



**UNIVERSIDAD MICHUACANA DE
SAN NICOLÁS DE HIDALGO**



**DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO DE LA
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE
BIODIESEL A PARTIR DE ACEITES DE
JATROPHA E HIGUERILLA**

TESIS presentada por:

DANIEL ALVAREZ BARRERA

**A la División de Estudios de Posgrado de la
Facultad de Ingeniería Química como
requisito parcial para obtener el
grado de:**

**MAESTRO EN CIENCIAS
EN
INGENIERÍA QUÍMICA**

Directora de tesis: Dra. Ma. del Carmen Chávez Parga

Morelia Michoacán, Enero de 2011

RESUMEN

“SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL A PARTIR DE ACEITES DE JATROPHA E HIGUERILLA”

Por
Daniel Álvarez Barrera
Febrero 2011

Debido a la situación energética en la cual se encuentra nuestro país actualmente (se tiene petróleo suficiente para satisfacer la demanda del mismo durante un aproximado de 12 años), es necesario pensar en la posibilidad del diseño y construcción de fábricas capaces de procesar los derivados de la biomasa para la producción de biocombustibles sustituyendo así aquellos productos que, hasta la fecha, provienen del tratamiento del crudo.

El presente trabajo tiene como finalidad el diseño, evaluación y comparación técnica y económica (de manera integral) de la propuesta de instalación de una planta para producir biodiesel a partir de la transesterificación de aceites de *jatropha curcas* e higuierilla en un medio con catalizador básico (potasa cáustica al 0.5% w/w), mediante el uso de un simulador especializado en procesos como lo es Super Pro Designer, además de simularse este proceso con dos usos distintos para el catalizador manejado (recirculándolo al proceso o bien neutralizándolo para venderse como subproducto del mismo). Las variables técnicas principales comparadas durante las simulaciones de estos procesos fueron la eficiencia energética y los rendimientos obtenidos durante los mismos, mientras que las variables económicas involucraron a la tasa de retorno, precio de venta mínimo y tiempo de recuperación de capital para cada uno de ellos.

Se encontró que la producción de biodiesel con aceite de *jatropha curcas* presenta ventajas considerables desde el punto de vista energético y económico: con una relación de energía producida/consumida igual a 37, mientras que para la higuierilla es de 3; la tasa de retorno es de 87%, aproximadamente 4.5 veces más elevada en referencia al uso de higuierilla. Además de ello, la economía del proceso se ve fuertemente influenciada por el uso dado a la potasa ya que existe un incremento de 20% en la tasa de retorno para *jatropha curcas* y 5% para higuierilla al pasar de un proceso sin recirculación a uno con recirculación de catalizador. Por ello es que puede decirse que para el proceso estudiado la mejor materia prima para la propuesta de un proceso de producción de biodiesel es por medio de *jatropha curcas* a partir de una capacidad de procesamiento de 2 ton/h.

Asesor: Dra. Ma. del Carmen Chávez Parga

ÍNDICE

Resumen	ii
Índice de contenido	iii
Lista de tablas	vii
Lista de figuras	ix
Agradecimientos	xii

Capítulo 1	Introducción	1
1.1	Generalidades	1
1.2	Justificación	6
1.3	Hipótesis	7
1.4	Objetivos	7
1.4.1	Objetivo General	7
1.4.2	Objetivos particulares	7
Capítulo 2	Marco teórico	8
2.1	Producción de biodiesel en el mundo	8
2.2	Fundamentos en el proceso de producción de biodiesel	10
2.2.1	Producción de biodiesel por transesterificación de aceite de jatropha curcas	14
2.2.1.1	Antecedentes	14
2.2.1.2	Ventajas	14
2.2.1.3	Crecimiento	15
2.2.2	Producción de biodiesel por transesterificación de aceite de higuerilla	16
2.3	Especificaciones del biodiesel	18
2.4	Procesos de fabricación de biodiesel	19
2.4.1	Procesos por lotes	19
2.4.2	Procesos catalíticos continuos	21
2.4.3	Procesos supercríticos	22
2.4.4	Hidrólisis y esterificación	23

2.4.5	Procesos enzimáticos	24
2.4.6	Hidropirólisis de triglicéridos	24
2.5	Cinética y catálisis para producción de biodiesel	25
2.5.1	Catálisis homogénea	25
2.5.2	Catálisis heterogénea	26
2.6	Operaciones de separación	27
2.7	Simulación: definiciones e importancia	27
2.7.1	Etapas para realizar un estudio de simulación	28
2.7.1.1	Definición del sistema	28
2.7.1.2	Formación del modelo	28
2.7.1.3	Colección de datos	28
2.7.1.4	Implementación del modelo en la computadora	28
2.7.1.5	Verificación	29
2.7.1.6	Validación del sistema	29
2.7.1.7	Experimentación	29
2.7.1.8	Interpretación	29
2.7.1.9	Documentación	30
2.7.2	Simulación en ingeniería química	30
2.7.2.1	Usos de Super Pro Designer	31
Capítulo 3	Metodología	32
3.1	Casos de estudio en la simulación del proceso de producción de biodiesel utilizando SPD	32
3.1.1	Simulación de un reactor continuo de mezcla completa	32
3.1.2	Simulación de una columna de destilación en SP	34
3.1.3	Simulación de una centrifuga para separación de catalizador y ácidos grasos	35
Capítulo 4	Análisis de resultados	39
4.1	Introducción y descripción de los procesos analizados mediante simulación	39
4.1.1	Composición en ácidos grasos de los aceites estudiados	42
4.2	Análisis técnico de los procesos de producción de biodiesel	43

4.2.1	Análisis de flujos de materia utilizados en los procesos de producción	43
4.2.2	Análisis energético de los procesos de producción de biodiesel simulados	45
4.3	Análisis económico de los procesos simulados	48
4.3.1	Costos de mano de obra involucrados en los procesos	48
4.3.2	Costos de materiales involucrados en las entradas y salidas de los procesos estudiados	49
4.3.3	Especificaciones fiscales en para el cálculo de la tasa de retorno	50
4.3.4	Análisis económico de entrada salida de materiales	51
4.4	Comparativo económico final de los procesos estudiados	52
4.5	Impacto de la temperatura de operación del reactor en la economía global del proceso y sus requerimientos energéticos	60
4.6	Impacto energético de la producción de biodiesel por medio de jatropha curcas en México	62
4.7	Impacto ambiental de la producción de biodiesel de jatropha en México	64
4.8	Impacto social de la sustitución de gasóleo por biodiesel de jatropha curcas en México	65
Capítulo 5	Conclusiones y recomendaciones	67
5.1	Conclusiones	67
5.2	Recomendaciones	68
Capítulo 6	Referencias	69
Apéndices		73
AI	Apertura y entorno de SPD	73
AII	Alta y registro de nuevos componentes en la base de datos de SPD	77
AII.1	Dar de alta los compuestos involucrados	77
AII.2	Editar sistema de unidades	83
AII.3	Registro de equipos para diagrama de flujo	83
AII.4	Inserción de líneas de corriente y conexión entre equipos	85

AII.5	Especificación de las corrientes de entrada a un equipo	87
AII.6	Especificaciones de trabajo de los equipos presentes en un diagrama de flujo en SPD	88
AII.7	Especificaciones particulares en el diseño de equipos	88
AII.8	Selección del método termodinámico para cálculo de ELV	89
AII.9	Reportes de resultados	90
AIII	Edición del sistema de unidades para la simulación de procesos en SPD	92
AIV	Especificación de corrientes de entrada para simulación de procesos	93
AV	Especificación de condiciones de trabajo de los equipos presentes en el diagrama de flujo	95
AVI	Especificaciones particulares de los equipos presentes en el diagrama de flujo	97
AVII	Especificaciones en la simulación de un reactor de mezcla completa	99
AVIII	Especificaciones en la simulación de un decantador	102
AIX	Análisis técnico de corrientes internas del proceso de producción de biodiesel a partir de jatropha curcas con recirculación de catalizador	104
AX	Análisis técnico de equipos del proceso JCR	110
AX.1	Lista detallada de equipos	110
AXI	Análisis económico del proceso JCR	114
AXI.1	Análisis global	114
AXI.2	Estimado de capital fijo	114
AXI.3	Costo total de planta	115
AXI.4	Cargos de contratista y contingencia	115
AXI.5	Costos fijos directos	115
AXI.6	Costo de mano de obra	115
AXI.7	Costo de servicios	115

LISTA DE TABLAS

Tabla	Título	Página
2.1	Principales productores de biodiesel en el continente Europeo	9
2.2	Fuentes de lípidos estudiados para la producción de biodiesel	10
2.3	Composición de ácidos grasos contenidos en algunos aceites	12
2.4	Rendimiento de aceite para diferentes fuentes vegetales	13
2.5	Especificaciones de calidad del biodiesel según Norma Alemana 14214	19
2.6	Propiedades críticas de metanol/aceite de coco para diferentes radios molares obtenidas por experimentación a nivel laboratorio	23
2.7	Balance estequiométrico de materia para metanólisis de Trioleina	27
4.1	Composición de ácidos grasos contenidos en los aceites de jatropha curcas e higuerilla	43
4.2	Especificación de flujos de las corrientes involucradas en la simulación de los procesos de producción de biodiesel	45
4.3	Comparativo de flujos de energía entrada-salida para los procesos de producción de biodiesel simulados en Super Pro Designer	46
4.4	Puestos y salarios base tomados en cuenta para el análisis de costo de mano de obra de los procesos simulados en SPD	49
4.5	Precios de materia prima utilizados en el comparativo de alternativas	50
4.6	Utilidad bruta de los procesos comparados	52
4.7	Indicadores económicos para los procesos de producción de biodiesel simulados	53
AI.1	Características de los procesos manejados por Super Pro Designer	75
AII.1	Constantes para capacidad calorífica de ácidos grasos y metil ésteres derivados de estos	80
AII.2	Constantes para presiones de vapor de metil ésteres provenientes de ácidos grasos	81

Tabla	Título	Página
AII.3	Propiedades físicas independientes de la temperatura para los metil ésteres provenientes de ácidos grasos	81
AII.4	Constantes para el cálculo de calores de vaporización para los metil ésteres provenientes de ácidos grasos	81
AII.5	Calores de formación para ácidos carboxílicos y metil ésteres derivados de ellos	82
AII.6	Operaciones Unitarias disponibles en Super Pro Designer	83
AII.7	Reportes de resultados finales que ofrece Super Pro	90
AIX.1	Datos globales del proceso	104
AIX.2	Materiales a granel (proceso completo)	104
AIX.3	Detalles de corrientes	104
AX.1	Características de la unidad de triturado de semilla	110
AX.2	Especificaciones de la unidad de extracción de aceite	110
AX.3	Características de los tanques de control de materia prima	111
AX.4	Especificaciones de la unidad de reacción para transesterificación	111
AX.5	Características de la unidad de separación de fases subsecuente al Reactor	112
AX.6	Especificaciones de las columnas de separación de metanol y glicerol	112
AX.7	Características de las unidades de enfriamiento de biodiesel y glicerol	112
AX.8	Especificaciones de la unidad de separación de potasa	113
AXI.1	Detalle de costos globales del proceso	114
AXI.2	Total de costos directos de planta	114
AXI.3	Total de costos indirectos de planta	114
AXI.4	Análisis de costo de mano de obra por puesto ocupado en el proceso	115
AXI.5	Análisis de costos por tipo de servicio	115

LISTA DE FIGURAS

Figura	Título	Página
1.1	Reservas mundiales de petróleo a finales de 2009	2
2.1	Mecanismo de reacción para transesterificación de un triglicérido	10
2.2	Reacción global de transesterificación de un triglicérido para conversión completa	11
2.3	Vivero con plantaciones de <i>Jatropha</i> de aproximadamente 1 mes	15
2.4	Plantaciones de <i>Jatropha</i> de aproximadamente 1 año de edad	15
2.5	Semilla de <i>Jatropha</i> lista para corte	16
2.6	Arbusto silvestre de higuera	17
2.7	Semillas de higuera de las cuales se extrae el aceite para producción de biodiesel	17
2.8	Producción de biodiesel por medio de un proceso <i>Batch</i>	21
2.9	Producción de biodiesel por medio de un proceso catalítico continuo	22
2.10	Mecanismo de transesterificación de catálisis ácida	25
2.11	Mecanismo para la transesterificación con catálisis básica	25
3.1	Diagrama de un reactor de mezcla completa en Super Pro	33
3.2	Destilación Glicerol/Agua	35
3.3	Equipo y modo de conexión de una centrifuga	36
3.4	Especificación en condiciones de operación de una centrifuga	37
3.5	Decantador para separación de metil ésteres	38
3.6	Especificaciones para decantador	38
4.1	Proceso de producción de biodiesel con recirculación de catalizador	40
4.2	Proceso de producción de biodiesel simulado sin recirculación de catalizador	41
4.3	Comparativo de consumo energético de los procesos simulados	46
4.4	Comparativo de factores económicos para los procesos estudiados	54
4.5	Análisis de flujo másico de alimentación contra precio de venta mínimo	56
4.6	Análisis de flujo másico de alimentación contra tasa de retorno	56

Figura	Título	Página
4.7	Análisis de flujo másico de alimentación contra tiempo de recuperación de capital	57
4.8	Gráfico comparativo de terreno disponible para cultivo de JC contra tasa de retorno del proceso de producción de biodiesel	58
4.9	Gráfico comparativo de la cantidad de terreno sembrado contra porcentaje de energía abastecido a la región centro-occidente de México por la planta diseñada	59
4.10	Gráfico comparativo de la cantidad de terreno sembrado contra porcentaje de energía abastecido a la región de Morelia y zona metropolitana por la planta propuesta	59
4.11	Efecto de la temperatura de operación del reactor en los requerimientos energéticos globales en el proceso JCR	61
4.12	Efecto de la temperatura de operación del reactor en la tasa de retorno del proceso JCR	61
4.13	Contribución energética de los combustibles en las actividades de México	63
AI.1	Pantalla de inicio de Super Pro Designer	73
AI.2	Selección del tipo de proceso de trabajo	75
AI.3	Entorno de trabajo de Super Pro Designer	76
AII.1	Registro de componentes a utilizar en el proceso	77
AII.2	Ventana de registro de nuevos componentes	78
AII.3	Registro de propiedades físicas de un nuevo componente	79
AII.4	Edición de Etiquetas de un equipo	85
AII.5	Edición de nombre de corrientes	87
AII.6	Ejemplo de proceso consistente de 2 equipos en modo continuo	87
AII.7	Selección del método termodinámico para cálculos de ELV	89
AIII	Selección de unidades para variables del proceso	92
AIV	Especificaciones en las corrientes de alimentación a un equipo	93
AV	Especificaciones de condiciones de operación de un equipo	95
AVI	Especificaciones particulares para una columna de destilación	97

Figura	Título	Página
AVII.1	Condiciones de operación del reactor	99
AVII.2	Especificaciones de volumen del reactor	100
AVII.3	Registro de reacciones existentes en el reactor	100
AVII.4	Especificación de emisiones y ventilación del reactor	101
AVII.5	Especificaciones de labor de operación del reactor	101
AVIII.1	Especificaciones de remoción de componentes en un decantador	102
AVIII.2	Especificación de utilidades en un decantador	103

AGRADECIMIENTOS

A Dios por darme la salud, tranquilidad y paciencia para ver este proyecto de mi vida cumplido.

A la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, especialmente a la División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química por permitirme ser parte de su alumnado.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (No. de becario 226696) por brindarme el apoyo económico que necesité durante el transcurso de esta penúltima etapa educativa de mi vida.

A mis padres Salvador Álvarez Hernández y Evangelina Barrera Rueda por entregarme el amor y comprensión que necesité y por darme el empuje necesario para seguir luchando en los momentos más difíciles de mi educación.

A la C. Guadalupe Rueda Delgado (abuela) por ser mi vivo ejemplo de la constancia en el trabajo.

A la C. Candelaria Pérez Montes (t), por enseñarme el valor de la lucha por la vida.

A los doctores Fiacro Jiménez Ponce y Ana Luisa Velasco Monroy por ayudarme a solucionar los problemas de salud por los cuales pasé.

Al ISSSTE por facilitarme el medicamento necesario durante el tiempo que estuve estudiando este posgrado.

Con especial respeto a la Dra. Ma. Del Carmen Chávez Parga por permitirme ser parte de su grupo de tesis y por su apoyo e interés en el seguimiento de este trabajo.

A los doctores Agustín Jaime Castro Montoya, Rafael Maya Yescas, Javier Lara Romero y Gabriel Segovia Hernández por el tiempo dedicado a la revisión de este escrito.

A la empresa BIOENERGY J.H. por facilitarme el estudio económico de la siembra y rendimientos de cada una de las especies vegetales analizadas en este trabajo.

A la Red de Ingeniería de Procesos por facilitar los recursos necesarios para la compra del simulador Super Pro Designer.

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

1.1 GENERALIDADES

Un motor de combustión interna es un tipo de máquina que obtiene energía mecánica directamente de la energía química producida por un combustible que arde dentro de una cámara de combustión, la parte principal de un motor. Se emplean motores de combustión interna de cuatro tipos:

- El motor de explosión ciclo Otto, es el motor convencional de gasolina que se emplea en automoción y aeronáutica.
- El motor diesel, el cual funciona con un principio diferente y suele consumir gasóleo. Se emplea en instalaciones generadoras de energía eléctrica, en sistemas de propulsión naval, en camiones, autobuses y automóviles.
- El motor rotatorio.
- La turbina de combustión.

En la actualidad, el uso de maquinaria pesada ha hecho posible que las arduas tareas que en el pasado se tenían que realizar de manera manual y que llevaban periodos muy grandes de tiempo en realizarse se simplifiquen haciendo más cómoda la vida del hombre.

El funcionamiento de estas máquinas está normalmente basado en el uso del motor Diesel, el cual es un motor térmico de combustión interna cuyo encendido se logra por la temperatura elevada que produce la compresión del aire en el interior del cilindro.

Un motor diesel funciona mediante la ignición (quema) del combustible al ser inyectado en una cámara (o pre cámara, en el caso de inyección indirecta) de combustión que contiene aire a una temperatura superior a la temperatura de autocombustión, sin necesidad de chispa. Esta combustión ocasiona que el gas contenido en la cámara se expanda, impulsando el pistón hacia abajo. La biela transmite este movimiento al cigüeñal, al que hace girar, transformando el movimiento lineal del pistón en un movimiento de rotación.

Debido a lo anterior, se lleva a pensar entonces que al haber un aumento en la demanda de combustibles para el funcionamiento de los motores de combustión interna habrá con ello una mayor demanda de petróleo para satisfacer las peticiones que el mercado necesita.

También se debe recordar que los mayores yacimientos de este recurso se encuentran en los lugares donde alguna vez hubo mar. Las reservas petroleras son aquellas acumulaciones de esta materia ya conocida, para un periodo determinado y que se pueden explotar comercialmente. Las estimaciones que se conocen, implican un importante nivel de incertidumbre, que dependerá fundamentalmente de la calidad y cantidad de información geológica, geofísica de sus yacimientos. Las reservas de petróleo en el mundo para finales del año 2009 alcanzaron los 1333,1 miles de millones de barriles de petróleo, de las cuales el 56.57% pertenece a los países de Medio Oriente.

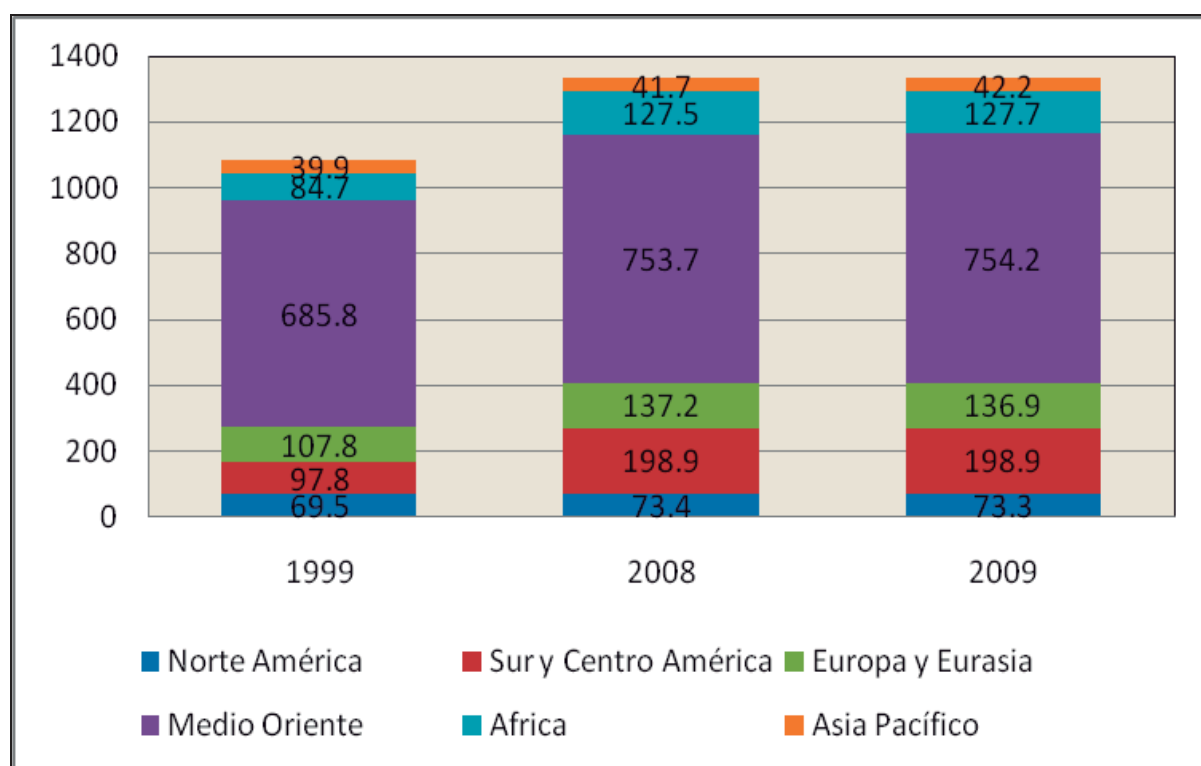


Figura 1.1 Reservas mundiales de petróleo a finales de 2009, según BP Statistical Review Full Report Workbook 2010.

Tal y como se puede observar en la figura anterior, las reservas mundiales de petróleo ascienden a un aproximado de 1333.00 miles de millones de barriles. Según datos de la Agencia Internacional de Energía, en 2008 la demanda de petróleo para la producción de combustibles

fósiles fue de 85 millones de barriles diarios pero se espera que esta cantidad aumente en un 23.5% hasta el año 2030 alcanzando una demanda de 105 millones de barriles por día. Esto quiere decir que si se utilizaran las reservas actuales para satisfacer la demanda de petróleo a nivel mundial, estas se terminarían en un periodo aproximado de 38 años.

En el caso concreto de México, según datos publicados por la SENER al primero de enero de 2009, las reservas remanentes totales de petróleo ascendieron a un total de 43,562.6 millones de barriles de crudo. Dichas reservas se encuentran clasificadas en tres tipos: probadas, probables y posibles. De este total las reservas probadas contribuyen con un 32.8%, las probables con un 33.3% y las posibles con un 33.8%.

Por otro lado, pasando a la demanda de este recurso natural los datos históricos muestran que el consumo de crudo para ese mismo año fue de aproximadamente 3 mbd. Si este consumo se mantiene constante las reservas probadas de petróleo tendrían un tiempo de vida aproximado de 12.9 años, después de lo cual se pensaría en la posibilidad de importar este recurso de otros países con mayores reservas, lo que encarecería aun más el precio de los combustibles fósiles.

En la actualidad existen tres grandes regiones que contienen las cuencas con reservas probadas de petróleo: El Golfo Pérsico, Asia Central y el Cinturón. Sin embargo el límite de las reservas podría estar más cercano aún si se tienen en cuenta modelos de previsión con un consumo creciente como ha venido siendo norma a lo largo de todo el siglo pasado. Los nuevos descubrimientos de yacimientos se han reducido drásticamente en las últimas décadas haciendo insostenible por mucho tiempo los elevados niveles de extracción actuales, sin incluir la futura demanda de los consumidores asiáticos. Por otra parte la mayoría de las principales reservas mundiales han entrado en declive y sólo las de oriente medio mantienen un crecimiento sostenido. Se espera que incluso esos yacimientos entren en declive hacia el 2010 lo que provocaría que toda la producción mundial disminuyera irremediablemente conduciendo a la mayor crisis energética que haya sufrido el mundo industrializado.

Una crisis energética es una gran carestía (o un incremento de precio) en el suministro de fuentes energéticas a una economía. Normalmente hace referencia a una disminución de la disponibilidad de petróleo, electricidad u otros recursos naturales. La crisis a menudo repercute en el resto de la economía, provocando una recesión en alguna forma. En particular, los costos de

producción de electricidad crecen, lo que eleva los costos de las manufacturas. Para el consumidor, el precio de la gasolina (petróleo) para automoción aumenta, lo que lleva al consumidor a una reducción de sus gastos y a una menor confianza.

Por lo anterior, las posibilidades de una crisis energética en el mundo han impulsado, desde hace algunos años, la investigación científica para suplir los productos derivados del petróleo por otros de la misma índole que provengan de fuentes renovables, encontrándose en el año de 1965 un combustible con características similares al gasóleo pero obtenido a partir de una fuente distinta, al cual se le denominó biodiesel.

El biodiesel es hoy en día una de las energías de transición de mayor importancia a nivel mundial. Es un biocombustible sintético líquido que se obtiene a partir de lípidos naturales como aceites vegetales o grasas animales, nuevos o usados, mediante procesos industriales de esterificación y transesterificación, y que se aplica en la preparación de sustitutos totales o parciales del petrodiesel o gasóleo obtenido del petróleo.

El biodiesel presenta algunas características específicas en lo que respecta a su funcionamiento en un motor de combustión interna:

1. No se requiere hacer modificaciones en un motor diesel antiguo para que funcione con biodiesel.
2. El biodiesel presenta un número de cetano más alto que el diesel (51 del biodiesel contra 42 del gasóleo). Esto es un indicador del grado de golpeteo del motor al arrancar, lo cual prueba que el arranque de un motor que usa biodiesel es más suave que con el uso de diesel (Katschmit y col., 1997).
3. El biodiesel presenta mayores características solventes en relación al diesel, lo cual lleva como ventaja un efecto de limpieza de las partes del motor donde actúa este biocombustible.
4. Un litro de biodiesel puede llegar a reemplazar entre 0.9 y 0.95 litros de diesel de petróleo con relación al poder calorífico que aporta al sistema del motor, esto debido a que su poder calorífico es entre 5 y 10% menor.

5. Al utilizar biodiesel se reduce en un 78% la cantidad de dióxido de carbono que emite un motor a la atmósfera en comparación al funcionamiento del mismo utilizando gasóleo como combustible (Gerpen y Shresta, 2005).

Por otro lado, es importante hacer hincapié en la importancia de este último punto, ya que hoy en día se vive una situación muy desalentadora para la vida en el planeta, la cual es denominada calentamiento global.

El calentamiento global es un término utilizado comúnmente para referirse a un aumento en el promedio de la temperatura de la atmósfera terrestre, lo cual tiene impacto en los fenómenos meteorológicos naturales ocurridos en la tierra. Si bien este es un fenómeno que se ha presentado desde mucho antes de la aparición del hombre sobre la superficie terrestre de manera natural, es a partir de la acción de este último sobre la naturaleza que este problema se ha agudizado, ya que la sobreexplotación de recursos y la transformación de estos a bienes y servicios han contribuido de manera significativa a la producción y emisión de gases de efecto invernadero, mismos que son promotores del problema en cuestión. Entre estos gases se encuentran principalmente vapor de agua, dióxido de carbono, metano, óxidos de nitrógeno, entre otros.

Es por esto último que el uso de biodiesel llega a cobrar importancia ya que, si bien el uso de combustibles para la producción de energía es inherente a las actividades del hombre para la transformación y producción de bienes y servicios, es también necesario tomar en cuenta al medio ambiente dentro de las actividades realizadas y, por ende, las cantidades de contaminantes que cada actividad puede llegar a producir.

El biodiesel, como se mencionaba anteriormente, es producido a partir del proceso de esterificación y transesterificación de aceites vegetales y grasas animales, utilizándose mayormente los aceites de maíz, soya, canola, palma y olivo.

En el pasado, la mejor forma de evaluar la viabilidad económica de producir biodiesel a través de los aceites vegetales o de las grasas animales era por medio de experimentación a nivel laboratorio. Es decir, se transesterificaban las diferentes materias primas disponibles para este fin y se medía el rendimiento del producto deseado con respecto a la materia prima utilizada para dar un estimado de los costos de llevar a cabo este proceso en un nivel industrial.

En la actualidad, el uso de computadoras y de programas especializados ha permitido tener aproximaciones de un comportamiento simulado al comportamiento real en diferentes áreas de estudio. En la medicina el uso de programas especializados permite prever las posibles consecuencias de un medicamento en el cuerpo humano. En la ingeniería industrial el uso de Pro Model permite calcular tiempos de operación bastante apegados a la realidad y, en el campo de la química, el uso de simuladores ha permitido dar estimaciones bastante cercanas del comportamiento de algunos compuestos al comportamiento observado a nivel laboratorio.

Es por esto que la simulación ha cobrado importancia en esta última ciencia, ya que permite tener un estimado del comportamiento real de una sustancia sin necesidad de realizar los gastos que conlleva la experimentación y tomar decisiones en base a estas aproximaciones.

El presente trabajo se centra en hacer un estudio por medio de simulación de los principales parámetros que gobiernan el proceso de producción de biodiesel para, por medio de ellos, evaluar la viabilidad económica de llevar este proceso hasta un nivel industrial.

1.2 JUSTIFICACION

La utilización de biocombustibles en la actualidad cobra gran importancia debido a que parecen ser un gran instrumento de lucha contra el deterioro ambiental ya que su uso permite la disminución de gases de efecto invernadero, con lo cual se contribuye al mejoramiento de la calidad del aire.

El análisis de la viabilidad económica del proceso de producción de biodiesel es, por el momento, determinado a través de los resultados de la experimentación con las materias primas ya estudiadas. Esto conduce a realizar estimados económicos en base a resultados experimentales, lo cual es también costoso.

El uso de un simulador especializado como el Súper Pro Designer 7.5 permitirá realizar estimados económicos de llevar este proceso a un nivel industrial y hacer un comparativo de costos y rendimientos para materias primas distintas.

1.3 HIPÓTESIS

La factibilidad técnico-económica del diseño y propuesta de instalación de una planta productora de biodiesel utilizando simulación bajo un mismo diagrama de proceso, dependerá exclusivamente de la materia prima utilizada para dicho fin.

1.4 OBJETIVOS

1.4.1 OBJETIVO GENERAL

Realizar un análisis comparativo entre los procesos de producción de biodiesel a partir de la transesterificación de ácidos grasos contenidos en los aceites de *Jatropha Curcas* e Higuierilla mediante el uso de Super Pro Designer.

1.4.2 OBJETIVOS PARTICULARES

- Encontrar, por medio de simulación, los rendimientos de producción de biodiesel en un medio catalítico básico, teniendo como casos de estudio el empleo de aceite de *Jatropha Curcas* e Higuierilla mediante el uso de Super Pro Designer.
- Comparar los rendimientos obtenidos para el proceso de producción de biodiesel a partir de estas materias primas.
- Realizar un análisis económico de la viabilidad de llevar a cabo la producción de este biocombustible hasta una escala industrial teniendo en cuenta los dos procesos estudiados.
- Comparar ambos procesos para seleccionar aquel que mejores ventajas económicas presente.

CAPÍTULO 2

MARCO TEÓRICO

2.1 PRODUCCIÓN DE BIODIESEL EN EL MUNDO

El uso por primera vez de aceites vegetales como combustibles, se remontan al año de 1900, siendo Rudolph Diesel, quien lo utilizara por primera vez en su motor de ignición compresión y quien predijera el uso futuro de biocombustibles.

Durante la segunda guerra mundial, y ante la escasez de combustibles fósiles, se destacó la investigación realizada por Otto y Vivacqua en el Brasil, sobre diesel de origen vegetal, pero fue hasta el año de 1970, que el biodiesel se desarrolló de forma significativa a raíz de la crisis energética que sucedía en el momento, y al elevado costo del petróleo.

Las primeras pruebas técnicas con biodiesel se llevaron a cabo en 1982 en Austria y Alemania, pero sólo hasta el año de 1985 en Silberberg (Austria), se construyó la primera planta piloto productora de RME (*Rapeseed Methyl Ester* - metil éster aceite de semilla de colza).

Hoy en día países como Alemania, Austria, Canadá, Estados Unidos, Francia, Italia, Malasia y Suecia son pioneros en la producción, ensayo y uso de biodiesel en automóviles.

