

Diseño y simulación de una planta para la producción de biodiésel a partir de *Jatropha curcas* L. en el departamento de Bolívar

Conceptual design and simulation of a biodiesel production plant from *Jatropha curcas* L. in the department of Bolivar

Desenho e simulação de uma planta para a produção de biodiesel a partir de pinhão-manso (*Jatropha curcas* L.) no departamento de Bolivar

Luis Rafael De la Rosa Ramos; Eilis Henríquez Montero; Eduardo Sánchez Tuirán; Karina Angélica Ojeda Delgado*

Programa de Ingeniería Química. Universidad de Cartagena
Sede Piedra de Bolívar. Avenida del Consulado, calle 30 No. 48 - 152, Cartagena, Bolívar, Colombia.

*kojedad@unicartagena.edu.co

Fecha Recepción: 2 de julio de 2014
Fecha Aceptación: 26 de enero de 2015

Resumen

En los últimos años los biocombustibles han sido estudiados como una alternativa frente al uso de combustibles fósiles. Dentro de las recientes fuentes de producción de biodiésel se destaca la *Jatropha curcas* L. (*J. curcas*) cuyo aceite no es comestible, tiene buenos rendimientos, presentando con esto mayores ventajas que las materias primas tradicionales. En el presente trabajo se desarrolló un diseño conceptual y simulación del proceso de producción de biodiésel a partir del aceite de *J. curcas*, mediante la simulación de sus etapas en el software HYSYS®. Para este estudio, se trabajó con 11000kg/h de aceite como materia prima, se tuvo en cuenta una etapa de esterificación debido a los altos contenidos de ácidos grasos libres (FFA) presentes en este aceite y se emplearon diversos modelos termodinámicos, lo cual permitió obtener un biocombustible con una composición mayor al 98% (masa) en metilésteres. En cuanto a las propiedades fisicoquímicas del aceite y biodiésel obtenido por la simulación y correlaciones para la estimación de propiedades, se apreció concordancia con los datos experimentales reportados por diferentes autores, así como por normas ASTM D6751 y el Estándar Europeo EN-12214 que regulan sus características. Estos resultados permitieron identificar a la *J. curcas* como una alternativa viable para la producción de biocombustibles, y su posible implementación a escala industrial en el departamento de Bolívar, al no poner en riesgo la seguridad alimenticia y propiciar la producción de biocombustibles en Colombia a partir de fuentes vegetales no comestibles.

Palabras clave: biocombustibles, *Jatropha curcas* L, simulación, propiedades fisicoquímicas.

Abstract

In recent years biofuels have been studied as a good alternative instead of fossil fuels. *Jatropha curcas* L oil (*J. curcas*) is a feedstock used to produce biodiesel which does not affect food security, has good yields and more advantages than traditional oils. Therefore, in this work, a conceptual design of a biodiesel production from *J. curcas* was developed by simulation, using HYSYS® software. A case study was proposed to produce biodiesel from 11000kg/h of *Jatropha* oil. Sequential stages of esterification and transesterification were studied due to high content of free fatty acid (FFA) in the oil. Thermodynamic data of the components was obtained from several models, which allowed to obtain a biofuel with high content

Cita: De la Rosa Ramos LR, Henríquez Montero E, Sánchez Tuirán E, Ojeda Delgado KA. Diseño y simulación de una planta para la producción de biodiésel a partir de *Jatropha curcas* L. en el departamento de Bolívar. rev.ion. 2015;28(1):73-85.

of methyl esters over 98% (mass). Oil and biodiesel properties estimated by simulations and theoretical correlations showed a good fit with experimental data reported by different authors, and international standards for biodiesel such as ASTM D6751 and EN-12214 that helps to identify the *J. curcas* as a viable alternative to produce biofuels, also it could be suggested a commercial scale implementation in the department of Bolivar, because alimentary food would not be affected and it encourages to produce biodiesel from alternative resources in Colombia.

Keywords: *biofuels, Jatropha curcas L, simulation, physicochemical properties.*

Resumo

Nos últimos anos, os biocombustíveis têm sido estudados como alternativa aos combustíveis fósseis. Das fontes de produção de biodiesel, a *Jatropha curcas L (J. curcas)* destaca-se entre estas, cujo óleo não é comestível, além tem bons rendimentos, mostrando com isso vantagens sobre as materias primas tradicionais. O presente trabalho desenvolveu um desenho conceitual e simulação do processo de produção de biodiesel a partir de óleo de *J. curcas*, simulando as etapas do processo no *software* HYSYS®. Para o estudo foi considerado 11000kg/h de óleo e uma etapa de esterificação devido ao elevado teor de ácido graxo livre (FFA) presentes no óleo. Também, foram empregados variados modelos termodinâmicos o que permitiu a obtenção de um biocombustível com uma composição superior a 98% (em massa) em metil ésteres. Em quanto às propriedades físico-químicas do óleo e biodiesel obtidos pela simulação e as correlações para estimar as propriedades, estas concordaram com os dados experimentais relatados por diferentes autores bem como as normas ASTM D6751 e os Estándares Europeos EN-12214 que regem as características. Estes resultados permitiram a identificação da *J. curcas* como uma alternativa viável de produção de biocombustíveis e uma possível implementação em escala industrial no departamento de Bolívar, sem comprometer a segurança alimentar e promover a produção de biocombustíveis na Colômbia de fontes vegetais não comestíveis.

Palabras-chave: *biocombustíveis, Jatropha curcas L, Simulação, propiedades fisico-química.*

Introducción

El biodiésel se ha perfilado como una alternativa prometedora al diésel convencional, por sus buenas características como combustible, por ser biodegradable, renovable y a que presenta menores perfiles de emisión, entre otras [1]. Este se produce en gran medida a partir de aceites vegetales comestibles como: aceite de palma, girasol, soya, entre otros [2], generando, en algunos casos, competencia con la industria alimenticia. Por lo anterior, se han llevado a cabo investigaciones hacia la búsqueda de nuevas fuentes de aceites no consideradas fuentes alimenticias, como *Croton megalocarpus*, *Moringa oleifera*, *Jatropha curcas L.* [3] y las microalgas [4], con buenos rendimientos y que presenten menos inconvenientes que las materias tradicionales actualmente usadas.

De manera particular se puede hacer énfasis en el aceite de *J. curcas* que al presentar algunas ventajas sobre las tradicionales como no ser comestible, crecer en tierras marginales y degradadas, requerir poca agua para su crecimiento, entre otras [5], puede ser una buena

fuelle para la producción del biocombustible. Por consiguiente y dado que muchas de las áreas en la región Caribe, como en el departamento de Bolívar, no presentan las mejores condiciones para la siembra de alimentos, el uso de estas tierras para la implementación de cultivos de *J. curcas* podría ser beneficioso para la región, en el eventual caso de contar con una planta productora de biodiésel a partir de este aceite, como la propuesta en este trabajo, pues contribuiría a la generación de empleos, competitividad en la región y aumento de la producción de biocombustibles en el país.

