



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA
E INDUSTRIAS EXTRACTIVAS

**“SIMULACIÓN DE UN REACTOR QUÍMICO PARA LA
OBTENCIÓN DE BIODIÉSEL A PARTIR DE LA
TRANSESTERIFICACIÓN DE ACEITE DE JATROPHA”**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO INDUSTRIAL

PRESENTA
ZUÑIGA MOBARAK MAXIMILIANO

ASESOR
DR. ROMÁN RAMÍREZ LÓPEZ





SECRETARIA
DE
EDUCACION PUBLICA

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E INDUSTRIAS EXTRACTIVAS
DEPARTAMENTO DE EVALUACIÓN Y SEGUIMIENTO ACADÉMICO



T-035-14

México, D. F., 31 de marzo del 2014.

Al C. Pasante:
MAXIMILIANO ZÚÑIGA MOBARAK

Boleta:
2010320259

Carrera:
IQI

Generación:
2009-2013

Mediante el presente se hace de su conocimiento que este Departamento acepta que el C. **Dr. Román Ramírez López**, sea orientador en el tema que propone usted desarrollar como prueba escrita en la opción **Tesis Individual**, con el título y contenido siguiente:

“Simulación de un reactor químico para la obtención de biodiésel a partir de la transesterificación de aceite de jatropha”.

- Resumen.
- Introducción.
- I.- Generalidades.
- II.- Simulación de procesos.
- III.- Uso de biodiésel en el transporte público.
- IV.- Simulación de un reactor CSTR para la producción de biodiésel.
- V.- Análisis de resultados.
- Conclusiones.
- Referencias bibliográficas.

Se concede un plazo máximo de un año, a partir de esta fecha, para presentarlo a revisión por el Jurado asignado.

Ing. Antonio Salvador Pérez Cárdenas
Presidente de la Academia de
Fisicoquímica.

Dr. Román Ramírez López
Director de Tesis
Ced. Prof. 1838145

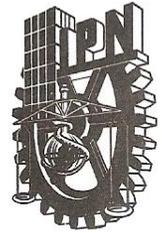
Lic. Guillermo Alberto de la Torre Arteaga
Jefe del Departamento de Evaluación y
Seguimiento Académico

Dr. Ricardo Gerardo Sánchez Alvarado
Subdirector Académico Interino



SECRETARIA
DE
EDUCACION PUBLICA

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
ESCUELA SUPERIOR DE INGENIERÍA QUÍMICA E INDUSTRIAS EXTRACTIVAS
DEPARTAMENTO DE EVALUACIÓN Y SEGUIMIENTO ACADÉMICO



T-035-14

México, D. F., 07 de abril del 2014.

Al C. Pasante:
MAXIMILIANO ZÚÑIGA MOBARAK
PRESENTE

Boleta:
2010320259

Carrera:
IQI

Generación:
2009-2013

Los suscritos tenemos el agrado de informar a usted, que habiendo procedido a revisar el borrador de la modalidad de titulación correspondiente, denominado:

“Simulación de un reactor químico para la obtención de biodiésel a partir de la transesterificación de aceite de jatropa”.

encontramos que el citado Trabajo de **Tesis Individual**, reúne los requisitos para autorizar el Examen Profesional y **PROCEDER A SU IMPRESIÓN** según el caso, debiendo tomar en consideración las indicaciones y correcciones que al respecto se le hicieron.

Atentamente

JURADO

Dr. Román Ramírez López
Presidente

Ing. Itzel Gutiérrez González
Vocal

Dr. Gustavo Pérez López
Secretario

c.c.p.- Expediente
GATA/rcr



AGRADECIMIENTOS

A DIOS:

Por la vida y por permitirme llegar a estas alturas de ella, por ser parte de mí día a día y especialmente por todo lo que me ha dado.

AL INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL:

Por ser mi Alma Máter, por su incondicionalidad y porque gracias a él soy lo que soy el día de hoy.

A LA ESIQIE:

Por forjar todas las bases y conocimientos adquiridos, porque gracias a ella se han abierto grandes puertas del mundo. Porque sus instalaciones además de ser centro de estudios, son centro de convivencia donde conocí verdaderos amigos y colegas.

AL DR. RÓMAN RAMÍREZ LÓPEZ:

Por la oportunidad de realizar este trabajo de investigación, por las facilidades, consejos y apoyo en su desarrollo. Además por ser un pilar y persona a seguir dentro de la Institución.

AL DR. SEGIO ODIN FLORES Y AL M. en C. ÁLVARO DE JESÚS CRUZ:

Por la amistad, por todos los buenos consejos y el apoyo dado dentro de la transición Escuela-Trabajo. Porque gracias a ellos soy un hombre justo y de bien.

POR ULTIMO Y NO MENOS IMPORTANTE A LUPITA:

Por todo el apoyo, orientación y consejos dados en el proceso de elaboración de este trabajo, además por tu amistad, ejemplo y por todos los momentos juntos. Porque sin ti hubiera sido imposible.



DEDICATORIAS

A MIS PADRES:

Marce y Pilar, por ser los pilares de esta formación, por ser ejemplo de la vida. Por el esfuerzo y sacrificio que realizaron para poder llegar hasta este punto. Así mismo por darnos todo lo que necesitamos a mi hermano y a mí. Porque gracias a ustedes somos hombres de bien. Los amo.

A MI HERMANO:

Por ser un amigo incondicional, por pasar todos esos momentos juntos y ayudarme cuando más lo necesito.

A MI ABUELO EDMUNDO MOBARAK DAGER (d.e.p.):

Por ser parte primordial para que yo llegara hasta este punto, por sus sabios consejos y momentos felices. Porque siempre voy a ser tu Ingeniero.

A MI FAMILIA:

Especialmente a mis tías: Reyna, Gaby y Macarena. Por todo el apoyo recibido y por creer siempre en mí.

Y FINALMENTE A TODAS AQUELLAS PERSONAS QUE DIRECTA O INDIRECTAMENTE ME OFRECIERON SU APOYO:

Especialmente a Irma Romero y Familia. Porque gracias a ustedes he llegado hasta aquí, porque gracias a su amistad y consejos siempre seré un hombre de principios. Infinitas Gracias.



ÍNDICE

ÍNDICE DE TABLAS	1
ÍNDICE DE FIGURAS	2
RESUMEN	3
INTRODUCCIÓN	5
1. CAPITULO I. GENERALIDADES	8
1.1 Biodiésel	8
1.2 Historia del Biodiésel	9
1.3 Propiedades del Biodiésel	11
1.3.1 Comparación de las Especificaciones del Diésel y Biodiésel	12
1.3.2 Ácidos Grasos presentes en el Biodiésel	13
1.4 Métodos de Obtención de Biodiésel	14
1.4.1 Transesterificación	14
1.4.1.1 Transesterificación Utilizando Bases	16
1.4.1.2 Transesterificación con Catalizador Ácido	17
1.4.1.3 Transesterificación Enzimática	17
1.4.2 Factores que Intervienen en la Reacción de Transesterificación	18
1.4.2.1 Presencia de Ácidos Grasos Libres (AGL) y Humedad	18
1.4.2.2 Tipo de Catálisis y Concentración del Catalizador	19
1.4.2.3 Relación Molar Alcohol-Aceite	20
1.4.2.4 Temperatura y Tiempo de reacción	21
1.4.2.5 Métodos Analíticos Empleados en la Reacción de Transesterificación	22
1.5 Materias Primas para la Producción de Biodiésel	23
1.5.1 Colza (Brassica Napus L.)	24
1.5.2 Soya (Glycine Max)	25
1.5.3 Jatropha (Jatropha Curcas)	26
1.5.4 Girasol (Helianthus Annuus L.)	28
1.5.5 Palma Aceitera (Elaeis Guineensis)	29
1.6 Ventajas y Desventajas del Empleo de Biodiésel	30
1.6.1 Ventajas	30
1.6.2 Desventajas	31



1.7	Diferencias entre Biodiésel y Diésel	31
1.7.1	Problemas del Biodiésel	31
1.7.2	Ventajas del Biodiésel frente al Diésel	38
1.8	Aplicaciones	39
1.9	Jatropha	41
1.9.1	Características de la Jatropha	41
1.9.1.1	Composición de la Semilla de Jatropha	42
1.9.1.2	Variedades de la Jatropha	42
1.9.2	Requerimientos Agroclimáticos	43
1.9.3	Ventajas del Cultivo de Jatropha	43
1.9.4	Toxicidad	44
1.9.5	Proceso de Producción	45
1.9.5.1	Extracción del Aceite	45
1.9.6	Subproductos y Beneficios de la Jatropha	47
1.10	Reactor CSTR	47
1.10.1	Descripción del Reactor CSTR	47
1.10.2	Características	48
1.10.3	Funcionamiento y Proceso del Reactor CSTR	49
1.10.4	Reactor PFR	50
1.10.5	Ventajas del Diseño de un Reactor CSTR	51
1.10.6	Campos de aplicación del Reactor CSTR	51
2.	CAPITULO II. SIMULACIÓN DE PROCESOS	52
2.1.	Análisis de Procesos Industriales	53
2.2.	Ventajas del Análisis y Simulación de Procesos Industriales	53
2.3.	Simuladores Comerciales de Procesos	55
2.3.1.	Selección del Método Termodinámico en un Simulador	56
2.4.	PROII	57
2.4.1.	Características Generales de PROII	58
2.4.2.	Aplicaciones de la Simulación en PROII	58
2.4.3.	Industrias que pueden ser Simuladas en PROII	58
2.4.3.1.	Procesamiento de Gas y Petróleo	59
2.4.3.2.	Refinación	59
2.4.3.3.	Petroquímica Básica	60
2.4.4.	Operaciones y Equipos Incluidos en PROII	60



3. CAPITULO III. USO DE BIODIÉSEL EN EL TRANSPORTE PÚBLICO	61
3.1. Ficha Técnica Autobús Volvo 7300	63
4. CAPITULO IV. SIMULACIÓN DE UN REACTOR CSTR PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL	67
4.1. Etapas en la Producción de Biodiésel	67
4.2. Descripción Detallada del Proceso	68
4.3. Cinética Homogénea del Proceso	70
4.4. Simulación del Reactor CSTR en PROII	71
4.4.1. Pasos de la Simulación en PROII	72
4.4.1.1. Inicio de la Simulación	72
4.4.1.2. Selección de los Compuestos y Calculo de Propiedades	73
4.4.1.3. Selección del Método Termodinámico	77
4.4.1.4. Estructuración del Proceso	78
4.4.1.5. Especificación de la Alimentación y sus Propiedades Termodinámicas	79
4.4.1.6. Declaración de las Reacciones	80
4.4.1.7. Especificación del Reactor y Cinética de las Reacciones	82
4.4.1.8. Resultados Obtenidos en la Simulación Iterativa	85
ANÁLISIS DE RESULTADOS	87
4.5. Alimentación de Exceso de Metanol al Reactor	87
4.6. Alimentación de NaOH al Reactor	89
4.7. Efecto de la Temperatura de Reacción	90
4.8. Volumen del Reactor y Tiempo Espacial	91
4.9. Cumplimiento de Especificaciones ASTM	94
CONCLUSIONES	95
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	98



ÍNDICE DE TABLAS

	Pág	
Tabla 1.1	Comparativa de Propiedades del Biodiésel y Diésel.	11
Tabla 1.2	Especificaciones para el uso de Diésel y Biodiésel.	12
Tabla 1.3	Estructura de Ácidos Grasos presentes en el Biodiésel.	14
Tabla 1.4	Contenido de Ácidos Grasos en Aceites Vegetales.	23
Tabla 1.5	Composición del Grano de Soya.	25
Tabla 1.6	Composición de Ácidos Grasos Saturados e Insaturados en Aceite de Jatropha.	26
Tabla 1.7	Composición de la Semilla de Jatropha.	26
Tabla 1.8	Productos Obtenidos al Año por Hectárea de Siembra.	27
Tabla 1.9	Costos de Producción de Biodiésel a partir de Aceite de Jatropha.	27
Tabla 1.10	Composición de la Semilla de Jatropha.	42
Tabla 1.11	Requerimientos Agroclimáticos de la Jatropha.	43
Tabla 1.12	Rendimientos de Extracción de Aceite de Jatropha.	46
Tabla 2.1	Selección del Modelo Termodinámico y Coeficientes de Actividad.	56
Tabla 2.2	Modelos de Ecuaciones de Estado y Coeficientes de Actividad.	57
Tabla 3.1	Calculo del Consumo de Biodiésel por día.	63
Tabla 4.1	Valores de Velocidad de Reacción, Ea y Factor de Frecuencia de Colisiones.	71
Tabla 4.2	Composición de las Moléculas de acuerdo a UNIFAC.	75
Tabla 4.3	Resultados Obtenidos de la Simulación del Reactor.	86
Tabla 4.4	Conversión de Triglicéridos a diferentes Temperaturas.	90
Tabla 4.5	Propiedades del Biodiésel obtenido en la Simulación.	94



ÍNDICE DE FIGURAS

	Pág	
Figura 1.1	Pasos de la Transesterificación de Triglicéridos con Alcohol.	14
Figura 1.2	Transesterificación Catalítica Básica de Triglicéridos con Metanol.	16
Figura 1.3	Semilla de Colza.	24
Figura 1.4	Semilla de Soya.	25
Figura 1.5	Semilla de Jatropha.	27
Figura 1.6	Semilla de Jatropha.	27
Figura 1.7	Flor de Girasol.	28
Figura 1.8	Palma Aceitera.	29
Figura 1.9	Productos y Subproductos obtenidos de la Jatropha.	47
Figura 1.10	Reactor CSTR.	48
Figura 1.11	Reactor PFR.	50
Figura 3.1	Línea 1 del Metrobús.	61
Figura 4.1	Proceso de Producción de Biodiésel.	68
Figura 4.2	Diagrama de Proceso de la Producción de Biodiésel.	69
Figura 4.3	Mecanismo de Reacción de la Transesterificación de Aceite Vegetal.	70
Figura 4.4	Variación de la Conversión con respecto al Exceso de Metanol.	87
Figura 4.5	Relación de Alimentación de Catalizador con la Conversión.	89
Figura 4.6	Relación de la Temperatura de Reacción con la Conversión.	91
Figura 4.7	Definición de Espacio-Tiempo (τ).	92
Figura 4.8	Relación del Volumen del Reactor con la Conversión Final.	92
Figura 4.9	Variación de la Conversión con respecto al Volumen del Reactor a Flujo Volumétrico Constante.	93
Figura 4.10	Variación de la Conversión con respecto al Tiempo Espacial a Flujo Volumétrico Constante.	93



RESUMEN

El presente trabajo muestra el estudio completo sobre el diseño de un reactor químico para el proceso de obtención de biodiésel a partir de aceite de Jatropha, donde posteriormente el producto obtenido se propondrá como biocombustible para su aprovechamiento en una flotilla de Autobuses (Metrobús Línea 1).

Se tomó en cuenta que el diseño de un reactor químico requiere conocimientos de Termodinámica, Cinética Química, Transferencia de Masa y Energía; así como de Mecánica de Fluidos y Balances de Materia y Energía necesarios. Por lo general se busca conocer el tamaño y tipo de reactor, así como el método de operación, además en base a los parámetros de diseño se espera poder predecir con cierta certidumbre la conducta de un reactor ante ciertas condiciones.

Finalmente se efectuó la simulación del sistema de condiciones propuesto en el simulador de procesos químicos PRO II; así como el análisis, evaluación y factibilidad del sistema.

El presente trabajo está conformado por cuatro capítulos en los que se describe lo siguiente:

Capítulo No. 1. GENERALIDADES. Se describe ampliamente la historia, características, aplicaciones, métodos de obtención y materias primas para la producción de biodiésel. Abarcando también las ventajas y desventajas que este presenta, estableciendo las diferencias entre el biocombustible y el diésel derivado del petróleo. Se tocan temas como la posible implementación en el transporte público especificando los vehículos en los cuales se usará el biocombustible obtenido.



Se mencionan las características principales de la Jatropha; la composición de la semilla, los requerimientos agroclimáticos, las ventajas de su cultivo, toxicidad, y el proceso de extracción del aceite así como su análisis costo-beneficio.

Así mismo, explica detalladamente el reactor que se utilizará en la simulación describiendo sus características principales.

Capítulo No. 2. SIMULACIÓN DE PROCESOS. Se muestra información sobre la simulación y el análisis de los procesos industriales mencionando sus ventajas, así como los simuladores comerciales que se utilizan comúnmente en la industria química. También se mencionan las características del simulador utilizado para este trabajo.

Capítulo No. 3. USO DE BIODIÉSEL EN EL TRANSPORTE PÚBLICO. Se establece el uso de biodiésel en la línea 1 del Metrobús y se plantea una producción de acuerdo a datos recopilados de consumo en la red de transporte público, detallando la cantidad necesaria por día para así establecer la cantidad de materia prima requerida. Se incluye la ficha técnica de los autobuses en donde se empleara el biodiésel.

Capítulo No. 4. SIMULACIÓN DE UN REACTOR CSTR PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL. Se indica la secuencia de pasos llevada a cabo en la simulación del reactor químico en el programa PRO II para una producción de 4,257 litros de biodiésel por día. Cantidad necesaria para satisfacer el 15% de combustible necesario para los 129 autobuses utilizados en la línea 1 del Metrobús. Se anexan las principales pantallas que muestran los pasos más relevantes para el diseño del reactor así como la tabla de resultados obtenidos.



INTRODUCCIÓN

El cambio climático causado principalmente por la gran acumulación de gases de efecto invernadero, es un tema que ha causado gran interés debido a que las variaciones incrementaron de manera dramática durante los últimos años, poniendo en riesgo el futuro del planeta y consigo el futuro de la humanidad.

El principal responsable del calentamiento global es el Dióxido de Carbono (CO_2). La quema excesiva de combustibles fósiles en plantas generadoras de electricidad y motores de combustión interna así como la industrialización urbana han contribuido a la acumulación de este nocivo gas. De ahí la gran preocupación por disminuir las emisiones y enfrentar el problema.

El desarrollo de biotecnologías puede ayudar a combatir esta problemática. Una alternativa es la producción de biocombustibles equiparables con combustibles de origen fósil^[1]. Un biocombustible contratipo del Diésel de origen fósil es el llamado Biodiésel.

El Biodiésel presenta grandes ventajas sobre el Diésel de petróleo, resaltando la reducción de emisiones de CO_2 debido principalmente al balance neutro de carbono en su combustión.

El biodiésel es obtenido principalmente de aceite de origen vegetal proveniente de semillas de plantas de distintos tipos como la Palma, Girasol, Jatropha, entre otras. Las cuales mediante el proceso de fotosíntesis absorben CO_2 del ambiente, purificando el aire.

El uso de biodiésel es una alternativa viable para contribuir a la mejora del planeta. En México el uso de biocombustibles es prácticamente nulo. Debido a ello la implementación de este combustible como alternativa al diésel de origen fósil, sería una notable mejora al ambiente al que estamos expuestos.



Por ello se propone utilizarlo en maquinas Diésel de automotores y Tractores Agroindustriales como ayuda a la producción agraria en el país.

El objetivo de este trabajo es la simulación de la producción de biodiésel a partir de la transesterificación de aceite de Jatropha, utilizando el simulador PRO II para analizar y determinar las condiciones optimas de operación de los equipos involucrados.

Con la simulación se obtiene un producto con especificaciones comerciales dentro de norma ASTM ^[3], y proporciona información que puede escalarse industrialmente. Ya que la producción de biodiésel no se limita únicamente al uso en motores de combustión interna, sino a calderas, generadores de vapor y otros equipos. Es por ello que también se debe tomar en cuenta como una alternativa para preservar los recursos petrolíferos del país.

El estudio “Potenciales y viabilidad del uso de bioetanol y biodiésel para el Transporte en México” menciona que una alternativa para la introducción y empleo de biodiésel en México se puede basar en materias primas de bajo costo, como es el caso de los aceites y grasas. Se considera que México cuenta con áreas de oportunidad para emprender proyectos que permitan la introducción del uso de biodiésel en vehículos automotores ^[2].

No es que el petróleo se vaya a terminar a corto plazo, pero a largo plazo la situación cambia. Extraer lo que queda del crudo Mexicano se vuelve cada vez más difícil y costoso. El suministro futuro depende del descubrimiento de nuevos yacimientos, y de la mejora en las tecnologías de extracción de los grandes pozos ya existentes, en su mayoría descubiertos en la década de los 70’s.



Según expertos, la producción mundial de crudo llegara a su límite máximo en un futuro no muy lejano. Las previsiones más optimistas son las del Departamento de Energía de EE.UU., que prevé el declive en el año 2037. Sin embargo, este cálculo se hace con base a la demanda actual de crudo, sin tomar en cuenta que ésta crece día con día. La escasez de petróleo en un futuro próximo está asegurada, por lo que encontrar y desarrollar soluciones alternativas no sólo es una cuestión ambiental, sino también una necesidad estratégica a futuro^[1].



CAPITULO I

GENERALIDADES

1.1 Biodiésel.

Según la definición de la ASTM (Norma Americana para Pruebas y Materiales) el biodiésel son ésteres mono alquílicos de ácidos grasos de cadena larga derivados de lípidos renovables, como aceites vegetales y grasas. Empleado en motores de ignición y compresión y además en calderas de calefacción ^[3].

Es un combustible de origen vegetal principalmente, que puede ser utilizado en cualquier maquina Diésel. Es producido mediante un proceso denominado Transesterificación Catalítica.

El término bio- hace referencia a su naturaleza renovable y biológica en contraste con el combustible diésel tradicional derivado del petróleo; por su parte, Diésel alude a su uso en motores de este tipo creados por Rudolph Diésel en 1883^[4]. El biodiésel sustituye como combustible limpio y renovable al diésel derivado del petróleo, y lo hace con ventaja ecológica ya que reduce las emisiones de gases que provocan el efecto invernadero.

