

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL

Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas

Optimización exergoeconómica de un reactor batch para la
producción de biodiésel a partir de aceite de palma usado

PROYECTO INTEGRADOR

Previo la obtención del Título de:

Ingeniero Químico

Presentado por:

Karla Vanessa Ajoy Rendón

José Antonio Sigüenza Polo

GUAYAQUIL - ECUADOR

Año: 2023

DEDICATORIA

El presente proyecto se lo dedico a mis padres, hermanos y abuelos por estar junto a mí desde el inicio e impulsarme a concluir esta meta.

Especialmente a mi mamá, quien, en ningún momento dudó de mí y me dio la fuerza que necesitaba para seguir.

A mi compañero de tesis por ser mi apoyo y un ejemplo de superación para lograr nuestros objetivos.

A mis mejores amigas quienes son incondicionales y a todos quienes estuvieron mientras cursaba el camino hacia mi propósito profesional y aportaron invaluablemente para completarlo.

Karla Vanessa Ajoy Rendón

DEDICATORIA

Este proyecto se lo dedico a mis padres, compañera de tesis y mi familia. Quienes fueron esenciales en este trayecto de mi vida y los que ya no me acompañan. A estas personas que han sido piedra angular en mi vida.

Especialmente, quiero dedicar este trabajo a mis padres y hermanas, quienes constantemente me han demostrado la fuerza y actitud para enfrentar los problemas.

A mis amigas y amigos de la ESPOL y colegio, que me aportan con diferentes puntos de vista y apoyo incondicional.

José Antonio Sigüenza Polo

AGRADECIMIENTOS

Mi sincero agradecimiento principalmente a Dios por brindarme la fortaleza para culminar mi meta profesional.

A cada uno de los docentes quienes contribuyeron de manera crucial a mi crecimiento académico.

Y, en general, a la Escuela Superior Politécnica del Litoral por formarme en sus aulas.

Karla Vanessa Ajoy Rendón

AGRADECIMIENTOS

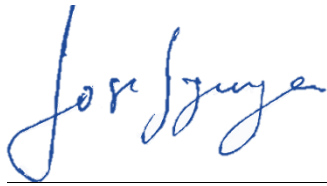
Mi más sincero agradecimiento a mi familia y Dios, especialmente a mis padres que fueron siempre incondicionales. Doy gracias al ánimo y las facilidades que me han brindado a lo largo de mi vida. Además, son testigos de mi crecimiento personal y profesional.

También a los docentes quienes fueron la guía del camino no solo académico, sino personal.

José Antonio Sigüenza Polo

DECLARACIÓN EXPRESA

“Los derechos de titularidad y explotación, nos corresponde conforme al reglamento de propiedad intelectual de la institución; *Karla Vanessa Ajoy Rendón* y *José Antonio Sigüenza Polo* damos nuestro consentimiento para que la ESPOL realice la comunicación pública de la obra por cualquier medio con el fin de promover la consulta, difusión y uso público de la producción intelectual”



**José Antonio
Sigüenza Polo**



**Karla Vanessa Ajoy
Rendón**

EVALUADORES

Ing. Nadia Flores, MSc.

PROFESOR DE LA MATERIA

Ing. Diana Tinoco, PhD.

PROFESOR TUTOR

Ing. Andrea Barcia, MSc.

PROFESOR COTUTOR

RESUMEN

La necesidad de energía, el consumo exponencial de los combustibles fósiles y el daño constante al medio ambiente han impulsado la búsqueda de alternativas novedosas como la producción de biodiésel a partir de materia vegetal. Sin embargo, se deben cubrir las aristas para presentar un proyecto a escala industrial. En la actualidad, existen estudios que presentan análisis técnicos, económicos y operativos, pero no se considera la termodinámica y las pérdidas que existen. Este proyecto apunta a determinar condiciones de operación que minimicen el costo exergo económico de un proceso de transesterificación batch a partir de aceite de cocina usado. Generalmente existen pérdidas de energía debido a irreversibilidades e ineficiencias que se pueden ajustar dependiendo de variables de entrada como temperatura, concentración o tiempo. Este proyecto encuentra dichas condiciones y el ahorro económico que se tendría. Se realizó un análisis exergético incluyendo a todas las corrientes que intervienen en el proceso. Además, fue necesario incluir un análisis económico y considerar la exergía para determinar el costo de la exergía no aprovechable. Para determinar las condiciones óptimas de operación, se desarrolló el algoritmo genético en *Python*. Posteriormente, se generaron gráficas para visualizar la influencia de las variables en el proceso. Se obtuvo un costo exergético mínimo de 20.56 \$/h operando durante 47.69 minutos a 55.77 °C con una relación molar de 6.31:1 y 0.83% en concentración de NaOH. Finalmente, los ajustes se deben realizar en la alimentación debido a que el quemador es el equipo que más exergía destruye y las variables más significativas en el proceso son la temperatura, el tiempo y la concentración de catalizador.

Palabras Clave: Biodiésel, algoritmo genético, optimización, exergía

ABSTRACT

The hunt for novel alternatives, including the manufacture of biodiesel from plant matter, has been sparked by the demand for energy, the exponential consumption of fossil fuels, and the ongoing harm to the environment. However, to propose a project of industrial scope, the margins must be covered. Studies are already available that give technical, economic, and operational analysis; nevertheless, thermodynamics and current losses are not considered. In this study, the operational parameters that reduce a batch transesterification process's overall economic cost will be identified. In general, energy losses resulting from irreversibilities and inefficiencies may be modified based on input factors like temperature, concentration, or duration. This initiative creates such circumstances and the financial value that would be rescued. All the currents that interfere with the process were included in an energetic study that was conducted. To calculate the cost of wasted energy, it was also important to incorporate an economic analysis and take the energy into account. The genetic algorithm will be created in Python to identify the ideal operating conditions. Graphs were subsequently created to show how the factors affected the procedure. Operating for 47.69 minutes at 55.77 °C with a molar ratio of 6.31:1 and a concentration of 0.83% NaOH, a minimum exergetic cost of 20.56 \$/h was attained. The supply must also be adjusted since the burner is the piece of machinery that wastes the most energy and because temperature, time, and catalyst concentration are the three key factors in the process.

Keywords: *Biodiesel, genetic algorithm, optimization, exergy*

ÍNDICE GENERAL

EVALUADORES.....	7
RESUMEN	I
<i>ABSTRACT</i>	II
ÍNDICE GENERAL	III
ABREVIATURAS.....	VI
SIMBOLOGÍA.....	VII
ÍNDICE DE FIGURAS	VIII
ÍNDICE DE TABLAS.....	IX
CAPÍTULO 1	1
1. Introducción	1
1.1 Descripción del problema	1
1.2 Justificación del problema	2
1.3 Objetivos	4
1.3.1 Objetivo General	4
1.3.2 Objetivos Específicos	4
1.4 Marco teórico.....	4
1.4.1 Aceite vegetal usado.....	4
1.4.2 Reacción de transesterificación.....	6
1.4.3 Biodiésel	7
1.4.4 Exergía	7
1.4.4.1 Exergía química.....	8
1.4.4.2 Exergía física.....	8
1.4.4.3 Exergía destruida	8

1.4.4.4	Eficiencia exergética.....	8
1.4.5	Optimización exergoeconómica	9
1.4.5.1	Análisis exergoeconómico	9
1.4.5.2	Algoritmo genético	9
CAPÍTULO 2	11
2.	Metodología.....	11
2.1	Descripción de la metodología empleada	11
2.2	Descripción del proceso	11
2.2.1	Suposiciones.....	12
2.3	Análisis exergético.....	13
2.3.1	Exergía	13
2.3.2	Exergía química	14
2.3.2.1	Cálculo de átomos de carbono, hidrógeno y oxígeno en la materia orgánica.....	14
2.3.2.2	Cálculo de poder calorífico superior (PCS) para combustibles líquidos.....	15
2.3.2.3	Cálculo de la entropía de la materia orgánica	16
2.3.2.4	Cálculo de la exergía química de la materia orgánica.....	16
2.3.3	Exergía física	17
2.3.3.1	Cálculo del calor específico	17
2.3.4	Exergía destruida	18
2.3.5	Eficiencia exergética	19
2.4	Análisis exergoeconómico	19
2.4.1	Costo de exergía.....	20
2.4.1.1	Costo de exergía de fuel.....	20
2.4.1.2	Balance exergoeconómico.....	20

2.4.2	Ecuaciones auxiliares	20
2.4.3	Costo de exergía destruida	21
2.4.4	Optimización multiobjetivo.....	21
2.4.4.1	Función objetivo	21
2.4.4.2	Metodología de optimización	21
2.4.4.3	Selección de algoritmo	22
CAPÍTULO 3		24
3.	Resultados y análisis	24
3.1	Análisis exergético.....	24
3.2	Análisis exergoeconómico	26
3.3	Optimización del proceso	28
CAPÍTULO 4		31
4.	Conclusiones y recomendaciones.....	31
4.1	Conclusiones	31
4.2	Recomendaciones.....	32
BIBLIOGRAFÍA		33
APÉNDICES.....		38
APÉNDICE A.....		39
APÉNDICE B.....		40
APÉNDICE C		43
APÉNDICE D		46

ABREVIATURAS

AIE	Agencia Internacional de la Energía
DFP	Diagrama de flujo de proceso
ESPOL	Escuela Superior Politécnica del Litoral
INEN	Instituto Ecuatoriano de Normalización
PCA	<i>Principal Component Analysis</i>
ASTM	Sociedad Estadounidense para Pruebas y Materiales
TULAS	Texto Unificado de Legislación Secundaria del Ministerio del Ambiente

SIMBOLOGÍA

°C	Grados centígrados
%	Porcentaje
% m/m	Porcentaje en masa
GJ	Gigajulio
g	Gramos
KOH	Hidróxido de potasio
NaOH	Hidróxido de sodio
kg	Kilogramo
kJ	Kilojulio
kmol	Kilomol
mg	Miligramo
MJ	Megajulio
mL	Mililitro
mm²	Milímetro cuadrado
mol	Mol
I₂	Yodo molecular
<i>c_D</i>	Costo de exergía destruida
<i>c_{esp}</i>	Costo específico
<i>c^F</i>	Costo de exergía de fuel
<i>e</i>	Exergía
<i>h</i>	Hora
<i>m</i>	Flujo
<i>Z</i>	Índices económicos

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 <i>Reacción de transesterificación para la producción de biodiésel</i>	6
Figura 2 <i>Diagrama de flujo del proceso de producción de biodiésel a partir de aceite de palma africana usado</i>	12
Figura 3 <i>Diagrama de algoritmo de optimización</i>	22
Figura 4 <i>Gráfica costo de la exergía destruida vs temperatura vs concentración de catalizador</i>	30

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1	<i>Propiedades físicas y químicas del aceite de palma usado</i>	5
Tabla 2	<i>Composiciones de los triglicéridos de aceite de cocina usado</i>	5
Tabla 3	<i>Propiedades físicas y químicas del biodiésel</i>	7
Tabla 4	<i>Composición molar de los triglicéridos en el aceite de cocina</i>	13
Tabla 5	<i>Condiciones de la población inicial</i>	23
Tabla 6	<i>Condiciones para funciones principales</i>	23
Tabla 7	<i>Resultados de flujos de exergía caso optimizado</i>	25
Tabla 8	<i>Resultados de flujos de exergía caso base Alcívar y Risco (2022)</i>	26
Tabla 9	<i>Exergía de fuel, producto y destruida para caso optimizado y caso base Alcívar y Risco (2022)</i>	26
Tabla 10	<i>Resultados de análisis exergoeconómico del caso optimizado y el caso base</i>	28
Tabla 11	<i>Resultados de parámetros óptimos de operación</i>	29

CAPÍTULO 1

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Descripción del problema

El consumo energético ha aumentado considerablemente desde la década de los 70s y con ello, los gases de efecto invernadero de acuerdo con la AIE (Agencia Internacional de la Energía) (International Energy Agency, 2019). La gran necesidad energética de la población ha llevado a la búsqueda de sustituyentes de los combustibles fósiles. En la actualidad, el empleo de aceites vegetales y grasas animales como fuentes de biocombustibles brindan una alternativa eco amigable como sustituyente de los hidrocarburos (Datta et al., 2019).