En el estudio realizado por Foidl *et al.* [6] se investigó la producción de biodiésel a partir del aceite de dos especies de *J. curcas*; para la transesterificación se usó KOH como catalizador y dos alcoholes, metanol y etanol, obteniendo un mayor rendimiento teórico con el metanol (92%). Otras investigaciones más recientes como la de Berchmans e Hirata [7], estudiaron la producción de biodiésel a partir de aceite crudo de *J. curcas* con altos contenidos de FFA. Se usó como pretratamiento la esterificación con ácido sulfúrico para disminuir los niveles de FFA. Para la transesterificación se empleó NaOH. Las mejores condiciones obtenidas fueron a una

relación másica de metanol-aceite 0,60 y 0,24, con concentraciones de 1%p de H_2SO_4 y 1,4%p de NaOH, para la esterificación y la transesterificación, respectivamente.

Del aceite de *J. curcas* se destacan propiedades como la baja acidez y viscosidad, buena estabilidad y propiedades en frío, entre otras [8]. Wang *et al.* [9] estudiaron la influencia de la composición de los ácidos grasos en las propiedades del biodiésel, pudiendo determinar que el biodiésel obtenido a partir de aceite de *J. curcas* y en general de otras plantas estudiadas, presentan mejores propiedades debido a que contienen altos contenidos de ácidos grasos mono-saturados. Además, sus propiedades han sido estudiadas tanto experimental como teóricamente. Diversas correlaciones han sido desarrolladas para estimar propiedades como densidad, viscosidad, punto de ebullición, punto de fusión, propiedades críticas, factor acéntrico, número de cetano, poder calorífico, presión de vapor, entre otras [9-13].

En el área de diseño de plantas productoras de biodiésel, Zhang *et al.* [14], realizaron la simulación de cuatro procesos para obtener biodiésel a partir de aceite virgen y usado de canola, mediante el *software* de simulación HYSYS®. Los modelos termodinámicos NRTL y UNIQUAC, fueron comparados en los casos de estudio. En Colombia, Zapata *et al.* [15] reportaron un trabajo sobre esta temática usando aceite de palma. Para el caso de la *J. curcas*, la literatura publicada sobre este tipo de simulaciones ha sido limitada [16].

En este trabajo se realizó el diseño y la simulación de una planta productora de biodiésel, a partir de un aceite no convencional para la producción del biocombustible y que presenta un alto potencial para la implementación de los cultivos de *J. curcas* en el departamento de Bolívar y, en general, en la región Caribe. Se logró simular un proceso capaz de producir cantidades de biodiésel acordes con las plantas en operación en Colombia y con propiedades acordes con los estándares que regulan este biocombustible, de acuerdo con las diferentes validaciones realizadas. Este trabajo contribuye con los estudios sobre diseño y simulación de plantas productoras de biodiésel, a partir de una fuente no tradicional como lo es el aceite de *J. curcas* ya que se efectuó cuidadosamente la validación de propiedades fisicoquímicas de aceite y biodiésel en la simulación con datos experimentales reportados en la literatura, lo cual no es muy frecuente en este tipo de investigaciones.

Metodología

Con el propósito de realizar el diseño conceptual de una planta productora de biodiésel, en primer lugar se creó el aceite de *J. curcas* en el simulador de acuerdo con las composiciones de ácidos grasos empleadas por Castillo *et al.* [17] y la concentración de ácidos grasos libres presentes en el aceite de *J. curcas* reportados por Berchmans e Hirata [7] (Tabla 1).

Tabla 1. Composición de ácidos grasos y FFA del aceite crudo de *J. curcas*.

| Aceite | Palmítico | Estearico | Linoleico | Oleico | Linolénico |
|-----------|-----------|-----------|-----------|--------|------------|
| % en masa | 15,47 | 7,37 | 34,38 | 42,23 | 0,56 |
| FFA (%p) | 2,4 | 0,2 | 6,9 | 5,4 | - |

Fuente: Adaptado de Castillo *et al.* (2011) y Berchmans e Hirata, (2008).

En este caso, los triglicéridos que hacen parte del aceite fueron creados en el simulador mediante la herramienta HYPO MANAGER, debido a que este no contenía información para los mismos, por lo cual se necesitó conocer algunas de sus propiedades tales como: el punto normal de ebullición, peso molecular, densidad, propiedades críticas (temperatura, presión y volumen) y el factor acéntrico, asimismo se estableció el tipo de componente con el cual se trabajó (hidrocarburo, ácido carboxílico, ésteres, etc.).

Los valores de las propiedades críticas de los triglicéridos, se obtuvieron de las investigaciones reportadas por Aca-Aca *et al.* [18], en la cual se empleó el método de contribución de grupos de Constantinou–Gani [19]. En el caso de la densidad de los triglicéridos, los valores fueron obtenidos a partir de bases de datos de sustancias químicas, y la masa molecular de los mismos fue calculada de acuerdo con su fórmula molecular. Por lo anterior, los valores del punto normal de ebullición y de factor acéntrico fueron estimados y son presentados en la Tabla 2.

Tabla 2. Triglicéridos del aceite de *J. curcas* creados en HYSYS®.

| Nombre | NBP* (°C) | MW | ρ (kg/m ³) | ω^* | Propiedades críticas | | |
|--------------|-----------|--------|--------------------------------|------------|----------------------|-------------|------------------------------|
| | | | | | Tc (°C) | Pc (kPa) | Vc (m ³ /kmol) |
| Tripalmitina | 622,55 | 807,34 | 920,0 | 2,0275 | 650,25 | 370,0 | 2,9479 |
| Triestearina | 643,69 | 891,48 | 910,0 | 2,0112 | 672,05 | 330,0 | 3,2825 |
| Trioleina | 641,75 | 885,43 | 910,0 | 2,0118 | 670,05 | 320,0 | 3,2510 |
| Trilinoleina | 639,91 | 879,38 | 930,0 | 2,0311 | 668,15 | 320,0 | 3,2196 |

Fuente: Los autores. *Estimados por el simulador. Propiedades críticas tomadas de Aca-Aca *et al.* (2009); MW y ρ obtenido de bases de datos de sustancias químicas. NBP: punto de ebullición normal; MW: masa molecular; ρ : densidad; ω : factor acéntrico.

Una vez definidos los componentes del aceite, se seleccionó el modelo termodinámico *Non-Ramdon Two Liquids* (NRTL) debido a que en estudios reportados presenta buenos resultados en las simulaciones de producción de biodiésel [16,20].

Para la validación de las propiedades, la densidad y viscosidad cinemática del aceite fueron obtenidas por medio de la simulación, mientras que el valor de saponificación (*SV*) y el poder calorífico superior (*HHV* expresados en mg KOH/g y MJ/kg, respectivamente, fueron determinados por correlaciones de estimación de propiedades, las cuales se emplearon por presentar errores bajos y por ser aplicables a un amplio rango de aceites (maíz, soya, palma, girasol, *J. curcas*, entre otras). En la Ecuación 1, se tiene en cuenta el porcentaje de ácidos grasos presentes en el aceite (*P*: palmítico, *S*: esteárico, *O*: oléico, *L*: linoléico y *LL*: linolénico) [1] y en la Ecuación 2 la viscosidad cinemática (*VS*) en centistokes y a una temperatura de 311K [21]. Estos datos fueron comparados con los experimentales reportados en la literatura a fin de verificar la correspondencia del aceite simulado con el real.

$$SV = 268 - (0,418 \times P) - (1,30 \times S) - (0,695 \times O) - (0,77 \times L) - (0,847 \times LL) \quad (1)$$

$$HHV = 0,0317 (VS) + 38,053 \quad (2)$$

Se estableció como base de cálculo un ingreso de 11000kg/h de aceite de *J. curcas* para llevar a cabo la simulación del proceso de producción de biodiésel teniendo en cuenta que es posible obtener altas tasas de este aceite en la región Caribe [22]. Además, este valor fue establecido para obtener una cantidad acorde a las tasas de producción de las plantas de biodiésel actualmente en operación en Colombia [23].

