VOLUMEN 48
XXXI Verano De la Ciencia
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Estudio de las mejores condiciones de operación para la producción de biodiesel mediante destilación reactiva

Study of the best operating conditions for biodiesel production by reactive distillation

Axel Arturo Hernández Mandujano, María Dolores López Ramírez, Salvador Hernández Castro
Departamento de Ingeniería Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato
lopez.md@ugto.mx

Resumen

La producción de biodiésel mediante destilación reactiva representa una alternativa para integrar la reacción de esterificación y la separación de productos en una sola unidad de proceso, favoreciendo la conversión de los ácidos orgánicos a ésteres (biodiésel). En este trabajo se simuló la producción de biodiésel en Aspen Plus® utilizando una columna de destilación reactiva, evaluando mediante un análisis de sensibilidad el efecto de la relación molar metanol: ácido oleico, la relación de reflujo y la carga térmica sobre la composición del producto. Los resultados mostraron que una relación molar de 13 favorece la obtención de una mayor fracción de ésteres; sin embargo, el contenido de agua permaneció por encima del límite establecido por la norma EN 14214:2012. Para mejorar la calidad del biodiésel se incorporó una corriente lateral en la columna, logrando disminuir significativamente la concentración de agua sin afectar de manera importante la composición del producto. Adicionalmente, se desarrolló una interfaz de vinculación entre Aspen Plus® y MATLAB® mediante la tecnología COM, con el propósito de evaluar modelos cinéticos externos y establecer una metodología que permita, en trabajos futuros, integrar el intercambio de información entre ambas plataformas para el análisis de procesos de destilación reactiva.

Palabras clave: biodiesel; destilación reactiva; vínculo Aspen Plus®-Matlab®.

Introducción

El mundo enfrenta actualmente dos desafíos interrelacionados: el cambio climático y la dependencia energética de los combustibles fósiles. La quema de derivados del petróleo continúa siendo una de las principales fuentes de emisiones de gases de efecto invernadero, lo que acelera el deterioro ambiental y compromete la salud pública. Ante esta problemática, se ha intensificado la búsqueda de fuentes renovables de energía que permitan reducir la huella de carbono y garantizar un suministro sostenible.

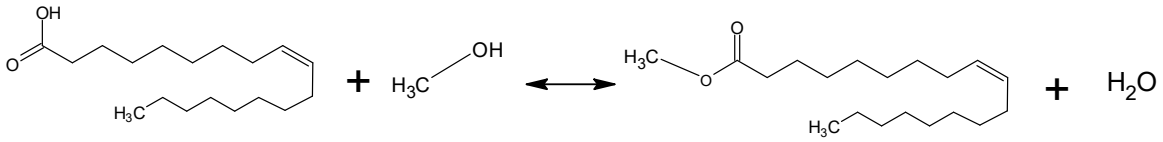
Entre las alternativas más prometedoras se encuentra el biodiesel, un combustible renovable obtenido a partir de aceites vegetales o grasas animales. Su uso como sustituto parcial o total del diésel de petróleo ofrece ventajas ambientales y técnicas: es biodegradable, menos tóxico y contribuye a disminuir las emisiones de CO_2 (Neumann *et al.,* 2016).

El proceso de producción se basa en reacciones de esterificación o transesterificación, donde triglicéridos o ácidos grasos reaccionan con alcoholes de bajo peso molecular en presencia de un catalizador, generando ésteres alquílicos y glicerol o agua como subproducto. Sin embargo, la eficiencia de estas reacciones depende fuertemente de las condiciones de operación y del tipo de catalizador empleado (Neumann *et al.,* 2016).

En este contexto, la destilación reactiva (DR) surge como una tecnología de intensificación de procesos capaz de integrar en un mismo equipo la reacción química y la separación de los productos. Esta estrategia no solo reduce costos de inversión y operación, sino que también mejora la conversión y selectividad al desplazar el equilibrio químico mediante la extracción continua de los productos. La DR ha demostrado su potencial en la industria para la producción de compuestos como MTBE y acetato de metilo, y puede ser una alternativa

viable para la síntesis de biodiesel, al realizar simultáneamente la reacción de esterificación y la separación de los subproductos, (Machado *et al.,* 2022, Pérez-Cisneros 2016).