Este aceite se utiliza en muchas industrias por sus múltiples empleos, en el sector industrial. Ecuador es el onceavo productor a nivel mundial de aceite (IndexMundi, 2022). Sin embargo, luego de emplearlo para sus usos cotidianos no hay reutilización, este termina en vertederos o en red de alcantarillado al final de su ciclo. Aquello ocurre por falta de tecnología disponible para reutilizarlo lo cual genera un impacto ambiental negativo (Hernández, 2019). Debido a ello, es fundamental reciclarlo y convertirlo a biocombustible.

En el proceso de transesterificación un elevado porcentaje de exergía es perdido en el reactor donde ocurre la reacción. Existe un alto costo en los reactivos para producir el biodiésel. Aproximadamente el 75% de este se debe a los materiales de ingreso. Debido a lo mencionado, reusar el aceite de cocina abarata los insumos económicos que se invierten (Blanco-Marigorta et al., 2013).

El análisis exergo económico permite calcular la exergía destruida de un reactor batch y los costos asociados. Una optimización exergoeconómica permitiría encontrar parámetros de operación óptimos para que con ellos se

minimice el costo operativo de la producción de biodiésel y se maximice la eficiente exergética (Julio et al,2021).

Existen varias restricciones en el proceso. Una de ellas es la seguridad industrial, ya que es necesario encontrar condiciones óptimas de temperatura, presión y concentraciones de flujos de ingreso al reactor. Todas estas para minimizar tanto costos como exergía perdida, teniendo en consideración que dichos parámetros deben ser controlados y no exceder determinados valores.

Además, el biodiésel que se obtiene como producto debe estar dentro de los parámetros de las normas ASTM (Sociedad Estadounidense para Pruebas y Materiales) D675, EN 14214 e INEN 2482:2009 y de TULAS (Texto Unificado de Legislación Secundaria del Ministerio del Ambiente) por sus emisiones líquidas y gaseosas. Así mismo, es necesario que la calidad del agua que se emplea en el proceso esté dentro de la normativa descrita en el Anexo 1 del Libro VI de TULAS categorizada como agua de uso industrial. Las emisiones gaseosas producidas por la combustión también deben verse reguladas por el Anexo 3 del Libro VI de TULAS. Por último, en el campo económico se deben contemplar los precios de los equipos y la cantidad de dinero que la empresa está dispuesta a invertir para el proyecto.

1.2 Justificación del problema

Una de las estrategias del modelo circular es utilizar los desechos que la materia prima genera al llegar al fin de su vida útil para reincorporarlo en un nuevo proceso (Suárez-Eiroa,2019). Actualmente, la palma africana es uno de los elementos de mayor producción de Ecuador (ESPAC, 2021). El país se sitúa en el onceavo productor de palma africana a nivel global, por lo que su producción de desechos es considerable (IndexMundi, 2022). Debido a esto, encontrar una utilidad para dichos desechos es significativo para las industrias nacionales.

El estudio de Aghbashlo et al. (2018) presenta resultados donde se realizó una evaluación exergoeconómica y exergoambiental para optimizar la síntesis de biodiésel a partir de aceite de cocina usado empleando un reactor. En esta se reportaron que bajo una relación molar de alcohol y aceite de 7.4, una temperatura de reacción de transesterificación de 60 °C y un tiempo de residencia de 10 minutos el costo de la exergía para obtener biodiésel fue de 2.23 USD/GJ y su impacto ambiental de 1.32 mPts/GJ según los estándares de ASTM.

Existen estudios relacionados a una optimización exergoeconómica, especialmente en un proceso de trigeneración (Baghernejad, Yaghoubi, & Jafarpur, 2016; Chitsaz, Mehr, & Mahmoudi, 2015). En estos estudios se encuentran las condiciones óptimas con un análisis de frente de Pareto.

Encontrar parámetros ideales mediante un lenguaje de programación resulta una alternativa aplicable para darle valor a dichos residuos de aceite. Dentro de este contexto, el propósito del presente proyecto busca realizar una optimización exergoeconómica del reactor de transesterificación para la producción de biodiésel a partir de aceite de palma usado con el fin de minimizar costos y exergía destruida para hacer más eficiente el proceso usando una optimización con algoritmo genético.

El uso del algoritmo genético para la optimización es uno de los modelos que más se aplican en el área de ingeniería. Entre las mayores ventajas que este ofrece está la convergencia para problemas no lineales, la eficiencia en la búsqueda de óptimas soluciones y simplicidad en manipular los parámetros o variables a mutar. Además, resulta cómodo para el usuario ya que, basado en el principio de selección natural de Charles Darwin, el sistema se encarga de evaluar el candidato más apto para el problema, en este caso el resultado óptimo.

Así mismo, el empleo de estos algoritmos en el área ingenieril exhibe su transversalidad y potencial. Esta tesis se enfoca en la aplicación dentro del área termodinámica, exergía y economía. Por ejemplo, Abid realizó un estudio en 2020, en el que se encontraron las condiciones óptimas de operación que minimicen los costos de la exergía destruida en un proceso multi efecto de desalinización de agua (Abid, 2020). Además, Jamil ha realizado una optimización exergoeconómica de un intercambiador de calor tubo y coraza (Jamil, 2020). La aplicación de un algoritmo genético nos brinda un apoyo confiable de encontrar las mejores condiciones de operación que minimicen el costo de exergía destruida en un proceso de producción de biodiésel.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Optimizar desde el punto de vista exergo económico un reactor batch de transesterificación de aceite de palma usado mediante el empleo de un algoritmo genético para la reducción de costos operativos y la exergía destruida.

1.3.2 Objetivos Específicos

1. Desarrollar el análisis exergético del reactor batch para la producción de biodiésel a través del planteamiento de balances másicos y exergéticos acoplados al modelo cinético del reactor.
2. Plantear el análisis exergoeconómico del reactor en función de las variables de operación usando lenguaje de programación.
3. Implementar un algoritmo genético para la optimización del reactor batch para minimizar el costo de exergía destruida del proceso de transesterificación

1.4 Marco teórico

1.4.1 Aceite vegetal usado

La palma africana es una especie vegetal que fue introducida en Ecuador a principios de los años cincuenta como una alternativa más económica para el aceite de cocina. Sin embargo, la producción masiva de este cultivo ha sido

proporcional con la cantidad de deshechos de este. Actualmente, a nivel mundial la producción de aceite de palma es de 77.2 millones de toneladas al año. Dentro del ámbito local, se generan 470, 000 toneladas métricas de este producto (Producción Agrícola Mundial, 2022). La biomasa de sus residuos se puede aprovechar como materia prima para derivar distintos productos como biodiésel, biometanol, antioxidantes, etc. (Chhetri et al., 2008).

El aceite de palma está compuesto por ácidos grasos saturados e insaturados, principalmente ácido palmítico y oleico. También posee ácido linoleico y linolénico en porcentajes menores.

Tabla 1

Propiedades físicas y químicas del aceite de palma usado

Parámetro	Rango
Propiedades físicas	
Densidad [g/mL]	0.91 - 0.924
Punto de inflamación [°C]	200 - 298
Humedad [%]	0.02 – 0.166
Peso molecular [kg/kmol]	670 – 873.4
Propiedades químicas	
Índice de acidez [mgKOH/g]	0.5 -17.85
Índice de saponificación [mgKOH/g]	188.2 - 207
Índice de yodo [gI ₂ /100g]	83 - 141.5

Nota. Fuente: Carlini (2014). Mero Benavides (2022).

Tabla 2

Composiciones de los triglicéridos de aceite de cocina usado

Triglicérido	%p/p
PLO	11.3
PLP	12.7
OOO	6.6

POO	26.2
POP	33
PPP	7.2
Ácido palmítico	3

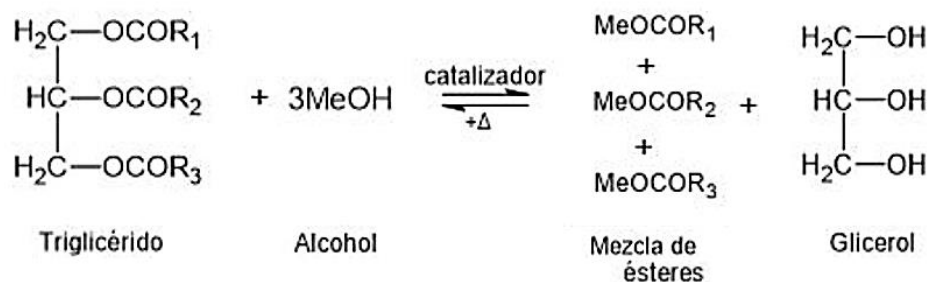
Nota. P: Palmítico, L: Linoleico, O: Oléico. Fuente. Tan et al. (1997).

1.4.2 Reacción de transesterificación

El biodiésel puede ser producido por varios métodos, uno de los más usados es el de la transesterificación en donde se lo genera a partir de grasas animales o vegetales. Los triglicéridos, diglicéridos y monoglicéridos son transformados en ácidos grasos libres en presencia de un alcohol y un catalizador. Los alcoholes más usados son metanol y etanol. La reacción de transesterificación se ilustra en la siguiente *Figura 1*.

Figura 1

Reacción de transesterificación para la producción de biodiésel



Nota. Fuente. Schuchardt et al., (1998).

Lo que se aprovecha de la reacción son los metil ésteres de los ácidos grasos. Un producto secundario de la reacción es la glicerina, la cual es una impureza del biodiésel y es necesario separarla. El tipo de metil éster obtenido dependerá de la fuente de ácidos grasos usados. Por ejemplo, si la materia prima tiene un mayor contenido de ácido palmítico, el biodiésel tendrá mayor contenido de metil éster de este ácido. El biodiésel tiene alto poder calorífico,

el cual es aprovechado como fuente energía para la combustión (Zahan, 2018).