En la simulación, la etapa de esterificación se especificó metanol como alcohol, en relación másica con el aceite de 0,60 y ácido sulfúrico como catalizador en una concentración de 1%p [7]. De acuerdo con las condiciones dadas en la literatura se fijó una conversión de 98% de FFA a metilésteres, a 60°C [7] y 400kPa [14].

En la Tabla 3 se presentan las condiciones de operación empleadas en las diferentes etapas del proceso.

Tabla 3. Condiciones de operación en las etapas del proceso de producción de biodiésel.

| | Esterificación | Transesterificación | Separación | Purificación |
|-------------------------|---|--|-------------------|--------------|
| Aceite (kg/h) | 11000 | - | - | - |
| Agua (kg/h) | - | - | 7000 | - |
| Alcohol | Metanol – relación másica 0,60 ^I | Metanol – relación molar 6:1 ^{II} | - | - |
| Catalizador | H ₂ SO ₄ – concentración 1%p ^I | NaOH – 1% de aceite ^{II} | - | - |
| Conversión (%) | 98 | 99 | - | - |
| Presión (kPa) | 400 ^{III} | 400 ^{III} | 120 ^{IV} | 101,3 |
| Temperatura (°C) | 60 ^I | 65 ^{II} | 35 ^{IV} | 124 |

Fuente: Adaptado de: ^I[7]; ^{II}[8]; ^{III}[14]; ^{IV}[15].

En la Figura 1, se presenta un diagrama de bloques del proceso de producción de biodiésel a partir de aceites mediante la reacción de transesterificación.

La etapa de esterificación se llevó a cabo con el propósito de disminuir el porcentaje de ácidos grasos libres presentes en el aceite, y que se encontrara dentro del límite permitido (1%) para llevar a cabo la transesterificación [17]. El aceite esterificado fue llevado hasta una etapa de purificación (decantación) en la que se buscó separarlo del agua, del metanol y el catalizador; realizando la respectiva recuperación de alcohol sin reaccionar mediante una torre de destilación.

En la etapa de transesterificación también fue seleccionado metanol en una relación molar 6:1 alcohol-aceite y 1%p de NaOH (masa de aceite) como catalizador alcalino, a una temperatura de 65°C [17] y estableciendo la conversión de la reacción en 99% de triglicéridos de acuerdo con el estudio reportado por Koh y Ghazi [8]. Por último, en las etapas de purificación del biodiésel se empleó una columna de extracción líquido-líquido usando agua como agente extractor para retirar glicerina, metanol y otras impurezas, así como una etapa de destilación instantánea para eliminar restos de agua y metanol que pudiera contener la corriente [15].

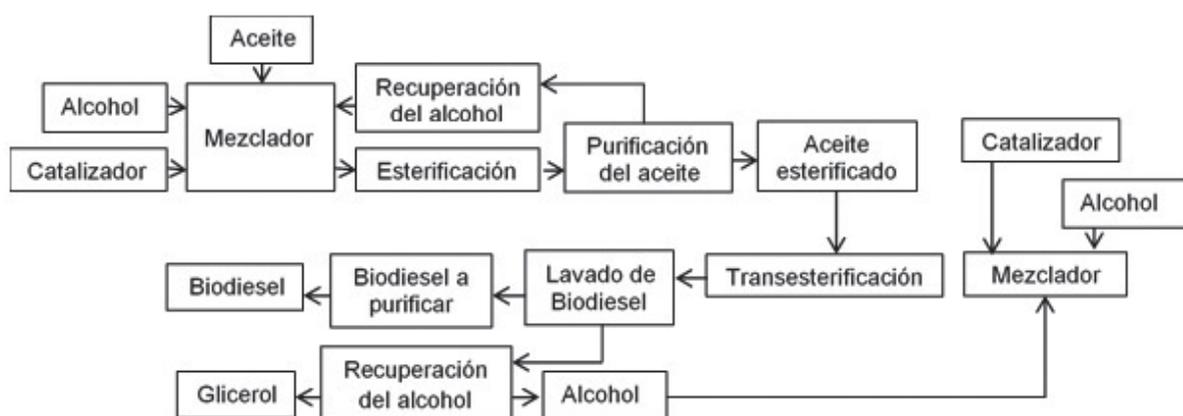


Figura 1. Etapas del proceso de producción de biodiésel.

Por otro lado, para el biodiésel, propiedades como la viscosidad cinemática y densidad, además de ser obtenidas mediante la simulación, fueron calculadas por ecuaciones para su estimación. Las Ecuaciones 3 y 4 reportadas por Ramírez-Verduzco *et al.* [12] se emplearon para establecer la viscosidad cinemática a 40°C y densidad a 20°C, teniendo en cuenta las masas moleculares (M_i) y el grado de insaturación (N) de los metilésteres, para diversos aceites entre ellos los que se encuentran presente en el de *J. curcas*.

$$\ln(\eta_i) = -12,503 + [2,496 \times \ln(M_i)] - (0,178 \times N) \quad (3)$$

$$\rho_i = 0,8463 + \frac{4,9}{M_i} + 0,018 \times N \quad (4)$$

El valor del poder calorífico superior (HHV), fue obtenido por la Ecuación 5 reportada por Demirbas [21], en la cual VS corresponde al valor de la viscosidad del biodiésel a una temperatura de 311K.

$$HHV = 0,4625(VS) + 39,450 \quad (5)$$

La estimación del número de cetano se realizó acorde con la correlación establecida por Wang *et al.* [9] en la Ecuación 6, teniendo en cuenta el grado de insaturación (DU) calculado mediante la Ecuación 7, el cual es definido a partir de la cantidad de ácidos grasos monosaturados y poliinsaturados presentes en el aceite vegetal (C_n), así como por la correlación reportada por Ramírez-Verduzco *et al.* [12] (Ecuación 8) teniendo en cuenta la masa molecular (M_i) y grado de insaturación (N) de los metilésteres presentes en el biodiésel. Estas ecuaciones son aplicables a cualquier biodiésel que se encuentre entre los que se hayan usado para determinar las correlaciones, además los parámetros usados son propiedades características de las moléculas.

$$CN = -0,1209(DU) + 62,0958 \quad (6)$$

$$DU = (\text{monoinsaturados } Cn : 1\%) + 2 \times (\text{poliinsaturados } Cn : 2\%) + 3 \times (\text{poliinsaturados } Cn : 3\%) + 4 \times (\text{poliinsaturados } Cn : 4\%) \quad (7)$$

$$\phi_i = -7,8 + (0,302 \times M_i) - (20 \times N) \quad (8)$$

Finalmente, se llevó a cabo un análisis comparativo entre las propiedades calculadas teóricamente y las experimentales reportadas, calculando las desviaciones entre éstos. Dichas propiedades fueron comparadas para el aceite de *J. curcas* con biodiésel obtenido de aceites vegetales tradicionales.

