

**APROVECHAMIENTO DEL GLICEROL PRODUCIDO EN LA INDUSTRIA DE  
BIODIÉSEL EN COLOMBIA**

**MARYURI DANIELA PEÑA REINOSO**

**PABLO ANDRÉS ORDOÑEZ LANDINEZ**

**Proyecto integral de grado para optar al título de**

**INGENIERO QUÍMICO**

**Director**

**JUAN CARLOS OJEDA TORO**

**Ph.D.,M.Sc, Ingeniero Químico**

**FUNDACIÓN UNIVERSIDAD DE AMÉRICA**

**FACULTAD DE INGENIERÍAS**

**PROGRAMA DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**BOGOTÁ D.C.**

**2024**

**NOTA DE ACEPTACIÓN**

---

---

---

---

---

---

---

---

---

Juan Carlos Ojeda Toro  
Firma del director

---

Firma del presidente del jurado

---

Firma Docente Jurado 1

---

Firma Docente Jurado 2

**Bogotá, D.C. Enero de 2024**

## **DIRECTIVOS DE LA UNIVERSIDAD**

Presidente de la Universidad y Rector del Claustro

Dr. MARIO POSADA GARCÍA PEÑA

Consejero institucional

Dr. LUIS JAIME POSADA GARCÍA PEÑA

Vicerrectora Académica

MARIA FERNANDA VEGA DE MENDOZA

Vicerrectora de Investigaciones y extinción

Dra. SUSAN MARGARITA BENABIDES TUGILLO

Vicerrector Administrativo y Financiero

Dr. RICARDO ALFONSO PEÑARANDA CASTRO

Secretario General Dr.

JOSÉ LUIS MACÍAS RODRÍGUEZ

Decano Facultad de Ingenierías Dra.

NALINY PATRICIA GUERRA PRIETO

Director del Programa de Ingeniería de Química

Ing. NUBIA LILIANA BECERRA

**Las directivas de la Universidad de América, los jurados calificadores y el cuerpo docente no son responsables por los criterios e ideas expuestas en el presente documento. Estos corresponden únicamente a los autores.**

## **DEDICATORIA**

"El éxito no es la clave de la felicidad, la felicidad es la clave del éxito. Si amas lo que haces, tendrás éxito". -Albert Schweitzer

El presente trabajo investigativo lo dedicamos principalmente a Dios, mi familia, a mis papás, mis hermanos, mi novio, docentes, quienes desde el inicio de mis estudios estuvieron ahí guiándome y apoyándome para que pudiera lograr ser una profesional y poder seguir adelante, este logro no es solo mío sino una parte también de ustedes.

***Maryuri Daniela Peña Reinoso***

"La educación es el pasaporte hacia el futuro, porque el mañana pertenece a aquellos que se preparan hoy". -Malcolm X

Dedico mi proyecto de grado inicialmente a Dios, por ser mi inspirador y darme fuerza para dar cada paso a lo largo de mi carrera, a mis padres y abuelos quienes han sido mi motor de vida, también estoy agradecido con mis profesores por enseñarme con amor y sabiduría para formarme como todo un profesional.

***Pablo Andrés Ordoñez Landinez***

## **AGRADECIMIENTOS**

Quiero agradecer a todas aquellas personas que hicieron parte de nuestro proceso académico, principalmente a Dios por permitirnos mucha sabiduría y fortaleza en los 5 años de carrera profesional

Al mismo tiempo a nuestros padres, y hermanos quienes nos brindaron amor, cariño, consejos, ánimo y fortaleza en nuestros momentos más difíciles de la carrera.

Asimismo, agradecer al Ingeniero Juan Carlos Ojeda Toro, sin usted y sus virtudes, su paciencia y constancia este trabajo no lo hubiéramos logrado tan fácil. También a los docentes de la Fundación Universidad de América que nos brindaron los conocimientos durante el trayecto de la carrera para lograr llegar a este momento.