El biodiesel puro es biodegradable, no tóxico y esencialmente libre de azufre y compuestos aromáticos, sin importar significativamente el alcohol y el aceite vegetal que se utilice en la transesterificación.

En Europa, es producido principalmente a partir del aceite de la semilla de canola (mejor conocida como colza o *rapeseed*) y el metanol, denominado comercialmente como RME (*Rapeseed Methyl Ester*), el cual es utilizado en las máquinas diesel puro o mezclado con aceite diesel, en proporciones que van desde un 5% hasta un 20%, generalmente. En Alemania y

Austria se usa puro para máximo beneficio ambiental. La tabla 2.1 muestra los principales países de Europa productores de Biodiesel:

Tabla 2.1 Principales productores de biodiesel en el continente Europeo (Fuente EBB*).

País	Producción (ton/año 2009)
Alemania	5,200,000
Francia	2,505,000
Italia	1,910,000
Bélgica	705,000
Austria	707.000
Suecia	212,000
Checoslovaquia	247,000
Total	11,486,000

* European Biodiesel Board, 2010.

En la Unión Europea se estipuló que para 2005, el 5% de los combustibles debe ser renovable, porcentaje que deberá duplicarse para 2010: en Francia, todos los combustibles diesel poseen un mínimo del 1% de biodiesel. En Alemania, el biocombustible se comercializa en más de 350 estaciones de servicio y su empleo es común en los cruceros turísticos que navegan en sus lagos.

Con el paso del tiempo, la necesidad de producción del biodiesel se ha incrementado en tal forma que se ha necesitado experimentar con diferentes aceites vegetales y grasas animales para su producción y comercialización.

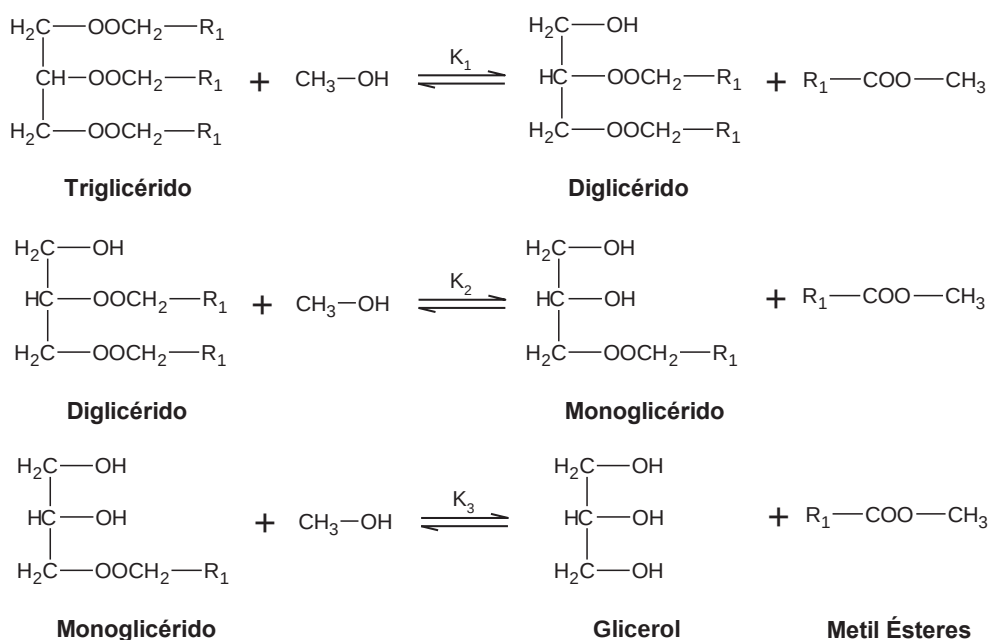
Muchas han sido las fuentes encontradas y los trabajos publicados sobre el tema en cuestión. Por dar un ejemplo, se citan en la tabla 2.2 algunos de los trabajos hechos por diferentes investigadores para la producción de este biocombustible:

Tabla 2.2 Fuentes de lípidos estudiados para la producción de biodiesel.

Fuente	Investigador (es)
Aceite de desecho de cocina	Y. Zhang, M. A. Dube (2003)
Aceite crudo de palma	Crabbe Edward, Sonomoto Kenji (2001)
Aceite Heterotrópico de Microalgas	Xiaoling, Miao (2006)
Aceite de Camelina Sativa	A. Frolich (2005)
Aceite de soya	G. Recinos, J. Yeohmans (2006)
Grasa de pollo	Dalla Costa (2006)
Aceite de Higuierilla	Zieba A. (2009)
Aceite de Jatropha Curcas	Berchmans H.J. (2010)

2.2 FUNDAMENTOS EN EL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL

Los ésteres grasos son fabricados actualmente por la transesterificación de triglicéridos con alcoholes ligeros. Los triglicéridos se encuentran principalmente en aceites vegetales o grasas animales, conocidos generalmente como lípidos. Las reacciones de transesterificación toman lugar en presencia de un medio catalítico, ácido o básico. El éster graso es formado simultáneamente con la formación de glicerol dada por el reacomodo del grupo OH. La reacción completa ocurre en tres etapas que son controladas por el equilibrio químico, las cuales se muestran a continuación:

**Figura 2.1** Mecanismo de reacción para la transesterificación de un triglicérido.

Para una conversión total de los intermediarios, la reacción global puede expresarse de la siguiente forma:

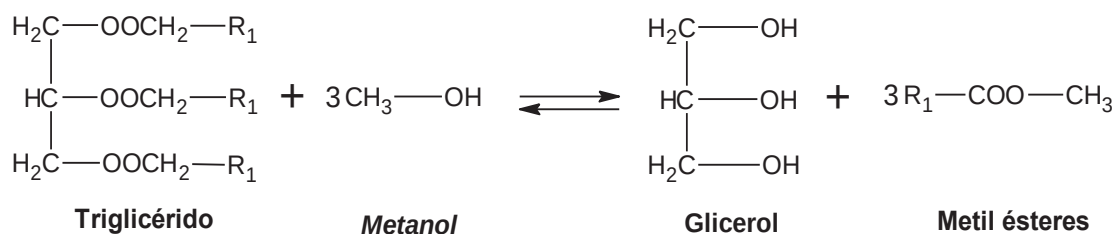


Figura 2.2 Reacción global de transesterificación de un triglicérido para conversión completa.

De este modo, tres moléculas de éster graso son producidas por cada molécula de triglicérido que necesita 3 moléculas de alcohol. El rendimiento en el biodiesel es aproximadamente el 90% pero la máxima composición aceptable depende de las constantes de equilibrio para cada paso intermedio. En consecuencia, un exceso sustancial de alcohol es necesario para obtener un rendimiento más grande. Así como un bajo contenido en monoglicéridos y diglicéridos.

Desde el momento en el que la reacción no es rápida a bajas temperaturas se hace necesario el uso de un catalizador. De hecho, ellos hacen la diferencia entre las tecnologías. La catálisis puede ser de carácter ácido o básico, de igual manera puede ser homogénea o heterogénea. Los catalizadores básicos son preferidos debido a que son más rápidos. La catálisis homogénea manifiesta alta actividad pero requiere de costosas etapas de post-procesamiento. De cualquier forma, las tecnologías basadas en catalizadores sólidos y operación continua son preferidas (Demirbass, 2008).

La alimentación de lípidos puede contener cantidades variables de ácidos grasos libres, los cuales pueden ser convertidos en ésteres antes de la transesterificación. Por otro lado, la formación de jabones también puede ocurrir por reacción con el catalizador hidróxido como se muestra a continuación:



Otra fuente de formación de jabones es la saponificación del éster disuelto en la fase de glicerol de acuerdo a:



Los jabones pueden ser convertidos nuevamente a ácidos grasos por tratamiento con un ácido mineral:



Las reacciones mostradas anteriormente, en la práctica conllevan operaciones costosas como neutralización, lavado y separaciones de las fases líquida y sólida. Éstas pueden ser reducidas significativamente si se emplea catálisis heterogénea.

Una fuente resaltable en los lípidos, ya sean de origen animal o vegetal, es que contienen los mismos ácidos grasos en triglicéridos en el intervalo de 12 a 20 carbonos, con la diferencia de que tienen diferentes composiciones. De esta manera los aceites de soya y girasol están basados en ácidos de 18 carbonos y son ricos en ácido linoleico insaturado, el cual puede llevar a un problema de estabilidad con respecto a la oxidación. La tabla 2.3 muestra algunas de las composiciones típicas de ácidos grasos en algunos aceites vegetales.

Tabla 2.3 Composición de ácidos grasos contenidos en algunos aceites (Dermibass, 2008).

Ácido Graso	Fórmula	Soya	Colza	Girasol	Palma	Coco	Sebo
Láurico	12:0	0.1			0.1	46.5	0.1
Mirístico	14:0	0.1			1.0	19.2	2.8
Palmítico	16:0	10.2	3.49	6.08	23.6	9.8	23.3
Esteárico	18:0	3.7	0.85	3.26	14.2	3.0	19.4
Oléico	18:1	22.8	64.4	16.93	44.2	6.9	42.4
Linoléico	18:2	53.7	22.3	73.73	10.7	2.2	2.9
Linolénico	18:3	8.6	8.23		0.4	0	0.9

Por otro lado, es importante señalar que a pesar de la gran cantidad de investigaciones hechas para la producción de biodiesel con las materias primas mencionadas anteriormente, se debe tomar en cuenta la cantidad de aceite que se puede extraer de cada una de ellas para evaluar

la posibilidad de su uso en la producción de biodiesel. La tabla 2.4 muestra los rendimientos de aceite que se pueden obtener de las diferentes fuentes vegetales que se pudieran utilizar.

Tabla 2.4 Rendimiento de aceite para diferentes fuentes vegetales (Demirbass, 2008).

Fuente	Rendimiento [=] kg/ha
Maíz	145
Algodón	273
Soya	375
Mostaza	481
Camelina	490
Arroz	696
Girasol	800
Cacahuete	890
Colza	1000
Higuerilla	1188
Jojoba	1528
Jatropha	1590
Macadamia	1887
Aguacate	2217
Coco	2260
Palma de aceite	5000

Como se puede observar en la tabla anterior, el rendimiento de aceite para algunas de estas fuentes vegetales es escaso. Además se debe tomar en cuenta que debido a algunos factores político – económicos, no es viable la producción de biodiesel proveniente de aceite obtenido de semillas o fuentes que sean propias para consumo humano. Esta restricción es la que da la pauta para el estudio de 2 materias primas en particular de la tabla 2.4. Estas fuentes son, entonces, la Higuerilla y la Jatropha Curcas, las cuales se mencionan a continuación.

2.2.1 PRODUCCIÓN DE BIODIESEL POR TRANSESTERIFICACIÓN DE ACEITE DE “JATROPHA CURCAS”

2.2.1.1 ANTECEDENTES

La *Jatropha Curcas*, conocida como piñón de tempate o jatrofa, es una Euphorbiacea nativa de América Central. Fue difundida a Asia y África por comerciantes portugueses, como planta para cercar y hoy en día se ha expandido por el mundo entero.

Las semillas contienen un aceite no comestible, que se puede utilizar directamente para aprovisionar de combustible lámparas y motores de combustión o se puede transformar en biodiesel, mediante un proceso de transesterificación. Además se usa para fabricar jabones. Un colorante también se puede derivar de la semilla.

Resiste en un alto grado la sequía y prospera con apenas 250 a 600 mm de lluvia al año. El uso de pesticidas no es importante, gracias a las características pesticidas y fungicidas de la misma planta, la cual puede vivir hasta 40 años.

2.2.1.2 VENTAJAS

Por otro lado, se debe responder ahora a una pregunta importante ¿Por qué usar *Jatropha Curcas* como medio para la producción de biodiesel?, existen muchas razones que pueden responder a la pregunta anterior, entre las principales se encuentran:

- Es una planta que tiene una distribución geográfica de siembra más ancha en los trópicos.
- Tiene una mejor adaptación en condiciones áridas y semiáridas.
- Cuidados agronómicos fáciles.
- Existe un contenido alto de componentes tóxicos en las semillas, lo que las hace inservibles para el consumo humano.
- Las semillas tienen un alto contenido de aceite (aproximadamente 55%).
- Alta productividad (aproximadamente 1600 l de aceite por hectárea).

2.2.1.3 CRECIMIENTO

Es importante mencionar que, a pesar de que la *Jatropha Curcas* es una planta silvestre, existen muchas variedades para esta misma especie. Dependiendo de la variedad, los cuidados que se tengan durante el crecimiento de la misma afectarán los rendimientos de aceite obtenido de esta planta. Actualmente la región suroeste del estado de Michoacán se encuentra trabajando con el cultivo de *Jatropha Curcas* para el fin antes mencionado. El proceso de cuidado de esta planta consiste en sembrar la semilla en maceta para posteriormente (ya que tiene el tamaño adecuado) poder sembrarla en campo. Las siguientes figuras muestran el crecimiento de esta planta en los sembradíos del estado de Michoacán.



Figura 2.3 Vivero con plantaciones de *Jatropha* de aproximadamente 1 mes.



Figura 2.4 Plantaciones de *Jatropha* de aproximadamente 1 año de edad.



Figura 2.5 Semilla de *Jatropha* lista para corte.

2.2.2 PRODUCCIÓN DE BIODIESEL POR TRANSESTERIFICACIÓN DE ACEITE DE HIGUERILLA

La Higuerilla es un arbusto de hasta 4 m de altura, de tallo hueco y ramificado que va de color verde al café rojizo. Sus hojas tienen forma de estrella, con nervaduras rojizas y bordes dentados de tamaño irregular. Las flores son racimos de color blanco; sus frutos son globosos y espinosos y albergan tres semillas grandes y semiaplanadas. Es una planta originaria de África, frecuentemente se encuentra en tierras cálidas y templadas. Las flores son de dos tipos: masculinas y femeninas, pero ambas sobre el mismo pie, las femeninas en la parte superior y las masculinas por debajo de éstas. Los frutos (que sólo se forman a partir de las femeninas) son pequeñas cápsulas recubiertas de púas que, cuando maduran, se abren elásticamente y proyectan las tres semillas ovaladas y aplanadas que contienen. Se denomina también catapucia e higuera del diablo.

El cultivo prospera desde el nivel del mar hasta los 2.500 m de altura, pero conforme aumenta la altitud, decrece el contenido de aceite. La Higuerilla requiere una época seca definida después de la floración y su requerimiento de agua durante la etapa de crecimiento es de 600 a 800 mm. Prospera bien en suelos de mediana o alta fertilidad, profundos, sueltos, permeables, aireados, bien drenados, con altas cantidades de elementos nutritivos y con pH sobre 5,5 (óptimo 6-7), aunque no soporta la alcalinidad.

Como anteriormente se mencionó, la ventaja de usar Higuierilla para la producción del biodiesel consiste en su alto rendimiento de aceite por hectárea sembrada (como se muestra en la tabla 2.4). Por otro lado, debido a que se trata de una planta no utilizada para el consumo humano, la producción de biodiesel a partir de esta fuente vegetal se hace factible. Las figuras 2.6 y 2.7 muestran el arbusto y las semillas de esta planta, las cuales son utilizadas para la extracción del aceite que sirve como materia prima para la producción de biocombustibles.



Figura 2.6 Arbusto silvestre de Higuierilla.



Figura 2.7 Semillas de Higuierilla de las cuales se extrae el aceite para producción de biodiesel.

2.3 ESPECIFICACIONES DEL BIODIESEL

Como combustible para motor, los ésteres grasos de cadena larga del biodiesel se asemeja a los altos n-alcanos del petrodiesel. El biodiesel exhibe una quema más limpia por sus componentes oxigenados, de manera que el calor de combustión es sólo 90% del originado por el diesel de petróleo. La tabla 2.5 muestra las especificaciones de calidad del biodiesel siguiendo la norma alemana 14214, la cual es uno de los estándares típicos europeos. La característica de combustión más importante es el número de cetano, el cual se incrementa con el crecimiento de la cadena pero disminuye con la insaturación de los ésteres grasos y, como resultado, depende de la composición del material a tratar.

El punto de inflamación indica la temperatura a la cual el combustible iniciará la ignición cuando se exponga a un medio. Este valor, aproximadamente 110 °C mayor al petrodiesel es más seguro para propósitos de transporte.

Con respecto a la viscosidad, la cual controla la inyección de combustible, el biodiesel muestra valores más altos comparados al petrodiesel. Sin embargo, esto puede ser solucionado controlando la composición de alimentación.

El punto de filtro frío indica la posibilidad de utilizar el combustible en condiciones de temperatura baja. Información similar está dada por el punto de nube. El biodiesel muestra valores de punto de filtro frío mayores.

El carbón residual es una medida de la formación de depósitos en una corrida larga. El biodiesel manifiesta una formación de coque más pronunciada que el diesel convencional. Por esta razón, el contenido de mono, di y triglicéridos debería mantenerse por debajo del 0.4% en peso y el glicerol total por debajo del 1.5% en peso.

Tabla 2.5 Especificaciones de calidad del biodiesel según Norma Alemana 14214.

Análisis	Unidades	Mínimo	Máximo
Densidad	g/ml	0.875	0.900
Numero de Cetano		49	
Punto de Inflamación	°C	110	
Viscosidad Cinemática (15 ⁰ C)	mm ² / s	3.5	5.0
Punto de Obstrucción Filtro Frio (POFF)	°C	-10	-20
Agua	ppm	-	300
Número de acidez	mg KOH/g	-	0.5
Mono-/Di-/Triglicéridos	% peso	-	0.4/0.4/0.4
Glicerol	% peso	-	0.25
Estabilidad a la oxidación.	h	5	

2.4 PROCESOS DE FABRICACIÓN DE BIODIESEL

2.4.1 PROCESOS POR LOTES (BATCH)

Los antiguos procesos de producción de biodiesel eran esencialmente procesos por lotes (*BATCH*). El aceite era suministrado a un reactor de tipo tanque agitado en presencia de una gran cantidad de metanol y un catalizador básico, preferiblemente hidróxido de sodio o de potasio (Lang, 2001).

Un exceso de metanol es necesario para asegurar una alta solubilidad del triglicérido y mantener una viscosidad de la mezcla de reacción baja, así como para asegurar el equilibrio químico. Una relación molar mínima metanol: triglicérido de 6:1 es generalmente aceptada. La reacción toma lugar a temperaturas entre 60 y 80 grados centígrados, es decir, abajo del punto de ebullición de mezcla a la presión de operación. Previamente, el aceite debe ser neutralizado por un tratamiento acuoso de hidróxido de sodio para la remoción de ácidos grasos libres. Estos pueden ser encontrados entre 0.5 y 5% en los aceites vegetales, quizás más en las grasas animales. Pero pueden ser encontrados hasta en un 30% en aceite de cocina usado.

La reacción de transesterificación puede considerarse terminada cuando la conversión rebasa el 98.5%, o bien, cuando la composición de mezcla cumpla las especificaciones de calidad

requeridas para biodiesel. El exceso de metanol es recuperado para el siguiente proceso *batch*. La mezcla remanente es sometida a procesos para separar los ésteres del glicerol formado. Esta puede tomar lugar ya sea por decantación o por centrifugación. Puede adherirse agua para provocar una separación de fases (Clements y col., 1998).

La fase aceitosa, que contiene ésteres grasos se manda entonces a un proceso final de neutralización con ácido, seguido por un proceso de lavado y secado. El ácido fosfórico es comúnmente utilizado para la neutralización debido a que el fosfato de sodio y de potasio, pueden ser recuperados y vendidos como fertilizantes.

Después de mezclar las corrientes de glicerol el resultado es una solución de 50% w/w glicerol en agua, con algo de metanol, residuos de catalizador básico y jabones. Entonces primeramente se lleva a cabo la recuperación de metanol por destilación flash o por evaporación de película. Posteriormente, la adición de ácido permite la transformación de los jabones en ácidos grasos libres que se separan del glicerol como una capa superior de fase aceitosa. Luego de ello los ácidos libres pueden ser recuperados y valuados por esterificación con metanol.

Finalmente el glicerol pasa por un proceso de purificación hasta tenerlo en composición de 85% y es vendido a refinarías especializadas, donde se purifica hasta un 99.7% aplicando procesos de intercambio iónico.

Los procesos *batch* presentan gran flexibilidad con respecto a la composición de alimentación. En cambio, los índices económicos son bajos debido a la baja productividad del equipo y los altos costos de operación.

La productividad puede ser aumentada en gran manera con la implementación de operaciones continuas y el uso de técnicas de proceso intensificadas, como la destilación reactiva o el reemplazo de catálisis homogénea por heterogénea.

La figura 2.8 muestra un proceso de producción de biodiesel en un proceso batch o por lotes:

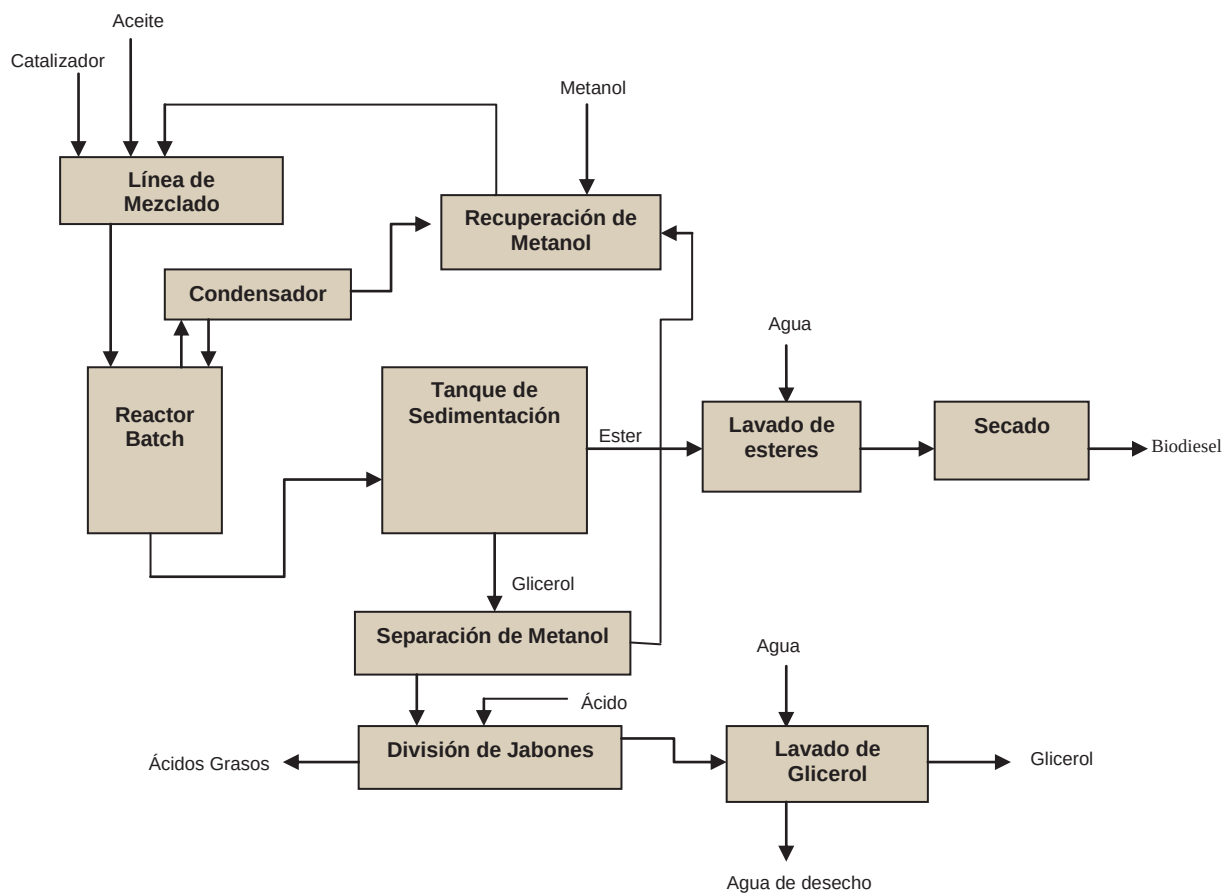


Figura 2.8 Producción de biodiesel por medio de un proceso *Batch*.

2.4.2 PROCESOS CATALÍTICOS CONTINUOS

La figura 2.9 muestra un esquema conceptual de un proceso continuo trabajando a baja presión, el cual es capaz de procesar una alimentación con una gran cantidad de ácidos grasos libres, como aceites vegetales no refinados. Por esta razón en el primer reactor la esterificación de los ácidos grasos libres se hace presente, preferiblemente en un aparato de destilación reactiva con catalizador sólido (Fukuda y col., 2001).

El monto de los ácidos grasos libres se debería reducir por debajo del 1%, pero preferiblemente, por debajo del 0.5%. Después, la reacción de transesterificación continúa en la unidad R2. Un catalizador homogéneo es entonces utilizado. La conversión debería ser entonces más alta, en general arriba del 98.5%. Para asegurar alto rendimiento en monoésteres y mínimas

cantidades de mono/ di/ triglicéridos se deben emplear como mínimo dos reactores en serie con separación intermedia de glicerol. La mezcla de separación es entonces sometida a separación de fases en ésteres crudos y glicerol en la unidad S1. La separación puede tomar lugar por decantación o centrifugación. La fase de glicerol es tratada con ácido para remoción de jabones y recuperación de ácidos grasos libres. Entonces, el metanol se recupera por evaporación y es reciclado. Los ésteres crudos siguen la ruta de separación del metanol en la unidad S4, la neutralización del catalizador, así como el acondicionamiento del biodiesel para lavado y secado (Freedman y col., 1998).

El balance de materia es cerrado para la recuperación del exceso de metanol de la solución acuosa por medio de destilación.

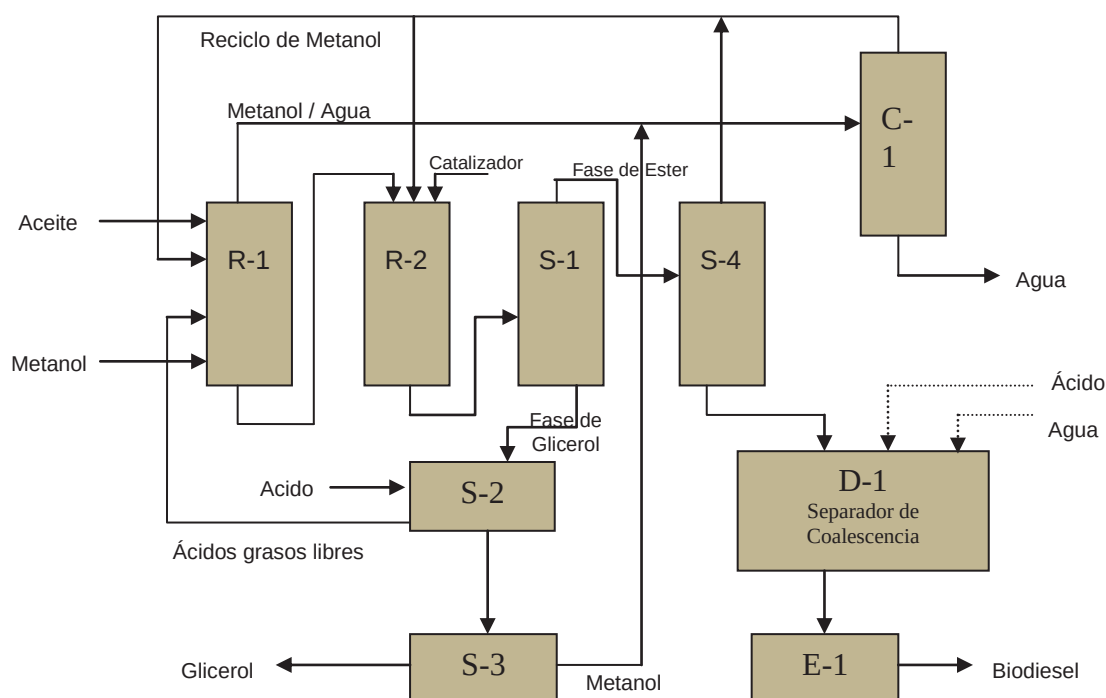


Figura 2.9 Producción de biodiesel por medio de un proceso catalítico continuo (Sorín, 2008).

2.4.3 PROCESOS SUPERCRÍTICOS

La esterificación en condiciones supercríticas ha sido estudiada inicialmente como un método para resolver el problema de la miscibilidad del aceite en metanol que esconde la cinética

en condiciones normales. De cualquier modo, las condiciones de presión y temperatura son severas y necesitan de equipo especial. Recientes investigaciones muestran que el rendimiento real puede ser reducido por degradación termal del biodiesel. Por esta razón, incrementar la temperatura y presión de la reacción es altamente deseable (Kiwjaroun y col., 2009).

Además, la adición de un co-solvente en combinación con propiedades supercríticas parece ser un medio eficiente para reducir significativamente la temperatura. Por ejemplo, el aceite de soya puede ser convertido junto con el metanol a biodiesel con 98% de rendimiento utilizando propano. Resultados similares han sido reportados con dióxido de carbono en una relación molar de 0.1 con respecto al metanol. La tabla 2.6 muestra las propiedades críticas obtenidas para diferentes radios molares de metanol/ aceite, comenzando con 6, correspondiente al límite inferior de solubilidad y terminando con 42, el valor práctico más alto registrado en experimentos de laboratorio.

Tabla 2.6 Propiedades críticas de metanol/aceite de coco para diferentes relaciones molares obtenidas por experimentación a nivel laboratorio.

Propiedades	Metanol	Aceite de Coco	R=6	R= 12	R=24	R=42
T_c °C	239.5	606.8	395.9	345.9	305.8	282.2
P_c atm	79.9	6.2	37.2	50.3	61.7	68.4
V_c l/mol	118	2.366	0.33	0.22	0.22	0.22

Debido a la ausencia de catalizador, los procesos de flujo empleando tecnología supercrítica se vuelven mucho más simples, pero a cambio la manufactura del equipo se vuelve más demandante, por lo que la integración energética efectiva se hace necesaria (Velez y col., 2010).

2.4.4 HIDRÓLISIS Y ESTERIFICACIÓN

Los procesos simples de manufactura podrían consistir en un primer paso en la hidrólisis de triglicéridos y separando después los ácidos grasos seguidos por esterificación empleando la tecnología robusta de un catalizador sólido heterogéneo. Ventajas significativas podrían ser la

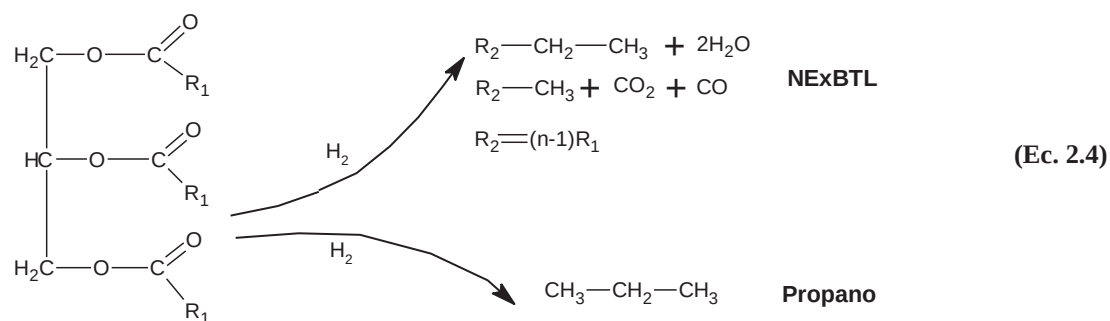
extracción de ácidos grasos de gran valor de la fuente de lípidos, para así obtener una alta pureza en glicerol.

2.4.5 PROCESOS ENZIMÁTICOS

Las reacciones de transesterificación pueden ser catalizadas por enzimas. La más utilizada en la actualidad es la lipasa. La reacción toma lugar a presión normal y temperaturas entre 50 y 55 grados centígrados, con bajo consumo de energía. El rendimiento de la metanólisis depende de varios factores como la temperatura, pH, tipo de microorganismo que produce la enzima, el uso de co-solventes, etc. De cualquier modo, los bajos rendimientos de metil ésteres y el muy largo tiempo de reacción hace que los procesos enzimáticos no sean competitivos en la actualidad (Moreira y col., 2007).

2.4.6 HIDROPIROLISIS DE TRIGLICÉRIDOS

Un camino con fundamento químico diferente para la conversión de bio-triglicéridos a combustible es la hidrogenación seguida por pirolisis en presencia de un catalizador. Este proceso es mostrado en la siguiente figura:



El combustible producido es esencialmente una mezcla de hidrocarburos de cadena larga llevados por ésteres de cadena larga. Después la alimentación es valorada, incluyendo glicerol convertido a propano. Es lógico que el combustible resultante tenga propiedades de combustión superiores comparados con los ésteres del biodiesel, así como un número de cetano mayor (84 a 99). Por estas razones este producto es ocasionalmente llamado biodiesel de “segunda generación”. De cualquier modo, este proceso implica la disposición de fuentes de hidrógeno de bajo costo, como también equipo más caro y sofisticado.