Resultados

La simulación del aceite de *J. curcas*, cuya composición fue mencionada anteriormente, permitió la estimación de propiedades como densidad másica y la viscosidad cinemática de 898,4kg/m³ y 51,16cSt, respectivamente. En cuanto al valor de saponificación del aceite (Ecuación 1) y su poder calorífico superior (Ecuación 2) los valores fueron de 196,19mg KOH/g y 39,674MJ/kg. En la Figura 2 se presenta la densidad obtenida y los datos experimentales reportados en la literatura. De esta manera el dato calculado para esta propiedad se encuentra dentro del rango reportado por Koh y Ghazi [8], y muy cercano al valor mínimo presentado por Okullo *et al.* [24]. Sin embargo, es posible apreciar un error relativo menor al 5% con respecto a los estudios realizados por Karmakar *et al.* [25].

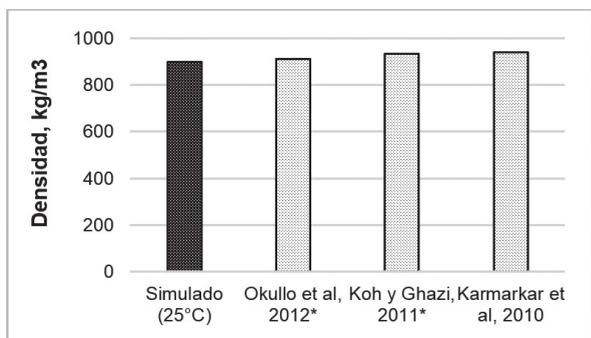


Figura 2. Densidad del aceite de *J. curcas*. *Okullo *et al.*, 2012 y Koh y Ghazi, 2011 reportan rangos, con valores mínimos de 907,36kg/m³ y 860kg/m³, respectivamente.

En la Figura 3 se observa que la viscosidad del aceite obtenida por medio de la simulación a dos temperaturas diferentes (30 y 40°C) se encuentra

dentro de los rangos y valores reportado en la literatura [1,8,25], presentado errores relativo inferiores al 5%.

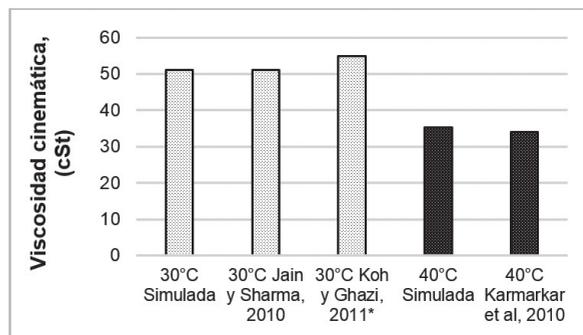


Figura 3. Viscosidad cinemática del aceite de *J. curcas* *Koh y Ghazi, 2011 reportan un rango, con valor mínimo de 37cSt.

La Figura 4 muestra el valor de saponificación calculado para el aceite de *J. curcas*, con lo que fue posible verificar que el porcentaje de ácidos grasos fijados para la simulación del aceite es adecuado, dado que el resultado obtenido por medio de la correlación, se ajusta a los valores experimentales reportados [8,25] con diferencias aproximadas de 3%.

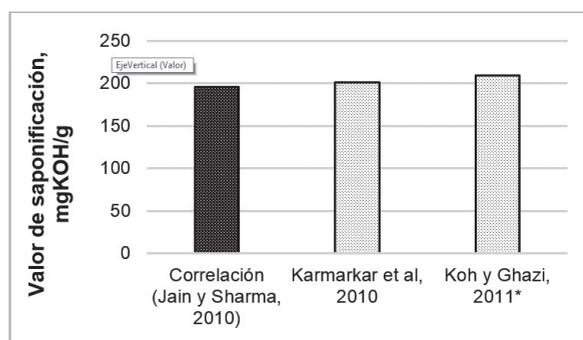


Figura 4. Valor de saponificación del aceite de *J. curcas* *Koh y Ghazi, 2011 reporta un rango, con valor mínimo de 102,9 mgKOH/g.

De igual forma como se observa en la Figura 5, el valor del poder calorífico superior se ubica dentro de los valores máximos y mínimos presentados por Koh y Ghazi [8] y Okullo *et al.* [24] para esta propiedad, y presenta errores relativos de 2,6% de acuerdo con el estudio realizado por Karmakar *et al.* [25].

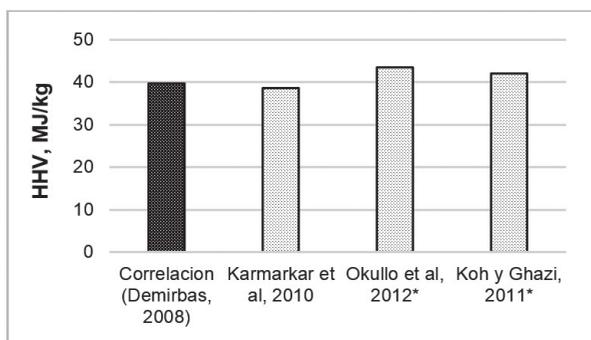


Figura 5. HHV del aceite de *J. curcas*. *Okullo et al., 2012 y Koh y Ghazi, 2011 reportan rangos, con valores mínimos de 41,52MJ/kg y 37,83MJ/kg, respectivamente.

Los anteriores resultados, muestran la correspondencia de las propiedades del aceite simulado con los datos experimentales reportados

en la literatura. De igual forma, otros aceites vegetales empleados para la producción de biodiésel fueron simulados, en función de las composiciones específicas de triglicéridos (palma, soya y girasol), con el fin de realizar un análisis comparativo y validar la correspondencia de los componentes hipotéticos creados con los datos experimentales reportados. De esta manera, en la Tabla 4 se presentan las propiedades como densidad, viscosidad cinemática y HHV, y su comparación con los aceites simulados para diferentes materias primas, los resultados muestran una concordancia adecuada permitiendo la validación de los compuestos hipotéticos creados. Definidas las condiciones de la corriente de aceite, se simularon las etapas que intervienen en el proceso de producción del biodiésel. En la Figura 6 se presenta el diagrama de flujo para las etapas de esterificación y transesterificación, separación y purificación, respectivamente.

Tabla 4. Propiedades de otros aceites vegetales.

| Propiedad | Palma | | Soya | | Girasol | |
|------------------------------|----------|--------------|----------|-------------------|----------|-------------------|
| | Simulado | Experimental | Simulado | Experimental [26] | Simulado | Experimental [26] |
| Densidad másica, kg/m^3 | 901,5 | 923 [19] | 908,1 | 913,8 | 910,7 | 916,1 |
| Viscosidad cinemática, cSt | 42,68 | 44,79 [25] | 34,26 | 32,6 | 30,63 | 33,9 |
| HHV, MJ/kg | 39,51 | 39,74 [19] | 39,14 | 39,44 | 39,02 | 39,59 |

Fuente: Desarrollado por los autores a partir de la simulación realizada en HYSYS®.

