

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL

Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas

Diseño de una propuesta sostenible de producción de biodiesel
mediante optimización multiobjetivo de factores económicos,
ambiental y rendimiento

PROYECTO INTEGRADOR

Previo la obtención del Título de:

Ingeniero Químico

Presentado por:

Kerly Damiana Alcivar Espinoza

Alejandra Nathalye Risco Bravo

GUAYAQUIL - ECUADOR

Año: 2022

DEDICATORIA

El presente proyecto se lo dedico a mi esposo, por siempre apoyarme y darme valor de siempre salir adelante, a mi hija por creer siempre en mí y decir que su mamá es una ingeniera, a mi mamá por siempre brindarme su apoyo incondicional. A mi papá que, aunque no se encuentre entre nosotros, siempre me apoyó incondicionalmente.

A los amigos que me ayudaron a lo largo de la carrera y pusieron su granito de arena para llegar a la meta.

A mí misma, por no darme por vencida y demostrarme que, si uno se lo propone, se puede lograr.

Kerly Damiana Alcivar Espinoza

DEDICATORIA

El presente proyecto lo dedico a mis padres, mis hermanos y mi perrito, por ser lo más valioso que tengo, nada hubiese sido posible sin ustedes.

A toda mi familia y amigos, por siempre creer en mí y brindarme su apoyo incondicional.

A esa persona especial, por tu apoyo, comprensión y por convertirte en una parte importante de mi vida.

A todos los que de alguna u otra manera contribuyeron a que lograra esta meta.

Alejandra Nathalye Risco Bravo

AGRADECIMIENTOS

Mi más sincero agradecimiento a mis tutoras, Diana Tinoco y Andrea Barcia por su guía durante todo el desarrollo de este proyecto.

A todos los profesores que fueron participe de este proceso y dieron su aporte, en especial Miss Myriam por siempre guiarme a lo largo de la carrera.

Especialmente a Dios, por guiarme en el camino.

Kerly Damiana Alcivar Espinoza

AGRADECIMIENTOS

Mi más sincero agradecimiento a mis tutoras, Diana Tinoco y Andrea Barcia, por su guía en el desarrollo de este proyecto.

A todos los profesores que fueron parte de mi formación profesional por enseñarme a amar la carrera.

En especial, a Dios por darme la fortaleza para seguir adelante.

Alejandra Nathalye Risco Bravo

DECLARACIÓN EXPRESA

"Los derechos de titularidad y explotación, no corresponde conforme al reglamento de propiedad intelectual de la institución; *Kerly Damiana Alcivar Espinoza* y *Alejandra Nathalye Risco Bravo* 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"



Kerly Damiana Alcivar Espinoza



Alejandra Nathalye Risco Bravo

EVALUADORES

Ing. Nadia Flores, M. Sc.
PROFESOR DE LA MATERIA

Ing. Diana Tinoco, PhD
PROFESOR TUTOR

Ing. Andrea Barcia, M. Sc.
PROFESOR COTUTOR

RESUMEN

La creciente demanda energética y el agotamiento gradual de los combustibles fósiles han incentivado la búsqueda de nuevas alternativas como el biodiesel por transesterificación de aceite vegetal. La implementación de este proceso a nivel industrial no resulta atractiva pues implica altos costos operativos y un impacto ambiental significativo, acompañado de un bajo rendimiento. Por ello, el presente proyecto propone el diseño de una producción sostenible de biodiesel, a partir de aceite de palma usado, mediante optimización multiobjetivo de factores económicos, ambiental y rendimiento como alternativa frente a los combustibles tradicionales.

El proyecto se desarrolló en 2 etapas. En primera instancia, se realizó un estudio bibliográfico para validar el modelo cinético propuesto por Narváez et al. (2015), seleccionar las variables a optimizar y diseñar la propuesta sostenible. Posteriormente, se realizó la optimización mediante el planteamiento de las funciones objetivo y la determinación de las condiciones óptimas con 3 estrategias diferentes: Obtención del Conjunto Pareto, Análisis por Método R y Análisis Tecno-económico.

Se obtuvo que la solución óptima es una temperatura de 45°C, un tiempo de reacción de 30 minutos, una relación molar 3:1 y una concentración de NaOH de 1.5%. Operando a estas condiciones, el rendimiento es del 80.29%, el costo de producción de 0.26 \$/kg y la huella de carbono de 0.144 kg CO₂-eq/kg. Esta solución no sólo maximiza el rendimiento mientras minimiza los costos de operación y el impacto ambiental, sino también presenta el mejor potencial económico. Además, logra reducir el costo de producción hasta en un 67.37% frente a otras propuestas similares. Esto demuestra que la solución óptima hace a la propuesta atractiva y viable.

Palabras Clave: optimización, rendimiento, costos de producción, impacto ambiental, biodiesel

ABSTRACT

The growing energy demand and the gradual depletion of fossil fuels have encouraged the search of new alternatives such as biodiesel by vegetable oil transesterification. The implementation of this process at an industrial level is not attractive as it implies high operating costs and a significant environmental impact, followed by a low yield. This project proposes the design of sustainable biodiesel production, from used palm oil, through multi-objective optimization of economic, environmental, and yield factors as an alternative to traditional fuels.

The project was developed in 2 phases. First, a bibliographic study was conducted to validate the kinetic model proposed by Narváez et al. (2015), select the variables to optimize and design the sustainable proposal. Subsequently, the optimization was conducted through the approach of the objective functions and the determination of the optimal conditions with 3 different strategies: Obtaining the Pareto Set, R-Method Analysis, and a Techno-economic Analysis.

It was found that the optimal solution is a temperature of 45°C, a reaction time of 30 minutes, a molar ratio of 3:1, and a NaOH concentration of 1.5%. Operating under these conditions, the yield is 80.29%, the production costs are 0.26 \$/kg, and the carbon footprint is 0.144 kg CO₂-eq/kg. This solution not only maximizes biodiesel yield while minimizing operating costs and environmental impact but also has the best economic potential. In addition, it manages to reduce the cost of production by up to 67.37% compared to other similar proposals. This shows that the optimal solution makes the proposal attractive and feasible.

Keywords: *optimization, yield, production costs, environmental impact, biodiesel*

ÍNDICE GENERAL

EVALUADORES.....	VII
RESUMEN	I
<i>ABSTRACT</i>	II
ÍNDICE GENERAL.....	III
ABREVIATURAS.....	V
SIMBOLOGÍA.....	VI
ÍNDICE DE FIGURAS	IX
ÍNDICE DE TABLAS.....	XI
CAPÍTULO 1	1
1. Introducción	1
1.1 Descripción del problema	1
1.2 Justificación del problema	2
1.3 Objetivos	3
1.3.1 Objetivo General	3
1.3.2 Objetivos Específicos.....	3
1.4 Marco teórico.....	4
1.4.1 Biodiesel	4
1.4.2. Producción de Biodiesel.....	5
1.4.2.1. Reacción de transesterificación.....	5
1.4.2.2. Parámetros de operación del proceso.....	6
1.4.3. Optimización multiobjetivo.....	8
CAPÍTULO 2	13
2. Metodología.....	13
2.1 Estudio bibliográfico	13

2.1.1	Validación de modelo cinético teórico	13
2.1.2	Selección de variables a optimizar	14
2.1.3	Diseño de la propuesta de producción de biodiesel	15
2.2	Optimización multiobjetivo	17
2.2.1	Planteamiento de funciones objetivo	17
2.2.2	Determinación de condiciones óptimas	23
CAPÍTULO 3		26
3.	RESULTADOS Y ANÁLISIS	26
3.1	Validación Modelo Cinético Teórico	26
3.2	Diseño y dimensionamiento del reactor	30
3.3	Optimización Multiobjetivo	32
3.3.1	Resultados del Conjunto Pareto	36
3.3.2	Resultados del Método R	37
3.3.3	Resultados del Análisis Tecno-económico	39
3.3.4	Solución óptima	42
CAPÍTULO 4		45
4.	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	45
4.1	Conclusiones	45
4.2	Recomendaciones	46
BIBLIOGRAFÍA		47
APÉNDICES		53

ABREVIATURAS

TG	Triglicéridos
M	Metanol
MG	Monoglicéridos
DG	Diglicéridos
EM	Metil éster de ácido graso
EE	Etil éster de ácido graso
G	Glicerol
GEI	Gases de efecto invernadero
LHV	Low heating value
T	Temperatura de reacción
t	Tiempo de reacción
C_{cat}	Concentración de Catalizador
RM	Relación molar metanol:aceite
FO	Función Objetivo
TIR	Tasa interna de retorno
VAN	Valor actual neto

SIMBOLOGÍA

[]	Concentración en molaridad
%	Porcentaje
% m/m	Porcentaje masa/masa
°C	Grados Centígrados
C_{MP}	Costo por materia prima
C_E	Costo por consumo eléctrico
C_c	Costo por consumo combustible
$CO_2\text{-eq}$	Dióxido de carbono equivalentes
C_{p_a}	Capacidad calorífica del aceite
C_{p_m}	Capacidad calorífica del metanol
$C_{p_{mix}}$	Capacidad calorífica de la mezcla
cPs	Centipoise
D_a	Diámetro del agitador
g	Gramo
HC_M	Huella de carbono por consumo de metanol
HC_{Cat}	Huella de carbono por consumo de catalizador NaOH
HC_E	Huella de carbono por consumo eléctrico
HC_c	Huella de carbono por consumo de combustible
kJ	Kilojoules
kg	Kilogramo
L	Litro
m	Metro
m^3	Metro cúbico
mg	Miligramo
min	Minutos
mol	Mol

M_{bio}	Masa de biodiesel producido
m_m	Masa de metanol
m_a	Masa de aceite
m_{comb}	Masa de combustible
N	Velocidad de agitación
N_p	Número de Potencia
NaOH	Hidróxido de sodio
P	Potencia
PM_m	Peso molecular del metanol
PM_a	Peso molecular del aceite
ρ_a	Densidad del aceite
ρ_m	Densidad del metanol
ρ_{mix}	Densidad de la mezcla
Pa	Pascal
Q_r	Calor necesario para alcanzar la temperatura de reacción
R²	Coeficiente de determinación
RPM	Revoluciones por minutos
s	Segundo
μ_a	Viscosidad dinámica del aceite
μ_m	Viscosidad dinámica del metanol
μ_{mix}	Viscosidad dinámica de la mezcla
V_m	Volumen del metanol
V_a	Volumen del aceite
W	Watt
w_a	Fracción másica del aceite
w_m	Fracción másica del metanol
x_a	Fracción molar del aceite
x_m	Fracción molar del metanol

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 Reacción de transesterificación para la producción de biodiesel (Schuchardt et al., 1998)	6
Figura 1.2 Sistema de ecuaciones diferenciales del modelo cinético teórico (Narváez et al., 2007)	9
Figura 1.3 Sistema de ecuaciones diferenciales del modelo cinético teórico (Narváez et al., 2015)	10
Figura 2.1 Resumen del desarrollo del proyecto	13
Figura 2.2 Diagrama de flujo del proceso de producción de biodiésel a partir de aceite usado	16
Figura 2.3 Resumen del algoritmo de optimización.....	24
Figura 3.1 Comparación entre datos experimentales (●) para la etanólisis de aceite de palma de Narváez et al. (2015) con curvas del modelo cinético teórico (—)	26
Figura 3.2 Comparación entre datos experimentales (●) para la metanólisis de aceite de palma de a) Narváez et al. (2007) y b) Leevijit et al.(2004) con curvas del modelo cinético teórico (—).....	27
Figura 3.3 Plano diseño del reactor	31
Figura 3.4 Resultados de rendimiento, costo y huella de carbono del conjunto solución	32
Figura 3.5 Gráficos de superficie para a) Rendimiento (%) b) Huella de Carbono (kg CO ₂ -eq/kg) c) Costos (\$/kg) en función de la Concentración de Catalizador NaOH (%) y Relación Molar para una temperatura de 52°C y un tiempo de 75 minutos.....	33
Figura 3.6 Gráficos de superficie para a) Rendimiento (%) b) Huella de Carbono (kg CO ₂ -eq/kg) c) Costos (\$/kg) en función del Tiempo (min) y Temperatura (°C) para una relación molar de 6:1 y una concentración de NaOH de 0.8%.....	34

Figura 3.7 Frecuencia de los parámetros de operación en las soluciones del conjunto Pareto.....	37
Figura 3.8 Análisis de flujo de caja para las soluciones obtenidas a partir del método R	41
Figura 3.9 Proporción de materia prima y servicios en a) Costos (\$/kg) b) Huella de Carbono (kg CO ₂ -eq/kg) para la solución óptima	43
Figura A.1 Dimensiones de la paleta del agitador de turbina (McCabe et al., 1991)....	56
Figura B.1 Número de Potencia vs Número de Reynolds para el cálculo de potencia según el tipo de agitador (Couper et al., 2012)	59
Figura C.1 Plano completo del diseño del reactor.....	60
Figura E.1 Flujo de caja para la solución con Rank #1.....	69
Figura E.2 Flujo de caja para la solución con Rank #2	69
Figura E.3 Flujo de caja para la solución con Rank #3	70
Figura E.4 Flujo de caja para la solución con Rank #4	70
Figura E.5 Flujo de caja para la solución con Rank #5	71
Figura E.6 Flujo de caja para la solución con Rank #6	71
Figura E.7 Flujo de caja para la solución con Rank #7	72
Figura E.8 Flujo de caja para la solución con Rank #8	72
Figura E.9 Flujo de caja para la solución con Rank #9	73
Figura E.10 Flujo de caja para la solución con Rank #10.....	73

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Composición másica porcentual de biodiesel obtenido a partir de la transesterificación con metanol de aceite de soya y aceite usado de cocina (Peng et al., 2006)	4
Tabla 1.2 Parámetros del modelo cinético de la transesterificación del aceite de palma con metanol y etanol respectivamente (Narváez et al., 2015).....	11
Tabla 2.1 Propiedades del aceite usado y metanol (Cengel & Boles, 2012; Mero Benavides, 2022).....	17
Tabla 2.2 Precio de las materias primas y suministros empleados (EP PETROECUADOR, 2022a; QUIMPAC ECUADOR S.A., 2022).....	22
Tabla 3.1 Descripción de los experimentos empleados para la validación	28
Tabla 3.2 Resultados de validación del modelo cinético	30
Tabla 3.3 Dimensiones del reactor batch propuesto.....	31
Tabla 3.4 Top 10 soluciones obtenidas a partir del método R	38
Tabla 3.5 Resultados de la estimación del capital de inversión	39
Tabla 3.6 Producción de biodiesel para las soluciones obtenidas por el método R ..	40
Tabla 3.7 Resultados del análisis económico para las mejores soluciones por el método R.....	41
Tabla 3.8 Condiciones de operación óptimas.....	42
Tabla C.1 Dimensiones y propiedades del serpentín de calentamiento.....	60
Tabla D.1 Resultados del Conjunto Pareto.....	61

CAPÍTULO 1

1. INTRODUCCIÓN

1.1 Descripción del problema

La International Energy Outlook 2016 (IEO2016) prevé que para el 2040 el consumo global de energía se incrementará hasta en un 48% (U.S. Energy Information Administration, 2016). Actualmente, la fuente de energía predominante son los combustibles fósiles. Sin embargo, debido al incremento en la demanda energética y a la reserva limitada de recursos fósiles, se ha comenzado a optar por diferentes alternativas, dentro de las que destaca la producción de biodiesel a partir de la transesterificación de aceite vegetal usado.

El proceso de producción de biodiesel ha sido implementado en varios países. Indonesia es el mayor fabricante del mundo dominando el 16% de la producción global con un aproximado de 137 mil barriles diarios (Torroba, 2020). La compañía ecuatoriana “La Fabril” posee la única planta en el país respecto a la actividad de biodiesel con una capacidad de hasta 144 mil toneladas al año (Roca Meza, 2014). De acuerdo con “La Fabril”, los costos de producción de biodiesel a partir de aceite de palma fresco exceden los \$1000/ton donde el costo de esta materia prima representa alrededor del 76% de los costos totales de producción (Almeida-Naranjo et al., 2022). Esto ocasiona que el precio de biodiesel esté entre 5.56 \$/gal (Clickgasoil, 2021) lo cual está por encima del diésel, el cual está actualmente en 4.326 \$/gal (EP PETROECUADOR, 2022b). Emplear aceite de palma usado como materia prima, disminuiría significativamente los costos de producción.

Por otro lado, varios estudios han determinado que la transesterificación es una vía rentable y ecológica para convertir aceite vegetal usado a biodiesel (Hosseinzadeh-Bandbafha et al., 2022). Además, indican que el uso de biocombustibles reduce la emisión de gases de efecto invernadero y las emisiones de carbono (Ögmundarson et al., 2020), por lo que entonces se suele pensar que esta alternativa no está asociada con potenciales riesgos ambientales. No obstante, en el análisis de ciclo de vida (LCA) del biodiesel se detectaron impactos ambientales significativos como un aumento de emisiones de hidrocarburos aromáticos en el aire producto de una mayor demanda de

metanol para la transesterificación, el consumo eléctrico proveniente de fuentes fósiles para los procesos de calentamiento involucrados, así también como los procesos complejos de recolección y pretratamiento del aceite usado (Hosseinzadeh-Bandbafha et al., 2022).

Para industrializar un proceso, es primordial que a escala laboratorio se obtengan buenos resultados de rendimiento, lo que supone una mayor producción del producto principal. Diferentes parámetros son los que afectan el rendimiento de una reacción de transesterificación como la relación molar alcohol: aceite, la cantidad de catalizador o la temperatura de reacción, debido a esto el rendimiento del proceso puede estar en un rango de 70 – 90% (Pinto et al., 2005).

La variabilidad en el rendimiento de la reacción, los altos costos de producción y el alto impacto ambiental del proceso de biodiesel dificultan la implementación y el mantenimiento a largo plazo de una planta industrial de producción de biodiesel a partir de aceite usado. A las empresas no les resulta atractivo apostar e invertir por un proceso con alto costo de reactivos, bajo rendimiento e impacto ambiental significativo.

1.2 Justificación del problema

El año pasado, Ecuador se situó como el “segundo productor de aceite de palma de la región y el noveno en el mundo” (Danec, 2021). Esto implica que existe una elevada generación de residuos provenientes de este sector, de los cuales un 54% es desechado en vertederos y un 24% en desagües (Andrade Villegas & Moncada Rangel, 2020).

La reutilización de residuos es una de las actividades principales de la economía circular, un modelo que se ha ido fomentando y fortaleciendo globalmente, y que además es clave para lograr los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS). En el país hay disponibilidad de aceite vegetal usado para ser reutilizado y ser convertido en biodiesel, sin embargo, no se cuenta con el desarrollo industrial para lograrlo.

Según el ODS 9, se debe reconvertir la industria para que sea más sostenible, y para ello se debe hacer uso de nuevas tecnologías. Varias investigaciones proponen como herramienta una optimización multiobjetivo basado en 3 ejes: energético, económico y ambiental, para así conseguir producción limpia y desarrollo sostenible de procesos químicos complejos a gran escala. Este tipo de optimización multiobjetivo ha sido

aplicado por industrias productoras de etileno (Dai et al., 2021), combustibles a base de biomasa (Espinoza Vázquez et al., 2022), así también como en sistemas de desalinización (Kowsari & Deymi-Dashtebayaz, 2021), permitiéndoles determinar condiciones de operación sostenibles de manera eficiente.

Por lo que, aplicar una optimización multiobjetivo al proceso de producción de biodiesel permitirá determinar las condiciones de operación sostenibles para el proceso a partir de aceite usado, de tal forma que se obtenga un mayor rendimiento a bajo costo y con un bajo impacto ambiental. Esto resultaría en una propuesta incentivadora para que más empresas ecuatorianas decidan apuntar al mercado de los biocombustibles bajo el objetivo de producción y consumo responsables.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Determinar las condiciones de operación óptimas del proceso de transesterificación de aceite de palma usado para la reducción de los costos de operación e impacto ambiental y el aumento del rendimiento mediante la aplicación de una optimización multiobjetivo.

1.3.2 Objetivos Específicos

- Desarrollar la validación del modelo cinético de la reacción de transesterificación de triglicéridos para la producción de biodiesel mediante el uso de un lenguaje de programación.
- Plantear las funciones objetivo de rendimiento, costos e impacto ambiental de la etapa del proceso de síntesis del biodiesel mediante el desarrollo de balances de masa y energía en el sistema.
- Aumentar el rendimiento del proceso de producción de biodiesel, en paralelo a la reducción de los costos de operación e impacto ambiental mediante la aplicación de un algoritmo de optimización en un lenguaje de programación.

1.4 Marco teórico

1.4.1 Biodiesel

El biodiesel es un biocombustible que puede ser elaborado a partir de aceites vegetales o grasas de animales. Este es considerado como una importante alternativa energética por ser un combustible renovable con características similares a los combustibles fósiles, haciéndolo óptimo para la sustitución parcial o total de los mismos. Desde el punto de vista ecológico, su uso en motores de combustión interna resulta atractivo, pues permitiría reducir las emisiones de CO₂ y la dependencia de fuentes de energías no renovables (Tejada Tovar et al., 2013).

El biodiesel es una mezcla de metil ésteres o etil ésteres de ácidos grasos, cuya composición puede variar dependiendo de la materia prima empleada para su producción. Esto se evidencia en la *Tabla 1.1* donde 2 diferentes tipos de biodiesel fueron obtenidos a partir de la metanólisis de aceite de soya y aceite usado de cocina respectivamente.

