \cdot C_i \bar{v}^*) - (\nabla \cdot \vec{j}_i^*) + R_i. \quad (1)$$

Donde:

C_i : (Concentración molar del componente i) mol/L.

\bar{v}^* : (Velocidad de difusión media del sistema)

\vec{j}_i^* : (Flux molar del componente i)

R_i : (Velocidad de generación de materia de i por unidad de volumen – Velocidad de consumo de materia de i por unidad de volumen) mol/L.s.

$\frac{dC_i}{dt}$: (Velocidad de acumulación de materia de i por unidad de volumen) mol/L-s.

$\nabla \cdot C_i \bar{v}^*$: (Velocidad neta de adición de materia de i por unidad de volumen debido a la convección) mol/L-s.

$(\nabla \cdot \vec{j}_i^*)$: (Velocidad neta de adición de materia de i por unidad de volumen debido a la difusión) mol/L-s.

Como: $\nabla \cdot (\vec{N}_i) = (\nabla \cdot C_i \bar{v}^*) + (\nabla \cdot \vec{j}_i^*)$. Entonces, la ecuación (1) queda de la siguiente forma:

$$\frac{dC_i}{dt} = -(\nabla \cdot \vec{N}_i) + R_i. \quad (2)$$

Por las consideraciones **a** y **c**, se tiene que $\nabla \cdot (\vec{N}_i) = 0$. Entonces, la ecuación simplificada para el componente i del proceso de transesterificación es:

$$\frac{dC_i}{dt} = R_i. \quad (3)$$

Todas las reacciones del proceso de transesterificación (figura 1), son de segundo orden. Teniendo esta consideración, la figura 1 y la ecuación (3), se obtiene las siguientes ecuaciones para cada uno de los componentes del proceso de transesterificación como se muestra desde la ecuación (4) hasta la ecuación (10). Para el caso de los triglicéridos, diglicéridos, monoglicéridos y biodiesel, la ecuación (3) se aplica considerando que cada uno de estos representa a un solo componente.

$$\frac{dC_{TG}}{dt} = -k_1 C_{TG} C_A + k_2 C_{DG} C_{BD}. \quad (4)$$

$$\frac{dC_A}{dt} = -k_1 C_{TG} C_A + k_2 C_{DG} C_{BD} - k_3 C_{DG} C_A + k_4 C_{MG} C_{BD} - k_5 C_{MG} C_A + k_6 C_{GL} C_{BD}. \quad (5)$$

$$\frac{dC_{DG}}{dt} = -k_3 C_{DG} C_A + k_4 C_{MG} C_{BD} + k_1 C_{TG} C_A - k_2 C_{DG} C_{BD}. \quad (6)$$

$$\frac{dC_{MG}}{dt} = -k_5 C_{MG} C_A + k_6 C_{GL} C_{BD} + k_3 C_{DG} C_A - k_4 C_{MG} C_{BD}. \quad (7)$$

$$\frac{dC_{GL}}{dt} = k_5 C_{MG} C_A - k_6 C_{GL} C_{BD}. \quad (8)$$

$$\frac{dC_{BD}}{dt} = k_1 C_{TG} C_A - k_2 C_{DG} C_{BD} + k_3 C_{DG} C_A - k_4 C_{MG} C_{BD} + k_5 C_{MG} C_A - k_6 C_{GL} C_{BD} \quad (9)$$

$$\frac{dC_{AG}}{dt} = 0 \quad (10)$$

El sistema de ecuaciones diferenciales de (4) a (10), representa el modelo fenomenológico para el proceso de transesterificación.

Es decir en $t=0$, solo estarán presentes los triglicéridos, el alcohol etílico y el ácido graso libre, siendo la concentración inicial de los demás componentes igual a cero. Ahora se realiza el mismo análisis que se realizó en el reactor por lotes, para esto se considera una esfera hipotética que representa un elemento diferencial de la mezcla reaccionante. Al igual que en el reactor por lotes, en $t=0$, la esfera hipotética sólo contendrá triglicéridos, alcohol etílico y ácido graso libre, siendo la concentración inicial de los demás componentes igual a cero. Para $t=t$, la esfera hipotética contendrá a todos los componentes del proceso de transesterificación (figura 4).