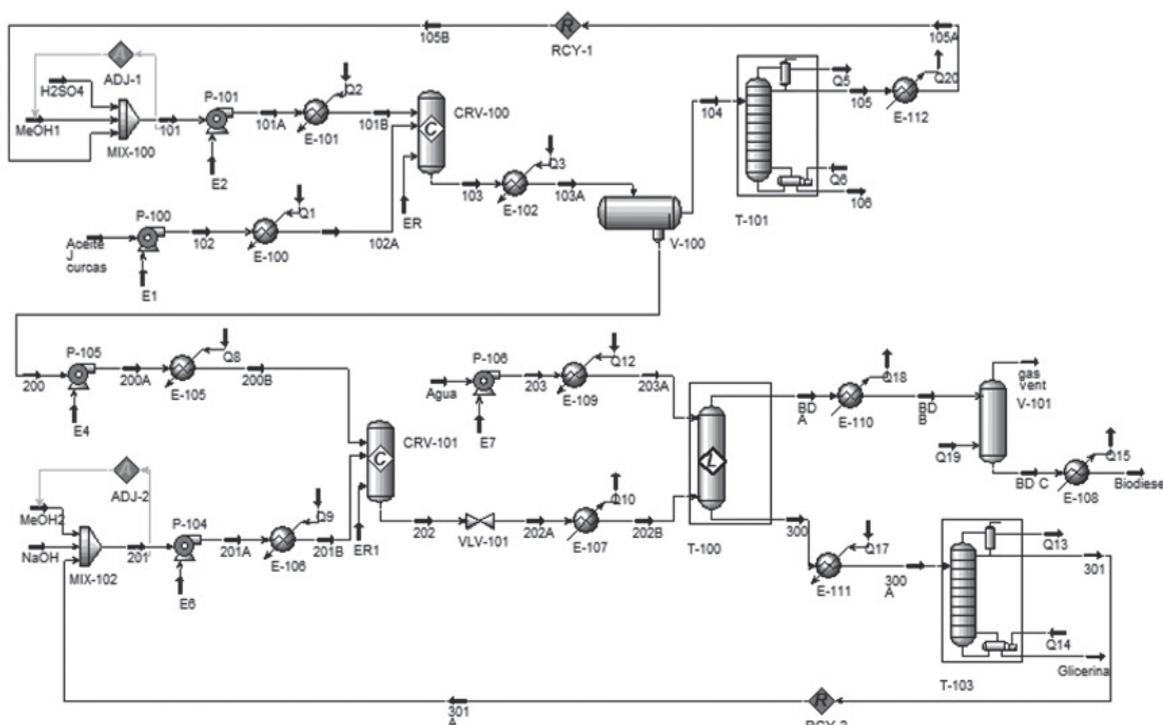


Figura 6. Diagrama de flujo del proceso de producción de biodiésel.

La primera etapa correspondiente al pretratamiento del aceite de *J. curcas* se realizó en el reactor de conversión CRV-100, en el que se redujeron los contenidos de ácidos grasos libres de 14,9%p a aproximadamente 0,23%p, lo cual se encuentra por debajo del límite recomendado de 1%p para llevar a cabo la reacción de transesterificación básica [8].

Luego de realizada la esterificación, la corriente de aceite esterificado fue llevada al separador de tres fases, V-100, en el que se llevó a cabo una decantación, de la cual se obtuvo una fase liviana rica en metanol y una fase pesada rica en aceite y metilésteres, mientras que la fase vapor en esta etapa fue nula. Para esta etapa fue necesario evaluar diferentes modelos termodinámicos con el cual se lograra una mejor separación de fases.

Entre los modelos seleccionados se escogió el PR-Twu con Ecuaciones de Estado, debido a que la modificaciones propuestas por Twu [27] permiten predecir la densidad en líquidos, como hidrocarburos pesados y compuestos polares mejor que el PR o SRK [27]. La elección de estos modelos se realizó de acuerdo con los estudios sobre simulación de biodiésel donde se ha encontrado una mejor predicción de los equilibrios de fase con ecuaciones de estado que mediante modelos de coeficientes de actividad, dada su precisión, capacidad de predicción y simplicidad de los mismos [28, 29]. En la Tabla 5, se muestran los diferentes modelos evaluados en esta etapa, con sus respectivas composiciones en flujos molares, así como la composición de las corrientes que abandonan la etapa de decantación con el modelo termodinámico escogido.

Tabla 5. Comparación de paquetes de fluidos en la etapa de separación del pretratamiento.

| Modelo Termodinámico | | NRTL Ideal | | PR-Twu | | SRK | | SRK-Twu | |
|----------------------|----------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| Corriente (kg-mol/h) | Alimento | Fase Ligera | Fase Pesada |
| Metanol | 77,263 | 0,563 | 76,700 | 75,404 | 1,859 | 75,072 | 2,191 | 75,119 | 2,144 |
| Agua | 6,587 | 0,012 | 6,576 | 6,582 | 0,005 | 6,568 | 0,019 | 6,568 | 0,019 |
| Aceite | 10,733 | 0,024 | 10,829 | 0,000 | 10,853 | 0,000 | 1,853 | 0,000 | 1,853 |
| M-palmitato | 1,018 | 0,000 | 1,018 | 0,001 | 1,017 | 0,006 | 1,012 | 0,004 | 1,015 |
| M-estearato | 0,077 | 0,000 | 0,077 | 0,000 | 0,076 | 0,000 | 0,076 | 0,000 | 0,076 |
| M-oleato | 2,080 | 2,055 | 0,025 | 0,000 | 2,080 | 0,000 | 2,080 | 0,000 | 2,080 |
| M-linoleato | 2,677 | 2,670 | 0,007 | 0,020 | 2,657 | 0,063 | 2,614 | 0,044 | 2,634 |

Fuente: Obtenido por los autores a partir de la simulación

La siguiente etapa en el proceso de producción de biodiésel correspondió a la transesterificación. Para esta etapa se utilizó NaOH como catalizador y metanol en las relaciones fijadas en la Tabla 3. La reacción de transesterificación fue realizada en el reactor CRV-101 al que le fueron establecidas condiciones de operación de 400kPa [14] y 65°C [8]. En la corriente de fondo de reactor CRV-101, se encontraba aceite y metanol que no reaccionaron, biodiésel, glicerina y el hidróxido de sodio, siendo el 82,3% el porcentaje de metilésteres en esta corriente. En el proceso de purificación de biodiésel se buscó, en primer lugar, separar la glicerina y los otros compuestos de los metilésteres. En esta etapa se obtuvo una separación adecuada debido a que la corriente de biodiésel contenía más del 98% de su composición másica en metilésteres y también por el hecho de que el metanol se retira casi por completo con el

glicerol, lo cual se esperaba, dada la afinidad que presentan por ser compuestos altamente polares. Finalmente, la corriente de biodiésel se sometió a una etapa de destilación instantánea, en el que se buscó retirar más impurezas como agua y metanol. Esta etapa operó a una temperatura de 124°C y presión de 101,3kPa, con el que se obtuvo una fase vapor de 20,15kg/h siendo casi en su totalidad agua y en menor proporción metanol. De acuerdo con la información obtenida por medio de la simulación, se pudo comprobar que la corriente de biodiésel, presentó una composición de 98,73% en metilésteres, y pequeñas trazas de alcohol, aceite sin reaccionar, agua y catalizador empleado en la etapa de transesterificación. Cabe resaltar que el pretratamiento de esterificación permite aumentar la producción del biodiésel frente a otros tratamientos, ya que convierte los ácidos grasos libres directamente en alquilésteres

[15], y de acuerdo con las investigaciones reportadas las conversiones alcanzadas son bastante significativas [7]. Por otro lado, de acuerdo con el proceso de simulación y las etapas establecidas, la pérdida de producto o reactivos de interés es bastante baja, puesto que las etapas de separación y recuperación de alcohol se realizaron adecuadamente. En la Tabla 6 se presenta la información de la corriente de biodiésel al finalizar el proceso.