En este trabajo se realiza un estudio en el simulador Aspen Plus® de las mejores condiciones de operación de la DR para la producción de oleato de metilo a partir de metanol y ácido oleico, de acuerdo con la Reacción 1, utilizando cinéticas obtenidas experimentalmente, tales como las reportadas por Medina Jurado et al. (2017), quienes utilizan una resina de intercambio iónico ácida Amberlyst-15 o zirconia sulfatada como catalizador heterogéneo (Ecuación 1) y P. Jasen et al. (2011), donde utilizan resina sólida básica como catalizador heterogéneo (Ecuación 2).



Reacción 1. Reacción de esterificación de ácido oleico con metanol.

$$r = C_{cat}\left(k_1 X_{AO} X_{MeOH} - k_2 X_{OM} X_{Agua}\right) \qquad Ecuación\ 1$$

$$r = m_{cat} C \left(C_{ale} - \frac{C_{faee} C_w}{C_{FFA} K}\right) \qquad Ecuación\ 2$$

Donde: $m_{cat} = \frac{m_{cat}^0}{1 + k_1 C_w + \left(\frac{k_2 C_{faee} C_w}{C_{FFA}}\right)}$

Metodología

Para el estudio se utilizó la columna reportada en Medina Jurado et al. (2017), la cual consta de 20 etapas totales, una zona reactiva de la etapa 7 a la 14, donde el metanol es alimentado en la etapa 14 y el ácido oleico en la etapa 7, tal como se muestra en la Figura 1, considerando presión atmosférica local de 790.52 mbar, el NRTL como modelo termodinámico, la cinética de la Ecuación 1 y un tiempo de residencia de 0.1.

Mediante un análisis paramétrico y haciendo uso de la herramienta "*Sensitivity Analysis*" del simulador Aspen Plus® se analizó el efecto de la relación molar de alimentación metanol: ácido oleico (RM), la relación de reflujo (RR) y la carga térmica (QR) en el flujo de oleato de metilo y ácido oleico, así como en las concentraciones de oleato de metilo y agua en la corriente de fondos, buscando que se cumplieran las especificaciones de la norma EN 14214:2012, la cual establece que el biodiesel debe tener una pureza de 96.5% en peso de ésteres metílicos de ácidos grasos y un contenido de agua de 500 mg/kg (0.05% en peso) (Moser, 2009).

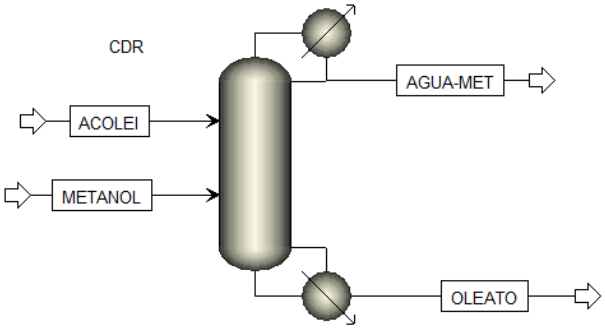


Figura 1. Diagrama de destilación reactiva.

Los valores de las variables analizadas se muestran en la Tabla 1. Para cada uno de los valores de RM, se realizó un análisis de sensibilidad con RR y QR como variables independientes y en cada caso se registraron la producción y composición del oleato de metilo, así como el agua presente en la corriente de fondo. Los resultados obtenidos fueron procesados y analizados en Excel®.

***Tabla 1**. Condiciones de operación empleadas en el análisis de sensibilidad.*

RM	RR	QR (cal/s)
7, 9, 11, 12, 13	0.1-6	40,000-80,000

Una vez revisados los resultados se observó que ninguno de los casos cumplía con la especificación de la concentración de agua y al revisar los perfiles de composición se observó un máximo en la concentración de esta dentro de la columna, por lo que se incorporó una corriente lateral en la etapa 19 con el objetivo de extraer parte de este componente antes de que alcanzara la corriente de fondo y disminuir el contenido de agua presente en el oleato de metilo producido.