El biodiésel puede mezclarse con gasóleo procedente del refinado del petróleo en diferentes cantidades. Se utilizan notaciones abreviadas según el porcentaje en volumen de biodiésel presente en la mezcla: B100 en caso de utilizar sólo biodiésel, u otras notaciones como B5, B15, B30 o B50, donde la numeración indica el porcentaje en volumen de biodiésel en la mezcla.



1.2 Historia del Biodiésel.

Los aceites vegetales se usan como combustibles desde hace más de 100 años. En 1912 Rudolph Diésel probó aceite de cacahuate en su motor de encendido por compresión y dijo: “El uso de aceites vegetales para combustibles de motor puede verse insignificante hoy, pero los aceites, pueden en el transcurso del tiempo ser tan importantes como el petróleo y el alquitrán de hulla, productos del tiempo presente” ^[5].

El biodiésel es un combustible alternativo para el diésel del petróleo, es producido principalmente por una reacción llamada transesterificación; llevada a cabo entre un aceite y un alcohol en presencia de un catalizador, para obtener los mono-alquil ésteres y glicerol, que luego se separan y se purifican.

La transesterificación fue conocida a principios de 1846 cuando Rochieder describió la preparación de glicol por etanólisis de aceite de ricino ^[5].

La idea de utilizar biocombustibles surgió en la década de los 70’s y 80’s en Estados Unidos. En 1970 la Agencia de Protección Ambiental (EPA por sus siglas en Ingles) firmo el tratado de aire limpio, dicho evento es catalogado como uno de los pioneros en el tema. Esto permitiría a la Agencia la regulación minuciosa de emisiones de agentes contaminantes como SO_x , NO_x , CO, O_3 y HC básicamente.

En los años 90’s se incluyeron en el tratado de aire limpio medidas restrictivas en las emisiones atmosféricas de vehículos con motor de combustión interna.

Este cambio al tratado, introdujo medidas como el aumento de Oxígeno presente en gasolinas y la disminución de Azufre en los combustibles Diésel, lo cual disminuye las emisiones de CO y minimiza las emisiones de SO_x respectivamente.



Este pasó, encabezó la fase de desarrollo de moléculas de combustión más limpia. A su vez, se desarrollaron estándares para los aditivos de combustibles.

Héchos como el embargo de petróleo y la revolución Iraní, disminuyeron la producción de petróleo causando la alza de los precios a nivel mundial ^[6].

Acorde a datos del Departamento de Energía de los Estados Unidos, las importaciones de crudo se vieron afectadas con la reducción de un 30% durante el embargo, consecuentemente el precio del hidrocarburo se disparó 300% hasta su estabilización en la década de los 80's ^[7].

Debido a los altos precios del petróleo crudo, las investigaciones se enfocaron en otras alternativas de menor costo. En agosto de 1982, se llevo a cabo la primera conferencia sobre plantas y aceites en la ciudad de Fargo, Dakota del Norte. Se trataron temas como los precios del combustible, aditivos de combustibles y métodos de extracción de aceites.

Fue hasta los últimos años de la década de los 90's cuando se recomendó el uso de biodiésel en vehículos con motor a diésel como una buena alternativa para su correcto funcionamiento y la disminución de emisiones contaminantes ^[8].

A partir de ello, muchas plantas dedicadas al refinamiento de aceites comestibles; se han sometido a reingeniería para la conversión a plantas productoras de biodiésel. Desafortunadamente, debido al escaso suministro de aceites con buenas propiedades para el proceso, el costo de producción de biodiésel es alto.

Sin mencionar el costo del tratamiento de subproductos obtenidos durante la producción de biodiésel. De ahí la necesidad de realizar estudios técnico-económico para optimizar el rendimiento y costos de producción.



1.3 Propiedades del Biodiésel.

El biodiésel tiene mejores propiedades lubricantes e igual número de cetano que el diésel de bajo azufre. Agregar una proporción de biodiésel al diésel de petróleo, reduce significativamente el desgaste del circuito de combustible. Además en sistemas de alta presión extiende la vida de los inyectores que depende del poder de lubricación del combustible.

Cuenta con un PC de 37.27 MJ/L aproximadamente 9% menor que el diésel de petróleo (48.6 MJ/L). El PC del biodiésel depende de la materia prima empleada en el proceso de producción.

El biodiésel es un líquido de color que varía entre el marrón y el dorado dependiendo la materia prima utilizada en su producción. Es inmisible en agua y cuenta con baja presión de vapor y alto punto de ebullición. Su punto de inflamación es superior a 130°C que es aproximadamente 50% mayor al del diésel (64°C) y 130% mayor al de la gasolina (-40°C). Su densidad es aproximadamente de 0.88 g/cm³, menor que el agua (1 g/cm³)^[9].

Tabla 1.1. Comparativa de Propiedades del Biodiésel y Diésel^[10].

Propiedades	Biodiésel	Diésel.
Norma del Combustible	ASTM D975	ASTM PS121
Composición	C12-C22 FAME	C10-C21 HC
Metil éster	95.5->98%	-
Carbono (% peso)	77	86.5
Azufre (%peso)	0-0.0024	0.05 máx.
Agua (ppm)	0.05 % máx.	161
Oxígeno (%peso)	11	0
Hidrogeno (%peso)	12	13
Numero de cetano	48-55	48-55
PCI (KJ/Kg)	37,700	41,860
Viscosidad Cinemática (40° C)	1.9-6.0	1.3-4.1
Punto de Inflamación (°C)	100-170	60-80
Punto de Ebullición (°C)	182-338	188-343
Gravedad Específica (Kg / L) (60°C)	0.88	0.85
Relación aire / combustible	13.8	15



1.3.1 Comparación de las Especificaciones del Diésel y Biodiésel.

En la tabla 1.2 se enlista una comparativa de las propiedades entre un biodiésel y un diésel. Algunas son semejantes pero otras difieren en gran medida. Estas últimas son las causantes de la mayor parte de los problemas asociados al motor por el uso de este tipo de combustibles.

Tabla 1.2. Especificaciones para el uso de Diésel y Biodiésel ^[11].

Parámetro	Norma	Unidades	UNE EN 590 Diésel #2	Limite CEN/TC 19 Biodiésel
Densidad (15°C)	EN ISO 12185	g/cm ³	0.820-0.845	0.860-0.900
Viscosidad Cinemática (40° C)	EN ISO 3104	sCt	2.0-4.5	3.5-5.0
Punto de Inflamación	EN 22719 ISO/CD 3679	° C	55	101
Azufre	EN ISO 14596	ppm	350 máx.	10 máx.
Residuo Carbonoso (10%)	EN ISO 1037	%	0.30 máx.	0.30 máx.
Contaminación Total	EN 12662	ppm	24 máx.	24 máx.
Agua	EN ISO12937	ppm	200 máx.	500 máx.
Corrosión al cobre	EN ISO 2160	-	Clase 1	Clase 1
Cenizas Sulfatadas	EN ISO 6245 ISO 3987	%	0.01 máx.	0.02 máx.
Estabilidad Oxidación.	EN ISO 12205 ISO 14112	mg/L	25 máx.	6 h
Numero de Cetano	EN ISO 5165	-	51 min.	51 min
Índice de Cetano	EN ISO 4264	-	46 min.	-

En la comparación anterior entre el biodiésel y el diésel de petróleo, se puede observar lo siguiente:

- La densidad y la viscosidad cinemática son notablemente mayores en el biodiésel.
Mayor densidad indica mayor energía térmica y una economía de combustible mejor.
- La temperatura de fusión es más favorable para el derivado del petróleo frente al biodiésel, sobre todo en regiones de clima templado.
- El número de cetano es similar en el biodiésel y en el diésel de petróleo.



Metil ésteres con mayor cantidad de ácidos grasos saturados se emplean como aditivos para mejorar el índice de cetano.

Un bajo Número de Cetano conlleva ruidos en el motor, prolongando el retraso de la ignición y aumentando el peso molecular de las emisiones por combustión.

- El punto de inflamación del biodiésel es muy superior al del diésel, por lo que el biodiésel garantiza un manejo y almacenamiento mucho más seguro que el diésel de petróleo.
- El contenido de azufre es muy superior en el diésel de petróleo, razón que justifica sus emisiones de SO_x, a diferencia del biodiésel que lo contiene en mucha menor cantidad.

Además que la presencia de azufre contribuye al desgaste del motor favoreciendo la formación de depósitos dentro de este.

- El PC es ligeramente menor en el biodiésel.

1.3.2 Ácidos Grasos presentes en el Biodiésel.

Los componentes básicos de los aceites y grasas son triglicéridos, los cuales provienen principalmente de ácidos grasos. Dependiendo de las características de origen de los triglicéridos se obtendrá un biodiésel con distintas cualidades.

En la tabla 1.3 se presenta la estructura de diferentes ácidos grasos.



Tabla 1.3. Estructura de Ácidos Grasos presentes en el Biodiésel ^[12].

Ácidos Grasos	Carbonos y dobles enlaces.	Estructura Química (=denota doble enlace)
Caprílico	C _{8:0}	CH ₃ (CH ₂) ₆ COOH
Cáprico	C _{10:0}	CH ₃ (CH ₂) ₈ COOH
Láurico	C _{12:0}	CH ₃ (CH ₂) ₁₀ COOH
Mirístico	C _{14:0}	CH ₃ (CH ₂) ₁₂ COOH
Palmítico	C _{16:0}	CH ₃ (CH ₂) ₁₄ COOH
Palmitoleico	C _{16:1}	CH ₃ (CH ₂) ₅ CH=CH(CH ₂) ₇ COOH
Estéarico	C _{18:0}	CH ₃ (CH ₂) ₁₆ COOH
Oleico	C _{18:1}	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH=CH(CH ₂) ₇ COOH
Linoléico	C _{18:2}	CH ₃ (CH ₂) ₄ CH=CHCH ₂ CH=CH(CH ₂) ₇ COOH
Linolénico	C _{18:3}	CH ₃ (CH ₂) ₂ CH=CHCH ₂ CH=CHCH ₂ CH=CH(CH ₂) ₇ COOH
Aracídico	C _{20:0}	CH ₃ (CH ₂) ₁₈ COOH
Eicosenoico	C _{20:1}	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH=CH(CH ₂) ₉ COOH
Beénico	C _{22:0}	CH ₃ (CH ₂) ₂₀ COOH
Euríco	C _{22:1}	CH ₃ (CH ₂) ₇ CH=CH(CH ₂) ₁₁ COOH

1.4 Métodos de Obtención de Biodiésel.

1.4.1 Transesterificación.

El proceso de Transesterificación consiste en hacer reaccionar triglicéridos con alcoholes, comúnmente metanol y etanol por su bajo costo. El principal producto son Metil ésteres y como el único residuo de valor agregado propanotriol (glicerina) que puede ser aprovechada por la industria cosmética, farmacéutica, textil, entre otras.

La Transesterificación cuenta con 3 pasos principales. El primer paso es la conversión de triglicéridos a diglicéridos, seguido por la conversión de diglicéridos a monoglicéridos y por último la conversión de monoglicéridos a glicerol produciendo una molécula de metiléster en cada paso ^[13].



Figura 1.1. Pasos de la Transesterificación de Triglicéridos con Alcohol ^[13].



Las grasas animales y aceites vegetales están compuestos normalmente de triglicéridos, que son ácidos carboxílicos de cadena larga unidos a una molécula de glicerol.

La Transesterificación debido a que es una reacción lenta, puede ser catalizada. Existen distintas formas de catalizar la reacción, en medio ácido, medio básico y la vía enzimática que es la menos empleada. En medio básico, el catalizador es Hidróxido de Sodio o Potasio siendo el primero el más utilizado debido a su disponibilidad.

En el proceso de Transesterificación, el alcohol es deprotonado con la base para formar un nucleófilo (anión con un par de electrones libres) más fuerte.

Comúnmente son usados etanol y metanol debido a su bajo costo y disponibilidad. La reacción no requiere de otros reactivos, únicamente el triglicérido, el alcohol y el catalizador. En condiciones ambientales normales, la reacción puede no ocurrir o hacerlo de manera muy lenta. Además, debido a que se trata de una reacción exotérmica, requiere temperatura para que la reacción proceda con buenos rendimientos ^[14,15].

Es importante notar que el ácido o la base empleados como catalizador, no se consumen durante la reacción, es decir, son agentes que si bien intervienen en la reacción, al final de esta son regenerados. La mayoría del biodiésel es producido a partir de aceites vegetales vírgenes usando una base como catalizador debido a que es el método más económico, requiriendo bajas temperaturas y presiones obteniendo conversiones de hasta el 98%. Sin embargo, hay otros métodos que emplean ácidos como catalizadores que son más lentos o catalizadores heterogéneos como óxidos metálicos y carbonatos ^[15].

En la figura 1.2 se aprecia el mecanismo general de reacción de la Transesterificación básica de Triglicéridos con metanol.

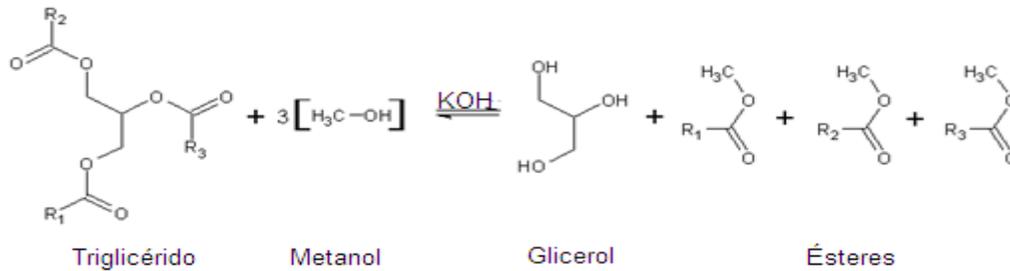


Figura 1.2. Transesterificación Catalítica Básica de Triglicéridos con Metanol ^[14].

1.4.1.1 Transesterificación Utilizando Bases.

La Transesterificación alcalina es el proceso más simple y más utilizado para obtener biodiésel. Sin embargo, requiere de un aceite con bajo contenido de ácidos grasos libres, agua y otras impurezas, o de procesos adicionales de pre tratamiento de la materia prima. Además, requiere de etapas posteriores de tratamiento del biodiésel para reducir su contenido de impurezas procedentes del proceso, principalmente restos de catalizador, y de purificación de la glicerina para incrementar su valor de mercado. Es por esto que otros procesos han sido desarrollados para aceites menos puros, para mejorar el rendimiento o para acelerarla, sin embargo su uso aún no está generalizado.

La Transesterificación se realiza a través del mecanismo de reacción conocido como sustitución nucleofílica en el acilo, usando una base fuerte (NaOH o KOH), capaz de deprotonar el alcohol. Comúnmente, la base es disuelta en el alcohol para dispersarla en todo el aceite. El hidróxido debe ser muy seco ya que cualquier cantidad de agua en el proceso aumenta las probabilidades de saponificación y producir jabones consumiendo la base. Una vez hecha la mezcla de alcohol y base, esta es agregada al triglicérido.



El átomo de carbono del grupo carbonilo del éster del triglicérido tiene una carga parcialmente positiva y el átomo de oxígeno del grupo carbonilo tiene una carga parcialmente negativa. Esta polarización del grupo C=O es la que atrae al ion hidroxilo (-OH) al lugar de reacción^[16].

La mezcla se debe agitar a 60°C y presión atmosférica. Una reacción exitosa muestra 2 fases, una del Éster y otra del Glicerol. La separación se realiza mediante decantación y la purificación del Éster mediante extracción líquido-líquido empleando agua como solvente^[17].

1.4.1.2 Transesterificación con Catalizador Ácido.

El proceso es catalizado por ácidos Brønsted como ácido sulfónico (H₂SO₃) y ácido sulfúrico (H₂SO₄). Este tipo de catálisis genera una alta producción de ésteres alquílicos, desafortunadamente se trata de reacciones lentas comparadas con las catalizadas por bases. Este tipo de catálisis es aplicada cuando las grasas o aceites contienen altas cantidades de AGL (Ácidos Grasos Libres) y humedad. Además de aplicar para aceites de menor grado como el aceite de Oliva^[14].

1.4.1.3 Transesterificación Enzimática.

La Transesterificación enzimática de aceites refinados o de desecho, es particularmente buena debido a que no importa la humedad y ácidos grasos libres que contenga el aceite o grasa, requiere menos etapas de proceso, consume menos energía y genera menos agua de desecho. En este proceso, el subproducto, glicerol, es fácilmente separado de la mezcla reactante sin ayuda de un proceso complejo. Además que los ácidos grasos libres (AGL) contenidos en el residuo del aceite y las grasas son convertidos totalmente en Metil ésteres^[14].



Dentro de las ventajas que presenta este tipo de catálisis se encuentran:

- ✓ Alta selectividad y posibilita el control sobre la distribución posicional de los ácidos grasos.
- ✓ Balance entre hidrólisis y esterificación.
- ✓ No requiere la continua eliminación de agua del medio.
- ✓ Menor temperatura de proceso.
- ✓ Alta producción de Metil ésteres.

Principales desventajas del proceso:

- ✓ Alto costo de producción y desactivación del catalizador enzimático.

1.4.2 Factores que Intervienen en la Reacción de Transesterificación.

La reacción de Transesterificación es afectada por diferentes factores, dependiendo de las condiciones de reacción empleadas, entre las más sobresalientes se encuentra la calidad del aceite, la presencia de AGL, concentración y tipo de catálisis, temperatura, tiempo de reacción y la relación molar Triglicérido-Alcohol.

1.4.2.1 Presencia de Ácidos Grasos Libres (AGL) y Humedad.

Un ácido graso es una molécula orgánica de naturaleza lipídica formada por una larga cadena hidrocarbonada lineal en cuyo extremo hay un grupo carboxilo. Es lo mismo decir que se trata de un ácido carboxílico de alto peso molecular.

El contenido de ácidos AGL y humedad son parámetros fundamentales que determinan la viabilidad del proceso de Transesterificación y su presencia determina la vía catalítica por el que transcurra.



Para la catálisis básica, es necesaria una presencia menor del 3% de AGL, la alta acidez del aceite influye en una baja conversión. Aceites con más del 5% de AGL no pueden ser transesterificados por catálisis alcalina, debido a la formación de jabones que inhibirían la separación del biodiésel de la glicerina y además favorecerían la formación de emulsiones durante el lavado. Además consume catalizador reduciendo la eficiencia catalítica ^[20].

Una de las dificultades de este proceso es la presencia de agua. La acumulación de agua que se va produciendo durante la esterificación puede llegar a detener la reacción antes de que esta sea completada.

Si la grasa o aceite contiene un elevado contenido porcentual de AGL, el proceso de Transesterificación se puede llevar a cabo en dos etapas, una primera en que los AGL son convertidos en alquilésteres mediante catálisis ácida y una segunda donde es completado el proceso de Transesterificación mediante catálisis básica.

Es sabido que el uso de H_2SO_4 reduce el contenido de AGL pudiendo bajarlo hasta el 1% en peso en aceite de Jatropha ^[18]. Otras fuentes mencionan la reducción de la concentración de AGL en aceite de tabaco de 35%w a menos del 2%w empleando 1%w H_2SO_4 ^[19]. El aceite que se utilizara debe ser purificado o refinado para reducir el contenido de agua y AGL por debajo del 1% y 3% respectivamente ^[20].

1.4.2.2 Tipo de Catálisis y Concentración del Catalizador.

Para la conversión de los triglicéridos en alquilésteres las catálisis empleadas se clasifican en cuatro tipos: Ácida, Básica, Enzimática y Heterogénea. Entre las cuales la catálisis alcalina se produce en presencia de Hidróxido de Sodio, Metóxido de Sodio, Hidróxido de Potasio o Metóxido de Potasio ^[16].



Para materias primas con elevado contenido de AGL y agua es apropiada la catálisis ácida, usualmente se emplea Ácido Sulfúrico, Sulfónico o Clorhídrico como catalizador ^[14].

El Hidróxido de Sodio tiene más bajo efecto catalítico que el Metóxido correspondiente. Se habla de 0.5% y 0.3%w/w respectivamente. Sin embargo el uso de Metóxido de Sodio puro causa la formación de diferentes subproductos principalmente formación de sales de sodio.

El proceso más conocido, utilizado y hasta el momento más efectivo es el que emplea catalizadores alcalinos, sin embargo, si el aceite tiene un alto contenido de AGL, la catálisis alcalina no es apropiada debido a que los hidróxidos reaccionan con los ácidos grasos formando jabones; lo cual reduce el rendimiento de producción de biodiésel. En este caso, se requiere otro tipo de Transesterificación, o un pre tratamiento con catalizadores ácidos ^[14,15].

1.4.2.3 Relación Molar Alcohol-Aceite.

Una de las variables más importantes que afecta los rendimientos de los ésteres es la relación molar Alcohol-Triglicéridos. La proporción estequiométrica requerida es de tres moles de alcohol por cada mol de triglicérido para producir tres moles del Éster del ácido graso y un mol de glicerol. Sin embargo, debido a la reversibilidad del proceso, se requiere un exceso de alcohol. La alta relación Alcohol-Aceite interfiere en la separación de la glicerina debido al incremento de su solubilidad.

La Transesterificación es una reacción reversible, es decir, se necesita un gran exceso de alcohol para forzar la reacción hacia la formación de los productos buscados, biodiésel y glicerol. Por esto, en la práctica, cuando se trabaja con Metanol se recomienda una relación molar de 6:1 para asegurar una conversión máxima de triglicéridos hacia ésteres ^[21].



En el caso del Etanol, algunos estudios indican que una razón molar de 9:1 sería la más apropiada. Si la cantidad de alcohol no es suficiente, el producto contendrá monoglicéridos y diglicéridos (productos intermedios de la Transesterificación), los cuales cristalizan muy fácilmente en el biodiésel y pueden causar taponamiento de los filtros y otros problemas en el motor.