Tabla 1.1 Composición másica porcentual de biodiesel obtenido a partir de la transesterificación con metanol de aceite de soya y aceite usado de cocina (Peng et al., 2006)

<i>Compuesto</i>	Composición másica (%)	
	<i>Biodiesel de aceite de soya</i>	<i>Biodiesel de aceite usado de cocina</i>
Metil éster de ácido linoleico	47.7	50.1
Metil éster de ácido oleico	18.4	15.6
Metil éster de ácido palmítico	16.3	17.1
Metil éster de ácido linolénico	10.2	7.3
Metil éster de ácido esteárico	6.6	6.1
Metil éster de ácido araquídico	0.5	0.8
Metil éster de ácido heptadecanoico	0.1	0.1
Metil éster de ácido mirístico	0.1	0.1
Metil éster de ácido palmitoleico	0.1	0.2
Metil éster de ácido 11-eicosenoico	0.0	0.4

Metil éster de ácido caprílico	0.0	0.6
Metil éster de ácido docosanoico	-	0.8
Ácido n-hexadecanoico	-	0.3
Metil éster de ácido tetracosanoico	-	0.2
Metil éster de ácido tricosanoico	-	0.1
Metil éster de ácido heneicosanoico	-	0.1
Metil éster de ácido pentadecanoico	-	0.2

1.4.2. Producción de Biodiesel

1.4.2.1. Reacción de transesterificación

La transesterificación o alcoholólisis es una reacción reversible en donde los ésteres experimentan un intercambio de un grupo alcoxi por otro grupo del mismo tipo. Este tipo de reacciones puede darse en presencia o en ausencia de un catalizador, el cual puede ser ácido o básico (L. G. Wade, 2011).

La reacción de transesterificación de un aceite vegetal se da por el intercambio de los grupos alquilo orgánicos presentes en el aceite, con el grupo alcoxi presente en el alcóxido, el cual se formó por el alcohol y el catalizador. En el mecanismo de transesterificación, el carbono carbonílico presente en el aceite vegetal sufre una sustitución nucleofílica por el alcóxido. Esto produce un intermediario tetraédrico, el cual puede volver al material de inicio o transformarse en glicerol (Patel & Shah, 2015).

En la transesterificación de los aceites vegetales, un triglicérido reacciona con alcohol en presencia de una ácido o base fuerte produciendo una mezcla de ésteres alquilo de ácidos grasos y glicerol. Todo el proceso es una consecuencia de tres reacciones reversibles en cadena, en donde se forman como productos intermedios: monoglicéridos y diglicéridos. La reacción requiere de una relación estequiométrica de 1 mol de triglicérido por 3 moles de alcohol como se muestra en la *Figura 1.1*. Un exceso de alcohol es empleado para garantizar un buen rendimiento de la reacción.

Los alcoholes utilizados para la producción de biodiesel por transesterificación de aceite vegetal son el metanol o el etanol. Debido a ello, surgieron los términos *metanólisis* y *etanólisis*, haciendo referencia al alcohol empleado como materia prima en la transesterificación.

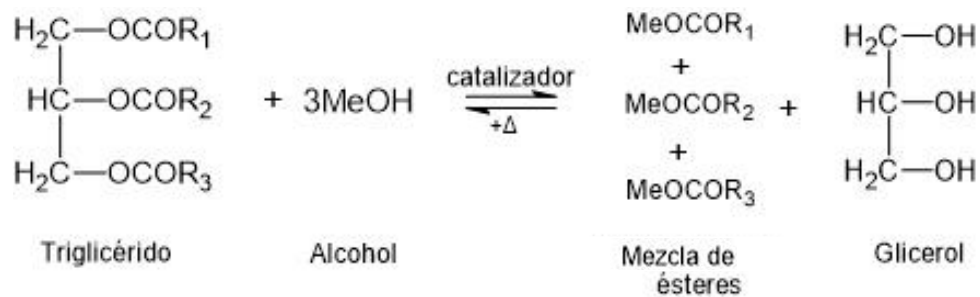


Figura 1.1 Reacción de transesterificación para la producción de biodiesel (Schuchardt et al., 1998)

1.4.2.2. Parámetros de operación del proceso

En el proceso de producción de biodiesel se deben considerar ciertos parámetros de operación que influyen en la reacción de transesterificación, y, por lo tanto, son determinantes para que el producto deseado esté en mayor proporción.

Uno de estos parámetros es el tipo a catalizador a emplear. La función principal del catalizador es favorecer los choques efectivos entre las moléculas de los reactivos dando lugar a la formación de los productos, esto implica una reducción en la energía de activación y por ende un aumento en la velocidad de la reacción. Como previamente se mencionó, este tipo de reacción puede tener lugar en condiciones ácidas o básicas. Sin embargo, estudios previos han demostrado que el uso de catalizadores básicos solubles en alcohol, como el hidróxido de sodio (NaOH) o hidróxido de potasio (KOH), proporcionan reacciones más rápidas con un mayor rendimiento (Medina Villadiego et al., 2015). El catalizador básico más utilizado a nivel industrial es el NaOH pues, por tener un menor peso molecular, se requiere de una menor cantidad (Narváez Rincón et al., 2004).

No sólo el tipo de catalizador es importante, sino también su concentración. Una baja concentración implica una menor superficie catalítica para llevar a cabo la reacción de transesterificación lo que provoca un bajo rendimiento. Por otro lado, una concentración muy alta conlleva a un aumento en la viscosidad de los reactivos, que no sólo provoca un bajo rendimiento, sino que también aumenta la probabilidad de que ocurra la saponificación (Suzihaque et al., 2022).

Otro parámetro es la temperatura de reacción. A altas temperaturas, las moléculas se encuentran con mayor nivel de energía, aumentando la cinética de la reacción (Castillo González et al., 2020) y favoreciendo la formación de productos. No obstante, para seleccionar una temperatura de operación para la transesterificación se debe tener en cuenta que esta no debe superar la temperatura de ebullición del alcohol, ya que esto no favorece la reacción. Por ejemplo, en el estudio de la cinética de la metanólisis del aceite de palma se realizaron pruebas experimentales a 50, 55 y 60°C (Narváez et al., 2007), estando por debajo de la temperatura de ebullición del metanol de 64.7°C.

Varios estudios indican que para la formación de ésteres de alquilo, la relación molar alcohol:aceite debe ser igual o mayor a 6:1 (Castillo González et al., 2020), por lo que este es otro parámetro que afecta a la reacción. Al aumentar la relación molar alcohol:aceite, la cantidad de monoglicéridos y diglicéridos disminuye, aumentando la producción de ésteres de alquilo. Sin embargo, esta relación no puede ser muy alta pues se ha demostrado que el rendimiento de la reacción no aumenta, más bien dificulta el proceso de purificación del biodiesel (Narváez Rincón et al., 2004).

Al tener una mezcla de reactivos no miscibles, se requiere de una velocidad de agitación superior a 600 rpm para que la mezcla se comporte como una mezcla cuasi-homogénea favoreciendo la transferencia de masa en la reacción (Castillo González et al., 2020). Por eso, la velocidad de agitación es otro parámetro imprescindible por considerar en la reacción de esterificación, especialmente porque una velocidad mayor a los 800 rpm incurre en una saponificación.

Por último, el tiempo de reacción. Tiempos de reacción muy bajos provocarán que el aceite y el alcohol no se mezclen adecuadamente, mientras que tiempos largos de reacción provocarían que el éster obtenido se hidrolice y posteriormente ocurra la saponificación. En ambos casos, se obtendría un rendimiento muy bajo (Suzihaque et al., 2022). Dependiendo del enfoque del estudio, ya sea para analizar la cinética de reacción o el rendimiento del proceso, el tiempo de la reacción de transesterificación suele estar en un rango de 30 a 120 minutos.

1.4.3. Optimización multiobjetivo

La optimización multiobjetivo (MOO) consiste en optimizar un proceso de manera sistemática y simultánea de un determinado grupo de objetivos individuales. Para lograr la optimización de un proceso, se deben considerar los siguientes elementos:

- Las *Funciones Objetivo*, pues son “la medida cuantitativa del funcionamiento del sistema que se desea optimizar” (Galeano Sánchez & Montoya Corrales, 2008).
- Las *variables*, ya que por medio de ellas se pueden tomar decisiones que afecten a las funciones objetivo. Se clasifican en dependientes, también conocidas como variables de decisión, e independientes o variables de control.
- Las *restricciones*, pues representan las relaciones que las variables deben satisfacer. Estas están expresadas en forma de ecuaciones e inecuaciones.

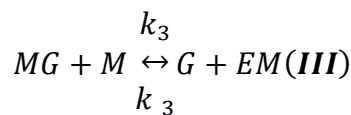
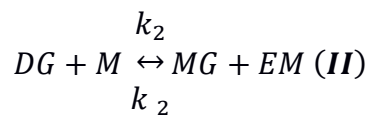
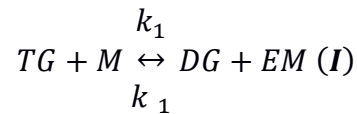
En este tipo de optimizaciones no existe una solución global única, sino un conjunto de puntos que contienen las soluciones factibles del problema, denominado Conjunto Pareto (Orjuela Castro & Aranda Pinilla, 2015). Una solución *factible* es aquella donde las variables de decisión logran optimizar las funciones objetivo, a la vez que satisfacen las restricciones del problema.

A continuación, se presentan términos clave para el planteamiento de las *funciones* objetivo de rendimiento, costos e impacto ambiental.

1.4.3.1. Modelo cinético de transesterificación

En un mecanismo de reacción en cadena, el producto intermediario se forma en la primera reacción, llamada paso de iniciación. Posteriormente, este reacciona con el reactivo para formar un producto y un producto intermediario, etapa denominada propagación. Finalmente, en la terminación se obtiene el producto final (Levenspiel, 2004).

El modelo propuesto por Narváez et al. (2007), supone que la reacción de transesterificación involucra tres reacciones reversibles en cadena que siguen una ley de velocidad elemental:



Al desarrollar este mecanismo, se obtiene el sistema de seis ecuaciones diferenciales no lineales mostrado en la *Figura 1.2*.

$$\begin{aligned} \frac{d[TG]}{dt} &= -k_1[TG] \cdot [M] + k_{-1}[DG] \cdot [EM] \\ \frac{d[DG]}{dt} &= k_1[TG] \cdot [M] - k_{-1}[DG] \cdot [EM] - k_2[DG] \cdot [M] + k_{-2}[MG] \cdot [EM] \\ \frac{d[MG]}{dt} &= k_2[DG] \cdot [M] - k_{-2}[MG] \cdot [EM] - k_3[MG] \cdot [M] + k_{-3}[G] \cdot [EM] \\ \frac{d[EM]}{dt} &= k_1[TG] \cdot [M] - k_{-1}[DG] \cdot [EM] + k_2[DG] \cdot [M] - k_{-2}[MG] \cdot [EM] + k_3[MG] \cdot [M] - k_{-3}[G] \cdot [EM] \\ \frac{d[G]}{dt} &= k_3[MG] \cdot [M] - k_{-3}[G] \cdot [EM] \\ \frac{d[M]}{dt} &= -\frac{d[EM]}{dt} \end{aligned}$$

Figura 1.2 Sistema de ecuaciones diferenciales del modelo cinético teórico (Narváez et al., 2007)

Narváez et al. (2015) extendió el análisis del modelo cinético anterior, para considerar la influencia de la temperatura de reacción y concentración de catalizador en las constantes cinéticas mediante la siguiente expresión basada en la ecuación de Arrhenius:

$$k = k e^{\frac{E}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{cat} + C_{cat}} \right)$$

Donde:

$$E: \text{Energía de activación } \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol}} \right]$$

$$k_{cat}: \text{Efecto del catalizador en la reacción } \left[\% \frac{w_{cat}}{w_{oil}} \right]$$

Bajo estas consideraciones, el modelo cinético integrado resultó en un nuevo sistema de ecuaciones diferenciales. Los parámetros constantes del modelo se muestran en la *Tabla 2.1*.

$$\begin{aligned} \frac{d[TG]}{dt} &= -k_1 e^{\frac{E_1}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{1cat} + C_{cat}} \right) [TG][M] + k_{-1} e^{\frac{E_{-1}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-1cat} + C_{cat}} \right) [DG][EM] \\ \frac{d[DG]}{dt} &= k_1 e^{\frac{E_1}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{1cat} + C_{cat}} \right) [TG][M] - k_{-1} e^{\frac{E_{-1}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-1cat} + C_{cat}} \right) [DG][EM] \\ &\quad - k_2 e^{\frac{E_2}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{2cat} + C_{cat}} \right) [DG][M] + k_{-2} e^{\frac{E_{-2}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-2cat} + C_{cat}} \right) [MG][EM] \\ \frac{d[MG]}{dt} &= k_2 e^{\frac{E_2}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{2cat} + C_{cat}} \right) [DG][M] - k_{-2} e^{\frac{E_{-2}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-2cat} + C_{cat}} \right) [MG][EM] \\ &\quad - k_3 e^{\frac{E_3}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{3cat} + C_{cat}} \right) [MG][M] + k_{-3} e^{\frac{E_{-3}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-3cat} + C_{cat}} \right) [G][EM] \\ \frac{d[EM]}{dt} &= k_1 e^{\frac{E_1}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{1cat} + C_{cat}} \right) [TG][M] - k_{-1} e^{\frac{E_{-1}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-1cat} + C_{cat}} \right) [DG][EM] \\ &\quad + k_2 e^{\frac{E_2}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{2cat} + C_{cat}} \right) [DG][M] - k_{-2} e^{\frac{E_{-2}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-2cat} + C_{cat}} \right) [MG][EM] \\ &\quad + k_3 e^{\frac{E_3}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{3cat} + C_{cat}} \right) [MG][M] - k_{-3} e^{\frac{E_{-3}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-3cat} + C_{cat}} \right) [G][EM] \\ \frac{d[G]}{dt} &= k_3 e^{\frac{E_3}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{3cat} + C_{cat}} \right) [MG][M] - k_{-3} e^{\frac{E_{-3}}{RT}} \left(\frac{C_{cat}}{k_{-3cat} + C_{cat}} \right) [G][EM] \\ \frac{d[M]}{dt} &= -\frac{d[EM]}{dt} \end{aligned}$$

Figura 1.3 Sistema de ecuaciones diferenciales del modelo cinético teórico (Narváez et al., 2015)

Tabla 1.2 Parámetros del modelo cinético de la transesterificación del aceite de palma con metanol y etanol respectivamente (Narváez et al., 2015)

Grupo	Parámetro	Metanólisis	Etanólisis
Efecto del catalizador (% w_{cat}/w_{oil})	$k_{1\ cat}$	3.98	1.80
	$k_{-1\ cat}$	0	0.32
	$k_{2\ cat}$	2.53	1.94
	$k_{-2\ cat}$	0.05	0
	$k_{3\ cat}$	25.28	31.94
	$k_{-3\ cat}$	0.35	0.15
Constantes cinéticas del modelo ($L/mol * min$)	k_1	2.32	7.73
	k_{-1}	0.92	0.02
	k_2	7.97	8.32
	k_{-2}	0.09	0.67
	k_3	6.99	5.83
	k_{-3}	0.03	0.02
Energía de activación (cal/mol)	E_1	11.03	12.65
	E_{-1}	10.81	8.34
	E_2	9.6	7.59
	E_{-2}	11.05	8.39
	E_3	9.35	6.73
	E_{-3}	10.48	15.10
Constante de los gases ($cal/K * mol$)	R	1.988	

1.4.3.2. Rendimiento

El rendimiento es una proporción porcentual que se define como la cantidad real obtenida de un producto deseado dividido para la cantidad teórica a obtener de dicho producto en base a la relación estequiométrica (σ) del reactivo limitante alimentado. En este caso, este término está relacionado con la reacción de transesterificación, teniendo como producto deseado al biodiesel. La siguiente ecuación resume lo indicado:

$$Rendimiento (\%) = \frac{Moles\ biodiesel\ producido}{Moles\ de\ aceite\ usado * \sigma_{biodiesel/aceite}} \times 100\%$$

1.4.3.3. Costos de operación

Los costos de operación se expresan como la suma de todos los valores incurridos en la producción de un bien o servicios durante un determinado periodo de tiempo. Los costos de operación comprenden los costos por materia prima, costo por mano de obra directa y costos indirectos de fabricación (consumo de energía, mantenimiento de los equipos, personal, etc.) (Arias et al., 2020), es decir:

$$\text{Costos de operación} = \text{Costos directos} + \text{Costos indirectos}$$

1.4.3.4. Huella de carbono

La huella de carbono es un indicador del impacto ambiental de una actividad según su emisión directa o indirecta de gases de efecto invernadero (GEI). Las emisiones directas son aquellas que están controladas por la actividad, mientras que las emisiones indirectas corresponden a las consecuencias para su desarrollo.

Las emisiones de GEI se miden en términos de CO₂-eq ya que “es la unidad universal que indica el potencial de calentamiento atmosférico (PCG) de cada uno” (Ministerio para la Transición Ecológica, 2017).

La huella de carbono corresponde a la sumatoria del consumo (CE) de las n fuentes de emisión por su respectivo factor de emisión (FE) de CO₂-eq. Esto se resume como:

$$\text{Huella de Carbono} = \sum_{i=1}^n CE_i * FE_i$$

CAPÍTULO 2

2. METODOLOGÍA

La metodología aplicada se resume a continuación en la *Figura 2.1*:

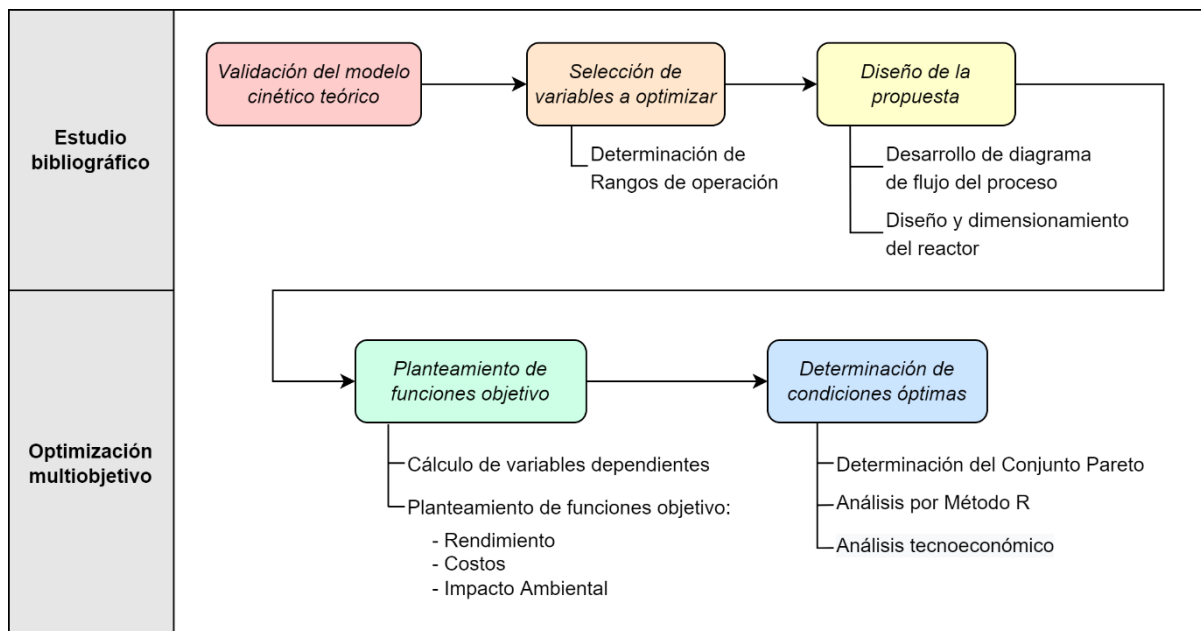


Figura 2.1 Resumen del desarrollo del proyecto

La herramienta que se empleó para el desarrollo de este proyecto fue el lenguaje de programación Python 3.8.8, en el entorno de *Jupyter Notebook*. Así también, se utilizó el *software* openLCA 1.11.0 para la determinación de los factores de emisión de impacto ambiental.

2.1 Estudio bibliográfico

2.1.1 Validación de modelo cinético teórico

El enfoque principal del modelo propuesto por Narváez et al. (2015) fue la *etanólisis* del aceite de palma. Sin embargo, también se reportan los parámetros de la *metanólisis* bajo la suposición de que ambas reacciones siguen el mismo mecanismo.

Con base a lo mencionado, se desarrolló la validación del modelo cinético de la *Figura 1.3*. En primera instancia, se comparó el grado de ajuste de los datos

cinéticos experimentales de Narváez et al. (2015), Narváez et al. (2007) y Leevijit et al. (2004) con la curva predicha por el modelo. El criterio de validación fue R^2 superiores a 0.9, para lo que el modelo tendrá un buen ajuste y será altamente confiable (Bloomenthal, 2021).

Posteriormente, se utilizaron los datos de Narváez et al. (2007), Cheng et al. (2004), Wongjaikham et al. (2021) y Silva et al. (2021) para comparar sus resultados de rendimiento o conversión con los predichos por el modelo cinético. En este caso, el criterio de validación fue un margen de error menor al 10%. Esto permitió establecer los límites del rango de operación para cada variable donde el modelo sea aplicable.

Para la validación se utilizó el lenguaje de programación Python en el entorno de *Jupyter Notebook*. Se empleó el módulo *chemical_kinetics* junto con las librerías *numpy*, *math* y *lmfit* para evaluar el modelo cinético. La librería *sklearn* fue utilizada para determinar el coeficiente de determinación R^2 . Para una representación visual de los resultados, se usó la librería *matplotlib*.