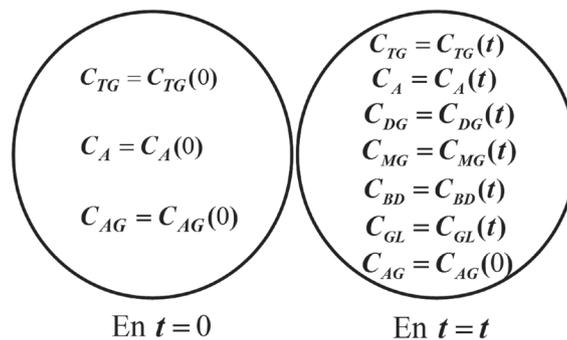


Figura 4. Esfera hipotética que representa un elemento diferencial de la mezcla reaccionante.

Para aplicar la **ecuación general de transferencia de masa** a la esfera hipotética, se ha considerado lo siguiente:

- f. No existe entrada y salida de materia a la esfera durante todo el tiempo que dura el proceso de transesterificación
- g. La concentración de los componentes es uniforme en toda la esfera.
- h. La concentración de cada uno de los componentes a excepción del ácido graso variaran con el tiempo.
- i. El volumen de la esfera permanece constante durante todo el tiempo que dura el proceso de transesterificación.

Si se aplicaría la ecuación general de transferencia de masa en la esfera hipotética, para cada uno de los componentes del proceso de transesterificación, se obtendría el mismo sistema de ecuaciones diferenciales de (4) a (10), puesto que se tiene las mismas consideraciones que para el reactor por lotes. El número de **Damköhler** se denota como D_{A0} y es un parámetro que relaciona la velocidad de reacción química con la velocidad de transferencia de masa (Bird, Stewart y Lightfoot, 1980; Carrasco, 2005; Fogler, 2008), mediante la siguiente ecuación:

$$D_{A0} = \frac{\text{Velocidad de reacción química}}{\text{Velocidad de transferencia de masa}} \quad (11)$$

Las reacciones químicas del proceso de transesterificación no son instantáneas, normalmente para que lleguen al equilibrio se tardan en promedio de 50 minutos a 1 hora. Es decir, las reacciones químicas son lentas y por ende la velocidad de reacción química será bastante pequeña en comparación con la velocidad de transferencia de masa (Zapata; et al, 2006, Bird, Stewart y Lightfoot, 1980; Carrasco, 2005; Fogler, 2008). En consecuencia el número de Damköhler tiende a cero. Esto hace que el proceso de transesterificación esté limitado por la velocidad de reacción química y no por la velocidad de transferencia de masa.

• Método de resolución del modelo

La resolución del sistema de ecuaciones diferenciales de (4) a (10), está basado en el método numérico de las **diferencias finitas** o **discretización** (en este caso la discretización explícita). Este método consiste en sustituir las derivadas por sus equivalentes en diferencias finitas (Fogler, 2008; Spiegel, 1983; Chapra y Canale, 2004; Edwards y Penney, 2001; Carrasco, 2011; Zill y Cullen, 2009).

Por ejemplo si se tiene la derivada $\frac{dC_i}{dt}$, su equivalente en diferencias finitas sería: $\frac{C_i|_{p+1} - C_i|_p}{\Delta t}$.

Donde $C_i|_{p+1}$ se denomina variable incrementada, $C_i|_p$ es la variable no incrementada o actual y Δt es el incremento de tiempo de p a $p+1$. Entonces, el tiempo t viene dado por la siguiente ecuación:

$$t = p\Delta t \quad (12)$$

Aplicando este criterio al sistema de ecuaciones diferenciales de (4) a (10), se obtiene las ecuaciones desde la (13) hasta la (19).