Una relación molar adecuada en catálisis básica es 6:1 llegando a dar rendimientos mayores al 93% en la metanólisis de aceite de soya, girasol y algodón ^[21]. En la alcoholisis en dos etapas del aceite de tabaco se utilizó una relación molar de 18:1 en la 1ra. Etapa, y 6:1 en la 2da, y para aceite de Jatropha se empleó una relación volumétrica de 0.28:1 en la 1ra. Etapa, y de 0.16:1 en la 2da. Esto indica que la catálisis ácida requiere mayor relación molar que la catálisis básica ^[19].

1.4.2.4 Temperatura y Tiempo de Reacción.

La temperatura y el tiempo de reacción son dos factores importantes que afectan la reacción de Transesterificación. La velocidad de conversión se incrementa con el tiempo de reacción. Freedman demostró que al cabo de un minuto de reacción, se obtienen aproximadamente 80% de rendimiento y una hora después se incrementa el rendimiento, alcanzando entre un 93% y un 97% ^[22].

La relación alcohol-aceite es 6:1, con Metóxido de Sodio como catalizador y una temperatura de 60 °C ^[22]. La Transesterificación puede transcurrir a diferentes temperaturas en dependencia del tipo de aceite que se emplee.

Las temperaturas de reacción para obtener buenos rendimientos oscilan entre los 20 y 95°C dependiendo el tipo de aceite y alcohol que se utilice. Se recomienda que esta temperatura sea menor que la temperatura de ebullición del alcohol empleado debido a que el alcohol se vaporiza y la interfase Alcohol-Aceite-Biodiésel se ve afectada ^[23].



1.4.2.5 Métodos Analíticos Empleados en la Reacción de Transesterificación.

En la actualidad existen varias formas para el análisis de mezclas obtenidas después de la reacción de Transesterificación. Dichas mezclas contienen principalmente Ésteres de Ácidos Grasos, y en menor medida cantidades de triglicéridos, diglicéridos y monoglicéridos, además del alcohol en exceso que se alimento ^[11].

Se han desarrollado métodos cromatográficos de análisis de mezclas que contienen ésteres y glicéridos para el estudio de la sensibilidad de éstos compuestos bajo la selección de los parámetros necesarios en su correcta identificación.

Se han encontrado las condiciones óptimas que favorecen la mejor resolución y tiempo de retención, mediante el uso de patrones estándar internos. En cromatografía de gases han sido calculados los rendimientos obtenidos durante el proceso de Transesterificación de triglicéridos para obtención de biodiésel.

La mezcla de ácidos grasos (biodiésel) es usualmente analizada mediante cromatografía de gases con sistema de detección por ionización de flama.

Este método analítico no es conveniente para la identificación de triglicéridos no volátiles, debido a que este tipo de compuestos necesitan ser derivatizados y analizados a altas temperaturas, aproximadamente 350°C, con consecuencias negativas sobre la durabilidad de las columnas. Se puede evitar la etapa de derivatización de triglicéridos de alta masa molecular recurriendo a cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) ^[24].



1.5 Materias Primas para la Producción de Biodiésel.

El biodiésel es principalmente producido a partir de una gran variedad de aceites vegetales y grasas animales, inclusive grasas y aceites reciclados ^[25]. Existen diversos tipos de cultivos oleaginosos que pueden emplearse como materia prima en el proceso de fabricación del biocombustible entre los que destacan las semillas de Colza (*Brassica Napus*), Soya (*Glycine Max*), *Jatropha* o Piñoncillo (*Jatropha Curcas*), Girasol (*Helianthus Annuus*), Palma aceitera (*Elaeis Guineensis jacq*), así como cebos de origen animal y en ocasiones aceites reciclados ^[26].

En la tabla 1.4 se muestran los contenidos de Ácidos grasos presentes en distintos aceites de origen vegetal.

Tabla 1.4. Contenido de Ácidos Grasos en Aceites Vegetales ^[26].

Ácidos grasos [%w]	Colza	Palma	Soya	Cártamo	Jatropha	Girasol
Ácido Mirístico	-	1.0	-	-	< 1.4	-
Ácido Palmítico	11	44.3	10.5	11	10-17	4-9
Ácido Esteárico	5	4.6	0.3	5	5-10	1-7
Ácido Oleico	6	38.7	8.9	6	36-64	14-10
Ácido Linoléico	78	10.5	79	78	18-45	48-74
Otros	-	0.9	0.12	-	-	-

México cuenta con variedad de cultivos de este tipo, sin embargo las especies como Palma Aceitera y *Jatropha* pueden adaptarse a climas y condiciones difíciles de suelo, por lo cual se propone la producción de *Jatropha* en climas desérticos y de clima extremo.



1.5.1 Colza (*Brassica Napus L.*)^[25]

La *Brassica Napus*, conocida como Colza, Raps, Canola o Nabicol. Es una planta de cultivo de la familia de las Brassicaceae con flores de color amarillo brillante. Se cultiva por todo el mundo para producir forraje, aceite vegetal para consumo humano y biodiésel por su alto contenido de aceite (alrededor del 40%) ver figura 1.3.

Haixian Shi y Zonghong Bao en el 2008 realizaron un estudio del efecto de algunos factores en la reacción de Transesterificación del aceite de Colza, tales como el tiempo de reacción, concentración del catalizador y relación molar metanol-aceite para determinar las condiciones óptimas de proceso^[27].

Es necesario el 1.1%w de hidróxido de sodio, una relación molar de metanol-aceite de 9:1 y un tiempo de reacción de 120 minutos a una temperatura entre 55 y 60 °C. Bajo estas condiciones de reacción, la conversión de los triglicéridos es de 98.2%^[27].



Figura 1.3. Semilla de Colza^[28].



1.5.2 Soya (Glycine Max) ^[25]

La Soja o Soya (Glycine Max) es una especie de la familia de las leguminosas (Fabaceae) cultivada por sus semillas de alto contenido en aceite y proteína (ver figura 1.4). El grano de soya y sus subproductos (aceite y harina de soya, principalmente) se utilizan en la alimentación humana y de ganado.

El cultivo de la soya para propósitos de producción de biodiésel, debería dirigirse a la promoción y desarrollo de este cultivo en áreas de temporal de la Región Huasteca (Estados de Tamaulipas, San Luis Potosí y el norte de Veracruz) en donde se pueden encontrar amplias superficies (más de un millón de hectáreas) muy probablemente propias en suelo y lluvia para los cultivos bioenergéticos. La tabla 1.5 muestra la composición del Grano de Soya.

Tabla 1.5. Composición del Grano de Soya ^[25].

Composición.	% Peso
Agua	6.0
Aceites	18.0
Proteína	38.0
Fibra	8.0
Carbohidratos solubles	14.0
Carbohidratos insolubles	14.0
Cenizas	2.0



Figura 1.4. Semilla de Soya ^[29].



1.5.3 Jatropha (Jatropha Curcas) ^[25]

La Jatropha curcas (ver figura 1.5 y 1.6), conocida como "Piñón de Tempate" o "Jatropha", es una Euphorbiaceae. Sus semillas rinden entre un 20 y 40 % de aceite no comestible, debido a la presencia de compuestos anti-nutricionales tóxicos. La tabla 1.6 muestra la composición en %w del aceite obtenido de la semilla.

Tabla 1.6. Composición de Ácidos Grasos Saturados e Insaturados en Aceite de Jatropha ^[30].

Ácidos Saturados	Ácidos Insaturados.
Ácido Palmítico: 14.41 %	Ácido Oleico: 47 %
Ácido Esteárico: 6.7 %	Ácido Linoléico: 31.6 %

El aceite de Jatropha puede ser utilizado directamente como combustible en lámparas y motores de combustión o se puede transformar en biodiésel, por lo que es considerada como un potencial sustituto del diésel (ver tabla 1.7). No es recomendable el uso directo del aceite obtenido de la Jatropha por su mayor viscosidad con relación al diésel y menor tiempo de iniciación de la combustión. Por estas razones el uso directo no ha sido ampliamente probado por largos períodos. Se cultiva en India, África y Centroamérica para obtener biodiésel. En la Península de Yucatán se le conoce por el nombre de "Sikil-Te" y se distribuye en Chiapas, Oaxaca, Quintana Roo, Guerrero, Hidalgo, Puebla, Veracruz, Tamaulipas, Sinaloa y Sonora ^[25].

Tabla 1.7. Composición de la Semilla de Jatropha ^[31].

Composición.	% Peso
Agua	6.6
Grasas	38.0
Carbohidratos Totales	32.5
Proteína	18.2
Cenizas	4.0



Figura 1.5 y 1.6. Semilla de Jatropha ^[32,33].

La Jatropha tiene una vida de 24 años aproximadamente, tiene una eficiencia de siembra de 102 a 105 toneladas de semilla seca por hectárea. Según datos de la SENER ^[25], en sembradíos de 3x3 metros existiría una población de 1,111 plantas. Se habla que una tonelada de semilla seca, produce aproximadamente 350 kg de aceite y 650 kg de torta. Con esa cantidad de aceite de Jatropha, es posible la producción de 435 litros del biocombustible. Las tablas 1.8 y 1.9 muestran los rendimientos obtenidos por hectárea y los costos estimados.

Tabla 1.8. Productos Obtenidos al año por Hectárea de Siembra ^[17].

Año	Semilla [kg/ha]	Torta [kg/ha]	Aceite [kg/ha]	Biodiésel [lt/ha]
3	3,340	2,174	1,166	1,449
4	4,000	2,604	1,396	1,735
5	5,000	3,255	1,745	2,168
6-24	90,000	58,590	31,410	39,030
Total	102,340	66,623	35,717	44,382

Tabla 1.9. Costos de Producción de Biodiésel a partir de Aceite de Jatropha ^[17].

	Pesos [\$]
Costo de la Semilla de Jatropha	1,660
Precio de la Torta a la Ganadería	580
Costo de la Materia Prima a Biodiésel	1,152
Precio por litro de Biodiésel	2.64



1.5.4. Girasol (*Helianthus Annuus L.*)^[25]

El Girasol es una planta herbácea de la familia de las Asteráceas, cultivada como oleaginosa y ornamental en gran parte del mundo. El girasol contiene hasta un 58% de aceite, 6% de proteína y 40% de fibra en su fruto seco. El aceite de girasol se utiliza para la cocina principalmente. También puede ser empleado para la producción de biodiésel. La harina obtenida luego de la extracción del aceite puede ser empleada como alimento para ganado^[34].

Se ha estudiado la optimización de las condiciones de reacción de Transesterificación a partir del aceite de girasol para la producción de biodiésel. Donde se analizan las variables temperatura, proporción de reactantes y métodos de purificación con el propósito de obtener una alta calidad del biodiésel y máximos rendimientos en el proceso. Así obteniendo un rendimiento del 97.1% de metilésteres en condiciones óptimas de reacción, relación molar alcohol-aceite 6:1, 60 °C de temperatura y una concentración catalítica de NaOH de 1% w/w^[17].

La figura 1.7 muestra la flor de Girasol, de donde cuando llegado su tiempo de maduración, es extraída la semilla.



Figura 1.7. Flor de Girasol^[35].



1.5.5. Palma Aceitera (*Elaeis Guineensis* Jacq) ^[25]

La Palma (*Elaeis Guineensis*) pertenece a la familia palmácea. El aceite de palma contiene 43% de grasa mono-insaturada y 13% poli-insaturada, además de vitamina K y Magnesio. El derivado de la especie americana *E. Oleífera* se caracteriza por contener mayor concentración de Ácido Oleico y Linoléico así como menor concentración de Ácido Palmítico y otros saturados. Es una planta del trópico húmedo, que es la mejor opción para las tierras bajas de las regiones tropicales y ayuda a prevenir la erosión del suelo (ver figura 1.8).

Las condiciones de Transesterificación para la obtención de biodiésel a partir de aceite de palma han sido estudiadas en condición catalítica ácida. Se determina la relación alcohol-aceite, la proporción del catalizador y la temperatura de reacción para alcanzar los mayores rendimientos posibles ^[36].



Figura 1.8. Palma Aceitera ^[37].



1.6 Ventajas y Desventajas del Empleo de Biodiésel.

1.6.1 Ventajas ^[38].

- ✓ Se puede obtener a través de fuentes renovables, así como de aceites reciclados.
- ✓ En México se pueden emplear varios tipos de cultivos oleaginosos para su obtención. La Jatropha es una de las opciones más viables debido a que se cuenta con alrededor de 2.5 millones de hectáreas con alto potencial para su cultivo localizadas en los estados de Chiapas, Campeche, Guerrero, Michoacán, Oaxaca, Quintana Roo, Tabasco y Veracruz.
- ✓ El uso de biodiésel permite reducir emisiones contaminantes como es el caso del monóxido de carbono (CO), SO_x, hidrocarburos (HC), así como partículas (en la medida en que se emplea una mezcla con mayor contenido de biodiésel, las emisiones de los contaminantes citados tienden a reducir considerablemente).
- ✓ Tiene mayor lubricidad y por tanto permite alargar la vida del motor y reducir su ruido. (una mezcla de 1% de biodiésel puede mejorar la lubricidad en un 30%).
- ✓ Mayor poder disolvente que hace que se reduzcan los depósitos de carbón en los conductos internos del motor y por lo tanto permite mantener limpio el interior de este. Así mismo mantiene limpios los inyectores.



1.6.2 Desventajas ^[38]

- ✓ Las emisiones de óxidos de nitrógeno (NO_x), generalmente incrementan debido al aumento de presión y temperatura en la cámara de combustión.
- ✓ La potencia del motor disminuye y el consumo de combustible se incrementa debido a que el poder calorífico de este bioenergético es menor que el del diésel de origen fósil. Sin embargo se considera que esto depende en mucho de la calidad del biodiésel que se emplea. Al ser el biodiésel un mejor solvente ataca toda aquella pieza construida a partir de caucho o goma, por ejemplo las mangueras y juntas de motor.
- ✓ No se puede almacenar por más de 21 días debido a que comienza a degradarse.
- ✓ El empleo de mezclas con más de 30% de biodiésel puede presentar problemas de solidificación en frío, lo que obstruiría el sistema de alimentación de combustible del motor.

1.7 Diferencias entre Biodiésel y Diésel.

1.7.1 Problemas del Biodiésel.

- a) Incompatibilidad a bajas temperaturas.

Uno de los mayores problemas que se encuentran a la hora de decidir el uso de Biodiésel como combustible es el de las malas propiedades que posee a bajas temperaturas. Generalmente, como ya se ha indicado, tanto los puntos de congelación (PC), puntos de Nube (PN), así como el punto de obstrucción por filtros fríos (POFF) son desde ligeramente superiores a muy superiores dependiendo del origen del éster (Aceite de Maíz, Oliva Jatropha, etc.).



Para un Biodiésel procedente de un aceite residual el (POFF) se encuentra entre -7 y 0 °C, lo cual es insuficiente para épocas frías. Utilizando Biodiésel de origen animal él (POFF) es todavía superior ^[39].

b) Mayor Viscosidad.

Debido a que el biodiésel tiene mayor viscosidad que el diésel, pueden existir problemas de pérdidas de flujo a través de los filtros e inyectores. Si el espray es alterado por el flujo de combustible se puede generar una coquización del inyector o dilución del lubricante ^[39].

c) Coquización del inyector.

La coquización se incrementa con el aumento de:

- ✓ La viscosidad.
- ✓ Peso Molecular.
- ✓ Potencia Calorífica.

Disminuye con el aumento del grado de instauración ^[39].

d) Dilución del Lubricante.

Se debe desarrollar un lubricante específico para este combustible. Se necesita uno que tenga capacidad dispersante superior a la utilizada con el diésel (TBN alto). El perfil de la destilación del biodiésel difiere mucho del diésel de petróleo aunque sus puntos de ebullición finales son bastante similares. Esto explica por qué el biodiésel tiende a disolver más fácil el lubricante que el diésel.

Existen estudios que indican que un aceite de motor se degrada mucho más rápido si el combustible utilizado es Biodiésel en vez de Diésel. La dilución que es producida por el Biodiésel en el aceite hace que la viscosidad disminuya en primeras etapas (dilución del combustible).



En posteriores etapas, la oxidación del lubricante aumenta con el tiempo debido a la formación de depósitos y lacas, causadas por la tendencia del biodiésel a la oxidación y polimerización del lubricante debido a la presencia de dobles enlaces en su estructura. Se han observado diluciones máximas en el cárter del orden del 15 al 20%. Cada motor tiene un orden de dilución diferente debido a sus holguras de fabricación, régimen de trabajo, etc. ^[39].

La dilución afecta al motor de la siguiente manera:

- Se observan depósitos de carbonilla blandos en la boquilla del inyector, corona del pistón y cabeza del cilindro.
- Se generan menos depósitos de carbono en la válvula de admisión y similares en la de escape que respecto al diésel.
- El biodiésel genera depósitos de carbón similares al diésel en los segmentos superiores, pero se obtienen mayores lacas en los segmentos internos.
- Formación de lacas en los orificios del inyector.
- Lodos en el sumidero, zonas de filtración de la bomba de aceite y otras partes del motor.
- Desgastes en el cojinete de bancada (Sn/Pb).

La dilución por combustible es mayor con la carga aplicada que con la velocidad.

Respecto al lubricante:

- Pérdida de dispersancia.
- Separación de fases. Se forma una pequeña capa de fangos negros.
- Aumento de la viscosidad.
- Aumento de los insolubles en pentano.



- Aumento de los niveles de desgaste en metales.
- Aumento de la acidez del lubricante.

Por todo esto se recomiendan cambios de aceite en periodos más cortos que para un diésel normal.

e) Problemas de Corrosión.

Pueden presentarse algunos problemas debido a corrosión y partículas de desgaste en el aceite; que deben tomarse en cuenta no en su ataque al motor, sino respecto a la instalación (tanque de almacenamiento) ^[39].

- ✓ Ataque a las juntas y pinturas.
 - Las juntas de nitrilo en contacto con el biodiésel se disuelven, por lo que se deben sustituir por las de Vitón que son más resistentes.
 - También habrá que tener en cuenta las que están en contacto con el aceite debido a los problemas encontrados de dilución con biodiésel.
 - Las pinturas del depósito de combustible y demás partes se deben sustituir por pinturas del tipo acrílicas.
- ✓ Ataque al Cu y Pb.

El Pb se desgasta muy rápido en presencia de biodiésel. Las fuentes de plomo que existen en el motor son:

- Casquillo de Pie de Biela 10% (recubrimiento).
- Casquillos de la Bomba de Aceite (recubrimiento).



El Cu también es atacado por el biodiésel. Las Partes principales que contienen Cobre son:

- Enfriador del Aceite 100%.
- Casquillo de Pie de Biela 75%
- Diferentes partes en menores porcentajes.

El Cobre puede ser sustituido en la fabricación de las piezas:

- Enfriadores de Acero Inoxidable. Su desventaja es que disipan menos el calor, por lo que deben de ser más grandes y pesados.
- Sustitución de los casquillos de pie de biela por otros que resistan ácidos y Cl.
- ✓ Agentes Corrosivos presentes en el Biodiésel.
 - El Cl es un agente muy corrosivo y por ello se debe limitar su presencia. Este puede proceder de diferentes fuentes:
 - i. La sal de las comidas.
 - ii. Agua sin desalar en el proceso de fabricación del biodiésel.
- ✓ Ácidos presentes en el Biodiésel.

A medida que aumentan la cantidad de ácidos; en el motor se van generando depósitos en los sistemas de inyección con la consiguiente problemática en el bombeo del combustible. También atacan a las juntas y partes metálicas de los elementos del sistema de inyección ^[39].

f) Otros contaminantes:

- ✓ La presencia de K y Na puede causar la precipitación de jabones obstruyendo los filtros. Estos se presentan en el biodiésel debido a un defectuoso proceso de lavado en su producción.



-
- ✓ Los Diglicéridos y Triglicéridos aumentan la corrosión al formar quelatos con los metales de las superficies metálicas. Existen en el mercado filtros bastante hidrófobos para resolver en gran medida este problema.
 - ✓ Glicerina Libre y Total. Se debe controlar muy bien el nivel de estos dos compuestos debido a que afecta de forma muy directa a la bomba de inyección.
 - Colmatan los filtros.
 - Por otro lado la generación de producto coquizado en los inyectores.
 - Aumentan la viscosidad y espesamiento.
 - Causan cristalizaciones a bajas temperaturas.
 - g) Colmatación de filtros ^[39].
 - ✓ Debido a que el biodiésel es un buen disolvente, disuelve toda la suciedad que se encuentre en el circuito de combustible hasta limpiarlo completamente. Por ello, al principio, puede que se colmaten los filtros muy rápidamente y deban ser reemplazados a las pocas horas de uso.
 - ✓ Si se ha usado anteriormente diésel, el biodiésel arrastrará toda la suciedad que se haya depositado en el sistema de combustible durante el uso del gasoil.
 - ✓ Los filtros se pueden colmatar con glicerina, con la consiguiente disminución de combustible bombeado (problemas de lubricidad). En la trampa líquida puede quedarse parte de la glicerina que haya sido filtrada.
 - ✓ Los glicéridos causan cristalizaciones a bajas temperaturas. Los mono y diglicéridos afectan al punto de nube, pero no al de congelación. Se ha comprobado que los causantes de la colmatación de los filtros son los glicéridos saturados, por lo que los insaturados no contribuyen notoriamente al punto de nube.



Se deben controlar especialmente los filtros cuando se trabaja a temperaturas bajas. Se pueden poner calentadores para evitar este problema.

- ✓ Se pueden usar prefiltros de 5-10 micras para eliminar la mayor cantidad de suciedad inicial.

h) Problemas de Estabilidad ^[39].