2.1.2 Selección de variables a optimizar

De acuerdo con el apartado 1.4.2.2 *Parámetros de operación del proceso*, son varios los factores que influyen en la reacción de transesterificación y por ende en su cinética. En este proyecto las variables independientes seleccionadas fueron **temperatura de reacción, tiempo de reacción, concentración de catalizador y relación molar alcohol: aceite**. Con esto, el vector de variables a optimizar quedó expresado como:

$$x = (T, t, C_{cat}, RM)$$

Los rangos de operación utilizados en este estudio fueron los siguientes:

- *Temperatura: T* (°C) = [45, 46, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59, 60]
- *Tiempo de reacción: t* (min) = [30, 45, 60, 75, 90, 105, 120]
- *Catalizador: C_{cat}* ($\frac{m}{m}$) = [0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9, 1.0, 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5]
- *Relación molar: RM* = [3: 1, 4: 1, 5: 1, 6: 1, 7: 1, 8: 1, 9: 1, 10: 1]

Estos límites se establecieron mediante revisión de estudios experimentales previos, y posterior a la validación del modelo cinético. El rango de la temperatura se situó entre 45°C y 60°C, de manera que se evite la evaporación del metanol. En el caso del tiempo, se estableció un rango de 30 a 120 minutos, ya que por ser una reacción espontánea no requiere de períodos prolongados de reacción. Para la relación molar se consideró el valor mínimo de 3:1, según la estequiometría de la reacción, y una relación en exceso de 10:1 para favorecer al rendimiento. Con respecto a la concentración de catalizador, el límite inferior se estableció en 0.2% según lo reportado por Narváez et al. (2007) y para el límite superior en 1.5% de acuerdo con Wongjaikham et al. (2021).

Cabe aclarar que, debido a que las funciones objetivo dependen del modelo cinético compuesto por ecuaciones diferenciales no lineales, se fijaron valores puntuales en lugar de un rango continuo. Con esto se generó un experimento factorial donde cada una de las combinaciones del vector x resuelve el modelo cinético y, posteriormente, los resultados son utilizados en el *algoritmo de optimización*. Además, trabajar con valores fijos resulta ventajoso pues a nivel sería más sencillo controlar cada variable en el proceso.

2.1.3 Diseño de la propuesta de producción de biodiesel

En la *Figura 2.2* se presenta el flujo del proceso para la etapa de síntesis de producción *batch* de biodiesel.

Al reactor R-101 ingresa una mezcla NaOH-metanol (Corriente 1) y aceite de palma usado previamente tratado (Corriente 2) para dar lugar a la reacción de transesterificación. Este reactor de tipo *batch* está constituido por un agitador mecánico y un serpentín de calentamiento que utiliza vapor de agua suministrado (Corriente 6) por la caldera E-101.

La caldera trabaja con gas natural licuado GNL (Corriente 5) como combustible y tiene admisión de aire (Corriente 6) a condiciones ambientales para que se produzca la combustión.

Bajo esta propuesta, las variables dependientes que se consideraron fueron:

- Volumen efectivo, es decir el volumen que ocupa la mezcla de reactivos y productos, en el reactor R-101
- Concentración final de reactivos y productos
- Potencia requerida por el agitador del reactor R-101
- Consumo de combustible de la caldera E-101

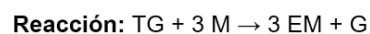
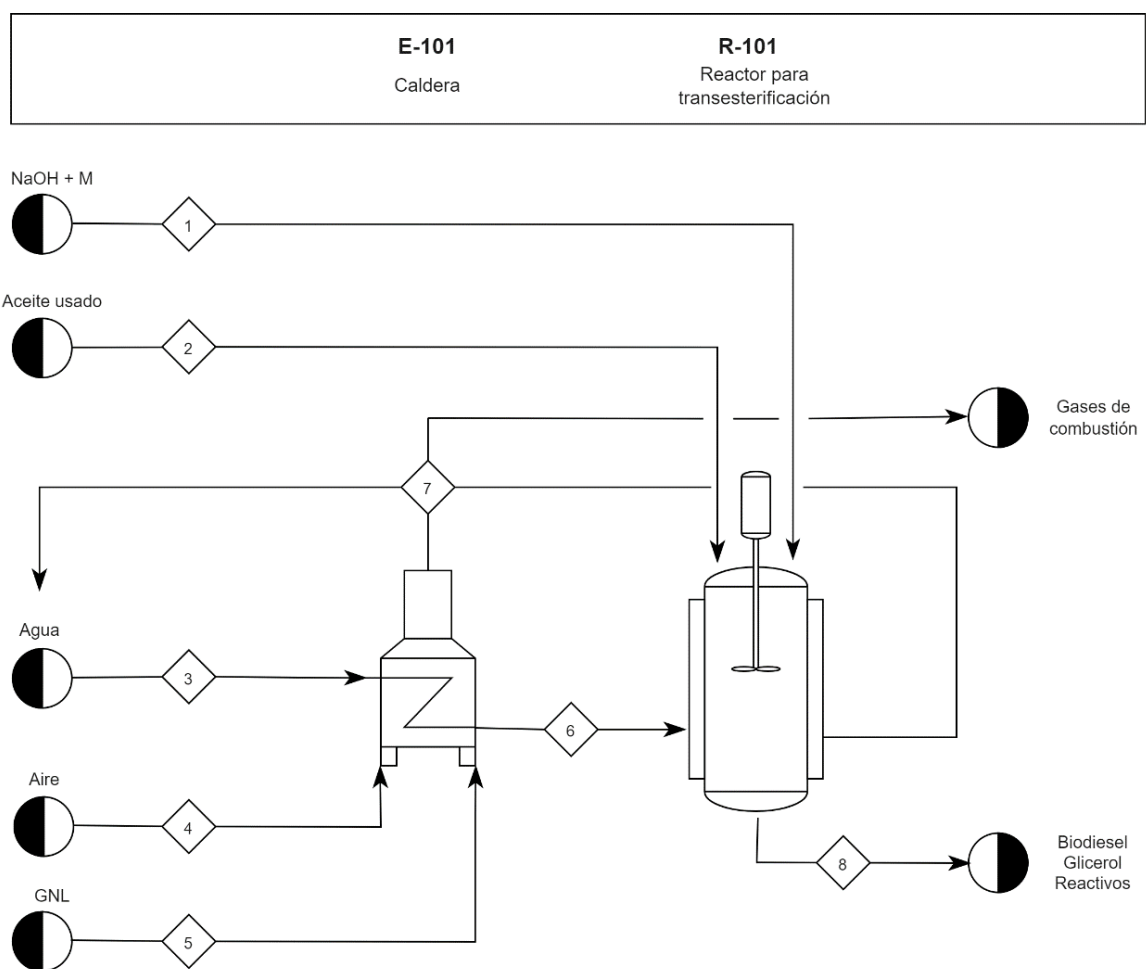


Figura 2.2 Diagrama de flujo del proceso de producción de biodiésel a partir de aceite usado

2.1.3.1 Diseño y dimensionamiento del reactor

Las variables dependientes inciden en los objetivos planteados por lo que fue necesario diseñar el reactor *batch*. Se planteó un reactor cilíndrico de base esférica con un serpentín en su interior y un agitador mecánico para asegurar la homogeneidad en la reacción.

Para el dimensionamiento del reactor se siguió la metodología descrita en el *Apéndice A* bajo las siguientes consideraciones:

- Velocidad de agitación: 600 RPM
- Volumen efectivo máximo del reactor: 1 m³, para lo que se fijó la cantidad de aceite usado en 540 kg por batch
- Densidad constante de la mezcla de los reactivos

2.2 Optimización multiobjetivo

2.2.1 Planteamiento de funciones objetivo

2.2.1.1 Cálculo de las variables dependientes

Tabla 2.1 Propiedades del aceite usado y metanol (Cengel & Boles, 2012; Mero Benavides, 2022)

Reactivo	Parámetro	Valor
<i>Aceite de palma usado</i>	Índice de saponificación (mg/g)	253.57
	Índice de acidez (mg KOH/g aceite)	2.47
	Peso molecular (g/mol)	670.25
	Viscosidad dinámica a 40°C (cPs)	42.61
	Densidad (kg/m ³)	891.7
<i>Metanol</i>	Conductividad térmica a 60°C (W/m K)	0.1765
	Peso molecular (g/mol)	32.04
	Densidad (kg/m ³)	792
	Viscosidad dinámica a 40°C (cPs)	3.345 x 10 ⁻⁴
	Conductividad térmica a 60°C (W/m K)	0.01904

En primera instancia, se determinaron las propiedades de la mezcla que se forma en el reactor R-101. Se asumió que el catalizador no tiene influencia sobre estas propiedades, por lo que se trabajó únicamente con las propiedades de los reactivos. Estos valores se muestran en la *Tabla 2.2*. Se definieron *funciones* en *Jupyter Notebook* para recalcular las propiedades de la mezcla en base al vector x , siguiendo los pasos descritos a continuación.

- **Viscosidad dinámica de la mezcla**

1. Se utilizó la ecuación de *Extrapolación de Lewis-Squires* (Cruz Fierro, 2018b) para calcular la viscosidad de los reactivos puros a la temperatura de reacción:

$$\mu_i^{-0.2661} = \mu_1^{-0.2661} + \frac{T - T_1}{37.073}$$

Donde:

μ_i = Viscosidad dinámica del reactivo a $T_{reacción}$ [Pa · s]

μ_1 = Viscosidad dinámica del reactivo a T_1 [Pa · s]

T_1 = Temperatura de referencia [°C]

2. Se utilizó la ecuación propuesta por Kendall y Monroe (Cruz Fierro, 2018b) para el cálculo de la viscosidad de mezcla:

$$\ln(\mu_{mix}) = x_a \ln(\mu_a) + x_m \ln(\mu_m)$$

- **Densidad de la mezcla**

$$\rho_{mix} = \frac{1}{\frac{w_m}{\rho_m}} + \frac{1}{\frac{w_a}{\rho_a}}$$

- **Calor específico de la mezcla**

1. Se calculó el calor específico para el aceite según la expresión propuesta por Liley et al. (1999):

$$C_{Pa} = \frac{0.5}{0.8917^{0.5}} + 0.007 * (T - 15)$$

2. Se calculó el calor específico para el metanol mediante:

$$C_{Pm} = 75.86 \times 10^{-3} + 16.83 \times 10^{-5} T$$

3. Se determinó el calor específico de la mezcla como:

$$C_{Pmix} = w_m * C_{Pm} + w_a * 4.184 C_{Pa}$$

De igual manera, se plantearon *funciones* en *Jupyter Notebook* para las variables dependientes. A continuación, se describen los pasos seguidos para el cálculo respectivo y las consideraciones tomadas.

- **Volumen efectivo de la mezcla**

$$V_e = V_a + V_m$$

- **Concentración final de reactivos y productos**

El índice de acidez del aceite usado, mostrado en la *Tabla 2.1*, representa una composición de ácidos grasos libres menor al 3%. Debido a ello, se asumió que el aceite estaba compuesto en su totalidad por triglicéridos. Bajo esta suposición:

1. Se determinaron las concentraciones iniciales de los reactivos:

$$[TG]_0 = \frac{m_a}{V_e * PM_a}$$

$$[M]_0 = \frac{m_a * RM}{V_e * PM_a}$$

2. Se resolvió el sistema de ecuaciones diferenciales del modelo cinético validado. Para ello se usaron las concentraciones iniciales de los reactivos y las variables independientes de cada una de las

combinaciones. Además, se trabajó con la función *odeint* de la librería *scipy.integrate* de *Python* ya que esta determina el mejor método numérico de integración para un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales (SciPy community, 2022).

Esto dio como resultado:

$$[TG]_f, [M]_f, [EM]_f, [DG]_f, [MG]_f, [G]_f$$

Que corresponden a las concentraciones en $\left[\frac{mol}{L}\right]$ de cada una de las especies involucradas en la transesterificación.

- **Potencia del agitador**

1. Se determinó el número de Reynolds (Re) para la mezcla mediante la siguiente ecuación:

$$Re = \frac{Da^2 N \rho_{mix}}{\mu_{mix}}$$

2. Se relacionó el número de Reynolds con el N_p mediante la gráfica de la *Figura B.1*.
3. Se determinó la potencia P del agitador por medio de la siguiente ecuación:

$$P = N_p * Da^5 * N^3 * \rho_{mix}$$

Cálculos preliminares mostraron que el Re obtenido para las diferentes combinaciones era superior a 10^3 . Como se observa en el *Apéndice B Figura B.1. Curva 6*, el N_p se mantiene constante alrededor de 1.3 para Re mayores a ese valor. Por lo tanto, la ecuación para determinar la potencia del agitador se resumió en:

$$P = 1.3 * Da^5 * N^3 * \rho_{mix}$$

- **Consumo de combustible**

1. Bajo las asunciones indicadas en el *Apéndice A* para el diseño del serpentín, se estimó el calor suministrado por el vapor de agua mediante el siguiente balance de energía:

$$Q_{vapor} = -\frac{Q_r}{0.9}$$

2. Se calculó el calor requerido en la caldera para la producción del vapor de servicio, asumiendo una eficiencia energética del 90%.

$$Q_{caldera} = -\frac{Q_{vapor}}{0.9}$$

3. Se calculó la masa de combustible mediante la siguiente ecuación:

$$m_{comb} = \frac{Q_{caldera}}{LHV}$$

Como se indicó, el combustible seleccionado para el funcionamiento de la caldera fue GNL cuyo poder calorífico inferior (LHV) es 45000 kJ/kg (Cengel & Boles, 2012).

2.2.1.2 Función Rendimiento

El producto deseado de esta reacción es el biodiesel, o [EM], mientras el reactivo limitante es el aceite [TG]. Por ello, la función objetivo de rendimiento se planteó como:

$$FO_{Rendimiento} = \max_x \frac{[EM]_f}{3 * [TG]_f}$$

2.2.1.3 Función Costos

Para el planteamiento de la función costos se consideró:

- *Consumo de Materia Prima*

$$C_{MP} = \frac{([M]_f * V_e * PM_m)}{10^3} * P_m + \frac{(m_a * C_{cat})}{10^5} * P_{cat}$$

- *Consumo eléctrico*

$$C_E = P * P_{kWh}$$

- *Consumo de combustible*

$$C_C = m_{comb} * P_{comb}$$

Como se puede apreciar, no se consideró el consumo del aceite usado. Debido a que este proviene de residuo industrial, su precio de adquisición suele ser relativamente bajo y, por lo tanto, despreciable. Siendo así, los precios utilizados para cada uno de los suministros se detallan a continuación:

Tabla 2.2 Precio de las materias primas y suministros empleados (EP PETROECUADOR, 2022a; QUIMPAC ECUADOR S.A., 2022)

Descripción	Simbología	Valor
Metanol (\$/kg)	P_m	1.07
Hidróxido de sodio (\$/kg)	P_{cat}	1.68
Electricidad (\$/kWh)	P_{kWh}	0.08
Gas natural (\$/kg)	P_{comb}	6.72

Finalmente, la función objetivo para los costos de producción quedó planteada como:

$$FO_{Costos} = \min_x \frac{C_{MP} + C_E + C_C}{M_{bio}}$$

2.2.1.4 Función Impacto Ambiental

Para el planteamiento de la función de impacto ambiental se utilizó el programa *openLCA 1.11.0* junto con el database *ef_secondarydata_202202*. Se determinaron los factores de emisión (FE) mediante regresión lineal para las siguientes variables:

- *Consumo de Materia Prima*

$$HC_M = 0.9573 \left(\frac{([M]_f * V_e * PM_m)}{10^3} \right) - 0.0492 \quad [R^2 = 1]$$

$$HC_{Cat} = 0.7751 \left(\frac{(m_a * C_{cat})}{10^5} \right) + 0.00002 \quad [R^2 = 1]$$

- *Consumo eléctrico*

$$HC_E = 52.211 \left(\frac{P}{10^3} \right) - 0.0002 \quad [R^2 = 1]$$

- *Consumo de combustible*

$$HC_C = 0.6115 (m_{comb}) - 0.0001 \quad [R^2 = 1]$$

Finalmente, la función objetivo de impacto ambiental quedó planteada como:

$$FO_{Impacto\ Ambiental} = \min_x \frac{HC_M + HC_{Cat} + HC_E + HC_C}{M_{bio}}$$

2.2.2 Determinación de condiciones óptimas

El algoritmo de optimización se esquematiza en la *Figura 2.3*. Como se puede observar, se usaron 3 estrategias diferentes que permitieron discriminar los resultados del conjunto solución hasta precisar la solución óptima.

El conjunto Pareto se determinó empleando el paquete *paretoset 1.2.0* de *Python*. Este paquete está basado en la metodología de *skyline operator* propuesta por Borzsony et al. (2001) que identifica las soluciones *no-dominadas* del conjunto, es decir aquellas que son la mejor en todos los objetivos o al menos en uno.

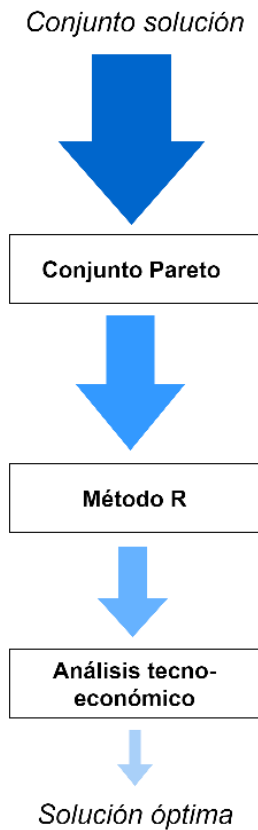


Figura 2.3 Resumen del algoritmo de optimización

Posteriormente, se utilizó el método R propuesto por Rao & Lakshmi (2021). Este es un algoritmo de ranking y selección de la *mejor* solución en base al nivel de importancia de cada uno los objetivos. Se establecieron a los objetivos de *rendimiento* y *costos* con el mismo grado de interés, por lo que el ranking quedó de la siguiente manera:

- Objetivo Rendimiento: $R_1 = 1.5$
- Objetivo Costos: $R_2 = 1.5$
- Objetivo Impacto Ambiental: $R_3 = 3$

Se seleccionaron las 10 soluciones con la mayor puntuación tras aplicar el Método R y se les realizó un análisis tecno-económico. Se siguió la metodología propuesta por Turton et al. (2018) para determinar el flujo de caja e indicadores económicos como TIR, VAN y *Período de recuperación de la inversión* para cada solución. Para esto se consideró:

- Capital de inversión inicial estimado en base al dimensionamiento del reactor propuesto y el factor de instalación para una planta existente según Smith (2016)
- Tiempo de vida del proyecto de 10 años, con un tiempo de construcción de 1 año
- Producción anual de 500 toneladas de biodiesel, con un precio de venta de 3.56 \$/gal (Mero Benavides, 2022)
- Tasa de interés de 8.52% y tasa de impuestos de 15% (Castro Jaime, 2021)
- Costos de mantenimiento, administrativos, y entre otros como el 18% del capital de inversión (Turton et al., 2018)
- Costo de mano de obra según los días de operación para 2 operadores con sueldo básico de 14.17 \$/día. Para los días operables, se tomó en cuenta:
 - o Jornada laboral de 8 horas al día, con 40 minutos destinados para la limpieza del reactor (Fogler, 2008)
 - o Tiempo de vaciado y llenado de 10 minutos por batch (Campos Castelo et al., 2021)
 - o Tiempo de espera hasta llegar a la temperatura de reacción de $2.5714 T - 64.286$ minutos (Campos Castelo et al., 2021)

Se seleccionó la solución con mayor TIR, VAN y menor periodo de recuperación como la solución óptima. Esta solución no sólo maximiza el rendimiento y minimiza los costos de producción y el impacto ambiental, sino que también presenta el mejor potencial económico.

CAPÍTULO 3

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1 Validación Modelo Cinético Teórico

El modelo cinético de la reacción de transesterificación de aceite de palma fue validado en *Jupyter Notebook* mediante el lenguaje de programación *Python*. Para ello se utilizaron los datos experimentales de la etanólisis de aceite de palma de Narváez et al. (2015) y de la metanólisis de aceite de palma de Narváez et al. (2007) y Leevijit et al.(2004). Las *Figuras 3.1* y *3.2* muestra el comportamiento del modelo cinético teórico y los datos experimentales de cada uno de los autores mencionados, cuyas condiciones de operación se presentan en la *Tabla 3.1*.