$$\frac{C_{TG}|_{p+1} - C_{TG}|_p}{\Delta t} = -k_1 C_{TG}|_p C_A|_p + k_2 C_{DG}|_p C_{BD}|_p \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_A|_{p+1} - C_A|_p}{\Delta t} = & -k_1 C_{TG}|_p C_A|_p + k_2 C_{DG}|_p C_{BD}|_p - k_3 C_{DG}|_p C_A|_p + k_4 C_{MG}|_p C_{BD}|_p - k_5 C_{MG}|_p C_A|_p \\ & + k_6 C_{GL}|_p C_{BD}|_p. \end{aligned} \quad (14)$$

$$\frac{C_{DG}|_{p+1} - C_{DG}|_p}{\Delta t} = -k_3 C_{DG}|_p C_A|_p + k_4 C_{MG}|_p C_{BD}|_p + k_1 C_{TG}|_p C_A|_p - k_2 C_{DG}|_p C_{BD}|_p \quad (15)$$

$$\frac{C_{MG}|_{p+1} - C_{MG}|_p}{\Delta t} = -k_5 C_{MG}|_p C_A|_p + k_6 C_{GL}|_p C_{BD}|_p + k_3 C_{DG}|_p C_A|_p - k_4 C_{MG}|_p C_{BD}|_p \quad (16)$$

$$\frac{C_{GL}|_{p+1} - C_{GL}|_p}{\Delta t} = k_5 C_{MG}|_p C_A|_p - k_6 C_{GL}|_p C_{BD}|_p \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_{BD}|_{p+1} - C_{BD}|_p}{\Delta t} = & k_1 C_{TG}|_p C_A|_p - k_2 C_{DG}|_p C_{BD}|_p + k_3 C_{DG}|_p C_A|_p - k_4 C_{MG}|_p C_{BD}|_p \\ & + k_5 C_{MG}|_p C_A|_p - k_6 C_{GL}|_p C_{BD}|_p. \end{aligned} \quad (18)$$

$$C_{AG}|_{p+1} = C_{AG}|_p. \quad (19)$$

Despejado las concentraciones evaluadas en $p+1$, se tiene:

$$C_{TG}|_{p+1} = (1 - k_1 \Delta t C_A|_p) C_{TG}|_p + k_2 \Delta t C_{DG}|_p C_{BD}|_p. \quad (20)$$

$$C_A|_{p+1} = (1 - k_1 C_{TG}|_p) C_A|_p \Delta t - k_3 C_{DG}|_p C_A|_p \Delta t - k_5 C_{MG}|_p C_A|_p \Delta t + k_2 C_{DG}|_p C_{BD}|_p \Delta t + k_4 C_{MG}|_p C_{BD}|_p \Delta t + k_6 C_{GL}|_p C_{BD}|_p \Delta t. \quad (21)$$

$$C_{DG}|_{p+1} = (1 - k_2 \Delta t C_{BD}|_p) C_{DG}|_p - k_3 \Delta t C_A|_p C_{DG}|_p + k_1 \Delta t C_{TG}|_p C_A|_p + k_4 \Delta t C_{MG}|_p C_{BD}|_p. \quad (22)$$

$$C_{MG}|_{p+1} = (1 - k_4 \Delta t C_{BD}|_p) C_{MG}|_p - k_5 \Delta t C_A|_p C_{MG}|_p + k_3 \Delta t C_{DG}|_p C_A|_p + k_6 \Delta t C_{GL}|_p C_{BD}|_p. \quad (23)$$

$$C_{GL}|_{p+1} = (1 - k_6 \Delta t C_{BD}|_p) C_{GL}|_p + k_5 \Delta t C_{MG}|_p C_A|_p. \quad (24)$$

$$C_{BD}|_{p+1} = (1 - k_2 \Delta t C_{DG}|_p) C_{BD}|_p - k_4 \Delta t C_{MG}|_p C_{BD}|_p - k_6 \Delta t C_{GL}|_p C_{BD}|_p + k_1 \Delta t C_{TG}|_p C_A|_p + k_3 \Delta t C_{DG}|_p C_A|_p + k_5 \Delta t C_{MG}|_p C_A|_p. \quad (25)$$

Teniéndose en cuenta las fracciones molares de los triglicéridos y el ácido palmítico que se muestran en la tabla I, se obtiene las siguientes ecuaciones para los componentes:

$$C_{\text{Tripalmitina}} = x_{\text{Tripalmitina}} \frac{C_{TG}}{x_{TG}} = \frac{0,45}{0,88} C_{TG}. \quad (26)$$

$$C_{\text{Trioleina}} = x_{\text{rioleina}} \frac{C_{TG}}{x_{TG}} = \frac{0,33}{0,88} C_{TG}. \quad (27)$$

$$C_{\text{Trilinoleina}} = x_{\text{Trilinoleina}} \frac{C_{TG}}{x_{TG}} = \frac{0,10}{0,88} C_{TG}. \quad (28)$$