1.4.3 Biodiésel

El biodiésel es un combustible considerado no tóxico que genera un bajo impacto ambiental. Es posible producirlo a partir de fuentes renovables y se presenta como una mejor alternativa en comparación al diésel. Esto debido su alta biodegradabilidad manteniendo las propiedades fisicoquímicas que se observan en la *Tabla 3*. Por ello, utilizar los residuos del aceite de cocina para producirlo, así como minimizar las irreversibilidades que generan la destrucción de exergía en todo el proceso, significan un ahorro financiero en la industria haciéndolo llamativo.

Tabla 3

Propiedades físicas y químicas del biodiésel

Parámetro	Valor
Propiedades físicas	
Densidad 15 °C [g/mL]	0.878 ± 0.001
Punto de inflamación [°C]	254 ± 22
Humedad [%]	0.048 ± 0.038
Viscosidad cinemática 40 °C [mm ² /s]	4.90 ± 0.13
Propiedades químicas	
Poder calorífico [MJ/kg]	38.23 ± 0.44
Índice de saponificación [mgKOH/g]	206.18 ± 15.21
Índice de yodo [gI ₂ /100g]	67.69 ± 0.05
Acidez [mgKOH/g]	0.37 ± 0.18

Nota. Fuente. Raqeeb y Bhargavi, (2015). Mero Benavides (2022).

1.4.4 Exergía

La exergía se denomina la energía de alta calidad que es el máximo trabajo útil en un proceso reversible. En la actualidad, se busca minimizar a exergía destruida pues ello representa una pérdida económica y aumento de impacto ambiental. El aumento de la eficiencia exergética significa una reducción de la exergía perdida. Este trabajo perdido proviene principalmente de irreversibilidades de operaciones unitarias dentro del proceso global (Wu y Wang, 2020).

1.4.4.1 Exergía química

La exergía química es el trabajo máximo que es posible obtener cuando se coloca a las corrientes con T_0 y P_0 para producir un equilibrio químico con el entorno (Kojas, 2012). Para compuestos puros esta se puede encontrar tabulada en fuentes bibliográficas como Bejan et al. (1996) o Morris y Szargut (1986).

1.4.4.2 Exergía física

La exergía física es la cantidad de trabajo máximo que es posible obtener cuando la corriente es llevada de su estado inicial a su estado muerto con T_0 y P_0 con procesos de origen físicos que engloban interacciones térmicas con el ambiente (Kojas, 2012).

1.4.4.3 Exergía destruida

La exergía destruida también conocida como trabajo perdido o irreversibilidad es la diferencia de la exergía de fuel menos la exergía del producto. Esta se relaciona directamente con la entropía que se genera debido a procesos reales irreversibles que ocurren. En un proceso real el trabajo perdido es positivo, mientras que, en un proceso reversible toma el valor de cero (Cengel y Boles, 2015).

1.4.4.4 Eficiencia exergética

La eficiencia exergética es la efectividad de la energía utilizada siendo la relación entre lo que se obtiene como producto final del proceso entre los recursos que ingresan para generar el mismo (Moran et al, 2014).

1.4.5 Optimización exergoeconómica

1.4.5.1 Análisis exergoeconómico

El análisis exergoeconómico también denominado termoeconómico se refiere a la combinación de balances exergéticos y económicos. En este se fusiona la exergía con los costos para optimizar el proceso global. Se consideran las ineficiencias de este y lo que estas representan económicamente con el fin de reducir tanto la inversión como las inefectividades (Bejan et al., 1996).

1.4.5.2 Algoritmo genético

Para la optimización exergoeconómica, se ha propuesto la aplicación de un algoritmo genético. Este algoritmo se basa en la teoría de selección natural propuesta por biólogos a mediados del siglo XX inspirado en la naturaleza (Lambora et al., 2019). El modelo genético propone un método de selección donde se escoge la opción más apta para sobrevivir dentro de un grupo de candidatos. Ahora, en la naturaleza, dependiendo del entorno, la población muta de acuerdo a las condiciones que se tengan que enfrentar. Esta mutación se debe a un cambio en los genes de los progenitores. Por lo que, se deben considerar todas las opciones posibles en las que los alelos produzcan un individuo para sobrevivir. Es ahora cuando se aprovechan las ventajas de la computación. El algoritmo genético considera estas combinaciones, mutaciones y valora los mejores candidatos disponibles a sobrevivir en su entorno. Una característica importante del algoritmo genético es el componente estocástico y su amplio uso en problemas de optimización. Además, dentro de la ingeniería es normal que los problemas se describan procesos dinámicos, ecuaciones diferenciales dependientes de tiempo.

Para estos casos, los algoritmos evolutivos son una opción ampliamente usada, ya que no presenta problemas de convergencia ni continuidad.

CAPÍTULO 2

2. METODOLOGÍA

2.1 Descripción de la metodología empleada

La metodología aplicada fue la siguiente:

1. Realizar el diagrama de flujo de procesos (DFP) e identificar los equipos: caldera, quemador y reactor batch.
2. Escribir las ecuaciones de costos y exergía en *Python* en modo de métodos para usarlas como funciones objetivo en el algoritmo de optimización.
3. Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales con la función 'odeint' de 'scipy' la cual resuelve el problema con el método de Runge-Kutta de 4to orden.
4. Especificar las condiciones iniciales para que se pueda resolver el sistema de ecuaciones.
5. Aplicar el modelo de algoritmo genético de la librería PyGAD para las funciones objetivo de costos y exergía.
6. Encontrar las condiciones óptimas de operación.

El lenguaje de programación usado para el desarrollo del presente proyecto fue *Python* 3.8.8 en el entorno de Google Colab.

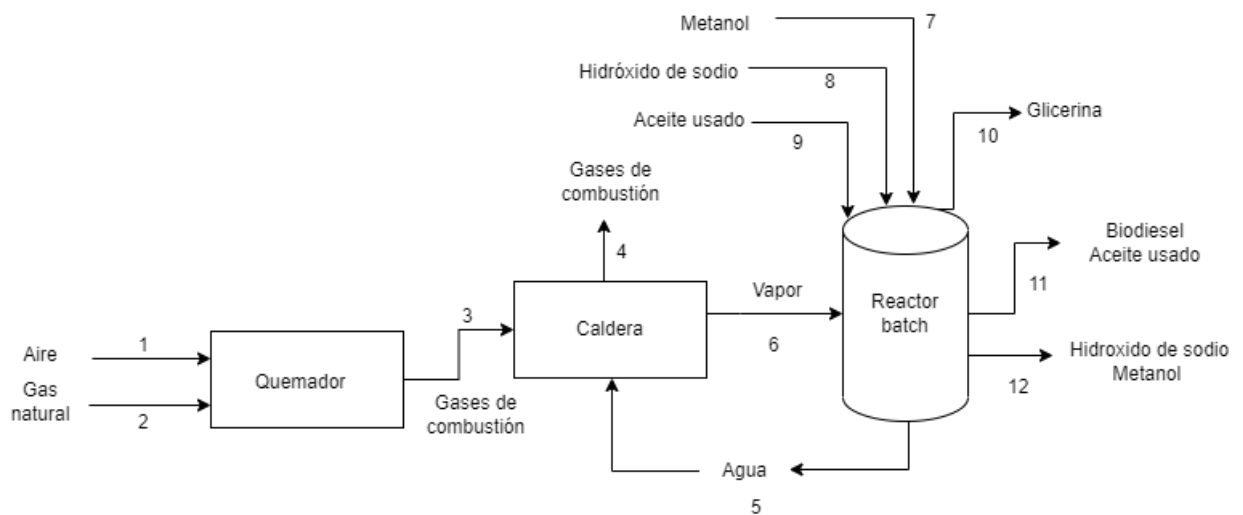
2.2 Descripción del proceso

La obtención de biodiésel a partir de aceite usado de cocina parte de un quemador E-101 y una caldera E-102 donde el aire (corriente 1) y el gas natural (corriente 2) generan gases de combustión (corriente 3) mediante una reacción de combustión. En la caldera

salen dichos gases (corriente 4) y entra agua potable (corriente 5) que es convertida a vapor. Este vapor es admitido al reactor R-101 (corriente 6). También ingresan reactivos como metanol (corriente 7) e hidróxido de sodio (corriente 8) y el aceite de cocina usado (corriente 8). Mediante la reacción de transesterificación estos son convertidos en glicerina (corriente 10) y biodiésel (corriente 11) como se observa en la *Figura 2*. Generando así el combustible a partir de residuos industriales de aceite.

Figura 2

Diagrama de flujo del proceso de producción de biodiésel a partir de aceite de palma africana usado



2.2.1 Suposiciones

En el presente proyecto se generar las siguientes suposiciones para llevar a cabo el análisis:

- El reactor opera de manera estacionaria.
- No hay acumulación en el sistema.
- La eficiencia del caldero es del 90%.

- La eficiencia de la chaqueta del reactor es del 90%.
- No existen pérdidas de calor en el quemador.
- Existen pérdidas de calor en la chaqueta del reactor.
- El calor específico promedio del biodiésel tiene un valor de $521.55 \frac{J}{mol}$.
- La composición molar del aceite usado de cocina es:

Tabla 4

Composición molar de los triglicéridos en el aceite de cocina

Triglicérido	%
PLO	0.117054
PLP	0.12756
OOO	0.070604
POO	0.272034
POP	0.333053
PPP	0.070401
Ácido palmítico	0.009294

Nota. P: Palmítico, L: Linoleico, O: Oléico. Fuente. Tan et al. (1997).

- Existe una relación estequiométrica entre el aire y el gas natural.
- El reactor incluye una separación de fases.
- El reactor es de tipo batch y posee un agitador.
- El costo de aire y de aceite de cocina usado es de \$0/h.