## TABLA DE CONTENIDO

	<b>pág.</b>
INTRODUCCIÓN	14
OBJETIVOS	17
METODOLOGÍA	18
1. GENERALIDADES	20
1.1. El glicerol	20
1.2. Características y propiedades fisicoquímicas	21
1.3. Glicerina cruda: un subproducto de la industria de biodiésel	23
1.4. Plantas productoras de biodiésel en Colombia	24
1.5. Producción de carbonato de glicerol	25
<i>1.5.1. Transesterificación</i>	26
<i>1.5.2. Purificación del carbonato de glicerol</i>	27
1.6. Catalizadores	28
<i>1.6.1. Tipos de catalizadores</i>	28
1.7. Cinética química	29
<i>1.7.1. Velocidad de reacción</i>	30
1.8. Diseño de reactores	30
<i>1.8.1. Clasificación de los reactores.</i>	31
1.9. Matlab®	33
<i>1.9.1. Tipo de ode</i>	34
2. APROVECHAMIENTO QUE SE LE DA AL GLICEROL GENERADO EN LA INDUSTRIA DE BIODIESEL.	36
2.1. El glicerol como recurso valioso	36
<i>2.1.1. Usos de la glicerina en Colombia</i>	37
2.2. Proceso industrial	40

2.2.1. <i>Proceso del biodiesel en la industrial</i>	40
2.2.2. <i>Proceso del glicerol refinado en la industria</i>	41
2.2.3. <i>Proceso de carbonato de glicerol en la industria</i>	42
3. DETERMINAR LOS PARÁMETROS CINÉTICOS Y ESPECIFICACIONES.	43
3.1. Cinética aparente	43
3.2. Reactor Batch: Estudio de Modelado de Synthesis of glycerol carbonate from glycerol and dimethyl carbonate by transesterification: Catalyst screening and reaction optimization	45
3.2.1. <i>Ecuaciones para el diseño del reactor Batch[1]</i>	45
3.2.2. <i>Selección de los pasos</i>	49
3.2.3. <i>Parámetros cinéticos</i>	50
3.2.4. <i>Perfiles de conversión del reactor Batch: Modelo cinético elemental y no elemental</i>	53
3.2.5. <i>Gráficas de paridad de conversión del glicerol teórica y experimental</i>	57
3.2.6. <i>Análisis estadístico para la selección del modelo cinético: Elemental o no elemental</i>	59
3.3. Modelamiento del reactor Batch : Artículo [2]	62
3.3.1. <i>Ecuaciones para el diseño del reactor Batch</i>	63
3.3.2. <i>Selección de los pasos</i>	65
3.3.3. <i>Parámetros cinéticos</i>	66
3.3.4. <i>Perfiles de conversión del reactor Batch: Modelo cinético elemental y no elemental</i>	69
3.3.5. <i>Gráficas de paridad de conversión del glicerol teórica y experimental</i>	72
3.3.6. <i>Análisis estadístico para la selección del modelo de cinético: Elemental o no elemental</i>	73
3.3.7. <i>Diagrama de flujo del modelo cinético elemental y no elemental</i>	75
4. DISEÑO DE UN REACTOR DE ACUERDO CON EL MODELO SELECCIONADO.	79
4.1. Cinética propuesta	79
4.2. Ecuaciones para el diseño del reactor PBR	80
4.2.1. <i>Balance de moles del reactor PBR</i>	80
4.2.2. <i>Balance de energía del reactor PBR</i>	83

4.2.3. <i>Caída de presión del reactor PBR</i>	87
4.3. Parámetros de diseño del reactor PBR	88
4.4. Comportamiento del reactor PBR: Conversión, balance de energía y caída de presión	90
4.5. Diagrama de flujo de diseño del reactor PBR	94
5. ANÁLISIS	96
6. CONCLUSIÓN	98
REFERENCIAS	101
GLOSARIO	108
ANEXOS	110