$$C_{\text{Dipalmitina}} = \frac{0,45}{0,88} C_{DG}. \quad (29)$$

$$C_{\text{Diroleina}} = \frac{0,33}{0,88} C_{DG}. \quad (30)$$

$$C_{\text{Dilinoleina}} = \frac{0,10}{0,88} C_{DG}. \quad (31)$$

$$C_{\text{Monopalmitina}} = \frac{0,45}{0,88} C_{MG}. \quad (32)$$

$$C_{\text{Monoleina}} = \frac{0,33}{0,88} C_{MG}. \quad (33)$$

$$C_{\text{Monolinoleina}} = \frac{0,10}{0,88} C_{MG} \quad (34)$$

$$C_{\text{Etil-palmitato}} = \frac{0,45}{0,88} C_{BD} \quad (35)$$

$$C_{\text{Etil-oleato}} = \frac{0,33}{0,88} C_{BD} \quad (36)$$

$$C_{\text{Etil-linoleato}} = \frac{0,10}{0,88} C_{BD} \quad (37)$$

Donde:

x_{TG} : Fracción molar del total de triglicéridos en el aceite de palma.

$C_{\text{Tripalmitina}}$, $x_{\text{Tripalmitina}}$: Concentración molar en la mezcla reaccionante y fracción molar en el aceite de palma para la tripalmitina, respectivamente.

$C_{\text{Trioleina}}$, $x_{\text{Trioleina}}$: Concentración molar en la mezcla reaccionante y fracción molar en el aceite de palma para la trioleina, respectivamente.

$C_{\text{Trilinoleina}}$, $x_{\text{Trilinoleina}}$: Concentración molar en la mezcla reaccionante y fracción molar en el aceite para la trilinoleina, respectivamente.

$C_{\text{Dipalmitina}}$, C_{Dioleina} , $C_{\text{Dilinoleina}}$: Concentración molar, de la dipalmitina, dioleina y dilinoleina en la mezcla reaccionante, respectivamente.

Se debe notar que la composición de la tripalmitina en los triglicéridos, es igual a: la composición de la dipalmitina en los diglicéridos, a la composición de la monopalmitina en los monoglicéridos y a la composición del etil-palmitato en el biodiesel.

Sean V_{Mezcla} , V_{Aceite} y V_A los volúmenes de la mezcla reaccionante, aceite de palma y el alcohol etílico, respectivamente, entonces:

$$V_{\text{Mezcla}} = V_{\text{Aceite}} + V_A \quad (38)$$

El volumen y la masa del aceite se puede expresar:

$$V_{\text{Aceite}} = \frac{m_{\text{Aceite}}}{\rho_{\text{Aceite}}} \quad (39)$$

La masa de aceite de palma

$$m_{\text{Aceite}} = N_{\text{Aceite}} PM_{\text{Aceite}} \quad (40)$$

Remplazando la ecuación (40) en (39):

$$V_{\text{Aceite}} = \frac{N_{\text{Aceite}} PM_{\text{Aceite}}}{\rho_{\text{Aceite}}} \quad (41)$$

Donde:

m_{Aceite} , ρ_{Aceite} , N_{Aceite} , PM_{Aceite} : Masa, densidad, número de moles y masa molecular del aceite de palma.

Además: $N_{TG} = x_{TG} N_{Aceite}$.

Reemplazando N_{Aceite} en la ecuación (41), se tiene:

$$V_{Aceite} = \frac{N_{TG} PM_{Aceite}}{x_{TG} \rho_{Aceite}}. \quad (42)$$

N_{TG} : Número de moles del total de triglicéridos en el aceite de palma.