2.3 Análisis exergético

2.3.1 Exergía

En caso de que haya carencia de procesos nucleares, magnéticos, eléctricos y de tensión superficial, la exergía total de cada corriente se define como la sumatoria de las exergías presentes en cada corriente considerando la física y química y asumiendo que la cinética y potencial son nulas o despreciables (Dincer & Cengel, 2001). La siguiente ecuación lo indica por cada corriente:

$$e^T = e^{CH} + e^{PH} [kJ] \quad (1)$$

Donde:

e^{CH} = Exergía química [kJ]

e^{PH} = Exergía física [kJ]

2.3.2 Exergía química

La exergía química de una mezcla es calculada mediante la siguiente ecuación obtenida de Aghbashlo et al.(2017):

$$e^{CH} = n \left(\sum x_i e_i^{CH} + R T_0 \sum x_i \ln x_i \right) [kJ] \quad (2)$$

Donde:

n = moles de la mezcla [mol]

x_i = composición molar del componente i

e_i^{CH} = exergía química del componente i [$\frac{kJ}{mol}$]

R = Constante de gases ideales [$\frac{atmL}{molK}$]

T_0 = Temperatura ambiente [K]

2.3.2.1 Cálculo de átomos de carbono, hidrógeno y oxígeno en la materia orgánica

Se utilizó la ecuación de Song et al. (2012) para el cálculo de los átomos presentes en los componentes orgánicos:

$$m = \frac{10 C}{12.011} [mol] \quad (3)$$

$$n = \frac{10 H}{1.008} [mol] \quad (4)$$

$$p = \frac{10 O}{15.999} [mol] \quad (5)$$

$$q = \frac{10 N}{14.007} [mol] \quad (6)$$

$$r = \frac{10 S}{32.066} [mol] \quad (7)$$

Donde:

C = Porcentaje másico de carbono en la materia orgánica [%]

H = Porcentaje másico de hidrógeno en la materia orgánica [%]

O = Porcentaje másico de oxígeno en la materia orgánica [%]

N = Porcentaje másico de nitrógeno en la materia orgánica [%]

S = Porcentaje másico de azufre en la materia orgánica [%]

2.3.2.2 Cálculo de poder calorífico superior (PCS) para combustibles líquidos

Se empleó la ecuación de Song et al. (2012) que, a su vez, se obtuvo de Channiwala et al. (2002) para el cálculo del PCS:

$$PCS = 0.3491 C + 1.17383 H + 0.1005 S - 0.1034 O - 0.0151 N - 0.0211 A \left[\frac{MJ}{kg} \right] \quad (8)$$

Donde:

C = Porcentaje másico de carbono en la materia orgánica [%]

H = Porcentaje másico de hidrógeno en la materia orgánica [%]

O = Porcentaje másico de oxígeno en la materia orgánica [%]

N = Porcentaje másico de nitrógeno en la materia orgánica [%]

S = Porcentaje másico de azufre en la materia orgánica [%]

$A = \text{Porcentaje másico de cenizas la materia orgánica [\%]}$

2.3.2.3 Cálculo de la entropía de la materia orgánica

Se consideró la ecuación de Song et al. (2012) para el cálculo de entropía de componentes orgánicos:

$$S_{MO}^o = 0.0068 C + 0.1567 H + 0.0268 O - 0.0551 N + 0.0329S \left[\frac{kJ K}{kg} \right] \quad (9)$$

Donde:

$C = \text{Porcentaje másico de carbono en la materia orgánica [\%]}$

$H = \text{Porcentaje másico de hidrógeno en la materia orgánica [\%]}$

$O = \text{Porcentaje másico de oxígeno en la materia orgánica [\%]}$

$N = \text{Porcentaje másico de nitrógeno en la materia orgánica [\%]}$

$S = \text{Porcentaje másico de azufre en la materia orgánica [\%]}$

2.3.2.4 Cálculo de la exergía química de la materia orgánica

Tabla 6

Exergía química estándar y entropía estándar de productos a partir de materia orgánica

Sustancia	$e^{CH} \left[\frac{kJ}{mol} \right]$	$s^o \left[\frac{kJ}{mol K} \right]$
CO_2	19.87	0.214
H_2O_l	0.95	0.070
O_2	3.97	0.205
N_2	0.72	0.192
SO_2	310.093	0.248

l: líquido

Nota. Fuente. Song. et al. (2012).

Se tomó la ecuación de Song et al. (2012) para el cálculo de la exergía química de componentes orgánicos con valores de las ecuaciones 3,4,5,6,7,8 y 9:

$$e_{MO}^{CH} = m[(e_{CO_2}^{CH} + T_0 s_{CO_2}^o) - (e_{O_2}^{CH} + T_0 s_{O_2}^o)] + \frac{n}{2} [(e_{H_2O}^{CH} + T_0 s_{H_2O}^o) - \frac{1}{2} (e_{O_2}^{CH} + T_0 s_{O_2}^o)] + \frac{P}{2} (e_{O_2}^{CH} + T_0 s_{O_2}^o) + \frac{q}{2} (e_{N_2}^{CH} + T_0 s_{N_2}^o) + r [(e_{SO_2}^{CH} + T_0 s_{SO_2}^o) - (e_{O_2}^{CH} + T_0 s_{O_2}^o)] + PCS - T_0 S_{MO}^o \left[\frac{kJ}{kg} \right] \quad (10)$$

Donde:

T_0 = Temperatura del entorno [K]

S_{MO}^o = Entropía de la materia orgánica $\left[\frac{kJ K}{kg} \right]$

2.3.3 Exergía física

La siguiente ecuación resume la exergía física reportada en Aghbashlo et al.(2017):

$$e^{PH} = \sum n_i C_{pi} (T_i - T_0 - T_0 \ln \frac{T_i}{T_0}) \quad [kJ] \quad (11)$$

Donde:

n_i = moles del componente i [mol]

C_{pi} = Capacidad calorífica específica del componente i $\left[\frac{kJ}{mol K} \right]$

T_i = Temperatura del componente i [K]

T_0 = Temperatura ambiente [K]

2.3.3.1 Cálculo del calor específico

Se utilizó la librería de *Python* denominada *Thermo* para obtener el calor específico de cada sustancia a la temperatura deseada tomando en consideración su estado físico ya sea líquido, gaseoso o una mezcla líquida o gaseosa. Este se reporta en $\frac{J}{mol K}$. En el caso de un líquido o gas puro es necesario estipular el número CAS de cada sustancia, así como su peso molecular. Mientras que, en una mezcla líquida o gaseosa, se colocaron los números CAS de cada componente presente, el calor específico del mismo y sus pesos moleculares. En este caso el poder calorífico se reportó en $\frac{J}{mol}$. Luego para obtenerlo con las especificaciones deseadas se indicó la temperatura en Kelvin, presión en Pascales y el porcentaje másico de cada componente en la mezcla.

$$C_{pi,gas} = HeatCapacityGas(CASRN, MW) \left[\frac{J}{molK}\right] \quad (12)$$

$$C_{pi,liquid} = HeatCapacityLiquid(CASRN, MW) \left[\frac{J}{molK}\right] \quad (13)$$

$$C_{pi,gasmixture} = HeatCapacityGasMixture(CASRN, HeatCapacityGases, MW) \left[\frac{J}{mol}\right] \quad (14)$$

$$C_{pi,liquidmixture} = HeatCapacityLiquidMixture(CASRN, HeatCapacityLiquids, MW) \left[\frac{J}{mol}\right] \quad (15)$$

Donde:

CASRN =Número de cas del componente i

MW =Peso molecular del componente i $\left[\frac{g}{mol}\right]$

2.3.4 Exergía destruida

Según Bejan et. al. (1996) la siguiente ecuación expresa la exergía destruida:

$$e^D = e^F - e^P [kJ] \quad (16)$$

Donde:

e^F = Exergía de fuel [kJ]

e^P = Exergía de producto [kJ]

2.3.5 Eficiencia exergetica

Según Moran et al. (2014) la eficiencia exergetica se define como:

$$\eta_e = \frac{e^P}{e^F} \times 100 [\%] \quad (17)$$

Donde:

e^F = Exergía de fuel [kJ]

e^P = Exergía de producto [kJ]

2.4 Análisis exergoeconómico

Según Bejan et al. (1996) el análisis exergoeconómico inicia con la obtención del costo de exergía de las corrientes. Los costos relacionados a la exergía por corriente se obtienen con el precio específico $\left[\frac{\$}{kJ}\right]$ de cada compuesto que ingresa multiplicado por la exergía de dicha corriente $\left[\frac{kJ}{h}\right]$, como se muestra en la ecuación 18. Una ecuación auxiliar que también deriva al costo exergetico es usando el precio del insumo $\left[\frac{\$}{kg}\right]$ y el flujo másico de la corriente $\left[\frac{kg}{h}\right]$ como se evidencia en la ecuación 20. Con estas relaciones se procede a realizar los balances exergoeconómicos en cada equipo del proceso (ecuación 19). En este caso se consideraron tres equipos: quemador, caldera y reactor batch con chaqueta. El balance más básico de un equipo es que el costo de exergía de los insumos es igual al de los productos. Sin embargo, es necesario considerar los valores $\dot{Z} \left[\frac{\$}{h}\right]$. Esta variable toma en cuenta costos de operación, mano de obra, depreciación, precio del equipo, valor de la tierra, entre otros. Al considerar estos valores \dot{Z} en los balances exergoeconómicos, para cada equipo, se pueden determinar los costos de exergía para los productos; en este caso el vapor de agua, biodiésel y glicerina. Finalmente, con el costo del producto $\left[\frac{\$}{kJ}\right]$ y la exergía destruida en el proceso,

resta entre la exergía de los insumos y la del producto, se obtiene el costo de la exergía destruida (ecuación 21).

2.4.1 Costo de exergía

2.4.1.1 Costo de exergía de fuel

El costo de exergía de fuel es calculado mediante la siguiente ecuación:

$$c_{\dot{F}_k}^F = e_{k}^T \cdot c_{\dot{e}_{sp}_i} \quad [$/h] \quad (18)$$

Donde:

k = Corriente

$c_{\dot{e}_{sp}_i}$ = Costo específico del componente i [\$/kJ]

e_{k}^T = Exergía total de la corriente k [kJ/h]

2.4.1.2 Balance exergoeconómico

El costo de exergía se obtiene mediante el siguiente balance:

$$\dot{Z}^k = c_{\dot{P}_r}^P - c_{\dot{F}_r}^F \quad [$/h] \quad (19)$$

Donde:

r = Equipo

$c_{\dot{P}_r}^P$ = Costo exergético del producto del equipo [\$/h]

$c_{\dot{F}_r}^F$ = Costo exergético del fuel del equipo [\$/h]

2.4.2 Ecuaciones auxiliares

$$c_k^{\dot{F}} = c_{esp_i} \cdot \dot{m}_k \quad [$/h] \quad (20)$$

Donde:

k = Corriente

c_{esp_i} = Costo específico del componente i [\$/kJ]

\dot{m}_k = Flujo de la corriente k [kJ/h]

2.4.3 Costo de exergía destruida

$$c_D = e_D^T \cdot c_{esp}^P \quad [$/h] \quad (21)$$

Donde:

e_D^T = Exergía total destruida global [kJ/h]

c_{esp}^P = Costo específico del producto global [\$/kJ]

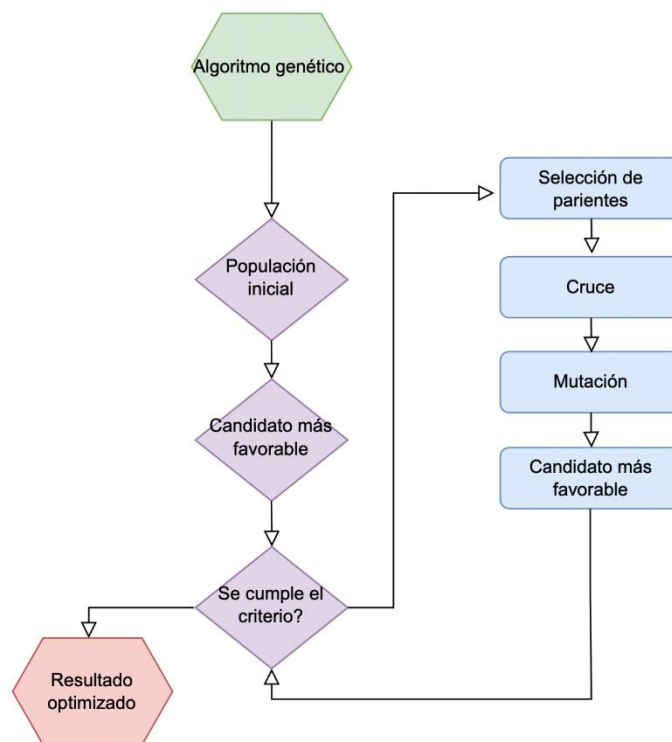
2.4.4 Optimización multiobjetivo

2.4.4.1 Función objetivo

La variable que se desea minimizar es el costo de la exergía destruida la cual dependerá de condiciones iniciales, limitaciones físicas y de seguridad. De las condiciones iniciales, se parte de un caso base y al ser un algoritmo pseudo aleatorio fue definir un estado puntual de aleatoriedad. Las variables de control que van a ser iteradas son temperatura, tiempo, concentración de catalizador, relación metanol-aceite. Estas variables se encuentran dentro de unos rangos específicos basado en estudios anteriores de seguridad y rendimiento.