- ✓ Posee menor estabilidad a la oxidación que el diésel debido a que contiene dobles enlaces y oxígeno en su molécula. Esto es importante en el momento de almacenar biodiésel durante mucho tiempo.
 - El uso de recipientes de acero o aluminio para almacenar el biodiésel no afecta negativamente a su estabilidad.
 - EL empleo de recipientes que contengan cobre, zinc, plomo o alguna combinación de ellos, afecta de manera muy negativa a la estabilidad ya que forma gran cantidad de sedimentos.
- ✓ Cuanto más contenido en $C_{18:3}$ contenga el biodiésel, este será menos estable.
 - Pueden favorecer la formación de depósitos en los inyectores.
 - Colmatación de los filtros.
- ✓ Los productos que se generan en la pre-reacción de combustión suelen ser más pesados formándose depósitos en el interior del motor y obstruyendo los inyectores.
- ✓ A medida que aumentan las insaturaciones en el biodiésel, se ha observado que los depósitos penetran más en los segmentos del pistón.



1.7.2 Ventajas del Biodiésel frente al Diésel ^[10,11]

a) Lubricidad.

El biodiésel posee características de lubricidad superiores a las del diésel.

- ✓ Se obtienen resultados marcadamente superiores en ensayos de lubricidad.
- ✓ Se producen menos partículas de desgaste (Fe) que con el diésel.

b) Número de Cetano (NC).

Por lo general los ésteres derivados de ácidos grasos tienen NC mayores que el diésel. Durante el proceso de pre-combustión de los ésteres en el motor, se forman diferentes compuestos: alcanos, alquenos, ésteres, aromáticos sustituidos, furanos entre otros.

Se ha comprobado que los compuestos aromáticos poseen un número de cetano menor. Los ésteres que más cantidad de compuestos aromáticos poseen son los insaturados.

- ✓ Esta es una explicación del porque éstos poseen números de cetano inferiores a los de los ésteres saturados.
- ✓ La posición del doble enlace también influye en la formación de especies de pre-combustión.
- ✓ Otro factor influyente en el NC es la estructura (ramificación, presencia y número de dobles enlaces en la molécula). Cuanto mayor sea la longitud de la cadena (número de $-CH_2-$) mayor será también el NC, así como la ausencia de dobles enlaces.
- ✓ Cuanto mayor sea la parte alcohólica del éster tanto menor será el NC.



h) Emisiones Contaminantes.

Produce una combustión más eficiente debido a la presencia de oxígeno en la molécula del éster:

- ✓ Mejora en el rendimiento de la combustión.
- ✓ Disminución de la cantidad de partículas emitidas (menor capacidad en los humos). Esto se ve influenciado por el mayor NC.
- ✓ Menores emisiones de CO y HC sin quemar.
- ✓ Balance en emisiones de CO₂ nulo debido a su origen biológico.

1.8 Aplicaciones.

✓ El biodiésel se puede utilizar en el sector del transporte urbano, minero, agrícola y marino, incorporándolo directamente o mezclado con gasóleo.

✓ También puede ser empleado para la generación de calor y/o energía eléctrica mediante métodos directos (combustión de la biomasa residual) o mediante métodos indirectos (combustión del biogás producido en la digestión anaerobia de los residuos biodegradables).

✓ Uso en trenes: El Tren Real el 15 de septiembre de 2007 completó su primer recorrido con B100 abastecido por Green Fuels Ltd. La realeza, el príncipe de Gales y el director de Green Fuels, fueron los primeros pasajeros en un tren corriendo con 100% biodiésel. Desde ese entonces el tren opera exitosamente con biodiésel puro. También en Disney, los trenes del parque corren con B98 desde el año 2007 ^[39].

✓ Aceite de calefacción: El biodiésel puede ser usado también como combustible de calefacción en calderas domésticas y comerciales. Una mezcla de 20% de biodiésel y 80% de aceite es la recomendada para no tener que modificar los sistemas.



Se debe tener cuidado cuando se utiliza por primera vez biodiésel en maquinas que operaban anteriormente con diésel, porque los residuos del diésel son removidos y pueden obstruir tuberías. De igual manera, es necesario el cambio de filtros. Otra idea es usar biodiésel progresivamente para que las obstrucciones no ocurran con tanta facilidad. Esto genera una ventaja, el sistema se limpia y su rendimiento aumenta.

✓ Incluso investigaciones recientes hablan sobre la aplicación de biodiésel en la aviación ^[39].



1.9 Jatropha ^[40].

1.9.1 Características de la Jatropha.

La Jatropha es una planta mexicana, también conocida como piñón o piñoncillo. Se le localiza en climas tropicales y semi-tropicales. Es un arbusto-árbol que llega a medir entre 1 y 8 metros y se desarrolla en altitudes que van desde 5 hasta 1,500 metros sobre el nivel del mar.

Crece en suelos pobres y arenosos, es resistente a las sequías y la semilla posee un importante contenido de proteína y grasa. En buenas tierras y sin limitaciones de agua pueden obtenerse hasta 5 toneladas de semilla por hectárea, y en tierras marginales se alcanzan hasta 1.5 toneladas por hectárea.

Las semillas no son comestibles ni son llevadas por aves o animales, debido a que son altamente tóxicas; por lo que no perjudican a otros cultivos o áreas. Curiosamente sus hojas y tallos expelen un líquido tóxico que la hace inmune de plagas e insectos conocidos. Tolera el riego con agua salobre además de evitar la desertización de las tierras. El biodiésel de su aceite no contiene azufre.

Puede ser desarrollada con mano de obra familiar, siendo así una fuente de ingresos para las propiedades rurales necesitadas ^[40]. Puede ser utilizada para la conservación del suelo ya que evita la erosión y la pérdida de agua por evaporación, además de ser un fertilizante natural. Es una planta perenne que vive entre 40 y 50 años. Puede comenzar a producir desde el primer año, pero su máximo de producción lo alcanza hasta los 5 años de vida.

Existen dos variedades de Jatropha: una que tiene toxinas y otra que está libre de ellas. Se recomienda trabajar con ésta última, porque su procesamiento es más sencillo e implica menos costos.



Se cultiva en India, África y Centroamérica para obtener biodiésel. En la Península de Yucatán se le conoce por el nombre de “Sikil-Te” y se distribuye en Chiapas, Oaxaca, Quintana Roo, Guerrero, Hidalgo, Puebla, Veracruz, Tamaulipas, Sinaloa y Sonora ^[17].

1.9.1.1 Composición de la Semilla de Jatropha.

La semilla de Jatropha se constituye básicamente de grasa y carbohidratos como se muestra en la tabla 1.10.

Tabla 1.10. Composición de la Semilla de Jatropha ^[34].

	%Peso
Agua	6.6
Grasa	38.0
Carbohidratos totales	32.5
Proteínas	18.2
Cenizas	4.0

1.9.1.2 Variedades de la Jatropha ^[41].

Según las investigaciones y la colección en herbarios de México, se han encontrado dos especies adicionales de Jatropha, además de la Jatropha Curcas:

1. Jatropha (Pereziae) con presencia en la región del río Balsas, en el estado de Michoacán.
2. Jatropha (Dehganii) presente en lomeríos del río Armería, en el estado de Jalisco.



1.9.2 Requerimientos Agroclimáticos ^[41].

La tabla 1.11 muestra las condiciones de prosperidad de distintos tipos de Jatropha.

Tabla 1.11. Requerimientos Agroclimáticos de la Jatropha ^[41].

	Alto	Medio	Bajo
Altitud	0-1000 m	1000-1500 m	>1500 m
Precipitación	600-1200 mm	1200-1800 mm	>1800 y < 300 mm
Temperatura	18°-28° C	28°-34° C	<18° C
Pendiente	0-20 %		
Uso de suelo	Área agrícola		

1.9.3 Ventajas del Cultivo de Jatropha ^[41].

Las ventajas obtenidas por el uso de la Jatropha en la producción de biocombustibles son muchas:

- Con la integración de los cultivos agro-energéticos, tal es el caso de la Jatropha Curcas, se ampliará la producción agrícola de materias primas para consumo nacional y para su exportación, se abre la industria de los bioenergéticos y biocombustibles en el país.
- El aporte de los cultivos bioenergéticos y de los biocombustibles están relacionados con el incremento de la productividad y la diversificación de actividades económicas en áreas rurales al proporcionar múltiples servicios de energía para la preparación de alimentos y calefacción, además de la energía necesaria para la generación de energía eléctrica, la industria y los transportes.
- La agricultura bioenergética como productora de energía regeneradora de agro-ecosistemas y proveedora de servicios ambientales es componentes esenciales de la sustentabilidad.



- El combustible obtenido será más barato que el diésel de petróleo, bajará en alguna forma la importación de combustibles de origen fósil y se ampliará la producción agrícola de materias primas.
- Permite la diversificación de la matriz energética y la incorporación de energías renovables y fundamentalmente los biocombustibles.
- La Jatropha tiene ventajas naturales y prácticas sobre otros agroenergéticos hasta ahora investigados. Este biocombustible fundamentalmente genera una reducción de la contaminación ambiental y la sustitución de recursos no renovables como el Petróleo, permite que grandes extensiones de tierra como desiertos hasta ahora inservibles puedan ser cultivadas, creando puestos de trabajo y beneficios a países con pocos recursos.

1.9.4 Toxicidad ^[41].

Investigaciones en ratas y peces establecieron que la harina de semillas de la planta Jatropha en estado salvaje originaria de México no muestra toxicidad como alimento. El contenido de proteína, energía, lípidos y aminoácidos en Jatropha curcas fue similar al de variedades tóxicas de Jatropha. La harina mostró niveles significativos de lectina, fitatos e inhibidor de la tripsina similares a los de la variedad tóxica.

La ausencia de ésteres de forbol en las semillas de Jatropha Curcas originaria de México sugiere que uno de los principios de toxicidad en las variedades tóxicas de Jatropha puede estar relacionado con la presencia de este compuesto. El fitato en las harinas constituye el mayor componente anti-nutritivo que no se destruye con el calor y que puede tener efectos adversos. Mientras que otros factores anti-nutricionales como los inhibidores de la tripsina y lectinas pueden ser destruidos mediante calor.



1.9.5 Proceso de Producción.

1.9.5.1 Extracción del Aceite ^[41].

La primera etapa en el proceso de producción de biodiésel es la extracción del aceite. Dependiendo de la escala de producción, la etapa de extracción se hace de la siguiente manera:

- Pequeña escala: por prensado en frío directamente en el campo o en cooperativas.

A pequeña escala, las frutas se limpian manualmente para retirarles materiales grandes como palos, tallos, hojas, basura, etc.; después se le quita la cáscara. Cuando se usan semillas pueden ser calentadas antes de prensarlas.

Las prensas pueden ser manuales o motorizadas. El aceite fresco que se obtiene del prensado puede estar contaminado con pequeñas partículas de pulpa que deben ser retiradas ya sea decantando o filtrando.

El material que queda después del prensado, que todavía contiene entre 20% y 33% de aceite, puede ser utilizado como alimento para animales o como base para la producción de biogás.

La producción a pequeña escala es de interés para las granjas y cooperativas porque ofrece un medio sencillo de obtener aceite, gas y alimento para ganado.

- A gran escala el aceite es extraído mediante solventes. Este proceso es más eficiente que el prensado pero más costoso.



Inicialmente, los frutos de *Jatropha* se secan hasta tener un contenido de humedad de entre 5 y 7%. El ajuste de humedad es importante ya que si es más alta o baja de la óptima, se dificulta la penetración del solvente con resultados bajos en la obtención del aceite.

Una vez secas, las semillas se compactan y se calientan hasta 80° C adicionando el solvente. El calentamiento es de vital importancia, ya que desactiva microorganismos presentes en el aceite y evita que las proteínas coagulen.

El solvente más utilizado para este tipo de procesos es Hexano debido a su alta disponibilidad y bajo costo. La solución con aceite y solvente se somete a un proceso de destilación por arrastre de vapor para su separación ^[42]. El solvente puede ser reutilizado en el proceso. La extracción con solvente produce un aceite con una pureza mayor, pero la extracción mecánica tiene un mayor rendimiento, como se muestra en la tabla 1.12.

Tabla 1.12. Rendimientos de Extracción de Aceite de *Jatropha* ^[42].

Eficiencia de Extracción de Aceite	
Extracción Mecánica	70%
Extracción por Solventes	96%
Rendimiento del Aceite	
Extracción Mecánica	4.1 kilos por litro 553 litros por hectárea
Extracción con Solventes	2.7 kilos por litro 730 litros por hectárea



1.9.6 Subproductos y Beneficios de la Jatropha.

Son muchos los beneficios que pueden obtenerse a partir del procesamiento de la semilla de Jatropha como se muestra en la figura 1.9.

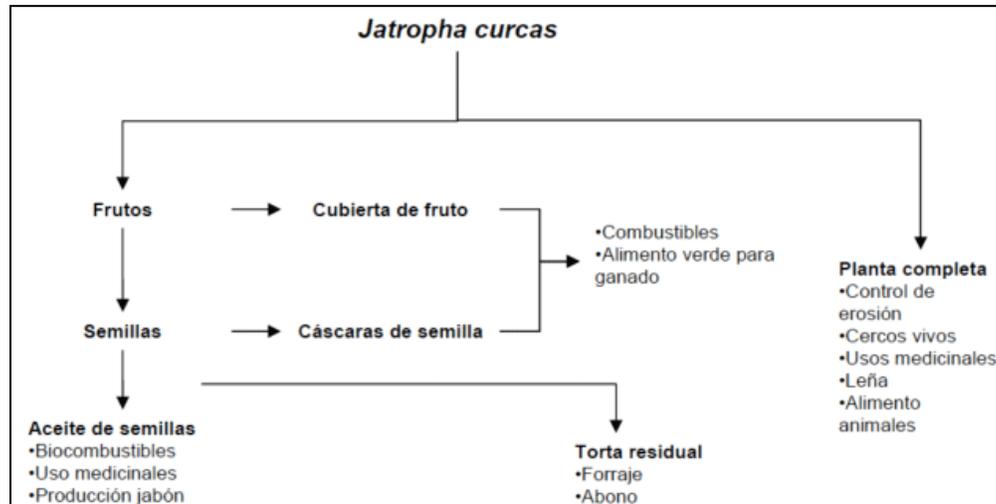


Figura 1.9. Productos y Subproductos obtenidos de la Jatropha [42].

1.10 Reactor CSTR.

1.10.1 Descripción del Reactor CSTR.

Este tipo de reactor consiste en un tanque con buena agitación en el que hay un flujo continuo de material reaccionante y desde el cual sale continuamente el material que ha reaccionado (ver figura 1.10). La agitación del contenido es esencial a causa de la forma de estos recipientes (por ejemplo, cilindros cuyo diámetro es igual a su altura); si no fuera así, se crearía una corriente directa de fluido entre la entrada y la salida del recipiente y gran parte del volumen de este sería un espacio muerto (sin circulación) [43].

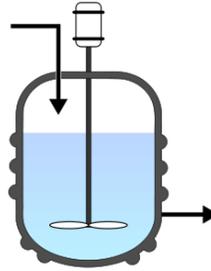


Figura 1.10. Reactor CSTR ^[43].

1.10.2 Características.

La característica más importante de un reactor CSTR es la agitación ^[43]. Una primera aproximación que describe más apropiadamente su funcionamiento se basa en la suposición de que su contenido está perfectamente mezclado. Como consecuencia de ello, la corriente efluente tiene la misma composición que el contenido del reactor. Los reactores de este tipo poseen muchas facilidades en lo referente a transferencia de calor si la agitación permanece constante en el interior del reactor.

Otra característica de este tipo de reactores es que posee una unidad procesadora (tanque) diseñada para que en su interior se produzcan una o varias reacciones químicas, producto del ingreso del flujo de alimentación, con el fin de descargar productos con flujos volumétricos del material que ha reaccionado, de modo que el volumen de reacción permanece constante ^[43].

En un reactor CSTR no es difícil alcanzar, con bastante aproximación, una mezcla perfecta, siempre y cuando la fase fluida no sea demasiado viscosa. En general, si un elemento de fluido que entra (por ejemplo, colorante agregado) se distribuye en el tanque, entonces éste puede considerarse "bien mezclado".



- En estado estacionario, el caudal de entrada debe igualar al caudal total de salida. Mientras que el reactor está en un estado transitorio la ecuación modelo se debe derivar con respecto a la masa y los balances energéticos deben ser diferenciados.
- Todos los cálculos realizados para un CSTR se asumen con un mezclado perfecto.
- A menudo, es económicamente práctico trabajar con varios CSTR con arreglo en serie o en paralelo. Esto permite, por ejemplo, al primer CSTR funcionar en una concentración más alta de reactivo y por lo tanto con una tasa más alta de reacción. En estos casos, los tamaños de los reactores se pueden variar para reducir al mínimo la inversión de capital total requerida para poner el proceso en ejecución ^[44].

1.10.3 Funcionamiento y Proceso del Reactor CSTR.

Es económicamente más productivo disponer de varios reactores CSTR en serie dando como resultado un cambio de composición escalonado entre los tanques sucesivos. También provoca una pérdida por el establecimiento de rutas cortas de flujo: una molécula determinada que entre a un tanque tiene una probabilidad significativa de fluir inmediatamente hacia la salida. Esta es la razón por la cual es usualmente necesario emplear varios tanques en serie, sobre todo si se requieren conversiones altas. Si solo uno o dos reactores se emplearan, habría una pérdida apreciable de material sin reaccionar. Aunque esta pérdida es, en cierto sentido, el resultado de la agitación, generalmente sería más alta si no hubiese agitación, debido a la formación de corrientes directas entre la entrada y la salida.



Una consecuencia común del cambio escalonado en la concentración es que la velocidad media de reacción sería menor que la obtenida en un reactor tubular que tenga la misma concentración de reactivos en la alimentación ^[44].

1.10.4 Reactor PFR.

Un reactor tubular es cualquier reactor de operación continua en donde hay un movimiento continuo de uno o de todos los reactivos en una dirección espacial seleccionada (los reactivos entran en un extremo del sistema y salen por el otro) y en el cual no se hace intento alguno por inducir el mezclado entre los elementos del fluido en ningún punto de la dirección del flujo como se muestra en la figura 1.11 ^[43].

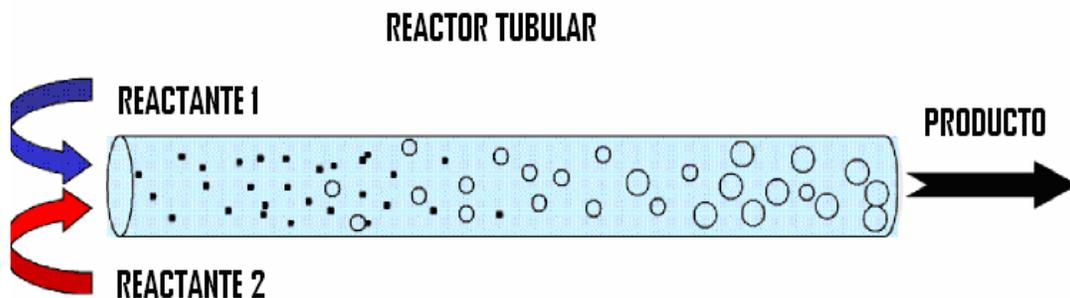


Figura 1.11. Reactor PFR ^[43].

Por lo tanto el volumen del reactor CSTR para una producción determinada debe ser mayor que el de un PFR y esto debe tomarse en cuenta en el diseño. Puede parecer paradójico que el reactor CSTR se utilice mucho para reacciones en fase líquida comparativamente lentas.

Razón por la cual, la construcción de un CSTR es más barata. El volumen mayor no es tan importante como el factor económico, al menos en el caso de tanques que funcionan a presión atmosférica y están fabricados de un material barato ^[43].



1.10.5 Ventajas del Diseño de un Reactor CSTR.

Una de las grandes ventajas de los reactores CSTR, además de su sencillez de construcción, es la facilidad con que se realiza el control de la temperatura. Los reactivos que entran al primer recipiente de inmediato entran a un gran volumen de fluido que ha reaccionado parcialmente y, debido a la agitación, no tienden a producirse zonas calientes ^[44]. Asimismo los tanques del reactor CSTR ofrecen la oportunidad de proporcionar un área muy grande de superficie de enfriamiento. Además de la superficie externa de los recipientes mismos, puede lograrse una gran cantidad de superficie interna si se instalan serpentines sumergidos ^[45].

Otra ventaja es que la construcción es abierta. Esto facilita la limpieza de las superficies internas lo cual es importante en el caso de reacciones en que hay una tendencia a que se deposite material sólido, por ejemplo, en los procesos de polimerización y en las reacciones en que se forma como producto algún material alquitranado ^[44].

1.10.6 Campos de Aplicación del Reactor CSTR.

Los campos de aplicación típicos de los reactores CSTR son los procesos continuos de sulfonación, nitración, polimerización, etc. Se utiliza ampliamente en la industria química orgánica y, en particular, en la producción de plásticos, explosivos, hule sintético, etc. El reactor CSTR se emplea también siempre que hay necesidad especial de agitación, por ejemplo, para mantener las burbujas de gas o las partículas sólidas en suspensión dentro de una fase líquida o para mantener las gotitas de un líquido en el seno de otro, como es el caso de la nitración de benceno o tolueno. La rapidez de estas reacciones depende considerablemente del grado de dispersión y, por lo tanto, de la intensidad de la agitación ^[44].



CAPITULO II

SIMULACIÓN DE PROCESOS

La simulación de procesos es la más grande herramienta que la Ingeniería Química ha creado, ya que recopila todos los conocimientos que el ingeniero posee para el estudio, creación y mejoramiento de un proceso químico.

La simulación es indispensable hoy en día en la industria química ya que da idea del posible comportamiento de un proceso en general o equipos individuales como reactores y columnas de separación. Permite analizar las características o parámetros como la temperatura, presión y composición de las corrientes para obtener mejor eficiencia de planta, debido a que es económicamente más productivo obtener una alta eficiencia ^[48].