## LISTA DE FIGURAS

	<b>pág.</b>
<b>Figura 1.</b> Aplicación del glicerol en la industria	20
<b>Figura 2.</b> Estructura molecular de glicerol	22
<b>Figura 3.</b> Reacción de transesterificación para producción de biodiésel	23
<b>Figura 4.</b> Rutas de síntesis	26
<b>Figura 5.</b> Esquema de síntesis de carbonato de glicerol a partir de DMC	27
<b>Figura 6.</b> Diversas aplicaciones del glicerol en la industria	37
<b>Figura 7.</b> Ficha técnica de nutrición de bovinos Bio-D (Facatativá)	39
<b>Figura 8.</b> Esquema de proceso para la producción de biodiesel	41
<b>Figura 9.</b> Esquema de proceso para la producción de glicerol refinado	42
<b>Figura 10.</b> Esquema de proceso para la producción de carbonato de glicerol	43
<b>Figura 11.</b> Toma de datos del artículo [1]	50
<b>Figura 12.</b> Comparación entre los perfiles de conversión experimental y modelada mediante cinética elemental (1)	53
<b>Figura 13.</b> Comparación entre los perfiles de conversión experimental y modelada mediante cinética no elemental (1)	55
<b>Figura 14.</b> Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética elemental) (1)	60
<b>Figura 15.</b> Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética no elemental) (1)	60
<b>Figura 16.</b> Diagrama de caja	63
<b>Figura 17.</b> Toma de datos del artículo [2]	67
<b>Figura 18.</b> Comparación de perfiles de conversión experimental y modelada de la reacción elemental (2)	71
<b>Figura 19.</b> Comparación de perfiles de conversión experimental y modelada de la reacción no elemental (2)	72

<b>Figura 20.</b> Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética elemental) (2)	74
<b>Figura 21.</b> Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética no elemental) (2)	75
<b>Figura 22.</b> Diagrama de caja	77
<b>Figura 23.</b> Diagrama de flujo de la programación de la cinética no elemental	80
<b>Figura 24.</b> Diagrama de flujo de la programación de la cinética elemental	81
<b>Figura 25.</b> Perfil de conversión- Reactor PBR	85
<b>Figura 26.</b> Cambio de la temperatura - Reactor PBR	86
<b>Figura 27.</b> Caída de presión-Reactor PBR	90
<b>Figura 28</b> Diagrama de flujo de la programación del reactor PBR	92

## LISTA DE TABLAS

	<b>pág.</b>
<b>Tabla 1.</b> Propiedades del glicerol.	20
<b>Tabla 2.</b> Ubicación de plantas productoras de biodiésel en Colombia	23
<b>Tabla 3.</b> Ecuaciones de diseño	29
<b>Tabla 4.</b> Criterios para la clasificación de reactores	30
<b>Tabla 5.</b> Ejemplos de reactores químicos.	31
<b>Tabla 6.</b> Rutas para resolver ode en Matlab®	32
<b>Tabla 7.</b> Estequiométrica	43
<b>Tabla 8.</b> Datos experimentales	48
<b>Tabla 9.</b> Condiciones iniciales	49
<b>Tabla 10.</b> Parámetros adicionales	49
<b>Tabla 11.</b> Parámetros cinéticos de la reacción elemental	50
<b>Tabla 12.</b> Parámetros cinéticos de la reacción no elemental	52
<b>Tabla 13.</b> Evolución de la conversión modelada mediante cinética elemental (1)	53
<b>Tabla 14.</b> Evolución de la conversión modelada mediante cinética no elemental (1)	58
<b>Tabla 15.</b> Conversión del glicerol (1)	57
<b>Tabla 16.</b> Datos experimentales	64
<b>Tabla 17.</b> Condiciones iniciales	65
<b>Tabla 18.</b> Parámetros adicionales	66
<b>Tabla 19.</b> Parámetros cinéticos de la reacción elemental	66
<b>Tabla 20.</b> Parámetros cinéticos de la reacción no elemental	67
<b>Tabla 21.</b> Evolución de la conversión modelada mediante cinética elemental (2)	68
<b>Tabla 22.</b> Evolución de la conversión modelada mediante cinética no elemental (2)	70
<b>Tabla 23.</b> Conversión del glicerol (2)	73
<b>Tabla 24.</b> Estequiométrica	80
<b>Tabla 25.</b> Parámetros de diseño- Reactor PBR	87

## NOMENCLATURA

### Símbolos con letras latinas

SÍMBOLO	TÉRMINO	UNIDADES
<b>T</b>	Temperatura	K
<b>t</b>	Tiempo	s, min
<b>W</b>	Masa de catalizador	g, kg
<b>r</b>	Velocidad de reacción	mol/(L·s)
<b>k, k<sub>inv</sub></b>	Constante de velocidad de reacción	L/(g <sub>cat</sub> · s · mol)
<b>R</b>	Constante de los gases ideales	kJ/(mol·K)
<b>E<sub>a</sub>, E<sub>ainv</sub></b>	Energía de activación	J/mol, kJ/mol
<b>n, N</b>	Número de moles	mol