2.4.4.2 Metodología de optimización

Figura 3
Diagrama de algoritmo de optimización



2.4.4.3 Selección de algoritmo

El proceso de optimización se realizó mediante los pasos como se observa en la *Figura 3*. Principalmente se definió la población, es decir, la primera generación de individuos (condiciones y soluciones) elegido de manera pseudoaleatoria. Dichos individuos se consideran como los padres, y de aquí se dividen en la primera generación, segunda y así sucesivamente hasta completar las iteraciones. En la *Tabla 5* es posible conocer las condiciones iniciales de la población.

Tabla 5***Condiciones de la población inicial***

Parámetro	Valor
Número de iteraciones	200
Número de bits	32
Tamaño de la población	50
Tasa de recombinación	1
Tasa de mutación	0.3

Dentro de los parámetros a definir para que funcione el algoritmo de optimización, es necesario establecer el rango del conjunto de soluciones, la precisión de los genes de las futuras generaciones y el ratio de mutación. Estos últimos conceptos influyen directamente en su eficiencia.

Tabla 6***Condiciones para funciones principales***

Parámetro	Valor
Rango de conjunto solución	500
Precisión	32
Ratio de mutación	0.3

El algoritmo usa tres funciones principales en toda su estructura. La primera, es la mutación donde se recibe como parámetro el ratio de mutación definido por el usuario. Esta mutación dependerá si las generaciones no sobreviven a la selección. Ella define el candidato que más opciones tiene de sobrevivir, en este caso, se desea el menor valor de costo de exergía destruida. La segunda, la población inicial y finalmente está la función de cruce, la cual se encarga de evaluar a la selección y mutación basándose en los padres para crear a un nuevo candidato más oprimado a sobrevivir.

CAPÍTULO 3

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1 Análisis exergético

El análisis exergético se realizó tomando en consideración la exergía química y física de cada corriente para el posterior cálculo de la exergía total. Se determinó cada componente presente en la respectiva corriente con el fin de conocer el equipo que mayor exergía destruida genera y obtener la exergía de fuel y producto global del proceso.

En la *Tabla 7* se evidenció que en el proceso de producción de biodiésel del caso optimizado las corrientes E1, E7, E8 y E9, de aire, metanol, hidróxido de sodio y aceite usado respectivamente, poseen una exergía física de 0 debido a que, al ser reactivos que ingresan a condiciones ambientales dentro del proceso, su trabajo útil relacionado a condiciones físicas es nula.

La corriente E7 presentó la mayor exergía química, así como la exergía total. Si bien, su exergía física tomó el valor de 0, su exergía química superó los demás valores. Esto pudo ocurrir debido a que según Bejan et al. (1996) la exergía química del metanol en estado líquido, siguiendo el modelo II, es de $718,000 \frac{kJ}{kmol}$. Dicho valor supera a los demás provenientes de los otros componentes presentes en el proceso, a excepción del metano que posee un valor de $831,650 \frac{kJ}{kmol}$. No obstante, los moles del metanol son mayores a los del gas natural que en su mayoría es metano el cual ingresa como combustible. Por dicha razón, la corriente E7 es la que más aporta exergéticamente.

Cabe mencionar que como se observa en la *Tabla 7*, comparando con el caso base, la exergía de la corriente 7 del caso optimizado baja un orden de magnitud. Mientras que las corrientes E11 y E12 del mismo se ven acrecentados. Esto tiene una directa relación con mayor exergía de producto.

Además, en la *Tabla 8* los resultados obtenidos del proyecto integrador Alcívar y Risco (2022) se presentó una exergía física de 0 en las corrientes E1, E7, E8 y E9 así como en el caso optimizado por la razón mencionada anteriormente. Sin embargo, la corriente E7 de metanol superó el valor de exergía química del caso optimizado con 3,470,824.32 kJ.

Así mismo, a partir de la *Tabla 9*, se observa que la exergía de fuel del caso optimizado es menor. Mientras que, lo contrario ocurre con la exergía de producto, siendo mayor que el caso el caso base. En consecuencia, el caso Alcívar y Risco (2022) posee una mayor exergía destruida debido a que a mayor exergía de fuel mayor exergía destruida. Aquello pudo ocurrir gracias a las condiciones óptimas de operación. En el caso del presente proyecto la temperatura fue de 55.77 °C, el tiempo de 47.69 minutos, la concentración del catalizador de 0.83 % m/m y la relación molar de 6.314 lo cual influyó directamente en los valores mostrados al ser factores que afectan en la generación del biocombustible. El siguiente equipo que presenta mayores irreversibilidades luego del reactor es la caldera ya que opera como un intercambiador de calor para poder proveer vapor al reactor.

Es importante mencionar que en ambos casos el equipo con mayor exergía es el reactor. Esto debido a que en dicho equipo se originan la reacción de transesterificación. Cabe recalcar que el reactor también presenta mayor exergía destruida debido a la reacción química y la mezcla que se da en el mismo.

Tabla 7

Resultados de flujos de exergía caso optimizado

Corriente	Exergía química [GJ]	Exergía física [GJ]	Exergía total [GJ]
E1	0	0	0
E2	0.017	$0.38 \cdot 10^{-9}$	0.017
E3	0.77	2.28	3.06
E4	0.77	0.011	0.78
E5	0.019	$140.58 \cdot 10^{-9}$	0.019
E6	0.046	0.0014	0.047
E7	3.49	0	3.49
E8	0.0028	0	0.0028

E9	0.0080	0	0.0080
E10	0.0021	0.084	0.086
E11	0.38	0.0029	0.39
E12	220571.97	77812.39	298384.36

Tabla 8

Resultados de flujos de exergía caso base Alcívar y Risco (2022)

Corriente	Exergía química [GJ]	Exergía física [GJ]	Exergía total [GJ]
E1	0	0	0
E2	0.016	$0.27 \cdot 10^{-9}$	0.016
E3	0.76	2.24	3.00
E4	0.76	0.0075	0.76
E5	0.016	$81 \cdot 10^{-9}$	0.016
E6	0.037	0.0012	0.038
E7	3.47	0	3.47
E8	0.019	0	0.019
E9	0.0080	0	0.0080
E10	0.0028	0.080	0.083
E11	0.22	0.0012	0.22
E12	0.08	0.040	0.12

Tabla 9

Exergía de fuel, producto y destruida para caso optimizado y caso base Alcívar y Risco (2022)

	Exergía fuel [GJ]	Exergía producto [GJ]	Exergía destruida [GJ]
Caso optimización	2.42	0.46	1.96
Caso base Alcívar y Risco (2022)	2.61	0.30	2.31

3.2 Análisis exergoeconómico

El análisis para el caso base se realizó a 45 °C, 30 minutos, 1.5% de catalizador y una relación molar de 3:1. Por otro lado, el presente estudio se realizó a 55.77 °C durante 47.69 minutos a 0.83% y una relación molar de 6.31:1. Comparando los valores obtenidos de la optimización se obtuvo que el costo de la exergía destruida disminuye

en $42.5 \frac{\$}{h}$. Esta variable fue la función objetivo del proyecto y fue usado el caso base para contrastar los resultados. Además del costo de la exergía destruida, otras variables como eficiencia exergética, costo de exergía de fuel, rendimiento de biodiésel y rendimiento de combustible fueron analizadas. Las variables de la eficiencia exergética y rendimiento del combustible, presentaron valores mayores que el caso base. La eficiencia exergética representa la relación entre la exergía del producto y la de la materia prima. A mayor eficiencia exergética, se tiene más exergía del producto, la cual disminuye la exergía destruida y así el costo de esta. De la *Tabla 10* se puede notar que la eficiencia exergética del caso base fue de 11.54%, mientras que, la que corresponde al costo de la exergía destruida mínima fue de 19.26%. Normalmente, el equipo que más contribuye en la exergía destruida es el quemador. El combustible está estrechamente relacionado a este proceso y, por eso, el rendimiento del gas natural es una variable importante por considerar. El rendimiento del combustible se presenta como los kilogramos de gas natural necesarios para producir un kilogramo de biodiésel. En base a la *Tabla 10*, el rendimiento del combustible fue de 0.075 kg gas natural/kg biodiésel para el caso optimizado y 0.056 kg gas natural/kg biodiésel para el caso base. Extendiendo la comparación con el caso base, a mayor rendimiento de combustible y mayor eficiencia exergética, menos exergía se destruye en el quemador, lo que produce un menor costo en el costo de la exergía destruida. Por otro lado, el rendimiento del reactor y el costo exergético de la materia prima aumentaron al tener el costo de la exergía destruida. De la *Tabla 10*, el rendimiento disminuye de 80.28% a 61.19% y el costo de la exergía de fuel de $71.24 \frac{\$}{h}$ a $25.47 \frac{\$}{h}$. Es importante mencionar que, uno de los objetivos del caso base fue maximizar el rendimiento y no se consideró el aporte exergético. Es decir, las condiciones de operación encontradas en dicha investigación no toman en cuenta las condiciones termodinámicas del proceso. El hecho de que el rendimiento del proceso, relación entre la cantidad de biodiésel obtenido y teórico, sea inferior al caso base se debe a las condiciones de operación como tiempo y temperatura. Aunque se produce menos biodiésel por kilogramo de aceite que el caso base, el ahorro en costos por exergía por hora resultó entre 30% y 35%. El resultado mínimo de costo en la exergía destruida se ve representado por el valor del costo de la materia prima, $25.47 \frac{\$}{h}$. Además,

esta relación se puede ver por la diferencia de los costos de la exergía de fuel, aproximadamente $46 \frac{\$}{h}$.