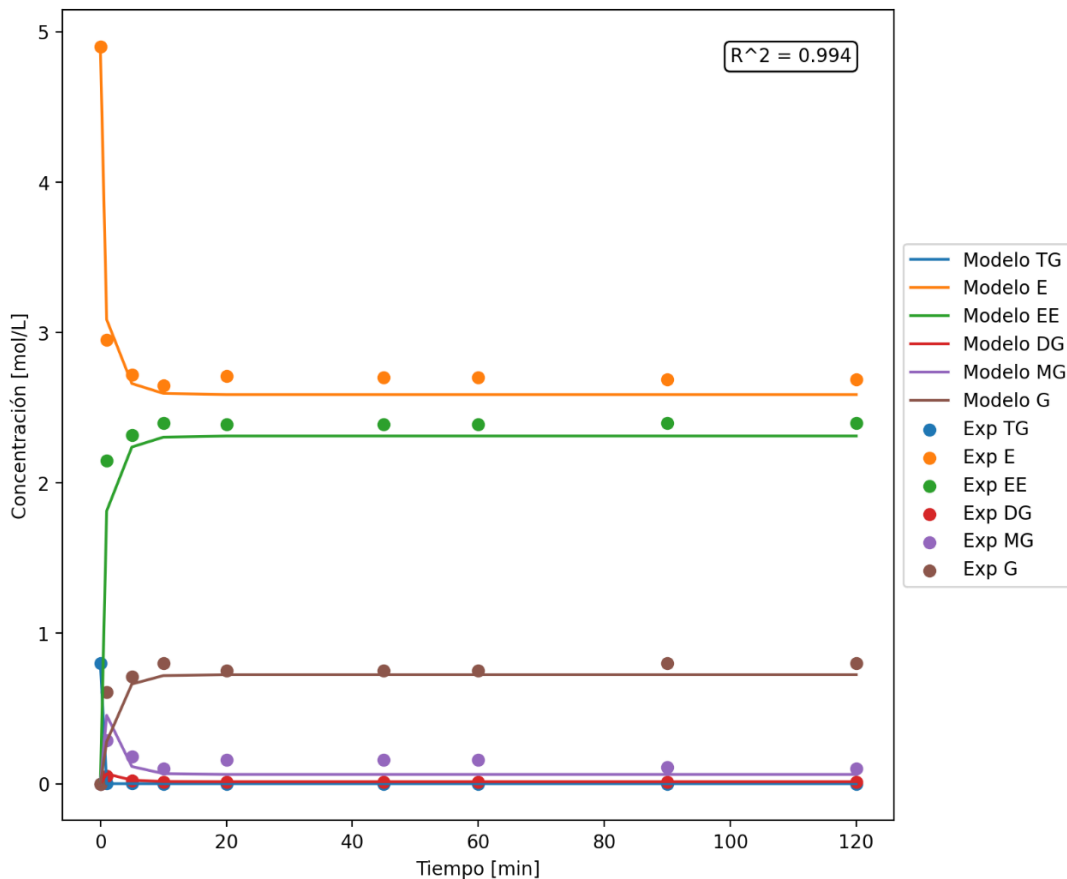
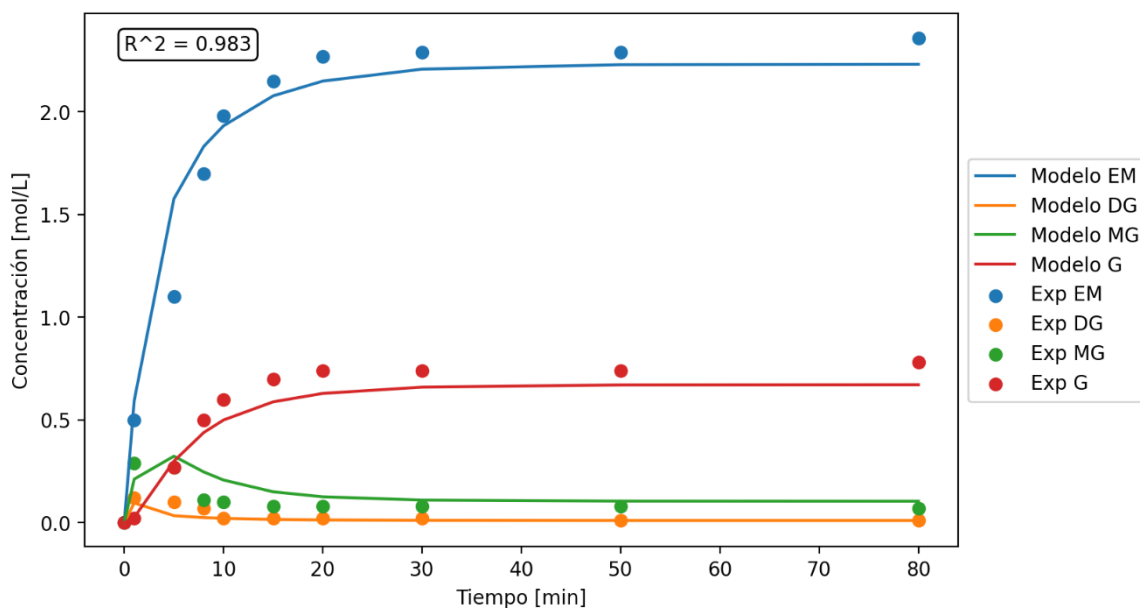
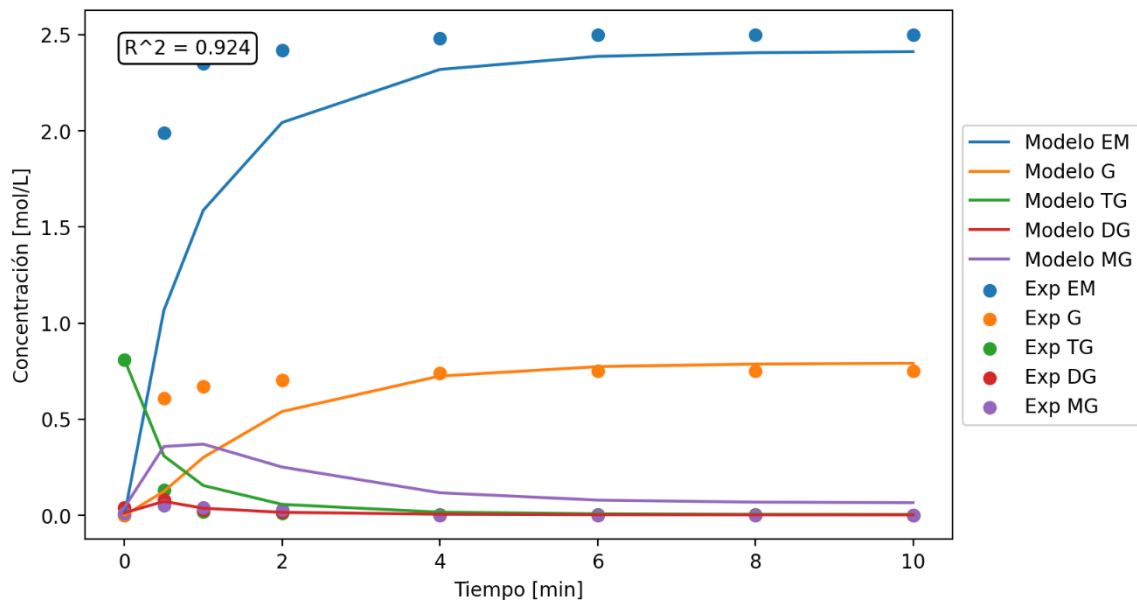


Figura 3.1 Comparación entre datos experimentales (●) para la etanólisis de aceite de palma de Narváez et al. (2015) con curvas del modelo cinético teórico (—)



a)



b)

Figura 3.2 Comparación entre datos experimentales (●) para la metanólisis de aceite de palma de a) Narváez et al. (2007) y b) Leevijit et al.(2004) con curvas del modelo cinético teórico (—)

Tabla 3.1 Descripción de los experimentos empleados para la validación

Figura	Descripción	Condiciones de operación		
		Temperatura (°C)	NaOH (%m/m)	Relación Molar
3.1	Etanólisis de aceite de palma refinado	70	1	6:1
3.2 a)	Metanólisis de aceite de palma refinado	50	0.2	6:1
3.2 b)	Metanólisis de aceite de palma refinado	60	1	6:1

La *Figura 3.1* evidencia la mejor aproximación de la transesterificación de aceite de palma con etanol, con un R^2 de 0.9943. Esto se debe a que el enfoque principal de los autores, al proponer el modelo cinético, fue la etanólisis de aceite de palma. Así mismo, la metanólisis muestra una buena aproximación en las *Figuras 3.2 a)* y *b)* con valores de R^2 superiores a 0.9. Se demuestra que la suposición de que la metanólisis sigue el mismo mecanismo de reacción que la etanólisis es correcta. Por ello, presentan un comportamiento similar en cuanto a la velocidad de reacción de reactivos y productos.

De manera general, se puede observar que la velocidad de producción de biodiesel, o metil ésteres (EM), comienza con un aumento repentino hasta que la reacción alcanza el equilibrio. La velocidad de formación del glicerol (G) tiene un comportamiento similar al del EM. La única diferencia radica en que el aumento repentino ocurre en una menor proporción, obteniendo así menores concentraciones. Esto se debe a la estequiometría de la reacción, donde la relación de producción entre EM y G es de 3 a 1.

Con respecto a los productos intermediarios, tanto monoglicéridos (MG) como diglicéridos (DG) presentan sus concentraciones más elevadas durante el primer minuto debido a la espontaneidad de la reacción. En las *Figuras 3.1* y *3.2* se evidencia un pico para el MG, ya que, de acuerdo con el mecanismo de reacción, este es el último producto en formarse. A medida que pasa el tiempo, las velocidades de formación de MG y DG van disminuyendo hasta llegar al equilibrio químico. Esto da como resultado que al final de la reacción se tenga un pequeño remanente de MG y DG en la mezcla.

Los primeros 5 minutos de la reacción son cruciales pues, además de alcanzar el equilibrio, se logra una conversión mayor al 70% de los reactivos. Se aprecia que los dos reactivos, alcohol y triglicéridos (TG), tienen una disminución repentina seguido de un

comportamiento asintótico al llegar al equilibrio. En este caso, el TG al ser el reactivo limitante se consume en su totalidad como se muestra en las *Figuras 3.1* y *3.2*, algo que no ocurre con el alcohol pues corresponde al reactivo en exceso.

Cabe mencionar que los gráficos de las *Figuras 3.1* y *3.2* difieren en la cantidad de curvas, pues esto va de la mano con la información disponible en el trabajo de cada autor. Por ejemplo, Narváez et al. (2015) reporta los resultados para reactivos y productos de la etanólisis, mientras que Narváez et al. (2007) reporta sólo para los productos de la metanólisis. Esta diferencia influye significativamente en el cálculo de R^2 ya que, con más datos cinéticos, se obtendrá un resultado más preciso para el grado de ajuste entre los datos experimentales y el modelo teórico.

En la *Tabla 3.2* se muestran los resultados de la validación del modelo cinético para diferentes condiciones de operación. Se puede observar que el error tiende a aumentar cuando se trabajan con el límite inferior de una variable y el límite superior de otra. Por ejemplo, los resultados obtenidos para Wongjaikham et al. (2021) con errores de 6.07% y 4.43% para una relación molar de 3:1 y una concentración de catalizador de 1% y 1.5% respectivamente. A pesar de esto, el porcentaje de error entre el valor reportado por el autor y el valor predicho por el modelo tiende a estar por debajo del 10%. Esto demuestra la posibilidad de extrapolar el modelo para los rangos de operación seleccionados y obtener buenas aproximaciones.

Con base en los resultados de la validación, se concluyó que el modelo propuesto por Narváez et al. (2015) es altamente confiable para describir la cinética de la transesterificación del aceite de palma. Es importante mencionar que este modelo también es aplicable para el aceite usado de palma propuesto en este proyecto. Esto debido a que su caracterización dio como resultado un índice de acidez relativamente bajo, por lo que se puede asumir una composición del 100% de triglicéridos.

Tabla 3.2 Resultados de validación del modelo cinético

Referencia	Condiciones de operación		Parámetro estudiado	Valor reportado	Valor modelo	% Error
Cheng et al. (2004)	Temperatura (°C)	60.5	Conversión	99%	99.77%	0.78
	Tiempo de reacción (min)	7				
	NaOH (% m/m)	0.5				
	Relación molar	10:1				
	Temperatura (°C)	60.5	Conversión	99%	99.90%	0.91
	Tiempo de reacción (min)	5				
	NaOH (% m/m)	0.74				
	Relación molar	10:1				
	Temperatura (°C)	60.5	Conversión	99%	99.91%	0.92
	Tiempo de reacción (min)	3				
	NaOH (% m/m)	0.99				
	Relación molar	10:1				
Narváez et al. (2007)	Temperatura (°C)	60	Rendimiento	97.6%	96.94%	0.68
	Tiempo de reacción (min)	80				
	NaOH (% m/m)	1				
	Relación molar	6:1				
Silva et al. (2021)	Temperatura (°C)	45	Rendimiento	88.5%	90.08%	1.75
	Tiempo de reacción (min)	60				
	NaOH (% m/m)	1				
	Relación molar	4:1				
Wongjaikham et al. (2021)	Temperatura (°C)	62.5	Rendimiento	72.69%	77.11%	6.03
	Tiempo de reacción (min)	40				
	NaOH (% m/m)	1				
	Relación molar	3:1				
	Temperatura (°C)	62.5	Rendimiento	77%	80.41%	4.39
	Tiempo de reacción (min)	40				
	NaOH (% m/m)	1.5				
	Relación molar	3:1				

3.2 Diseño y dimensionamiento del reactor

El reactor donde ocurre la transesterificación de aceite usado es de tipo *batch* cilíndrico de base esférica con un serpentín en su interior como medio de calentamiento, y un agitador mecánico para asegurar la homogeneidad en la reacción. La consideración de la base semiesférica fue diseñada en base a la facilidad de limpieza del reactor.

Para su dimensionamiento se utilizaron los datos del límite superior de los parámetros de operación. Es decir, una relación molar metanol:aceite de 10:1, una temperatura de 60°C y un tiempo de operación de 120 minutos. De esta manera, se obtiene un diseño sobredimensionado que podrá contener un volumen máximo de 1 m³ por batch.

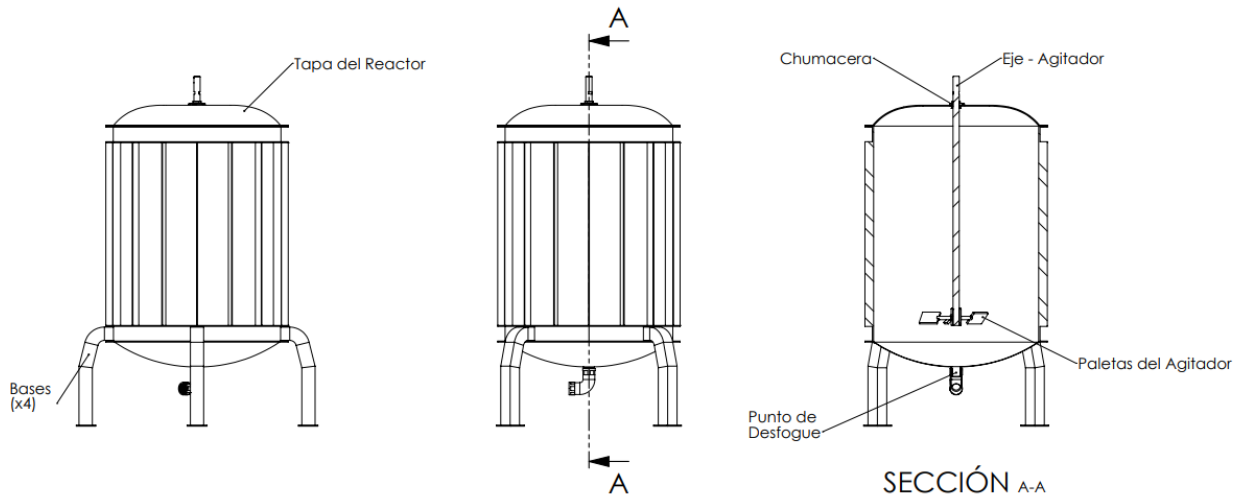


Figura 3.3 Plano diseño del reactor

Tabla 3.3 Dimensiones del reactor batch propuesto

Parte	Descripción	Valor
Reactor	Diámetro (m)	0.993
	Altura (m)	1.291
	Altura tapa (m)	0.130
	Altura casquete esférico (m)	0.150
	Volumen del reactor (m ³)	1.000
Agitador	Longitud (m)	1.500
	Diámetro (m)	0.447
Paletas del agitador	Longitud (m)	0.112
	Altura (m)	0.089
Intercambiador de calor	Longitud (m)	1.045

En la *Figura 3.3* se muestra el plano del reactor, cuyas dimensiones son de 0.993 m de diámetro y 1.91 m de altura. Para el diseño del agitador se emplearon correlaciones con

el reactor, obteniendo los valores mostrados en la *Tabla 3.3*. El intercambiador de calor tiene una longitud de 1.045 m como se observa en el *Apéndice C Figura C.1*.

3.3 Optimización Multiobjetivo

El algoritmo de optimización de las funciones objetivo de rendimiento, costo e impacto ambiental para la producción sostenible de biodiesel incluyó 3 estrategias diferentes: Obtención del Conjunto Pareto, Análisis por Método R y Análisis Tecno-económico. Esto permitió discriminar los resultados del conjunto solución hasta obtener la solución óptima.

El conjunto solución estuvo compuesto por un total de 12544 resultados para Rendimiento (%), Costo (\$/kg) e Impacto ambiental (kg CO₂-eq/kg). El comportamiento entre estas variables es creciente como se evidencia en la *Figura 3.4*, es decir que a medida que va aumentando el rendimiento, los costos de producción y la huella de carbono también incrementan.

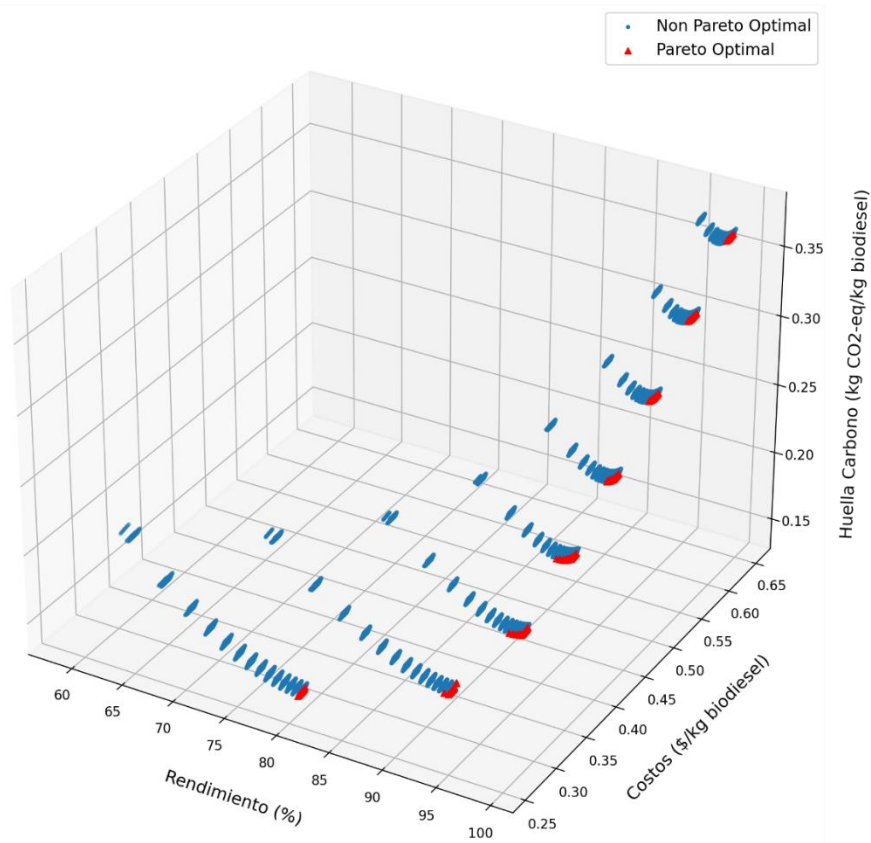
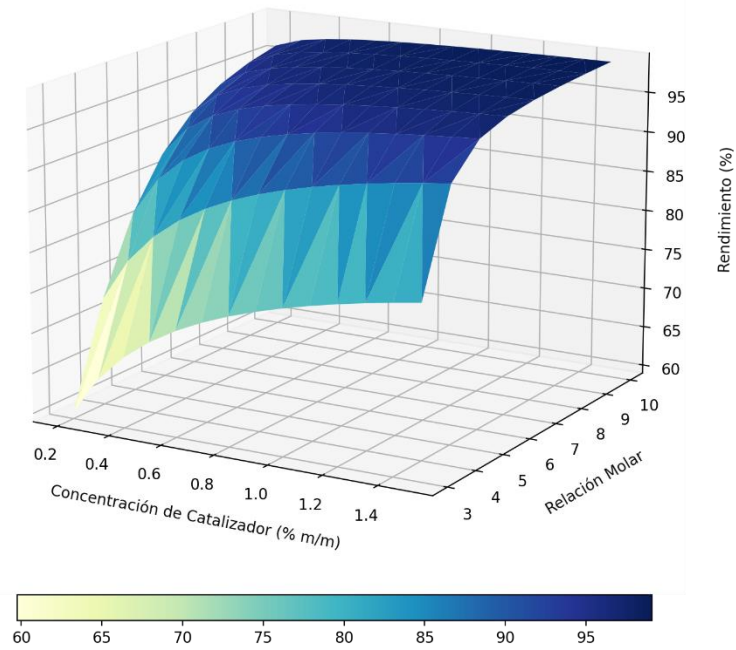
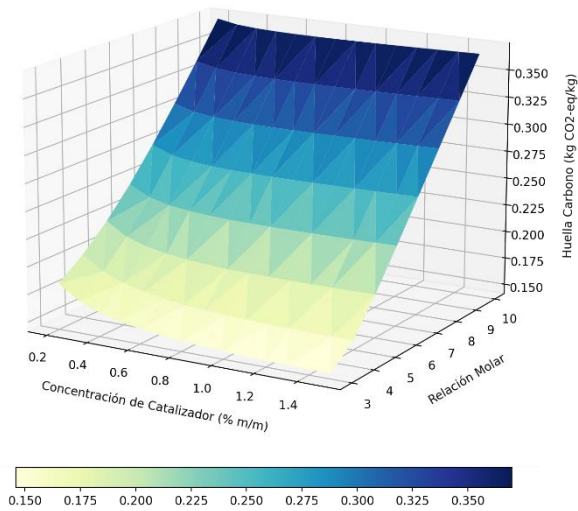


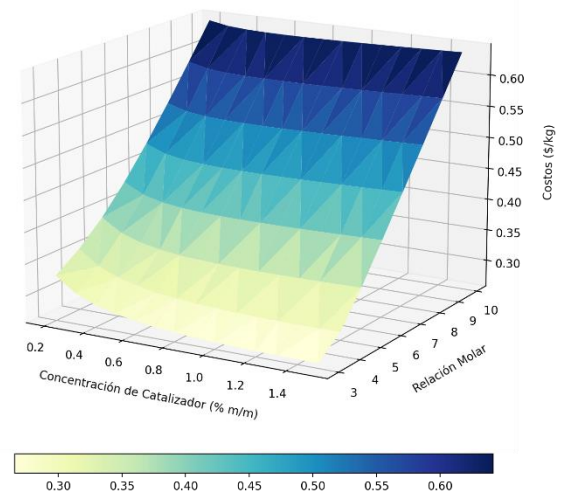
Figura 3.4 Resultados de rendimiento, costo y huella de carbono del conjunto solución



a)