### Símbolos con letras griegas

ABREVIATURA	TÉRMINO
$\alpha$	Orden de reacción del glicerol
$\beta$	Orden de reacción del carbonato de dimetilo
$\gamma$	Orden de reacción del carbonato de glicerol
$\delta$	Orden de reacción del metanol

## Subíndices

SUBÍNDICE	TÉRMINO
0	Condiciones de alimento o de inicio
inv	Con respecto a los parámetros de la reacción inversa
A	Con respecto de la especie (glicerol)

## Abreviaturas

ABREVIATURA	TÉRMINO
CG	Carbonato de glicerol
DMC	Dimetil de carbonato
Batch	Reactor discontinuo
PBR	Reactor de lecho empacado
CGR	Relación molar de moles de catalizador/moles de glicerol.

## RESUMEN

El trabajo se enfoca en explorar rutas de síntesis para transformar el glicerol, un subproducto abundante de la industria del biodiésel, en productos más valiosos. Se destaca el carbonato de glicerol (CG) por su valor industrial, derivado de una materia prima renovable y con propiedades amigables con el medio ambiente. Los trabajos experimentales más prometedores en literatura sobre esta ruta no presentan información de la cinética química.

Para abordar este estudio, se analizan la selección de dos documentos: “*Synthesis of glycerol carbonate from glycerol and dimethyl carbonate by transesterification: Catalyst screening and reaction optimization*” y “*Synthesis of Glycerol Carbonate from Glycerol and Dimethyl Carbonate Catalyzed by Solid Base Catalyst Derived from Waste Carbide Slag*” [1][2], que detallan procedimientos similares para obtener carbonato de glicerol mediante transesterificación, pero con variaciones en los catalizadores y las condiciones de reacción. [1]. utilizaron un reactor Batch con proporciones molares específicas y distintas temperaturas, mientras que [2]. emplearon un catalizador diferente en un reactor Batch con variaciones en las proporciones molares y tiempo de reacción. Ambos enfoques experimentales buscan mejorar la síntesis del carbonato de glicerol mediante ajustes en los reactores, catalizadores y condiciones de reacción.

Se realizó el modelamiento, estableciendo como variable de respuesta la conversión del glicerol, con la finalidad de comprobar que el modelo cinético propuesto es adecuado para la obtención de los parámetros cinéticos, y el modelamiento de los reactores. Se evaluaron parámetros de cada proceso mencionado, tales como temperatura, tiempos de reacción, relación molar, dimetil carbonato/glicerol, cantidad de catalizador y condiciones de operación. Los resultados mostraron que las conversiones calculadas del glicerol no tienen diferencias significativas con las conversiones experimentales en los dos procesos de síntesis analizados.

**Palabras claves:** Glicerol, Modelamiento, Parámetros cinéticos, Reactores, Biodiésel, Carbonato de glicerol.

## INTRODUCCIÓN

En los últimos años, se ha buscado una solución respetuosa con el medio ambiente para mitigar el problema del calentamiento global. Esta problemática se debe principalmente a la generación de gases de efecto invernadero, como el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ), que se liberan a la atmósfera por el consumo de combustibles fósiles (petróleo, gas, carbón). Para enfrentar esta problemática, se ha planteado la necesidad de usar energías limpias y alternativas de fuentes renovables. Entre las fuentes más reconocidas de energía se destacan la solar, eólica, geotérmica y los biocombustibles.

Los biocombustibles se dividen en tres generaciones. La primera generación se deriva de la fermentación de azúcares y almidones presentes en materias primas vegetales como maíz, remolacha o caña de azúcar, dando como resultado el alcohol carburante. La segunda generación se basa en la utilización de biomasa vegetal proveniente de residuos agrícolas y forestales, rica en celulosa que se encuentra en tallos, hojas y leña. Por último, la tercera y cuarta generación de biocombustibles se obtienen de manera más avanzada, utilizando materias vegetales de rápido crecimiento, microorganismos, microalgas y macroalgas genéticamente modificadas, lo que representa una vía prometedora hacia fuentes de energía más eficientes y sostenibles [3].