2.5 CINÉTICA Y CATÁLISIS PARA PRODUCCIÓN DE BIODIESEL

2.5.1 CATÁLISIS HOMOGÉNEA

La catálisis homogénea todavía permanece empleada hoy en día debido a que asegura tecnología simple y robusta, así como también tasas de reacción altas. Aunque también ofrece desventajas importantes económica y ambientalmente. Para la producción de biodiesel por transesterificación pueden ser utilizadas ambos tipos de catálisis, básica y ácida, pero la básica resulta mucho más eficiente. La diferencia entre ambas puede ser explicada por el mecanismo de reacción mostrado en las figuras 2.10 y 2.11:

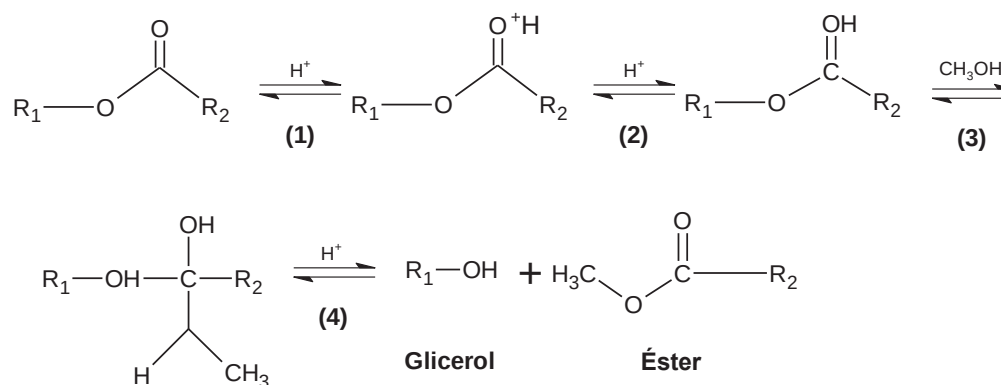


Figura 2.10. Mecanismo de transesterificación de catálisis ácida.

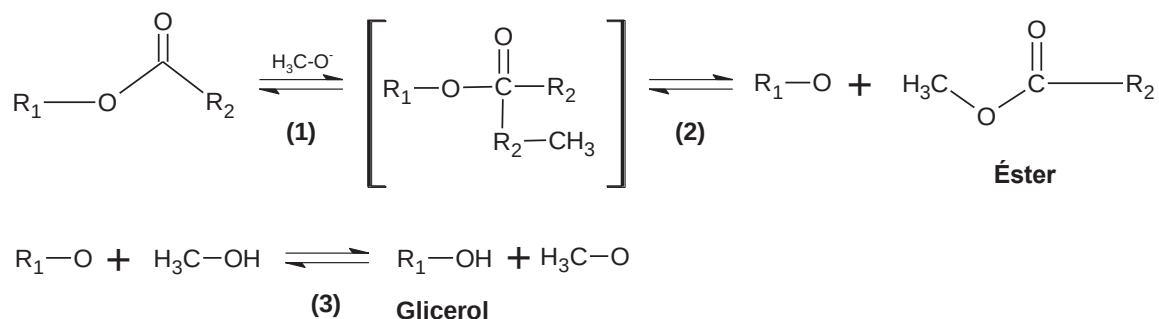


Figura 2.11. Mecanismo para la transesterificación con catálisis básica.

En el primer mecanismo (catálisis ácida), el primer paso consiste en la activación del triglicérido por protonación en el grupo CO donde el oxígeno es más activo, seguido por la formación de complejos carbocatiónicos. Por ataque nucleofílico con metanol se forma un complejo de carbono tetraédrico el cual al perder el protón se descompone nuevamente en ésteres

grasos de metilo y diglicéridos. La metanólisis procede similarmente con diglicéridos y monoglicéridos. Se puede observar que si hay agua presente producirá ácidos grasos por hidrólisis y como consecuencia decrecerá el rendimiento de ésteres grasos. Por esta razón la concentración de agua en los triglicéridos debe ser reducida abajo del 0.5%.

La catálisis básica envuelve un mecanismo completamente distinto. Las especies activas en este caso son el alcóxido, llamado metóxido. Este puede ser producido in situ por reacción del metanol con el hidróxido liberando agua. El metóxido puede ser introducido como pre-procesamiento desde un alcohol y un metal alcalino. En este caso, la ausencia de agua favorece la tasa de reacción, para después pasar a un pos tratamiento. El primer paso consiste en un ataque nucleofílico del metóxido al grupo carbonilo para dar lugar a la formación de un complejo carboaniónico tetraédrico. Después, este complejo en transición se descompone en ésteres grasos y anión diglicerol, el cual reacciona con una molécula de alcohol reformando las especies catalíticas. Las otras etapas de transesterificación toman lugar de manera similar. El proceso de reacción global es controlado por el equilibrio químico.

Como se mencionaba anteriormente, la tasa de reacción de catálisis básica comparada a la ácida es mucho mayor en tres órdenes de magnitud. La transesterificación de triglicéridos con metanol a ésteres grasos de metilo implica tres etapas de reacción pasando por la formación de un diglicérido y un monoglicérido intermedios. Para cada etapa la constante de equilibrio puede ser expresada como la relación entre las reacciones directa e inversa.

2.5.2 CATÁLISIS HETEROGÉNEA

El reemplazo de catalizadores homogéneos por catalizadores sólidos presenta ventajas económicas y tecnológicas obvias. Por esta razón, una considerable investigación se desarrolla en esta área. Una primera aplicación recae en las reacciones de esterificación (Soares y col., 2008). Aquí, los catalizadores sólidos con carácter ácido pueden ser utilizados, como las zeolitas, resinas de intercambio iónico, óxidos de metales sulfatados, fibras de carbón sulfatadas, etc., sin embargo, solo una pequeña parte de estas pueden ser utilizadas para los fines propuestos.

La segunda área de catálisis heterogénea en la manufactura de biodiesel es la reacción de transesterificación. Aquí nuevamente los catalizadores básicos exhiben mucha más actividad que los catalizadores ácidos, pero encontrar catalizadores efectivos es todavía un gran problema. Algunos óxidos de metales sólidos como el magnesio y el zinc pueden ser utilizados directamente pero actúan principalmente por medio de un mecanismo homogéneo, produciendo una gran cantidad de jabones o gliceratos. Una variedad de catalizadores sintéticos basados en óxidos de metales alcalinotérreos (Ca, Mg, Zn, Sn) han sido estudiados mucho pero su robustez y actividad resultan ser insuficientes (Hancock y col., 1983). Como se mencionó anteriormente, se ha reportado una satisfactoria aplicación industrial en catálisis heterogénea básica, pero no ha sido confirmada por otros estudios.

2.6 OPERACIONES DE SEPARACIÓN

Una operación clave en la producción de biodiesel es la separación del glicerol y los metil ésteres de ácidos grasos libres provenientes de la mezcla de reacción por decantación. Estudios termodinámicos en este tema han despertado el interés industrial. La tabla 2.7 presenta datos para el sistema metanol/ metil oleato/ glicerol que podrían verse como representativos. Se puede observar que la solubilidad reciproca del glicerol y metil ésteres a 60 grados es muy baja, el éster es prácticamente insoluble en glicerol. El metanol es distribuido entre las fases pero preferiblemente en glicerol. Los mismos resultados son válidos a altas temperaturas. Los datos de la tabla siguiente pueden servir para identificar los parámetros de interacción binarios del modelo termodinámico conveniente, tal como el NTRL.

Tabla 2.7 Balance estequiométrico de materia para metanólisis de Trioleína.

	Entrada			Salida		
	Trioleína	Metanol	Total	Metil oleato	Glicerol	Total
Masa, kg	884	96	980	888	92	980
Volumen, l	1040	122.2	1162.2	1082.9	83.6	1166.5

2.7 SIMULACIÓN: DEFINICIONES E IMPORTANCIA

Thomas T. Goldsmith Jr. y Estle Ray Mann la definen así (1976): "Simulación es una técnica numérica para conducir experimentos en una computadora digital. Estos experimentos

comprenden ciertos tipos de relaciones matemáticas y lógicas, las cuales son necesarias para describir el comportamiento y la estructura de sistemas complejos del mundo real a través de largos periodos de tiempo".

Una definición más formal formulada por R.E. Shannon (1976) es: "La simulación es el proceso de diseñar un modelo de un sistema real y llevar a término experiencias con él, con la finalidad de comprender el comportamiento del sistema o evaluar nuevas estrategias -dentro de los límites impuestos por un cierto criterio o un conjunto de ellos para el funcionamiento del sistema".

2.7.1 ETAPAS PARA REALIZAR UN ESTUDIO DE SIMULACIÓN

2.7.1.1 DEFINICIÓN DEL SISTEMA

Consiste en estudiar el contexto del problema, identificar los objetivos del proyecto, especificar los índices de medición de la efectividad del sistema, especificar los objetivos específicos del modelamiento y definir el sistema que se va a modelar.

2.7.1.2 FORMULACIÓN DEL MODELO

Una vez definidos con exactitud los resultados que se esperan obtener del estudio, se define y construye el modelo con el cual se obtendrán los resultados deseados. En la formulación del modelo es necesario definir todas las variables que forman parte de él, sus relaciones lógicas y los diagramas de flujo que describan en forma completa el modelo.

2.7.1.3 COLECCIÓN DE DATOS

Es importante que se definan con claridad y exactitud los datos que el modelo va a requerir para producir los resultados deseados.

2.7.1.4 IMPLEMENTACIÓN DEL MODELO EN LA COMPUTADORA

Con el modelo definido, el siguiente paso es decidir si se utiliza algún lenguaje como el fortran, algol, lisp, entre otros, o se utiliza algún paquete como Promodel, Vensim, Stella y

iThink, GPSS, Chemcad, simscript, Aspen Plus, Super Pro Designer o algún otro para procesarlo en la computadora y obtener los resultados deseados.

2.7.1.5 VERIFICACIÓN

El proceso de verificación consiste en comprobar que el modelo simulado cumple con los requisitos de diseño para los que se elaboró. Se trata de evaluar que el modelo se comporta de acuerdo a su diseño del modelo.

2.7.1.6 VALIDACIÓN DEL SISTEMA

A través de esta etapa es valorar las diferencias entre el funcionamiento del simulador y el sistema real que se está tratando de simular. Las formas más comunes de validar un modelo son:

1. La opinión de expertos sobre los resultados de la simulación.
2. La exactitud con que se predicen datos históricos.
3. La exactitud en la predicción del futuro.
4. La comprobación de falla del modelo de simulación al utilizar datos que hacen fallar al sistema real.
5. La aceptación y confianza en el modelo de la persona que hará uso de los resultados que arroje el experimento de simulación.

2.7.1.7 EXPERIMENTACIÓN

La experimentación con el modelo se realiza después que éste haya sido validado. La experimentación consiste en generar los datos deseados y en realizar un análisis de sensibilidad de los índices requeridos.

2.7.1.8 INTERPRETACIÓN

En esta etapa del estudio, se interpretan los resultados que arroja la simulación y con base a esto se toma una decisión. Es obvio que los resultados que se obtienen de un estudio de simulación ayudan a soportar decisiones del tipo semi-estructurado.

2.7.1.9 DOCUMENTACIÓN

Dos tipos de documentación son requeridos para hacer un mejor uso del modelo de simulación. La primera se refiere a la documentación del tipo técnico y la segunda se refiere al manual del usuario, con el cual se facilita la interacción y el uso del modelo desarrollado.

2.7.2 SIMULACIÓN EN INGENIERÍA QUÍMICA

El uso de simuladores dentro del ámbito de la ingeniería química cobra una gran importancia debido a que minimiza el esfuerzo humano para la resolución de los cálculos complejos que normalmente lleva asociado un proceso de ingeniería.

Por este motivo, la simulación de varios procesos en serie facilita la toma de decisiones, ya que los datos arrojados por el software permite un análisis lógico del proceso. Dentro de los simuladores comerciales más utilizados en el tema del que se habla se encuentran los siguientes:

HYSIS: Es un simulador comercial de múltiples aplicaciones. Muy utilizado en química e ingeniería de petróleos por su facilidad en separaciones.

ASPEN PLUS: Es un simulador estacionario, secuencial y modular. Modela y simula cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra.

CHEMCAD: Simulador de procesos utilizado en varias industrias, desde la refinación del crudo hasta la producción de cosméticos. Permite resolver muchos de los problemas de la ingeniería química en poco tiempo y con resultados confiables.

SUPER PRO DESIGNER: Simulador de procesos líder en la industria biotecnológica. Utilizado en el ciclo de vida de envío y comercialización de productos, facilitando la optimización de procesos.

Tomando en cuenta el tema del cual trata esta investigación, se ha elegido este último simulador debido a su gran rama de aplicaciones en los procesos biológicos. A continuación se

muestran algunas de las aplicaciones de este simulador en las diferentes industrias que manejan este tipo de procesos.

2.7.2.1 USOS DE SUPER PRO DESIGNER

Biotecnología y bioprocesos: Reducción de tiempo de ciclos, previsión de comportamiento de equipos y acortamiento de tiempo al mercado.

Farmacéutica: Síntesis y comercialización de medicamentos.

Purificación de agua: Modelado, evaluación y optimización del proceso de producción de agua ultra pura por intercambio iónico, absorción con carbón activado y radiación UV.

Tratamiento de aguas: Súper Pro Designer puede ser utilizado para modelar, evaluar y optimizar cualquier tipo de tratamiento de aguas residuales, purificación de agua y procesos de purificación de aire. Incluye operaciones unitarias para el tratamiento de aguas por medios biológicos o físicos.

Hidrometalurgia y procesos de minerales: Usado en los modelos de tratamiento de sólidos, química húmeda, control de contaminación de aire y pasos en los procesos de reciclaje de materiales.

Industria de la pulpa y el papel: Súper Pro es utilizado en esta industria para mejorar los balances y evaluar las opciones de reciclaje de agua. Otras aplicaciones incluyen el tratamiento de aguas de desecho de plantas de papel y pulpa.

Control de la contaminación del aire: Súper Pro incluye una gran variedad de modelos de operaciones unitarias para tratamiento y purificación de aire y corrientes gaseosas en general. La lista incluye operaciones unitarias para remoción de partículas de materiales (ej. Ciclones, Filtro de bolsa, Precipitador Electrostático) así como para remoción de vapores orgánicos y otros componentes.

CAPÍTULO 3

METODOLOGÍA

Una vez que ya han quedado claros los diferentes tipos de procesos que se pueden utilizar para la producción de biodiesel por medio de transesterificación de triglicéridos, se procede entonces ahora a analizar los equipos del proceso que se utilizarán durante la simulación.

Es importante resaltar en esta sección que algunos de los componentes existentes en las corrientes de flujo del proceso (como los ácidos grasos y metil ésteres derivados de ellos) que se utilizaron durante las simulaciones son sustancias que no se manejan convencionalmente en su forma pura y, por ende, no existen dentro de la base de datos de SPD.

Es por lo anterior que se vio la necesidad de dar de alta y manipular dichos componentes dentro de la base de datos de este simulador. El proceso de apertura del simulador, registro de componentes, así como la información utilizada para cada uno de ellos se explica con detalle en los apéndices I y II, respectivamente.

3.1 CASOS DE ESTUDIO EN LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL UTILIZANDO SUPER PRO DESIGNER

3.1.1 SIMULACIÓN DE UN REACTOR CONTINUO DE MEZCLA COMPLETA

En esta sección se analizará la simulación de un reactor continuo de mezcla completa para la producción de biodiesel. Este reactor forma parte de la primera fase del proceso de producción para este biocombustible ya que es la etapa en la cual se llevarán a cabo las reacciones de transesterificación para cada uno de los ácidos grasos presentes en la alimentación.

Se ha decidido utilizar un reactor continuo cuya cinética depende de la materia prima estudiada para cada proceso. Por ello, se tomaron como referencia los datos presentados por Zieba y col. (2009) y se propusieron ecuaciones que describieran la cinética de esta reacción en base a las condiciones reportadas en dicho artículo, comparando los resultados obtenidos con

simulación contra los experimentales obteniéndose de esta forma la ecuación cinética que obedece cada uno de los aceites analizados.

Por otro lado, se ha decidido trabajar con un reactor de mezcla completa debido a las fases presentes en este sistema. Como se podrá observar, la materia prima entra en una forma líquida y el metanol de igual manera. Por lo anterior será necesario utilizar este tipo de reactores.

Como se ha explicado anteriormente, lo primero que se debe hacer es abrir el programa y seleccionar un modo de operación continuo. Después de ello se darán de alta los componentes involucrados y se seleccionará el sistema de unidades en que se desea trabajar. Para fines de estudio, se seleccionará el **Sistema Internacional de Unidades (mks)**. Posteriormente en el menú “**Operaciones Unitarias (Unit Procedures)**” se seleccionará el submenú “**Reacción Continua (Continuos Reaction)**”, donde se desplegarán los distintos tipos de reactores disponibles. Se seleccionará entonces el menú “**Cinética (Kinetic)**” y finalmente se dará un clic en la opción “**En un reactor de mezcla completa (In a CSTR)**”.

Ya que se ha realizado lo anterior entonces se plasmará el icono de este reactor en el entorno de trabajo de Super Pro Designer. Después de ello se dibujarán las corrientes de entrada y salida de este equipo y se especificarán las composiciones de cada una de las corrientes entrantes. Si el usuario así lo desea entonces se cambiará de igual modo el nombre de cada corriente y del equipo para localizarlo con mayor facilidad. Si todo lo anterior se ha llevado a cabo de la forma correcta el diagrama de flujo para el análisis aislado de un reactor de este tipo será de la siguiente forma.

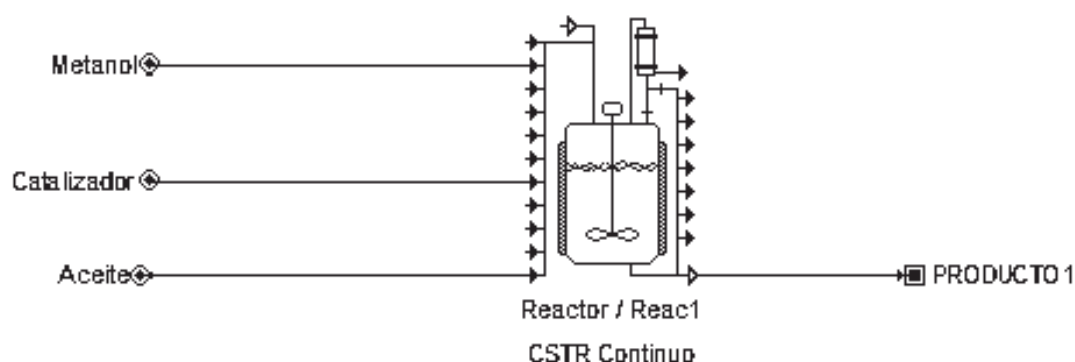


Figura 3.1. Diagrama de un reactor de mezcla completa en Super Pro.

Una vez que ya se han especificado las corrientes, se deberán especificar las características del equipo a utilizar. Para el caso en estudio se especificarán una corriente de metanol de 600 mol/h, una alimentación de aceite de 100 mol/h y una corriente de catalizador con una composición de 80% hidróxido de sodio con 20% de agua. Ya hecho lo anterior se deberán especificar las reacciones que suceden en el reactor con que se labora. Para realizar esto se deberá ir primero a las especificaciones del reactor y posteriormente dar clic en la pestaña “**Reacciones (Reactions)**”, donde aparecerá una ventana en la cual se podrán modificar las reacciones que se tengan. Lo primero será tener la reacción y modificarle el nombre para identificarla de mejor manera por medio del icono . Posteriormente se deberá especificar la reacción dando un doble clic sobre el nombre de la misma y oprimiendo el botón  para la especificación de reactivos (en la sección izquierda) y productos (en la sección derecha). En el presente caso de estudio se propone que los reactivos sean el metanol y los triglicéridos y los productos sean los ésteres correspondientes, de acuerdo a la reacción presentada en la ecuación 2.2.2.

Ya una vez especificadas las reacciones presentes entonces se deberán especificar las otras opciones que el reactor requiere. En este caso se propone una presión de una atmósfera, un tiempo de residencia de una hora, ninguna emisión en fase gas y una temperatura de 70 grados centígrados (estos datos fueron tomados de la literatura correspondiente).

La información de las ventanas que se abren al momento de modelar el reactor y la información que deberá llenarse en cada una de ellas se encuentra presente en el apéndice VII.

3.1.2 SIMULACIÓN DE UNA COLUMNA DE DESTILACIÓN EN SUPER PRO

Como ya se ha mencionado anteriormente, la simulación del proceso de producción de biodiesel requiere de etapas de separación constantemente. En este apartado se estudiará una columna de destilación para la separación de la mezcla glicerol-agua proveniente de la mezcla de corrientes de glicerol. Como se mencionó en el proceso anterior la alimentación a este equipo será una mezcla de 50% glicerol en agua con una pequeña cantidad de metanol.

De la misma forma en cómo se procedió a especificar y dibujar el diagrama para el reactor se realizará el de la destilación. Para ello es necesario ir al menú “Operaciones Unitarias-Destilación – continua” y plasmar el equipo así como conectar sus corrientes. Como resultado el diagrama quedará como se muestra en la figura siguiente:

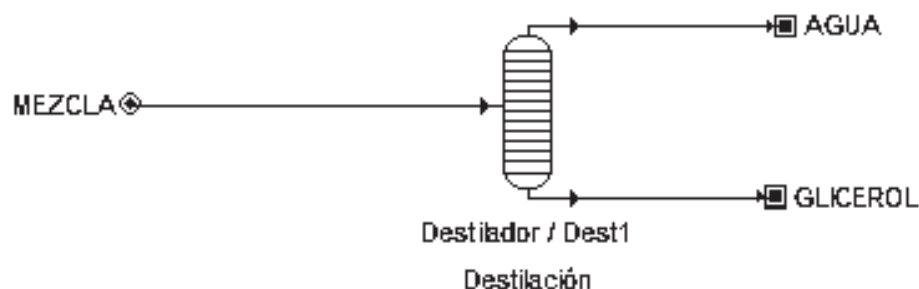


Figura 3.2 Destilación Glicerol/Agua.

Una vez que ya se tiene dibujado el diagrama de flujo se procede entonces ahora a dar las condiciones de operación para este equipo. La pantalla principal de especificaciones se encuentra en la figura AVI.1. Para el caso en estudio se elige como ligero clave al agua y como pesado clave al glicerol. Posteriormente se deberá especificar la pureza de cada uno de ellos en el destilado y en el fondo. En el presente caso se elegirá una pureza del 99% de agua en destilado y 1% en el fondo. Por otro lado se deberá realizar de la misma forma un estudio de factibilidad tomando en cuenta diferentes relaciones de reflujo.

3.1.3 SIMULACIÓN DE UNA CENTRÍFUGA PARA SEPARACIÓN DE CATALIZADOR Y ÁCIDOS GRASOS

Como se puede observar, los equipos analizados en esta sección de la metodología son en general los equipos utilizados en un proceso continuo de producción de biodiesel. Por ende, no se debe dejar pasar la forma en cómo se debe utilizar una centrifuga, ya que este equipo es utilizado para la separación que conlleva ácidos grasos y catalizador. Este proceso se debe llevar a cabo debido a que, como se había ya mencionado anteriormente, el proceso de transesterificación que forma parte de la primera etapa del proceso de producción de biodiesel, se logra mediante el uso de un reactor donde los triglicéridos son convertidos a metil ésteres y glicerol. Por lo tanto,

debido a que el producto de interés es la mezcla de metil ésteres se deberán separar estos últimos del glicerol para su posterior purificación.

Gracias a la diferencia en las densidades entre los compuestos presentes en esta mezcla, la separación del glicerol puede llevarse a cabo mediante una centrifugación, o bien, mediante una decantación. En la sección presente se analizará el caso de la operación de centrifugación para separación de estos componentes.

La forma en la que Super Pro permite dar de alta una operación de centrifugación es la misma que las dos anteriores. Para acceder a este equipo es necesario ir al menú “**Operaciones Unitarias (Unit Procedures)**”, después de ello se selecciona el submenú “**Centrifugación (Centrifugation)**” y por último se selecciona la opción “**Centritech**”. Esta opción permitirá el registro de la centrifuga en el escritorio de Super Pro.

Una vez realizado lo anterior se deberá entonces hacer clic sobre el icono “modo de conexión”, el cual se vio anteriormente para colocar las corrientes de entrada y salida de este equipo. Posterior a este paso se accede entonces a las propiedades del equipo para seleccionar su modo de operación. Las formas en que este equipo puede operar son en modo de bomba, de alimentación y de válvula. Las figuras 3.3 y 3.4 muestran, respectivamente, el equipo de centrifugación y la ventana de especificación de condiciones en este equipo.

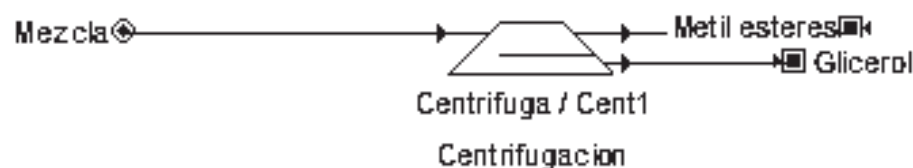


Figura 3.3 Equipo y modo de conexión de una centrifuga.

CENTRIFUGE-1 (Centritech Centrifugation)

Oper. Cond's | Labor, etc. | Description

Particulate Component Removal

Component	% Removed
Nitrogen	0.00
Oxygen	0.00
Water	0.00

Concentration Factor (Feed/Concentrate) 20.0000

Centrifugation Mode
☒ Pump ☐ Feed ☐ Valve

Power
 Power 0.000 kW

Operating Throughput 0.00 L/h

Aceptar Cancelar Ayuda

Figura 3.4 Especificación en condiciones de operación de una centrifuga.

Como se puede observar en la última figura (3.4) las especificaciones principales de este centrífuga son la potencia de la centrífuga y el rendimiento operativo, además del factor de concentración.

Se debe ahora mencionar que, como se había dicho anteriormente, otra forma de separar es por medio de un decantador. La opción de este tipo de equipos se encuentra en el mismo menú y submenú que la centrifuga anterior, con la diferencia de que en vez de seleccionar la opción “**Centritech**”, se seleccionará ahora la opción “**Decantador (Decanter)**”. La diferencia principal entre estos equipos es que el decantador tiene 3 salidas en el caso de que así lo requiriera el proceso. En una salida se obtiene glicerol, en otra los metil ésteres y en la última se obtienen los sólidos disueltos (en el caso de que la mezcla tuviera sólidos presentes). Las figuras 3.5 y 3.6 muestran, respectivamente, el equipo de decantación y la ventana de especificación de condiciones en el mismo.

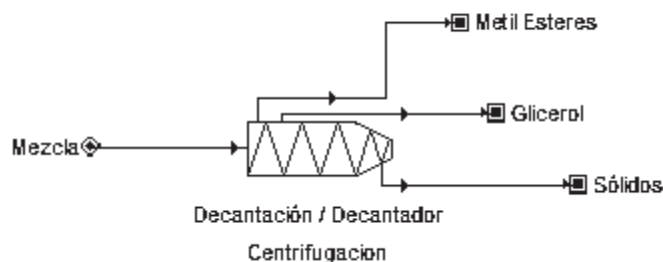


Figura 3.5 Decantador para separación de metil ésteres.

Figura 3.6 Especificaciones para decantador.

Como se puede observar, las especificaciones para este equipo están dadas en función de si existen o no sólidos disueltos. En el caso que no los haya, la opción de partículas sólidas se tornará inaccesible. Otro de los factores importantes a considerar en este equipo es en base a qué tipo de operación se realizará el diseño. Es decir, se debe especificar si habrá remoción de sólidos, de aceites o de ambos. Es necesario saber qué es lo que se desea remover porque el diseño del equipo dependerá de esta opción. Para más información acerca de las especificaciones de diseño para un decantador se deberá consultar el apéndice VIII.

CAPÍTULO 4

ANÁLISIS DE RESULTADOS

4.1 INTRODUCCIÓN Y DESCRIPCIÓN DE LOS PROCESOS ANALIZADOS MEDIANTE SIMULACIÓN

En la presente sección se realizará un análisis de factibilidad que pretende mostrar al interesado una visión global de la viabilidad de llevar a cabo la construcción de una planta productora de biodiesel tomando en cuenta las materias primas antes mencionadas. Como ya se ha dicho en la sección anterior, las simulaciones del diseño de planta se han realizado tomando en cuenta un medio básico de catálisis debido a que la transesterificación en este medio resulta ser más rápida que la del medio ácido y presenta una mejor conversión (aprox. 95% en el caso de la *Jatropha* y 98% en el caso de la *Higuerilla* para tiempos de residencia en el reactor entre 30 minutos y una hora) según estudios realizados por Zieba y col. (2009), utilizando para ello hidróxido de potasio como catalizador.

Este último compuesto se ha elegido debido a que, a diferencia de la sosa cáustica, presenta una mayor estabilidad en la reacción, además de que su recuperación dentro de la fase pesada posterior a la transesterificación se lleva a cabo de manera total, mientras que la sosa presenta la desventaja de ofrecer un tiempo de residencia mayor dentro del reactor y la separación de esta puede no ser completa causando así que el producto final exceda los límites de sodio permitidos en las normas (0.05% w/w según la ASTM D6751). Además de ello, el control de la temperatura en la reacción utilizando sosa en vez de potasa es más difícil y puede llevar a que la temperatura del reactor aumente hasta llegar a la temperatura necesaria para que se produzca un proceso de saponificación (70^o C aproximadamente) teniendo como productos indeseables a los ácidos grasos saponificados, lo que conlleva a tener mayor cantidad de procesos de separación afectando la economía del proceso general, lo cual puede ser evitado utilizando las condiciones propuestas por Meneghetti y col. (2006). Por ello es que, hoy en día, las plantas productoras de biodiesel en la unión europea realizan el proceso utilizando el catalizador mencionado anteriormente.

Como se pudo observar en la sección anterior, Super Pro Designer ofrece la ventaja de tener un entorno muy amigable al usuario, además de permitir un análisis detallado de cada corriente presente en el proceso a simular. Es importante mencionar que, a pesar de que el producto de interés (Biodiesel) puede obtenerse a partir de diferentes materias primas, dentro del proceso de obtención de este biocombustible también existen subproductos que son obtenidos en el mismo y que pueden ser vendidos para obtener un beneficio económico extra aparte del producto principal.

Es importante recordar también que los procesos simulados con *Jatropha* e *Higuerilla* pueden ser de dos tipos: con y sin recirculación de catalizador. Sin embargo, existen operaciones (como el triturado de la semilla y la centrifugación para obtención del aceite) que son comunes en los dos procesos. Los esquemas mostrados en las figuras 4.1 y 4.2 respectivamente, permiten observar la diferencia entre los equipos utilizados en un proceso con recirculación de catalizador y otro transformando este último en un subproducto (fertilizante) que puede ser vendido para mejorar la economía del proceso.

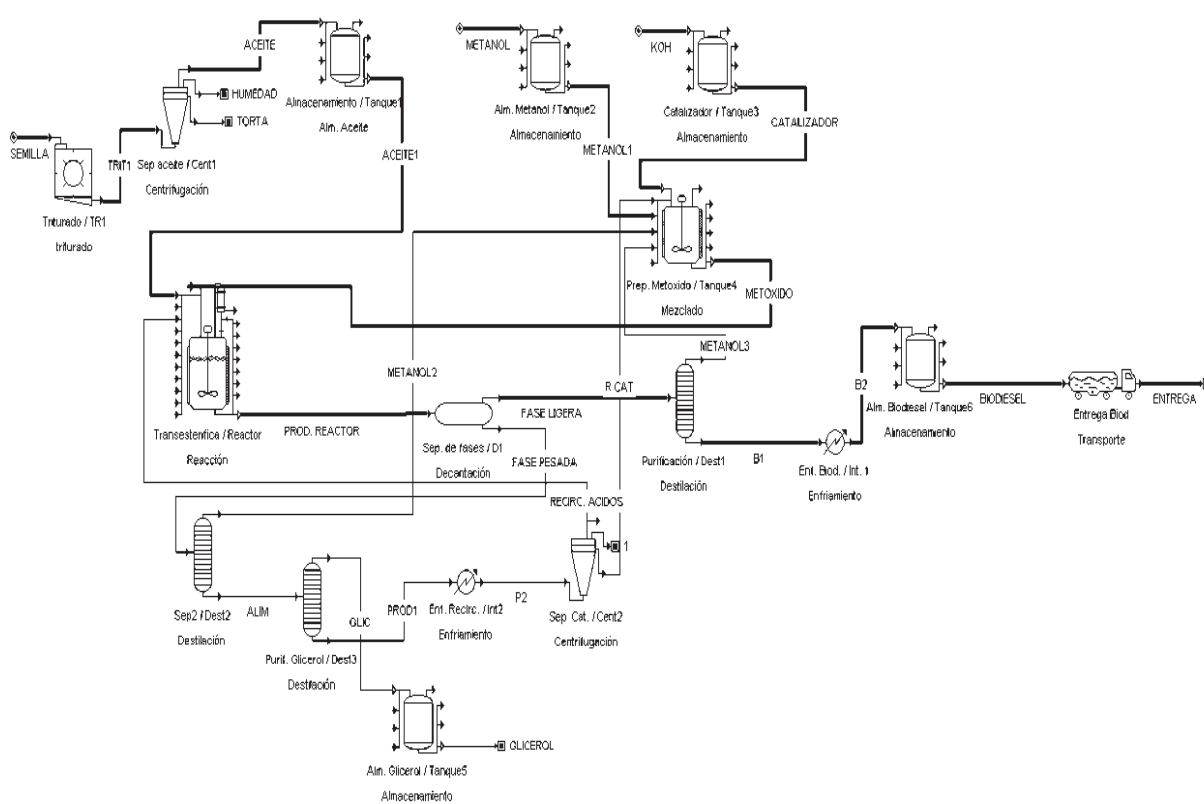


Figura 4.1 Proceso de producción de biodiesel con recirculación de catalizador.