Tabla 10

Resultados de análisis exergoeconómico del caso optimizado y el caso base

	Costo exergía destruida [\$/h]	Eficiencia exergética [%]	Costo exergía fuel [\$/h]	Rendimiento del reactor [%]	Rendimiento combustible [kg gas natural/kg biodiésel]
Caso optimización	20.56	19.26	25.47	61.19	0.075
Caso base Alcívar y Risco (2022)	63.02	11.54	71.24	80.28	0.056

3.3 Optimización del proceso

La optimización exergoeconómica del proceso de producción biodiésel se realizó utilizando un algoritmo genético desarrollado en Python usando la librería *NumPy* en su desarrollo. Además, para tener mayor conocimiento del proceso, se implementaron algoritmos de análisis de datos. Para obtener un mayor conocimiento sobre las variables que intervienen en el proceso, se realizó un análisis de sensibilidad por cada par de variables, un mapa de correlaciones lineal y *Principal Component Analysis* que toma en cuenta las interacciones no lineales. Estos gráficos se encuentran en *Apéndices*. De los estudios realizados de correlación, se pudo determinar que las variables más importantes en el costo de la exergía destruida fueron el tiempo, temperatura y relación molar. Estas tres variables son responsables del 80% del costo de exergía destruida, siguiendo la regla de Pareto. Además, del análisis de sensibilidad se pudo notar que el efecto del catalizador cuanto se mantiene el tiempo y la relación molar constantes es notable. Sin embargo, es importante destacar que, al fijar dos variables constantes, para producir una visualización en 3D, se está variando el comportamiento dimensional del

proceso. Es decir, que dependiendo de los valores constantes que se fijen, que en el caso fueron 60 minutos y 3.

Tabla 11

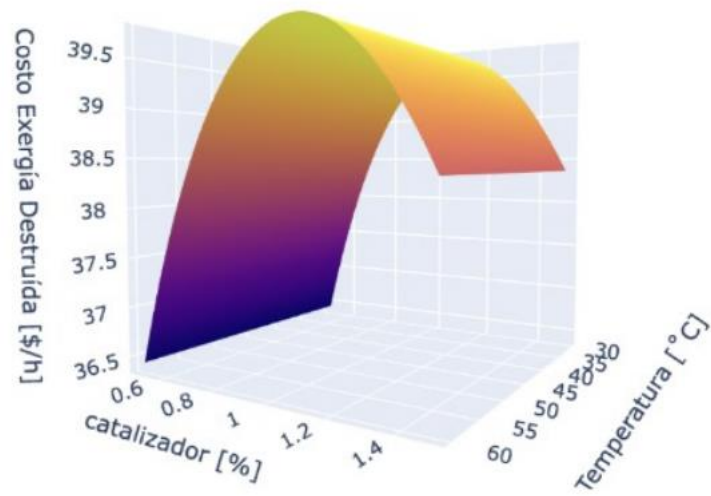
Resultados de parámetros óptimos de operación

Parámetro	Caso Optimizado	Caso Base
Temperatura [C]	55.77	45
Tiempo [min]	47.69	30
Concentración del catalizador [% m/m]	0.8334	1.5
Relación molar	6.314	3

Se realizaron las gráficas de las superficies para tener un mayor entendimiento de la influencia de las variables en el proceso. Para ello, se tomaron en cuenta dos variables, influyentes en el costo de la exergía, y las otras dos variables se mantuvieron constantes. La *Figura 4* muestra esta relación dejando a la relación molar y el tiempo manteniéndose constantes en 3:1 y 60 minutos respectivamente. Se puede apreciar cómo el costo aumenta proporcionalmente con la concentración de catalizador, hasta que llega un punto que empieza a disminuir. Por otro lado, la temperatura presenta un comportamiento peculiar, ya que no es influyente en el costo de la exergía. Sin embargo, es importante considerar que este análisis se realizó en 4 dimensiones (temperatura, tiempo, concentración de catalizador y relación molar), por lo que es fundamental la interacción de las 4 variables al mismo tiempo. Se encontró una limitación a la hora de presentar la visualización de su influencia ya que no se pueden realizar gráficos en 5 dimensiones, máximo en 3. Por último, se visualizó el comportamiento de todas las combinaciones de variables manteniendo 2 constantes tanto para el costo exergético como para la eficiencia exergética presentado en la sección de *Apéndices*. De la *Figura 4* se tiene el comportamiento del costo de la exergía destruida en función de la concentración del catalizador y la temperatura. Sin embargo, es importante conocer la interacción con las demás variables mediante un estudio de correlaciones no lineal para conocer las variables más influyentes en el proceso.

Figura 4

Gráfica costo de la exergía destruida vs temperatura vs concentración de catalizador



CAPÍTULO 4

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Conclusiones

Se desarrolló un análisis exergoeconómico del proceso para producción de biodiésel a partir de aceite de palma usado. Así mismo, mediante el lenguaje de programación de *Python* se empleó un algoritmo genético para minimizar el costo de exergía destruida del proceso.

Se determinó que, en comparación al caso base Alcívar y Risco (2022), la exergía destruida fue menor con 355,828.74 kJ debido a un mayor valor de esta de producto reduciendo la exergía de fuel. Se concluyó que a partir del algoritmo genético las condiciones óptimas de operación del reactor fueron de: temperatura de 55.7°C, tiempo de reacción de 47.69 minutos, relación molar 6.314:1 y concentración de 0.8334% del catalizador básico. Con estas condiciones, el costo de exergía destruida es de 20.56 $\frac{\$}{kg}$. Aquello genera un ahorro anual en comparación al caso base de 88554.58 $\frac{\$}{kg}$ considerando que el reactor batch opera 8 horas al día y 5 días a la semana. El costo mínimo de exergía destruída resulta en un ahorro del 33% anual en la empresa.

Este análisis toma en cuenta los proceso descritos en el digrama de flujos de procesos, pero se deben considerar otros factores para un estudio completo. Por ejemplo, los procesos de pre-tratamiento y post-tratamiento deben ser considerados ya que, la materia prima debe tener unos parámteros de calidad para evitar obstrucciones en las tuberías.

4.2 Recomendaciones

Es recomendable evaluar procesos industriales en los que se pueda emplear los gases de combustión provenientes de la caldera. Esto con el fin de utilizar este calor generado de manera útil y poderlo incorporar a algún otro proceso.

Se recomienda, por último, realizar un estudio compartido que analice no solo la parte exergética y de costos, si no, también la parte de eficiencia. Con ello, podrían encontrarse soluciones para minimizar costos y exergía destruida y aumentar eficiencia del proceso de producción de biodiésel a partir de aceite de palma usado.

BIBLIOGRAFÍA

- Alcívar, K. y Risco, A. (2022). *Diseño de una propuesta sostenible de producción de biodiésel mediante optimización multiobjetivo de factores económicos, ambiental y rendimiento* [Proyecto Integrador]. Escuela Superior Politécnica del Litoral.
- Ahmadi, P., Dincer, I., & Rosen, M. A. (2011, October). Exergy, exergoeconomic and environmental analyses and evolutionary algorithm based multi-objective optimization of combined cycle power plants. *Energy*, 36(10), 5886–5898. [doi:10.1016/j.energy.2011.08.034](https://doi.org/10.1016/j.energy.2011.08.034)
- Aghbashlo, M., Tabatabaei, M., Hosseinpour, S., Khounani, Z., & Hosseini, S. S. (2017). *Exergy-based sustainability analysis of a low power, high frequency piezo-based ultrasound reactor for rapid biodiesel production*. *Energy Conversion and Management*, 148, 759–769. [doi:10.1016/j.enconman.2017.06.038](https://doi.org/10.1016/j.enconman.2017.06.038)
- Aghbashlo, M., Tabatabaei, M., & Hosseinpour, S. (2018). *On the exergoeconomic and exergoenvironmental evaluation and optimization of biodiesel synthesis from waste cooking oil (WCO) using a low power, high frequency ultrasonic reactor*. *Energy Conversion and Management*, 164, 385–398. [doi:10.1016/j.enconman.2018.02.086](https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.02.086)
- Baghernejad, A., Yaghoubi, M., & Jafarpur, K. (2016). Exergoeconomic optimization and environmental analysis of a novel solar-trigeneration system for heating, cooling and power production purpose. *Solar Energy*, 134, 165–179. <https://doi.org/10.1016/J.SOLENER.2016.04.046>
- Bejan A, Tsatsaronis G, Moran M. (1996). *Thermal design and optimization*, 1ra ed., Wiley, 143-144, 405-432, 522 pp., New York.

- Blanco-Marigorta, A. M., Suárez-Medina, J., & Vera-Castellano, A. (2013). *Exergetic analysis of a biodiesel production process from Jatropha curcas*. *Applied Energy*, 101, 218–225. [doi:10.1016/j.apenergy.2012.05.03](https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2012.05.03)
- Carlini, M., Castellucci, S., & Cocchi, S. (2014). *A Pilot-Scale Study of Waste Vegetable Oil Transesterification with Alkaline and Acidic Catalysts*. *Energy Procedia*, 45, 198–206. [doi:10.1016/j.egypro.2014.01.022](https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.01.022)
- Cengel, Y.A. and Boles, M.A. (2015). *Thermodynamics: An Engineering Approach*, 8va edición, 448 pp. McGraw-Hill, New York.
- Channiwala, S.A. and Parikh, P.P. (2002) *A Unified Correlation for Estimating HHV of Solid, Liquid and Gaseous Fuels*. *Fuel*, 81, 1051-1063.
- Chhetri, A., Watts, K., & Islam, M. (2008). *Waste Cooking Oil as an Alternate Feedstock for Biodiesel Production*. *Energies*, 1(1), 3–18. [doi:10.3390/en1010003](https://doi.org/10.3390/en1010003)
- Chitsaz, A., Mehr, A. S., & Mahmoudi, S. M. S. (2015). *Exergoeconomic analysis of a trigeneration system driven by a solid oxide fuel cell*. *Energy Conversion and Management*, 106, 921–931. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2015.10.009>
- Datta, A., Hossain, A., & Roy, S. (2019). *An Overview on Biofuels and Their Advantages and Disadvantages*. *Asian Journal of Chemistry*, 31(8), 1851–1858. [doi:10.14233/ajchem.2019.22098](https://doi.org/10.14233/ajchem.2019.22098)
- Dincer, I., & Cengel, Y. (2001). *Energy, Entropy and Exergy Concepts and Their Roles in Thermal Engineering*. *Entropy*, 3(3), 116–149. [doi:10.3390/e3030116](https://doi.org/10.3390/e3030116)
- ESPAC. (2021). *Encuesta de Superficie y Producción Agropecuaria Continua*.
- Hernández Degollado, A. (2019). *Diseño E Implementacion De Trampa Para Desecho De Aceite Comestible En Un Establecimiento Alimentario (Doctoral dissertation)*.