El biodiésel es un carburante alternativo para motores diésel que se produce principalmente a través de una reacción química de transesterificación de un triacilglicérido (se encuentra en aceites de origen vegetal o en grasas de origen animal) con un alcohol. Para producir biodiésel, es necesario convertir las grasas y aceites en ésteres metílicos. Este proceso de conversión puede realizarse utilizando un catalizador, que puede ser homogéneo o heterogéneo, básico o ácido. Como subproducto de este proceso se obtiene el glicerol, un compuesto químico con diversas aplicaciones, como en la fabricación de jabón, alimentos para mascotas, productos farmacéuticos, cosméticos y productos del tabaco [4]. La incineración del glicerol es el uso más común en la industria brindado a este compuesto; sin embargo, genera emisiones contaminantes como el dióxido de carbono y los óxidos de nitrógeno [1], [5] Por esta razón, es importante realizar investigaciones en diferentes aplicaciones para reducir las emisiones de contaminantes y fomenten el desarrollo de procesos innovadores para la fabricación de productos químicos que satisfagan las necesidades del mercado de manera sostenible [1]

La oportunidad que brinda el aprovechamiento de este subproducto en los diferentes mercados es debido a la gran cantidad de derivados que se pueden obtener a partir de él. Como es el caso del carbonato de glicerol (CG), el cual es un componente que actualmente tiene más atención científica debido a la amplia gama de usos que se le puede dar y es una alternativa sostenible de generar algunos compuestos derivados del petróleo, como el carbonato de etileno y el carbonato de propileno; lo que lo convierte en un sustituto verde [6]. El carbonato de glicerol se puede utilizar para la síntesis de polímeros, tensoactivos, aceites lubricantes e intermedios químicos valiosos [1] También se puede implementar como electrolito en baterías de iones de litio y solvente en membranas de separación de  $\text{CO}_2$  [5].

Existen diferentes métodos para la síntesis de carbonato de glicerol (CG). Uno de ellos consiste en la reacción de glicerol con dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ); sin embargo, esta ruta no ha brindado resultados muy prometedores (rendimientos del CG menores al 10%) como consecuencia a la baja reactividad del  $\text{CO}_2$  [7]. Entre otras rutas alternativas se encuentra la reacción de glicerol con monóxido de carbono (CO), pero su aplicación puede ser peligrosa para la salud dado que el CO es tóxico e inflamable [1]

La reacción de transesterificación es un proceso químico más simple y seguro para la producción de carbonato de glicerol. En este proceso, el glicerol experimenta una transformación en carbonato de glicerol bajo la influencia de un catalizador, empleando un dialquilo carbonato como agente de transesterificación. En entornos industriales, se recomienda el uso de dimetil carbonato como agente de transesterificación debido a su amplia disponibilidad comercial. Su eficiencia notable en la reacción promueve conversiones elevadas, además de que su utilización conlleva la generación de metanol como subproducto. Es importante destacar que el metanol, al ser un compuesto fácilmente separable del producto deseado (CG) mediante el proceso de evaporación, añade valor a este método [1] En este trabajo se modela la reacción de transesterificación para la síntesis de carbonato de glicerol, La determinación del reactor idóneo para el escalamiento industrial de estos procesos se basa en consideraciones clave, como las condiciones operativas, la disponibilidad de materias primas, el control del proceso, los tiempos de residencia y las conversiones máximas logradas. Los resultados derivados de este modelo tienen el potencial de mejorar tanto la eficiencia como la rentabilidad inherente a este proceso.

## **OBJETIVOS**

### **Objetivo general**

Evaluar la transformación química del glicerol (extraído como subproducto en la industria colombiana de biodiésel) a productos de interés comercial mediante modelación cinética.

### **Objetivo específicos**

1. Identificar el aprovechamiento que se le da al glicerol generado en la industria de biodiesel.
2. Determinar los parámetros cinéticos y especificaciones para la producción de carbonato de glicerol.
3. Proponer el diseño de un reactor de acuerdo con el modelo seleccionado.

## METODOLOGÍA

La metodología se compone de diversas etapas. En primer lugar, se realiza una exhaustiva revisión en bases de datos científicas y recursos académicos, restringiendo la búsqueda a fuentes publicadas en un lapso de 15 años, desde el año 2008 hasta el 2023. Se aplican filtros específicos para una búsqueda más precisa, priorizando literatura en inglés relacionada con el carbonato de glicerol, catalizadores amigables con el medio ambiente, de costo accesible y que permitan su recuperación.