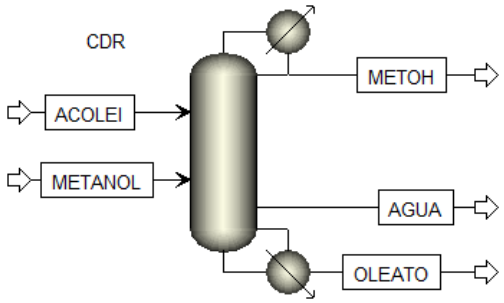


Figura 2. Diagrama de columna de destilación reactiva con corriente lateral.

Se evaluó el efecto del flujo lateral de 0.1 a 1 kmol/h manteniendo constantes RM, RR Y QR en los valores que mostraron el mejor desempeño durante el análisis de sensibilidad realizado previamente. Se seleccionó el mejor caso, como aquel que tuviera la menor carga térmica, el mayor flujo de oleato de metilo y que a su vez cumpliera con las especificaciones de la EN 14214:2012.

Para el uso de la cinética de la Ecuación 2, dado que no se puede introducir de manera estándar al simulador, se propone el uso de Matlab® siguiendo la estructura mostrada en la Figura 3, donde se fijan las condiciones de operación (RM, RR, QR) de la columna reactiva en el módulo Radfrac de Aspen Plus® y la expresión cinética en Matlab® para que sea llamada desde el simulador en las etapas que presentan reacción química.

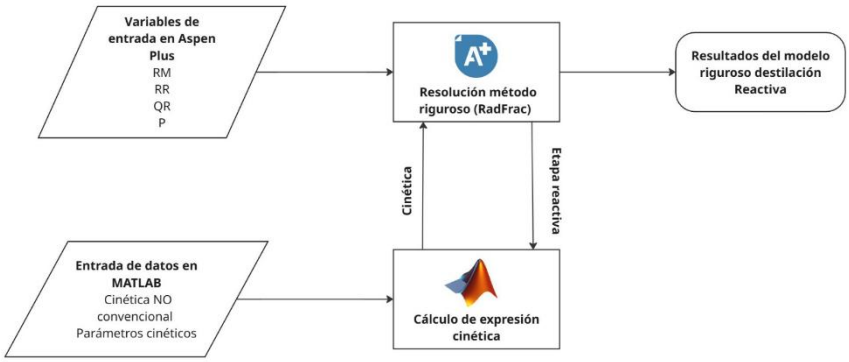


Figura 3. Diagrama de flujo de la metodología propuesta para el acoplamiento entre Aspen Plus® y Matlab®.

Resultados

De los resultados del análisis de sensibilidad realizado, para cada una de las RM se seleccionó el caso que presentó la mayor composición de oleato.

La Figura 4 muestra el flujo de oleato de metilo obtenido en la corriente de fondos. Se observa que al aumentar RM de 7 a 9 el flujo de oleato de metilo presenta una ligera disminución; sin embargo, a partir de una relación molar de 11 el flujo comienza a incrementarse, alcanzando su valor máximo para una relación molar de 13. Esto era de esperarse, ya que el exceso de reactivos favorece la formación de los productos.

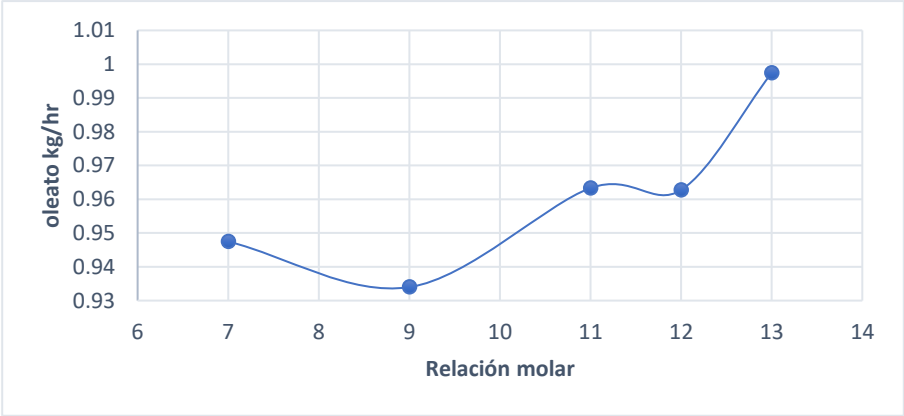


Figura 4. Flujo de oleato en la corriente de fondos en función de la relación molar metanol: ácido oleico.