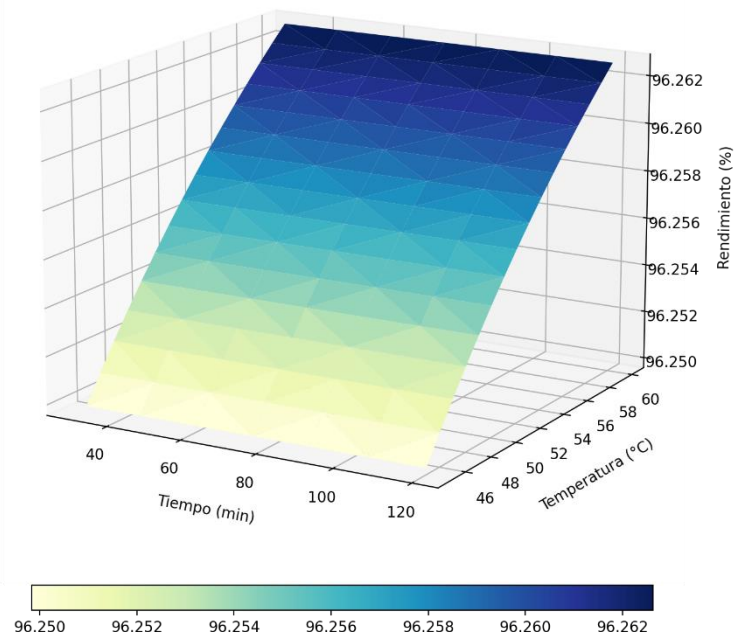


b)

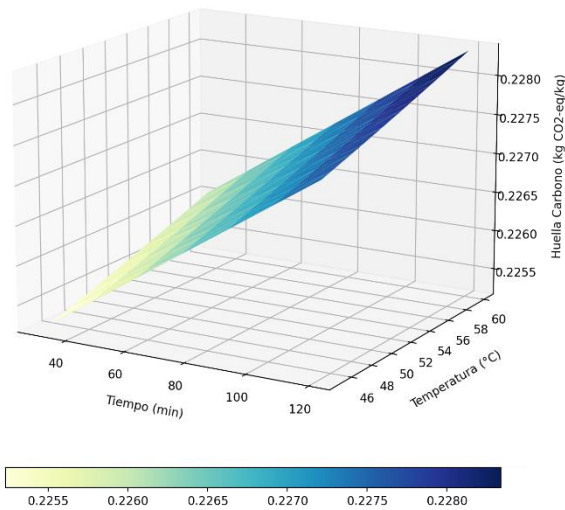


c)

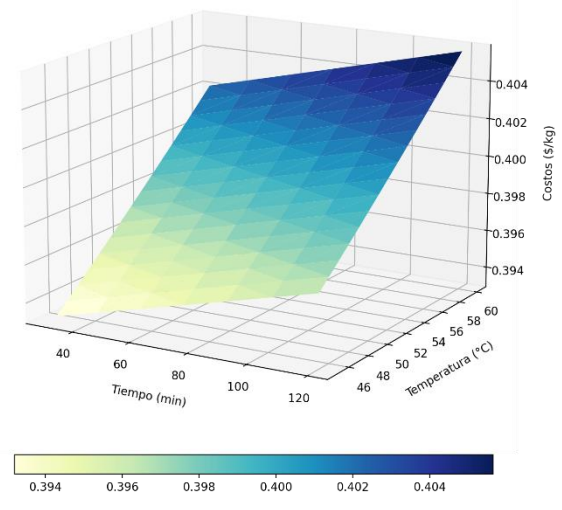
Figura 3.5 Gráficos de superficie para a) Rendimiento (%) b) Huella de Carbono (kg CO₂-eq/kg) c) Costos (\$/kg) en función de la Concentración de Catalizador NaOH (%) y Relación Molar para una temperatura de 52°C y un tiempo de 75 minutos



a)



b)



c)

Figura 3.6 Gráficos de superficie para a) Rendimiento (%) b) Huella de Carbono (kg CO₂-eq/kg) c) Costos (\$/kg) en función del Tiempo (min) y Temperatura (°C) para una relación molar de 6:1 y una concentración de NaOH de 0.8%

Las Figuras 3.5 y 3.6 presentan la interacción entre las variables de operación con los objetivos de rendimiento, costos e impacto ambiental. Se fijó la temperatura, el tiempo, la concentración de catalizador NaOH y la relación molar en 52 °C, 75 minutos, 0.8% y 6:1, correspondiendo a los valores intermedios del rango de operación de cada variable.

En la Figura 3.5 se tiene la influencia de la concentración del catalizador y la relación molar para los 3 objetivos. La interacción de la relación molar con el rendimiento es creciente y asintótica alrededor de 96% a partir de la relación 6:1. Si bien un exceso de metanol promueve la reacción, el rendimiento no varía significativamente (Narváez Rincón et al., 2004) como se evidencia en la Figura 3.5. Con respecto a los costos e impacto ambiental, la relación molar tiene un comportamiento lineal y creciente. Por lo tanto, la relación molar tiene mayor influencia sobre estos dos objetivos.

La concentración del catalizador y el rendimiento tienen una relación creciente. A relaciones molares menores a 6:1, el incremento en el rendimiento es significativo. Por ejemplo, fijando una relación molar de 3:1, para una concentración de NaOH de 0.2% se tiene un rendimiento alrededor del 60%; mientras que con 1.5% de NaOH, el rendimiento aumenta hasta 80%. No obstante, para relaciones mayores a 6:1, la diferencia en el rendimiento deja de ser considerable. Por ejemplo, para una relación 10:1, el rendimiento tanto para una concentración de 0.2% como para 1.5% está alrededor del 95%. Esto ocurre debido a que el exceso de metanol tiene mayor incidencia en el rendimiento en comparación a la cantidad de catalizador.

Con respecto al impacto ambiental y costos de producción, la concentración de catalizador tiene un comportamiento levemente decreciente. Un ejemplo de ello es cuando la relación molar es 3:1, el impacto ambiental para una concentración de catalizador del 0.2% es de 0.175 kg CO₂-eq/kg valor que va disminuyendo hasta 0.150 kg CO₂-eq/kg para una concentración de 1.5%. Mientras que, para estas mismas condiciones, los costos están entre 0.35 y 0.30 \$/kg respectivamente.

En la Figura 3.6 se muestra la influencia de las variables de tiempo de reacción y temperatura. La relación que existe entre el tiempo y el rendimiento es aproximadamente constante. Esto se debe a que la reacción de transesterificación es espontánea y alcanza

más del 70% de conversión durante los primeros minutos de la reacción. El resto del tiempo, la reacción tiene un comportamiento levemente creciente hasta alcanzar el equilibrio.

Por otro lado, la relación que existe entre la temperatura y el rendimiento es lineal y levemente creciente. Para que la reacción tenga lugar se recomiendan temperaturas elevadas ya que el proceso de transesterificación es una reacción endotérmica (Suzihaque et al., 2022). Sin embargo, los resultados obtenidos están entre 80.30% y 80.32% para 45°C y 60°C respectivamente. Esto indica que, con respecto al rendimiento, la temperatura no es una variable crucial.

La relación del tiempo y temperatura con respecto al impacto ambiental y costos de operación son directamente proporcionales. Al aumentar la temperatura, aumenta el consumo de combustible y por ende su emisión de carbono. Así mismo el tiempo incide en el consumo eléctrico. Por lo tanto, la temperatura y el tiempo de reacción tienen mayor influencia sobre estos dos objetivos.

3.3.1 Resultados del Conjunto Pareto

Al determinar el conjunto Pareto, el conjunto se redujo a 286 posibles soluciones, las cuales se muestran en el *Apéndice D Tabla D.1*. En la *Figura 3.4*, se puede observar que estas soluciones se encuentran en la frontera inferior del conjunto solución. Esto demuestra que son soluciones *no-dominadas*, es decir que son las mejores en todos los objetivos o al menos las mejores en uno según el criterio de esta optimización.

La *Figura 3.7* presenta la distribución de los parámetros de operación en las soluciones del conjunto Pareto. Las soluciones se concentran en el límite inferior del tiempo de reacción, es decir 30 y 45 minutos. Algo similar sucede con la temperatura de reacción, donde la mayoría de los resultados tienden hacia los 45°C. Esto ocurre debido a que, para elevadas temperaturas y tiempo de reacción, se requeriría de un mayor consumo de combustible y electricidad para calentar la mezcla de reactivos, aspecto que implicaría mayores costos y emisiones de CO₂.

La concentración de catalizador tiende a concentrarse hacia el límite superior de 1.5%, ya que, mientras mayor sea su concentración, mayor será la velocidad de reacción de la transesterificación. A pesar de que el precio de catalizador es mayor

frente al del metanol, la cantidad a utilizar de NaOH en un batch no es considerable. Entonces, las altas concentraciones de catalizador no influyen significativamente en el costo de operación o en la huella de carbono, pero si en el rendimiento.

Las soluciones del conjunto Pareto para la relación molar tienden a valores mayores a 6:1. Varios autores concuerdan que la relación molar óptima es la relación 6:1 (Silva et al., 2021), puesto que con relaciones menores no se obtienen los rendimientos deseados; mientras que relaciones molares muy elevadas dificultan el proceso de post-tratamiento del biodiesel.

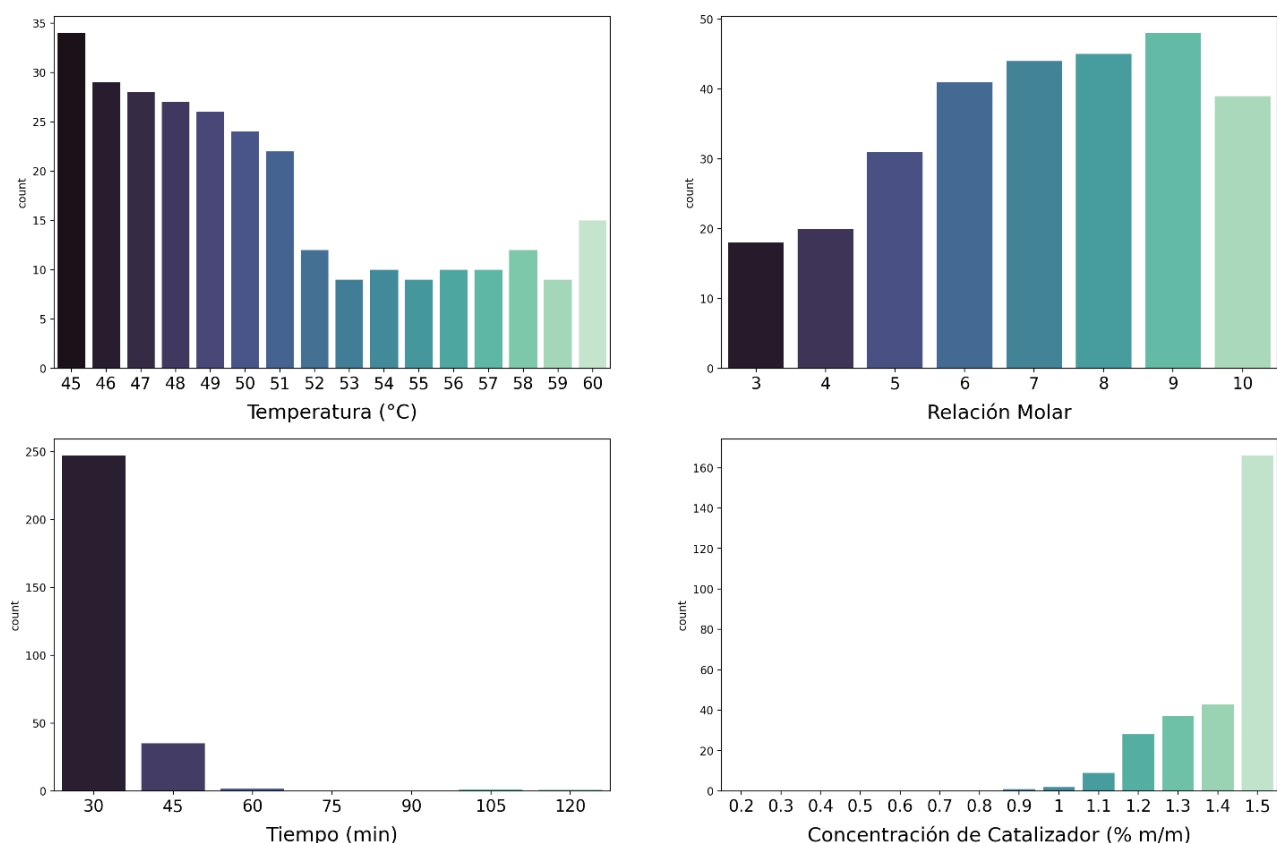


Figura 3.7 Frecuencia de los parámetros de operación en las soluciones del conjunto Pareto

3.3.2 Resultados del Método R

Las soluciones del conjunto Pareto son las *mejores*, pero sólo una puede ser la solución óptima que maximice el rendimiento y a su vez minimice los costos e

impacto ambiental. Para ello, se utilizó el método R considerando a los objetivos de rendimiento y costos con igual prioridad por ser los factores decisivos a nivel industrial. A pesar de que el objetivo de impacto ambiental quedó en un segundo plano, al aplicar este método posterior a la determinación del conjunto Pareto, se asegura que los resultados para la huella de carbono sea los mínimos del conjunto solución.

Tabla 3.4 Top 10 soluciones obtenidas a partir del método R

Rank Solución	Condiciones de operación				Resultados funciones objetivo		
	T (°C)	C _{cat} (% m/m)	RM	t (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella carbono (kg CO ₂ -eq/kg)
1	45	1.5	3:1	30	80.29	0.26	0.144
2	60	1.5	10:1	30	99.09	0.64	0.365
3	45	1.4	7:1	30	98.28	0.45	0.259
4	46	1.4	5:1	30	96.29	0.34	0.192
5	59	1.5	7:1	30	98.38	0.46	0.261
6	45	1.5	7:1	30	98.37	0.45	0.260
7	57	1.5	9:1	30	98.94	0.58	0.330
8	45	1.2	8:1	30	98.47	0.51	0.294
9	59	1.5	6:1	30	97.79	0.40	0.226
10	46	1	6:1	30	96.89	0.39	0.225

En la *Tabla 3.4* se muestran las 10 mejores soluciones tras aplicar el método R al conjunto Pareto. En este rank, el tiempo y la concentración de catalizador se concentran el límite inferior y superior respectivamente. Por otro lado, la relación molar y la temperatura muestran valores variados tendiendo hacia los extremos inferior y superior de su respectivo rango de estudio.

En estos resultados se corrobora que la relación molar tiene mayor influencia sobre los objetivos de costo e impacto ambiental. Por ejemplo, la única diferencia en las condiciones de operación de las soluciones del rank 1 y 6 es la relación molar, de 3:1 y 7:1 respectivamente. Se puede observar que el rendimiento difiere en 23%, mientras el costo en 76% y la huella de carbono en 81%.

Además, la temperatura influye sobre los costos e impacto ambiental, pero en menor proporción que la relación molar. Por ejemplo, las condiciones de operación del rank 5 y 6 son las mismas a diferencia de la temperatura. No obstante, el rendimiento difiere en un 0.005%, mientras los costos en un 1.811% y el impacto ambiental en un 0.287%.

3.3.3 Resultados del Análisis Tecno-económico

Se consideró realizar un análisis tecno-económico para evaluar las soluciones de la *Tabla 3.4*. Los parámetros determinados fueron TIR, VAN y el *Período de recuperación de la inversión*. De esta forma, la solución óptima no sólo maximiza el rendimiento y minimiza los costos de producción e impacto ambiental, sino que también presenta el mejor potencial económico.

En la *Tabla 3.5* se muestra el costo estimado de inversión para una planta existente. En esta estimación se consideraron las dimensiones y el tipo de material del reactor. Así mismo como las utilidades, el mantenimiento, la presión y la inflación del año en curso.

Tabla 3.5 Resultados de la estimación del capital de inversión

ID	Descripción	Costo estimado (\$)
R-101	Reactor batch	192 695.61
	Serpentín de calentamiento	230.00
<i>Inversión de Capital</i>		192 925.61

En la *Tabla 3.6* se evidencia que cada una de las soluciones produce una cantidad diferente de biodiesel por batch. Cada batch se demorará alrededor de 90 – 130 minutos tomando en consideración el tiempo de reacción, el tiempo de vaciado y llenado y el tiempo de espera hasta llegar a la temperatura de reacción.

Debido a que la producción anual quedó establecida en 500 toneladas de biodiesel, cada solución requerirá de un tiempo diferente para su producción. El tiempo máximo necesario fue de 212 días para la solución del rank 2, lo cual está por debajo del número de días en un año. Con base a esto, la producción anual podría ser incluso

mayor, lo que generaría más ganancias y mejoraría el potencial económico de cada propuesta. Sin embargo, en caso de aumentar la producción anual, se debe considerar un tiempo muerto por si llegase a ocurrir algún fallo o problema durante la producción.

Tabla 3.6 Producción de biodiesel para las soluciones obtenidas por el método R

Rank Solución	Biodiesel producido (kg/batch)	Tiempo destinado a producción (días)
1	565.7	184
2	698.2	212
3	692.5	150
4	678.5	157
5	693.2	209
6	693.1	150
7	697.1	199
8	693.8	150
9	688.9	210
10	682.6	156

La función objetivo de costos incluye únicamente a los costos de la materia prima y utilidades del reactor. Para este análisis, se consideró incluir los costos por mano de obra y los costos de mantenimiento. Con respecto a la mano de obra, se asignaron 2 operadores con un sueldo básico de 14.17 \$/día de producción. Los costos de mantenimiento se estimaron como el 18% del capital invertido.

La *Tabla 3.7* presenta los resultados del análisis económico según el menor tiempo de retorno y los mayores valores para el TIR y VAN. Es de observar que el orden del rank cambió, menos para el rank 1 que mantuvo su posición tras este análisis. En la *Figura 3.8* se muestra el flujo de caja de cada solución para un proyecto de 10 años de operación con 1 año de construcción.

Tabla 3.7 Resultados del análisis económico para las mejores soluciones por el método R

Rank Solución	Condiciones de operación				Resultados parámetros económicos		
	T (°C)	C _{cat} (% m/m)	RM	t (min)	Tiempo de retorno	TIR (%)	VAN (Millones de dólares)
1	45	1.5	3:1	30	8 meses y 12 días	128.94	1.43
4	46	1.4	5:1	30	9 meses y 24 días	108.93	1.19
10	46	1	6:1	30	11 meses y 4 días	94.26	1.03
9	59	1.5	6:1	30	11 meses y 25 días	87.72	0.95
3	45	1.4	7:1	30	13 meses	78.44	0.84
6	45	1.5	7:1	30	13 meses y 1 día	78.21	0.84
5	59	1.5	7:1	30	14 meses	71.92	0.77
8	45	1.2	8:1	30	15 meses y 18 días	62.94	0.66
7	57	1.5	9:1	30	21 meses y 24 días	40.72	0.40
2	60	1.5	10:1	30	32 meses y 35 días	23.16	0.19

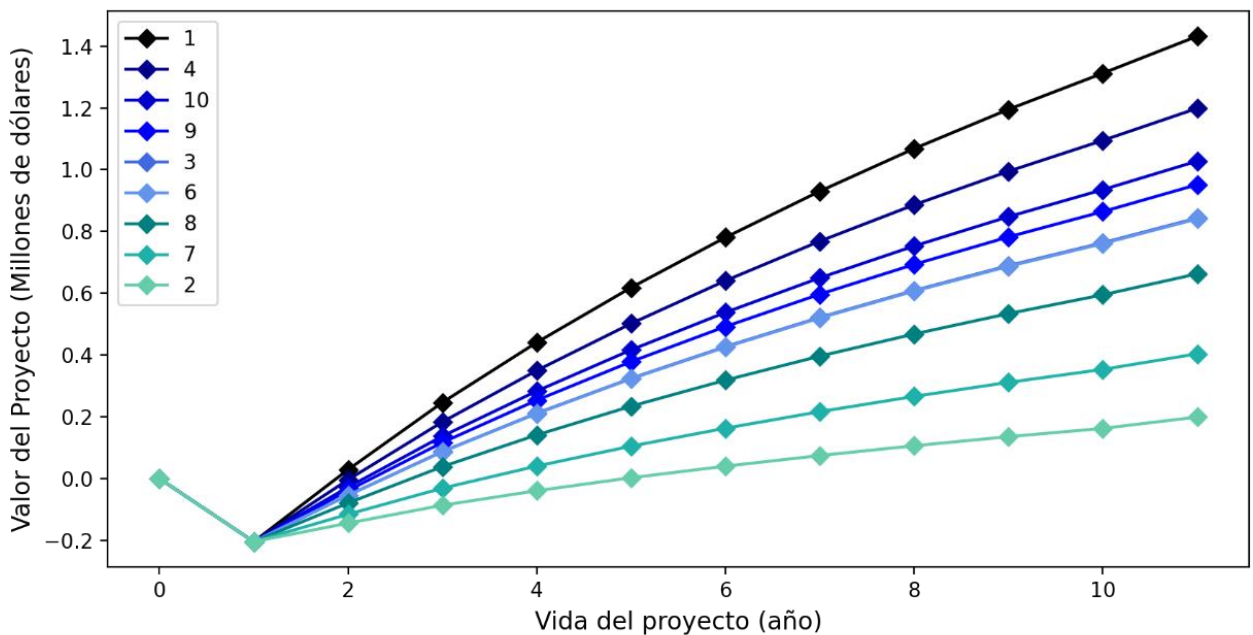


Figura 3.8 Análisis de flujo de caja para las soluciones obtenidas a partir del método R

En la *Figura 3.8* se aprecia que hasta el año 1 las líneas del flujo de caja se superponen y luego divergen según el potencial económico de cada solución. Las soluciones con una relación molar mayor a 6:1 resultaron ser las menos atractivas económicamente ya que cuentan con un tiempo de retorno mayor a 1 año, un TIR menor al 80% y los valores de VAN más bajos del conjunto. Esto ocurre debido a que los costos de operación son los más elevados para estas soluciones, lo que disminuye las ganancias obtenidas, y por lo tanto la rentabilidad del proyecto.