En la elección de los dos artículos, [1], [2], se tomaron en cuenta todos los criterios mencionados anteriormente. Ambos artículos presentan similitudes en la ruta de obtención del carbonato de glicerol, utilizando diferentes catalizadores (CaO, CS).

En una segunda fase, se lleva a cabo un análisis minucioso de los datos experimentales procedentes de dos artículos seleccionados que se centran en el estudio y optimización de catalizadores heterogéneos para la conversión del glicerol. El propósito es lograr una mayor eficiencia y selectividad en el producto final. Estos artículos proporcionan datos experimentales y gráficos fundamentales para comprender el comportamiento cinético de la reacción. Estos datos son empleados para modelar el reactor Batch, utilizando la herramienta GetData Graph Digitizer, con el fin de determinar los pasos de conversión a partir del gráfico. Esta información es crucial para la formulación de la ley de velocidad cinética del mecanismo de reacción seleccionado. Posteriormente, se procedió a la programación en Matlab® para establecer una correlación entre las tasas de reacción y los tiempos de operación, permitiendo así la determinación de los parámetros cinéticos de la ruta química de las reacciones elemental y no elemental con el objetivo de realizar un estudio estadístico. Se empleó la prueba t de Student para determinar cuál de las dos rutas ofrece una conversión superior.

En la tercera fase, se procedió con el diseño del reactor de lecho empacado (PBR), considerando la caída de presión en el contexto de una reacción reversible. Se llevó a cabo un exhaustivo balance molar y un balance de energía en co-corriente, utilizando acero inoxidable como material principal para el reactor. Se incorporaron los parámetros cinéticos en el modelado del reactor mediante Matlab®. La programación adquiere una relevancia fundamental en este proyecto, ya que facilita

la integración y localización de variables, permitiendo comprender con facilidad el comportamiento del rendimiento del producto deseado. Finalmente, se realizó un análisis integral del trabajo de grado, abordando los resultados obtenidos y las conclusiones finales.

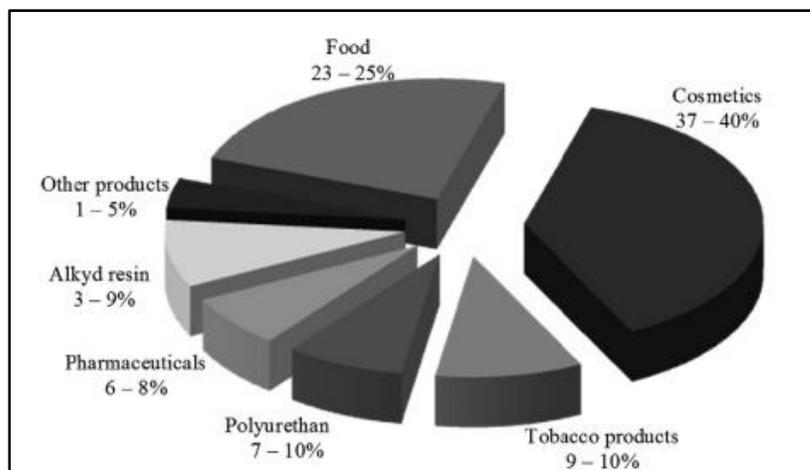
## 1. GENERALIDADES

### 1.1. El glicerol

El glicerol (1,2,3-propanotriol,  $C_3H_8O_3$ , CAS No. 56-81-5) comúnmente llamado “glicerina”, es un alcohol (polialcohol) que posee tres grupos de hidroxilos (-OH), la presencia de estos hidroxilos le confieren propiedades higroscópicas, lo que significa que atrae y retiene el agua [8]. Es catalogado como un compuesto versátil y estable que se utiliza en la síntesis de una amplia variedad de productos químicos, incluidos biopolímeros, ácidos grasos poliinsaturados, etanol, hidrógeno, n-butanol, carbonato de glicerol y ésteres de acetilo de glicerol [9]. Es un compuesto orgánico que se encuentra en todos los triglicéridos, que son los componentes principales de las grasas animales y vegetales. El glicerol se puede obtener mediante la producción de biodiésel. Es un subproducto valioso de la industria del biodiésel, que se produce mediante los procesos de transesterificación y saponificación. La glicerina se utiliza en la fabricación de medicamentos, cosméticos, alimentos, y otras aplicaciones dependiendo de su grado de pureza [9]. De acuerdo a la Figura 1, se puede evidenciar el porcentaje de consumo que se tiene de glicerol en cada industria a nivel mundial.