En la figura 5 se presenta la variación de la fracción másica de oleato de metilo en la corriente de fondos a diferentes RM. En este caso hay una ligera disminución cuando la relación molar aumenta de 7 a 9; posteriormente la composición del oleato de metilo aumenta hasta alcanzar un valor cercano a 0.993 para una relación molar de 13. Esto se debe a que, al tener una mayor RM, la cantidad de oleato de metilo presente en la corriente de fondos se incrementa.

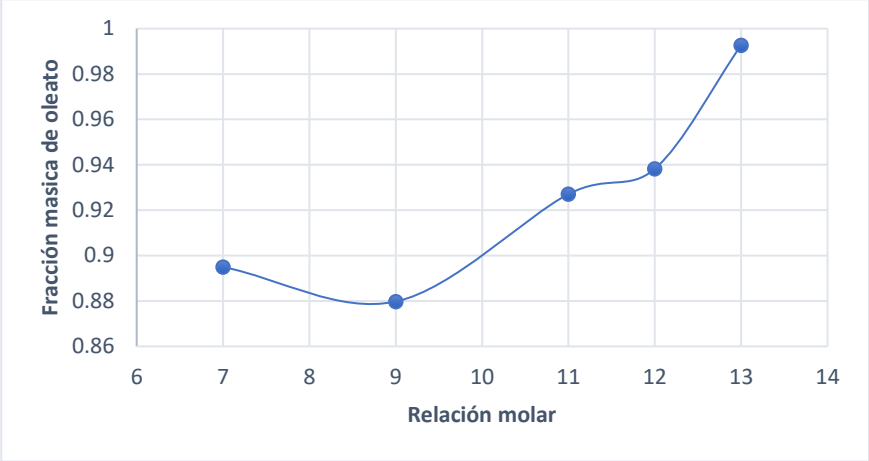


Figura 5. Composición de oleato en la corriente de fondos en función de la relación molar metanol: ácido oleico.

La Figura 6 ilustra el comportamiento de la fracción másica de agua en la corriente de fondos. Conforme aumenta RM, el contenido de agua disminuye, pasando de una fracción masa de 0.054 hasta valores cercanos a 0.001 para una relación molar de 13.

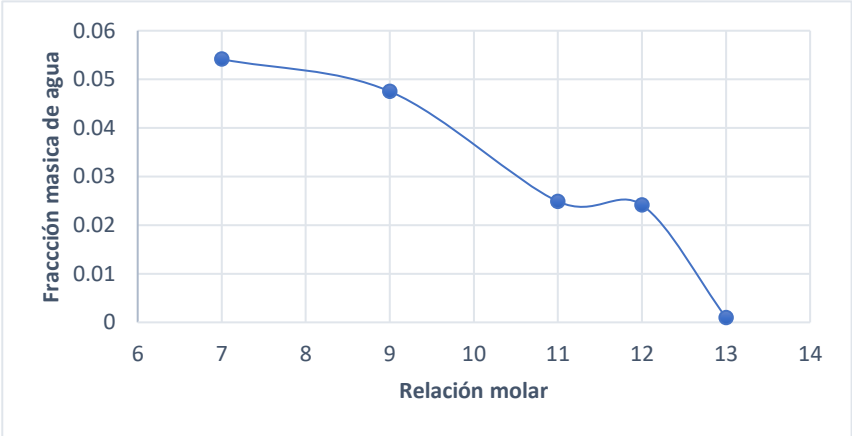


Figura 6. Composición de agua en la corriente de fondos en función de la relación molar metanol: ácido oleico.