Beneficios de la simulación de procesos en Ingeniería Química:

- ✓ Predicción del comportamiento de un proceso utilizando principios de ingeniería.
- ✓ Cálculo de balances de materia y energía complejos.
- ✓ Análisis del comportamiento de un sistema y estudio de la optimización y sensibilidad.
- ✓ Permite modificar las condiciones de operación como temperatura, presión y composición de las corrientes, sin necesidad de aplicarlas en plantas piloto.
- ✓ Estima costos de producción y ganancias.
- ✓ Genera gráficas y tablas de resultados para un mejor entendimiento del proceso.



2.1 Análisis de Procesos Industriales.

En la industria química siempre se presentan problemas de operación en las plantas. Esto se puede reducir empleado los conocimientos de ingeniería y la aplicación de métodos científicos del reconocimiento y definición del problema, así como el desarrollo de procedimientos para su solución. El análisis de procesos industriales comprende un examen global del proceso, de otros procesos posibles, así como de sus aspectos económicos.

Se hace resaltar el aspecto económico porque al efectuar una selección de distintos esquemas posibles, los costos constituyen un elemento tan importante que nunca se pueden ignorar. Si se ha de realizar una amplia selección, es preciso conocer los costos de cada proyecto y compararlo con los demás. De esta forma se pueden estimar los beneficios de cada una de las alternativas con fines comparativos ^[49].

2.2 Ventajas del Análisis y Simulación de Procesos Industriales.

La simulación de procesos industriales presenta ventajas como:

1.- Experimentación económica.

Estudio de procesos nuevos o existentes de una manera más rápida, integral y económica que en plantas piloto o plantas reales. Puede apreciarse más fácilmente el comportamiento del sistema ^[17,50].

2.- Extrapolación.

Mediante la aplicación de un modelo matemático, se puede experimentar dentro de intervalos extremos de condiciones de operación que la mayoría de veces son impracticables o imposibles de realizar en una planta real ^[50].



3.- Estudio de conmutabilidad y evaluación de otros planes de actuación.

Es posible la introducción de factores o elementos de un sistema y suprimir otros al examinar el sistema con el fin de ver si dichas modificaciones son compatibles con el sistema. La simulación de procesos permite comparar distintos diseños y procesos fuera de operación y estudiar las hipótesis sobre sistemas o procesos antes de ser llevados a la práctica ^[17].

4.- Repetición Experimental.

El estudio del efecto de la modificación de las variables y parámetros es repetible. A diferencia de una planta real, en la simulación es posible corregir errores ^[50].

5.- Control de Cálculo.

Una importante herramienta es el material para el estudio de sistemas de control de lazo abierto o cerrado ^[50].

6.- Ensayo de Sensibilidad.

Es posible modificar la sensibilidad de costos y parámetros básicos del sistema ^[50]. Por ejemplo, un incremento de la velocidad de alimentación tendrá; según sea el caso, un efecto desde mínimo hasta muy importante sobre el funcionamiento de la instalación y costos ^[17].



2.3 Simuladores Comerciales de Procesos.

En el mercado existen distintos simuladores comerciales, entre los más comúnmente utilizados se encuentran HYSYS, DESIGN, ASPEN PLUS, PROII, entre otros. Los cuales se basan en modelos matemáticos para realizar los cálculos.

La esencia de un simulador de procesos son los modelos matemáticos, así como las Leyes de conservación de la Materia, Leyes de la Termodinámica, el Diseño de Plantas y las Restricciones de Control de Procesos. El modelo matemático que engloba el proceso completo de simulación está basado en ecuaciones algebraicas y diferenciales.

Un simulador comercial parte de principios básicos como ^[50]:

- Modelos secuenciales basados en subrutinas para cada unidad del proceso.
- Ecuaciones de resolución simultánea.
- Modelos de Ingeniería aproximados o linealidad de modelos rigurosos.
- Propiedades Termodinámicas y de Transporte.
- Naturaleza de los componentes implicados.
- Idealidad o no de las mezclas.
- Temperatura y Presión.
- Equilibrio L-V, L-L, etc.



2.3.1 Selección del Método Termodinámico en un Simulador.

Cuando se desea realizar la simulación de un proceso, uno de los problemas más comunes es que método Termodinámico seleccionar para cada tipo de problema. Todos los simuladores antes mencionados cuentan con gran variedad de métodos termodinámicos. Todos y cada uno de ellos dependen de la aplicación que se le vaya a dar de acuerdo a las especies involucradas.

Tabla 2.1. Selección del Modelo Termodinámico y Coeficientes de Actividad ^[17].

	Binario L-V	Multicomponente L-V	Azeótropos	Equilibrio L-L	Sistemas Diluidos	Extrapolación
Margules	3	2	3	3	x	x
Van Laar	3	2	3	3	x	x
Wilson	3	3	3	1	3	4
NRTL	3	3	3	3	3	4
UNIQUAQ	3	3	3	3	3	4
UNIFAC	3	3	3	3	3	4

x: No se Recomienda	4: Muy Aplicable	3: Aplicable	2: Aplicación Restringida	1: No Aplicable
------------------------	------------------	--------------	------------------------------	-----------------

La tabla 2.1 muestra la selección del modelo Termodinámico adecuado a cada sistema. Sin embargo, los simuladores manejan más Ecuaciones de Estado y Modelos de Coeficiente de Actividad como se muestra en la tabla 2.2.



Tabla 2.2. Modelos de Ecuaciones de Estado y Coeficientes de Actividad ^[17].

Lee-Kesler (LK)
Lee-Kesler-Plocker.
Peng-Robinson (PR).
Peng-Robinson-Stryje k-Vera (PRSV).
Redlich-Kwong (RK).
Redlich-Kwong-Soave (RKS).
API-Soave-Redlich-Kwong (API-SRK).
RKS o PR con reglas de mezclado de Wong-Sandler (WS).
RKS o PR con fusión alfa de Boston-Mathias.
Sanchez-Lacombe (Para polímeros).
Hayden-O´Connell.
Benedict-Webb-Rubin (BWR).
Schwartzentruber-Renon.
NRTL.
UNIQUAC.
UNIFAC.
Van Laar.
Wilson.
Margules.
Pitzer.
Braun K-10.
Chao-Seader.
Grayson-Streed.
Kent-Eisenberg.
Aminas.

2.4. PROII ^[51].

PRO II es un programa de simulación que permite realizar rigurosos y complejos balances de materia y energía para una amplia gama de procesos químicos.

PROII es fácil de utilizar siempre y cuando se tengan bien claros los conceptos de la simulación, ya que ofrece la solución más completa para distintos tipos de procesos químicos. Es muy empleado para conocer el comportamiento de sistemas reaccionantes o de separación de componentes.



2.4.1. Características Generales de PROII.

- ✓ Entorno gráfico de simulación interactivo.
- ✓ Funciona bajo sistema Microsoft Windows.
- ✓ Posibilidad de incluir código de programación en VISUAL BASIC.
- ✓ Posibilidad de realizar simulación en régimen dinámico (paquete PROTISS).

2.4.2. Aplicaciones de la Simulación en PROII.

- ✓ Diseño de nuevos procesos.
- ✓ Evaluación de configuraciones alternativas de la planta.
- ✓ Modernización y renovación de plantas existentes.
- ✓ Evaluación y documentación del cumplimiento de las regulaciones ambientales.
- ✓ Solución de problemas y descongestionamiento de plantas de procesos.
- ✓ Monitoreo, optimización y mejora del rendimiento de las plantas.

2.4.3. Industrias que pueden ser Simuladas en PROII.

- ✓ Aceites y Procesamiento de Gas.
- ✓ Refinación.
- ✓ Petroquímica.
- ✓ Productos Químicos.
- ✓ Polímeros.
- ✓ Químicos Finos y Productos Farmacéuticos.
- ✓ Ingeniería, Construcción y Consultoría.



2.4.3.1. Procesamiento de Gas y Petróleo.

- Endulzamiento de Aminas.
- Refrigeración en Cascada.
- Trenes de Compresión.
- Deetanización y Desmetanización.
- Expansión de la planta.
- Deshidratación de Gas.
- Inhibición de la Formación de Hidratos.
- Operaciones en Plataforma.
- Serpentes de Refrigeración.
- Optimización de Turbo-Expansores.

2.4.3.2. Refinación.

- Fraccionadora de Etileno.
- Divisor de Propileno.
- Separación de Aromáticos.
- Planta de Ciclohexano.
- Fabricación de Separadores Metanol-Buteno.
- Recuperación de Naftalenos.
- Producción de Olefinas.
- Producción de Compuestos Oxigenados.
- Cloración del Propileno



2.4.3.3. Petroquímica Básica.

- Precalentamiento de Crudo.
- Destilación Atmosférica de Crudo.
- Columnas de Vacío.
- Fraccionador Catalítico Fluidizado (FCC).
- Plantas de Gas
- Estabilizadores de Naftas y Gasolinas.
- Divisores y Separadores de Nafta.
- Reactores de Refinería.
- Reactores de Mecanización.
- Alquiladores de Acido Sulfúrico y Acido Fluorhídrico.
- Separador de Aguas Ácidas.
- Desisobutanizadores.

2.4.4. Operaciones y Equipos Incluidos en PROII.

El simulador cuenta con variedad de operaciones y equipos:

- ✓ Separadores Flash de 2 fases.
- ✓ Válvulas.
- ✓ Compresores y Expansores.
- ✓ Bombas.
- ✓ Tuberías.
- ✓ Mezcladores y Divisores de líneas.
- ✓ Intercambiadores de Calor (Simples y Minuciosos).
- ✓ Reactores (CSTR, PFR, Batch, Gibbs y para Polímeros).
- ✓ Columnas de Destilación Batch y Continuas.
- ✓ Mezcladores, cristalizadores, Filtros, Evaporadores, entre muchos otros.



CAPITULO III

USO DE BIODIÉSEL EN EL TRANSPORTE PÚBLICO

Se proveerá el 15% de la demanda de Diésel de la Línea 1 del Metrobús (ver figura 3.1) con el biocombustible. Se eligió este porcentaje debido a que en investigaciones realizadas ^[14]. La mezcla B15 (15% Biodiésel- 85% Diésel) es la optima para maquinas que anteriormente utilizaban diésel de petróleo como único combustible. Esto para evitar taponamientos, corrosión y desgaste de las juntas y equipos que conforman el motor.



Figura 3.1. Línea 1 del Metrobús ^[52].



La línea 1 del Metrobús se conforma por 45 Estaciones con una longitud total de 30 km. Inicio operaciones en Junio del 2005 y tuvo su primera ampliación en Marzo del 2008. Atiende una demanda de 440,000 pasajeros por día. Cuenta con 152 Autobuses articulados del tipo Volvo 7300 de los cuales 129 se encuentran en Servicio ^[52].

Cada autobús consume 220 L/día de diésel de petróleo lo que suma 28,380 litros/día de diésel consumidos por toda la flotilla ^[52]. Haciendo la mezcla B15 se requeriría una producción de 4,257 litros/día del biocombustible.

La tabla 3.1 muestra los cálculos realizados acorde a la necesidad de producción establecida de biodiésel.

El siguiente cuadro muestra los datos necesarios para realizar los cálculos correspondientes, estos fueron tomados de los puntos 1.3 y 1.4.

Datos tomados de distintas fuentes para el cálculo de la producción ^[11]:

Gravedad Específica del Biodiésel Norma ASTM D975: 0.86-0.90 g/cm³.

Gravedad Específica del Aceite de Jatropha: 0.91-0.92 g/cm³.

Peso Molecular del Biodiésel Norma ASTM D975: 296-297 g/gmol.

Peso Molecular del Metanol: 32 g/gmol.

Densidad del Metanol: 0.79 g/cm³.

Peso Molecular Aceite de Jatropha: 885-890 g/gmol.

Relación Estequiométrica Metanol-Aceite de Jatropha ^[21]: 6:1

Rendimiento de Aceite de Jatropha: 0.85 ^[18].



Tabla 3.1. Calculo del Consumo de Biodiésel por día.

CANTIDAD DE BIODIÉSEL A PRODUCIR			
Litros/día	g/día	g/min	gmol/min
4257	3, 746, 160	2601.5	8.77

ACEITE DE JATROPHA NECESARIO			
Litros/día	g/día	g/min	gmol/min
5008	4, 582, 320	3182	3.59

METANOL NECESARIO (ESTEQUIOMETRICO 3:1) ^[14] .			
Litros/día	g/día	g/min	gmol/min
628.13	496, 224	344.6	10.77

METANOL ALIMENTADO (6:1) ^[21] .			
Litros/día	g/día	g/min	gmol/min
1256.26	992, 448	689.3	21.54

3.1 Ficha Técnica Autobús Volvo 7300.

Con un enfoque al transporte masivo de pasajeros, el Volvo 7300 ofrece la mayor eficiencia operacional con relación al volumen de pasajeros transportados. Este tipo de vehículos puede transportar hasta 4000 pasajeros/hora-sentido.

Este vehículo se basa en la plataforma Volvo B12MA; que es la culminación de toda la experiencia y tradición de Volvo en autobuses articulados de motor central. Este es el único concepto que permite tener la tracción en el carro delantero, logrando un mejor control direccional en todas las condiciones y al mismo tiempo sin requerir complejas tecnologías de estabilización de la articulación.

Cuenta con un motor electrónico que satisface los últimos requerimientos ambientales y que está plenamente comprobado en México en aplicaciones foráneas.



El concepto robusto de la plataforma con eje rígido al frente y una elevada capacidad le permiten aprovechar al máximo el volumen interior en las condiciones más exigentes ^[53].

Especificaciones ^[53]:

- Construcción.

Chasis tubular de Acero Inoxidable con carrocería en perfiles de acero galvanizado, costados de Aluminio, Parte Frontal, Posterior y Toldo Fabricados de plástico reforzado con fibra de vidrio.

- Capacidad de Transporte y Opciones.

Capacidad máxima de 160 pasajeros (41 sentados y 119 de pie) en Volvo 7300 Articulado y 240 en Biarticulado. Diferentes distribuciones de área interior y ubicación de asientos según necesidad y lugar de puertas de acceso (Plataforma y Banqueta).

Opciones:

- Aire Acondicionado opcional Sutrac AZ353.
- Calefacción por Convección.
- Letrero de ruta.
- Rines de Aluminio.
- Voceo Interior.
- Torreta Delantera y Trasera en LED.
- Sistema Adaptativo de Topografía Senso Top o Topodyn.

- Motor

Motor a diésel Volvo DH12E de 6 cilindros en línea, Posición horizontal central, Turbo alimentación, Refrigeración complementaria e Inyección electrónica. Potencia de 340 hp en un intervalo de 1400-1800 rpm, con 1700 Nm de Torque.



Radiador en todo, post enfriador con entrada de aire en ambos lados.
Separador de combustible y agua con calentador eléctrico. Tanque de combustible de 450 Litros.

- Transmisión

Automática ZF Ecomat 4 de 6 velocidades con retardador incorporado.

Automática Voith 864.5 de 4 velocidades con retardador incorporado.

- Tanque combustible

Tanque de Acero Inoxidable con capacidad de 450 litros.

- Suspensión

Neumática con auto nivelación con control electrónico.

Ejes rígidos delanteros de tracción con bolsas de aire y auxiliar trasero, así como barras estabilizadoras.

Eje de tracción: Relación 4:63:1

- Sistema Eléctrico

Sistema Eléctrico Multiplex con arneses simplificados y menos pesados.
Motor, Sistema Eléctrico, Transmisión, Frenos, Suspensión, Dirección y Luces exteriores que reportan estatus a computadora central.

- Llantas y Rines

Llantas 295/80R22.5

Rines 8.25 x 22.5 de Acero.

- Dirección
-



Dirección hidráulica ZF8098 tipo telescópica regulable en ángulo y altura.

- Sistema de frenos

Frenos de disco en todas las ruedas, Sistema ABS y ASR. Sensor de desgaste y temperatura.

- Dimensiones

Largo: 18.1 metros Articulado, 25.0 metros Biarticulado.

Ancho: 2.55 metros. Ambos Autobuses.

Altura: 3.81 metros. Ambos Autobuses.



CAPITULO IV

SIMULACIÓN DE UN REACTOR CSTR PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL

4.1. Etapas en la Producción de Biodiésel.

Para la producción de biodiésel mediante la Transesterificación de Aceite de Jatropha, se cuenta con 6 etapas de proceso (ver figura 4.1), más las etapas de obtención del aceite a partir de la semilla. Dentro de estos pasos se encuentran ^[17, 42]:

1. Siembra de la Planta.
2. Cosecha de Semillas de Jatropha.
3. Secado de la Semilla.
4. Calentamiento y Compactación de la Semilla.
5. Destilación por arrastre de vapor.
6. Secado del Aceite.
7. Mezclado del Aceite con la solución de Metóxido de Sodio.
8. Reacción de Transesterificación.
9. Recuperación del Alcohol no reaccionado.
10. Lavado del Biodiésel.
11. Purificación del Biodiésel mediante Extracción L-L.
12. Purificación del Glicerol.

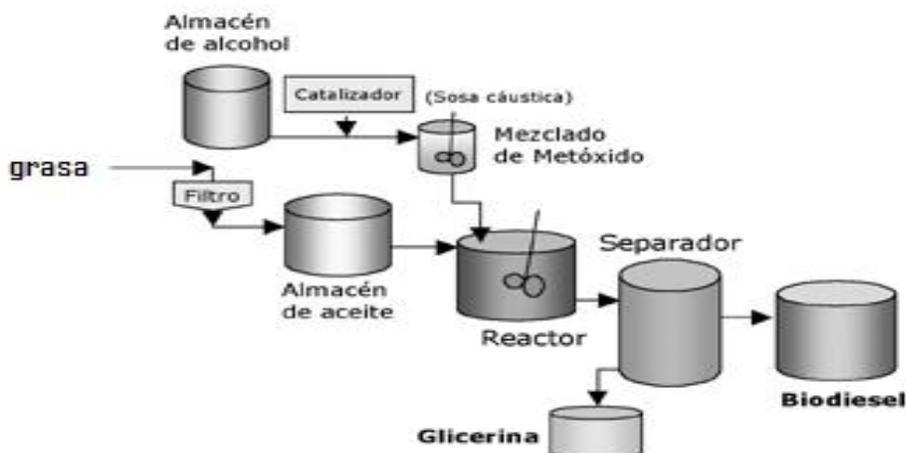


Figura 4.1. Proceso de Producción de Biodiesel ^[54].

4.2. Descripción Detallada del Proceso (ver figura 4.2).

Se prepara una mezcla 1%w de Metanol-Hidróxido de Sodio ^[55] (M-1). Dicha mezcla es alimentada al Reactor CSTR-1 junto con la alimentación de Aceite de Jatropha seco.

El reactor opera a presión atmosférica y temperatura debajo del punto de ebullición del Metanol (Aproximadamente 60°C @ 585 mmHg). El efluente del reactor es enviado a una primer columna de separación (C-1) donde el Metanol sin reaccionar es recuperado en el destilado para su posterior recirculación a (M-1). La mezcla Glicerol-Ésteres-Aceite es enviada a una columna de extracción (L-1) para su lavado con agua. La mezcla Agua-Glicerol es enviada a una segunda columna de destilación (C-2) donde se obtiene glicerol de alta pureza en los fondos de la columna.

Por otra parte la mezcla Biodiésel-Aceite, es enviada a una tercera columna de destilación (C-3) donde se obtiene como destilado biodiésel de alta pureza y aceite sin reaccionar como fondo de la columna.

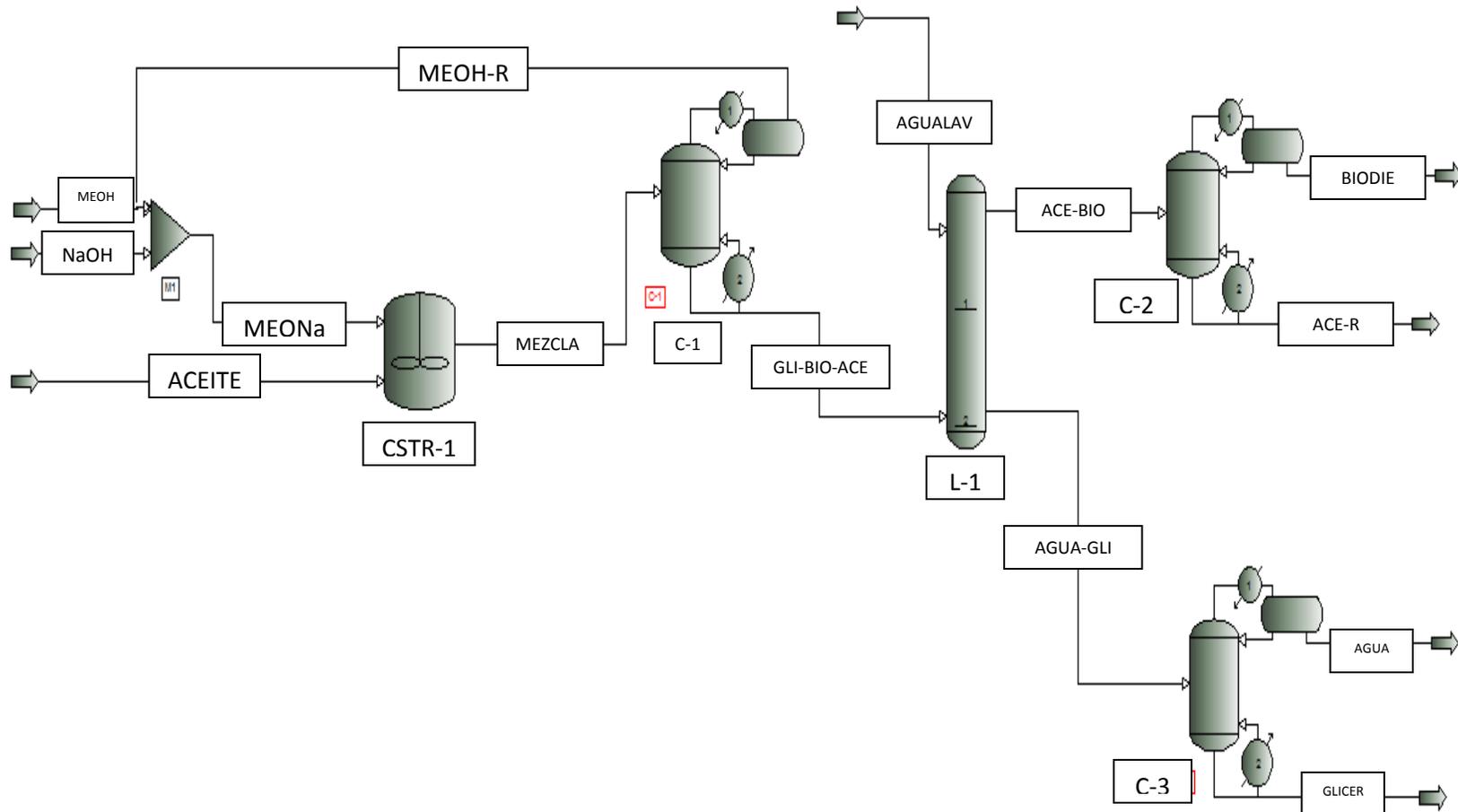


Figura 4.2. Diagrama de Proceso de la Producción de Biodiésel.