Tabla 6. Composición de la corriente de biodiesel de *J. curcas*.

| Biodiésel | |
|--------------------------------|--------|
| Flujo másico (kg/h) | 11130 |
| Flujo molar (kgmol/h) | 38,47 |
| Composición en fracción másica | |
| M-Palmitato | 0,1546 |
| M-Estearato | 0,0639 |
| M-Oleato | 0,4099 |
| M-Linoleato | 0,3589 |
| Glicerina | 0,0000 |
| Metanol | 0,0002 |
| Aceite | 0,0115 |
| H ₂ O | 0,0005 |
| NaOH | 0,0005 |

Fuente: Obtenido por los autores a partir de la simulación

De acuerdo con el contenido de metilésteres obtenido para la corriente de biodiésel simulado, se evaluaron algunas de sus propiedades, con el fin de verificar que éstas se encontraran dentro de los parámetros que las regulan y acorde con el biodiésel obtenido en los estudios experimentales de biodiésel de *J. curcas* desarrollados por diferentes autores en la literatura [8, 23, 28]. La viscosidad cinemática, se presenta en la Figura 7 calculada a partir de la simulación y por medio de la Ecuación 3 reportada por Ramirez-Verduzco *et al.* [12], esta estimación se llevó a cabo a 40°C para ser concordantes con la norma ASTM D6751. El valor obtenido mediante la simulación presenta una diferencia por debajo del 1% con respecto al límite inferior establecido por el estándar, esto puede atribuirse a que los metilésteres que hacen parte de la librería del *software* utilizados para representar el biodiésel tienen valores de viscosidad bajos (del orden de 2cSt). De igual forma, el aceite de *J. curcas* al poseer un alto porcentaje de componentes insaturados (78,9%) [8] afecta la viscosidad disminuyéndola apreciablemente. Sin embargo, el valor obtenido por la correlación se

encuentra dentro de los rangos establecidos por la norma ASTM y los datos experimentales, lo cual demostraría que la composición obtenida en metilésteres fue adecuada.

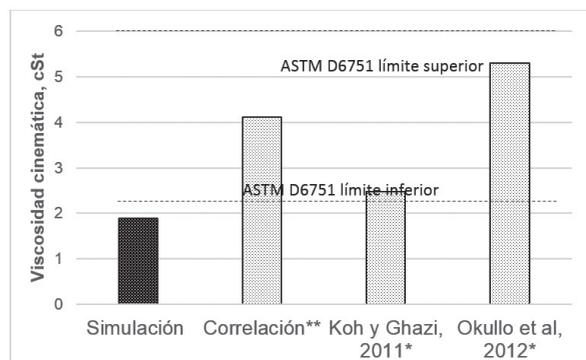


Figura 7. Viscosidad cinemática del biodiesel de *J. curcas*. * Koh y Ghazi, 2011 y Okullo *et al.*, 2012 reportan rangos, con valores mínimos de 2,23 5cSt, respectivamente. **Ramírez-Verduzco *et al.*, 2011.

Para la densidad del biodiésel de *J. curcas*, la Figura 8 muestra que la predicción realizada en la simulación y la correlación empleada (Ecuación 4), presentan desviaciones cercanas al 3% con respecto a los datos experimentales [8,30], y se ajustan adecuadamente dentro de los límites establecidos en el estándar EN-14214 y los valores reportados, lo cual influye en un buen potencial de energía del biocombustible [25].

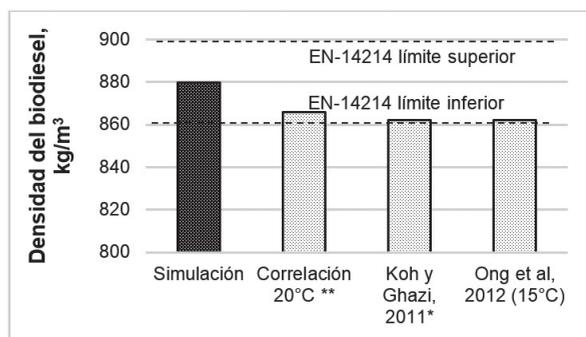


Figura 8. Densidad del biodiesel de *J. curcas*. *Koh y Ghazi, 2011 reporta un rango, con valor mínimo de 858kg/m³, **Ramírez-Verduzco *et al.*, 2011.

Propiedades como el número de cetano y poder calorífico superior fueron determinadas por correlaciones reportadas en la literatura. La Figura 9 muestra la comparación del HHV obtenido por correlación establecida por Demirbas [21] (Ecuación 5) y los datos experimentales reportados por diferentes autores en la literatura.

Se encuentra que la predicción del HHV es adecuada encontrándose dentro de los valores experimentales reportados en la literatura, con ligeras diferencias del orden del 3%, con respecto a los mismos, de esta manera, la cantidad de calor que se generará durante la combustión estará dentro de los parámetros obtenidos por medio de investigaciones de tipo teórico y experimental.

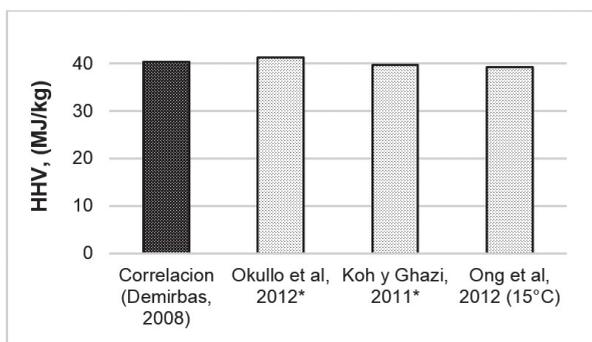


Figura 9. Poder calorífico superior del biodiésel de *J. curcas*. * Okullo *et al.*, 2012 y Koh y Ghazi, 2011 y reportan rangos, con valores mínimos de 41,2 MJ/kg y 39,23 MJ/kg, respectivamente.

La comparación del número de cetano del biodiésel de *J. curcas*, se muestra en la Figura 10, la predicción realizada mediante la correlación reportada por Wang *et al.* [9] (Ec. 6), se encuentra muy cercana al valor mínimo establecido por la norma ASTM D6751, sin embargo, este valor cercano al valor mínimo regulado por la norma

ASTM puede atribuirse al alto contenido de ácidos grasos insaturados presentes en el aceite de *J. curcas*; por su parte el valor predicho por la correlación descrita por Ramírez-Verduzco *et al.* [12] (Ecuación 8) presenta mayores similitud (menor del 5%) con respecto a los valores reportados por Koh y Ghazi [8] y Ong *et al.* [30], lo cual representa una mejora en la calidad de combustión del biocombustible.