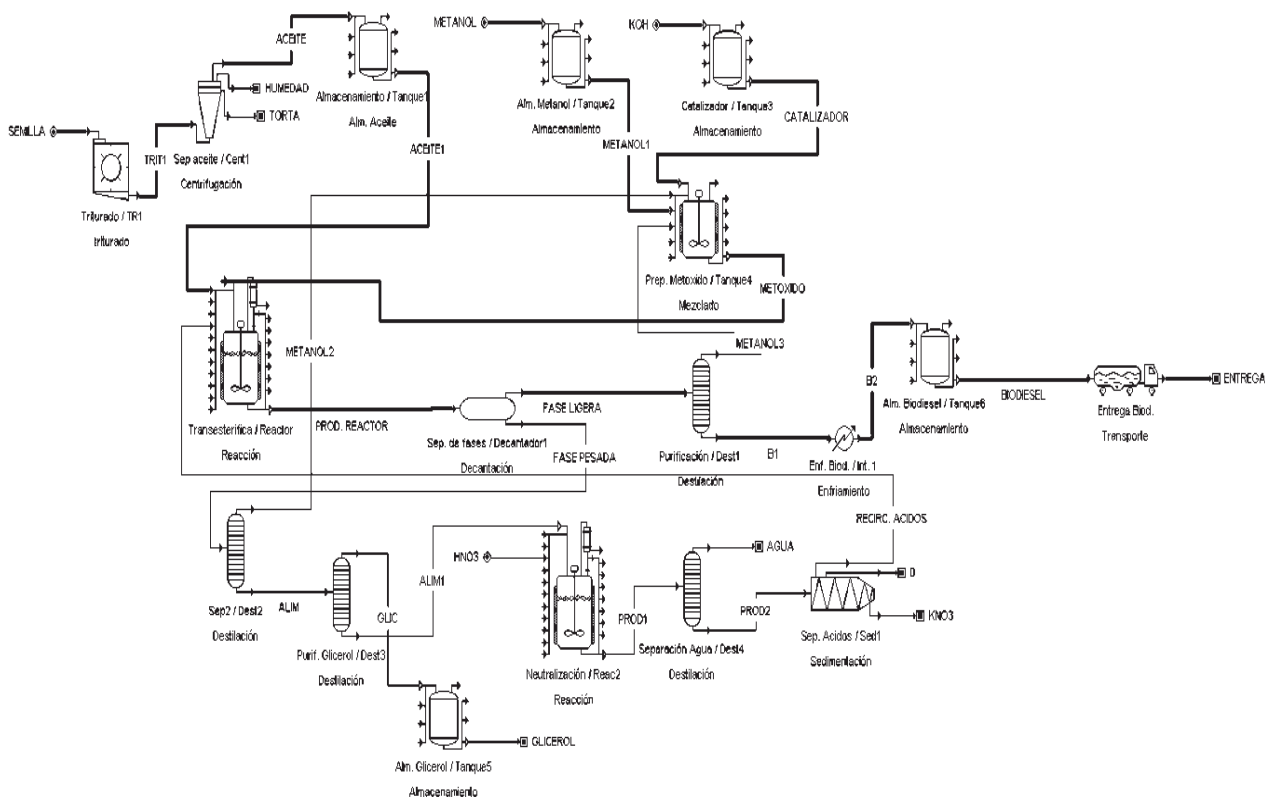


Figura 4.2 Proceso de producción de biodiesel simulado sin recirculación de catalizador.

Como se puede observar, una vez que la semilla ha entrado se pasa por un proceso de triturado y centrifugado para extraerle el aceite, el cual es guardado en un tanque de almacenamiento. Por otro lado, se debe preparar el metóxido que reaccionará con los ácidos grasos mezclando en un tanque la cantidad requerida de metanol y catalizador para cada materia prima y posteriormente pasarla por un reactor cinético continuo de tipo tanque agitado, en el cual se lleva a cabo la reacción de transesterificación. Como salida del reactor se tiene entonces una mezcla de ácidos grasos y metanol que no reaccionaron, el catalizador, glicerol y los metil ésteres formados en la reacción. Las cinéticas requeridas en el reactor fueron tomadas, en el caso de la Higuierilla, del artículo publicado por Zieba y col. (2009), mientras que la de *Jatropha* fue obtenida a partir del estudio de Berchmans y col. (2010).

Una vez que se tiene la corriente de salida del reactor, debido a la diferencia de densidades, esta mezcla se hace pasar por un decantador en el cual se separan dos fases presentes. En la fase ligera se encuentran los metil ésteres y una parte del metanol no reaccionante, mientras que en la fase pesada se encuentran el restante del metanol que no reaccionó, los ácidos grasos

que tampoco reaccionaron, el glicerol y el catalizador. Posteriormente tanto en la fase ligera como en la pesada se realizan operaciones de purificación de productos y pueden existir dos caminos a seguir una vez que el catalizador básico ha sido separado. Este último puede recircularse al proceso o bien, puede ser neutralizado con un ácido formando una solución acuosa del compuesto obtenido, el cual puede ser vendido como fertilizante. En el caso de estudio, el catalizador seleccionado (KOH), será neutralizado con ácido nítrico formando así una solución acuosa de nitrato de potasio para posteriormente retirar el agua y dejar como subproducto el fertilizante formado. Cabe mencionar que esto es factible ya que las reacciones de neutralización son completas y se llevan a cabo en poco tiempo (casi instantáneamente).

Como una contribución a lo dicho anteriormente y para un mejor entendimiento de los resultados presentados a partir de la sección 4.2, es importante mencionar también las condiciones de operación con las cuales trabajaron los equipos presentes en los diagramas anteriores (Figs. 4.1 y 4.2), las cuales se enumeran a continuación.

1. En el caso de las separaciones por destilación se tomaron relaciones de reflujo iguales a 1.25 veces la relación de reflujo mínima (la cual fue calculada por el programa) debido a que a partir de esta relación el valor del número de platos presentes en las columnas tiene variaciones pequeñas (del orden de centésimas).
2. La temperatura de reacción tomada en cuenta para la transesterificación del aceite de ambas materias primas fue de 65 grados centígrados, la cual representa el límite máximo conveniente para llevar a cabo dicha reacción (la explicación a esta limitante se encuentra en la sección 4.5).
3. Todos los equipos presentes en los procesos analizados se simularon tomando en cuenta presión atmosférica).

4.1.1 COMPOSICIÓN EN ÁCIDOS GRASOS DE LOS ACEITES ESTUDIADOS

Antes de mostrar los resultados obtenidos del reporte técnico de los procesos estudiados es necesario realizar un comparativo entre las composiciones de ácidos grasos en las materias primas analizadas ya que esto, junto con los resultados que se muestran en esta sección, contribuyen a comprobar la veracidad o falsedad de la hipótesis propuesta en la sección 1.4. Dichas composiciones se muestran entonces en la tabla 4.1 para la *Jatropha Curcas* y la

Higuerilla, obtenidas de los artículos de Berchmans (2007) y Zieba y col. (2009). Es importante mencionar que los valores de dicha tabla fueron tomados en cuenta debido a que el contenido de ácidos grasos en estos aceites varía poco entre muestras de la misma especie.

Tabla 4.1 Composición de ácidos grasos contenidos en los aceites de *Jatropha Curcas* e Higuerilla.

Ácido graso	Composición en <i>Jatropha Curcas</i> (%)	Composición en Higuerilla (%)
Mirístico [C ₁₄ :1]	0.18	1
Palmítico [C ₁₆ :1]	11.4	22
Estéarico [C ₁₈ :0]	2.27	3
Oleico [C ₁₈ :1]	45	19
Linoleico [C ₁₈ :2]	40.3	54
Linolénico [C ₁₈ :3]	0.85	1

4.2 ANÁLISIS TÉCNICO DE LOS PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL SIMULADOS

4.2.1 ANÁLISIS DE FLUJOS DE MATERIA UTILIZADOS EN LOS PROCESOS DE PRODUCCIÓN ESTUDIADOS

Una vez que ya se han mostrado los esquemas utilizados en Super Pro Designer para la producción de biodiesel con y sin recirculación de catalizador, es importante hacer el análisis técnico para tener una idea de la factibilidad de llevar a cabo cada uno de estos procesos y realizar el comparativo entre ellos para cada una de las materias primas propuestas. Para ello se hace necesario resaltar que (como se ha planteado en la hipótesis), con el fin de realizar un comparativo entre materias primas y no entre procesos óptimos, el tratamiento completo de los insumos (desde la fase de extracción de aceite hasta la entrega del producto final) serán iguales para las dos semillas a comparar siguiendo los diagramas de flujo mostrados en las figuras 4.1 y 4.2, respectivamente.

De datos obtenidos por la Secretaría de Agricultura, Ganadería y Pesca en Argentina (SAGyPA), se ha encontrado que las plantas productoras de biodiesel pueden clasificarse en 3 tipos principalmente:

- Plantas pequeñas con capacidad de producción de entre 100 y 5000 toneladas de producto por año.
- Plantas medianas con capacidad de producción entre 5001 y 60000 toneladas por año.
- Plantas grandes con capacidades mayores a las 60000 toneladas por año.

Siendo las intermedias las que mayormente pueden encontrarse instaladas debido a que la materia prima disponible para este fin normalmente no permite rebasar la capacidad de procesar mas allá de 60,000 toneladas de producto por año. Es por ello que las simulaciones realizadas en este trabajo pretenden realizar el análisis de factibilidad que permita la instalación de una planta productora de biodiesel con capacidad de 31,800 toneladas por año aproximadamente (esto debido a que esta cifra es un promedio de la capacidad de producción de 8 plantas ubicadas en la unión europea).

Tomando lo anterior como referencia, considerando que un año tiene aproximadamente 330 días laborales y operando la planta los tres turnos diarios, se tiene que para lograr el objetivo deseado dicho proceso debe producir un aproximado de 4605 litros por hora (incluidos ya los tiempos muertos entre turnos y el tiempo de mantenimiento). Por ende, se ha tomado este dato de volumen como referencia para el diseño de dicha planta y fue calculado dividiendo la capacidad total entre 330 días laborales y después entre 24 horas diarias. En la tabla 4.2 se muestran entonces las cantidades necesarias de materia prima, productos y subproductos obtenidos de las simulaciones para cada uno de los procesos propuestos, siendo estos nombrados como JSR (Jatropha sin recirculación), JCR (Jatropha con recirculación), HSR (Higuerilla sin recirculación) y HCR (Higuerilla son recirculación). Dichos datos se encuentran tabulados en kg/h.

Tabla 4.2 Especificación de flujos de las corrientes involucradas en la simulación de los procesos de producción de biodiesel.

Corriente	JSR	JCR	HSR	HCR
Materia Prima	6806.57	6807	7980.456	7980
Metanol	441.98	441.7	447.7004	447.68
KOH	77	.01	43.6	.01
HNO ₃	86.49	0	49	0
KNO ₃	138.77	0	78.5707	0
Biodiesel	4026.142	4026.182	4027.41	4027.196
Glicerol	247.841	247.846	250.498	250.485
Torta	2974.47	2974.66	4149.837	4149.6

Es importante tomar en cuenta la cantidad de torta proveniente de la extracción del aceite en *Jatropha Curcas* debido a que la gran cantidad de compuestos nitrogenados en ella permiten su comercialización como abono natural ayudando así a obtener una mejor tasa de retorno en cada uno de los procesos involucrados. De esta manera, la viabilidad de instalar una planta productora de biodiesel dependerá también de los subproductos presentes.

Por otro lado, es indispensable responder ahora a una pregunta que determinará la factibilidad técnica de cada proceso. ¿Es realmente la cantidad de energía producida mayor que la cantidad de energía consumida en la fabricación de este biocombustible? la respuesta a dicha pregunta se encuentra en la sección 4.2.2.

4.2.2 ANÁLISIS ENERGÉTICO DE LOS PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL SIMULADOS

La simulación de los procesos observados en la sección 4.2 muestran que es posible llevar a cabo la construcción de dichas plantas obedeciendo la ley de la conservación de la materia. Por otro lado, es importante saber de la misma forma si la cantidad de energía producida por estos procesos es mayor que la gastada en servicios para su manufactura. Para responder a esta cuestión se debe tomar en cuenta que el calor de combustión del biodiesel es de aproximadamente 38900 kJ/ kg (Sorin, 2008). Esto equivale a tener una cantidad de energía en combustión de 9290.66 Kcal/ kg.

Ya con estos datos obtenidos, es posible realizar ahora un comparativo entre la cantidad de energía obtenida del proceso y la cantidad de energía gastada en el mismo en servicios de calentamiento, enfriamiento y funcionamiento de la maquinaria. Dichos datos se muestran en la tabla 4.3 y en la figura 4.3 respectivamente. Es importante mencionar que los flujos de energía requeridos por cada uno de los procesos fueron resultados obtenidos en las simulaciones de cada uno de ellos en SPD y que dichos flujos se encuentran en **Kcal/h**.

Tabla 4.3 Comparativo de flujos de energía entrada-salida para los procesos de producción de biodiesel simulados en Super Pro Designer.

Proceso	Energía consumida como potencia de la maquinaria	Energía consumida en calentamiento y enfriamiento	Energía producida	Relación EP/EC
JCR	43,199.06	994,403.56	37, 405,497.85	37.8143
JSR	45,220.18	943,992.95	37, 405,497.85	36.0503
HCR	41,940.97	13,116,650.6	37, 417,947.34	2.84602
HSR	42,934.03	13,100,133.8	37, 417,947.34	2.84267

Donde:

EP = Energía Producida

EC = Energía Consumida

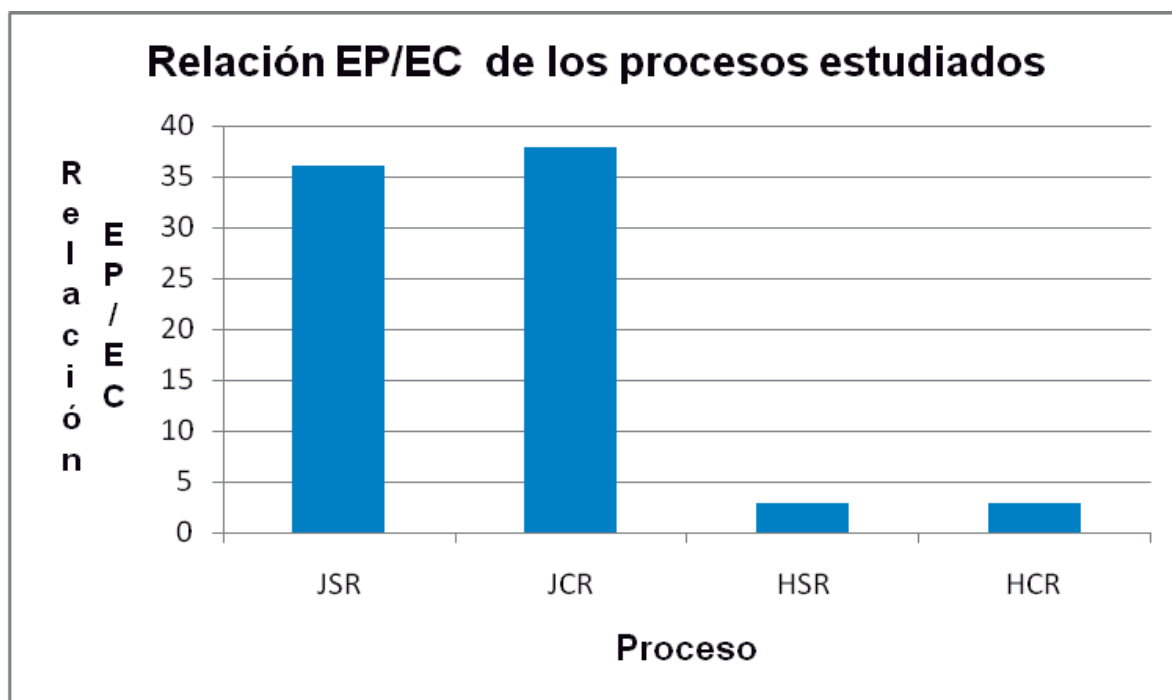


Fig 4.3 Comparativo de consumo energético de los procesos simulados.

Como puede observarse en la tabla y figura 4.3, los requerimientos energéticos de los procesos simulados varían poco al tratarse de un proceso con recirculación o sin recirculación de catalizador. Sin embargo, existe una diferencia muy grande entre los requerimientos energéticos al pasar de una materia prima a otra (de *Jatropha* a Higuierilla por ejemplo). Esto puede explicarse fácilmente debido a las relaciones molares existentes entre el aceite y la cantidad de metanol utilizada. En el caso de la *Jatropha* se utiliza una relación molar aceite: metanol de 1: 8 (Berchmans y col., 2007), mientras que la viscosidad del aceite de Higuierilla provoca que la relación molar adecuada de aceite: metanol para lograr la transesterificación de los ácidos presentes en esta grasa sea de 1: 29 (Zieba y col., 2009) y, por ende, los requerimientos energéticos para llevar a cabo dicha transesterificación difieran en cada proceso. Por otro lado se debe dejar en claro que, aunque la separación del metanol en los procesos (que es una de las etapas que mayor cantidad de energía consume) puede ser llevada a cabo por distintas operaciones unitarias, este trabajo pretende realizar un comparativo entre materias primas utilizando las mismas operaciones de separación para ambas y es por ello que, en el caso de la Higuierilla (el aceite de la cual se transesterifica con cantidades mayores de metanol), requiere una columna de destilación de mayor tamaño, incrementando de esta forma la cantidad de energía requerida para dicho proceso y, a su vez, afectando la relación presentada en la tabla 4.3.

De lo anterior se puede resaltar que los 4 procesos simulados con estos diagramas de flujo son viables energéticamente ya que se produce una mayor cantidad de energía que la utilizada en el proceso de fabricación. Sin embargo, es importante resaltar que de entre estos 4 procesos el más viable es el proceso JCR.

Hasta el momento se han analizado ya las variables técnicas principales de dichos procesos (como los requerimientos de flujos másicos y energéticos). Sin embargo, la decisión final entre utilizar una materia prima u otra así como utilizar o no recirculación de catalizador, estará dada por el estudio de impacto económico obtenido de cada uno de ellos, mismo que se muestra en la sección 4.3.

4.3 ANÁLISIS ECONÓMICO DE LOS PROCESOS SIMULADOS

Una vez que el análisis técnico del proceso ha sido estudiado y se ha verificado que la viabilidad de implementación del mismo es posible, es necesario recurrir a un análisis económico. La realización de este último es fundamental en cualquier proceso ya que, si bien es cierto que la verificación de las corrientes es importante para dicho estudio, se debe recordar que la finalidad de cualquier empresa nueva es obtener un beneficio económico. Para los estudiosos del diseño de proyectos y personas dedicadas a la optimización es común la frase “La finalidad de un buen diseño es ganar dinero”, y es por ello que se busca comparar las alternativas en base a 3 criterios principalmente. Estos criterios son:

- Tasa de retorno (Relación de Utilidad Neta / Inversión Inicial)
- Precio de venta mínimo
- Tiempo de recuperación de capital (Calculada con el inverso de la tasa de retorno)

Para fines prácticos en el desarrollo de este trabajo se ha elegido como variable de comparación a la tasa de retorno, ya que muestra un panorama más sencillo de comprender en el aspecto económico para los procesos estudiados. Es importante mencionar que dicha variable depende exclusivamente de la utilidad neta del proceso y de la inversión inicial del mismo. A su vez, la utilidad neta del proceso está influenciada principalmente por los costos de materia prima, mano de obra, utilidad por venta de productos y subproductos y las variables del ejercicio fiscal (depreciación, impuestos, etc.), mismas que son mencionadas a continuación:

4.3.1 COSTOS DE MANO DE OBRA INVOLUCRADOS EN LOS PROCESOS.

Considerando que el presente trabajo se ha realizado para la instalación, mantenimiento y operación de una planta productora de biodiesel en México, se hizo una búsqueda económica para determinar los salarios promedio que podrían pagarse a las personas encargadas del funcionamiento de la misma, dependiendo del rango jerárquico que ocupen y de la utilidad de su trabajo dentro de dicho proceso. Por ello, tomando en cuenta las necesidades del mismo, se ha propuesto tener personal para cubrir 4 puestos primordiales en planta. Dichos puestos, así como los salarios de cada uno de ellos (en dólares) se muestran en la tabla 4.4.

Tabla 4.4 Puestos y salarios base tomados en cuenta para el análisis de costo de mano de obra de los procesos simulados en SPD.

Puesto	Salario (USD / h)
Obrero	1.4
Supervisor	4.2
Gerente	6.9
Analista químico	2.3

Es de vital importancia mencionar que los salarios, materia prima y demás costos involucrados en el proceso se expresan en dólares debido a que una persona con la capacidad monetaria para invertir en una industria (sea cual sea el país donde lo haga) pocas veces realizará sus comparativos entre alternativas basado en la moneda del lugar sede, ya que los precios varían mucho de un país a otro, e incluso de una región a otra dentro de una misma nación.

Por otro lado, es necesario mencionar también que los requerimientos de personal necesario para los procesos a comparar cambian únicamente al cambiar la opción de destino del catalizador debido al aumento de equipos y control de los mismos. Así pues, para un proceso de producción de biodiesel con recirculación de catalizador se requerirán de 11 obreros, 2 supervisores, 2 analistas químicos (cuya finalidad es principalmente el control de calidad del producto fabricado) y un gerente general, mientras que para un proceso sin recirculación de catalizador la demanda de mano de obra es de 13 obreros, 3 supervisores, 2 analistas químicos y un gerente. Una vez especificado lo anterior se procede al análisis de costos de materia prima, producto principal y subproductos provenientes de dicho proceso.

4.3.2 PRECIOS DE MATERIALES INVOLUCRADOS EN LAS ENTRADAS Y SALIDAS DE LOS PROCESOS ESTUDIADOS

Como ya se ha mostrado en la sección 4.2.1, los requerimientos de materiales utilizados como entradas al proceso y sus respectivos flujos másicos dependerán en gran medida de la materia prima con que se trabaja y del destino del catalizador. Así bien, es entonces posible afirmar que la tasa de retorno de cada proceso depende también de la cantidad de dinero gastada en materia prima y de los ingresos por venta de producto principal y subproductos. Para realizar el análisis de factibilidad de instalación y operación de una planta productora de biodiesel en

México, se investigaron los precios de mercado de las corrientes involucradas en el mismo por medio de comunicación con las distintas empresas que proveen de materia prima a la industria de la transformación, excepto en el caso del precio de *Jatropha* e *Higuerilla*, los cuales fueron tomados de un estudio realizado por la empresa Bioenergy J.H. en 2008.

En la tabla 4.5 se especifican ahora los precios (en dólares) tomados en cuenta para el análisis económico de los procesos antes mencionados, así como sus respectivas bases másicas de cálculo (kilogramos, litros, etc.).

Tabla 4.5 Precios de materia prima utilizados en el comparativo de alternativas.

Corriente	Precio (USD)
Metanol	0.7 / l
Hidróxido de potasio grado industrial	3.03 / kg
Ácido nítrico	0.88 / l
Nitrato de potasio	2.5 / kg
Glicerol	2.24 / l
Biodiesel	0.86 / l
Semilla de <i>Jatropha Curcas</i>	0.2 / kg
Semilla de <i>Higuerilla</i>	0.31 / kg
Torta de <i>Jatropha Curcas</i>	0.07 / kg

4.3.3 ESPECIFICACIONES FISCALES PARA EL CÁLCULO DE LA TASA DE RETORNO

Una vez que ya se han especificado los costos de materia prima y mano de obra que son necesarios para la evaluación económica de planta, es necesario también especificar las variables fiscales involucradas en los equipos. Dichas variables fueron tomadas de los libros “Diseño de procesos en ingeniería química (Jiménez, 2003)” e “Ingeniería de costos y administración de proyectos (Ahuja, 2007)”. Se tomó entonces una depreciación en línea recta a 15 años para los equipos del proceso, tasa de inflación del 4% anual, valor de salvamento de los equipos equivalente al 2% de la inversión inicial en ellos (misma que fue calculada en base a las dimensiones de los equipos y al costo del material de construcción de cada uno) y valores de

índices de mantenimiento e instalación de unidades de proceso para estimación de inversión inicial, entre otros.

Otro de los costos involucrados y que no se debe dejar pasar es el costo de flete para entrega de producto principal al expendedor de biocombustibles. Dicho costo está dado por la distancia existente entre la biorefinería y el expendedor final. Para el caso en estudio se ha tomado una distancia de 40 kilómetros entre estos y por tanto un flete de 6.03 USD / m³. Dicho precio de referencia fue facilitado por el ingeniero Fernando de Jesús Aguayo Samaniego, auxiliar técnico “A” de la distribuidora de PEMEX Tepic, de acuerdo a oficio PXR-SC-GPDC-SEP-1546-2009, vigente a partir de Octubre del 2009.

4.3.4 ANÁLISIS ECONÓMICO DE ENTRADA-SALIDA DE MATERIALES

Tomando en cuenta los datos de precios mostrados en la tabla 4.3.2.1 y las cantidades requeridas de materiales de alimentación, así como las respectivas salidas de los procesos analizados se procede ahora a realizar un estudio económico tomando en cuenta solo la cantidad de materia prima alimentada y las salidas de cada uno de ellos. Para ello, haciendo un balance monetario de materias se utiliza la ecuación:

$$R = (B*0.86) + (G*1.781227) + (T*0.07) + (NP*2.5) - (HP*3.03) - (M*0.8865) - (AN*0.582831) - (CMP*F) \quad (\text{Ec. 4.1})$$

Donde:

R = Utilidad bruta [USD / h]

B = Cantidad de biodiesel producida [l/h]

G = Cantidad de glicerol producida [kg/ h]

T = Cantidad de torta proveniente de la primer centrífuga [kg/h]

NP = Cantidad de KNO₃ producida mediante la neutralización con ácido [kg/h]

HP = Cantidad de KOH utilizado como catalizador en el proceso [kg/h]

M = Flujo másico de metanol alimentado [kg/h]

AN = Flujo de ácido nítrico alimentado para transformación del catalizador [kg/h]

CMP = Costo de materia prima (semillas) [USD/h]

F = flujo másico de materia prima del proceso [kg/h]

Es importante mencionar que el uso de torta para venta como un subproducto (abono natural) es aplicable solo al caso de la *Jatropha Curcas* debido a su alto contenido en nitrógeno. Teniendo en cuenta la ecuación 4.1 se puede entonces ahora realizar un análisis de ganancia debida a materia prima y subproductos obteniendo así la tabla 4.6, la cual muestra la utilidad bruta de los procesos a comparar (tomando en cuenta flujos másicos por hora).

Tabla 4.6 Utilidad bruta de los procesos comparados.

Proceso	R [=] USD / h
JSR	2958.2819
JCR	2189.226
HSR	1610.2935
HCR	1574.5263

Como puede observarse en la tabla anterior (4.6), para un simple análisis de materia prima en ambos casos se demuestra (antes de impuestos) que los procesos sin recirculación de catalizador presentan una mayor ventaja económica que si el catalizador es recirculado a dicho proceso. Sin embargo es importante hacer notar que un proceso con recirculación de catalizador requiere a su vez de la instalación de más equipo y, por ende, más consumo energético y mano de obra. El comparativo económico final de los procesos simulados después de impuestos se muestra en la sección 4.4.

4.4 COMPARATIVO ECONÓMICO FINAL DE LOS PROCESOS ESTUDIADOS

Una vez que ya se ha realizado el análisis técnico para comparar alternativas de producción de biodiesel y se han revisado los precios de materias primas, producto principal y subproductos presentes en cada una de ellas se procedió a realizar un análisis económico global

de las mismas tomando en cuenta los datos financieros y contables especificados en la sección 4.3.3. Con todo lo anterior se realizó el comparativo entre los 3 principales indicadores para selección de alternativas, los cuales fueron la tasa de retorno (que representa el porcentaje de la inversión inicial recuperado cada año en el proceso), el precio de venta mínimo (el cual dicta el precio al que se debe vender el producto principal para obtener así la tasa de retorno mínima especificada para el proyecto) y el tiempo de recuperación de capital (que muestra el tiempo requerido en años para recuperar al 100% la inversión inicial de la planta) mediante el análisis de reportes económicos arrojados por SPD, encontrándose así los datos mostrados en la tabla 4.7.

Tabla 4.7 Indicadores económicos para los procesos de producción de biodiesel simulados.

Proceso	ROI (Tasa de retorno) %	PV_{min} [=] USD / litro	TR (Tiempo de recuperación de capital) [=] años
JSR	60.2	0.54	1.66
JCR	87.57	0.46	1.15
HSR	14.66	0.82	6.82
HCR	19.01	0.77	5.26

Los datos presentados anteriormente fueron obtenidos de las ecuaciones 4.2-4.4 (Jiménez, 2003) y pueden verse de una mejor manera por medio del gráfico mostrado en la figura 4.4, la cual permite realizar un mejor análisis comparativo de los procesos simulados tomando en cuenta los factores económicos.

$$PV_{\min} = I [i_{\min} + e - (t*d)] + C*(1-t) \quad (\text{Ec. 4.2})$$

$$ROI = P / I \quad (\text{Ec. 4.3})$$

$$TR = 1 / ROI \quad (\text{Ec. 4.4})$$

Donde: P = Utilidad neta I = Inversión inicial $i_{\min}$ = Tasa de interés mínima

C = Costos totales d = Tasa de depreciación fiscal e = Tasa de depreciación contable

t = Tasa de impuestos

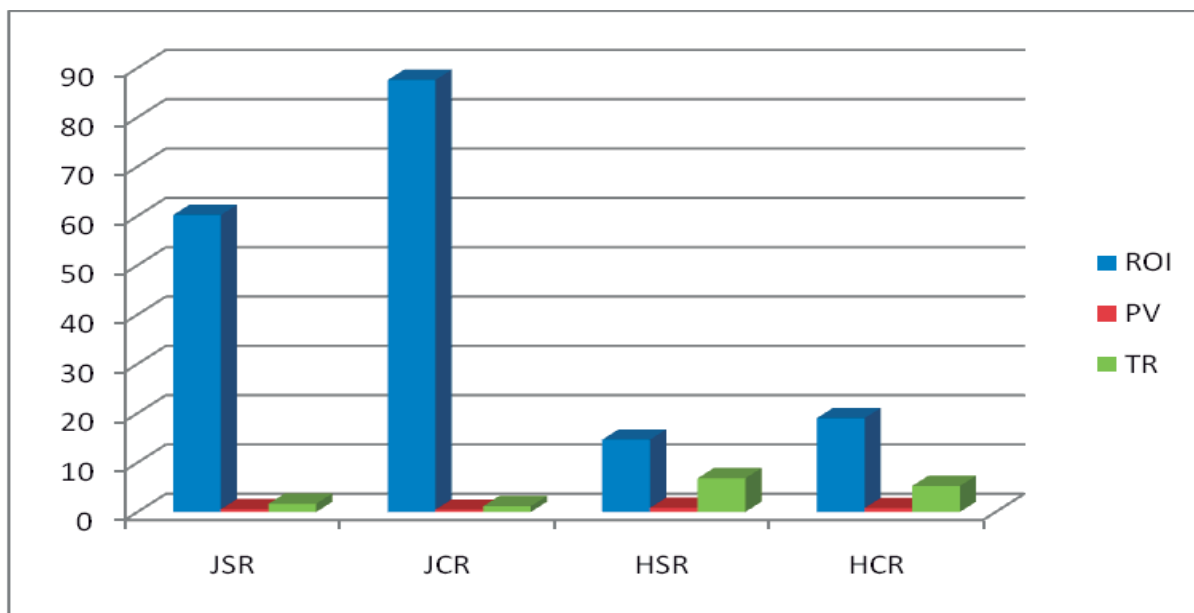


Figura 4.4 Comparativo de factores económicos para los procesos estudiados.