Procediendo de la misma forma, para el alcohol etílico se tendría:

$$V_A = \frac{N_A PM_A}{\rho_A}. \quad (43)$$

Por la relación estequiométrica entre el alcohol y los triglicéridos, el número de moles del alcohol etílico agregado al aceite es: $N_A = 3N_{TG}$ Entonces la ecuación (43) queda:

$$V_A = \frac{3N_{TG} PM_A}{\rho_A}. \quad (44)$$

Reemplazando las ecuaciones (42) y (44) en la ecuación (38)

$$V_{Mezcla} = \frac{N_{TG} PM_{Aceite}}{x_{TG} \rho_{Aceite}} + \frac{3N_{TG} PM_A}{\rho_A}. \quad (45)$$

$$V_{Mezcla} = N_{TG} \left(\frac{PM_{Aceite}}{x_{TG} \rho_{Aceite}} + \frac{3PM_A}{\rho_A} \right).$$

$$\frac{N_{TG}}{V_{Mezcla}} = \frac{1}{\left(\frac{PM_{Aceite}}{x_{TG} \rho_{Aceite}} + \frac{3PM_A}{\rho_A} \right)}. \quad (46)$$

Donde ρ_A y PM_A son la densidad y masa molecular del alcohol etílico, respectivamente.

La concentración inicial de los triglicéridos en la mezcla reaccionante es:

$$C_{TG}(0) = \frac{N_{TG}}{V_{Mezcla}} = \frac{1}{\left(\frac{PM_{Aceite}}{x_{TG} \rho_{Aceite}} + \frac{3PM_A}{\rho_A} \right)}. \quad (47)$$

La concentración inicial del alcohol etílico

$$C_A(0) = 3C_{TG}(0). \quad (48)$$

Realizando el mismo análisis, se determina que la concentración de ácido graso es:

$$C_{AG}(0) = C_{AG}(t) = \frac{x_{AG}}{x_{TG}} C_{TG}. \quad (49)$$

Para que el sistema de ecuaciones de (19) a (25) converja, se debe dar un valor bien pequeño a Δt . Este procedimiento se puede realizar en Excel programando estas ecuaciones y tratando de que la concentración total permanezca constante durante todo el proceso de transesterificación. En este caso, el valor adecuado para Δt es 2s. Para determinar el valor de las concentraciones en $p+1$, es necesario que se conozcan las condiciones iniciales, el valor de Δt y los valores de las constantes de reacción, las cuales se muestran en la tabla 2 a 50°C. Las concentraciones obtenidas para cada uno de los componentes aplicando las ecuaciones de (19) a (25), se grafican versus el tiempo, para el cual se ha utilizado una hoja de cálculo de Excel, estas gráficas se muestran desde la figura 5 hasta la figura 9. Como se puede observar en la ecuación (47), Para determinar la concentración inicial del total de los triglicéridos en la mezcla reaccionante, es necesario conocer las propiedades físicas del aceite de palma y del alcohol etílico, estas se muestran en la tabla 3.

Tabla 2. Valores para las constantes de reacción a 50°C [3, 5, 6, 7].

Constantes de reacción	L/mol-min
k_1	0,05
k_2	0,11
k_3	0,215
k_4	1,228
k_5	0,242
k_6	0,007

Tabla 3. Propiedades físicas del aceite de palma y el alcohol etílico.

Componente	Masa molecular kg/k mol	Densidad kg/m ³
Aceite de palma	774,35	880
Alcohol etílico	46,08	789

Fuente: Zapata; et al, 2006; Gustav, 2006.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Al aplicar las ecuaciones (47), (48) y (49) con los datos de la tabla 3, se obtiene las siguientes condiciones iniciales:

$$C_{TG}(0) = 0,8550 \text{ mol/L}, C_A(0) = 2,5529 \text{ mol/L}, C_{AG}(0) = 0,1160 \text{ mol/L}.$$

Las figuras 1 y 2 muestran que las tres etapas del proceso de transesterificación son reacciones químicas en doble sentido, de manera que los componentes que intervienen en el proceso de transesterificación se generan y consumen a la vez. En la figura 5 es notorio que la concentración de los triglicéridos y el alcohol etílico disminuyen con el tiempo, esto se debe a que estos componentes se consumen a una velocidad mayor a la que se generan, es decir, las curvas de concentración son decrecientes. Para el caso de la glicerina y los etil-ésteres, la concentración aumenta con el tiempo, debido a que se generan a una velocidad mayor a la que se consumen. Los diglicéridos y monoglicéridos se generan a una velocidad mayor a la que se consumen aproximadamente hasta tiempos de 538 s y 270 s, respectivamente y después se consumen a una velocidad mayor a la que se generan (curvas de concentración decrecientes). Como los triglicéridos están compuestos por tres componentes, los diglicéridos, monoglicéridos y etil-ésteres también estarán compuestos por tres componentes, tal como se indica en las figuras 6, 7, 8 y 9. Las curvas de concentración para la tripalmitina, trioleína y trilinoleína son decrecientes, es decir estos componentes se consumen a una velocidad mayor a

la que se generan. Las curvas de concentración para el etil-palmitato, etil-oleato y etil-linoleato son crecientes, es decir estos componentes se generan en una velocidad mayor a la que se consumen. También se puede notar en las figuras 5, 6, 7, 8 y 9, que el equilibrio de las reacciones se tiende a alcanzar a partir de los 3000 s aproximadamente.