4.3. Cinética Homogénea del Proceso.

El biodiésel es producido mediante un proceso denominado Transesterificación catalítica básica. La reacción global fue presentada en la figura 1.2. Dicha reacción se lleva a cabo en 3 etapas principales como se mostro en la figura 1.1.

En la figura 4.3 se observa detalladamente el mecanismo de reacción de la transesterificación de aceite vegetal para la obtención de biodiésel.

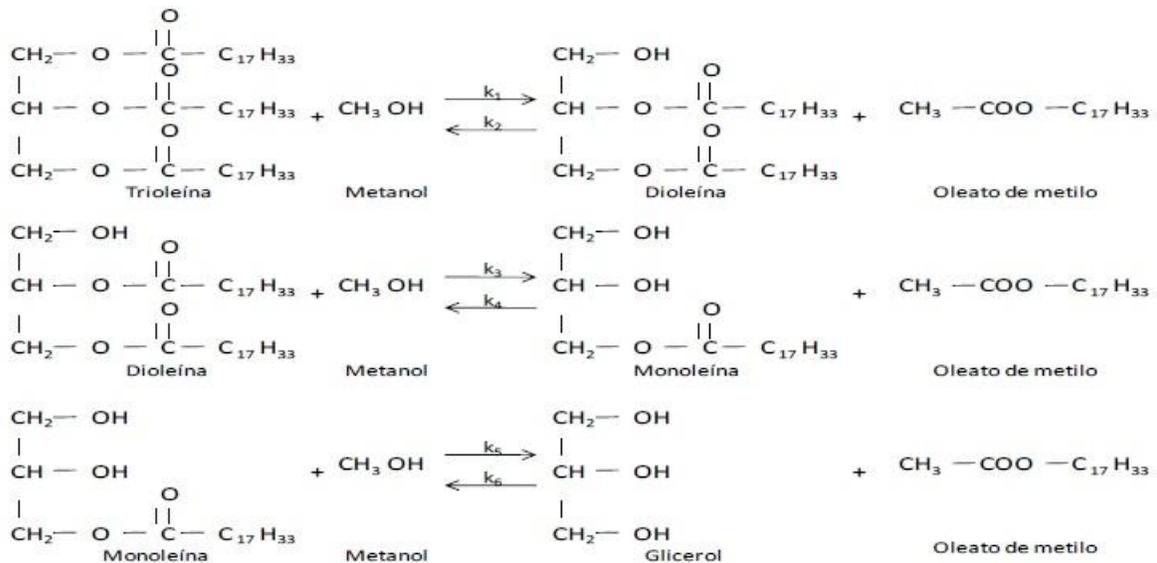


Figura 4.3. Mecanismo de Reacción de la Transesterificación de Aceite Vegetal ^[17].

Los datos cinéticos de la transesterificación de aceites vegetales han sido obtenidos anteriormente por Nouredini y Zhu ^[55]. La investigación se desarrollo empleando como catalizador 1%w de NaOH respecto al aceite; temperatura de reacción de 60°C y relación Molar Aceite-Metanol 6:1. En la tabla 4.1 se muestran los valores de las constantes de reacción (k), Energía de Activación (E_a) y el Factor de Frecuencia de colisiones (A).



Tabla 4.1. Valores de la Velocidad de Reacción, Energía de Activación y Factor de Frecuencia de Colisiones ^[55].

Reacción	k[L/mol-min]	Ea [cal/mol]	A
Trioleína - Dioleína	0.05	13,145	2.10E7
Dioleína - Trioleína	0.110	9,932	3.60E5
Dioleína - Monoleína	0.215	19,860	2.30E12
Monoleína - Dioleína	1.228	14,639	4.93E9
Monoleína - Oleato de Metilo	0.242	6,241	3008
Oleato de Metilo - Monoleína	0.007	9,588	13659

4.4. Simulación del Reactor CSTR en PROII.

La simulación se realizara en SimSci PROII versión 9.0. Dicho simulador cuenta con una amplia base de datos de propiedades termodinámicas de compuestos. El aceite de Jatropha está constituido por 47% de Ácido Oleico, 31.6% de Ácido Linoléico, 14.41% de Ácido Palmítico y 6.7% de Ácido Esteárico ^[30]. Sin embargo la mayoría de Triglicéridos se componen de Ácido Oleico y Linoléico. El simulador contiene el Ácido Trioléico que es la molécula más abundante en aceite de Jatropha y está constituida por tres cadenas de Ácido Oleico.

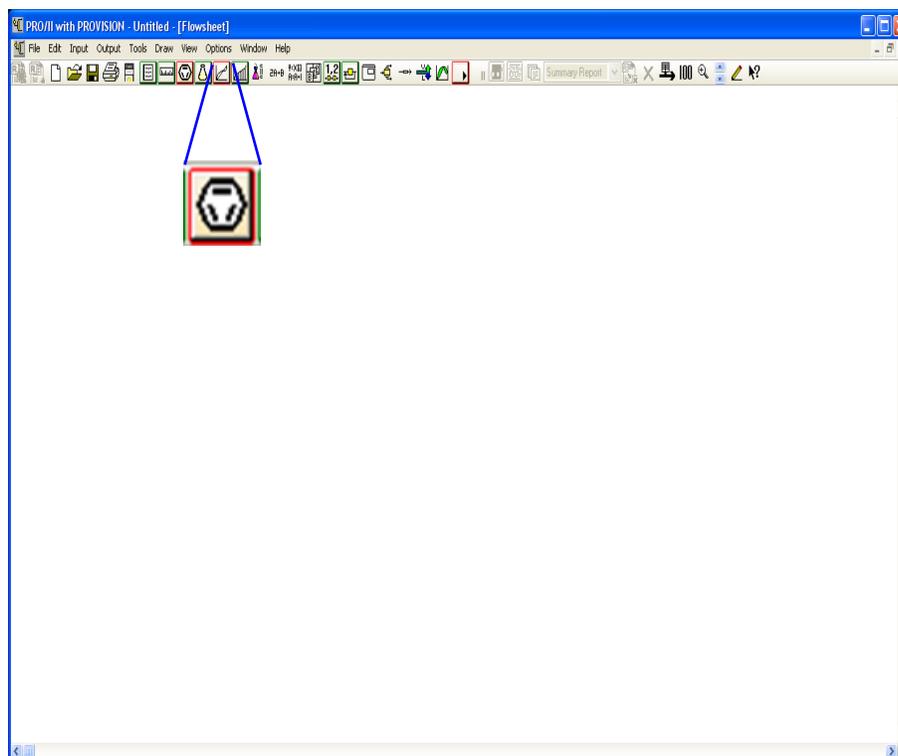
Las moléculas que no se encuentran en la base de datos, deben ser dadas de alta para el cálculo de sus propiedades Físico-Químicas. El modelo UNIFAC (Universal Functional Activity Coefficient) es uno de los mejores para la predicción del equilibrio L-V para sistemas no ideales de este tipo de sustancias ^[17].



4.4.1. Pasos de la Simulación en PROII.

4.4.1.1. Inicio de la Simulación.

Una vez en la pantalla principal del Simulador, dar clic en el icono con el símbolo del Benceno. Esto abrirá una nueva pantalla donde se pueden seleccionar los compuestos (Reactivos y Productos).





4.4.1.2. Selección de los Compuestos y Cálculo de Propiedades.

Buscar los compuestos ya sea por su Nombre o Estructura Química.

Component Full Name:	SIMSCI Name/Alias:	Formula:
GLUTARIC ACID	GLTRACID	C5H8O4
GLUTARIC ANHYDRIDE	GLUAN	C5H6O3
GLYCERINE GLYCOL	GLYGBRIN	C6H12O6
GLYCERYL TRIACETATE	123PTOLA	C9H14O6
GLYOXAL	GLYOXAL	C2H2O2

Buttons: Add Components, Remove Components, OK, Cancel.

Bottom text: Select the desired components

Cuando se desea agregar los compuestos no disponibles en la biblioteca del simulador, se da clic en la pestaña “user defined”. Se nombran los compuestos. En este caso Oleato de Metilo, Trioleina, Dioleina y Monoleina. Una vez nombrados todos, se procede al cálculo de las propiedades por su estructura UNIFAC.

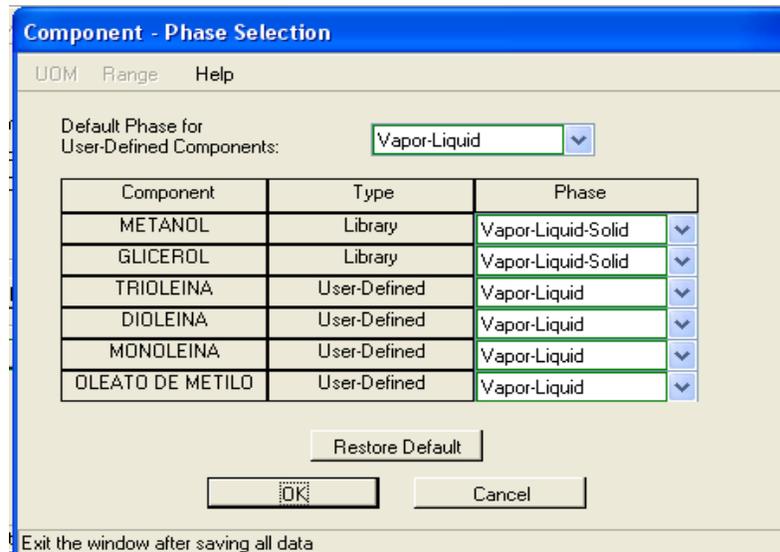
Component Name: OLEATO DE METILO

Components to be Added:
TRIOLEINA
DIOLEINA
MONOLEINA

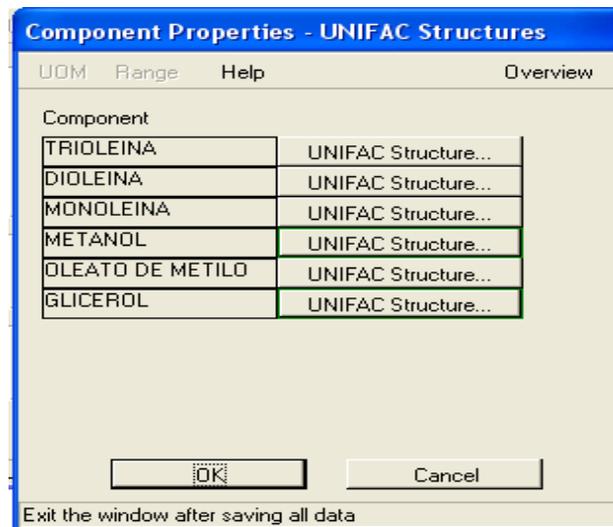
Buttons: Add ->, Delete, OK, Cancel.

Bottom text: Enter name for the component

Como se trata de líquidos libres de partículas en suspensión que trabajaran por debajo de su punto de ebullición, se selecciona fase Liquido-Vapor en todos los compuestos.



Dar clic en el icono del matraz Erlenmeyer y seleccionar la pestaña “UNIFAC structures”. Se despliega la siguiente Pantalla:



Los componentes que se encuentran enmarcados en color verde, es porque el simulador ya contiene las propiedades en la base de datos de su biblioteca. Los que se encuentran enmarcados en azul, son componentes desconocidos para el simulador por lo cual es necesario declarar la estructura para el cálculo de sus propiedades.



Para declarar la estructura es necesario primero conocer la composición de su molécula. En la Tabla 4.2 Se muestra la composición de las moléculas de Oleato de Metilo, Trioleína, Dioleína y Monoleína.

Tabla 4.2. Composición de las Moléculas de acuerdo a UNIFAC.

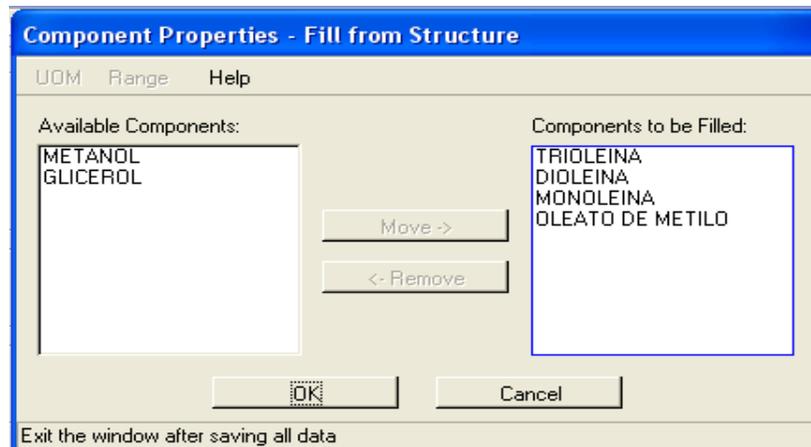
Grupo Funcional	Oleato de Metilo	Trioleína	Dioleína	Monoleína
-CH ₂ -	14	44	30	16
-CH ₃	2	3	2	1
-COO-	1	3	2	1
-CH=CH-	1	3	2	1
-OH	-	-	1	2
=CH-	-	-	1	1

La estructura se reporta de acuerdo a cada grupo funcional dentro de la columna "Group". Cada número corresponde a un grupo funcional diferente y se reporta en número de veces que la molécula repite el grupo.

Reset	Group	Number	Structure
1		900	3 -CH ₃
2			1
3			1



Una vez declaradas las estructuras de todos los componentes de acuerdo a la tabla 4.2, se selecciona la pestaña “Fill From Structure”. Esto para que el simulador pueda llevar a cabo el cálculo de las propiedades de los compuestos antes declarados.



Seleccionar los compuestos cuyas propiedades desean ser calculadas y dar clic en la pestaña “OK”. Para comprobar las propiedades calculadas, dar clic en la pestaña “Fixed”, inmediatamente aparece una pantalla donde se muestran las propiedades de los compuestos declarados.

Component Properties - Fixed Properties

UOM Range Help

	Molecular Weight	Standard Liquid Density	Normal Boiling Point
TRIOLEINA	885.1300	297.12 API	1122.99 F
DIOLEINA	620.7800	386.22 API	970.73 F
MONOLEINA	356.4300	9.6751 API	1207.45 F
METANOL	32.0422	45.521 API	148.46 F
OLEATO DE METILO	296.3900	36.945 API	794.03 F
GLICEROL	92.0938	-19.359 API	550.13 F

Critical Properties...

Molecular Constants...

Heats of Formation...

Miscellaneous Properties...

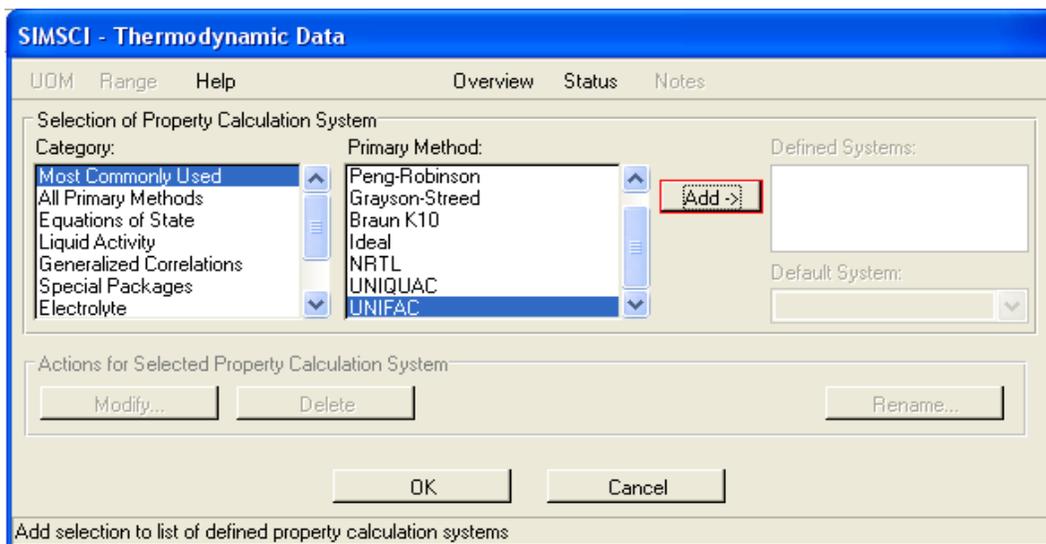
OK Cancel

Exit the window after saving all data



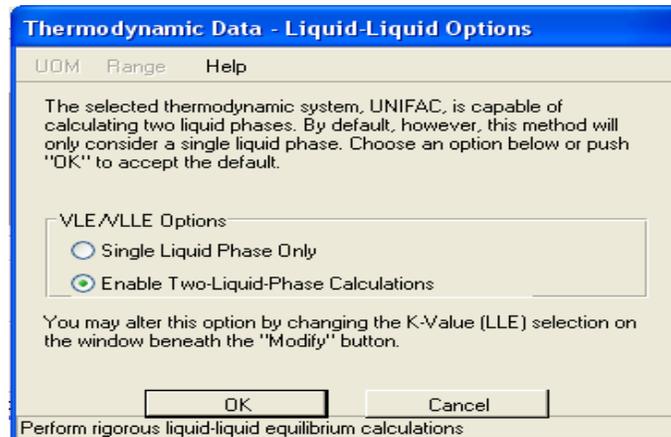
4.4.1.3. Selección del Método Termodinámico.

En la pantalla principal del simulador, seleccionar el icono "Azzay Characterization". Esto con la finalidad de seleccionar el método termodinámico con el que el simulador resolverá el sistema.



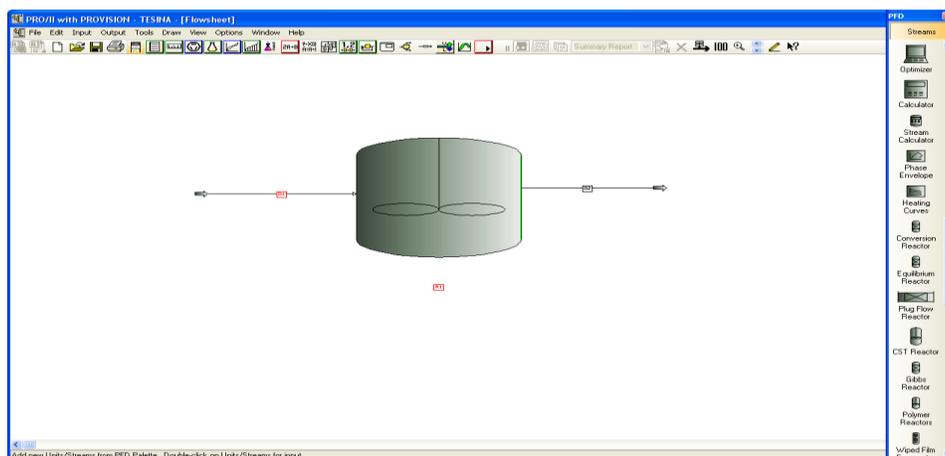
Seleccionar UNIFAC debido a que es un método de contribución de grupos funcionales y permitirá trabajar adecuadamente con los compuestos declarados.

Inmediatamente después de seleccionar el método, aparece una nueva pantalla en donde el simulador cuestiona si se desea trabajar con 2 fases líquidas. Pero esto resulta inútil debido a que únicamente se maneja una corriente a la salida del reactor.



4.4.1.4. Estructuración del Proceso.

En la pantalla principal del simulador, del lado derecho se encuentra una paleta donde se despliega una lista de todos los equipos con los que puede trabajar el simulador. Ir a la pestaña de reactores, seleccionar y arrastrar el reactor del tipo CSTR. Así mismo, en la pestaña general dentro de esa misma paleta se encuentra el icono “Streams”. Seleccionar, arrastrar y conectar al reactor. Una como alimentación al equipo y otra como efluente de este.





4.4.1.5. Especificación de la Alimentación y sus Propiedades Termodinámicas.

Dar doble clic en la corriente de alimentación al reactor para proporcionar los datos de la corriente como Flujo, Composición y Condiciones Termodinámicas.

Para Ingresar el flujo y composición, dar clic en la pestaña "Flowrates and Composition". Esto despliega una nueva pantalla donde se debe ingresar la información obtenida en los cálculos realizados en el Capítulo 3 y que están plasmados en la tabla 3.1.

Copy	Component	Component Flowrate g-mol/min
Paste	TRIOLEINA	3.5900
	DIOLEINA	
	MONOLEINA	
	METHANOL	21.560
	OLEATO DE METILO	
	GLYCERIN	

Clear Compositions Total: 25.150 Normalize Component Flowrates
Based on Specified Fluid Flowrate

OK Cancel

Enter the composition

Las condiciones Termodinámicas como Presión y Temperatura se ingresan en este mismo paso. Temperatura de Alimentación 30°C y Presión Atmosférica.