La tabla 4.7 y figura 4.4 muestran cómo, contrario a lo que se pensó inicialmente con el análisis de la tabla 4.6, los procesos en los cuales el catalizador se transforma en un fertilizante y se vende como subproducto de los mismos resultan menos atractivos económicamente que aquellos en los cuales este es separado y regresado al proceso para reutilizarse, ya que los primeros precisan de mayor cantidad de equipos para la transformación del material y, por lo tanto, mayor inversión inicial, mano de obra y costo de servicios.

Por otro lado, es importante hacer notar la enorme diferencia existente entre el uso de *Jatropha Curcas* y el uso de Higuierilla para la producción del biocombustible en estudio. Como ya lo han mostrado los análisis técnico y económico, es posible comprobar la hipótesis planteada al inicio tomando en cuenta que la composición de ácidos grasos de cadena más larga en el aceite de Higuierilla es mayor que en el de *Jatropha*. Esto tiene repercusión en la viscosidad que presenta cada uno de estos aceites lo cual, a su vez, trae como consecuencia una mayor cantidad de metanol utilizado para la preparación del metóxido y, por ende, mayor cantidad de energía consumida en el proceso para la separación del mismo. Por otro lado, se debe hacer mención de las grandes ventajas económicas que la *Jatropha Curcas* tiene en comparación con la Higuierilla. Entre las más destacadas se encuentran la diferencia de precios en las semillas (la *Jatropha* es 11 centavos de dólar más económica que la Higuierilla), las cantidades de metanol requeridas para dichos procesos y la contribución de la venta de torta de *Jatropha* como abono natural (por cada

tonelada de semilla introducida al proceso se recuperan 33.61 dólares por venta de abono proveniente de la biomasa de la misma, los cuales no se toman en cuenta al utilizar Higuerilla). Es por ello que de los procesos estudiados, la mejor opción para la instalación de una planta industrial de producción de biodiesel es utilizando *Jatropha Curcas* como materia prima y recirculando el catalizador utilizado para la preparación del metóxido. Los reportes técnicos de flujos de materia de corrientes internas, especificaciones de los equipos presentes y reporte económico del proceso con la mejor tasa de retorno (JCR) pueden ser consultados en los apéndices AIX, AX y AXI respectivamente.

Una vez que ya se ha elegido el proceso que permite un mayor rendimiento económico (en el caso de estudio utilizando *Jatropha Curcas* con recirculación de catalizador), es preciso tomar en cuenta que la producción de esta planta puede llegar a ser muy variable ya que depende de la cantidad de terreno utilizado para su cultivo. Este factor puede afectar seriamente la cantidad de semilla disponible anualmente para la producción de biodiesel y, con ello, la capacidad de procesamiento de planta. Tomando esto en cuenta, se han realizado las simulaciones pertinentes que permitan a un inversionista realizar un comparativo entre los factores económicos discutidos con anterioridad y el flujo másico de semilla que entra al proceso. Es importante realizar este comparativo ya que quien pueda invertir en el proceso en cuestión debe tomar en cuenta la cantidad de materia prima disponible para su transformación. Las figuras 4.5, 4.6 y 4.7 mostradas a continuación, permiten realizar la comparación entre los factores económicos estudiados (precio de venta mínimo, tasa de retorno y tiempo de recuperación de capital respectivamente) y la cantidad de materia prima utilizada en el proceso tomando en consideración una tasa de rentabilidad mínima atractiva ($i_{\min}$) del 20%.

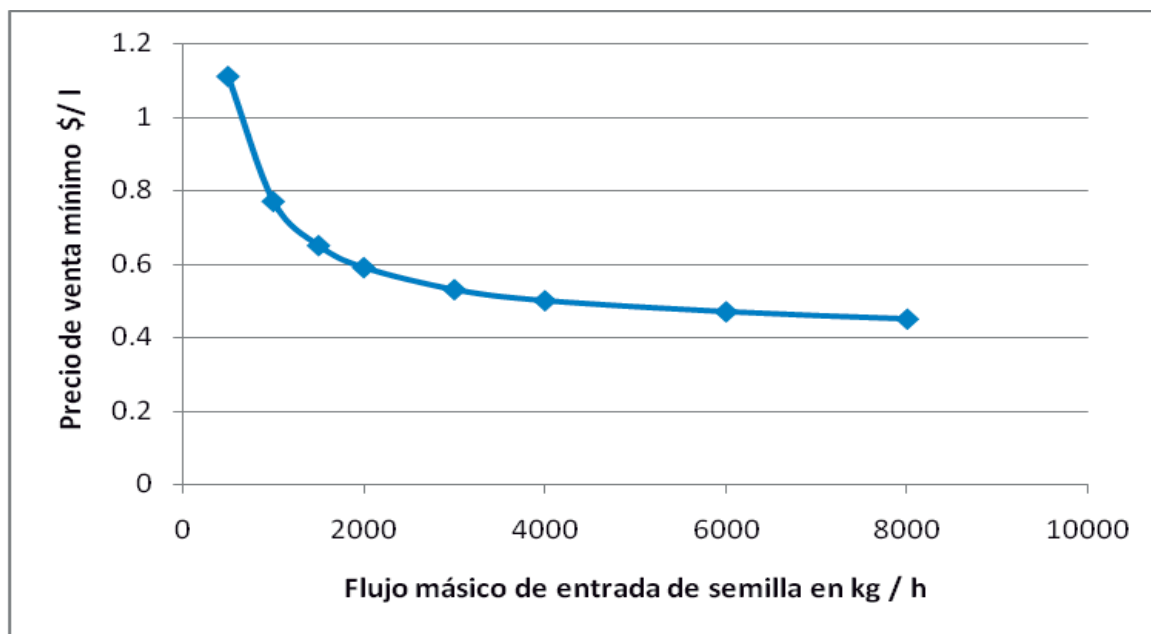


Figura 4.5 Análisis de flujo másico de alimentación contra precio de venta mínimo.

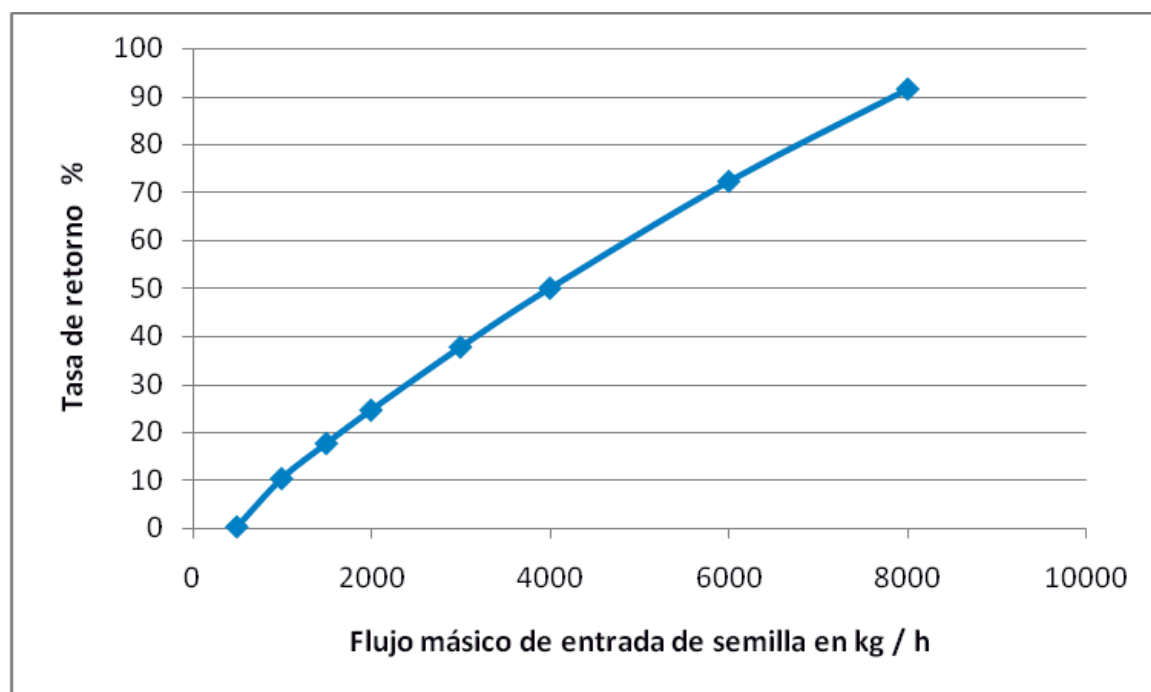


Figura 4.6 Análisis de flujo másico de alimentación contra tasa de retorno del proceso.

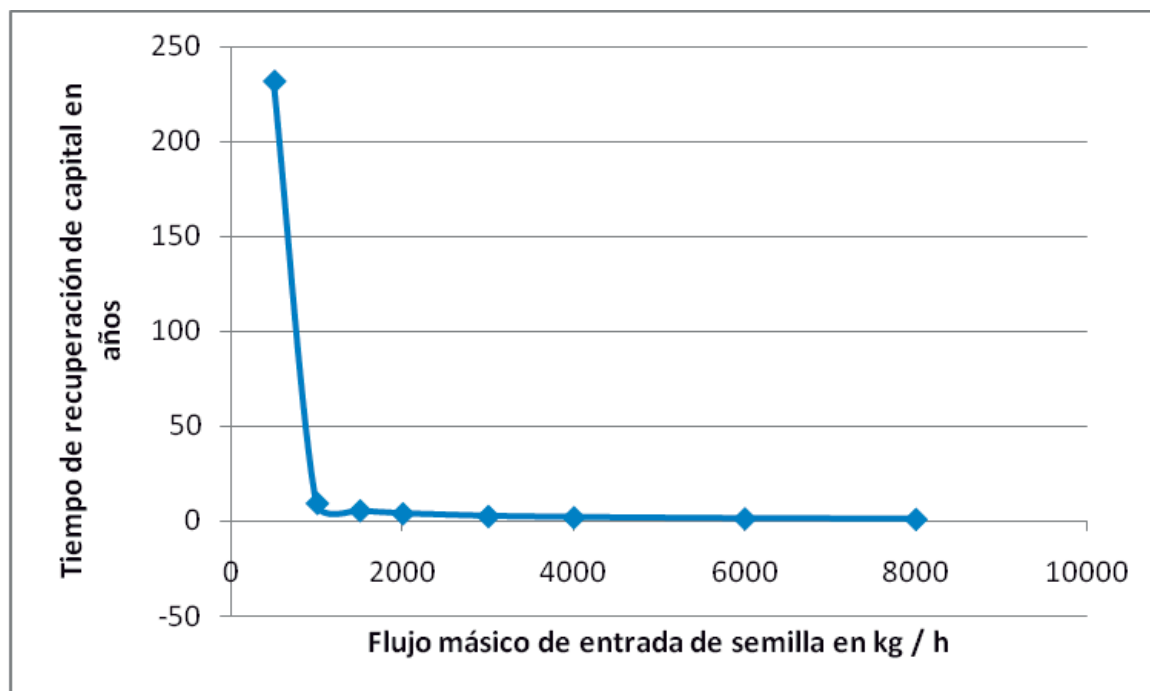


Figura 4.7 Análisis de flujo másico de alimentación contra tiempo de recuperación de capital.

Tal y como se puede mostrar en las figuras 4.5 a 4.7, el flujo másico de entrada de semilla que se requiere para la producción de biodiesel tiene su cambio más acentuado al pasar de un valor de 500 a un valor de 1000 kg/h. En el caso del precio de venta mínimo se observa que al haber este cambio en el flujo másico dicho precio cambia en 34 centavos de dólar, mientras que al pasar de 1000 a 10,000 kilogramos por hora dicha variable tiene un cambio de 33 centavos de dólar.

Así mismo, la variable que mejor representa este cambio en cuanto a análisis económico se refiere es el tiempo de recuperación de capital. Como se puede observar en la figura 4.7, el tiempo de recuperación de capital para un flujo de entrada de 500 kg/h es de 232.83 años mientras que el valor de esta variable para un flujo másico equivalente a 2 veces el primero es de aproximadamente 9.55 años, el cual es unas 25 veces menor que el del dato inicial.

De acuerdo a lo discutido anteriormente, se debe recordar que el flujo másico de entrada de semilla por hora depende de la cantidad de terreno disponible para el cultivo de esta planta. Tomando en cuenta que el rendimiento promedio de cultivo de *Jatropha Curcas* es de 5 toneladas de semilla por hectárea cada año, es posible realizar la figura mostrada anteriormente (4.6)

cambiando el eje de flujo másico de entrada al proceso por cantidad de terreno disponible (en hectáreas por año) para cultivo de la planta en estudio, mismo que se muestra en la figura 4.8.

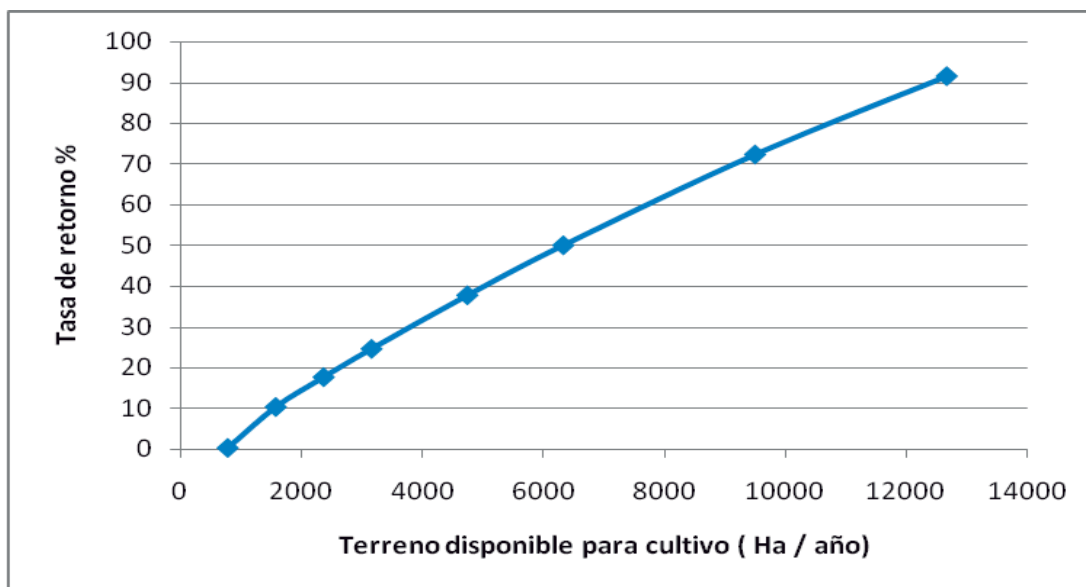


Figura 4.8 Gráfico comparativo de terreno disponible para cultivo de JC contra tasa de retorno del proceso de producción de biodiesel.

Por otro lado, es importante también mencionar la ventaja energética que la instalación de la planta productora de biodiesel puede llegar a tener en comparación al consumo requerido por la población de la zona en la cual se pretende instalar dicha fábrica. Según informes de la Secretaría de Planeación Energética y Desarrollo Tecnológico (SENER), el consumo energético de diesel por año perteneciente a la región centro occidente de México, la cual abarca los estados de Aguascalientes, Colima, Guanajuato, Jalisco, Michoacán, Nayarit, Querétaro, San Luis Potosí y Zacatecas es de 154.64 petajoules. Mientras que de esta misma región, la variable mencionada anteriormente para Morelia y zona metropolitana (la cual incluye también los municipios de Zinapécuaro, Álvaro Obregón, Indaparapeo, Charo y Tarímbaro) es de 6.99 petajoules por año (Alvarado y col., 2006).

Teniendo estos datos en cuenta es posible realizar un análisis en el cual se muestra la cantidad de terreno disponible para cultivo de *Jatropha Curcas* contra el porcentaje de energía abastecido por la planta productora de biodiesel tomando como referencia un año. Dichos análisis se muestran en las figuras 4.9 y 4.10.

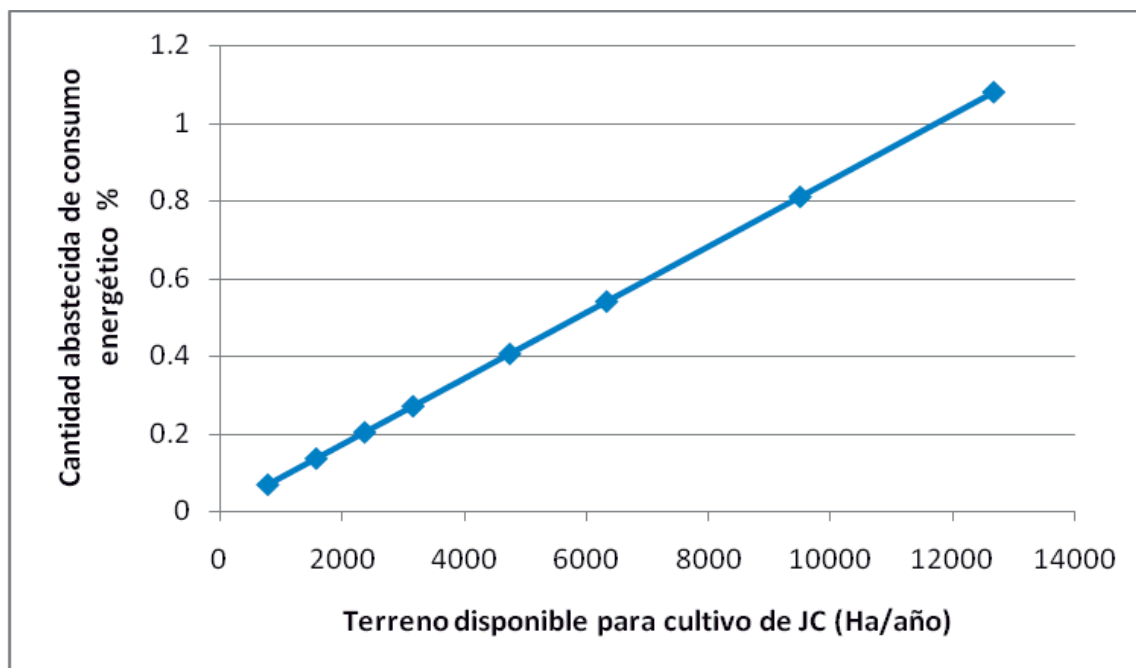


Figura 4.9 Gráfico comparativo de la cantidad de terreno sembrado contra porcentaje de energía abastecido a la región centro-occidente de México por la planta diseñada.

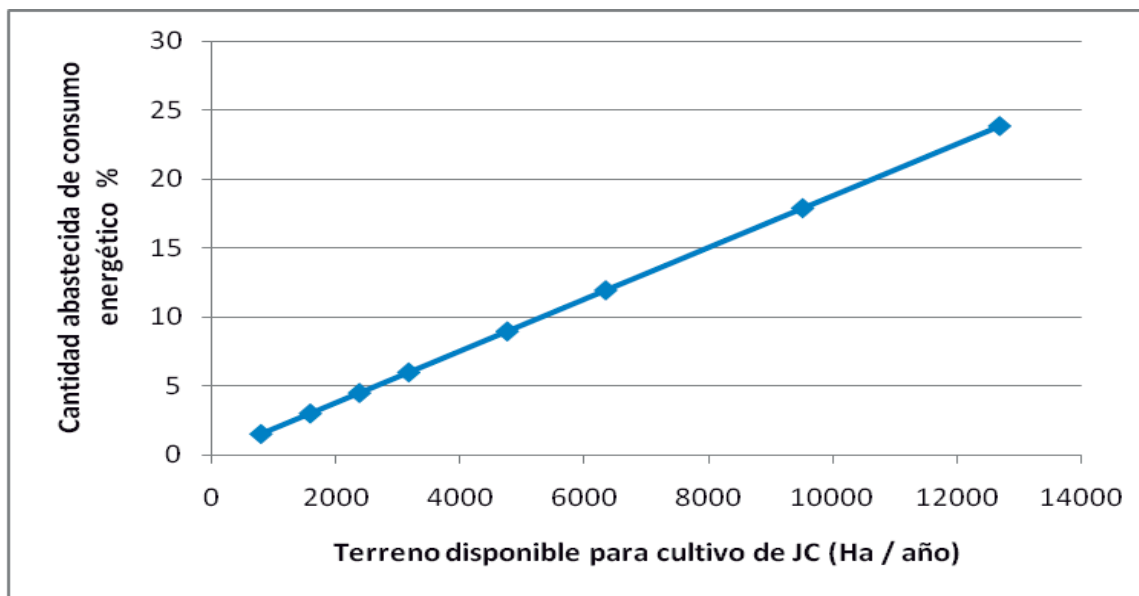


Figura 4.10 Gráfico comparativo de la cantidad de terreno sembrado contra porcentaje de energía abastecido a la región de Morelia y zona metropolitana por la planta propuesta.

4.5 IMPACTO DE LA TEMPERATURA DE OPERACIÓN DEL REACTOR EN LA ECONOMÍA GLOBAL DEL PROCESO Y SUS REQUERIMIENTOS ENERGÉTICOS

Una vez que ya se han mostrado las ventajas de instalación de una planta productora de biodiesel utilizando como materia prima *Jatropha Curcas* es necesario responder a una pregunta interesante, ¿Por qué se eligió realizar la transesterificación utilizando una temperatura de 65 grados centígrados y como afecta ésta variable en la cantidad de biodiesel producida y en la economía del proceso en general?.

Para responder a esta pregunta se realizaron simulaciones en las cuales se varió la temperatura del reactor y se observó como afectaba esta temperatura en la economía del proceso en general y en sus requerimientos energéticos. Para realizar estas simulaciones se investigó la conversión en la reacción de transesterificación del aceite de *Jatropha Curcas* medido a diferentes temperaturas y se obtuvieron los parámetros requeridos para el cálculo de la constante cinética de dicha reacción de acuerdo a las ecuaciones 4.5 y 4.6 mostradas a continuación.

$$r_A = \frac{k \prod c_i^{n_i}}{K_1 + c_m + \frac{c_n}{K_2}} \quad (\text{Ec. 4.5})$$

$$k = A e^{-\frac{E_a}{RT}} \quad (\text{Ec. 4.6})$$

De esta manera, los datos obtenidos para el cálculo de la constante mencionada fueron:

Energía de activación: $E_a = 25,407.82 \text{ J / mol}$

Factor preexponencial: $A = 29.5636$

Los datos anteriores fueron obtenidos de simular y acercar los datos obtenidos a la experimentación realizada por Berchmans y col. (2010) en la transesterificación de aceite de *Jatropha Curcas* y se utilizaron para la realización de un estudio de impacto económico y energético del proceso obteniéndose así los perfiles mostrados en las figuras 4.11 y 4.12.

Con el fin de simplificar los cálculos cinéticos en el reactor, los términos inhibitorios de la ecuación 4.5 no fueron tomados en cuenta en la simulación de las materias primas comparadas.

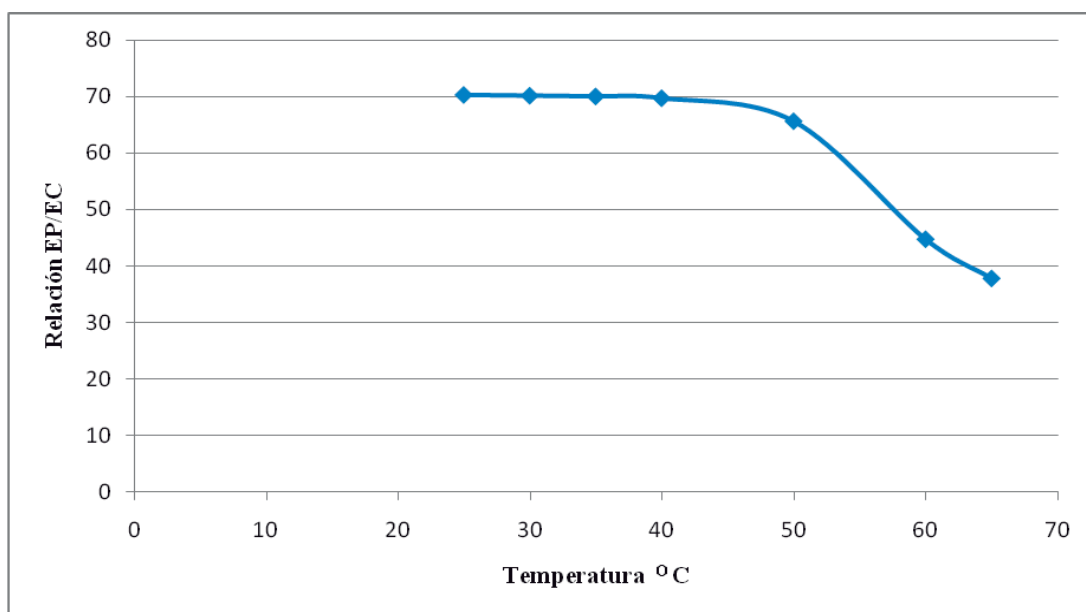


Figura 4.11 Efecto de la temperatura de operación del reactor en los requerimientos energéticos globales en el proceso JCR.

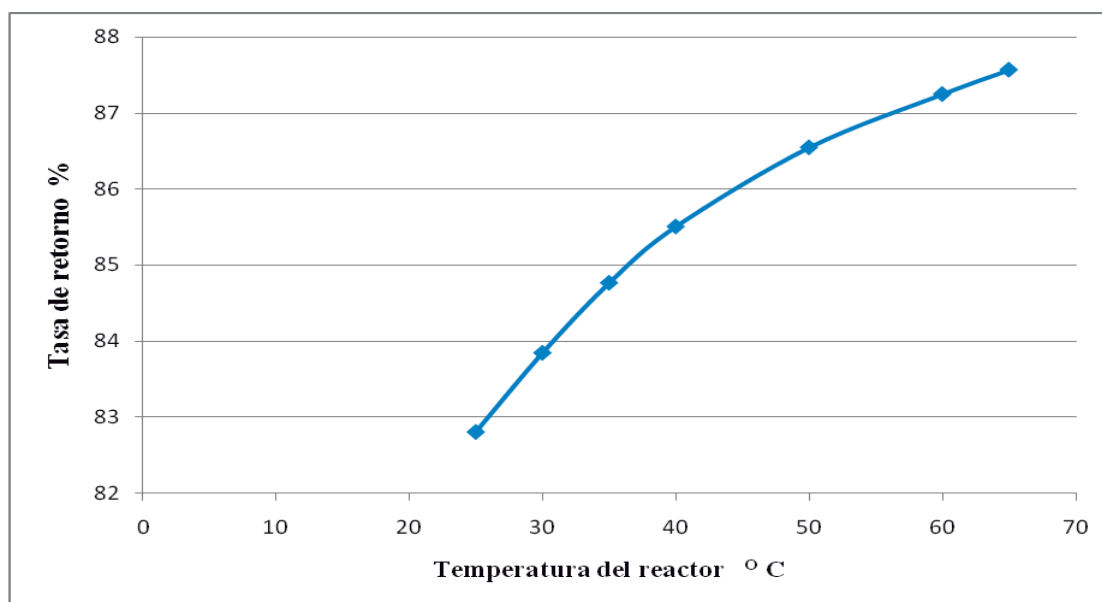


Figura 4.12 Efecto de la temperatura de operación del reactor en la tasa de retorno del proceso JCR.

Como se pudo observar en las figuras 4.11 y 4.12), que a medida que la temperatura de operación del reactor crece, la cantidad de energía consumida durante el proceso es mayor y, por ende, los requerimientos de servicios aumentan. Sin embargo, es necesario hacer notar que la tasa de retorno del proceso es también mayor cuando la temperatura asciende.

¿Cómo se explica esto? A medida que la temperatura de operación del reactor crece, la reacción se lleva a cabo con mayor rapidez. Esto implica que la cantidad de ácidos grasos no reaccionantes que se recirculan al proceso para un mismo tiempo de residencia decrece y, con ello, la cantidad de materia prima introducida al proceso se hace cada vez menor mientras que la cantidad producida de metil ésteres lleva una trayectoria contraria (aumenta). De ahí se puede observar que, aunque cuesta un poco más llevar la temperatura de operación del reactor hasta un valor mas elevado, esta variable afecta principalmente en las entradas de materia prima (las cuales afectan del mismo modo la tasa de retorno) observando que al haber un incremento de 40 °C en la temperatura de operación del reactor existe también un incremento de casi 5% en la variable económica descrita anteriormente. Por otro lado se debe resaltar que, como se mencionó en la sección 4.1, el límite máximo conveniente de temperatura para llevar a cabo la reacción de transesterificación es de 70 grados centígrados debido a que a partir de ese valor los ácidos grasos presentes en los aceites analizados pueden reaccionar con el catalizador por medio de un proceso de saponificación formando jabones, los cuales deberán ser separados posteriormente y tratados con un ácido para volver a su forma de ácidos grasos libres y ser recirculados al reactor, provocando con ello una mayor inversión inicial en equipos de separación y un incremento en el costo de servicios anuales para dichos equipos.

4.6 IMPACTO ENERGÉTICO DE LA PRODUCCIÓN DE BIODIESEL POR MEDIO DE JATROPHA CURCAS EN MÉXICO

Según datos presentados por la SENER, el consumo energético total de México es de aproximadamente 3,547.33 petajoules por año, de los cuales 102.65 pertenecen al bagazo de caña, 247.22 a la leña, 431.63 al gas LP, 1246.5 a las gasolinas y nafta, 145.36 al queroseno, 619.72 al diesel, 143.33 al combustóleo y 611.13 a electricidad. Dichos datos pueden mostrarse de mejor manera si se les expresa en porcentajes. La figura 4.13 muestra el consumo energético de cada uno de los productos anteriores en nuestro país y su contribución al consumo total. Como

se puede observar en la misma, el consumo anual de diesel representa el 18% del total de los combustibles utilizados en nuestro país, con un consumo de 619.72 de un total de 3547.33 petajoules por año. Si toda esta energía producida por el gasóleo fuera sustituida con la energía producida del biodiesel de *Jatropha Curcas*, entonces la producción anual de este biocombustible debería ser de 1.5931×10^{10} litros. Para lograr llegar a producir tal cantidad es necesario entonces procesar 2,973.39 toneladas de esta semilla por hora, lo cual indica que el área necesaria de cultivo de esta planta que satisfaga la demanda total anual de diesel en México es de 4,709,861.167 hectáreas, lo que equivale a 47,098.61167 km².

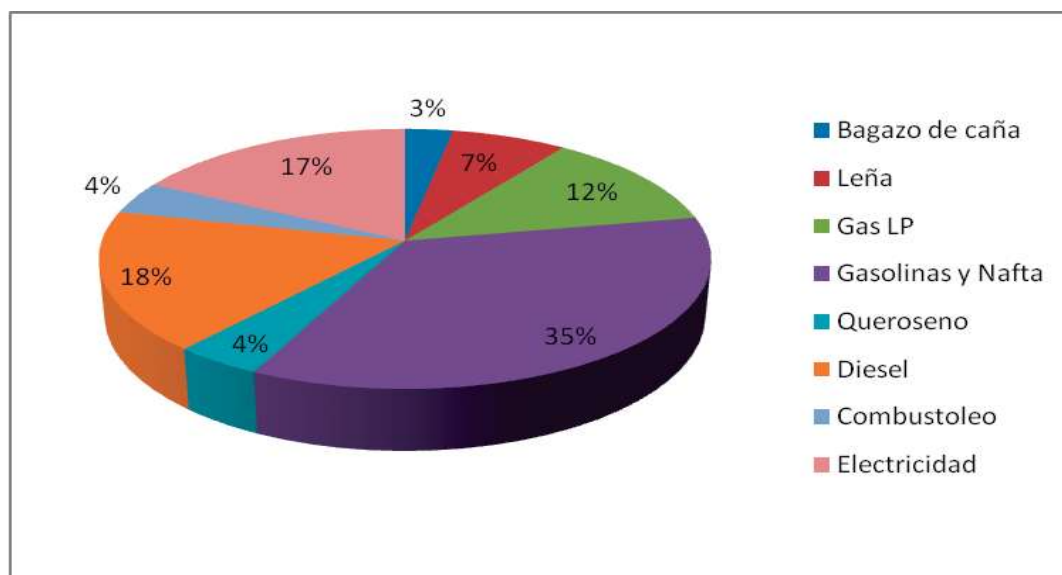


Figura 4.13 Contribución energética de los combustibles en las actividades de México.