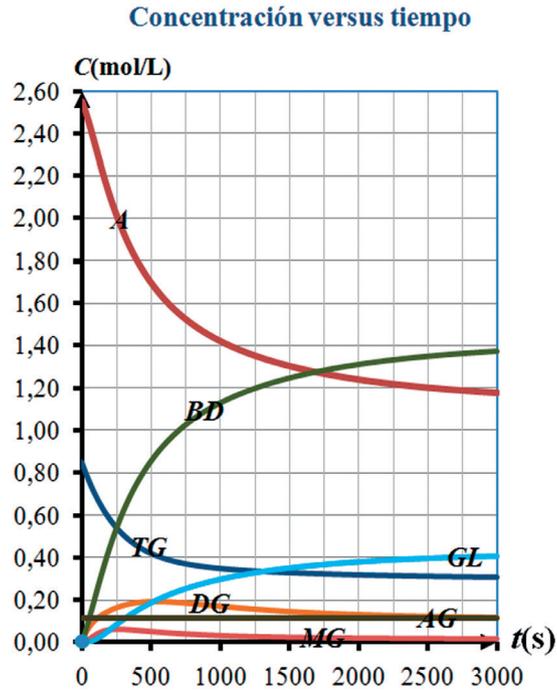


Figura 5. Representación gráfica de la concentración versus el tiempo, para los componentes TG, A, DG, MG, GL, BD, y AG.

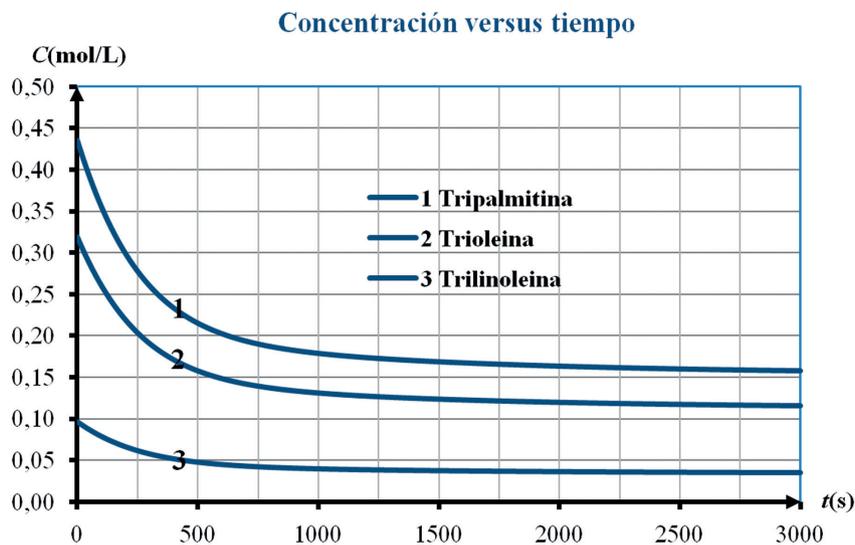


Figura 6. Representación gráfica de la concentración versus el tiempo, para los triglicéridos.