Las soluciones del rank 1 y 4 mostraron un alto potencial económico con un tiempo de retorno menor a 10 meses, un TIR superior al 100% y un VAN mayor al millón de dólares. Sus condiciones de operación tienden hacia el valor mínimo de la relación molar, el tiempo y la temperatura, mientras que, hacia el valor máximo de la concentración del catalizador. Cabe indicar que la solución del rank 2 pasó al último lugar una vez realizado el análisis económico, demostrando la importancia de evaluar el potencial económico de las propuestas.

3.3.4 Solución óptima

La solución del rank 1 por el método R fue también la solución con mayor potencial económico, haciéndola la solución óptima. Las condiciones de operación que maximizan el rendimiento mientras minimizan los costos de operación y el impacto ambiental se presentan en la *Tabla 3.8*.

Tabla 3.8 Condiciones de operación óptimas

Parámetro	Valor
Temperatura de reacción (°C)	45
Tiempo de reacción (min)	30
Concentración de NaOH (% w/w)	1.5
Relación Molar (metanol: aceite)	3:1

De acuerdo con la *Figura 3.9*, el metanol representa más del 80% de los costos y la huella de carbono. Por lo tanto, la relación molar fue la variable independiente

decisiva en estos dos objetivos. Por ello, su valor óptimo fue la relación estequiométrica 3:1.

Con respecto al objetivo de rendimiento, la variable con mayor influencia resultó ser la concentración de catalizador. Por esto, la solución óptima seleccionó el valor máximo de concentración de 1.5% de NaOH.

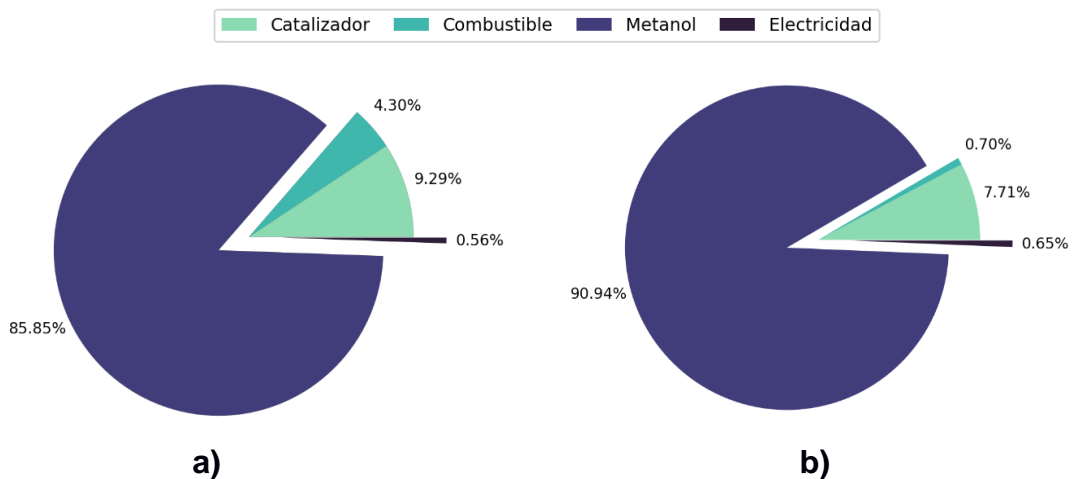


Figura 3.9 Proporción de materia prima y servicios en a) Costos (\$/kg) b) Huella de Carbono (kg CO₂-eq/kg) para la solución óptima

Las variables de tiempo y temperatura mostraron no tener mayor incidencia en el rendimiento; mientras que, en los objetivos de costos e impacto ambiental, su efecto no fue tan significativo. Debido a esto, la solución óptima seleccionó los valores del límite inferior para ambas variables independientes: un tiempo de reacción de 30 minutos y una temperatura de 45°C.

Bajo estas condiciones de operación se logra un rendimiento en la producción de biodiesel del 80.29%, un costo de producción 0.26 \$/kg y un impacto ambiental de 0.144 kg CO₂-eq/kg. Como se indicó, el costo de producción sólo incluye a las materias primas y utilidades del reactor. Sin embargo, en el análisis económico se estimó un costo final de 0.44 \$/kg, en el que además se consideraron costos por mano de obra y mantenimiento. Se puede apreciar que el costo de producción representa el 59.09% del costo final, por lo que entonces resulta un buen indicador sobre la rentabilidad del proyecto.

Propuestas similares de obtención de biodiesel por transesterificación de aceite usado presentan costos de 0.58 \$/kg (El-Gharbawy, 2017) y 1.35 \$/kg (Mohammadshirazi et al., 2014). El costo de producción se logra disminuir en un 23.96% y 67.37% respectivamente, operando a las condiciones de la solución óptima. Esto demuestra que esta solución resulta ser la más favorable no sólo en el rango estudiado, sino también frente a otras propuestas. Además, los resultados del análisis económico demuestran la solución óptima hace al proyecto atractivo y viable. Con un TIR del 128.94% y un VAN de 1.42 millones de dólares, el capital invertido se logrará recuperar en 8 meses y 12 días.

CAPÍTULO 4

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Conclusiones

Se desarrolló la validación del modelo cinético propuesto por Narváez et al. (2015) para la reacción de transesterificación de aceite de palma. Mediante el uso del lenguaje de programación *Python*, en su entorno *Jupyter Notebook*, se obtuvieron R^2 mayores a 0.9 al ajustar el modelo a datos cinéticos experimentales de diferentes autores. Además, se compararon los resultados de rendimiento y conversión obtenidos por el modelo con los reportados por otros estudios, obteniendo porcentajes de error menor al 10%. Con esto se concluyó que el modelo es altamente confiable para describir la cinética de la metanólisis de aceite de palma usado. Así también, que este es aplicable y válido para todo el rango operacional de las variables independientes seleccionadas en este proyecto.

Se plantearon las funciones objetivo de rendimiento, costos e impacto ambiental en función de las variables temperatura ($^{\circ}\text{C}$), tiempo (min), relación molar metanol: aceite y concentración de catalizador (% m/m). Para el primer objetivo se desarrolló el balance de materia para determinar el rendimiento de producción de biodiesel. Para los objetivos de costo e impacto ambiental se desarrollaron tanto balance de materia como de energía. Esto para determinar el consumo de las materias primas, metanol y NaOH, y el consumo de combustible y electricidad como utilidades.

El algoritmo de optimización incluyó 3 estrategias diferentes: Obtención del Conjunto Pareto, Análisis por Método R y Análisis Tecno-económico. Esto permitió discriminar los resultados del conjunto solución hasta precisar la solución óptima: temperatura de 45°C , tiempo de reacción de 30 minutos, relación molar 3:1 y concentración de 1.5% de NaOH. Bajo estas condiciones se obtiene un rendimiento del 80.29%, un costo de producción de 0.26 \$/kg y una huella de carbono de 0.14 kg $\text{CO}_2\text{-eq/kg}$. Esta solución no sólo maximiza el rendimiento mientras minimiza los costos de operación y el impacto ambiental, sino también demostró tener el mejor potencial económico con un tiempo de

retorno de la inversión de 8 meses y un TIR de 128.94%. Además, con esta solución se logra reducir el costo de producción hasta en un 67.37% frente a otras propuestas similares.

4.2 Recomendaciones

Se recomienda realizar la validación del modelo cinético con pruebas experimentales. Así se puede determinar que tanto se acerca el modelo propuesto a la realidad, y en futuros proyectos estimar factores de corrección.

Asimismo, realizar una producción de biodiesel a escala piloto bajo las condiciones de operación de la solución óptima. Esto con el objetivo de comparar el rendimiento del proceso y corroborar el potencial económico del proyecto.

Además, considerar los procesos de pre-tratamiento de los reactivos y post-tratamiento de los productos dentro de las funciones objetivo de costos e impacto ambiental. De esta manera, se obtienen estimaciones más precisas del costo de producción y la huella de carbono para la propuesta.

Por último, se aconseja evaluar otros parámetros como el tipo de catalizador o la velocidad de agitación en el reactor. Incluso sería conveniente evaluar una alternativa al metanol, como el bioetanol, ya que este resultó ser el factor con mayor contribución en los costos de producción y la huella de carbono. Esto permitirá determinar condiciones de operación que maximicen aún más el rendimiento a un menor costo e impacto ambiental.

BIBLIOGRAFÍA

- Almeida-Naranjo, C. E., Jácome, E., & Soria, R. (2022). Biodiesel market share in Ecuador: Current situation and perspectives. *Materials Today: Proceedings*, 49, 202–209. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.09.050>
- Andrade Villegas, N. X., & Moncada Rangel, J. A. (2020). Manejo de los residuos de aceite comestible en los expendios de comida. Ibarra, Ecuador. *SATHIRI*, 15(2), 185–198. <https://doi.org/10.32645/13906925.987>
- Arias, I. P., Vallejo, M. del P., & Ibarra, M. del C. (2020). Los costos de producción industrial en el Ecuador. *Revista ESPACIOS*, 41(7), 8–19.
- Bloomenthal, A. (2021, October 10). *Coefficient of Determination*. Investopedia.
- Borzsony, S., Kossmann, D., & Stocker, K. (2001). The Skyline operator. *Proceedings 17th International Conference on Data Engineering*, 421–430. <https://doi.org/10.1109/ICDE.2001.914855>
- Campos Castelo, J. P., Coba Castillo, N. J., Villa Escudero, I. C., & Aldaz Vargas, A. A. (2021). Automatización de un Reactor Tipo Batch para la obtención de Biodiesel a partir de aceite reciclado. *AlfaPublicaciones*, 3(3), 57–77. <https://doi.org/10.33262/ap.v3i3.68>
- Castillo González, J. P., Álvarez Gutiérrez, P. E., Adam Medina, M., López Zapata, B. Y., Ramírez Guerrero, G. v., & Vela Valdés, L. G. (2020). Effects on Biodiesel Production Caused by Feed Oil Changes in a Continuous Stirred-Tank Reactor. *Applied Sciences*, 10(3), 992. <https://doi.org/10.3390/app10030992>
- Castro Jaime, N. A. (2021). *Diseño conceptual de planta productora de biodiésel de aceite usado mediante la simulación del proceso* [Proyecto Integrador]. Escuela Superior Politécnica del Litoral.
- Cengel, Y. A., & Boles, M. A. (2012). *Termodinámica* (8th ed.). McGraw-Hill.
- Cheng, S. F., Choo, Y. M., Ma, A. N., & Chuan, C. H. (2004). Kinetics study on transesterification of palm oil. *Journal of Oil Palm Research*, 16(2), 19–29.

- Clickgasoil. (2021). *Evolución del precio de Biodiesel*.
<https://www.clickgasoil.com/c/Evolucion-Del-Precio-Biodiesel>.
- Couper, J. R., Penney, W. R., Fair, J. R., & Walas, S. M. (2012). Mixing and Agitation. In *Chemical Process Equipment* (pp. 277–327). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-396959-0.00010-0>
- Cruz Fierro, C. F. (2018a). *Algunos Métodos de Estimación para Conductividad Térmica*.
- Cruz Fierro, C. F. (2018b). *Algunos Métodos de Estimación para Viscosidad*.
- Dai, M., Yang, F., Zhang, Z., Liu, G., & Feng, X. (2021). Energetic, economic, and environmental (3E) multi-objective optimization of the back-end separation of ethylene plant based on adaptive surrogate model. *Journal of Cleaner Production*, 310, 127426. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.127426>
- Danec. (2021, June 1). *El rol protagónico de la Palma en el aparato productivo del país y en la conservación del medio ambiente*.
- El-Gharbawy, A. (2017). Cost Analysis for Biodiesel Production from Waste Cooking Oil Plant in Egypt. *INTERNATIONAL JOURNAL of SMART GRID*, 1(1), 16–25.
- EP PETROECUADOR. (2022a). *PRECIOS DE VENTA EN TERMINAL PARA LAS COMERCIALIZADORAS SECTOR AÉREO SECTOR AUTOMOTRIZ, PESQUERO, ATUNERO, CAMARONERO SECTOR AUTOMOTRIZ CALIFICADAS Y AUTORIZADAS A NIVEL NACIONAL*. EP PETROECUADOR. <https://www.eppetroecuador.ec/wp-content/uploads/downloads/2022/07/ESTRUCTURA-DE-PRECIOS-JULIO-2022.pdf>
- EP PETROECUADOR. (2022b). *PRECIOS DE VENTA EN TERMINAL PARA LAS COMERCIALIZADORAS CALIFICADAS Y AUTORIZADAS A NIVEL NACIONAL*. <https://www.eppetroecuador.ec/wp-content/uploads/downloads/2022/05/ESTRUCTURA-DE-PRECIOS-MAYO-2022.pdf>
- Espinoza Vázquez, Y. M., Gómez-Castro, F. I., & Ponce-Ortega, J. M. (2022). Multiobjective optimization of the supply chain for the production of biomass-based

- fuels and high-value added products in Mexico. *Computers & Chemical Engineering*, 157, 107598. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2021.107598>
- Fogler, H. S. (2008). *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas* (4th ed.). Pearson Education, Inc.
- Galeano Sánchez, E., & Montoya Corrales, V. H. (2008). *OPTIMIZACIÓN MULTI OBJETIVO DE LA OPERACIÓN EN SISTEMAS AUTOMATIZADOS DE DISTRIBUCIÓN DE ENERGÍA ELÉCTRICA*. Universidad Tecnológica de Pereira.
- Hosseinzadeh-Bandbafha, H., Nizami, A.-S., Kalogirou, S. A., Gupta, V. K., Park, Y.-K., Fallahi, A., Sulaiman, A., Ranjbari, M., Rahnama, H., Aghbashlo, M., Peng, W., & Tabatabaei, M. (2022). Environmental life cycle assessment of biodiesel production from waste cooking oil: A systematic review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 161, 112411. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112411>
- Kern, D. Q. (1999). *Procesos de Transferencia de Calor*. McGraw-Hill.
- Knudsen, J. G., Hottel, H. C., Sarofim, A. F., Wankat, P. C., & Knaebel, K. S. (1999). Heat and mass transfer. In *Perry's Chemical Engineer's Handbook* (7th ed.). McGraw-Hill.
- Kowsari, S., & Deymi-Dashtebayaz, M. (2021). Energy, exergy and exergoeconomic (3E) analysis and multi-objective optimization of a closed-circuit desalination system with side-conduit. *Desalination*, 514, 115154. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2021.115154>
- L. G. Wade, J. (2011). *Química Orgánica* (7th ed., Vol. 1). Pearson Educación.
- Leevijit, T., Wisutmethangoon, W., Prateepchaikul, G., Tongurai, C., & Allen, M. (2004). A Second Order Kinetics of Palm Oil Transesterification. *The Joint International Conference on "Sustainable Energy and Environment (SEE)"*, 3, 277–281.
- Levenspiel, O. (2004). *Ingeniería de las reacciones químicas* (3rd ed.). Limusa Wiley.
- Liley, P. E., Thomson, G. H., Friend, D. G., Daubert, T. E., & Buck, E. (1999). Physical and Chemical Data. In *Perry's Chemical Engineer's Handbook* (7th ed.). McGraw-Hill.
- McCabe, W. L., Smith, J. C., & Harriot, P. (1991). *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química* (4th ed.). McGraw-Hill.

- Medina Villadiego, M., Ospino Roa, Y., & Tejeda Benítez, L. (2015). ESTERIFICACIÓN Y TRANSESTERIFICACIÓN DE ACEITES RESIDUALES PARA OBTENER BIODIESEL. *Luna Azul*, 40. <https://doi.org/10.17151/luaz.2015.40.3>
- 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.
- Ministerio para la Transición Ecológica, O. E. de C. C. (2017). GUÍA PARA EL CÁLCULO DE LA HUELLA DE CARBONO Y PARA LA ELABORACIÓN DE UN PLAN DE MEJORA DE UNA ORGANIZACIÓN. In *Catálogo de Publicaciones de la Administración General del Estado*. Ministerio para la Transición Ecológica, Oficina Española de Cambio Climático.
- Mohammadshirazi, A., Akram, A., Rafiee, S., & Bagheri Kalhor, E. (2014). Energy and cost analyses of biodiesel production from waste cooking oil. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 33, 44–49. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2014.01.067>
- Narváez, P. C., Noriega, M. A., & Cadavid, J. G. (2015). Kinetics of palm oil ethanolsis. *Energy*, 83, 337–342. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2015.02.029>
- Narváez, P. C., Rincón, S. M., & Sánchez, F. J. (2007). Kinetics of Palm Oil Methanolysis. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 84(10), 971–977. <https://doi.org/10.1007/s11746-007-1120-y>
- Narváez Rincón, P. C., Sánchez Castellanos, F. J., Torres, J. A., & Ponce de León, L. F. (2004). Producción de ésteres metílicos de ácidos grasos: variables asociadas al proceso de transformación. *Universidad Nacional de Colombia - Ingeniería e Investigación*, 55, 41–50.
- Ögmundarson, Ó., Herrgård, M. J., Forster, J., Hauschild, M. Z., & Fantke, P. (2020). Addressing environmental sustainability of biochemicals. *Nature Sustainability*, 3(3), 167–174. <https://doi.org/10.1038/s41893-019-0442-8>
- Orjuela Castro, J. A., & Aranda Pinilla, J. A. (2015). Optimización Multiobjetivo en la Gestión de Cadenas de Suministro de Biocombustibles. Una Revisión de la Literatura. *Ingeniería*, 20(1), 37–63.

- Patel, N. K., & Shah, S. N. (2015). Biodiesel from Plant Oils. In *Food, Energy, and Water* (pp. 277–307). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-800211-7.00011-9>
- Peng, C.-Y., Lan, C.-H., & Dai, Y.-T. (2006). Speciation and quantification of vapor phases in soy biodiesel and waste cooking oil biodiesel. *Chemosphere*, 65(11), 2054–2062. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2006.06.056>
- Pinto, A. C., Guarieiro, L. L. N., Rezende, M. J. C., Ribeiro, N. M., Torres, E. A., Lopes, W. A., De, P. A., Pereira, P., & de Andrade, J. B. (2005). Biodiesel: An Overview. In *J. Braz. Chem. Soc* (Vol. 16, Issue 6B). www.scielo.br,
- Friday, G., Silverblatt, C. E., Slottee, J. S., Smith, J. C., & Todd, D. B. (1999). Liquid-solid Operations and Equipment. In *Perry's Chemical Engineer's Handbook* (7th ed.). McGraw-Hill.
- QUIMPAC ECUADOR S.A. (2022). *PROFORMA COTIZACIÓN*.
- Rao, R. V., & Lakshmi, R. J. (2021). Ranking of Pareto-optimal solutions and selecting the best solution in multi- and many-objective optimization problems using R-method. *Soft Computing Letters*, 3, 100015. <https://doi.org/10.1016/j.socl.2021.100015>
- Roca Meza, L. G. (2014). *Valoración Financiera de la empresa La Fabril S.A.* Escuela Superior Politécnica del Litoral.
- 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>
- SciPy community. (2022, May 20). *SciPy Reference Guide*. <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.odeint.html>
- Silva, F. C. da, Guardiola, J. F. H., Teixeira, L. P., Maria, A. C. L., Souza, L. A. de, & Belém, A. L. (2021). Optimization of palm oil biodiesel production using response surface methodology. *Revista Brasileira de Ciências Ambientais (Online)*, 56(2), 274–285. <https://doi.org/10.5327/Z21769478825>
- Smith, R. (2016). *Chemical Process Design and Integration* (2nd ed.). John Wiley & Sons, Inc.

- Suzihaque, M. U. H., Alwi, H., Kalthum Ibrahim, U., Abdullah, S., & Haron, N. (2022). Biodiesel production from waste cooking oil: A brief review. *Materials Today: Proceedings*. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.04.527>
- Tejada Tovar, C., Tejada Benítez, L., Ortiz, Á. V., & Rodríguez, L. M. (2013). Obtención de biodiesel a partir de diferentes tipos de grasa residual de origen animal. *Revista Luna Azul (On Line)*, 36, 10–27. <https://revistasojs.ucaldas.edu.co/index.php/lunazul/article/view/1656>
- Torroba, A. (2020). Atlas de los biocombustibles líquidos 2019-2020. In *Instituto Interamericano de Cooperación para la Agricultura (IICA)*. Instituto Interamericano de Cooperación para la Agricultura (IICA).
- Turton, R., Shaeiwitz, J. A., Bhattacharyya, D., & Whiting, W. B. (2018). *Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes* (5th ed.). Prentice Hall.
- U.S. Energy Information Administration. (2016). *International Energy Outlook 2016*. www.eia.gov
- Wongjaikham, W., Wongsawaeng, D., Ratnitsai, V., Kamjam, M., Ngaosuwan, K., Kiatkittipong, W., Hosemann, P., & Assabumrungrat, S. (2021). Low-cost alternative biodiesel production apparatus based on household food blender for continuous biodiesel production for small communities. *Scientific Reports*, 11(1), 13827. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-93225-5>

APÉNDICES

APÉNDICE A: DISEÑO Y DIMENSIONAMIENTO DEL REACTOR

- **Conductividad térmica de la mezcla**

Se calculó la conductividad de la mezcla empleando los datos que se muestra en la *Tabla 2.2* y la siguiente expresión (Cruz Fierro, 2018a):

$$k_{mix} = w_m * k_m + w_a * k_a - 0.72 * w_m * w_a (k_a - k_w)$$

Donde:

$$k_{mix} = \text{Conductividad térmica de la mezcla} \left[\frac{W}{m K} \right]$$

$$k_m = \text{Conductividad térmica del metanol} \left[\frac{W}{m K} \right]$$

$$k_a = \text{Conductividad térmica del aceite} \left[\frac{W}{m K} \right]$$

- **Diámetro y altura del reactor**

Por cuestiones de seguridad el reactor no debe ser llenado en su totalidad. Se asumió que el volumen total del reactor es la suma del volumen efectivo y el volumen que ocupa la sección de su base esférica.