- International Energy Agency (IEA). (2022, 16 de octubre). *Tracking clean energy progress overview*. <https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2022>
- IndexMundi. (2022, 16 de octubre). *Palm Oil Production*.
<https://www.indexmundi.com/agriculture/?commodity=palm-oil&graph=production>
- Julio, A.A.V., Batlle, E.A.O., Rodriguez, C.J.C. et al. (2021). Exergoeconomic and Environmental Analysis of a Palm Oil Biorefinery for the Production of Bio-Jet Fuel. *Waste Biomass, Valor* 12, 5611–5637. <https://doi.org/10.1007/s12649-021-01404-2>
- Kotas, T. J. (2012). *The exergy method of thermal plant analysis*. Paragon Publishing.
- Lambora, A., Gupta, K., & Chopra, K. (2019). Genetic Algorithm- A Literature Review. 2019 International Conference on Machine Learning, Big Data, Cloud and Parallel Computing (COMITCon). [doi:10.1109/comitcon.2019.8862255](https://doi.org/10.1109/comitcon.2019.8862255)
- Mero Benavides, M. B. (2022). *Estudio cinético de secado de aceite reciclado de una empresa de alimentos para la producción de biodiésel* [Proyecto Integrador]. Escuela Superior Politécnica del Litoral.
- Michalakakis, C., Fouillou, J., Lupton, R. C., Gonzalez Hernandez, A., & Cullen, J. M. (2021). Calculating the chemical exergy of materials. *Journal of Industrial Ecology*, 25(2), 274–287. [doi:10.1111/jiec.13120](https://doi.org/10.1111/jiec.13120)
- Moran, M.J., Shapiro H.N., Boettner D.D., Bailey M.B., (2014). *Fundamentals of Engineering Thermodynamics*, 399 pp. John Wiley & Sons, Inc, Estados Unidos.
- Morris, D. R., & Szargut, J. (1986). *Standard chemical exergy of some elements and compounds on the planet earth*. *Energy*, 11(8), 733–755. [doi:10.1016/0360-5442\(86\)90013-7](https://doi.org/10.1016/0360-5442(86)90013-7)

Producción Agrícola Mundial. (2022, 13 de noviembre). *Producción Mundial Aceite de Palma 2022/2023*.

<http://www.produccionagricolamundial.com/cultivos/aceitedepalma.aspx>

Raqeeb, M. A., & Bhargavi, R. (2015). Biodiesel production from waste cooking oil. *Journal of Chemical and Pharmaceutical Research*, 7(12), 670-681.

Schuchardt, U., Sercheli, R., & Vargas, R. M. (1998). Transesterification of vegetable oils: a review. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 9(3).

<https://doi.org/10.1590/S0103-50531998000300002>

Sierra, C. y Casas J.M., (2011). *Análisis Exergético de una Planta de Producción de Biodiésel de Aceite de Palma* [Proyecto Integrador]. Universidad Industrial de Santander. <http://tangara.uis.edu.co/biblioweb/tesis/2011/139114.pdf>

Song, G., Xiao, J., Zhao, H., & Shen, L. (2012). *A unified correlation for estimating specific chemical exergy of solid and liquid fuels*. *Energy*, 40(1), 164–173. [doi: 10.1016/j.energy.2012.02.016](https://doi.org/10.1016/j.energy.2012.02.016)

Suárez-Eiroa, B., Fernández, E., Méndez-Martínez, G., & Soto-Oñate, D.

(2019). Operational principles of Circular Economy for Sustainable Development: Linking theory and practice. *Journal of Cleaner Production*. [doi:10.1016/j.jclepro.2018.12.271](https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2018.12.271)

Tan, Y.A., Ainie, K., Siew, W.L., Mohtar, Y., Chong, C.L. (1997) *Crude palm oil survey. Report on Project CT 351/97*. Viva Report No 089/99(7), Malaysian Palm Oil Board, Malaysia, pp. 1–69

Wu, J., & Wang, N. (2020). Exploring avoidable carbon emissions by reducing exergy destruction based on advanced exergy analysis: A case study. *Energy*, 206, 118246. [doi:10.1016/j.energy.2020.118246](https://doi.org/10.1016/j.energy.2020.118246)

Zahan, K., & Kano, M. (2018). Biodiésel Production from Palm Oil, Its By-Products, and Mill Effluent: A Review. *Energies*, 11(8), 2132. [doi:10.3390/en11082132](https://doi.org/10.3390/en11082132)

APÉNDICES

APÉNDICE A: Composición de biodiésel

Tabla A.1

Composición del biodiésel obtenido al 61.19% de rendimiento

Compuesto	Porcentaje de cada metil éster [%]
M-Palmitato	49.9%
M-Linoleato	8.6%
M-Oleato	41.5%

Nota. Fuente. Sierra y Casas (2011).

APÉNDICE B: Diagramas 3D de costo de exergía destruida [\$/h]

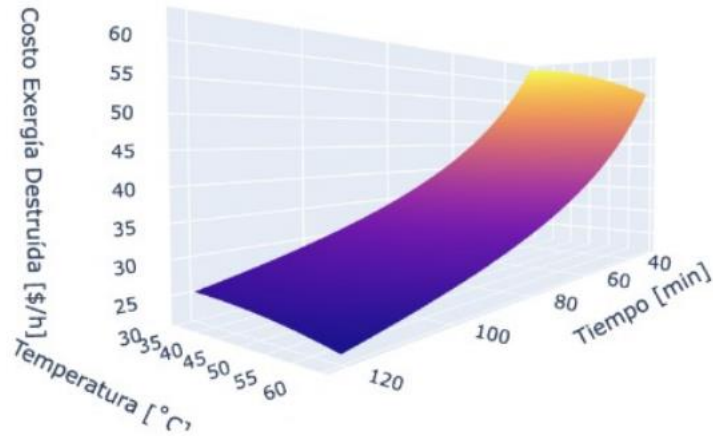


Figura B.1 Relación catalizador y relación molar constante

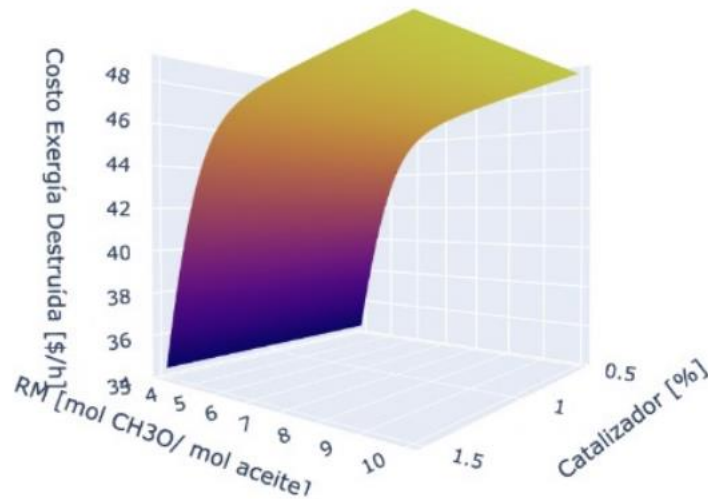


Figura B.2 Relación temperatura y tiempo constante

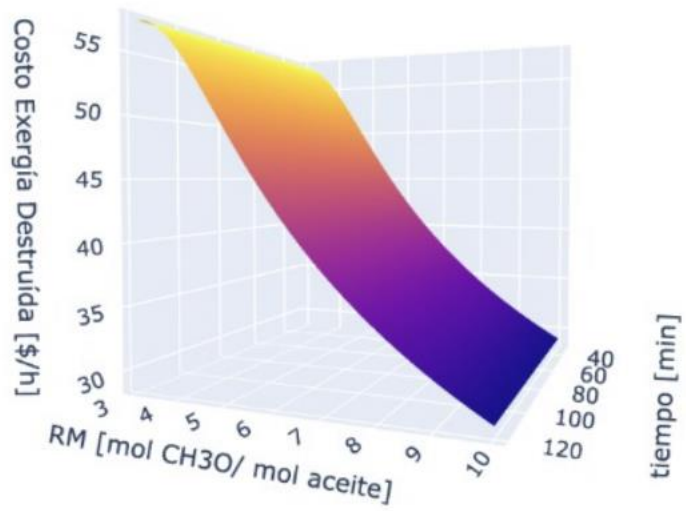


Figura B.3 Relación temperatura y catalizar constante

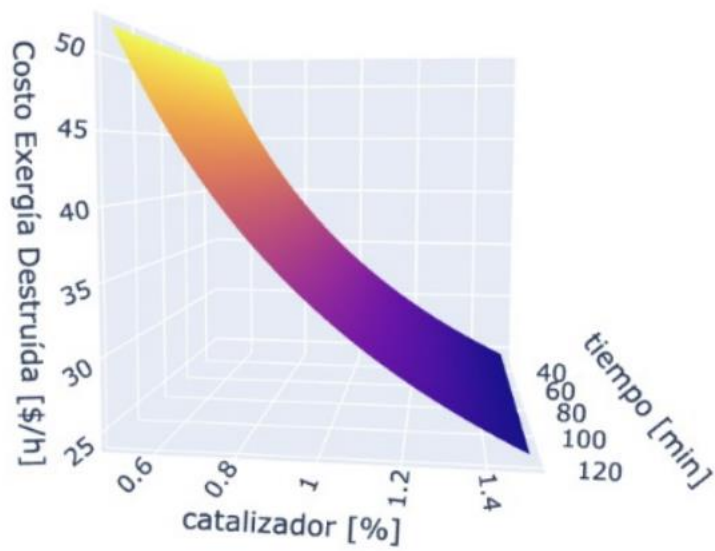


Figura B.4 Relación temperatura y relación molar constante

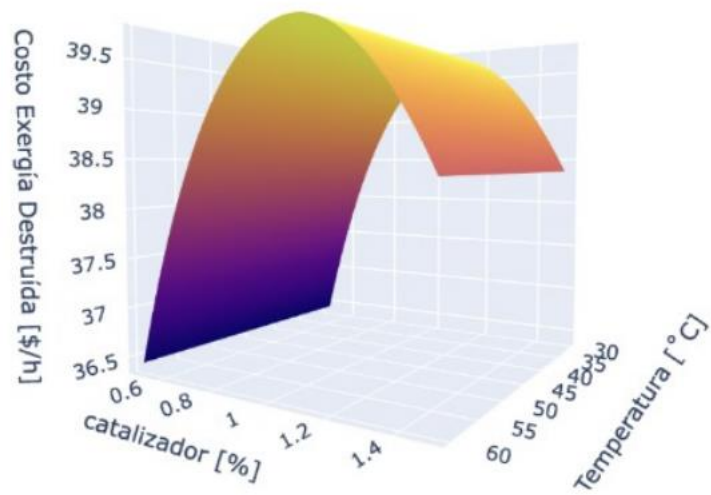


Figura B.5 Relación tiempo y relación molar constante

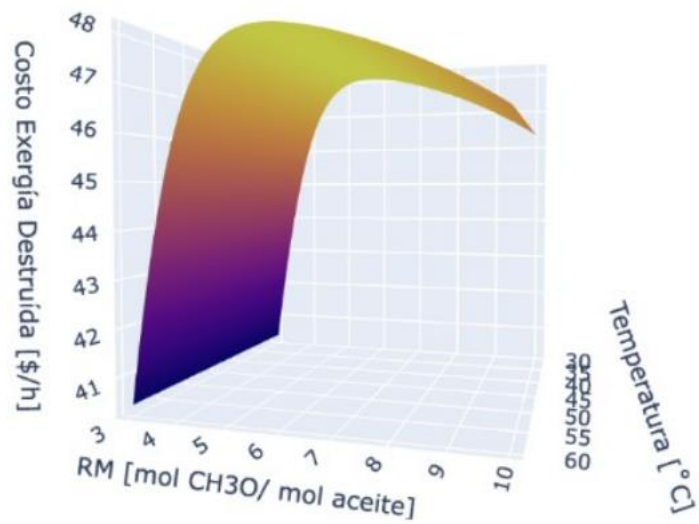


Figura B.6 Relación tiempo y catalizador constante

APÉNDICE C: Diagramas 3D de eficiencia exergética [%]