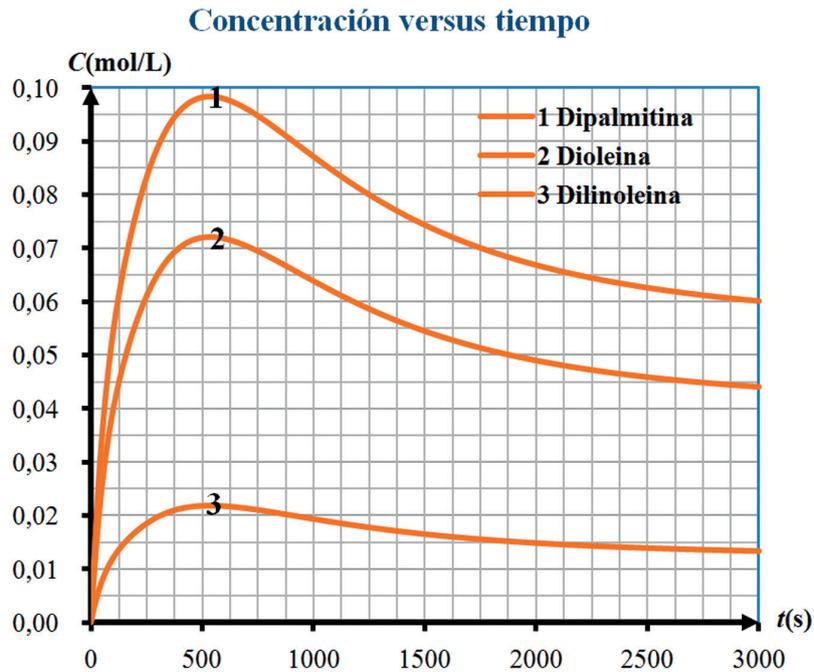


Figura 7. Representación gráfica de la concentración versus el tiempo, para los diglicéridos

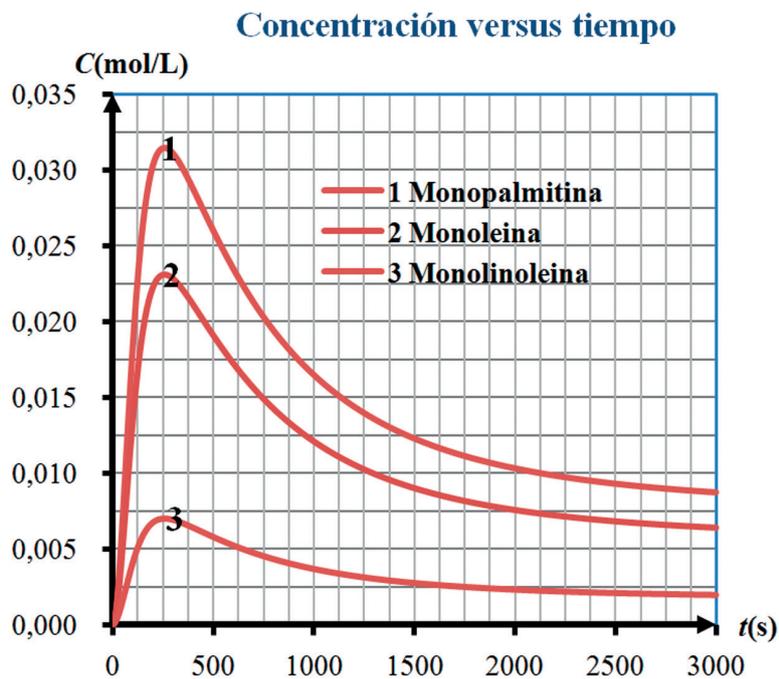


Figura 8. Representación gráfica de la concentración versus el tiempo, para los monoglicéridos