Para el cálculo del diámetro y la altura del reactor se empleó la ecuación del volumen de un cilindro:

$$V_R = \frac{D_R^2}{4} * H * \pi$$

Donde:

$$V_R = \text{Volumen efectivo del reactor} [m^3]$$

$$D_R = \text{Diámetro del reactor} [m]$$

$$H = \text{Altura del reactor} [m]$$

De acuerdo con Knudsen et al. (1999), la relación entre la altura y el diámetro de un reactor sin deflectores puede estar en un rango entre 0.75 y 1.5. Se asumió una relación de 1.3.

Por lo tanto:

$$H = 1.3 D_R$$
$$D_R = \sqrt[3]{\frac{4V_R}{1.3 * \pi}}$$

Para el cálculo del volumen de la base o casquete esférico se empleó la siguiente ecuación:

$$V_{ce} = \frac{1}{3} \pi * h^2 * (3R - h)$$

$$R = \frac{r_r^2 + h^2}{2h}$$

Donde:

$$V_{ce} = \text{Volumen base esférica [m}^3\text{]}$$

$$h = \text{Altura del casquete [m]}$$

$$r_r = \text{Radio del reactor [m]}$$

Para el valor de h, se asumió un valor de 0.15 m.

- **Diseño del agitador**

El tipo de agitador seleccionado fue un agitador de turbina de 6 paletas con una inclinación de 45°, ya que con este tipo se logra una combinación de flujo axial y radial, de manera que se tiene una mejor homogenización de la mezcla. Así mismo, mejora la transferencia de calor en tanques que contienen serpentines.

De acuerdo con Priday et al. (1999), se requiere que la distancia desde el fondo del reactor hasta el agitador sea de 0.25*D_R para así garantizar un mezclado eficiente.

Por cuestiones de mantenimiento y limpieza del equipo, se asumió una distancia entre el motor del agitador y la parte superior del reactor, así mismo como una altura para la tapa del reactor, cuyos valores se fijaron en de 0.1 m y 0.13 m respectivamente. Adicionalmente se determinó que el diámetro del tubo del agitador sea de 1 ½ pulg.

Con base a lo previamente mencionado, la longitud total de agitador fue calculada bajo la siguiente expresión:

$$L_p = H + h + h_T - 0.25D_r + 0.1 m$$

Donde:

$$L_p = \text{Longitud total del agitador [m]}$$

$$h_T = \text{Altura de la tapa del reactor [m]}$$

Para calcular el diámetro del agitador, se utilizó la relación entre el diámetro del tanque del reactor y el diámetro del agitador propuesta por Couper et al. (2012), misma que se encuentra en un rango de 0.3 hasta 0.6. Por lo tanto, se asumió un valor de 0.45.

$$D_a = 0.45 * D_R$$

Donde:

$$D_a = \text{Diámetro del agitador [m]}$$

Se determinaron las dimensiones de las paletas como se observan en la *Figura 2.5*, por medio de las siguientes relaciones propuestas por McCabe et al. (1991):

$$\frac{L}{D_a} = \frac{1}{4} \quad \frac{W}{D_a} = \frac{1}{5}$$

Donde:

$$L = \text{Longitud de la paleta [m]}$$

$$W = \text{Ancho de la paleta [m]}$$

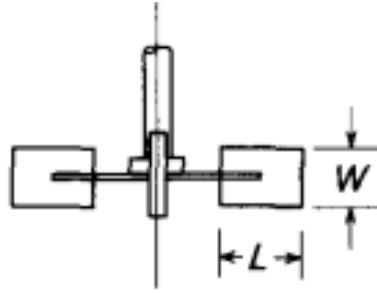


Figura A.1 Dimensiones de la paleta del agitador de turbina (McCabe et al., 1991)

- **Diseño del intercambiador de calor**

Para el diseño del serpentín, se consideró sobredimensionar el equipo usando los valores máximos de *temperatura de reacción* (60°C) y *relación molar metanol: aceite* (12:1). Adicional se establecieron las siguientes consideraciones:

- Los reactivos ingresan al reactor a temperatura ambiente 25°C, donde se suministra calor hasta alcanzar la temperatura de reacción.
- El vapor de servicio ingresa al intercambiador saturado a 100°C.
- La diferencia entre la temperatura de salida del vapor de servicio y la temperatura de reacción es de 10°C.
- La mezcla de reactivos absorbe el 90% del calor suministrado por el serpentín.
- El serpentín está compuesto por una tubería de 2 pulgada, de célula 40.
- La pérdida de presión es despreciable.

1. Se calculó la temperatura media logarítmica por medio de la siguiente ecuación:

$$\Delta T_m = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln (\Delta T_1 / \Delta T_2)}$$

Donde:

$$\Delta T_1 = T_{in\ agua} - T_{out\ agua}$$

$$\Delta T_2 = T_{out\ mezcla} - T_{in\ mezcla}$$

2. Se calculó el calor de reacción necesario mediante la siguiente ecuación:

$$Q_{rxn} = m_{mix} * \int_{T_0}^T C p_{mix} dT$$

Donde:

$$Q_{rxn} = \text{Calor requerido por los reactivos [kJ]}$$

$$m_{mix} = \text{Masa de la mezcla de reactivos [kg]}$$

$$T_0 = \text{Temperatura de entrada de los reactivos [°C]}$$

3. Se calcularon los coeficientes convectivos para cada la mezcla de reactivos y el vapor de servicio, las siguientes ecuaciones (Kern, 1999):

$$h_{mix} = 0.87 \frac{k}{D} \left(\frac{L^2 Np}{u} \right)^{\frac{2}{3}} \left(cp * \frac{u}{k} \right)^{\frac{1}{3}} \left(\frac{u}{u_w} \right)^{0.14}$$

$$h_w = \left[0.0115 * \frac{k}{D} * (Re)^{0.90} \left(cp * \frac{\mu}{k} \right)^{\frac{1}{3}} \right] * \frac{DI}{DE}$$

Donde:

$$h_{mix} = \text{Coeficiente convectivo para la mezcla de reactivos} \left[\frac{BTU}{h^{\circ}F ft^2} \right]$$

$$h_w = \text{Coeficiente convectivo para el vapor de servicio} \left[\frac{BTU}{h^{\circ}F ft^2} \right]$$

$$DI = \text{Diámetro interno de la tubería [ft]}$$

$$DE = \text{Diámetro externo de la tubería [ft]}$$

Para el cálculo del coeficiente convectivo del vapor de servicio se emplearon las propiedades a una temperatura promedio entre las temperaturas de entrada y salida.

4. Se calculó el coeficiente total de transferencia de calor, considerando el factor de obstrucción del agua, por medio de las siguientes ecuaciones (Kern, 1999):

$$U_c = \frac{h_{mix} * h_w}{h_{mix} + h_w}$$

$$R_d = \frac{1}{h_o}$$

$$\frac{1}{U_D} = \frac{1}{U_c} + R_d$$

Donde:

$$R_d = \text{Factor de obstrucción del agua} \left[\frac{h^\circ F ft^2}{BTU} \right]$$

$$h_o = \text{Coeficiente de conveccion del factor de incrustación} \left[\frac{BTU}{h^\circ F ft^2} \right]$$

$$U_c = \text{Coeficiente total de transferencia limpio} \left[\frac{BTU}{h^\circ F ft^2} \right]$$

$$U_D = \text{Coeficiente total de transferencia considerando el factor de incrustación} \left[\frac{BTU}{h^\circ F ft^2} \right]$$

5. Se calcularon las dimensiones del serpentín por medio de la siguiente ecuación:

$$A = \frac{\frac{Q}{1.055} \left[\frac{BTU}{h} \right]}{U_D (\Delta T_m * 33.8 [^\circ F])}$$

$$L = \frac{A}{\pi D} * \frac{1m}{3.281 ft}$$

Donde:

$$A = \text{Área del serpentín} [ft^2]$$

$$L = \text{Longitud de la tubería} [m]$$

$$D = \text{Diámetro de la tubería} [ft]$$

APÉNDICE B: POTENCIA DEL AGITADOR

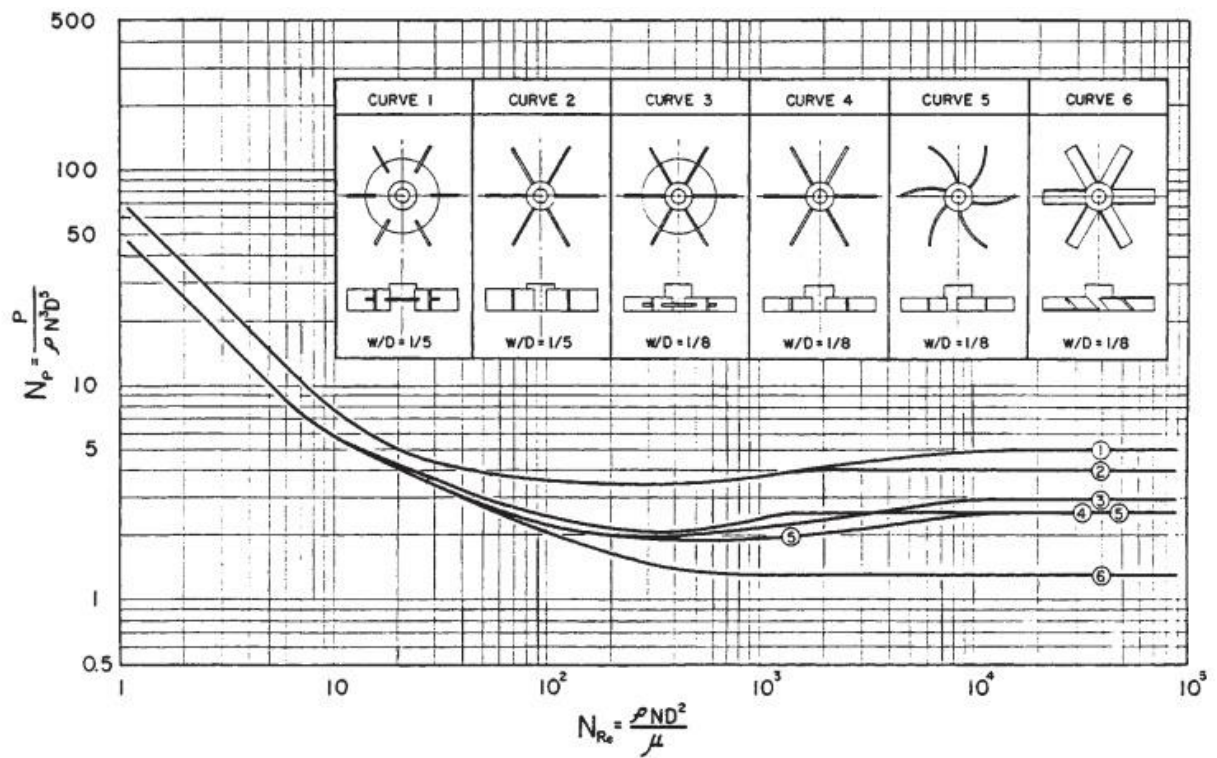


Figura B.1 Número de Potencia vs Número de Reynolds para el cálculo de potencia según el tipo de agitador (Couper et al., 2012)

APÉNDICE C: DIMENSIONES DEL SERPENTÍN DE CALENTAMIENTO

Tabla C.1 Dimensiones y propiedades del serpentín de calentamiento

Parámetro	Valor
Temperatura logarítmica media [°C]	32.44
Diámetro interno de la tubería [ft]	0.1723
Diámetro externo de la tubería [ft]	0.1984
Coeficiente convectivo de la mezcla [BTU/h °F ft ²]	4105.75
Coeficiente convectivo del agua de servicio [BTU/h °F ft ²]	1194.57
Coeficiente convectivo del factor de incrustación [BTU/h °F ft ²]	1000
Coeficiente total de transferencia de calor [BTU/h °F ft ²]	480.61
Área total de transferencia de calor [ft ²]	1.86
Longitud del tubo del intercambiador [m]	1.045

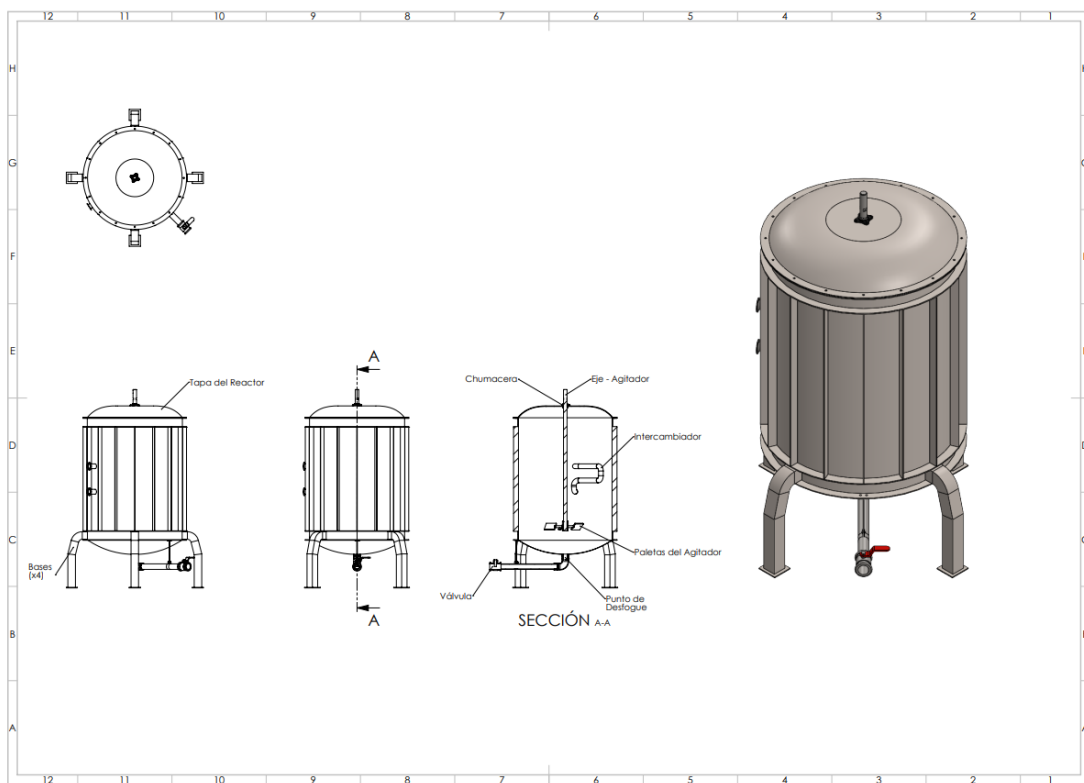


Figura C.1 Plano completo del diseño del reactor

APÉNDICE D: CONJUNTO PARETO

Tabla D.1 Resultados del Conjunto Pareto

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
45	3:1	1.5	30	80.29633	0.258950	0.144009
45	4:1	1.4	30	92.28407	0.288762	0.162696
45	4:1	1.5	30	92.69797	0.288862	0.162611
45	5:1	1.1	30	95.43249	0.337894	0.192244
45	5:1	1.2	30	95.76685	0.338059	0.192193
45	5:1	1.3	30	96.05151	0.338398	0.192242
45	5:1	1.4	30	96.29690	0.338873	0.192369
45	5:1	1.5	30	96.51073	0.339456	0.192559
45	6:1	0.9	30	96.60732	0.393064	0.225013
45	6:1	1	30	96.89581	0.393222	0.224956
45	6:1	1.1	30	97.13407	0.393584	0.225016
45	6:1	1.2	30	97.33457	0.394096	0.225163
45	6:1	1.3	30	97.50591	0.394724	0.225376
45	6:1	1.4	30	97.65424	0.395443	0.225642
45	6:1	1.5	30	97.78405	0.396235	0.225950
45	7:1	1.1	30	97.92217	0.451529	0.259053
45	7:1	1.2	30	98.06137	0.452201	0.259291
45	7:1	1.3	30	98.18117	0.452961	0.259580
45	7:1	1.4	30	98.28552	0.453790	0.259909
45	7:1	1.5	30	98.37733	0.454675	0.260270
45	8:1	1.2	30	98.47455	0.511074	0.293851
45	8:1	1.2	45	98.47455	0.511650	0.294227
45	8:1	1.3	30	98.56645	0.511904	0.294180
45	8:1	1.4	30	98.64686	0.512792	0.294542
45	8:1	1.5	30	98.71788	0.513727	0.294932
45	9:1	1.2	30	98.74087	0.570302	0.328610
45	9:1	1.3	30	98.81550	0.571175	0.328963
45	9:1	1.4	30	98.88100	0.572099	0.329346
45	9:1	1.5	30	98.93901	0.573065	0.329754
45	9:1	1.5	45	98.93901	0.573636	0.330126
45	10:1	1.3	30	98.98996	0.630623	0.363846
45	10:1	1.4	30	99.04531	0.631570	0.364242
45	10:1	1.5	30	99.09441	0.632557	0.364661

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
45	10:1	1.5	45	99.09441	0.633126	0.365033
46	3:1	1.5	30	80.29854	0.259556	0.144061
46	4:1	1.5	30	92.69983	0.289406	0.162657
46	5:1	1.2	30	95.76808	0.338605	0.192241
46	5:1	1.3	30	96.05266	0.338943	0.192290
46	5:1	1.4	30	96.29798	0.339416	0.192417
46	5:1	1.5	30	96.51174	0.339999	0.192606
46	6:1	1	30	96.89672	0.393781	0.225005
46	6:1	1.1	30	97.13491	0.394141	0.225065
46	6:1	1.2	30	97.33534	0.394652	0.225212
46	6:1	1.3	30	97.50664	0.395280	0.225425
46	6:1	1.4	30	97.65492	0.395998	0.225692
46	6:1	1.5	30	97.78469	0.396789	0.226000
46	7:1	1.1	30	97.92277	0.452101	0.259104
46	7:1	1.2	30	98.06193	0.452772	0.259342
46	7:1	1.3	30	98.18169	0.453531	0.259631
46	7:1	1.4	30	98.28601	0.454360	0.259960
46	7:1	1.5	30	98.37779	0.455245	0.260321
46	8:1	1.2	30	98.47499	0.511661	0.293904
46	8:1	1.3	30	98.56685	0.512490	0.294232
46	8:1	1.4	30	98.64724	0.513378	0.294595
46	8:1	1.5	30	98.71824	0.514313	0.294985
46	9:1	1.2	30	98.74122	0.570906	0.328664
46	9:1	1.3	30	98.81583	0.571778	0.329017
46	9:1	1.4	30	98.88132	0.572701	0.329400
46	9:1	1.5	30	98.93931	0.573667	0.329808
46	10:1	1.3	30	98.99025	0.631242	0.363901
46	10:1	1.4	30	99.04558	0.632190	0.364298
46	10:1	1.5	30	99.09467	0.633176	0.364717
46	10:1	1.5	45	99.09467	0.633745	0.365088
47	3:1	1.5	30	80.30065	0.260167	0.144113
47	4:1	1.5	30	92.70160	0.289955	0.162705
47	5:1	1.3	30	96.05376	0.339492	0.192338
47	5:1	1.4	30	96.29901	0.339965	0.192465
47	5:1	1.5	30	96.51272	0.340546	0.192655
47	6:1	1.1	30	97.13571	0.394703	0.225115
47	6:1	1.2	30	97.33609	0.395214	0.225261

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
47	6:1	1.3	30	97.50733	0.395840	0.225475
47	6:1	1.4	30	97.65557	0.396558	0.225741
47	6:1	1.5	30	97.78530	0.397349	0.226049
47	7:1	1.1	30	97.92335	0.452677	0.259155
47	7:1	1.2	30	98.06246	0.453348	0.259393
47	7:1	1.3	30	98.18219	0.454106	0.259682
47	7:1	1.4	30	98.28648	0.454935	0.260011
47	7:1	1.5	30	98.37824	0.455819	0.260372
47	8:1	1.2	30	98.47540	0.512252	0.293956
47	8:1	1.3	30	98.56724	0.513081	0.294285
47	8:1	1.4	30	98.64760	0.513969	0.294648
47	8:1	1.5	30	98.71859	0.514904	0.295038
47	8:1	1.5	45	98.71859	0.515478	0.295412
47	9:1	1.2	30	98.74156	0.571514	0.328719
47	9:1	1.3	30	98.81615	0.572385	0.329072
47	9:1	1.4	30	98.88162	0.573309	0.329455
47	9:1	1.5	30	98.93959	0.574274	0.329862
47	10:1	1.3	30	98.99052	0.631867	0.363957
47	10:1	1.4	30	99.04583	0.632814	0.364354
47	10:1	1.5	30	99.09491	0.633800	0.364773
47	10:1	1.5	45	99.09491	0.634369	0.365144
48	3:1	1.5	30	80.30268	0.260784	0.144166
48	4:1	1.5	30	92.70330	0.290509	0.162753
48	5:1	1.4	30	96.30000	0.340518	0.192514
48	5:1	1.5	30	96.51365	0.341098	0.192703
48	6:1	1.2	30	97.33680	0.395780	0.225312
48	6:1	1.3	30	97.50800	0.396405	0.225525
48	6:1	1.4	30	97.65619	0.397122	0.225791
48	6:1	1.5	30	97.78589	0.397912	0.226099
48	7:1	1.1	30	97.92390	0.453258	0.259207
48	7:1	1.2	30	98.06297	0.453928	0.259445
48	7:1	1.3	30	98.18267	0.454686	0.259734
48	7:1	1.4	30	98.28692	0.455514	0.260063
48	7:1	1.5	30	98.37866	0.456398	0.260424
48	8:1	1.2	30	98.47580	0.512848	0.294010
48	8:1	1.3	30	98.56761	0.513677	0.294338
48	8:1	1.4	30	98.64795	0.514564	0.294701