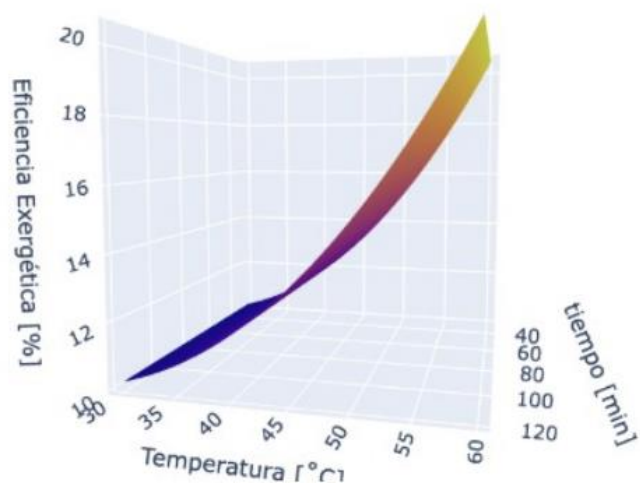


Figura C.1 Relación catalizador y relación molar constante

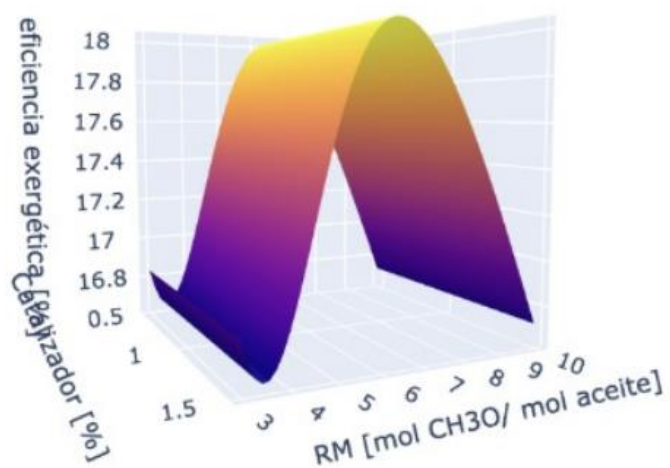


Figura C.2 Relación temperatura y tiempo constante

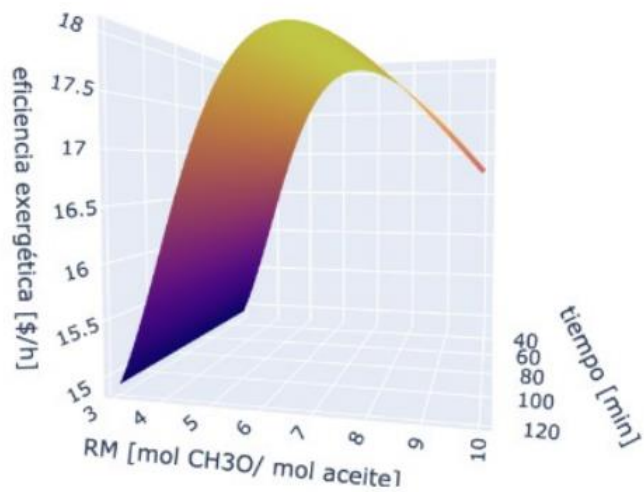


Figura C.3 Relación temperatura y catalizar constante

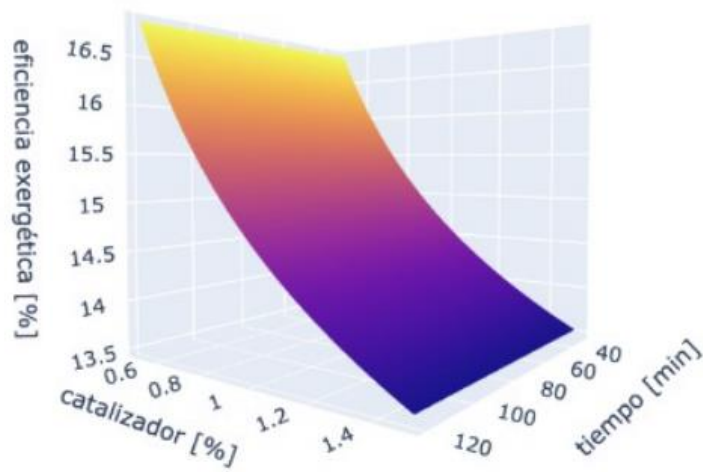


Figura C.4 Relación temperatura y relación molar constante

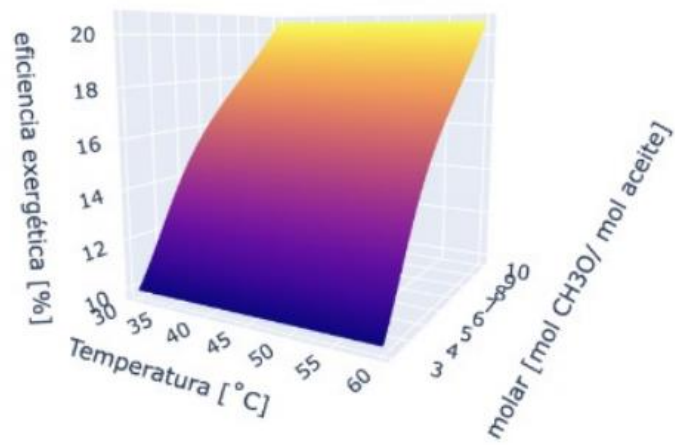


Figura C.5 Relación tiempo y relación molar constante

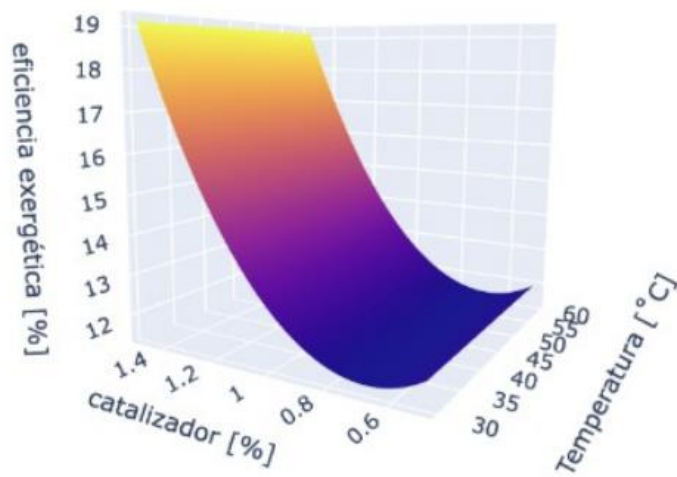


Figura C.6 Relación tiempo y catalizador constante

APÉNDICE D: Diagramas de análisis de sensibilidad

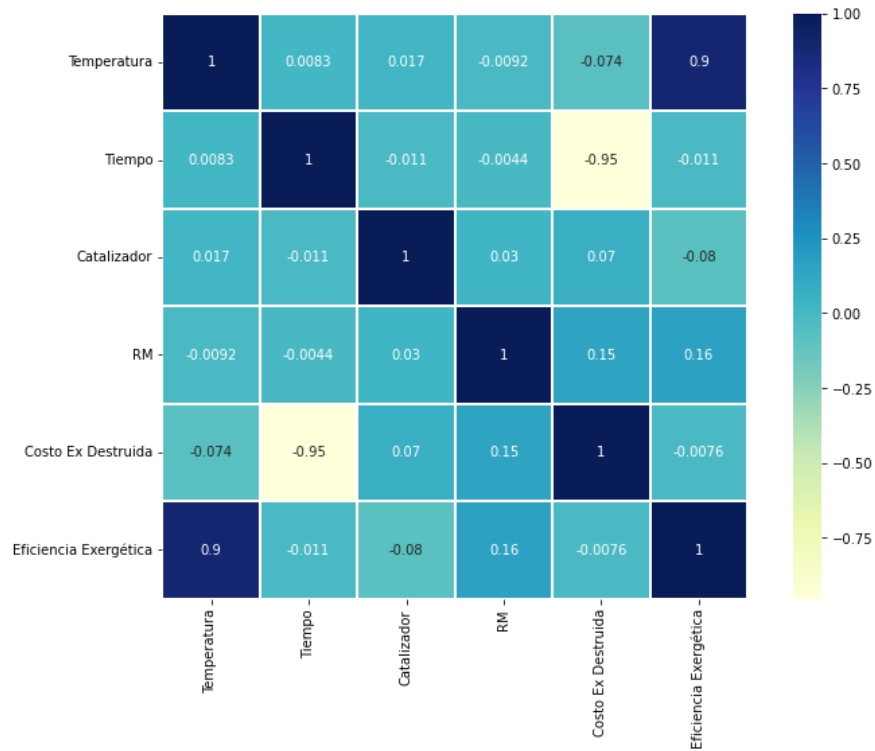


Figura D.1 Mapa de correlación entre las variables del proceso.

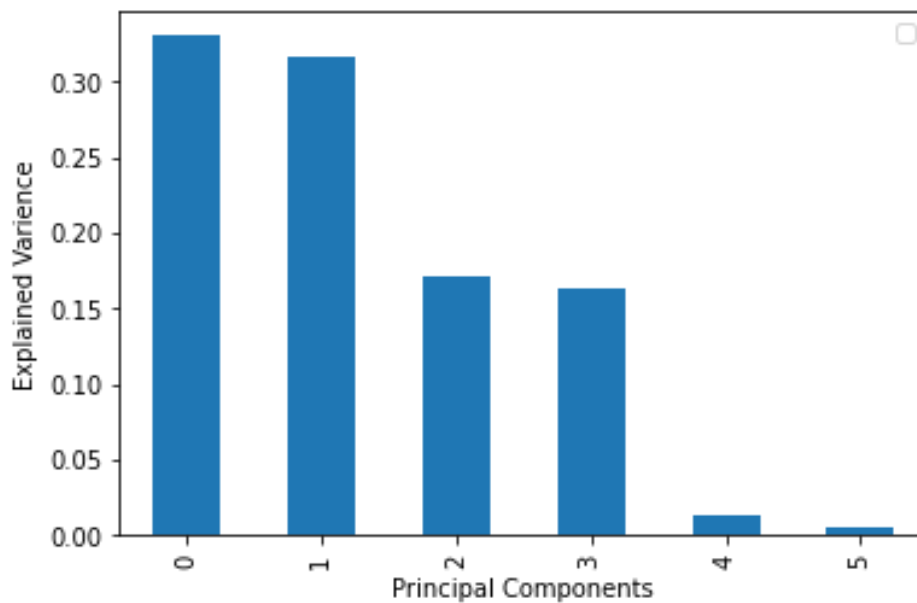


Figura D.2 Principal Component Analysis (PCA) para las variables más significativas.