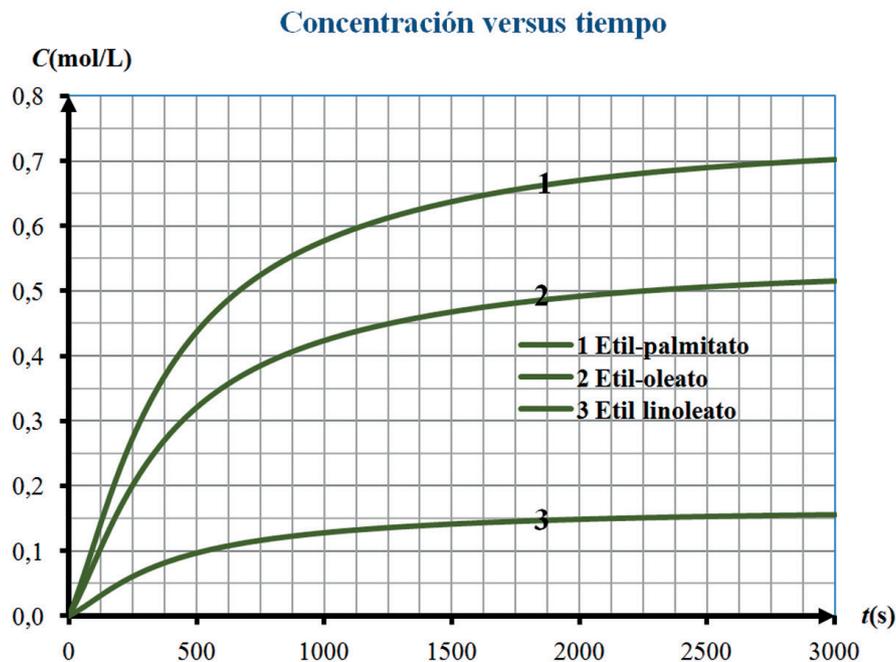


Figura 9. Representación gráfica de la concentración versus el tiempo, para los etil-ésteres

CONCLUSIONES

Mediante el modelado fenomenológico, se obtuvo la forma simplificada de la ecuación general de transferencia de masa para cada uno de los componentes del proceso de transesterificación en un reactor por lotes, esto se puede ver desde las ecuaciones (4) a (10). Se aplicó el método de diferencias finitas dando solución al sistema de ecuaciones diferenciales que representan el modelo fenomenológico del proceso de transesterificación, obteniéndose de esta forma las ecuaciones que relacionan la concentración versus el tiempo para cada uno de los componentes, esto se puede ver desde las ecuaciones (19) a (25). Se representó gráficamente la concentración versus el tiempo para cada uno de los componentes que intervienen en el proceso de transesterificación, esto se puede ver en las figuras 5, 6, 7, 8 y 9. Al terminar el proceso de transesterificación se puede notar que gran parte del alcohol etílico sigue presente, con respecto a esto se recomienda realizar otros estudios donde se muestre la metodología para recuperar al máximo este alcohol, de esta forma el biodiesel obtenido sería más puro.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a la Universidad Nacional de Ingeniería (UNI) - Facultad de Ingeniería Química y Textil (FIQT Lab N° 11) y a la Universidad Nacional de la Amazonía Peruana (UNAP) – Facultad de Ingeniería de Sistemas e Informática (FISI Laboratorio I de Informática) por el apoyo brindado a este proyecto.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Biocombustibles Colombia. (2007). *Primer Seminario-Taller sobre Biocombustibles. Biodiesel-Bioetanol*. Bogotá-Colombia: Biocombustibles Col.
- Bird, R.; Stewart, W. E. y Lightfoot, E. N. (1980). *Transport Phenomena*. Wisconsin-Madison: John Wiley & Sons, Inc. Segunda edición. 905p.
- Carrasco, L. (2005). *Transferencia de cantidad de movimiento, calor y masa*. Editorial San Marcos. Primera edición. 631p.
- Carrasco, L. (2011). *Métodos numéricos aplicados a la ingeniería*. Editorial Macro. Cuarta edición.
- Chapra, C. E. y Canale, R. P. (2004). *Métodos numéricos para ingeniería*. México: Editorial McGraw-Hill. Cuarta edición.
- Díaz, A. y Sotolongo J. (2007). *Estudio comparativo de la solución del sistema de ecuaciones diferenciales de la reacción de transesterificación mediante los métodos de discretización explícito e implícito*. Cuba: Universidad de Oriente. Centro de Aplicaciones Tecnológicas para el desarrollo sostenible.
- Edwards, C. H. y Penney, D. E. (2001). *Ecuaciones diferenciales*. México: Editorial Prentice Hall. Segunda edición.
- Fogler, H. S. (2008). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. México: Editorial Prentice Hall Cuarta edición. 968p.
- Gustav, H. (2006). *Oleochemische Erzeugnisse. Seit 1897*. Aceite de palma refinado.
- Spiegel, M. R. (1983). *Ecuaciones diferenciales aplicadas*. México: Editorial Prentice Hall.
- Zapata, C.; et al. (2006). *Producción de biodiesel a partir del aceite de palma: diseño y simulación de procesos continuos*. Universidad Pontificia-Bolivariana. Medellín-Colombia.
- Zill, D. y Cullen, M. (2009). *Ecuaciones diferenciales con valores de frontera*. México: Cengage Learning editores. Séptima edición.