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
48	8:1	1.5	30	98.71892	0.515499	0.295091
48	8:1	1.5	45	98.71892	0.516073	0.295466
48	9:1	1.2	30	98.74188	0.572126	0.328773
48	9:1	1.3	30	98.81645	0.572998	0.329127
48	9:1	1.4	30	98.88190	0.573920	0.329509
48	9:1	1.5	30	98.93987	0.574886	0.329917
48	9:1	1.5	45	98.93987	0.575457	0.330290
48	10:1	1.3	30	98.99077	0.632496	0.364014
48	10:1	1.4	30	99.04608	0.633443	0.364410
48	10:1	1.5	30	99.09514	0.634429	0.364830
48	10:1	1.5	45	99.09514	0.634997	0.365201
49	3:1	1.5	30	80.30463	0.261406	0.144220
49	4:1	1.5	30	92.70492	0.291067	0.162801
49	5:1	1.5	30	96.51454	0.341655	0.192753
49	6:1	1.2	30	97.33748	0.396350	0.225362
49	6:1	1.3	30	97.50863	0.396975	0.225576
49	6:1	1.4	30	97.65679	0.397691	0.225842
49	6:1	1.5	30	97.78645	0.398481	0.226150
49	7:1	1.1	30	97.92442	0.453843	0.259259
49	7:1	1.2	30	98.06346	0.454513	0.259497
49	7:1	1.3	30	98.18312	0.455270	0.259786
49	7:1	1.4	30	98.28735	0.456098	0.260115
49	7:1	1.5	30	98.37907	0.456981	0.260476
49	7:1	1.5	45	98.37907	0.457559	0.260854
49	8:1	1.2	30	98.47618	0.513449	0.294063
49	8:1	1.3	30	98.56797	0.514277	0.294392
49	8:1	1.4	30	98.64829	0.515164	0.294755
49	8:1	1.5	30	98.71924	0.516098	0.295145
49	8:1	1.5	45	98.71924	0.516672	0.295519
49	9:1	1.2	30	98.74220	0.572743	0.328829
49	9:1	1.3	30	98.81674	0.573614	0.329182
49	9:1	1.4	30	98.88218	0.574537	0.329565
49	9:1	1.5	30	98.94013	0.575502	0.329972
49	10:1	1.3	30	98.99102	0.633130	0.364071
49	10:1	1.4	30	99.04631	0.634076	0.364467
49	10:1	1.5	30	99.09536	0.635062	0.364886
49	10:1	1.5	45	99.09536	0.635631	0.365258

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
50	3:1	1.5	30	80.30649	0.262034	0.144274
50	4:1	1.5	30	92.70649	0.291631	0.162850
50	5:1	1.5	30	96.51540	0.342216	0.192802
50	6:1	1.3	30	97.50924	0.397549	0.225627
50	6:1	1.4	30	97.65736	0.398265	0.225893
50	6:1	1.5	30	97.78699	0.399054	0.226201
50	7:1	1.2	30	98.06393	0.455102	0.259550
50	7:1	1.3	30	98.18356	0.455859	0.259839
50	7:1	1.4	30	98.28777	0.456686	0.260168
50	7:1	1.5	30	98.37946	0.457569	0.260529
50	7:1	1.5	45	98.37946	0.458147	0.260906
50	8:1	1.2	30	98.47654	0.514054	0.294117
50	8:1	1.3	30	98.56831	0.514882	0.294446
50	8:1	1.4	30	98.64861	0.515768	0.294809
50	8:1	1.5	30	98.71954	0.516702	0.295199
50	8:1	1.5	45	98.71954	0.517276	0.295573
50	9:1	1.2	30	98.74249	0.573365	0.328884
50	9:1	1.3	30	98.81702	0.574236	0.329238
50	9:1	1.4	30	98.88245	0.575158	0.329621
50	9:1	1.5	30	98.94038	0.576123	0.330028
50	9:1	1.5	45	98.94038	0.576694	0.330401
50	10:1	1.3	30	98.99126	0.633768	0.364128
50	10:1	1.4	30	99.04654	0.634714	0.364525
50	10:1	1.5	30	99.09557	0.635700	0.364944
51	3:1	1.5	30	80.30829	0.262667	0.144329
51	4:1	1.5	30	92.70799	0.292199	0.162899
51	5:1	1.5	30	96.51622	0.342782	0.192852
51	6:1	1.4	30	97.65792	0.398843	0.225945
51	6:1	1.5	30	97.78751	0.399631	0.226253
51	7:1	1.3	30	98.18398	0.456452	0.259892
51	7:1	1.4	30	98.28816	0.457279	0.260221
51	7:1	1.5	30	98.37983	0.458161	0.260582
51	7:1	1.5	45	98.37983	0.458739	0.260959
51	8:1	1.2	30	98.47689	0.514664	0.294172
51	8:1	1.3	30	98.56864	0.515491	0.294501
51	8:1	1.4	30	98.64892	0.516377	0.294863
51	8:1	1.5	30	98.71983	0.517310	0.295253

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
51	8:1	1.5	45	98.71983	0.517885	0.295628
51	9:1	1.2	30	98.74278	0.573991	0.328941
51	9:1	1.3	30	98.81729	0.574861	0.329294
51	9:1	1.4	30	98.88270	0.575783	0.329677
51	9:1	1.5	30	98.94062	0.576748	0.330084
51	9:1	1.5	45	98.94062	0.577319	0.330457
51	10:1	1.3	30	98.99149	0.634411	0.364186
51	10:1	1.4	30	99.04675	0.635357	0.364583
51	10:1	1.5	30	99.09578	0.636342	0.365002
52	3:1	1.5	30	80.31001	0.263306	0.144385
52	4:1	1.5	30	92.70943	0.292772	0.162949
52	5:1	1.5	30	96.51701	0.343352	0.192903
52	6:1	1.5	30	97.78801	0.400213	0.226305
52	7:1	1.5	30	98.38019	0.458758	0.260636
52	8:1	1.4	30	98.64922	0.516990	0.294919
52	8:1	1.5	30	98.72011	0.517924	0.295308
52	9:1	1.4	30	98.88294	0.576414	0.329733
52	9:1	1.5	30	98.94085	0.577378	0.330141
52	10:1	1.4	30	99.04696	0.636004	0.364641
52	10:1	1.5	30	99.09597	0.636989	0.365060
52	10:1	1.5	45	99.09597	0.637558	0.365431
53	3:1	1.5	30	80.31167	0.263950	0.144441
53	4:1	1.5	30	92.71082	0.293349	0.163000
53	5:1	1.5	30	96.51778	0.343927	0.192954
53	6:1	1.5	30	97.78849	0.400799	0.226357
53	7:1	1.5	30	98.38054	0.459360	0.260689
53	8:1	1.5	30	98.72039	0.518541	0.295364
53	9:1	1.5	30	98.94107	0.578012	0.330198
53	9:1	1.5	45	98.94107	0.578583	0.330571
53	10:1	1.5	30	99.09616	0.637640	0.365119
54	3:1	1.5	30	80.31327	0.264600	0.144498
54	4:1	1.5	30	92.71216	0.293932	0.163051
54	5:1	1.5	30	96.51851	0.344507	0.193005
54	6:1	1.5	30	97.78895	0.401390	0.226410
54	7:1	1.5	30	98.38087	0.459966	0.260744
54	8:1	1.5	30	98.72065	0.519163	0.295420
54	9:1	1.5	30	98.94129	0.578651	0.330256

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
54	9:1	1.5	45	98.94129	0.579222	0.330628
54	10:1	1.5	30	99.09635	0.638296	0.365178
54	10:1	1.5	45	99.09635	0.638865	0.365549
55	3:1	1.5	30	80.31481	0.265255	0.144555
55	4:1	1.5	30	92.71345	0.294519	0.163103
55	5:1	1.5	30	96.51921	0.345091	0.193057
55	6:1	1.5	30	97.78940	0.401986	0.226463
55	7:1	1.5	30	98.38119	0.460576	0.260799
55	8:1	1.5	30	98.72090	0.519790	0.295476
55	9:1	1.5	30	98.94149	0.579294	0.330314
55	9:1	1.5	45	98.94149	0.579866	0.330686
55	10:1	1.5	30	99.09652	0.638957	0.365237
56	3:1	1.5	30	80.31629	0.265916	0.144613
56	4:1	1.5	30	92.71469	0.295111	0.163155
56	5:1	1.5	30	96.51990	0.345679	0.193110
56	6:1	1.5	30	97.78983	0.402586	0.226517
56	7:1	1.5	30	98.381500	0.461191	0.260854
56	8:1	1.5	30	98.72114	0.520421	0.295533
56	9:1	1.5	30	98.94169	0.579943	0.330372
56	9:1	1.5	45	98.94169	0.580514	0.330745
56	10:1	1.5	30	99.09669	0.639622	0.365297
56	10:1	1.5	45	99.09669	0.640191	0.365669
57	3:1	1.5	30	80.31773	0.266582	0.144671
57	4:1	1.5	30	92.71589	0.295708	0.163207
57	5:1	1.5	30	96.52055	0.346273	0.193163
57	5:1	1.5	45	96.52055	0.346866	0.193550
57	6:1	1.5	30	97.79024	0.403190	0.226571
57	7:1	1.5	30	98.38180	0.461810	0.260910
57	8:1	1.5	30	98.72137	0.521057	0.295590
57	9:1	1.5	30	98.94188	0.580595	0.330431
57	9:1	1.5	45	98.94188	0.581166	0.330804
57	10:1	1.5	30	99.09685	0.640292	0.365358
58	3:1	1.5	30	80.31911	0.267253	0.144730
58	4:1	1.5	30	92.71705	0.296309	0.163260
58	5:1	1.5	30	96.52119	0.346870	0.193216
58	5:1	1.5	45	96.52119	0.347464	0.193603
58	6:1	1.5	30	97.79064	0.403799	0.226626

Temperatura (°C)	Relación Molar	Catalizador (% m/m)	Tiempo (min)	Rendimiento (%)	Costos (\$/kg)	Huella Carbono (kg CO2-eq/kg)
58	6:1	1.5	45	97.79064	0.404383	0.227007
58	7:1	1.5	30	98.38209	0.462434	0.260966
58	8:1	1.5	30	98.72160	0.521697	0.295648
58	8:1	1.5	45	98.72160	0.522271	0.296023
58	9:1	1.5	30	98.94207	0.581252	0.330490
58	9:1	1.5	45	98.94207	0.581823	0.330863
58	10:1	1.5	30	99.09701	0.640966	0.365419
59	3:1	1.5	30	80.32045	0.267930	0.144790
59	4:1	1.5	30	92.71816	0.296916	0.163314
59	5:1	1.5	30	96.52180	0.347473	0.193270
59	5:1	1.5	45	96.52180	0.348066	0.193657
59	6:1	1.5	30	97.79103	0.404413	0.226681
59	7:1	1.5	30	98.38237	0.463063	0.261022
59	8:1	1.5	30	98.72182	0.522342	0.295706
59	9:1	1.5	30	98.94225	0.581914	0.330550
59	10:1	1.5	30	99.09716	0.641645	0.365480
60	3:1	1.5	30	80.32174	0.268613	0.144850
60	3:1	1.5	45	80.32179	0.269331	0.145319
60	3:1	1.5	60	80.32179	0.270050	0.145788
60	4:1	1.5	30	92.71924	0.297526	0.163368
60	4:1	1.5	45	92.71925	0.298146	0.163772
60	4:1	1.5	105	92.71925	0.300627	0.165391
60	4:1	1.5	120	92.71925	0.301247	0.165796
60	5:1	1.5	30	96.52239	0.348079	0.193324
60	5:1	1.5	45	96.52239	0.348673	0.193711
60	5:1	1.5	60	96.52239	0.349266	0.194098
60	6:1	1.5	30	97.79140	0.405031	0.226736
60	7:1	1.5	30	98.38264	0.463696	0.261079
60	8:1	1.5	30	98.72203	0.522991	0.295765
60	9:1	1.5	30	98.94242	0.582580	0.330610
60	10:1	1.5	30	99.09731	0.642329	0.365542

APÉNDICE E: FLUJOS DE CAJA

Abreviaturas

CF	Cash Flow	ND	Non-discounted
CCF	Cumulative Cash Flow	D	Discounted

Year	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	222391.61	274809.22	274809.22	52944.77	233352.11	28906.43
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	222391.61	278024.65	278024.65	330969.42	217547.43	246453.86
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	222391.61	269450.18	269450.18	600419.60	194285.03	440738.89
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	222391.61	267306.56	267306.56	867726.16	177607.25	618346.14
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	222391.61	265162.94	265162.94	1132889.11	162350.68	780696.82
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	222391.61	265162.94	265162.94	1398052.05	149604.39	930301.21
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	222391.61	265162.94	265162.94	1663215.00	137858.82	1068160.03
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	222391.61	265162.94	265162.94	1928377.94	127035.40	1195195.43
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	222391.61	265162.94	265162.94	2193540.88	117061.74	1312257.17
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	222391.61	265162.94	294101.79	2487642.67	119643.75	1431900.93

Figura E.1 Flujo de caja para la solución con Rank #1

Year	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	462491.44	70724.37	70724.37	-151140.08	60055.05	-144390.63
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	462491.44	73939.80	73939.80	-77200.29	57856.07	-86534.57
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	462491.44	65365.32	65365.32	-11834.96	47131.18	-39403.39
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	462491.44	63221.71	63221.71	51386.75	42006.58	2603.19
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	462491.44	61078.09	61078.09	112464.84	37396.14	39999.32
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	462491.44	61078.09	61078.09	173542.92	34460.13	74459.46
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	462491.44	61078.09	61078.09	234621.01	31754.64	106214.09
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	462491.44	61078.09	61078.09	295699.10	29261.55	135475.65
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	462491.44	61078.09	61078.09	356777.19	26964.20	162439.85
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	462491.44	61078.09	90016.93	446794.12	36619.85	199059.70

Figura E.2 Flujo de caja para la solución con Rank #2

Year	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	337018.26	177376.57	177376.57	-44487.88	150617.93	-53827.75
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	337018.26	180592.00	180592.00	136104.12	141308.78	87481.03
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	337018.26	172017.53	172017.53	308121.64	124031.95	211512.98
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	337018.26	169873.91	169873.91	477995.55	112869.80	324382.78
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	337018.26	167730.29	167730.29	645725.84	102695.82	427078.60
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	337018.26	167730.29	167730.29	813456.13	94633.09	521711.69
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	337018.26	167730.29	167730.29	981186.42	87203.36	608915.05
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	337018.26	167730.29	167730.29	1148916.71	80356.95	689271.99
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	337018.26	167730.29	167730.29	1316647.00	74048.05	763320.05
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	337018.26	167730.29	196669.13	1513316.13	80007.11	843327.15

Figura E.3 Flujo de caja para la solución con Rank #3

Year	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	267823.93	236191.75	236191.75	14327.30	200560.39	-3885.29
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	267823.93	239407.18	239407.18	253734.48	187330.21	183444.91
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	267823.93	230832.71	230832.71	484567.18	166440.19	349885.10
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	267823.93	228689.09	228689.09	713256.27	151948.54	501833.64
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	267823.93	226545.47	226545.47	939801.74	138706.46	640540.09
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	267823.93	226545.47	226545.47	1166347.21	127816.49	768356.58
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	267823.93	226545.47	226545.47	1392892.69	117781.51	886138.09
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	267823.93	226545.47	226545.47	1619438.16	108534.38	994672.47
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	267823.93	226545.47	226545.47	1845983.63	100013.25	1094685.72
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	267823.93	226545.47	255484.31	2101467.94	103933.75	1198619.47

Figura E.4 Flujo de caja para la solución con Rank #4

	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
Year										
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	351828.54	164787.83	164787.83	-57076.62	139928.30	-64517.38
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	351828.54	168003.26	168003.26	110926.64	131458.40	66941.03
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	351828.54	159428.79	159428.79	270355.43	114954.93	181895.96
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	351828.54	157285.17	157285.17	427640.60	104505.43	286401.39
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	351828.54	155141.55	155141.55	582782.15	94988.15	381389.53
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	351828.54	155141.55	155141.55	737923.70	87530.55	468920.08
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	351828.54	155141.55	155141.55	893065.25	80658.45	549578.53
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	351828.54	155141.55	155141.55	1048206.81	74325.88	623904.41
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	351828.54	155141.55	155141.55	1203348.36	68490.49	692394.90
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	351828.54	155141.55	184080.39	1387428.75	74885.87	767280.77

Figura E.5 Flujo de caja para la solución con Rank #5

	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
Year										
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	337541.11	176932.15	176932.15	-44932.30	150240.56	-54205.12
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	337541.11	180147.58	180147.58	135215.27	140961.03	86755.91
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	337541.11	171573.10	171573.10	306788.38	123711.50	210467.41
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	337541.11	169429.49	169429.49	476217.86	112574.51	323041.92
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	337541.11	167285.87	167285.87	643503.73	102423.72	425465.64
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	337541.11	167285.87	167285.87	810789.60	94382.34	519847.98
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	337541.11	167285.87	167285.87	978075.47	86972.30	606820.28
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	337541.11	167285.87	167285.87	1145361.33	80144.03	686964.32
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	337541.11	167285.87	167285.87	1312647.20	73851.85	760816.17
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	337541.11	167285.87	196224.71	1508871.91	79826.31	840642.48

Figura E.6 Flujo de caja para la solución con Rank #6

	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
Year										
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	422631.19	104605.58	104605.58	-117258.87	88825.01	-115620.67
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	422631.19	107821.01	107821.01	-9437.86	84367.28	-31253.39
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	422631.19	99246.54	99246.54	89808.67	71560.97	40307.58
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	422631.19	97102.92	97102.92	186911.59	64518.37	104825.95
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	422631.19	94959.30	94959.30	281870.89	58140.50	162966.45
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	422631.19	94959.30	94959.30	376830.19	53575.84	216542.29
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	422631.19	94959.30	94959.30	471789.49	49369.56	265911.85
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	422631.19	94959.30	94959.30	566748.79	45493.51	311405.36
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	422631.19	94959.30	94959.30	661708.09	41921.77	353327.13
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	422631.19	94959.30	123898.14	785606.24	50403.09	403730.22

Figura E.7 Flujo de caja para la solución con Rank #7

	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
Year										
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	372203.42	147469.18	147469.18	-74395.27	125222.31	-79223.37
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	372203.42	150684.61	150684.61	76289.34	117906.99	38683.62
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	372203.42	142110.14	142110.14	218399.48	102467.45	141151.06
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	372203.42	139966.52	139966.52	358366.00	92998.35	234149.41
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	372203.42	137822.90	137822.90	496188.90	84384.50	318533.91
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	372203.42	137822.90	137822.90	634011.80	77759.40	396293.31
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	372203.42	137822.90	137822.90	771834.70	71654.44	467947.75
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	372203.42	137822.90	137822.90	909657.61	66028.79	533976.54
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	372203.42	137822.90	137822.90	1047480.51	60844.81	594821.35
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	372203.42	137822.90	166761.74	1214242.25	67840.46	662661.81

Figura E.8 Flujo de caja para la solución con Rank #8

Year	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	315954.14	195281.08	195281.08	-26583.38	165821.40	-38624.28
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	315954.14	198496.50	198496.50	171913.13	155318.61	116694.34
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	315954.14	189922.03	189922.03	361835.16	136941.85	253636.19
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	315954.14	187778.41	187778.41	549613.57	124766.14	378402.33
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	315954.14	185634.79	185634.79	735248.36	113658.17	492060.50
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	315954.14	185634.79	185634.79	920883.16	104734.77	596795.27
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	315954.14	185634.79	185634.79	1106517.95	96511.95	693307.23
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	315954.14	185634.79	185634.79	1292152.75	88934.71	782241.94
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	315954.14	185634.79	185634.79	1477787.54	81952.37	864194.31
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	315954.14	185634.79	214573.64	1692361.18	87290.85	951485.16

Figura E.9 Flujo de caja para la solución con Rank #9

Year	Investment	d_k	$FCI_L - \Sigma d_k$	R	COM_d	Net Profit	CF (ND)	CCF (ND)	CF (D)	CCF (D)
0	0.00	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	221864.45	0.00	192925.61	0.00	0.00	0.00	-221864.45	-221864.45	-204445.68	-204445.68
2	0.00	64308.54	128617.07	534348.01	301107.66	207900.58	207900.58	-13963.87	176537.16	-27908.52
3	0.00	85744.72	42872.36	534348.01	301107.66	211116.01	211116.01	197152.13	165193.06	137284.54
4	0.00	28581.57	14290.79	534348.01	301107.66	202541.53	202541.53	399693.67	146041.05	283325.59
5	0.00	14290.79	0.00	534348.01	301107.66	200397.92	200397.92	600091.59	133150.95	416476.55
6	0.00	0.00	0.00	534348.01	301107.66	198254.30	198254.30	798345.88	121384.69	537861.23
7	0.00	0.00	0.00	534348.01	301107.66	198254.30	198254.30	996600.18	111854.67	649715.90
8	0.00	0.00	0.00	534348.01	301107.66	198254.30	198254.30	1194854.48	103072.86	752788.76
9	0.00	0.00	0.00	534348.01	301107.66	198254.30	198254.30	1393108.78	94980.52	847769.28
10	0.00	0.00	0.00	534348.01	301107.66	198254.30	198254.30	1591363.08	87523.52	935292.80
11	0.00	0.00	0.00	534348.01	301107.66	198254.30	227193.14	1818556.22	92424.60	1027717.40

Figura E.10 Flujo de caja para la solución con Rank #10