Como puede observarse, en ninguno de los casos se alcanzó la fracción másica de agua menor a 0.0005 que especifica la norma. Al analizar los perfiles de composición se identificó un máximo de concentración de agua en la etapa 19 de la columna y considerando las mejores condiciones de operación obtenidas previamente, se evaluó la incorporación de una corriente lateral en dicha etapa con el objetivo de retirar parte del agua antes de la corriente de fondos y favorecer el cumplimiento de las especificaciones de la calidad del biodiesel. Se analizó el efecto del flujo lateral mediante un análisis de sensibilidad, variándolo de 0.1-1 kmol/h y se seleccionó el caso con la mayor composición de oleato.

La Figura 7 muestra el comportamiento del flujo de oleato de metilo en la corriente de fondos al incorporar una corriente lateral y variar RM. Se observa una disminución inicial del flujo al incrementar la RM de 7 a 9, alcanzando un valor mínimo cercano a 0.88 kg/h. A partir de este punto, el flujo aumenta conforme se incrementa la RM, obteniéndose un valor máximo de 0.94 kg/h para una RM de 13. Estos resultados indican que, bajo la configuración con corriente lateral, una mayor relación molar favorece la producción de oleato de metilo, siendo la RM de 13 la condición más favorable entre los casos evaluados.

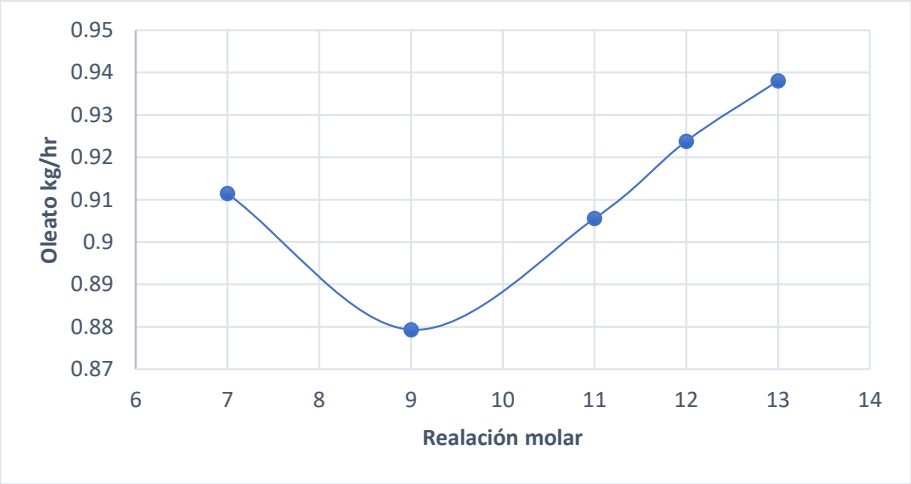


Figura 7. Flujo de oleato en la corriente de fondos en función de la relación molar metanol: ácido oleico con la corriente lateral.

La Figura 8 muestra la variación de la fracción másica de oleato de metilo en la corriente de fondos al incorporar una corriente lateral en la columna de DR. Se observa que la composición disminuye ligeramente al incrementar la relación molar de 7 a 9; posteriormente, presenta un incremento continuo hasta alcanzar un valor máximo de 0.9936 fracción masa para una relación molar de 13. Estos resultados indican que la incorporación de la corriente lateral no afecta negativamente la producción de oleato y, por el contrario, permite mantener una elevada pureza del biodiésel bajo las condiciones de operación evaluadas.

