

Índice

Introducción.....	1
CAPÍTULO 1	3
1.1 Especificación de calidad para el biodiésel	5
1.1.1 Punto de obstrucción de filtro en frío	6
1.1.2 Punto de nube	7
1.1.3 Punto de escurrimiento	7
1.1.4 Viscosidad	7
1.1.5 Densidad	8
1.1.6 Número de cetano.....	8
1.1.7 Punto de inflamación.....	8
1.1.8 Estabilidad a la oxidación.....	9
1.1.9 Calor de combustión	9
1.1.10 Índice de yodo	9
1.2 Modelos de predicción de propiedades	10
1.2.1 Modelos de la literatura para el punto de obstrucción de flujo en frío	10
1.2.2 Modelos de la literatura para el punto de nube	12
1.2.3 Modelos de predicción para punto de escurrimiento.....	13
1.2.4 Modelos predictivos para viscosidad	14
1.2.5 Modelos predictivos de densidad.....	15
1.2.6 Modelos de predicción de número de cetano.....	16
1.2.7 Modelos de predicción para punto de inflamación	17
1.2.8 Modelos de predicción de estabilidad a la oxidación (OS)	18
1.2.9 Modelos de predicción de calor de combustión	19
1.2.10 Modelos de predicción para el índice de yodo	20
1.3 Influencia de la termodinámica en las propiedades del biodiésel	21
1.3.1 Nucleación.....	23
1.3.2 Crecimiento cristalino.....	24
1.4 Impacto de la composición de los FAMES en las propiedades del biodiésel.....	25

Hipótesis	29
Objetivos	29
Objetivo general	29
Objetivos específicos	29
CAPÍTULO 2	30
2.1 Base de datos de las propiedades de los FAMES del biodiésel.....	30
2.1.1 Base de datos de valores experimentales de propiedades del biodiésel.....	31
2.2 Propuesta de modelos para predicción de propiedades	33
2.3 Optimización de parámetros	34
2.4 Análisis estadísticos	35
2.5 Reoptimización de modelos de la literatura y validación de ecuaciones propuestas ...	35
2.6 Cálculo de la incertidumbre de los métodos seleccionados.....	36
2.7 Estrategia para valorar la calidad del biodiésel mediante un índice	37
CAPITULO 3	40
3.1 Propuesta de modelo basado en el método de contribución de grupos (MCG) para la determinación de propiedades de flujo en frío.....	40
3.2 Propuesta de modelos empíricos.....	42
3.2.1 Propuesta de correlación para estimar el punto de obstrucción de filtro en frío....	47
3.2.2 Propuesta de modelo predictivo para punto de nube.....	49
3.2.3 Propuesta de modelo para punto de escurrimiento	51
3.2.4 Propuesta de modelo predictivo para estimar viscosidad	52
3.2.5 Propuesta de modelo predictivo para estimar densidad	54
3.2.6 Propuesta de modelo predictivo para número de cetano	56
3.2.7 Propuesta de modelo predictivo para punto de inflamación	57
3.2.8 Propuesta de modelo predictivo para estabilidad a la oxidación	59
3.2.9 Propuesta de modelo predictivo para calor de combustión	61
3.2.10 Propuesta de modelo para predecir índice de yodo.....	62
3.3 Validación de los modelos.....	64

3.3.1 Índice general de la calidad del biodiésel	68
CONCLUSIONES	71
PERSPECTIVAS.....	73
BIBLIOGRAFÍA	74
ANEXO	94

Índice de Tablas

Tabla 1.1. Esteres metílicos de ácidos grasos más comunes.....	3
Tabla 1.2. Especificaciones de calidad de acuerdo a normativa estadounidense, europea y mexicana del biodiésel [5].....	5
Tabla 1.3. Límite de especificación por zona de clima templado de acuerdo con EN 590.....	6
Tabla 1.4. Límite de especificación por zona de clima ártico de acuerdo con EN 590.....	6
Tabla 1.5. Punto de fusión de los FAMES más comunes de un biodiésel [19, 56].	11
Tabla 2.1. FAMES más comunes en biodiésel de diferente origen y que son considerados en este trabajo.....	31
Tabla 2.2. Listado de las propiedades y datos de biodiésel y métodos considerados para la construcción de modelos predictivos.....	32
Tabla 2.3. Criterios regulatorios de valores límites para el desarrollo de índice de calidad del biodiésel.....	38
Tabla 3.1. Valores calculados para los grupos que constituyen los FAME.	41
Tabla 3.2. Comparación de errores de los resultados del modelo de MCG contra modelos de literatura para estimación de CFPP.....	41
Tabla 3.3. Comparación de errores obtenidos con el modelo de CFPP propuesto y con modelos selectos tomados de la literatura.	48
Tabla 3.4. Comparación de errores obtenidos con el modelo propuesto y con los modelos tomados de la literatura para calcular el CP del biodiésel.	50
Tabla 3.5. Comparación de errores obtenidos con el método propuesto contra los métodos reportados de la literatura para el cálculo de PP del biodiésel.	51

Resumen

La calidad del biodiésel debe medirse y conocerse antes de su comercialización. Sin embargo, en ocasiones no se dispone del equipo analítico necesario o no se dispone de muestra suficiente para su determinación en trabajos de investigación. Por lo tanto, en este trabajo se desarrollaron correlaciones empíricas para estimar las siguientes propiedades del biodiésel: punto de obstrucción de flujo en frío, punto de nube, punto de fluidez, densidad, número de cetano, punto de inflamación, estabilidad a la oxidación, poder calorífico, viscosidad e índice de yodo. Para el desarrollo de cada modelo se utilizaron 60 datos experimentales extraídos de la literatura, más 8 datos adicionales de biodiésel para su validación. Los resultados obtenidos con los modelos propuestos se compararon con los de ecuaciones altamente referidas reportadas en la literatura para estimar las propiedades consideradas. El coeficiente de determinación (R^2) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE) fueron los parámetros estadísticos utilizados para evaluar el ajuste de los modelos a los datos experimentales. Los resultados sugieren que los modelos propuestos son más precisos que los modelos comparados para las diez propiedades estudiadas. Además, se desarrolló una propuesta de índice para determinar la calidad general del biodiésel.

Abstract

The quality of biodiesel must be measured and known before it is marketed. However, sometimes the required measurement equipment is not available, or there is not enough sample for its determination in research works on obtaining biodiesel from raw materials such as lipids from microalgae. Therefore, in this work empirical correlations were developed to estimate different properties such as Cold Flow Pugging Point, Cloud Point, Pour Point, Density, Cetane, Flash Point, Oxidation Stability, High Heating Value, Viscosity, and Iodine Value. 60 experimental data taken from the literature were used for the development of each model, plus 8 additional biodiesel data for its validation. The results obtained with the proposed models were compared against those of highly referred equations reported in the literature to estimate the considered properties. The coefficient of determination (R^2) and the root mean squares error (RMSE) were the statistical parameters used to evaluate the fit of the models to the experimental data. The results suggest that the proposed models are more accurate than the compared models for the ten properties studied. Additionally, an index proposal was developed to determine the general quality of biodiesel.