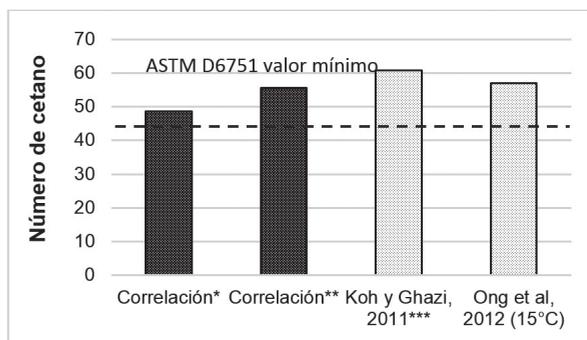


Figura 10. Número de cetano del biodiesel de *J. curcas*. *Wang *et al.*, 2012, **Ramírez-Verduzco *et al.*, 2012, ***Koh y Ghazi, 2011 reporta un rango, con valor mínimo de 60,74.

En la Tabla 7 se presentan los principales flujos de entrada y salida del proceso de producción de biodiésel a partir del aceite de *J. curcas*, así como las cantidades en diferentes unidades de aceite y alcohol empleado para llevar a cabo la simulación y de biodiésel como producto principal.

Tabla 7. Principales flujos de entrada y salida en la simulación del proceso.

| | ENTRADA | | SALIDA | |
|---------------------------------|---------|----------|-----------|----------|
| | Aceite | Metanol | Biodiésel | Glicerol |
| Flujo base (kg/h) | 11000 | 1246 | 11130 | 978.6 |
| Flujo anual (t/año) | 96360 | 10914,96 | 97674 | 8572.54 |
| Flujo en volumen (L/día) | 292560 | 38045,8 | 303360 | 18640 |

Fuente: Desarrollado por los autores

De igual forma y de acuerdo con el estudio de Gaona [22], el rendimiento de aceite de cultivos de *J. curcas* en Colombia se encontraría en un rango comprendido entre 0,8 y 1,4t/Ha; ambos significativamente menores que el presentado por los cultivos de palma en Colombia, 3,25t/Ha [31]. No obstante, de acuerdo con el estudio de Gaona, en la región caribe se encuentran más de 500 mil hectáreas de tierras disponibles para el cultivo de *J. curcas* con lo que se podrían obtener más de 800 mil toneladas de aceite por año, lo cual

representaría una disponibilidad bastante alta de materia prima para los requerimientos de la planta aquí propuesta (96360t/año).

La Tabla 8 presenta la producción de biodiésel de diferentes empresas en Colombia [23] y la producción obtenida mediante la simulación desarrollada, encontrándose muy cercana al promedio de producción nacional, empleando una materia prima alternativa a la tradicional, esperando con esto contribuir con la producción de biocombustibles en el país.

Tabla 8. Principales empresas productoras de biodiésel en Colombia.

| Empresa | Ciudad | Capacidad (t/año) | Capacidad (L/día) |
|--|-----------------|-------------------|-------------------|
| Caso base simulado | - | 97674 | 303360 |
| Biocombustibles Sostenibles del Caribe | Santa Marta | 100000 | 322461 |
| BioD | Facatativá | 115000 | 370830 |
| Ecodiesel de Colombia | Barrancabermeja | 115000 | 370830 |
| Aceites Manuelita | Meta | 120000 | 386953 |

Fuente: Desarrollado por los autores

Por lo anterior, se puede apreciar a partir de la simulación que el proceso de producción de biodiésel a partir del aceite de *J. curcas*, empleando las etapas de esterificación como pretratamiento y transesterificación básica como reacción principal para producir biodiésel, permitiría obtener cantidades de biodiésel concordantes con las actualmente producidas en el país y acorde con los estándares que lo regulan. De esta manera, el diseño conceptual desarrollado se presenta viable para su implementación a gran escala en el departamento de Bolívar de la Región Caribe colombiana, lo cual permitirá el aprovechamiento de terrenos cuyas características fisicoquímicas los hacen inapropiados para la siembra de cultivos tradicionales, así como emplear materias primas que no afecten la seguridad alimenticia de la región y contribuir a la generación de biocombustibles en el país.

Los resultados de este trabajo destacan la importancia de evaluar posibilidades tecnológicas para la producción de biodiésel de *Jatropha curcas L.* en Colombia a través del uso de herramientas de simulación de procesos. El uso de esta herramienta permite analizar y mejorar el desempeño de procesos simulados comparándolos con las producciones actuales, evitando los costos y riesgos asociados a su implementación a gran escala sin evaluaciones previas. De esta forma, el uso de herramientas de simulación para el diseño *a priori* de procesos permite un análisis de las alternativas tecnológicas planteadas desde una perspectiva más amplia y promueve la implementación de soluciones que consideran impactos ambientales, económicos, energéticos y sociales.

Conclusiones

La metodología empleada en esta investigación para la simulación del aceite de *J. curcas*, fue adecuada dado que los datos obtenidos para

las propiedades evaluadas se encontraron muy cercanos a los reportados experimentalmente. De esta manera, la predicción de las condiciones de operación, consumo de energía y propiedades del biodiésel brindadas por la simulación permiten analizar el proceso de producción a partir de un aceite con características más ajustadas a sus propiedades reales.

Por otro lado, mediante la simulación del proceso se verificó que el modelo de Peng-Robinson modificado por Twu [27], representó de manera más adecuada que el NRTL el comportamiento de las fases liviana y pesada en la separación. Como lo expresan otras investigaciones [32], el modelo NRTL no representa satisfactoriamente el equilibrio líquido-líquido en la etapa de decantación de los compuestos involucrados especialmente debido a la creación de triglicéridos en el *software* para representar el aceite.

En cuanto a las propiedades evaluadas del biodiésel, el esquema propuesto de la simulación permite obtener un biocombustible con propiedades similares a los datos reportados experimentalmente, y acordes con la Norma ASTM D6751 y el estándar europeo EN-14214. Sin embargo, la viscosidad obtenida por simulación es un poco más baja, lo cual puede atribuirse a los metilésteres utilizados para representar el biodiésel pertenecientes a la librería del *software* cuyas viscosidades son del orden de 2cSt; mientras que la correlación de Ramírez-Verduzco presenta mejores resultados para esta propiedad debido a que tiene en cuenta características estructurales de las moléculas (peso molecular y grado de insaturación de los metilésteres).