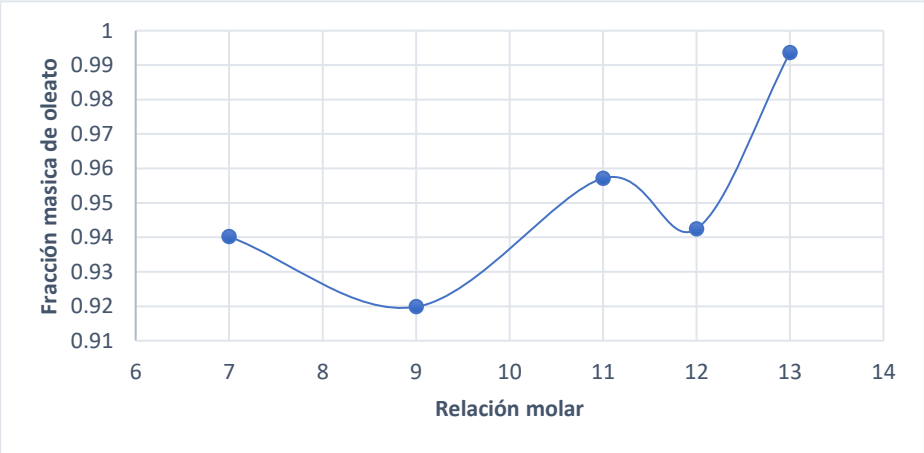


Figura 8. Composición de oleato de metilo en la corriente de fondos al incorporar una corriente lateral en la etapa 19 de la columna de destilación reactiva.

La Figura 9 presenta el comportamiento de la fracción másica de agua en la corriente de fondos al incorporar una corriente lateral. Se observa una disminución del contenido de agua conforme aumenta RM, aunque para una RM de 12 se presenta un ligero incremento cercano a 0.0202 fracción masa. Sin embargo, al incrementar la RM a 13, la concentración de agua disminuye significativamente hasta 5.97×10^{-4}, obteniéndose el menor contenido de agua de todas las condiciones evaluadas. Este comportamiento evidencia que la corriente lateral favorece la remoción de agua de la columna, permitiendo obtener un biodiésel con mayor pureza y cumpliendo de mejor manera con las especificaciones de calidad del producto.

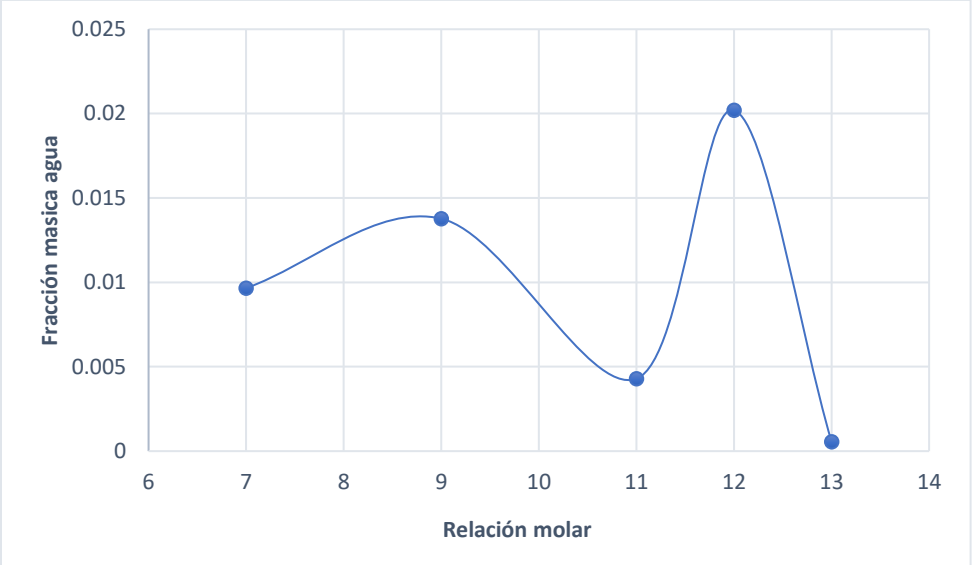


Figura 9. Composición de agua en la corriente de fondos al incorporar una corriente lateral en la etapa 19 de la columna de destilación reactiva.

Después de analizar todos los casos, se observa que las mejores condiciones de operación para esta columna de DR, considerando la Ecuación 1, se obtuvieron con una RM de metanol: ácido oleico de 13, una RR de 0.1 y una carga térmica QR de 40000 cal, incluyendo una corriente lateral de 0.1 kmol/h, alcanzando una fracción masa de oleato de metilo de 0.981 con una fracción masa de agua de 0.0004.