The screenshot shows the 'PRO/II - Stream Data' dialog box. It has a menu bar with 'UOM', 'Range', 'Help', 'Tag', 'Overview', 'Status', and 'Notes'. The 'Stream' field contains 'S1' and the 'Description' field contains 'REACTOR PARA PRODUCCIN DE BIODIESEL'. The 'To Unit' is set to 'R1'. Under 'Stream Type', 'Composition Defined' is selected. There are buttons for 'Flowrate and Composition...', 'Stream Solids Data...', and 'Stream Polymer Data...'. The 'Thermal Condition' section has 'First Specification' set to 'Temperature' with a value of '30.00' C, and 'Second Specification' set to 'Pressure' with a value of '1.0000' atm. The 'Thermodynamic System' is set to 'Default (UNIF01)'. There are 'OK' and 'Cancel' buttons at the bottom.

4.4.1.6. Declaración de las Reacciones.

Para declarar las reacciones, dar clic en el icono "2ª +B".

The screenshot shows the 'SIMSCI - Reaction Data' dialog box. It has a menu bar with 'UOM', 'Range', 'Help', 'Overview', and 'Status'. Below the menu bar is a table with columns for 'Cut', 'Reaction Set Name', 'Description', and an action button. The table has 5 rows. The first row is selected and has '1' in the 'Cut' column, 'BIODIESEL' in the 'Reaction Set Name' column, 'BIODIESEL A PARTIR DE AC. DE JATROPH' in the 'Description' column, and 'Enter Data...' in the action column. Below the table are 'OK' and 'Cancel' buttons. At the bottom, there is a text field with the prompt 'Enter an optional description of the reaction set'.

Cut	Reaction Set Name	Description	Action
1	BIODIESEL	BIODIESEL A PARTIR DE AC. DE JATROPH	Enter Data...
2			Enter Data...
3			Enter Data...
4			Enter Data...
5			Enter Data...

Nombrar el conjunto de reacciones y una breve descripción de esta. Dar clic en "Enter Data". Seleccionar Ley de Potencias como Método de Cálculo debido a que se cuenta con datos de este tipo. Nombrar la reacción y definirla mediante el balance estequiométrico de cada una de las reacciones involucradas. En este caso son 3 pero al tratarse de reacciones reversibles, 6 reacciones deben ser declaradas.



"SIMULACIÓN DE UN REACTOR QUÍMICO PARA LA OBTENCIÓN DE BIODIESEL
A PARTIR DE LA TRANSESTERIFICACIÓN DE ACEITE DE JATROPHA."

Reaction Data - Reaction Definitions

UOM Range Help

Reaction Set: BIODIESEL
Description: BIODIESEL A PARTIR DE AC. DE JATROPHA

Data Entry Legend
Heat of Reaction - H...
Equilibrium Data - E...
Kinetic Data - K...

Kinetic Rate Calculation
Calculation Method: Power Law Procedure Name:

Cut	Name	Definition			
Insert	1	TRIO-TO-DIO	Reactants = Products	H...	E... K...
Reset	2		Reactants = Products	H...	E... K...
	3		Reactants = Products	H...	E... K...
	4		Reactants = Products	H...	E... K...
	5		Reactants = Products	H...	E... K...
	6		Reactants = Products	H...	E... K...

OK Cancel

Enter a unique name for the reaction

Reaction Data - Reaction Components

UOM Range Help

Reaction Name: TRIO-TO-DIO

Reactant Stoichiometry

Reactant	Stoichiometry
TRIOLEINA	1.00000
DIOLEINA	
MONOLEINA	
METANOL	1.00000
OLEATO DE METILO	

Product Stoichiometry

Product	Stoichiometry
TRIOLEINA	
DIOLEINA	1.00000
MONOLEINA	
METANOL	
OLEATO DE METILO	1.00000

Stoichiometric Balance:
Reactant Sum: 917.17 equals Product Sum: 917.17 within 0.1% relative tolerance.

Reaction Definition
 Use Formula Use Name

TRIOLEINA+ CH4O = DIOLEINA+ OLEATO DE METILO

OK Cancel

Exit the window after saving all data



Reaction Data - Reaction Definitions

UOM Range Help

Reaction Set: BIODIESEL
Description: BIODIESEL A PARTIR DE AC. DE JATROPHA

Data Entry Legend
Heat of Reaction - H...
Equilibrium Data - E...
Kinetic Data - K...

Kinetic Rate Calculation
Calculation Method: Power Law Procedure Name:

Cut	Name	Definition	H...	E...	K...
1	TRIO-TO-DIO	TRIOLEINA+ CH4O = DIOLEINA+ OLEATO DE METILO	H...	E...	K...
2	DIO-TO-TRIO	DIOLEINA+ OLEATO DE METILO = TRIOLEINA+ CH4O	H...	E...	K...
3	DIO-TO-MONO	DIOLEINA+ CH4O = MONOLEINA+ OLEATO DE METILO	H...	E...	K...
4	MONO-TO-DIO	MONOLEINA+ OLEATO DE METILO = DIOLEINA+ CH4O	H...	E...	K...

OK Cancel

Select to define reaction stoichiometry

4.4.1.7. Especificación del Reactor y Cinética de las Reacciones.

En la pantalla principal, dar doble clic sobre el reactor, lo cual despliega una pantalla. Seleccionar el conjunto de reacciones e introducir la temperatura de mezclado y presión de operación del reactor.

PRO/II - Continuous Stirred Tank/Boiling Pot Reactor

UOM Define Range Help Overview Status Notes

Unit: R1 Description: REACTOR BIODIESEL

Reactor Type: Continuous Stirred Tank
Reaction Set Name: BIODIESEL

Thermal Specification
 Combined Feed Temperature
 Fixed Temperature: 60 C
 Fixed Duty: 0.00000 x 10⁶ Kcal/min

Thermodynamic System: Default (UNIF01)

Unit Reaction Definitions...
Extent of Reaction...
Product Phases...
Reactor Data...
Pressure...
Print Options...

OK Cancel

Enter the fixed reactor temperature



Dar clic en la pestaña “Unit Reaction Definitions”, se desplegara una nueva pantalla donde se muestran las reacciones declaradas y seleccionadas en el conjunto de reacciones. Seleccionar fase liquida y base molar ya que es una reacción de este tipo.

Continuous Stirred Tank Reactor - Unit Reaction Definitions

UOM Range Help

Reaction Set: BIODIESEL Description: BIODIESEL A PARTIR DE AC. DE

Operation Phase and Activity Basis

Reactor Operation Phase: Liquid Reaction Activity Basis: Molar Concentration

Default Option for Kinetic Rate Calculation

Calculation Method: Power Law Procedure Name: Enter Data...

Name	Definition	Kinetic Data...
TRIO-TO-DIO	TRIOLEINA + CH40 = DIOLEINA + OLEATO DE METILO	Kinetic Data...
DIO-TO-TRIO	DIOLEINA + OLEATO DE METILO = TRIOLEINA + CH40	Kinetic Data...
DIO-TO-MONO	DIOLEINA + CH40 = MONOLEINA + OLEATO DE METILO	Kinetic Data...
MONO-TO-DIO	MONOLEINA + OLEATO DE METILO = DIOLEINA + CH40	Kinetic Data...

OK Cancel

Exit the window after saving all data

Dar clic en Datos Cinéticos e ingresar los datos de la tabla 4.1 para cada una de las reacciones individuales.

Continuous Stirred Tank Reactor - Unit Kinetic Data

UOM Define Range Help

Reaction Set: BIODIESEL Reaction Name: TRI-DIO

Reaction: TRIOLEINA + CH40 = OLEATO DE METILO + DIOLEINA

Kinetic Data

Power Law: $Rate = A \cdot \exp[-E/RT] \cdot T^n \prod (Activity)^{Order}$

Pre-exponential Factor (A): 2.1035e+007

Activation Energy (E): 23.6609 x10³ BTU/lb-mol

Temperature Exponent (n): 0.00000

Base Component: TRIOLEINA

Units: Temperature: K, Weight: g, Volume: liter, Pressure: atm, Time: min

Reaction Order and Activity Basis

Default Phase: Liquid

Reaction Activity Basis: Molar Concentration

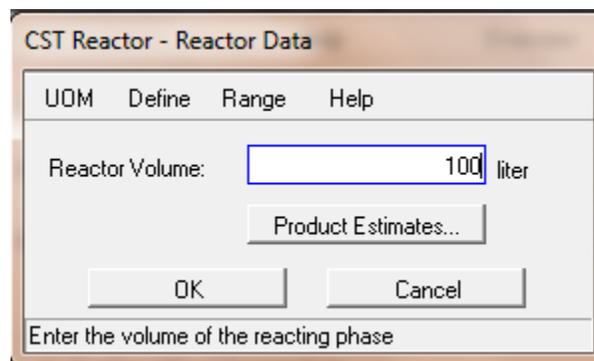
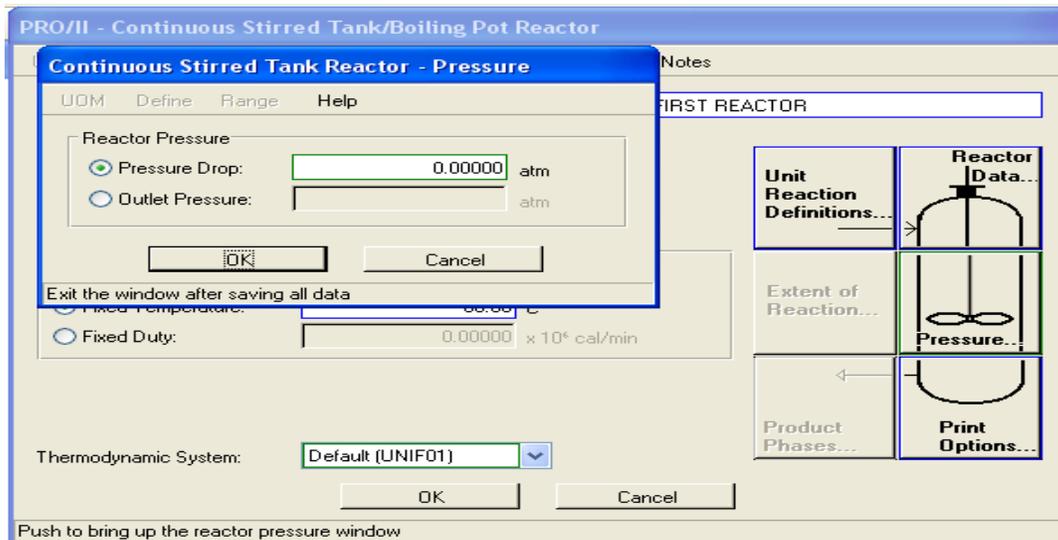
Reaction Orders...

OK Cancel

Exit the window after saving all data



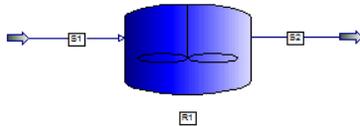
Una vez ingresados todos los datos, ingresar la caída de presión de dentro del reactor así como el volumen del reactor. Este último dato es el único que se va a iterar para encontrar el óptimo para la producción deseada con la mayor conversión posible.



Una vez ingresados todos los datos necesarios, dar clic en el icono "Play", la simulación se llevara a cabo y aparecerá una tabla de resultados.



4.4.1.8. Resultados Obtenidos en la Simulación Iterativa.



Stream Name		S1	S2
Stream Description			
Phase		Liquid	Liquid
Temperature	C	30.0000	60.0000
Pressure	ATM	1.0000	1.0000
Enthalpy	MM KCAL/MIN	0.0017	0.0002
Molecular Weight		97.6588	97.6594
Vapor Weight Fraction		0.0000	0.0000
Liquid Weight Fraction		1.0000	1.0000
Total Mass Rate	G/MIN	1645.239	1645.249
Total Weight Comp. Rates	G/MIN		
TRIOLEINA		1146.9515	87.6862
DIOLEINA		0.0000	3.0092
MONOLEINA		0.0000	10.3868
METHANOL		498.2876	384.4942
OLEATO DE METILO		0.0000	1052.5894
GLYCERIN		0.0000	107.0830

Después de una serie de iteraciones cambiando el Volumen del reactor, el volumen óptimo es de 250 Litros, con una conversión del 81%. En la Tabla 4.3 se muestran los resultados obtenidos de la simulación.



Tabla 4.3. Resultados Obtenidos de la Simulación del Reactor.

CORRIENTE	S1	S2
FASE	LÍQUIDO	LÍQUIDO
TEMPERATURA [°C]	30	60
PRESIÓN [atm]	1	1
PESO MOLECULAR [g/gmol]	153.9119	153.9159
FRACCIÓN LIQUIDA	1	1
FLUJO [gmol/min]	25.13	25.13

FLUJO POR COMPONENTE [gmol/min]		
TRIOLEINA	3.59	0.66
DIOLEINA	-	0.0315
MONOLEINA	-	0.1694
METANOL	21.54	12.9825
GLICEROL	-	8.5575
OLEATO DE METILO	-	2.7291

COMPOSICIÓN [%w]		
TRIOLEINA	0.143	0.026
DIOLEINA	-	0.001
MONOLEINA	-	0.007
METANOL	0.857	0.517
GLICEROL	-	0.341
OLEATO DE METILO	-	0.109



ANÁLISIS DE RESULTADOS

4.5 Alimentación de Exceso de Metanol al Reactor.

Inicialmente, se alimento Metanol en una relación 6:1 con respecto al Triglicérido; dando la conversión antes mencionada de 81%. Sin embargo se evaluó el comportamiento de la conversión con respecto a la cantidad de Metanol alimentado al reactor, donde 0% representa la alimentación estequiométrica es decir 3:1 y porcentajes mayores representan la modificación a dicha relación.

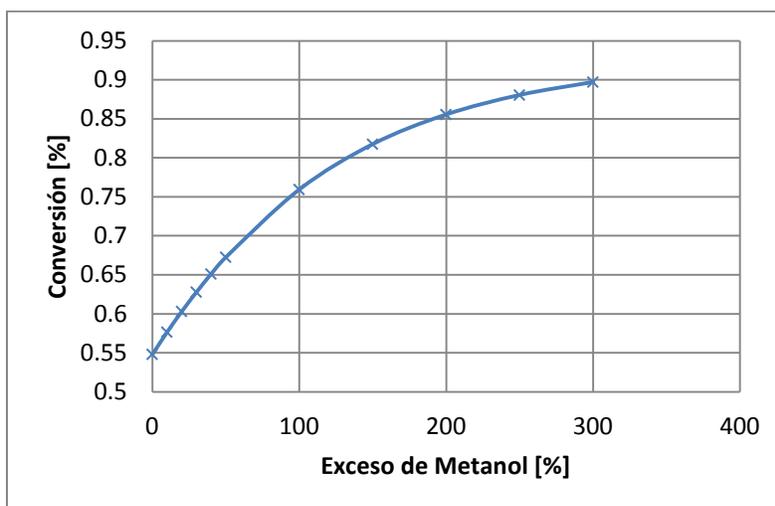


Figura 4.4. Variación de la Conversión con respecto al Exceso de Metanol.

En la figura 4.4 se aprecia que el aumento en el exceso de Metanol afecta de manera exponencial la conversión de la reacción. Dicho comportamiento puede explicarse por el Principio de Le Chatelier. El cual establece que "Si un sistema químico que inicialmente se encuentra en equilibrio experimenta un cambio en la concentración, la temperatura, el volumen o en la presión parcial. Dicho sistema contrarrestará este cambio". Este cambio dependerá de la estequiometría de la reacción.



Es decir, cuando, como en este caso, el número de moles en los productos es mayor que en los reactivos, la conversión aumentara reduciendo la presión o incrementando la concentración de uno de los reactivos en este caso el Metanol.

Esto es debido que al aumentar el número de moles de Metanol dentro del reactor, la presión interior aumentara si y solo si se habla de un reactor por lotes. Esto por efecto del incremento en las moléculas dentro del mismo. Al reducir la presión en el reactor, el equilibrio se desplazara hacia el lado de la reacción donde se incremente el número de moles para compensar esta reducción.

Por otra parte, cuando el incremento se hace en la concentración de uno de los reactivos, la reacción dispondrá de mayor cantidad de reactivo, lo que favorece la conversión. Generalmente la decisión de exceder un reactivo se basara a factores meramente económicos.

Según el mecanismo mencionado en la figura 4.3, las reacciones involucradas son reversibles, lo cual es contrarrestado al presentar un exceso de Metanol. Con ayuda de este exceso, el equilibrio químico es desplazado hacia los productos, sin embargo y a pesar de su recuperación, un gran exceso del alcohol resulta en gastos innecesarios además de incosteables para la producción diaria.

El análisis de estos datos arroja que es posible una relación Alcohol-Aceite de hasta 9:1. Sobrepasando esta relación, el aceite estaría muy diluido en el alcohol lo que reduce su concentración, razón por la cual la velocidad de reacción se vería afectada.



4.6 Alimentación de NaOH al Reactor.

El incremento en la masa del catalizador aumenta el grado de conversión obtenido. En la figura 4.5 se observa que para cantidades que se encuentran en un rango de 0.25 a 1%w/w NaOH con respecto al aceite, la conversión aumenta de manera aproximadamente lineal, pero estos cambios son pequeños en rangos subsecuentes (1-2%w/w). Razón por la cual la concentración de catalizador con respecto al aceite se tomo como la reportada por las investigaciones de 1%w/w ya que es la más económicamente productiva.

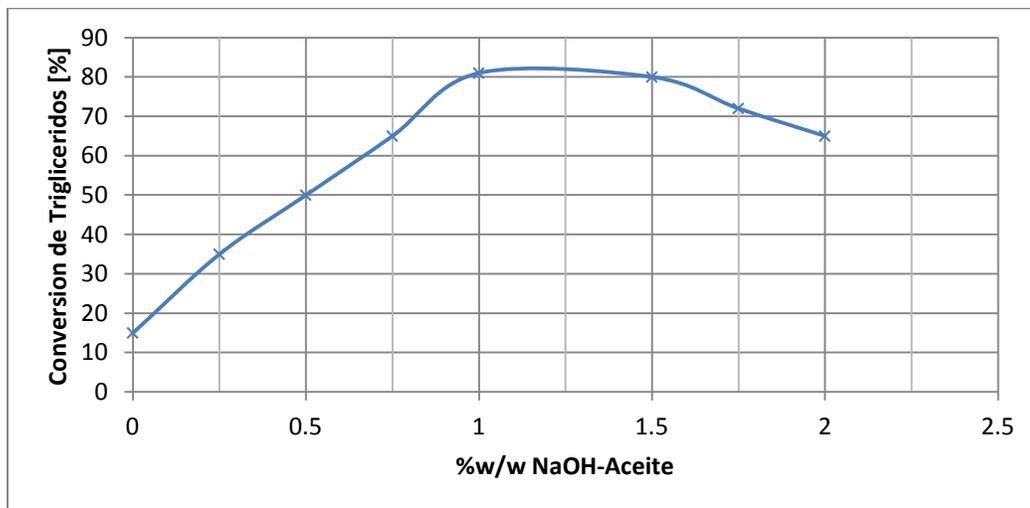


Figura 4.5. Relación de Alimentación de Catalizador con la Conversión.

Este comportamiento se debe a que concentraciones mayores del 1-1.5%w/w de Hidróxido de Sodio respecto al aceite, llevan la reacción hasta la saponificación de los aceites para la formación de jabones lo que reduce la conversión de los triglicéridos al éster.



4.7 Efecto de la Temperatura de Reacción.

El efecto que la Temperatura tiene sobre la conversión final de la reacción se estudio utilizando 1%w/w de NaOH con respecto al aceite de Jatropha y manteniendo el resto de las condiciones constantes (P=1atm, Flujo Volumétrico Cte., Relación Alcohol-Aceite 6:1, Volumen del Reactor de 250L). En la Tabla 4.4 y Figura 4.6 se observa el comportamiento que la conversión final tiene con respecto a cambios de temperatura.

Tabla 4.4. Conversión de Triglicéridos a diferentes Temperaturas.

Temperatura de Reacción [°C]	Conversión de Triglicéridos [%]
30	27.43
40	46.53
50	66.93
60	81.62
70	89.84
80	94.20
90	96.55

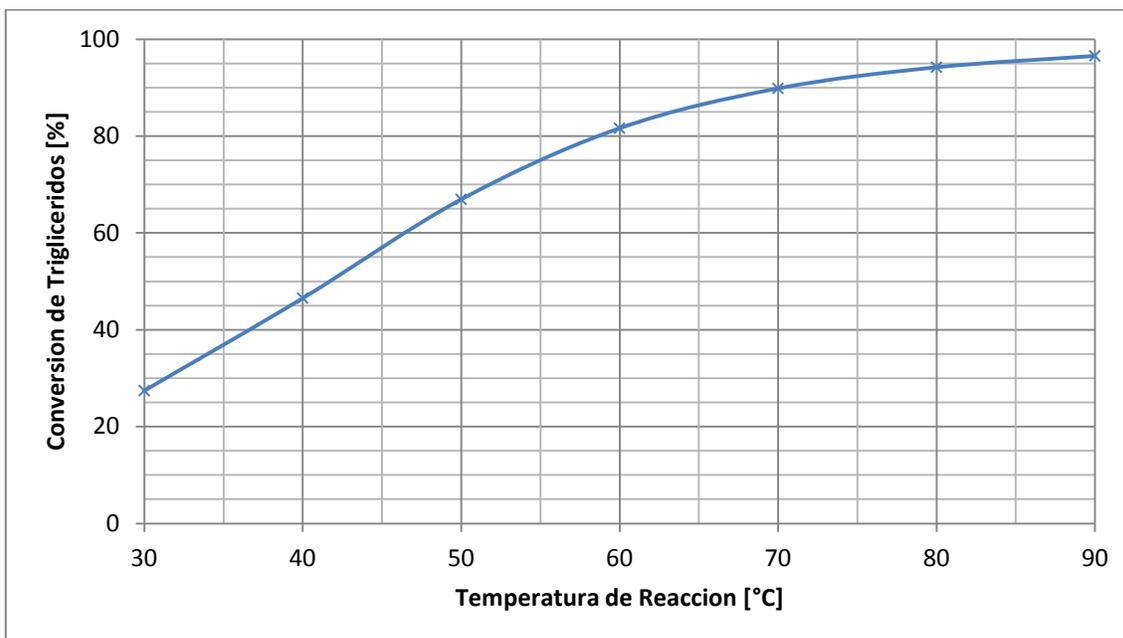


Figura 4.6. Relación de la Temperatura de Reacción con la Conversión.