Tomando en cuenta que la extensión territorial de nuestro país es de 1,959,248 km², el área necesaria para cultivo de JC que satisfaga las necesidades totales de biodiesel en el mismo es equivalente al 2.4% del total de la superficie.

Además de ello, es importante mencionar que cualquier parte de nuestro país es apta para la siembra y cuidados de esta planta ya que, por tratarse de una fuente vegetal que no requiere grandes cuidados en riego ni fertilizantes por ser altamente tóxica, puede darse en terrenos áridos y semiáridos sin mayor problema. Esto puede representar una ventaja para el uso de suelos en las regiones desérticas y de climas extremos en nuestro país como lo son los estados de Chihuahua, Coahuila, Sonora, Nuevo León y Tamaulipas, entre otros.

4.7 IMPACTO AMBIENTAL DE LA PRODUCCIÓN DE BIODIESEL DE JATROPHA EN MÉXICO

Una vez que ya han sido analizados los beneficios económicos y energéticos de la sustitución de gasóleo por biodiesel en México, se hace necesario resaltar también la importancia de dicha sustitución en el aspecto ambiental. Los resultados de dicho análisis se harán en base a 2 componentes clave que han sido estudiados en el ciclo de vida de los motores diesel, los cuales son el SO_2 y el CO_2 . Según datos obtenidos de la Secretaría del Medio Ambiente y Recursos Naturales (SEMARNAT), para finales de 2008 las emisiones totales de nuestro país en relación al SO_2 fueron de 654,080 ton/año mientras que las de CO_2 fueron de 492,862,160 ton/año.

Realizando la búsqueda por fuente energética se sabe que las emisiones totales de CO_2 por quema de diesel son de aproximadamente 69879363.2 ton/año (lo que representa un 14.17% del total de este emitido a la atmósfera), mientras que las emisiones de SO_2 fueron de 11,207.07 ton/año (aproximadamente 1.71% del total emitido).

Por otro lado, tomando en cuenta el trabajo realizado por Gerpen y Shresta (2005) en el cual se asevera que el uso de biodiesel puede llegar a reducir hasta en un 78% las emisiones de CO_2 y hasta en un 90% las de SO_2 , realizando los cálculos necesarios se puede predecir que la sustitución de gasóleo con biodiesel de *Jatropha Curcas* reducirá las emisiones de este contaminante de 69879363.2 a 15373460 ton/año, mientras que las emisiones de azufre bajarán de 11,207 a 1,120 ton/año.

Los beneficios anteriores pueden verse reflejados de una mejor manera al tomar en cuenta la contribución de estos gases de efecto invernadero en el total de emisiones contaminantes. En el caso de estudio, la sustitución de gasóleo por biodiesel permitiría reducir la contribución de estos dos gases de efecto invernadero desde un 9.85% hasta un 6.66% del total de arrojados a la atmósfera.

4.8 IMPACTO SOCIAL DE LA SUSTITUCIÓN DE GASÓLEO POR BIODIESEL DE JATROPHA CURCAS EN MÉXICO

Una vez que ya se han realizado los análisis de impacto técnico, económico y ambiental de sustituir el gasóleo por biodiesel proveniente de *Jatropha Curcas* en México, no menos importante es hacer resaltar el impacto que la sustitución total del mismo causaría a nuestro país.

Para realizar este análisis es necesario pensar primero en el aspecto agrícola que requiere dicho proceso. Como ya se mencionó anteriormente, la sustitución total de gasóleo por biodiesel requiere el cultivo de 4,709,861.167 hectáreas. Por otro lado, la cosecha de la semilla en cada una de estas hectáreas requiere de 3 cortadores y un trabajador para el transporte de la misma como mínimo por día. Si dichos cortadores trabajaran los 330 días contemplados en el año laboral esto da la pauta para aseverar que el número de trabajadores antes mencionado cortarían un aproximado de 990 hectáreas de cultivo por año. Siendo la anterior una suposición correcta, la cosecha y entrega de la semilla requerida a la planta procesadora requiere entonces la mano de obra de 19,298 trabajadores cada año.

Ahora bien, considerando las necesidades energéticas de nuestro país en el consumo de gasóleo, se ha estimado que el cubrir al 100% la demanda del mismo con biodiesel implica el procesamiento de 2973.39 ton/año. Realizando la suposición de que las condiciones financieras para alcanzar dicha producción puedan alcanzarse, entonces la misma implicaría la construcción de 50 plantas industriales grandes (con capacidad de procesamiento de 60 ton de semilla / h).

Cada una de estas plantas requiere un aproximado de 42 obreros para el manejo de los equipos involucrados (tomando en cuenta los 3 turnos y 330 días laborales por año), lo cual indica que para el proceso de producción de dicho biocombustible se requerirían 2100 trabajadores más cada año.

Sumando la demanda de mano de obra en el sentido agrícola y de producción para lograr el objetivo planteado, la sustitución de gasóleo por biodiesel de *Jatropha Curcas* generaría un total de 21,130 empleos.

Según datos del Instituto Nacional de Estadística y Geografía (INEGI), con cifras proporcionadas por la Encuesta Nacional de Ocupación y Empleo 2009 (ENOE), la denominada población “nini” (jóvenes que no estudian ni trabajan y, por ende no pertenecen a la población económicamente activa) asciende a un total de 285,000 personas.

Tomando en cuenta los datos anteriores, si los empleos generados por el proceso de sustitución total de gasóleo por biodiesel fueran aprovechados por esta parte de la población mexicana, el sector denominado “nini” se reduciría en un 7.41% con lo cual la situación social y económica de este sector aumentaría un poco en su calidad de vida.

Ahora bien, es necesario resaltar que lo anterior es sólo una pequeña parte de lo que sería el estudio de impacto social del proceso ya que a este mismo falta agregarle el impacto de uso de suelos y las ventajas y desventajas socio-demográficas que esto implica ya que se debe hacer notar que, a pesar de que la superficie total cultivable de México es de 1,864,276 km² por año, en los años anteriores el uso de suelos para diversos cultivos ascendió a 300,000 km² (aproximadamente un 16% del total). Tomando esto en cuenta entonces el cultivo de este arbusto para los fines planteados incrementaría la superficie cultivada desde un 16 hasta un 18.6184%.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1 CONCLUSIONES

Por medio de este trabajo se demuestra que es posible llevar a cabo la producción de biodiesel por medio de la transesterificación de ácidos grasos contenidos en el aceite de *Jatropha Curcas* e Higuierilla y que ambas materias primas son viables desde el punto de vista energético ya que la cantidad de energía producida en el proceso es mayor a la consumida durante el mismo.

La instalación de una planta productora de biodiesel utilizando Higuierilla como materia prima para la fabricación del mismo no es económicamente atractiva para la base de cálculo que se tomó en cuenta debido a que la tasa de retorno ofrecida por este proceso (ROI de 19%) no alcanza el valor mínimo especificado para este tipo de proyectos (TREMA de 20%).

El presente trabajo logró su objetivo principal ya que se realizó un análisis comparativo entre utilizar aceite de *Jatropha Curcas* e Higuierilla como materias primas para un proceso de producción de biodiesel y se demostró que la primera tiene gran ventaja técnica (con una relación de energía producida contra consumida 12 veces más elevada) y económica (con una tasa de retorno aproximadamente 4.2 veces mayor) con respecto a la segunda debido a que su viscosidad permite disminuir las cantidades requeridas de metanol para la transesterificación de esta, reduciendo así los costos de materia prima y servicios requeridos.

El uso que se dé al catalizador utilizado en el proceso (en el caso de estudio KOH) una vez que ha sido separado tiene un enorme impacto en la economía del proceso en general (con un incremento de 20% en la tasa de retorno para *Jatropha Curcas* y 5% en la Higuierilla al pasar de un proceso sin recirculación a uno con recirculación de catalizador).

En los procesos sin recirculación de catalizador, a pesar de que el fertilizante formado como subproducto tiene un valor comercial considerable, dicho valor no puede solventar los gastos que se requiere en mano de obra, equipos y servicios utilizados en su producción.

El uso de Super Pro Designer ha permitido un análisis global del proceso estudiado al incluir factores técnicos y económicos importantes, presentando la ventaja de permitir un análisis integral del proceso tomando en cuenta mano de obra, horas trabajadas, mantenimiento de equipos, materia prima, costos de transporte, entre otros. Esto representa una ventaja sobre los simuladores convencionales utilizados en ingeniería química debido a que estos últimos no permiten realizar los estudios correspondientes a la economía y logística del proceso dentro de la interfaz principal de los mismos.

La instalación de una planta productora de biodiesel a partir de aceite de *Jatropha Curcas* en México es viable económicamente para capacidades de procesamiento por encima de 2 toneladas de semilla por hora ya que es en este punto donde el precio de venta del biodiesel se equipara al actual precio del gasóleo.

5.2 RECOMENDACIONES (Perspectivas)

A continuación se mencionan una serie de observaciones que pueden contribuir a lograr un mejor estudio de los análisis técnico y económico del diseño, construcción y mantenimiento de una planta productora de biodiesel a partir de las materias primas propuestas:

Realizar estudios experimentales acerca de las propiedades físicas y químicas de los ésteres producidos por reacción de los ácidos grasos con la base propuesta (potasa cáustica).

Realizar estudios cinéticos del proceso de saponificación de ácidos grasos con potasa para determinar las mejores condiciones de reacción.

Aumentar la temperatura de reacción en el proceso simulado tomando en cuenta los compuestos nombrados anteriormente. Es importante mencionar que las simulaciones realizadas en este trabajo muestran un comparativo entre las materias primas trabajando temperaturas moderadas en las cuales no se induce a la saponificación con tiempos de reacción menores a una hora y conversiones por encima del 90%. Sin embargo, es necesario realizar simulaciones tomando en cuenta los ésteres derivados de la saponificación aumentando la temperatura y realizar el comparativo técnico y económico del proceso estudiado con y sin formación de jabones.

CAPÍTULO 6

REFERENCIAS

Ahuja H., Walsh M. (2007), “Ingeniería de costos y administración de proyectos”, Ed. Alfaomega, México.

Alvarado C.M. (2006), “Inventario de emisiones contaminantes a la atmósfera para la zona metropolitana de Morelia y cinco municipios”, Pp.17.

Berchmans H.J., Morishita K., Takarada T. (Press 2010), “Kinetic study of hydroxide-catalyzed methanolysis of Jatropha Curcas–waste food oil mixture for biodiesel production”, Fuel 89.

Berchmans H.J., Shizuko H. (2008), “Biodiesel production from crude Jatropha Curcas L. seed oil with a high content of free fatty acids”, Bioresource Technology 99. Pp. 1716-1721.

Clements L.D., Hanna L.A. (1998), “The effects of catalyst free fatty acids and water on transesterification of beef tallow”, Trans ASAE 41. Pp. 1261-1264.

Crabbe E., Nolasco H.C., Genta K., Kenji S., Ayaaki I. (2001), “Biodiesel production from crude palm oil and evaluation of butanol extraction and fuel properties”. Laboratory of Microbial Technology, Kyushu University, Hakozaki, Japan. Process Biochemistry 37. Pp. 65-71.

Dalla C.O., Pisarello M., Querini Carlos (2006), “Procesos de producción de Biodiesel: Uso de Materias Primas Alternativas y de Alta Acidez” Instituto de Investigaciones en Catálisis y Petroquímica (INCAPE), Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina.

Demirbass A. (2008), “Biodiesel, a realistic fuel alternative for diesel engines”, ed. Springer, Inglaterra. Pp. 111-139.

Drapcho C.M., Nhuan N.P., Walker T.H. (2008), “Biofuels Engineering Process Technology”, ed. Mc. Graw Hill.

Friedman B., Pryde E.H. (1998), "Variables affecting the yield of fatty ester from transesterified vegetable oils", JAOS 61. Pp. 1638-1643.

Fröhlich A., Rice B. (2005). "Evaluation of Camelina sativa oil as a feedstock for biodiesel production", Industrial Crops and Products 21. Pp. 25-31.

Fukuda H., Kondo A. (2001), "Biodiesel fuel production by transesterification of oils", Journal of Bioscience and Bioengineering 92. Pp. 405-416.

Gerpen J.V., Shresta D. (2005). "Biodiesel Energy Balance", Department of biological and agricultural Engineering, University of Idaho.

Graciani C. E. (2006). "Los aceites y grasas, composición y propiedades", Pp. 220-223. Ed. Mundi Prensa.

Hancock R., Mackinson R. (1983), "Process for the production of esters in presence of heterogeneous esterification catalyst" U.S. patent 4374273.

Jimenez G. A. (2003) "Diseño de procesos en ingeniería química", Ed. Reverte, México.

Katschmitt M., Reinhart G., (1997). "Información general del ciclo de vida del biodiesel", National Biodiesel Board (USA).

Kiwaroun Ch., Tubtimdee Ch., Piumsomboon P. (2009) "LCA Studies Comparing Biodiesel Synthesized by Conventional and Supercritical Methanol Methods", Journal of Cleaner Production 17. Pp. 143-153.

Lang X. (2001), "Preparation and characterization of bio-diesels from various bio-oils", Bioresource Technology, 80. Pp. 53-62.

Meneghetti S., Meneghetti R., Wolf C. (2006). “Biodiesel from castor oil: a comparison of ethanolysis versus methanolysis”, *Energy & Fuels*, 20. Pp. 2262-2265.

Moreira Ana, Victor H. (2007), “Biodiesel Synthesis by Enzymatic Transesterification of Palm Oil with Ethanol Using Lipases from Several Sources Immobilized on Silica-PVA” *Energy & Fuels* 21. Pp. 3689-3694.

Osmont A., Catoire L. (2007). “Thermochemistry of methyl and ethyl esters from vegetable oils”, *International journal of chemical Kinetics* 39. Pp. 481-491.

Penedo P.L., Cohelo G., Mendez M.F. (2009). ”Phase equilibria of oleic, palmitic, stearic, linoleic and linolenic acids in supercritical CO₂”. *Brazilian Journal of Chemical Engineering* 26. Pp. 137-142.

Recinos G., Rodríguez A., Hernández C., Yeomans J. (2005), “Metodología para la fabricación de biodiesel a partir de aceite de palma africana (*Elais Guineensis*) y aceite de soya usado”. *Tierra Tropical* 1, Pp. 51-59.

Soares C., Cordeiro G., Pereira L. (2008), “A new zinc hydroxide nitrate heterogeneous catalyst for the esterification of free fatty acids and the transesterifications of vegetables oils”, *Catalyst Communications* 9. Pp. 2140-2143.

Sorín B. C., Alexandre C. (2008), “Chemical Process Design”, ed. Wiley, pp. 420-449.

Shannon R., Johannes D. (1976). “Systems simulation: the art and science”. *IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics* 6. Pp. 723-724.

Vatani A., Merphooya M. (2007), “Prediction of Standard Enthalpy of Formation by a SQPR Model”, *International journal of molecular sciences* 8. Pp. 407-432.

Velez A., Hegel P., Brignole E.A (2010), “Density and Conversion in Biodiesel Production with Supercritical Methanol” *Ind. Eng. Chem.* 49. Pp. 7666-7670.

Xiaoling Miao, Qingyu Wu (2006), “Biodiesel production from heterotropic microalgal oil”. Bioresource Technology 97. Pp. 841-846.

Yuan W., Zhang Q. (2005), “Vapor pressure and normal boiling point predictions for pure methyl esters and biodiesel fuels”. Fuel 84. Pp. 943-950.

Zhang Y., M.A. Dube , D.D. McLean, M. Kates (2003). “Biodiesel production from waste cooking oil”. Bioresource Technology 89. Pp. 1-16.

Zieba A., Matachowski L. (2009), “Methanolysis of castor oil catalysed by Solid Potassium and cesium salts of 12-thungstophosphoric acid”. Catalysis Letters 127. Pp. 183-194.

<http://www.rtve.es/noticias/20091110/demanda-petroleo-cae-este-ano-22-pero-crecera-235-hasta-2030/300165.shtml>

<http://www.ebb-eu.org/stats.php>

http://www.sener.gob.mx/webSener/res/545/ESTIMACION_RESERVAS_HIDROCARB_AL_01_ENE_09.pdf

www.sagpya.mecon.gov.ar

http://dgeiawf.semarnat.gob.mx:8080/ibi_apps/WFServlet?IBIF_ex=D3_AIRE02_01&IBIC_user=dgeia_mce&IBIC_pass=dgeia_mce

http://www.ovaciones.com/gral/index.php?option=com_content&view=article&id=14805:sobree-estimado-volumen-de-poblacion-nini-en-mexico-sep-segob&catid=81:nacional&Itemid=399.

APÉNDICES

AI. APERTURA Y ENTORNO DE SUPER PRO DESIGNER 7.5

Para comenzar a utilizar este simulador una vez que ya ha sido instalado en equipos con sistema operativo Windows se debe acceder primeramente al menú **inicio**, localizado en la parte inferior izquierda del escritorio. Posteriormente se accede al menú **programas** y se selecciona la carpeta **Super Pro Designer 7.5** dentro de la cual se da un clic en la opción **Super Pro Designer v7.5** . Con ello se abrirá el programa y el usuario podrá comenzar con la simulación que requiera realizar.

Una vez que el usuario ha abierto Super Pro Designer para comenzar a trabajar, es necesario especificar en un inicio aquello que requiera hacer en ese momento. Para ello se hace necesario haber seleccionado este software dentro del entorno gráfico de Windows, enseguida de lo cual aparece una ventana en la que se elige la actividad que se desea realizar. Las opciones disponibles son:

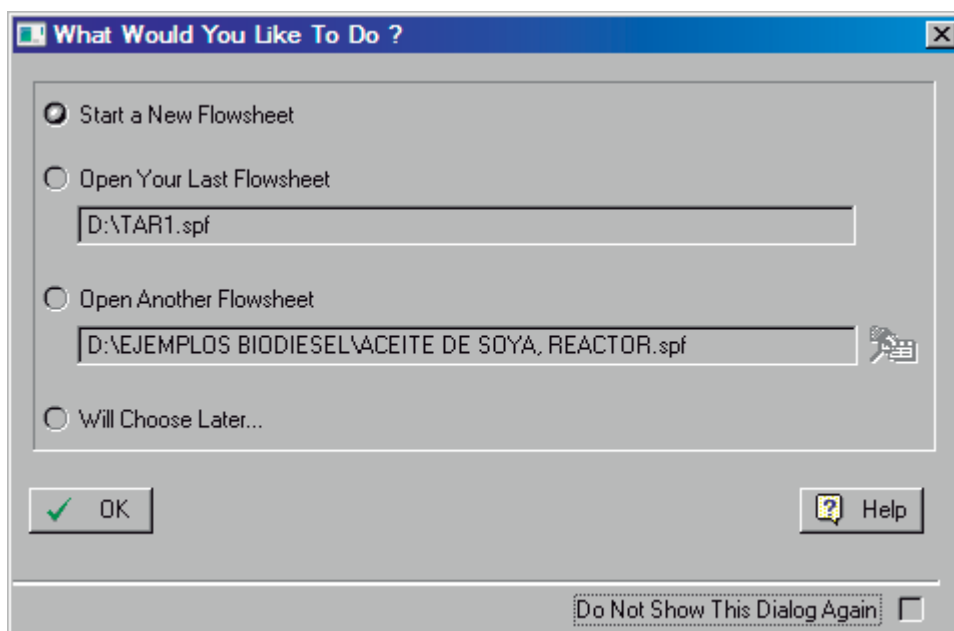


Figura AI.1 Pantalla de inicio de Super Pro Designer.

Comenzar un nuevo diagrama de flujo (*Start a New Flowsheet*): Esta opción se elige la primera vez que se abre el Super Pro Designer o cuando se requiere comenzar con un nuevo archivo. Es decir, cuando se requiere realizar un nuevo ejemplo.

Abrir el último diagrama de flujo (*Open your last flowsheet*) : Esta opción es normalmente utilizada cuando se requiere continuar con un ejemplo que por alguna causa quedó inconcluso. Esta opción abrirá el último diagrama de flujo que haya sido guardado en el programa.

Abrir otro diagrama de flujo (*Open Another Flowsheet*): Opción utilizada en el caso que se requiera abrir un diagrama de flujo que haya sido guardado con anterioridad pero que no necesariamente es el último con el que se trabajó.

Elegir en otra ocasión (*Will choose Later*): Esta opción es la menos recomendada ya que se utilizará únicamente en el caso de que el usuario no desee trabajar con algún diagrama de flujo. Super Pro Designer se abrirá pero no mostrará ninguna opción de trabajo.

Aunada a estas opciones se encuentra la opción “*Do Not Show This Dialog Again*”, esta opción se utilizará conjuntamente con alguna de las otras tres mencionadas y servirá única y exclusivamente en el caso de que el usuario desee realizar siempre la misma acción. Es decir, si se selecciona la primera opción junto con esta casilla el programa abrirá siempre un nuevo diagrama de flujo al momento de iniciarse. En el caso de seleccionarse la segunda opción el programa siempre abrirá el último archivo con el que se trabajó. Esto mismo sucederá con las otras dos opciones.

Posteriormente, ya que se ha seleccionado la opción con la cual se quiere comenzar el programa, se debe dar la orden de aceptar esa opción oprimiendo el botón **OK**.

Una vez que se ha seleccionado la opción de “Abrir un nuevo Diagrama de Flujo”, aparece entonces un nuevo menú en el cual se despliegan los tipos de procesos con los cuales puede trabajar una planta y se pide entonces seleccionar un tipo de proceso.

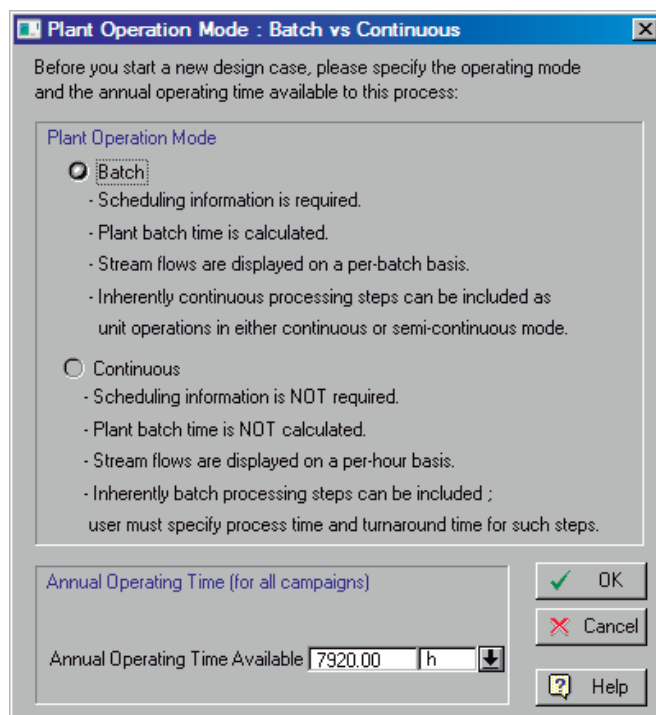


Figura AI.2 Selección del tipo de proceso de trabajo.

Las opciones disponibles para trabajar son los procesos **Continuos** y los procesos **Por lotes (Batch)**. La selección de uno de estos modos depende del tipo de proceso con el cual el usuario identifique más al proceso que desea simular. Las características de cada uno son mostradas en la siguiente tabla.

Tabla AI.1 Características de los procesos manejados por Super Pro Designer.

Continuo	Por Lotes (Batch)
No se requiere información de programación.	Se requiere tiempo de programación
No se calcula tiempo de proceso por lote.	Se calcula el tiempo de proceso por lote.
Los flujos de corrientes se despliegan en una base "por hora"	Los flujos de corriente se expresan por tiempo de proceso
Los pasos que requieran proceso por lotes pueden ser incluidos inherentemente. El usuario debe especificar el tiempo de proceso.	Se pueden incluir procesos continuos como operaciones unitarias.

Una vez que se ha elegido el modo de operación aparece entonces el escritorio de Super Pro. Este escritorio es el espacio donde el usuario creará y manipulará el diagrama de flujo del proceso que desea simular y tiene un aspecto como el mostrado en la figura siguiente:

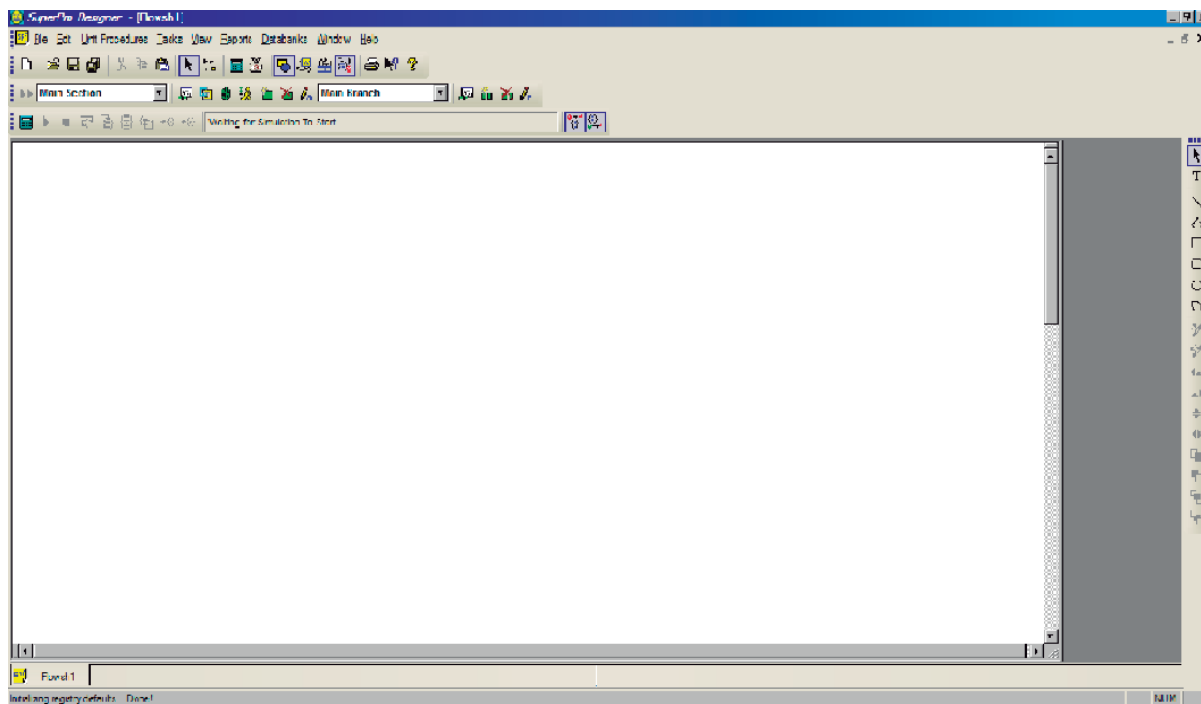


Figura AI.3 Entorno de trabajo de Super Pro Designer.

Es en esta última ventana donde el usuario podrá entonces realizar el diagrama de flujo del proceso en cuestión y manipularlo de acuerdo a sus necesidades.

AII. ALTAS Y REGISTROS DE NUEVOS COMPONENTES EN LA BASE DE DATOS DE SUPER PRO DESIGNER 7.5

AII.1. DAR DE ALTA LOS COMPUESTOS INVOLUCRADOS

Antes de comenzar en si con lo que es la creación del diagrama de flujo se deben primeramente especificar todos los componentes que estarán presentes en el proceso. Esto es importante debido a que al momento de especificar las corrientes, el programa pedirá las composiciones que llevan cada una de ellas, así como sus propiedades principales (P y T). La manera en que se logra esto es ir al menú Tareas (**Tasks**) y seleccionar la opción “**Editar componentes puros** (*Edit Pure Components*)”.

Una vez que el usuario ha accedido al menú indicado, el software en discusión mostrará una ventana como la mostrada en la figura AII.1, en la cual existen varias formas para registrar los componentes presentes en el proceso a simular.

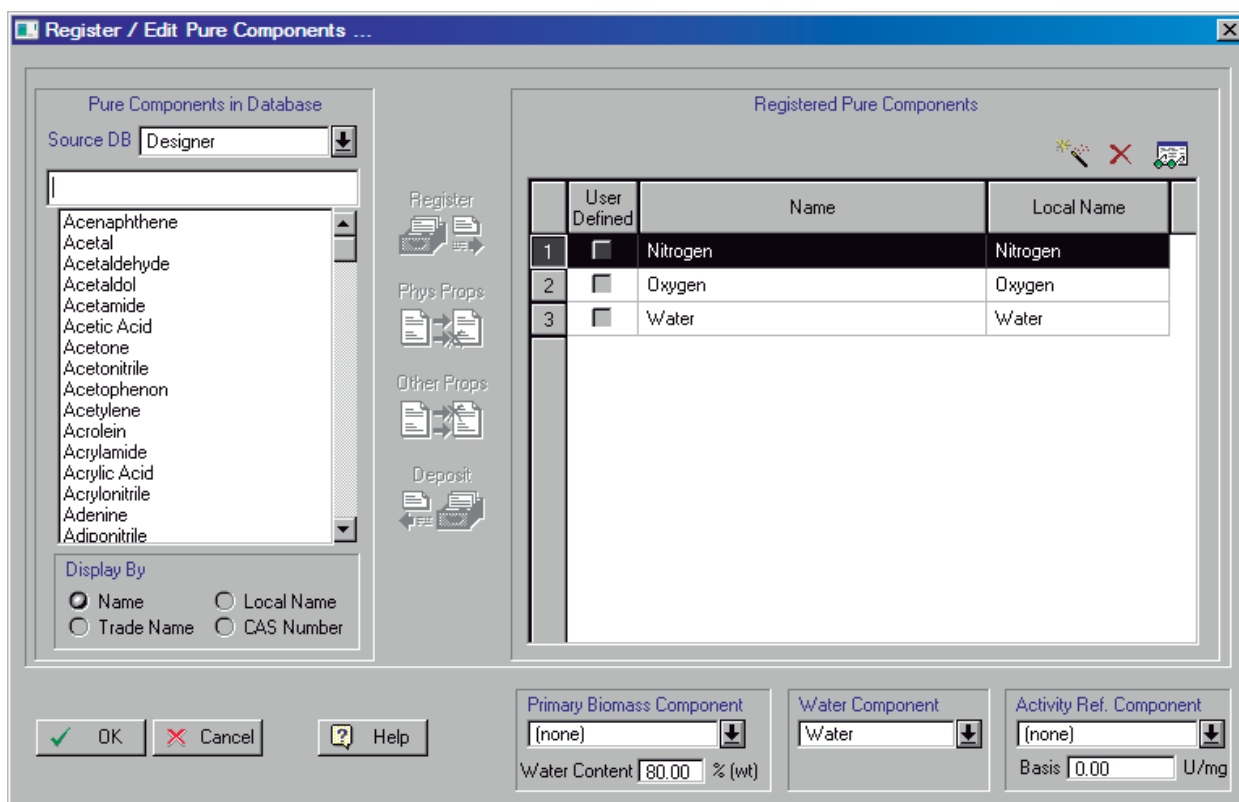


Figura AII.1 Registro de componentes a utilizar en el proceso.

Existen 2 fuentes de las cuales se puede extraer la información de los componentes de trabajo. Estas fuentes son:

1. La base de datos de Super Pro Designer, la cual es la opción que aparece configurada desde el momento en que se abre esta ventana.
2. La base de datos personal del usuario: Esta es una base de datos especial donde el usuario puede registrar los componentes que le interesan y que no se encuentran en la base de datos anterior.

Una vez seleccionada la fuente se procede a buscar los compuestos presentes en el proceso. Se buscan dentro de la lista correspondiente, se seleccionan y posteriormente se dá clic en la opción “registrar (*register*)”, la cual se encuentra ubicada al lado derecho de la lista desplegada.

En el caso de no encontrarse el componente buscado en la base de datos de Super Pro Designer se procede entonces a dar de alta este componente. Una vez que se ha abierto la lista desplegable de las bases de datos mostrada en la figura AII.1 se puede observar que arriba de los componentes elegidos se encuentran 3 botones distintos. El primer botón de izquierda a derecha es la opción para dar de alta un componente nuevo. El segundo es la opción para borrar uno de los compuestos de la lista que se haya registrado por error y el tercero es para ver o editar las propiedades de los componentes de trabajo. Al dar clic sobre el primer botón aparece entonces una ventana como la siguiente, en la cual se darán de alta el componente a utilizar.