Propuesta de enlace del simulador Aspen Plus® con Matlab®

Para utilizar la Ecuación 2 se desarrolló un código en Matlab® enlazado con el simulador Aspen Plus®, el cual consiste en un código principal, así como funciones y comandos adicionales, los cuales se describen a continuación

Programa principal del desarrollo en Matlab® para la comunicación con Aspen Plus®

En la Figura 10 se muestra el inicio del código base donde se establece la comunicación entre Matlab ® y Aspen Plus® mediante la interfaz COM. Se selecciona el modelo cinético que será evaluado, el cual deberá programarse en una función adicional, cuyos argumentos serán las condiciones de la etapa (Función 1) y se especifica la ubicación del archivo de Aspen Plus® (Comando 1). Posteriormente, se manda llamar la función AbrirAspen, cuya finalidad es establecer la comunicación entre MATLAB® y Aspen Plus® mediante la interfaz COM (Función 2) y cargar el caso de simulación correspondiente. Una vez establecida la conexión, el programa verifica que ésta se haya realizado correctamente y procede a leer variables de operación del simulador, como la relación de reflujo, utilizando la función LeerVariable (Función 3), donde deberán especificarse las rutas de acceso al dato.

VOLUMEN 48
XXXI Verano De la Ciencia
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

```
% VERANO DE LA INVESTIGACION 2026
clear
clc
close all

disp('       ASPEN PLUS - MATLAB')

% Selección del modelo cinético
% 1 = Cinética 1
% 2 = Cinética 2

modelo = 1;

% Ruta del archivo Aspen

ArchivoAspen = 'C:\Users\aahm2\OneDrive\Escritorio\verano\Biodiesel.bkp';

% Abrir Aspen

Aspen = AbrirAspen(ArchivoAspen);

disp(' ')
disp('Conexión con Aspen establecida correctamente.')

% Leer Reflux Ratio

RutaRR = '\Data\Blocks\B1\Input\BASIS_RR';

RR = LeerVariable(Aspen,RutaRR);

fprintf('Reflux Ratio inicial = %.4f\n',RR);
```

Figura 10. Código realizado en MATLAB, parte 1.

Una vez establecida la comunicación con Aspen Plus®, el programa recorre cada una de las etapas de la columna y en cada iteración se obtienen la temperatura y las composiciones de los componentes involucrados en la reacción, que posteriormente se emplea para calcular las constantes cinéticas y la velocidad de reacción mediante el modelo cinético seleccionado. Aunque en esta sección también se incluye la estructura para modificar la relación de reflujo mediante la función EscribirVariable, dichas instrucciones permanecen comentadas y se incorporaron para facilitar futuros análisis de sensibilidad sin modificar la estructura principal del programa.

ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

```
% Cambiar Reflux Ratio (para futuros analisis)

%NuevoRR = 2.0;

%EscribirVariable(Aspen,RutaRR,NuevoRR);

%Aspen.Engine.Run2;

%RR = LeerVariable(Aspen,RutaRR);

%fprintf('Nuevo Reflux Ratio = %.4f\n',RR);

% Número de etapas

RutaEtapas = '\Data\Blocks\B1\Input\NSTAGE';

NEtapas = LeerVariable(Aspen,RutaEtapas);

fprintf('Número de etapas = %d\n',NEtapas);

% Prealocación de vectores

Temperatura = zeros(NEtapas,1);
Agua        = zeros(NEtapas,1);
MetOH       = zeros(NEtapas,1);
AcOleico    = zeros(NEtapas,1);
Oleato      = zeros(NEtapas,1);

Velocidad   = zeros(NEtapas,1);

K1          = zeros(NEtapas,1);
K2          = zeros(NEtapas,1);
```

Figura 11. Código realizado en MATLAB, parte 2.

La lectura de los datos de las variables por cada etapa se realiza con la función LeerEtapas (Función 4), estos datos son almacenados en sus respectivos vectores para su posterior análisis. Los resultados se muestran mediante la función MostrarResultados (Función 5). Los perfiles de composición, temperatura y velocidad de reacción pueden graficarse de manera convencional en Matlab®, permitiendo analizar el comportamiento de la columna reactiva con las expresiones cinéticas implementadas.

```
% Leer todas las etapas

for etapa = 1:NEtapas

    % Leer variables desde Aspen

    [T,xAgua,xMet,xAO,xOM] = LeerEtapas(Aspen,etapa);

    % Guardar resultados

    Temperatura(etapa) = T;
    Agua(etapa)        = xAgua;
    MetOH(etapa)       = xMet;
    AcOleico(etapa)    = xAO;
    Oleato(etapa)      = xOM;

    % Seleccionar cinética

    switch modelo

        case 1

            [k1,k2,r] = CalcularCinetica1(T,xAO,xMet,xOM,xAgua);

        case 2

            [k1,Kads,r] = CalcularCinetica2(T,xAO,xMet,xOM,xAgua);

            % Se almacena Kads en k2 para mantener
            % compatibilidad con el resto del programa
            k2 = Kads;

        otherwise
```

Figura 12. Código realizado en MATLAB, parte 3.