De acuerdo con el diseño y la simulación del proceso propuesto, incluyendo las etapas de esterificación y transesterificación, se obtuvo un proceso capaz de producir más de 97000t/año de biodiésel, acorde con el promedio de producción de las plantas colombianas (100000t/año). No obstante, aunque los cultivos de *J. curcas*

presentan un menor rendimiento que los de palma (1,4t/Ha), en Colombia se dispone de amplias zonas para su cultivo, principalmente la región Caribe, que permitiría obtener las cantidades de aceite necesaria para la planta aquí propuesta. Por lo anterior, se podría pensar que es posible la producción de biodiésel a partir del aceite de *J. curcas* a gran escala en Colombia, puesto que en primer lugar el producto cumpliría con la normatividad vigente y por otro lado, el departamento de Bolívar sería adecuado para su implementación ya que aprovecharía los terrenos no aptos para la siembra de alimento, con lo que no afectaría la seguridad alimentaria y contribuiría al desarrollo de la región.

Referencias bibliográficas

- [1] Jain S, Sharma M.P. Biodiesel production from *Jatropha curcas* oil. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2010;14(9):3140-7.
- [2] Singh AP, Sarma AK. Modern heterogeneous catalysts for biodiesel production: A comprehensive review. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2011;15(9):4378-99.
- [3] Singh SP, Singh D. Biodiesel production through the use of different sources and characterization of oils and their esters as the substitute of diesel: A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2010;14(1):200-16.
- [4] Demirbas A, Demirbas MF. Importance of algae oil as a source of biodiesel. Energy Conversion and Management. 2011;52(1):163-70.
- [5] Basili M, Fontini F. Biofuel from *Jatropha curcas*: Environmental sustainability and option value. Ecological Economics. 2012;78:1-8.
- [6] Foidl N, Foidl G, Sanchez M, Mittelbach M, Hackel S. *Jatropha curcas* L. as a source for the production of biofuel in Nicaragua. Bioresource Technology. 1996;58(1):77-82.
- [7] Berchmans HJ, Hirata S. Biodiesel production from crude *Jatropha curcas* L. seed oil with a high content of free fatty acids. Bioresource Technology. 2008;99(6):1716-21.
- [8] Koh MY, Ghazi TIM. A review of biodiesel production from *Jatropha curcas* L. oil. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2011;15(5):2240-51.
- [9] Wang L, Yu H, He X, Liu R. Influence of fatty acid composition of woody biodiesel plants on the fuel properties. Journal of Fuel Chemistry and Technology. 2012;40(4):397-404.
- [10] Anand K, Sharma RP, y Mehta PS. A comprehensive approach for estimating thermo-physical properties of biodiesel fuels. Applied Thermal Engineering. 2011;31(2-3):235-42.
- [11] Lima EG, Silva GP, Silva GF. Evaluation of Group-Contribution Methods to Estimate Vegetable Oils and Biodiesel Properties. International Journal of Engineering and Technology. 2012;2(9):1600-5.
- [12] Ramírez-Verduzco LF, Rodríguez-Rodríguez JE, Jaramillo-Jacob AR. Predicting cetane number, kinematic viscosity, density and higher heating value of biodiesel from its fatty acid methyl ester composition. Fuel. 2012;91(1):102-11.
- [13] Sales-Cruz M, Aca-Aca G, Sánchez-Daza O, López-Arenas T. Predicting Critical Properties, Density and Viscosity of Fatty Acids, Triacylglycerols and Methyl Esters by Group Contribution Methods. ESCAPE20. 2010.
- [14] Zhang Y, Dubé MA, McLean DD, Kates M. Biodiesel production from waste cooking oil: 1. Process design and technological assessment. Bioresource Technology. 2003;89(1):1-16.
- [15] Zapata CD, Martínez ID, Arenas E, Henao CA. Producción de biodiesel a partir de aceite crudo de palma: 1. diseño y simulación de dos procesos continuos. Dyna rev.fac.nac.minas. 2007;74(151):71-82.
- [16] Santana GCS, Martins PF, de Lima N, Batistella CB, Maciel R, Wolf MR. Simulation and cost estimate for biodiesel production using castor oil. Chemical Engineering Research and Design. 2010;88(5-6):626-32.
- [17] Castillo AM, Velásquez JA, Cuartas PA. Obtención de biodiesel a partir de aceite de *Jatropha curcas* L por transesterificación etanólica. Revista Investigaciones Aplicadas. 2011;5(1):34-41.
- [18] Aca-Aca MG, Campos E, Sánchez O. Estimación de propiedades termodinámicas de los compuestos involucrados en la producción de biodiesel. Superficies y Vacío. 2009;22(3):15-9.
- [19] Constantinou L, Gani R. New group contribution method for estimating properties of pure compounds. AIChE Journal. 1994;40(10):1697-709.
- [20] Ofori-Boateng C, Teong LK, Jitkang L. Feasibility study of microalgal and *Jatropha* biodiesel production plants: Exergy analysis

- approach. Applied Thermal Engineering. 2012;36:141-51.
- [21] Demirbas A. Relationships derived from physical properties of vegetable oil and biodiesel fuels. Fuel. 2008;87(8-9):1743-8.
- [22] Gaona JA. Identificación de áreas aptas para el cultivo del Piñón (*Jatropha curcas L.*) en Colombia, como alternativa de obtención de biocombustible (tesis de pregrado). Bogotá D.C., Colombia: Pontificia Universidad Javeriana de Bogotá D.C. 2009.
- [23] Cifras Informativas del Sector Biocombustibles (sitio en internet). Federación Nacional de Biocombustibles de Colombia (Fedebiocombustibles). Disponible en: <http://www.fedebiocombustibles.com>. Acceso el 7 Febrero 2013.
- [24] Okullo A, Temu AK, Ogwok P, Ntalikwa JW. Physico-Chemical Properties of Biodiesel from *Jatropha* and Castor Oils. International journal of renewable energy research. 2012;2(1):47-52.
- [25] Karmakar A, Karmakar S, Mukherjee S. Properties of various plants and animals feedstocks for biodiesel production. Bioresource Technology. 2010;101(19):7201-10.
- [26] Demirbas, A. Biodiesel production from vegetable oils via catalytic and non-catalytic supercritical methanol transesterification methods. Progress in Energy and Combustion Science. 2005;31 (5-6):466-87.
- [27] Twu CH, Sim WD, Tassone V. Getting a handle on advanced cubic equations of state. Chemical Engineering Progress Magazine. 2002:58-65.
- [28] Sánchez E. Desarrollo de un proceso para el aprovechamiento de integral de microalgas para la obtención de biocombustibles (tesis doctoral). Bucaramanga, Colombia: Universidad Industrial de Santander; 2012.
- [29] Myint LL, El-Halwagi MM. Process analysis and optimization of biodiesel production from soybean oil. Clean Technologies and Environmental Policy. 2009;11(3):263-76.
- [30] Ong HC, Mahlia TMI, Masjuki HH, Norhasyima RS. Comparison of palm oil, *Jatropha curcas* and *Calophyllum inophyllum* for biodiesel: A review. Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2011;15(8):3501-15.
- [31] Minianuario Estadístico 2013. Principales cifras de la agroindustria de la palma de aceite en Colombia (sitio en Internet). Federación Nacional de Cultivadores de Palma de Aceite (Fedepalma). Disponible en: <http://www.fedepalma.org>. Acceso el 22 Febrero 2014.
- [32] Sánchez E, Ojeda K, El-Halwagi M, Kafarov V. Biodiesel from microalgae oil production in two sequential esterification/transesterification reactors: Pinch analysis of heat integration. Chemical Engineering Journal. 2011;176-177(1):211-6.