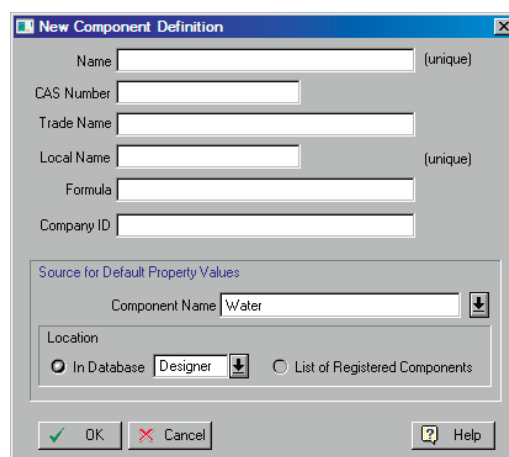


Figura AII.2 Ventana de registro de nuevos componentes.

Después de haberse realizado lo anterior se selecciona el componente registrado de la lista de componentes activos y se da clic sobre el tercer botón (mostrado en la figura AII.1) para dar de alta las propiedades físicas del mismo. Al hacer esto se despliega una ventana como la siguiente donde se deberán poner los valores encontrados para dicha sustancia. Cabe mencionar que el programa tiene dados valores de propiedades físicas y químicas de un nuevo componente tomando en cuenta las propiedades del agua. Estos valores se deben cambiar entonces para poder terminar con la operación.

Pure Component Properties for : Alúmina	
Economics	Pollutant Categories
Comments	
IDs	Physical (Constant)
Physical (T-dependent)	Aqueous
Main Properties	
MW	18.015 g/gmol
Enthalpy of Formation	-285830.00 J/gmol
Normal Boiling Point	100.00 °C
Normal Freezing Point	0.00 °C
Critical Properties	
Temperature	374.19 °C
Pressure	221.20 bar
Compressibility Factor	0.2350
Acentric Factor (Omega)	0.3440
Miscellaneous	
Henry's Const.x10**4	0.000000 atm-m3/gmol
Particle Size	0.00 micron
Default Volumetric Coefficient	1.00

Figura AII.3 Registro de propiedades físicas de un nuevo componente.

Una vez que ya se han dado de alta todos los compuestos involucrados en el proceso entonces se acepta el registro dando clic en la opción “OK”.

Se debe mencionar que, debido a que los componentes con los cuales se va a trabajar no son componentes utilizados de manera convencional, Super Pro Designer no cuenta con información termodinámica de algunos de estos. Por lo tanto, se hizo necesaria la búsqueda de ciertos datos indispensables para la correcta simulación de este proceso. Entre los datos que

principalmente se debieron buscar se encuentran las constantes para presiones de vapor y constantes para el cálculo de capacidades caloríficas de ácidos grasos y metil ésteres de ácidos grasos. Debido a que se ha estudiado poco acerca de estos compuestos los datos buscados de capacidad calorífica no se pudieron encontrar. Sin embargo, lo que si se pudo encontrar fueron datos experimentales de capacidades caloríficas medidas a diferentes temperaturas publicados por Osmont y col. (2007). Estos datos sirvieron de manera significativa debido a que muestran los datos experimentales de capacidad calorífica para cada uno de los compuestos medidos a diferentes temperaturas. Con estos datos encontrados se procedió entonces a realizar un ajuste de curvas polinomial para encontrar los valores de las constantes que mejor ajustan estos datos a un polinomio de segundo grado encontrándose así los datos mostrados en la siguiente tabla, donde C_p [=] J/mol K y T [=] $^{\circ}$ K

Tabla AII. 1 Constantes para capacidad calorífica de ácidos grasos y metil ésteres derivados de estos.

Compuesto	A	B	C
Miristato de Metilo	351.28	0.4215	$-5.807 \cdot 10^{-5}$
Oleato de Metilo	407.43	0.4868	$-6.726 \cdot 10^{-5}$
Linoleato de Metilo	407.79	0.4968	$-6.844 \cdot 10^{-5}$
Linolenato de Metilo	399.1614	0.4771	$-6.576 \cdot 10^{-5}$
Ácido Palmítico	378.25	0.4502	$-6.232 \cdot 10^{-5}$
Palmitato de Metilo	394.87	0.4770	$-6.579 \cdot 10^{-5}$
Ácido Esteárico	423.29	0.5044	$-6.971 \cdot 10^{-5}$
Estereato de Metilo	360.343	0.6049	$-8.587 \cdot 10^{-5}$
Ácido Laurico	218.133	0.4389	$-6.701 \cdot 10^{-5}$
Laurato de Metilo	305.78	0.3665	$-5.046 \cdot 10^{-5}$

Por otro lado, se hace necesario resaltar los datos de constantes para las presiones de vapor que se utilizarán en la simulación. La tabla AII.2 muestra los datos para presiones de vapor de algunos de los metil ésteres provenientes de ácidos grasos tomados del libro de Drapcho y col. (2008), utilizando la ecuación de Antoine, donde T [=] $^{\circ}$ C y P [=] mmHg.

Tabla AII.2 Constantes para presiones de vapor de metil ésteres provenientes de ácidos grasos.

Ácido graso	A	B	C
Mirístico	9.6258	2194.36	-95.50
Palmítico	9.5714	2229.94	-111.01
Estearico	9.3746	2174.39	-131.23
Oleico	9.9155	2583.52	-96.15
Linoleico	8.2175	1450.62	-188.03
Linolénico	8.1377	1387.93	-196.16

Se debe también tomar en cuenta que al momento de dar de alta un nuevo componente en Super Pro Designer, se hace necesario introducir algunas de las propiedades físicas que son independientes de la temperatura (Temperatura de ebullición normal, Peso molecular, No. CAS, Formula, entre otras); así como registrar los datos de las constantes necesarias para el cálculo de los calores latentes de vaporización. Dichos datos se muestran en las tablas AIII y AIV:

Tabla AII.3 Propiedades físicas independientes de la temperatura para los metil ésteres provenientes de ácidos grasos.

Componente	Formula	No. CAS	P.M.	T normal de ebullición [°C]*	T normal de Fusión [°C]**
Metil Laurato	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	111-82-0	214.35	261	5.1
Metil Miristato	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	124-10-7	242.41	295	19
Metil Palmitato	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	112-39-0	270.46	338	30.7
Metil Estereato	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	112-61-8	298.51	349	37.8
Metil Oleato	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	112-62-9	296.49	352	38.7
Metil Linoleato	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	112-63-0	294.47	366	39.1
Metil Linolenato	C ₁₃ H ₂₆ O ₂	301-00-8	292.46	372	39.5

Tabla AII.4 Constantes para el cálculo de calores de vaporización para los metil ésteres provenientes de ácidos grasos. La ecuación utilizada es $\Delta H_v = A (1-T_r)^B$ [J / mol. ^{**}]

Componente	A	B
Metil Laurato	62146.97	8.9916
Metil Miristato	67157.3	9.0622
Metil Palmitato	71142.5	9.125
Metil Estereato	79601	9.4552

Metil Oleato	80836	9.4771
Metil Linoleato	84157	9.5112
Metil Linolenato	85822	9.5548

*.- Vapor Pressure and normal boiling point predictions for pure methyl esters and biodiesel fuels.

**.- “Los aceites y grasas, composición y propiedades”.

Se debe también mencionar que los datos anteriores (constantes para calores de vaporización) fueron modificados del artículo original para la consistencia de unidades, ya que los datos originales presentaban las constantes para un calor dado en cal / mol.

Por otro lado, para la realización de una correcta simulación, se hace necesario registrar en este software una propiedad que es específica de cada componente y que no depende de la temperatura, esta propiedad es el calor estándar de formación. Dichos datos se muestran en la siguiente tabla (AII.5) para cada uno de los componentes presentes en este proceso (Vatani y Merpooya, 2007):

Tabla AII.5 Calores de formación para ácidos carboxílicos y metil ésteres derivados de ellos.

Componente	Calor de formación [=] J / mol
Ácido Láurico	-641520
Ácido Mirístico	-683000
Ácido Palmítico	-752310
Ácido Esteárico	-789564
Laurato de Metilo	-693000
Miristato de Metilo	-671160.8
Palmitato de Metilo	-710989
Estearato de Metilo	-751242
Oleato de Metilo	-734500
Linoleato de Metilo	-760200
Linolenato de Metilo	-765521

AII.2. EDITAR SISTEMA DE UNIDADES

Ya que se han dado de alta los componentes involucrados en el proceso se procede a seleccionar entonces las unidades que el simulador debe tomar en cuenta para cálculos. De este modo, puede el usuario pedir los reportes y trabajar con el sistema que mejor le parezca. Para realizar esto es necesario ir nuevamente al menú “*Editar (Edit)*”, seleccionar “*Flowsheet Options* (opciones de diagrama de flujo)” y posteriormente dar clic en la opción “*Physical Unit Options* (Opciones de unidades físicas)”, este proceso se explica con más detalle en el apéndice III.

AII.3. REGISTRO DE EQUIPOS PARA DIAGRAMA DE FLUJO

Ya que se han realizado los pasos anteriores (La edición del sistema de unidades y de componentes) se procede entonces a crear el diagrama de flujo correspondiente al proceso que se va a simular. Para ello se hace necesario seleccionar los equipos con los cuales cuenta el proceso para después interconectarlos y examinar los flujos de salida del proceso en general o del equipo que se desea, como se verá posteriormente.

Para agregar un nuevo equipo al proceso que se desea simular es necesario ir al menú “**Operaciones Unitarias** (*Unit Procedures*)” ubicado en la barra de menús del entorno gráfico principal de este software. Después de ello se selecciona el equipo que se desea añadir en el diagrama. La tabla AII.6 muestra las operaciones unitarias de las que dispone este software para la creación de diagramas de procesos:

Tabla AII.6 Operaciones Unitarias disponibles en Super Pro Designer.

Operación Unitaria
Procedimiento en Tanques
Reacción Continua
Preparación de inóculo
Filtración
Centrifugación
Homogenización
Cromatografía / Adsorción
Secado / Granulación
Sedimentación

Destilación
Extracción
Cambio de Fase
Absorción / Agotamiento
Almacenamiento / Mezcla
Intercambiadores de calor
Mezcladores
Divisores
Reducción de Tamaño
Formulación / Empacado
Transporte (Cercano)
Transporte (Lejano)
Caída de Presión (Válvulas)
Cajas Genéricas
Especificaciones de Diseño

Es importante mencionar que las categorías mostradas anteriormente son solo las que se muestran en el menú principal, esto debido a que cada una de ellas tiene diversas sub categorías. Por citar un ejemplo, se menciona que dentro de la operación unitaria “**Cambio de fase**” aparece un submenú en el cual se muestran los equipos disponibles para realizar esto. Los equipos disponibles dentro de esta operación son: **Condensación, Evaporación Multi efecto, Evaporación de película y cristalización continua.**

Una vez que ya se ha buscado el equipo con el cual se desea trabajar se procede entonces a seleccionarlo. Después de ello se deberá dar un clic en la parte del escritorio de Super Pro donde quedará colocado este equipo y así, sucesivamente, se colocarán todos los equipos que se requieran para el proceso a simular. Se debe decir que, al igual que en algunos otros simuladores, no es necesario poner los procedimientos en orden ya que, una vez que todos se encuentran en el diagrama, es fácil moverlos de un lugar al otro del escritorio arrastrándolos al igual que como se realiza en otros programas.

Posteriormente se procede a cambiar (si el usuario así lo desea) el nombre de los equipos insertados. Esto se realiza con fines de diseño para llevar un mejor control de los procedimientos registrados y del orden que deberán llevar. Para realizar esto se deberá primeramente seleccionar

el equipo deseado y posteriormente se dará un clic derecho sobre el mismo, con lo cual se despliega una lista de opciones de manipuleo del equipo. De entre esta lista se selecciona la opción “**Editar Etiquetas** (*Edit Labels*)”, con lo cual se abrirá una ventana como la mostrada en la siguiente figura, en la cual se deberán especificar 3 puntos importantes del equipo seleccionado.

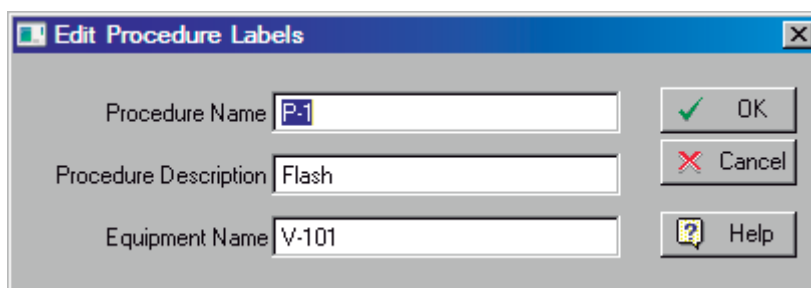


Figura AII.4 Edición de Etiquetas de un equipo.

El primer espacio que se pide especificar es el del nombre del procedimiento. En este espacio se coloca el nombre de la operación que realiza el equipo seleccionado. Para el caso anterior se colocará “Evaporación”, ya que se trata de una operación de este tipo. Después de ello da la descripción de lo que este equipo puede realizar. Es decir, se pone el tipo de evaporador que se está utilizando (por ejemplo un *flash*) y por último se especifica un nombre para el equipo que se está editando (en este caso se le podría llamar Flash1). Cabe mencionar que no es lo mismo el nombre de procedimiento que el nombre de equipo ya que, en algunos procesos se tienen varios equipos que realizan la misma operación solo que colocados en distintas secciones de proceso. Es decir, se podrían tener 4 o 5 columnas de destilación en diferentes partes de un mismo proceso. En este caso el nombre y la descripción del procedimiento serían los mismos pero se cambiarían de nombre con el fin de identificar a cada una.

AII.4. INSERCIÓN DE LINEAS DE CORRIENTE Y CONEXIÓN ENTRE EQUIPOS

Ya que los equipos han sido ya registrados se procede ahora, como último paso de diseño, a insertar las líneas que representaran los flujos de entrada y salida de cada equipo, así como a conectar la salida de un equipo con la entrada de otro. Para realizar esto es necesario primeramente tener acomodados cada uno de los procedimientos existentes. Después de ello se deberá recurrir al botón “Modo de conexión” . Este botón se encuentra debajo de la barra de

menús principales a un lado de la flecha de selección  y sirve para dibujar cada una de las líneas que representarán los flujos de materia del proceso. Ya que se ha seleccionado esta acción se da clic en el escritorio de Super Pro cerca de donde se tiene al equipo que se requiere y posteriormente se deberá acercar el apuntador del ratón a la entrada del equipo requerido. Se debe observar que al acercar el apuntador a este lugar la flecha cambiara la forma en que se ve, transformándose en un icono con una doble flecha (una a la izquierda y otra a la derecha), lo cual es señal de que ya se puede conectar la alimentación del equipo por medio de un simple clic. Posteriormente para indicar la salida de un equipo se realiza lo mismo, se recurre al botón de modo de conexión y se coloca el apuntador cerca de la flecha que indica la salida de un equipo. Ya que esto se hace se lleva la línea de flujo hasta el lugar que se quiera y se finaliza el proceso con un doble clic en el lugar del escritorio donde se requiera llevar este flujo.

La interconexión de equipos se realiza del mismo modo que se menciona anteriormente, solo que después de recurrir al modo de conexión y colocarlo a la salida de un equipo, el apuntador se lleva hasta la entrada del equipo siguiente y una vez que ha tomado la forma de la doble flecha se finaliza la conexión con un clic.

Del mismo modo en que se pueden manipular los nombres de cada uno de los equipos en Super Pro se pueden manipular los nombres de las corrientes involucradas en el diagrama. Para realizar esto primeramente se deberá seleccionar el botón “Flecha de selección”, ubicado bajo la barra de menús al lado del modo de conexión. Después de ello se selecciona la línea que representa al flujo del cual se desea cambiar el nombre y se oprime un clic derecho sobre la línea. Al hacer esto se puede observar que la línea se pone en color rojo y se despliega un menú en el cual aparecen varias opciones. De entre las opciones disponibles se selecciona ahora la que dice “**Editar Nombre de Etiqueta** (*Edit Tag Name*)”, con lo cual aparecerá una ventana en la cual se podrá cambiar el nombre de la corriente como la mostrada en la figura AII.5:

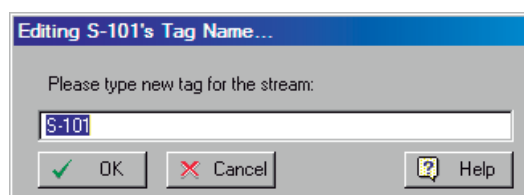


Figura AII.5 Edición de nombre de corrientes.

Lo dicho anteriormente es en sí lo que concierne a la creación, manipuleo y diseño de un diagrama de flujo para la simulación de un proceso en Super Pro Designer. A continuación, para ejemplificar un poco más lo escrito en la parte anterior se muestra una figura en la cual se han conectado un reactor y una columna de destilación y en la que se han ya editado los nombres de cada uno de los equipos y corrientes involucrados.

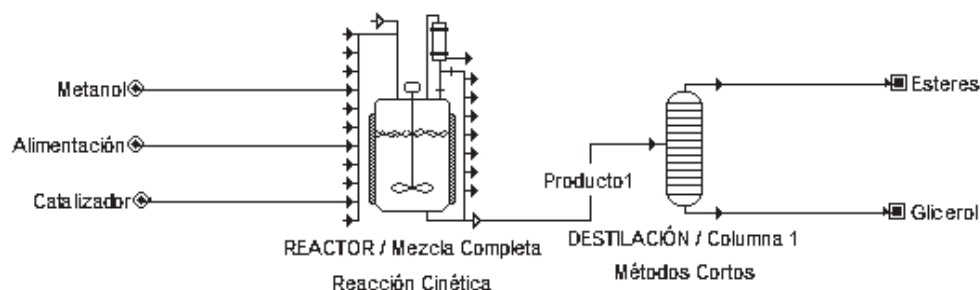


Figura AII.6 Ejemplo de proceso consistente de dos equipos en modo continuo.

AII.5. ESPECIFICACIONES DE LAS CORRIENTES DE ENTRADA A UN EQUIPO

En la simulación de cualquier proceso utilizando Super Pro Designer es preciso especificar cada una de las condiciones en que una corriente se encuentra en dicho proceso. Es decir, es necesario especificar las condiciones de presión y temperatura de cada corriente así como especificar la composición de las mismas. Esto se realiza una vez que el diagrama de flujo ha sido dibujado y que se han ya especificado los componentes presentes en el proceso a simular.

Es importante mencionar que solo es necesario especificar las corrientes de entrada del proceso general. Esto debido a que las corrientes intermedias y de salida, así como su composición son resultado de las especificaciones que se den a los equipos del diagrama. Para más información acerca de la especificación de corrientes en el proceso se deberá consultar el apéndice IV.

AII.6. ESPECIFICACIONES DE TRABAJO DE LOS EQUIPOS PRESENTES EN UN DIAGRAMA DE FLUJO EN SUPER PRO DESIGNER

Como se mencionaba anteriormente, la especificación de las condiciones de operación de un equipo en Super Pro Designer se hace necesaria ya que las composiciones de las corrientes de salida de cada equipo dependen de las condiciones a las cuales trabaje cada uno de ellos.

Si se piensa en una columna de destilación simple, se puede pensar en que la pureza del destilado no será la misma en una columna que trabaja con una relación de reflujo de 2 a una que trabaja con reflujo de 3. Tampoco es posible pensar que será la misma pureza de un equipo que posee 3 etapas a uno que posee 12 o quizás 20 etapas.

Todo lo anterior depende en gran medida de las especificaciones de las corrientes de entrada que llegan a un equipo, así como del tipo de componentes con los cuales se desea trabajar. En el apéndice V se muestra un ejemplo de la forma de especificar condiciones de trabajo en una columna de destilación.

AII.7. ESPECIFICACIONES PARTICULARES EN EL DISEÑO DE EQUIPOS

Si se desea ser más específico en el diseño de un equipo en especial, Super Pro Designer tiene una sección especial en cada equipo donde se pueden especificar características especiales que influyen en el diseño del mismo. Para acceder a este apartado se debe recurrir primeramente al botón “flecha de selección” y posteriormente seleccionar el equipo al cual se desean señalar las características. Después de ello se da un clic derecho sobre el mismo y se selecciona la opción “*Equipment Data*”. Esta selección desplegará una nueva ventana en la cual se realizarán las especificaciones de diseño.

Se debe mencionar que estas especificaciones tendrán, más que un sentido físico, uno económico. Es decir, servirán para el cálculo de costos principalmente, aunque también se verán afectadas otras variables de diseño. En el apéndice VI se discuten con más detalle las situaciones en las cuales es conveniente recurrir a estas especificaciones y las consecuencias de recurrir a las mismas.

AII.8. SELECCIÓN DEL MÉTODO TERMODINÁMICO PARA CÁLCULO DE EQUILIBRIO LÍQUIDO – VAPOR

En todo equipo donde se lleve a cabo una separación de componentes por cambio de fase es necesario especificar a la hora de realizar las simulaciones el método por el cual SPD realizará los cálculos para el equilibrio líquido-vapor.

A diferencia de los otros simuladores convencionales la desventaja que presenta SPD es su escasa variedad de métodos para lograr esta tarea. Este simulador realizará los cálculos basado solamente en el algoritmo de punto de burbuja o en el método ideal (cálculo de equilibrio por ley de Raoult). El primero de los anteriormente mencionados es el que se encuentra de modo predeterminado. Sin embargo, dicho método puede cambiarse fácilmente accediendo al menú “*Edit (editar)*”, posteriormente seleccionar “*Flowsheet Options (Opciones de diagrama de flujo)*” y por último presionar sobre la opción “*Thermodynamic Defaults*”.

Una vez realizado lo anterior se despliega una ventana como la mostrada en la figura AII.7, en la cual se seleccionará el método termodinámico acorde a los componentes requeridos.

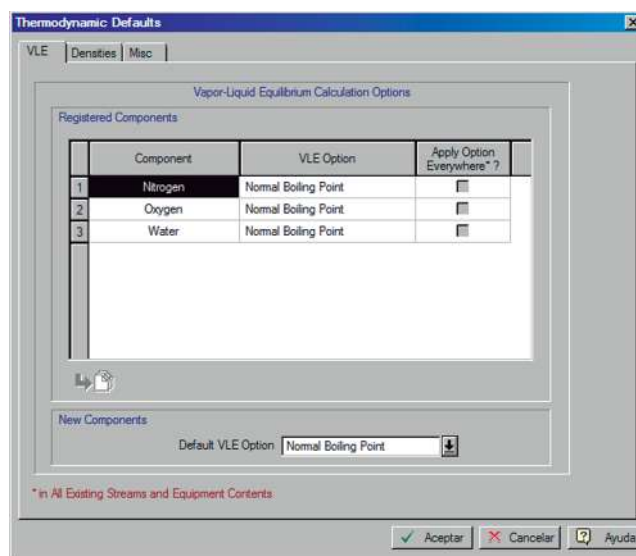


Figura AII.7 Selección del método termodinámico para cálculos de ELV.

AII.9. REPORTES DE RESULTADOS

Una vez que ya se ha realizado el diagrama de flujo y se han especificado las corrientes y equipos se procede entonces a analizar la viabilidad técnica, económica y lógica del proceso general por medio de los reportes que ofrece el programa. Super Pro Designer ofrece la ventaja de realizar reportes de resultados para distintas variables importantes en el proceso deseado. La siguiente tabla (AII.7) muestra los tipos de reportes que este software puede ofrecer una vez que se han cubierto los señalamientos anteriores.

Tabla AII.7 Reportes de resultados finales que ofrece Super Pro.

Tipo de Reporte
Corrientes y balance de materia
Evaluación económica
Análisis de flujo de caja
Análisis de rendimiento
Costos detallados
Impacto ambiental
Emisiones
Equipos
Entrada de datos

La manera de tener acceso a toda esta información es por medio de la barra de menús de Super Pro. Para pedir un reporte en especial una vez que se han cubierto los requisitos anteriores el usuario deberá ir a la barra de menús del programa y seleccionar el menú “**Reportes (Reports)**”. Una vez seleccionado esto el menú desplegará todas las opciones de reportes disponibles que se tienen para analizar. Ya después se requerirá solo seleccionar la opción que el usuario desea.

Ahora, si bien es cierto que el programa puede dar como salida muchos datos de interés, se debe recordar que, como se mencionaba dentro del marco teórico, una de las etapas de un estudio de simulación es la interpretación de los datos, lo cual es una obligación únicamente del usuario o de quien esté llevando a cabo el estudio.

Se debe recordar ahora que el programa arroja simples datos porque el usuario así lo requiere, pero es obligación de este último el realizar un análisis lógico de los mismos. De esta manera, si se piensa en un proceso en el cual hay un reactor en el que se lleva a cabo una reacción de A que produce B y se especifican ciertas condiciones de temperatura y presión para las cuales existe una conversión del 90% de A, la simulación arrojará un cierto costo. Se piensa ahora que cambiando las condiciones dadas se puede obtener un mejor costo, por lo cual se realiza otra simulación en la cual el valor de esta variable es menor que en la primera pero al hacer el análisis de materia se obtiene que no hay una conversión del 90% sino del 150%, lo cual es completamente ilógico pensar, ya que va en contra de la ley de la conservación de la masa.

Es por esto que el análisis de datos juega un papel importante en la simulación, ya que permite conservar y someter a estudio aquellas propuestas que tengan un sentido lógico y descartar todas aquellas que no lo posean.

Sin embargo, pese a las grandes ventajas que SPD ofrece al usuario (como la interfaz gráfica amigable, tiempos de cálculo cortos, etc) es relevante hacer notar que dicho simulador se encuentra más enfocado al proceso en general que a la parte técnica del mismo ya que carece de algunas operaciones unitarias que podrían dar un acercamiento más profundo al comportamiento real de la materia. Esto se explica mejor manera tomando como ejemplo una operación unitaria muy utilizada para separación de líquidos como es la destilación. SPD ofrece la desventaja de poder realizar los cálculos por medio de métodos cortos solamente mientras que otros pueden hacerlo utilizando métodos rigurosos. Dicha desventaja se ve reflejada principalmente en procesos donde los puntos de ebullición de las sustancias participantes son muy cercanos y la diferencia entre utilizar un método corto y uno riguroso implica la construcción de una columna mas grande. En el trabajo en estudio afortunadamente las columnas utilizadas no varían mucho en cuanto a especificaciones ya que 2 de ellas fueron diseñadas para la separación y recirculación de metanol al proceso, el cual tiene una temperatura de saturación a P atmosférica 9 veces menor que la de las sustancias con las cuales se encontraba, por lo cual la separación se lleva a cabo de una manera rápida y eficaz.

AIII. EDICIÓN DEL SISTEMA DE UNIDADES PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS EN SUPER PRO

Ya que el usuario ha seleccionado el menú y la opción mencionados en la sección 3.1.2, Super Pro abrirá una ventana como la mostrada en la figura AIII, en la cual el diseñador del proceso podrá manipular las unidades de cada variable presente en el mismo de acuerdo a sus necesidades. Cabe mencionar que si el usuario no cambia estas unidades el programa trabajará con el sistema de unidades que tiene preestablecido para cada variable (el cual es el mostrado en la figura en discusión). Como se puede observar, este sistema está dado en las unidades que más frecuentemente se observan de acuerdo a la variable. Sin embargo, pueden modificarse una a una a gusto del usuario o pueden modificarse todas en una sola ocasión seleccionando (si el diseñador así lo prefiere) sistema internacional o sistema inglés.

Physical Units Options

Common Properties

- Composition: %
- Concentration: g/L
- Density: g/L
- Temperature: °C
- Pressure: bar
- Pressure Drop: bar/m
- Dimensions: mm/cm/m
- Area: m²
- Velocity: cm/h
- Heating/Cooling Duty: kcal/h
- Heat Transfer Coef. (HTC): W/m²-K
- HTC x Area: kcal/h-°C
- Heating/Cooling Rate: °C/min
- Mass-Heat Capacity: kcal/°C
- Specific Energy: kcal/kg
- Specific Volume: m³/kg
- Surface Density: kg/m²
- Viscosity: cP
- Surf. Tension: dyn/cm
- Diffusivity: cm²/s
- Force: N

Time

- Startup, Process & Turnaround Time in Operations: min
- Absolute Start/End Times Cycle Times, Batch Time etc.: h
- Plant's Annual Operating Time Campaign Time: h

In Operations, Equipment

- Mass: kg
- Volume: L
- Mass Throughput: kg/h
- Volume Throughput: L/h
- Discrete Throughput: entities/h
- Mass Throughput per Length: (kg/h)/m
- Volume Throughput per Length: L/min-m
- Mass Flux: kg/m²-h
- Mass Flux Per Vol.: (kg/h)/m³
- Volume Flux: L/m²-h
- Power: kW
- Specific Power (per Volume): kW/m³
- Specific Power (per Area): kW/m²
- Specific Power (per Mass-Throughput): kW/(kg/h)
- Specific Power (per Vol. Throughput): kW/(m³/h)
- Specific Power (per Mass-Throughput-Length): kW/[(kg/h)-m]
- Specific Power (per Vol. Throughput-Length): kW/[(m³/h)-m]
- Specific Power (per Discrete Throughput): kW/(Entity/h)
- Area per Unit Volume: m²/m³

In Streams

- Mass: kg
- Volume: L
- Time Reference for Flows: h

Used w/ Agents

- Mass: kg
- Volume: L
- Mass Flow: kg/h
- Volume Flow: L/h
- Volume Flux: L/m²-min
- Gas Volume Flow: m³/s
- Volume Flow per Length: L/min-m
- Volume Flow per Volume: (m³/h)/L

Set Units Universally to ...

SI Only British Only

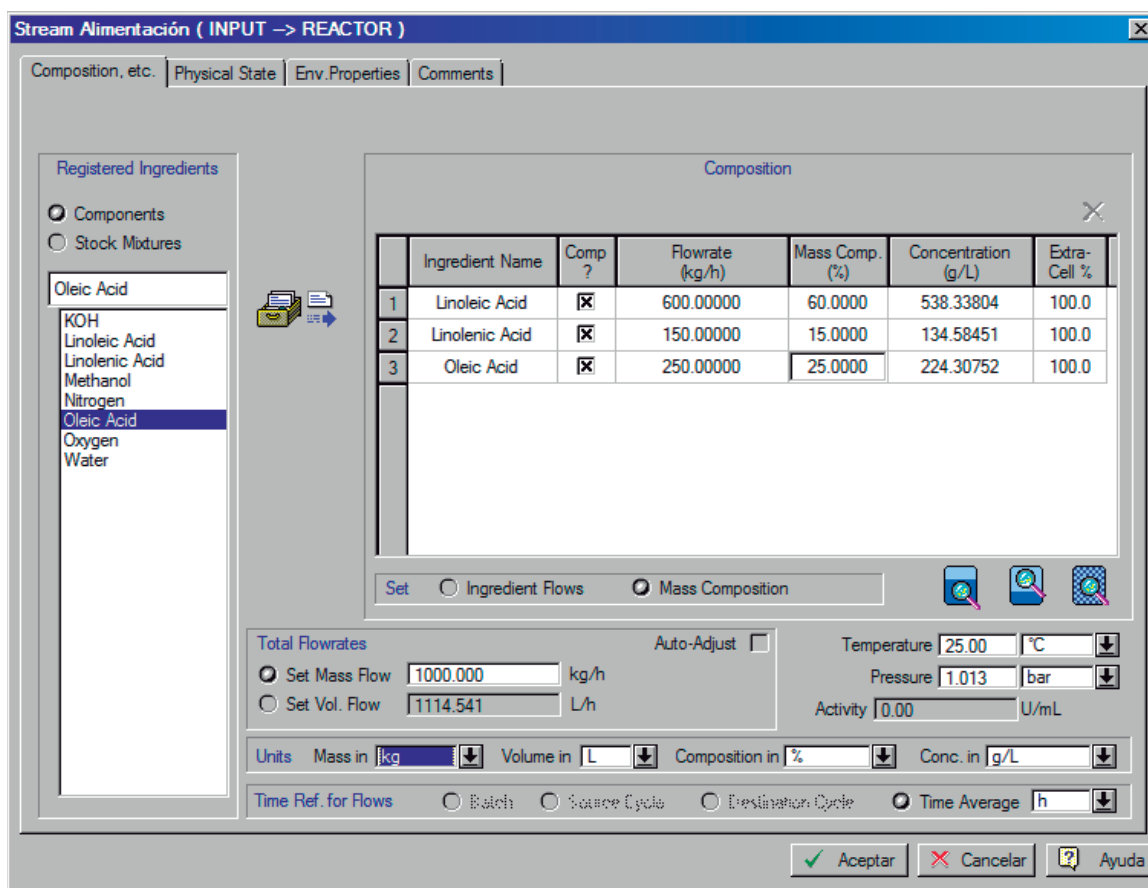
Preset Defaults

Help Cancel OK

Figura AIII Selección de unidades para variables del proceso.