Una vez establecido el enlace Aspen Plus®-Matlab®, se encontró que el módulo RadFrac no es capaz de leer las expresiones cinéticas programadas en Matlab®, debido a que Aspen Plus® es un simulador de caja negra, donde no es posible observar ni modificar las ecuaciones que modelan las unidades de proceso. Así que no fue posible incorporar el modelo cinético de la Ecuación 2 a la columna de DR. Sin embargo, al analizar el código presentado, se observa que podría ser utilizado como una herramienta en la que los resultados calculados puedan utilizarse posteriormente como datos de entrada para futuras simulaciones en Aspen Plus®, permitiendo una interacción entre ambas plataformas siendo compatibles con Aspen Plus®.

Conclusiones

La simulación de la producción de biodiésel mediante destilación reactiva permitió identificar las condiciones de operación que favorecen la obtención de un producto con mayor contenido de ésteres. Asimismo, se comprobó que la incorporación de una corriente lateral constituye una estrategia efectiva para disminuir el contenido de agua en la corriente de fondos, permitiendo obtener un biodiésel con características dentro de las especificaciones establecidas por la norma EN 14214:2012.

Por otra parte, el desarrollo del enlace entre Aspen Plus® y MATLAB® permitió automatizar la obtención de variables de proceso y evaluar modelos cinéticos externos que no pueden implementarse directamente en el módulo Radfrac. Aunque las limitaciones del simulador impidieron incorporar dichas expresiones cinéticas dentro de la columna reactiva, la metodología desarrollada representa una base para futuras herramientas de acoplamiento entre ambas plataformas ya que el desarrollo de una interfaz de comunicación entre Aspen

Plus® y MATLAB® permite ampliar las capacidades de análisis del simulador al incorporar el cálculo de modelos cinéticos no convencionales. Este trabajo constituye un primer paso hacia el desarrollo de herramientas de simulación más flexibles, capaces de integrar algoritmos y modelos no disponibles de Aspen Plus®.

Bibliografía/Referencias

Jasen, P., & Marchetti, J. M. (2012). Kinetic study of the esterification of free fatty acid and ethanol in the presence of triglycerides using solid resins as catalyst. *International Journal of Low-Carbon Technologies,* 7(4), 325–330. Oxford University Press.

Machado, G., Castier, M., dos Santos, M., Nishiyama, F., Aranda, D., Cardozo-Filho, L., Cabral, V., & Steffen, V. (2022). Reactive Distillation Applied to Biodiesel Production by Esterification: Simulation Studies.

Medina Jurado, M. E., López Manríquez, A., & Cárdenas Guerra, J. C. (2017). Producción de oleato de metilo mediante destilación reactiva. *Jóvenes en la Ciencia, Revista de Divulgación Científica,* Vol. 3, NE-2, Quinto Encuentro de Jóvenes Investigadores, pp. 407–413. Universidad de Guanajuato.

Moser, B. R. (2009). Biodiesel production, properties, and feedstocks. *In Vitro Cellular & Developmental Biology – Plant, 45*(3), 229–266.

Neumann, K., Werth, K., Martin, A., & Górak, A. (2016). Biodiesel production from waste cooking oils through esterification: Catalyst screening, chemical equilibrium and reaction kinetics. *Chemical Engineering Research and Design,* 107, 52–62.

Pérez-Cisneros, E. S., Mena-Espino, X., Rodríguez-López, V., Sales-Cruz, M., Viveros-García, T. & Lobo-Oehmichen, R. (2016). An integrated reactive distillation process for biodiesel production. *Computers & Chemical Engineering, 91,* 233–246.