Es notable que a temperaturas mayores, la conversión de triglicéridos aumenta. Sin embargo temperaturas mayores a las del punto de ebullición del Metanol (Aprox. 64°C), favorecen la existencia de grandes pérdidas por evaporación del alcohol, por lo cual no se recomienda trabajar con este tipo de reactores con temperaturas por arriba de los 60-65°C.

4.8 Volumen del Reactor y Tiempo espacial.

Para conocer el comportamiento de la conversión con respecto al volumen del reactor, se mantuvo constante el flujo volumétrico alimentado al reactor. En la figura 4.9 y 4.10 se observa que el aumento de volumen del reactor afecta exponencialmente a la conversión.

El espacio-Tiempo se define como el tiempo necesario para tratar un volumen de alimentación igual al volumen del reactor en condiciones determinadas.



$$\tau = \frac{V}{v_o} = \frac{\text{Volumen del reactor}}{\text{Gasto volumétrico}} [=] \text{Unidades de tiempo}$$

Figura 4.7. Definición de Espacio-Tiempo (Tao).

De la figura 4.7 es sencillo apreciar que el espacio-tiempo es directamente proporcional al Volumen del reactor e inversamente proporcional al Gasto Volumétrico. Es decir, para modificar el tiempo espacial es necesario mover alguna de estas dos variables.

Para el caso de estudio, el gasto volumétrico ha sido previamente establecido en la tabla 3.1 de acuerdo a la necesidad de producción, por lo cual para modificar el tiempo espacial es necesario modificar el volumen del reactor.

La conversión final se ve afectada con el aumento del volumen del reactor de acuerdo a la figura 4.8.

$$\tau = \frac{C_{A_o}(x_{A_{salida}} - x_{A_{entrada}})}{-\sigma_A}$$

Figura 4.8. Relación del Volumen del Reactor con la Conversión Final

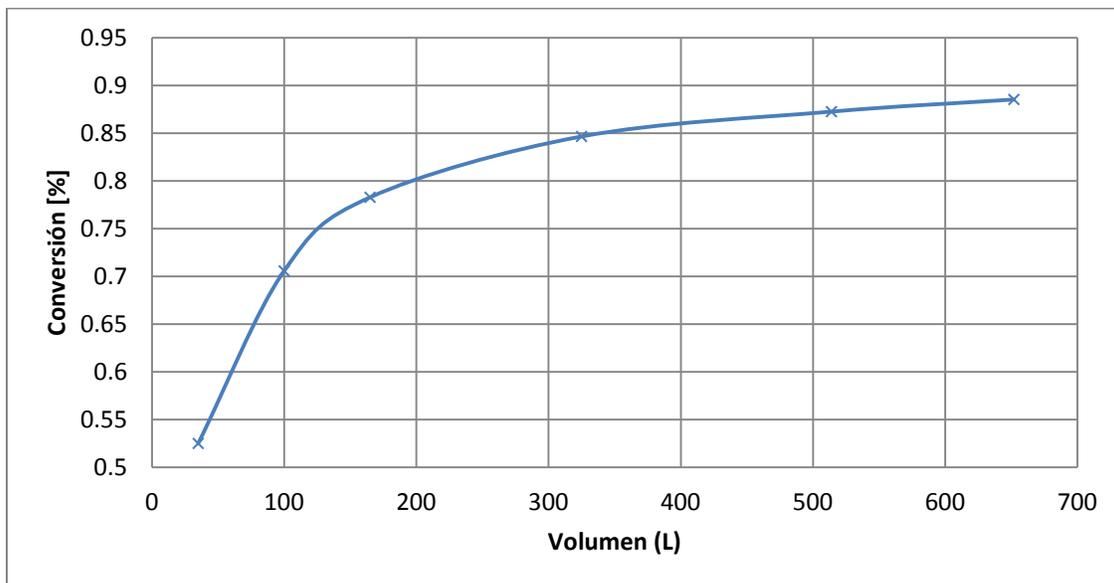


Figura 4.9. Variación de la Conversión con respecto al Volumen del Reactor a Flujo Volumétrico Constante.

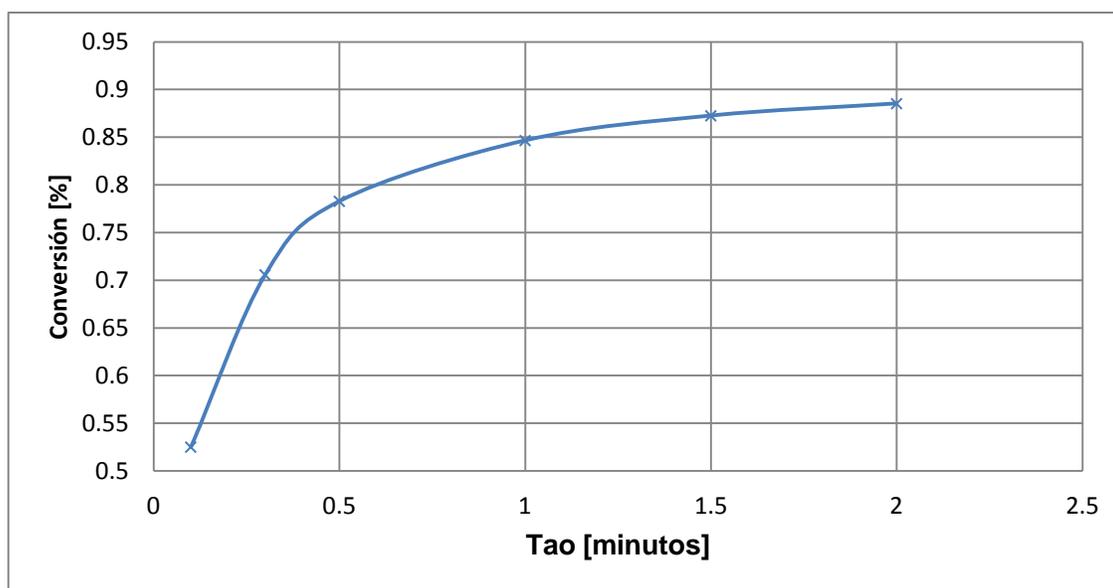


Figura 4.10. Variación de la Conversión con respecto al Tiempo Espacial a Flujo Volumétrico Constante.



Las figuras 4.9 y 4.10 muestran la dependencia de la conversión final con respecto al tiempo espacial de reactor. Esto puede explicarse de manera muy sencilla. Cuando el flujo volumétrico es constante, es decir la condición de alimentación está dada y el tiempo espacial del equipo es pequeño, las moléculas de Triglicéridos y Alcohol permanecen un corto periodo de tiempo dentro del reactor y así de las condiciones optimas de reacción desfavoreciendo la reacción. Por el contrario si el tiempo espacial del equipo es muy grande, las moléculas entrantes al reactor tendrán el tiempo suficiente a las condiciones óptimas para reaccionar. Falta de Tiempo espacial desfavorece la conversión final. Tiempo espacial de sobra, genera gastos innecesarios de equipo.

4.9 Cumplimiento de Especificaciones ASTM.

El biodiésel obtenido de este proceso tiene las siguientes especificaciones:

Tabla 4.5. Propiedades del Biodiésel obtenido en la Simulación.

Propiedad	NORMA ASTM	Resultado	Estatus
Densidad [kg/m^3]	D-287	889.1	Dentro de Norma
Densidad API	D-287	31.2	Dentro de Norma
Visc. Cinemática [cSt]	D-445	4.95	Dentro de Norma
Agua [%w]	D-1744	0.01	Dentro de Norma

El biodiésel obtenido de esta simulación, cumple con las normas internacionales establecidas por la ASTM para su uso en motores de combustión interna y generadores de vapor.



CONCLUSIONES

La simulación del proceso de Transesterificación de aceite de Jatropha para la obtención de biodiésel, se realizó con la herramienta SimSci PROII. Gracias a los beneficios que esta herramienta ofrece como la generación de parámetros y la selección de modelos y rutas de cálculo de propiedades termodinámicas y de transporte. Se pudieron realizar varios ensayos con los cuales se obtuvieron datos suficientes para corroborar que el volumen del reactor seleccionado y en consecuencia el Espacio-Tiempo así como el Exceso de Metanol empleado, la cantidad de Catalizador y la Temperatura fueron los adecuados para la producción necesaria del biocombustible.

Dichos parámetros, principalmente el Exceso de Metanol empleado fue seleccionado basándose en el Principio de Le Chatelier para favorecer el desplazamiento de la reacción hacia los productos. Un exceso de 100% de Metanol es decir una relación Metanol-Aceite 6:1 es la cantidad suficiente para lograr conversiones mucho mayores que si solo se empleara el necesario estequiométricamente, y esto no eleva significativamente el costo de operación del reactor.

Si bien es posible aumentar aún más la conversión, las opciones para aumentarlo resultarían en un sobregasto. Primero resultaría un exceso de gasto en adquisición de Metanol que si bien puede ser recuperado y recirculado en el proceso, es necesario establecer trenes de separación más complejos y por lo tanto mayores gastos.



Por otra parte, el incremento en el volumen del reactor, únicamente incrementaría de manera más notable el costo del mismo y resultaría sobre diseñado ya que se estaría desperdiciando la capacidad del reactor acorde a la necesidad de producción de Biodiésel. Aunque es posible hacerlo tomando en cuenta planes a futuro de aumentar la capacidad instalada de producción.

La cantidad de catalizador alimentada juega un rol muy importante dentro de la producción de biodiésel mediante la transesterificación de triglicéridos, ya que debe ser la cantidad adecuada de este para que la reacción tenga el comportamiento deseado. Es decir, una cantidad mayor a la necesaria de NaOH respecto al aceite, favorecería la reacción de saponificación, con lo cual el combustible obtenido quedaría fuera de norma ya que la separación de los jabones del biocombustible es demasiado costosa y difícil. Ahora si se trabaja con una cantidad menor, la reacción se vería lenta además de que la producción no cumpliría con la cantidad requerida en el tiempo necesario.

La temperatura es un parámetro de vital importancia, ya que mayores temperaturas requieren más consumo de energía en el reactor lo que conlleva más gasto de operación que lo haría un método no viable económicamente de producción del combustible. Por el contrario temperaturas bajas tendrían un menor consumo energético dentro del reactor pero una producción pobre del Éster y se necesitarían trenes de separación que consumirían mucha más energía que la necesaria en el reactor para la separación de los compuestos.

Finalmente es interesante observar que el tipo de reactor propuesto, las condiciones de operación, así como el tamaño del equipo tienen la capacidad de satisfacer la necesidad de producir un combustible limpio, económico y ambientalmente amigable que sea contrapunto de combustibles fósiles hasta el día de hoy empleados.



La producción de biodiésel mediante la transesterificación de aceites vegetales, es una alternativa viable además de muy económica para ir sustituyendo el consumo de combustibles fósiles. Se han mencionado anteriormente las ventajas ambientales como las sociales. Ambientales debido a que sus emisiones son nulas debido al origen vegetal del aceite, y sociales debido a que sería una fuente extra de ingresos a la sociedad que se dedique al cultivo y producción del aceite de Jatropha.



REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] D. Castillo, *Validad de los biocombustibles y bioetanol*, 2009.
- [2] Petróleo, I.M.D., *Potenciales y viabilidad del uso de Bioetanol y Biodiésel para el Transporte en México*, 2008.
- [3] http://www.astm.org/NEWS/SPANISH/SPJF09/nelson_spjf09.html, Consultada en Enero 2014.
- [4] Gviria Ríos J., Hernán Mora J. y Ramiro Agudelo J., “Historia de los motores de combustión interna”, *Revista Facultad de Ingeniería*, No. 26, 2002, p. 68-78.
- [5] Meher, S., Naik, “Aspects of biodiesel production by Transesterification. A review”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2006, p. 248-268.
- [6] Estados Unidos de América, Agencia para la Protección del Medio Ambiente, *Emisiones de Tóxicos en el Aire*, Junio de 1999, EUA, EPA.
- [7] Kleemann M., Hernández C. y López R., “La participación de la OPEP en la crisis petrolera de 1973”, *Debate Social*, No. 22, 2008, p. 1-23.
- [8] <http://www.marcadecoche.com/historia-biodiésel.html>, Consultada en Enero 2014.
- [9] <http://www.sagpya.mecon.gov.ar/new/oo/agricultura/otros/biodiese/foronacional/indexforonacional.php>, Consultada Noviembre 2009.
- [10] Bonilla Calzada Iris, “Los bioenergéticos en México: El marco Legal”, *Energía a Debate*, Tomo V, No. 29, Noviembre-Diciembre 2008. p. 35-38.
- [11] Sarmiento Torres Roció, “Propiedades Físicas y Químicas del Biodiesel vs Diesel de Petróleo”, *Energía a Debate*, Tomo V, No. 29, Noviembre-Diciembre del 2008. p. 39-40.
- [12] A. E. Blangino, S.D.R., *Modelado y Correlación de Propiedades en Biodiésel*, ANALES AFA, 2004, p. 93-97.



-
- [13] Freedman, E.H. Mounts, Variables affecting the yields of fatty esters from Transesterified vegetable oils. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, Ibid. 61: 1638-1643, 1986.
- [14] Demirbas, A., Biodiésel, A realistic fuel alternative for Diesel Engines. Springer, Cap. 5, 2008.
- [15] Fangrui Ma.; Milford A.Hanna, Biodiesel production: A review, *Tetrahedrom Letters*, *Bioresource Technology* 70, 1999, p. 1-15.
- [16] Fukuda H., K.A., Noda H., Biodiesel fuel production by Transesterification of oils, *Journal of Bioscience and bioengineering*, No. 92-5, 2001, p. 405-16.
- [17] Uribe Gómez Morayma, Simulación de una planta piloto para la producción de Biodiésel en el laboratorio de operaciones unitarias de la ESIQIE, Tesis, Ingeniería Química Industrial, Instituto Politécnico Nacional, México D.F., 2010, 78.
- [18] Tiwary A., Raheman H., "Biodiesel production from Jatropha oil with free fatty acids: an optimized process", *Biomass Bioenergy*, Vol. 31, 2007, p. 569-575.
- [19] Veljkovic V., Stamenkovic O., Todorovic Z., Lazic, M., Biodiésel production from tobacco (*Nicotiana tabacum* L.) seed oil with a high content of free fatty acids. Vol. 85, 2006, p. 2671-2675.
- [20] Recinos G., Rodriguez A., Hernández C., Yeomans J., "Metodología para la fabricación de biodiésel a partir de aceite de palma africana (*Elaeis guineensis*) y aceite de soya usado". *Revista Tierra Tropical*, Vol. 1, 2005, p. 51-59.
- [21] Meher L., Naik S., "Technical aspects of biodiesel production by Transesterification. A review", *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. 10, 2006, p. 248-268.
- [22] Freedman B., Butterfield R., Pryde E., "Transesterification kinetics of soybean oil", *JAOCS*, Vol. 63, No. 10, 1986, p. 1375-1380.
- [23] Liu X., P.X., Wang Y., Zhu S., He H., "Calcium methoxide as a solid base catalyst for the Transesterification of soybean oil to biodiesel with methanol", *Fuel*, Vol. 87-7, 2008, p. 1076-1082.



-
- [24] Ávila Gómez Adrian, Desarrollo de la Cinética Química de la reacción de Transesterificación de la Oleína de Palma, Tesis, Maestría en Ingeniería Mecánica, Universidad del Norte, Barranquilla Colombia, 2006, 103.
- [25] <http://www.sener.gob.mx>, Consultada en Enero 2014.
- [26] <http://www.vegetablesoilsproperties.rty.com>, Consultada Enero 2014.
- [27] <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/18490153>, Consultada en Enero 2014.
- [28] <http://www.agroeducacion.com>, Consultada Enero 2014.
- [29] <http://www.veoverde.com/2014/01/soya-ventajas-y-desventajas-de-consumirla-diariamente/>, Consultada en Enero 2014.
- [30] López Maldonado Byron, Plan estratégico de Producción de Biodiésel para consumo propio en la Industria Azucarera Guatemalteca, Maestría En Energía y Ambiente, Universidad San Carlos de Guatemala, Guatemala, 2011, 114.
- [31] Purdue University, Biodiesel Review, 1983.
- [32] <http://co2tropicaltrees.blogspot.mx/2010/11/jatropha-curcas-part-1-profitable.html>, Consultada en Enero 2014.
- [33] <http://www.2000agro.com.mx/agroindustria/entrega-inverbio-casi-1-mdp-a-productores-para-vivero-de-jatropha/>, Consultada en Enero 2014.
- [34] Purdue University, Biodiesel Review 1985.
- [35] <http://maringatova.blogspot.mx/2009/03/girasol-helianthus-annuus.html>, Consultada en Enero 2014.
- [36] http://www.sagarpa.gob.mx/transparencia/reglas/status_competitividad_ramas_produccion.pdf, Consultada Enero 2014.
- [37] http://www.fian.hn/v1/index.php?option=com_k2&view=item&id=1036:aceite-de-palma-as%C3%AD-da%C3%B1a-al-medio-ambiente&Itemid=4, Consultada Enero 2014.
- [38] México, DIRECCION DE AHORRO DE ENERGIA EN EL TRANSPORTE, Biodiésel, Diciembre del 2007, México, CONAE.
- [39] <http://vgeusa.weebly.com/noticias.html>, Consultada en Enero 2014.



-
- [40] Bruinsma Baukje, Producción de Biodiésel de palma aceitera y jatropha en la Amazonia del Perú y el impacto para la sostenibilidad, Opem Universitet Nederland, Perú, 2009, p. 89.
- [41] López Montes Rebeca, Potencial de Producción de Semilla de Jatropha Curcas en Sinaloa, Posgrado en Ciencias de la Tierra, Querétaro, Universidad Nacional Autónoma de México, 2008, p.14.
- [42] <http://www.bioenergeticos.gob.mx/index.php/biodiésel/produccion-a-partir-de-jatropha.html>, Consultada en Enero 2014.
- [43] http://www.catarina.udlap.mx/u_dl_a/tales/documentos/lic/...c_r/capitulo3.pdf, Consultada en Enero 2014.
- [44] Motta C., Torres V., Vilchez P., Yance E., Reactor CSTR y PFR, Callao Perú, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional de Callao, 2001, p. 9.
- [45] Cao Eduardo, Intercambiadores de Calor, Ed. Independiente, Argentina, 1983, p.180.
- [46] H- Scott Flogler, Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas, 3ra Edición, Editorial Pearson- Prentice Hall, México, 2008, p.969.
- [47] H. Perry Robert, Manual del Ingeniero Químico, 6ta Edición, Editorial McGraw Hill, México, 2001, p. 2577.
- [48] García J., Ibarra P., Felix G., Rios G., “La Simulación de Procesos en Ingeniería Química”, Revista Investigación Científica, Vol. 4, No. 2, 2008, p.9.
- [49] Scenna Nicolás, Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos, Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Rosario, Argentina, 1999, p. 840.
- [50] Martínez Víctor, Simulación de procesos en Ingeniería Química. Editorial Plaza y Valdéz, México, 2000, p. 755.
- [51] SIMSCI PROII, Comprehensive Process Simulation, 2000, p.6.
- [52] <http://www.metrobus.df.gob.mx/>, Consultada En Enero 2014.
- [53] Volvo Buses México, Volvo 7300, 2013, p. 6.



-
- [54] Jáuregui Rincón Juan, Producción de Biodiésel a partir de grasas de desecho, Protocolo de Tesis, Ingeniería Bioquímica, Universidad Autónoma de Aguascalientes, Aguascalientes Ags., 2006, p. 7.
- [55] Noureddini H., Zhu D., “Kinetics of Transesterification of Soybean Oil”, JAOCS, Vol. 74, No. 11, 1997, p. 1457-1463.
- [56] <http://www.wearcheckiberica.es/documentacion/doctecnica/combustibles.pdf>, Consultada en Enero 2014.
- [57] <http://www.monografias.com/trabajos67/biodiésel-alternativa-energetica/biodiésel-alternativa-energetica2.shtml>, Consultada en Enero 2014.
- [58] <http://www.miliarium.com/Bibliografia/Monografias/Biocombustibles/Biodiésel.asp>, Consultada en Enero 2014.
- [59] http://www.conuee.gob.mx/work/sites/CONAE/resources/LocalContent/4386/2/biodiésel_imp.pdf, Consultada en Enero 2014.
- [60] <http://www.conae.gob.mx/work/sites/CONAE/resources/LocalContent/466/2/biodiésel.pdf>, Consultada en Enero 2014.
- [61] <http://www.biodisol.com/biocombustibles/biodiésel/produccion-de-biodiésel-a-partir-de-aceite-de-jatropha-curcas/>, Consultada en Enero 2014.
- [62] <http://www.biodisol.com/biodiésel-que-es-el-biodiésel-definicion-de-biodiésel-materias-primas-mas-comunes/jatropha-curcas-physic-nut-pinhao-manso-tempate/>, Consultada en Enero 2014.