AIV. ESPECIFICACIÓN DE CORRIENTES DE ENTRADA EN LA SIMULACIÓN DE PROCESOS CON SUPER PRO DESIGNER

Para especificar las condiciones de las corrientes que requiere la simulación de un proceso en este software, es necesario comenzar oprimiendo el botón “Flecha de Selección” , al cual ya se había recurrido con anterioridad y después de ello dar un doble clic sobre la línea de corriente (del diagrama de proceso) que se desea modificar o especificar. Con ello se abrirá una ventana como la mostrada en la figura AIV, en la cual se especificarán los datos necesarios que cada corriente deba llevar para realizar la simulación del proceso.



	Ingredient Name	Comp ?	Flowrate (kg/h)	Mass Comp. (%)	Concentration (g/L)	Extra-Cell %
1	Linoleic Acid	☒	600.00000	60.0000	538.33804	100.0
2	Linolenic Acid	☒	150.00000	15.0000	134.58451	100.0
3	Oleic Acid	☒	250.00000	25.0000	224.30752	100.0

Figura AIV Especificaciones en las corrientes de alimentación a un equipo.

Se debe mencionar que la manera de introducir los datos de las corrientes puede ser de dos formas. Se pueden dar los flujos molares por componente o poner la cantidad de masa total y especificar la composición de la misma. Para realizar esto primeramente se deben seleccionar los componentes presentes en la corriente especificada. Esto se realiza seleccionando de la parte

izquierda de la ventana los componentes presentes y dando clic sobre el botón “registrar”



, el cual se encuentra al lado derecho de la lista mostrada. Una vez que ya se han dado de alta los componentes presentes se procede entonces a especificar si dichos componentes se encuentran en flujo másico o en composición. En el ejemplo anterior se ha introducido un flujo másico de 1000 kg/h de aceite de soya con una composición en masa de 60% ácido linoleico, 15% ácido linolénico y 25% de ácido oleico, los cuales entran a una temperatura de 25 grados centígrados y una atmósfera de presión. Es importante mencionar que dentro de estas ventanas de especificaciones también pueden seleccionarse las unidades en las que entrará la corriente. Esto debido a que el software realiza la conversión de unidades y posteriormente entrega los resultados en las unidades especificadas en la sección 3.2.2.

El caso anterior ha sido la especificación de una corriente de alimentación de aceite que entra en un reactor. Del mismo modo en cómo se ha introducido esta corriente se introducirán las composiciones de las otras corrientes presentes como alimentaciones y que se encuentren en todo el proceso a simular.

AV. ESPECIFICACIÓN DE LAS CONDICIONES DE TRABAJO DE LOS EQUIPOS PRESENTES EN EL DIAGRAMA DE FLUJO

Como se ha podido ver hasta el momento, el éxito en los resultados de una buena simulación depende en gran parte de las condiciones que el usuario introduzca como datos, ya que serán estas condiciones las que favorecerán o bloquearán la convergencia en los modelos utilizados. Es por esto que se hacen entonces necesarias las especificaciones de condiciones de trabajo de cada equipo ya que, dependiendo de estas, tanto la convergencia como la lógica de las condiciones de salida, se verán afectadas. Para llevar a cabo tales especificaciones, se realiza lo mismo que anteriormente se hizo con la especificación de corrientes. Como primera medida se oprime con el puntero del ratón el botón “Flecha de Selección”, con el cual el usuario ya debe estar familiarizado y después de ello se selecciona y se da doble clic sobre el equipo al que se desean registrar las condiciones de operación. Ya que se ha realizado lo anterior entonces aparece una ventana como la siguiente (mostrada en la figura AV), en la cual se llenarán los espacios que indican condiciones de trabajo del equipo a utilizar.

The screenshot shows the 'DISTILL-1 (Distillation)' window with the following sections:

- Oper. Cond's** (Labor, etc., Description):
 - Component Separation**: A table with 3 columns: Component, Relative Volatility, and Percent (%) in Distillate. The table lists Glycerol, KOH, Linoleic Acid, Linolenic Acid, Methanol, Nitrogen, and Oleic Acid, all with a relative volatility of 0.00 and 0.00% in distillate.
 - Light Key**: (none)
 - Heavy Key**: (none)
 - R / Rmin**: 1.250
 - Reflux Ratio**: 0.000
 - Feed Quality (q)**: 100.00 %
 - Column Pressure**: 1.013 bar
 - Vapor Linear Velocity**: 3.000 m/s
 - Number of Theoretical Stages**: 0.000
 - Stage Efficiency**: 80.00 %
- Cooling (Condenser)**:
 - Operating Temp.**: 90.00 °C
 - Duty**: 0.0 kcal/h
 - Agent**: Cooling Water
 - Name**: Cooling Water
 - In Temp.**: 25.00 °C
 - Out Temp.**: 30.00 °C
 - Rate**: 0.0 kg/h
- Heating (Reboiler)**:
 - Operating Temp.**: 100.00 °C
 - Duty**: 0.0 kcal/h
 - Agent**: Steam
 - Name**: Steam
 - In Temp.**: 152.00 °C
 - Out Temp.**: 152.00 °C
 - Rate**: 0.0 kg/h

At the bottom, there are buttons for 'Aceptar', 'Cancelar', and 'Ayuda'.

Figura AV Especificaciones de condiciones de operación de un equipo.

Se debe mencionar que la ventana que aparece es distinta en cada operación unitaria. Esto es debido a que las condiciones de operación dependen del equipo que se utilice.

Solo por dar un ejemplo se debe pensar en que las especificaciones de una columna de destilación no serán las mismas que las de un reactor. En el primer caso las condiciones necesarias serán las condiciones de presión y temperatura en la columna, condensador y ebullidor, así como la relación de reflujo que se maneje. Y en el segundo caso las especificaciones serán la temperatura y presión de operación así como la cinética de la reacción.

La ventana mostrada en la figura AV es la que aparece en el caso de una columna de destilación. Como se puede observar, los datos requeridos para este equipo serán entonces la temperatura del condensador, el medio de enfriamiento, la especificación del componente ligero clave y pesado clave, la relación de reflujo, número de etapas teóricas, temperatura o calor disponible en el ebullidor, entre otros.

AVI. ESPECIFICACIONES PARTICULARES DE LOS EQUIPOS PRESENTES EN EL DIAGRAMA DE FLUJO

Tal y como se mencionó en el apéndice II, Super Pro Designer ofrece la opción de realizar especificaciones particulares en el diseño de los equipos que se requieren para la simulación de un proceso. Estas especificaciones particulares influirán de una manera significativa en el reporte de costos que este software arroja. Esto debido a que se enfocan más en el diseño del equipo que en su función. Para ejemplificar de una manera más detallada lo mencionado anteriormente se muestra en la figura AVI un ejemplo de estas especificaciones particulares para una columna de destilación:

C-101 (Distillation Column)

Equipment | Purchase Cost | Adjustments | Consumables | Throughput | Comments | Allocation

Selection

☒ Select **C-101**

☐ Request New

Name

Size

☒ Calculated (Design Mode)

☐ Set by User (Rating Mode)

Description

Name **C-101**

Type **Distillation Column**

Number of Units **1**

Actual Stages **0**

Max Diameter **2.000** m

Stage Height **0.400** m

Column Height **0.000** m

Column Diameter **0.000** m

Volume **0.000** L

Design Pressure **1.500** bar

ASME Vessel ? ☒

Aceptar Cancelar Ayuda

Figura AVI Especificaciones particulares para una columna de destilación.

Como se puede observar en la figura AVI, el programa ya tiene ciertas especificaciones preestablecidas para el diseño de una columna de destilación. Sin embargo, si se requiere modificar alguna de estas condiciones también se puede hacer.

Tal y como se observa anteriormente, se puede modificar para una columna de destilación la distancia entre las etapas, la altura de cada plato, el diámetro de columna, el diámetro de cada etapa, etc. Como ya se mencionaba, esto va a tener repercusiones tanto en la pureza como en los costos de construcción del equipo. Los datos que se requieran cambiar de aquí se harán en función de lo que el usuario quiera hacer o, en su defecto, de si se dispone ya de un equipo que se pueda utilizar para esta operación unitaria.

Cabe mencionar que entre las características especiales que se pueden especificar en este programa se encuentran, por ejemplo, el material del cual se va a fabricar la columna y el costo de este material. Todo ello se verá reflejado, como anteriormente se mencionaba, en el reporte de costos del proceso.

Se debe tener en cuenta que estas especificaciones serán diferentes dependiendo del tipo de operación unitaria que se trabaje. Por otro lado, el especificar esto puede representar una enorme ventaja porque aparte de costos puede dar una idea de la seguridad con la que se operará cada equipo. Es decir, si una reacción es altamente exotérmica y se elige como material de construcción del reactor al acero inoxidable, no será lo mismo que la construcción del mismo con otro material diferente, ya que se toma en cuenta también la transferencia de energía por conducción.

AVII. ESPECIFICACIONES EN LA SIMULACIÓN DE UN REACTOR DE MEZCLA COMPLETA

En este apéndice se mostrarán las diferentes ventanas que pueden abrirse al momento de especificar las condiciones de trabajo del reactor mencionado en la sección 3.1.1. La primera ventana en la cual se deben especificar datos es la mostrada en la figura AVII.1. En esta ventana se deberá especificar primeramente el tipo de reactor que se maneja, las opciones mostradas son adiabático, isotérmico y con remoción o suministro de calor. Así también se deberá especificar el consumo de potencia en la agitación y el agente de enfriamiento que se utilizará.

REACT-1 (Continuous Kinetic Reaction)

Oper.Cond's | Volumes | Reactions | Vent./Emissions | Labor, etc. | Description

Thermal Mode

☐ Set Final Temp. 25.00 °C

☒ Adiabatic

☐ Set Duty

☐ Heating 0.00 kcal/h

☒ Cooling 0.00 kcal/h

Power Consumption (for Agitation, etc.)

☒ Set Specific Power 0.000 kW/m³

☐ Set Total Power 0.00 kW

Allow for a Split After Reaction ☐

Gaseous Components Available to React ☒

Heat Transfer

Agent: Cooling Water

Inlet Temp. 25.00 °C

Outlet Temp. 30.00 °C

Rate 0.00 kg/h

Aceptar Cancelar Ayuda

Figura AVII.1 Condiciones de operación del reactor.

Como siguiente paso se deberán especificar las condiciones de diseño del reactor. Es decir, se especificarán el volumen ocupado por el mismo y el tiempo de residencia estimado que se requiere. Dichas condiciones se especifican en la ventana mostrada en la figura AVII.2.

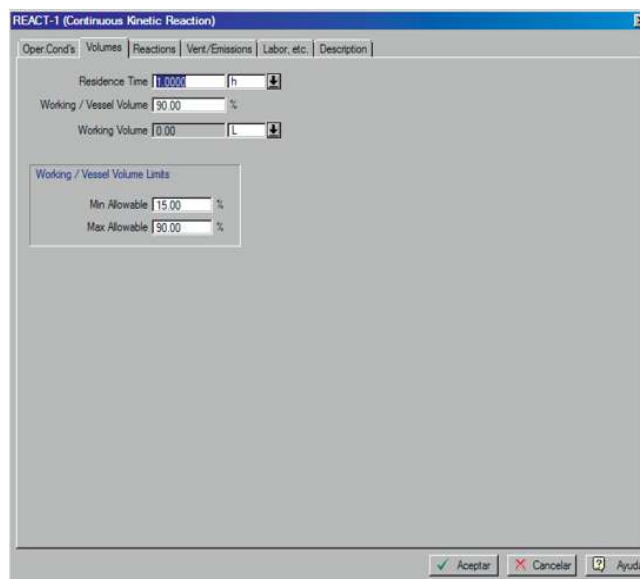


Figura AVII.2 Especificaciones de volumen del reactor.

Una vez realizado lo anterior se procede a especificar las reacciones existentes en este equipo. Para ello se selecciona la pestaña “*Reactions*” y se registran cada una de las reacciones existentes en una ventana como la mostrada a continuación:

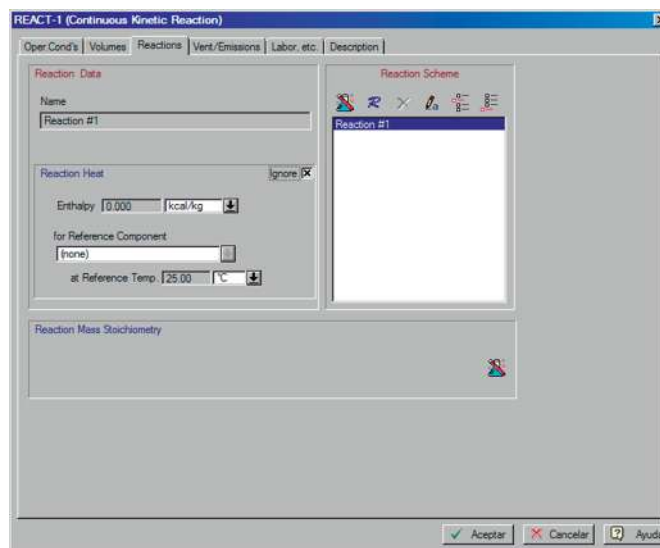


Figura AVII.3 Registro de reacciones existentes en el reactor.

Cabe también mencionar que las tres ventanas anteriores son las principales en el diseño de este. Sin embargo, existen ocasiones en las cuales se requiere especificar las condiciones de

ventilación para el manejo seguro del mismo, así como las especificaciones de quien operará este reactor. Dichas ventanas se muestran a continuación.

REACT-1 (Continuous Kinetic Reaction)

Operating Pressure: 1.013 bar

Venting

Vent Port / Stream: Out #1: (none)

Auto-Tag Stream: ☒

Operating Mode

☒ Open Vessel (Atmospheric)

☐ Pressurized Vessel with Relief Valve

Set At: 1.013 bar

Sweeping Gas (or Leaking Air)

Select Sweeping Agent from Registered

☐ Stock Mixture ☒ Pure Component

(none)

Flowrate: 0.000 m3/s

Emissions

Component Emission Data

Component	Emitted ?	Set By User	Emission %
1 Glycerol	☐	☐	0.000
2 Lauric Acid	☐	☐	0.000
3 Linoleic Acid	☐	☐	0.000
4 Linolenic Acid	☐	☐	0.000
5 Myristic Acid	☐	☐	0.000
6 Nitrogen	☐	☐	0.000
7 Oleic Acid	☐	☐	0.000
8 Oxygen	☐	☐	0.000
9 Palmitic Acid	☐	☐	0.000

Vent Condenser

☐ Off ☒ On at Temperature: 20.00 °C

Acceptar Cancelar Ayuda

Figura AVII.4 Especificación de emisiones y ventilación del reactor.

REACT-1 (Continuous Kinetic Reaction)

Labor

Labor	Amount	Units	Service
1 Operator	1.00	labor-hrs/hr	Operation

Auxiliary Utilities

Heating

Agent: Steam

Price: 12.0000 \$/MT

Rate: 0.00 kg/h

Duty: 0.00 kcal/h

Cooling

Agent: Cooling Water

Price: 0.0500 \$/MT

Rate: 0.00 kg/h

Duty: 0.00 kcal/h

Auxiliary Power

Price: 0.1000 \$/kWh

Rate: 0.00 kW

Size Utilization

Calculated Value: 0.00 %

For Throughput Analysis Use

☒ Calculated Value

☐ Assume (100%)

☐ Assume (0%)

Acceptar Cancelar Ayuda

Figura AVII.5 Especificaciones de labor de operación del reactor.

AVIII. ESPECIFICACIONES EN LA SIMULACIÓN DE UN DECANTADOR EN SUPER PRO DESIGNER

Como ya se pudo observar en la sección 3.1.3, existen ciertas condiciones que se requieren al momento de simular un decantador. La ventana principal de especificaciones fue mostrada en la figura 3.6. Sin embargo, es necesario especificar el porcentaje de remoción de cada uno de los compuestos presentes en la mezcla. Para ello, se recurre a la pestaña “Mat. Balance (balance de materia)”, mostrada en la figura AVIII.1 y se especifican el porcentaje de remoción de cada uno de los compuestos, así como la concentración requerida en cada una de las corrientes:

CENTRIFUGE-1 (Centrifugation)

Oper.Cond's | **Mat. Balance** | Utilities | Labor, etc. | Description

Removal of Particulate and Oily Components

Component Removal % ☒ Set by User ☐ Calculated

	Component	Oil Components Removal %	Solid Components Removal %
1	Nitrogen	0.00	0.00
2	Oxygen	0.00	0.00
3	Water	0.00	0.00

Oil Concentration in Oil Stream: 200.00 g/L

Solids Concentration in Solids Stream: 150.00 g/L

Aceptar Cancelar Ayuda

Figura AVIII.1 Especificaciones de remoción de componentes en un decantador.

Por otro lado, es necesario especificar si para que exista esta separación se requiere de algún agente de enfriamiento o, en su defecto, especificar la temperatura de salida para un buen balance de energía. Esto se logra a través de la pestaña “Utilidades (Utilities)”, mostrada en la figura AVIII.2.

The screenshot shows a software window titled "CENTRIFUGE-1 (Centrifugation)". It has five tabs: "Oper.Cond's", "Mat.Balance", "Utilities", "Labor, etc.", and "Description". The "Utilities" tab is selected. Inside this tab, there are several input fields and checkboxes. At the top, there is a "Exit Temperature" section with a "Set by User" checkbox (unchecked) and a temperature input field set to "25.00" with a unit dropdown set to "°C". Below this is a "Heating /Cooling" section. It contains an "Agent" subsection with a "Name" dropdown set to "Chilled Water", and "Inlet Temp." and "Outlet Temp." input fields set to "5.00" and "10.00" respectively, both with "°C" units. Below the agent section are three input fields: "Heating" (0.00 kcal/h), "Cooling" (0.00 kcal/h), and "Agent Rate" (0.00 kg/h), each with a unit dropdown. At the bottom of the utilities section is a "Power" section with a "Set by User" checkbox (unchecked) and a "Power" input field set to "0.000" with a unit dropdown set to "kW". At the bottom right of the window are three buttons: "Aceptar" (with a green checkmark icon), "Cancelar" (with a red X icon), and "Ayuda" (with a question mark icon).

Figura AVIII.2 Especificación de utilidades en un decantador.

Las pestañas restantes muestran, al igual que en los otros equipos, las especificaciones de labor de operario y descripción del equipo, las cuales no se analizarán por el momento.

AIX ANÁLISIS TÉCNICO DE CORRIENTES INTERNAS DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE BIODIESEL A PARTIR DE JATROPHA CURCAS CON RECIRCULACIÓN DE CATALIZADOR

Tabla AIX.1 Datos globales del proceso.

Tiempo de operación anual	7920 h
Caudal anual	35,751,720.91 l
Días de operación por año	330

Tabla AIX.2 Materiales a granel (proceso completo).

Material	kg/año
Ácido linoleico	12,231,913
Ácido linolénico	257,993
Ácido mirístico	54,634
Ácido oleico	13,658,463
Ácido palmítico	3,460,144
Residuos	23,559,299
Ácido esteárico	688,994
Metanol	3,468,264
KOH	79
Total	57,409,783

Tabla AIX.3 Detalles de corrientes.

Nombre de corriente	Metanol	Metanol1	KOH	Catalizador
Fuente	Entrada	Alm/metanol	Entrada	Catalizador
Destino	Alm/metanol	Prep. Metóxido	Catalizador	Prep. metóxido
Propiedades de corriente				
Temperatura (° C)	25	25	25	25
Densidad (g/l)	789.61	789.61	1882.1	1882.1

Flujo de componentes (kg/h)				
KOH	0	0	0.01	0.01
Metanol	441.7	441.7	0	0
Total (kg/h)	441.7	441.7	0.01	0.01
Nombre de corriente				
	Semilla	Trit1	Aceite	Torta
Fuente	Entrada	Triturado	Sep. Aceite	Sep. Aceite
Destino	Triturado	Sep. aceite	Almacenamiento	Salida
Propiedades de corriente				
Temperatura (° C)	25	25	25	25
Densidad (g/l)	1230.34	1230.34	904.01	2300.00
Flujo de componentes (kg/h)				
Ácido linoleico	1,544.433	1,544.433	1,544.433	0
Acido linolénico	32.575	32.575	32.575	0
Ácido mirístico	6.898	6.898	6.898	0
Ácido oleico	1,724.553	1,724.553	1,724.553	0
Ácido palmítico	436.887	436.887	436.887	0
Residuos	2,974.659	2,974.659	0	2,974.659
Ácido esteárico	86.994	86.994	86.994	0
Total (kg/h)	6,807	6,807	3832.341	2,974.659
Nombre de corriente				
	Aceite1	Prod. reactor	Fase ligera	Fase pesada
Fuente	Almacenamiento	Transesterifica	Sep. de fases	Sep. de fases
Destino	Transesterifica	Sep. de fases	Purificación	Sep2
Propiedades de corriente				
Temperatura (° C)	25	65	65	65
Densidad (g/l)	904.01	856.13	833.83	1,004.01
Flujo de componentes (kg/h)				
Glicerol	0	249.028	0	249.028
KOH	0	77.44	0	77.425
Ácido linoleico	1,544.433	178.013	0	178.013

Acido linolénico	32.575	3.755	0	3.755
Metanol	0	591.22	532.091	59.121
Linoleato de metilo	0	1,621.83	1,621.83	0
Linolenato de metilo.	0	34.22	34.22	0
Miristato de metilo	0	7.324	7.324	0
Oleato de metilo	0	1,810.385	1,810.385	0
Palmitato de metilo	0	460.598	460.598	0
Estereato de metilo	0	91.295	91.295	0
Ácido mirístico	6.898	0.795	0	0.795
Ácido oleico	1,724.553	198.774	0	198.774
Ácido palmítico	436.887	50.327	0	50.327
Ácido esteárico	86.994	10.027	0	10.027
Total (kg/h)	3,832.34	5,385.086	4,557.742	872.27
Nombre de corriente	Metanol3	B1	Metanol2	Alim
Fuente	Purificación	Purificación	Sep.2	Sep.2
Destino	Prep. metóxido	Enf. biod	Prep. metóxido	Purif. Glic.
Propiedades de corriente				
Temperatura (° C)	60	80	60	80
Densidad (g/l)	756.05	835.22	757.28	1,020.94
Flujo de componentes (kg/h)				
Glicerol	0	0	0.249	248.77
KOH	0	0	0	77.425
Ácido linoleico	0	0	0	178.013
Acido linolénico	0	0	0	3.755
Metanol	531.559	0.532	59.062	0.059
Linoleato de	0	1,621.83	0	0

metilo				
Linolenato de metilo.	0	34.22	0	0
Miristato de metilo	0.01	7.324	0	0
Oleato de metilo	0	1,810.385	0	0
Palmitato de metilo	0	460.59	0	0
Estereato de metilo	0	91.295	0	0
Ácido mirístico	0	0	0	0.795
Ácido oleico	0	0	0	198.774
Ácido palmítico	0	0	0	50.327
Ácido esteárico	0	0	0	10.027
Total (kg/h)	531.559	4026.183	59.311	767.96
Nombre de corriente	Glic	Prod1	P2	Recirc. ácidos
Fuente	Purif. glicerol	Purif. glicerol	Enf. Recirc.	Sep.Cat
Destino	Alm. Glicerol	Enf. Recirc.	Sep. cat.	Transesterifica
Propiedades de corriente				
Temperatura (° C)	25	290	60	68
Densidad (g/l)	1,257.56	816.29	959	879.07
Flujo de componentes (kg/h)				
Glicerol	247.535	1.244	1.244	1.244
KOH	0	77.425	77.425	
Ácido linoleico	0	178.013	178.013	178.013
Acido linolénico	0	3.755	3.755	3.755
Metanol	0.059	0	0	0
Ácido mirístico	0	0.795	0.795	0.795
Ácido oleico	0	198.774	198.774	198.774
Ácido palmítico	0.252	50.076	50.076	50.076
Ácido esteárico	0	10.027	10.027	10.027
Total (kg/h)	247.846	520.114	520.114	442.689

Nombre de la corriente	R CAT	Metóxido	Glicerol	B2
Fuente	Sep. cat	Prep. metóxido	Alm glicerol	Enf. biod
Destino	Prep. metóxido	Transesterifica	Salida	Alm. Biod.
Propiedades de corriente				
Temperatura (° C)	68	47.94	25	25
Densidad (g/l)	1,863.17	800.63	1,257.56	874.20
Flujo de componentes (kg/h)				
Glicerol	0	0.249	247.535	0
KOH	77.425	77.435	0	0
Metanol	0	1,032.32	0.059	0.532
Linoleato de metilo	0	0	0	1,621.83
Linolenato de metilo.	0	0	0	34.22
Miristato de metilo	0	0.0001	0	7.324
Oleato de metilo	0	0	0	1,810.21
Palmitato de metilo	0	0	0	460.59
Estereato de metilo	0	0	0	91.295
Palmitato de metilo	0	0	0	460.59
Estereato de metilo	0	0	0	91.295
Ácido palmítico	0	0	0	0.252
Total (kg/h)	77.425	1,110.06	247.846	4,026.18
Nombre de corriente	Biodiesel	Entrega		
Fuente	Alm. Biodiesel	Entrega biodiesel		

Destino j	Entrega biodiesel	Salida	
Propiedades de corriente			
Temperatura (° C)	25	25	
Densidad (g/l)	874.20	874.2	
Flujo de componentes (kg/h)			
Metanol	0.532	0.532	
Linoleato de metilo	1,621.83	1,621.83	
Linolenato de metilo.	34.22	34.22	
Miristato de metilo	7.324	7.324	
Oleato de metilo	1,810.21	1,810.21	
Palmitato de metilo	460.59	460.59	
Estereato de metilo	91.295	91.295	
Total (kg/h)	4,026.18	4,026.18	

AX ANÁLISIS TÉCNICO DE EQUIPOS DEL PROCESO JCR

Antes de comenzar a reportar los datos obtenidos por medio de la simulación en SPD, es importante saber la forma en que este simulador realiza los cálculos para especificaciones de cada uno de los equipos. En el caso de las columnas de destilación, el cálculo de dimensiones para el equipo, así como sus detalles de operación son calculados por métodos cortos (como la ecuación de Fenske, Gilliland, etc) y, debido a la gran diferencia existente entre los puntos de ebullición de los componentes separados, dichas especificaciones no difieren mucho entre realizarlas con métodos cortos o con un método riguroso. Se realizó la misma simulación de estas operaciones de separación utilizando métodos rigurosos con ASPEN PLUS y se compararon los resultados obtenidos con los de SPD sin obtener una variación considerable entre ellos. Una vez dejando en claro lo anterior se procede a reportar en las distintas tablas de este apéndice los resultados obtenidos en las características de equipos simulados en SPD para este proceso. Si se desea información más detallada de la forma de trabajo de SPD se puede consultar el manual de operación del mismo.

AX.1 LISTA DETALLADA DE EQUIPOS

Tabla AX.1 Características de la unidad de triturado de semilla.

TR1 (Molino)	
Número de unidades	1.00
Factor de instalación	0.50
Factor de mantenimiento	0.10
Factor de asignación de costos	1.0
Material de construcción	CS
Costo de compra (USD)	95000

Tabla AX.2 Especificaciones de la unidad de extracción de aceite.

CENT1 (Centrífuga de canasta)	
Número de unidades	1.00
Factor de instalación	0.50
Factor de mantenimiento	0.10
Factor de asignación de costos	1.0

Material de construcción	SS316
Costo de compra (USD)	95000
Factor Sigma	9,739.43 m ²

Tabla AX.3 Detalles de los tanques de control de materia prima.

Tanques Receptores	Tanque1	Tanque2	Tanque4	Tanque6
Número de unidades	1.00	1.00	1.00	1.00
Factor de instalación	0.30	0.30	0.30	0.30
Factor de mantenimiento	0.10	0.10	0.10	0.10
Factor de asignación de costos	1.0	1.0	1.0	1.0
Material de construcción	SS316	SS316	SS316	SS316
Costo de compra (USD)	47000	47000	190,000	48,000
Volumen	4710.31 l	621.54 l	1,536.8 l	5,117.31 l
Diámetro	1.26 m	0.64 m	0.87 m	1.3 m
Altura	3.78 m	1.92 m	2.60 m	3.89 m
Presión de diseño	1.52 bar	1.52 bar	1.52 bar	1.52 bar

Tabla AX.4 Características de la unidad de reacción para transesterificación.

Reactor (Reactor agitado)	
Número de unidades	1.00
Factor de instalación	0.30
Factor de mantenimiento	0.10
Factor de asignación de costos	1.0
Material de construcción	SS316
Costo de compra (USD)	645,000
Volumen	6,804.01 l
Diámetro	1.51 m
Altura	3.78 m
Presión de diseño	1.52 bar

Tabla AX.5 Especificaciones de la unidad de separación de fases subsecuente al reactor.

D1 (Decantador)	
Número de unidades	1.00
Factor de instalación	0.50
Factor de mantenimiento	0.10
Factor de asignación de costos	1.0
Material de construcción	SS316
Costo de compra (USD)	43,000
Volumen	1,783.3 l
Diámetro	0.77 m
Altura	3.84 m
Presión de diseño	1.52 bar

Tabla AX.6 Detalles de las columnas de separación de metanol y glicerol (Destilaciones).

Columnas de destilación	DEST1	DEST2	DEST3
Número de unidades	1.00	1.00	1.00
Factor de instalación	0.10	0.10	0.10
Factor de asignación de costos	1.0	1.0	1.0
Material de construcción	CS	CS	CS
Costo de compra (USD)	17,000	8,000	28,000
Diámetro	0.25 m	0.1 m	0.2 m
Altura	6 m	2.8 m	10 m
Presión de diseño	1.52 bar	1.52 bar	1.5 bar
No. De etapas actuales	15	7	25

Tabla AX.7 Características de las unidades de enfriamiento de biodiesel y glicerol.

Intercambiadores de calor	INT1	INT2
Número de unidades	1.00	1.00
Factor de instalación	0.50	0.50
Factor de mantenimiento	0.10	0.10
Factor de asignación de costos	1.0	1.0
Material de construcción	CS	CS
Costo de compra (USD)	1,000	1,000
Área de transferencia	0.26 m ²	0.25 m ²

Tabla AX.8 Especificaciones de la unidad de separación de potasa.

CENT2 (Centrífuga de canasta)	
Número de unidades	1.00
Factor de instalación	0.50
Factor de mantenimiento	0.10
Factor de asignación de costos	1.0
Material de construcción	SS316
Costo de compra (USD)	103,000
Factor Sigma	1,149.38 m ²

AXI ANÁLISIS ECONÓMICO DEL PROCESO JCR

AXI.1 ANÁLISIS GLOBAL

Tabla AXI.1 Detalle de costos globales del proceso.

Inversión total de capital	12,864,000 \$
Tasa de producto principal	35,751,720.91 L(STP) MP/año
Costos de operación	16,480,000 \$/año
Costo unitario de producto	0.46 \$/L(STP)
Producto principal	27,423,000 \$/año
Subproductos	5,145,597 \$/año
Ventas totales	32,569,000 \$/año
Margen bruto	49.40 %
Tasa de retorno	87.70 %
Tiempo de recuperación de capital	1.14 años
IRR (Después de impuestos)	40.86 %

AXI.2 ESTIMADO DE CAPITAL FIJO

Tabla AXI.2 Total de costos directos de planta.

Costo de compra de equipo	1,838,000
Instalación	678,000
Tuberías del proceso	643,000
Instrumentación	735,000
Aislamiento	55,000
Eléctricos	184,000
Infraestructura	827,000
Mejora de espacios	276,000
Instalaciones auxiliares	735,000

Tabla AXI.3 Total de costos indirectos de planta (USD).

Ingeniería	1,493,000
Construcción	2,090,000

AXI.3 COSTO TOTAL DE PLANTA

C=9,552,000 USD

AXI.4 CARGOS DEL CONTRATISTA Y CONTINGENCIA (USD)

Honorarios del contratista	478,000
Contingencia	955,000

AXI.5 COSTOS FIJOS DIRECTOS

C=10,985,000 USD

AXI.6 COSTO DE MANO DE OBRA

Tabla AXI.4 Análisis de costo de mano de obra por puesto ocupado en el proceso.

Cargo	Costo unitario(\$/h)	Monto anual (h)	Costo anual (\$)	%
Operador	1.4	121,063	169,851	39.22
Supervisor	4.2	31,680	133,056	30.73
Gerente	6.9	11,314	78,069	18.03
Analista Químico	2.3	22,269	52,046	12.02

AXI.7 COSTO DE SERVICIOS

Tabla AXI.5 Análisis de costos por tipo de servicio.

Servicio	Monto anual	Unidades de referencia	Costo anual (\$)	%
Electricidad	520,306	kW h	52,031	16.67
Vapor	8,266,176	kg	99,194	31.78
Agua de enfriamiento	298,623,003	kg	14,931	4.78
Vapor alta presión	1,177,495	kg	60,970	19.53
Agua refrigerante	212,515,881	kg	85,006	27.23