**Figura 1.**

*Aplicación del glicerol en la industria*



**Nota.** Usos tradicionales del glicerol junto a sus porcentajes promedio a nivel mundial. Tomado de: Glycerol Production, consumption, prices, characterization and new trends in combustion [Artículo de revista, 2013,p.9]

Disponible:[10][Acceso:Nov,21,2023]

El glicerol puede clasificarse según el nivel de purificación, como se indica a continuación [3]:

- El glicerol de alta pureza, conforme a las normativas USP y Kosher, se encuentra en concentraciones entre el 99.5% y el 99.7%, con un contenido máximo de humedad del 0.3% y unos ácidos grasos residuales del 0.10% como máximo. Este tipo de glicerol es muy beneficioso como disolvente o aditivo en composiciones alimentarias y farmacéuticas.
- El glicerol de grado técnico, que contiene un 98% de glicerol puro y un máximo del 2% de humedad e impurezas como cloruros y residuos orgánicos, se utiliza ampliamente en aplicaciones químicas. Su calidad y pureza excepcionales lo convierten en la elección preferida de diversas industrias que requieren un rendimiento fiable, constante y contribuyendo a obtener el producto deseado. Se utiliza para productos farmacéuticos, cosméticos o fabricación de alimentos.
- La glicerina cruda es esencialmente, el compuesto separado de la reacción de transesterificación de los ácidos grasos, con porcentajes de glicerol que oscilan entre el 44 y el 88%. Sin embargo, no se utiliza mucho en las plantas oleoquímicas tradicionales debido a que sus impurezas dañan las tuberías y los depósitos de almacenamiento.

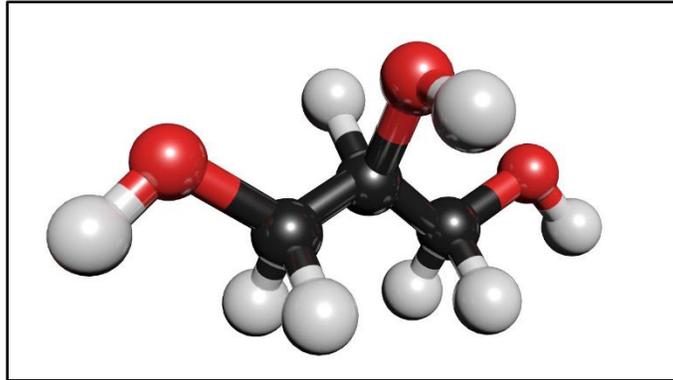
## **1.2. Características y propiedades fisicoquímicas**

El glicerol es un líquido viscoso, inodoro, higroscópico, de sabor dulce y sin toxicidad en su forma refinada. Su estructura molecular tiene un comportamiento similar al de los alcoholes, como la oxidación a grupos aldehídos y ácido carboxílico, la deshidratación, la eterificación, la esterificación, la acilación, etc. A altas temperaturas (160 - 200 °C), puede reaccionar cuando se expone al aire y/o a ácidos o bases fuertes [3].

La fórmula empírica del glicerol es  $C_3H_8O_3$  en la Figura 2 la cual corresponde una estructura con tres grupos hidroxilo que lo convierte en el triol más sencillo de la naturaleza.

**Figura 2.**

*Estructura molecular de glicerol*



*Nota.* Estructura molecular de glicerol en 3D. Tomado de: Glicerol [Página web] Disponible:[11] [Acceso: Nov,21,2023]

La siguiente Tabla 1 describe algunas propiedades fisicoquímicas del glicerol.

**Tabla 1.**

*Propiedades del glicerol.*

<b>PESO MOLECULAR</b>	92.09 g/mol
<b>ESTADO FÍSICO</b>	Líquido viscoso
<b>OLOR</b>	Inodoro a suave
<b>COLOR</b>	Incoloro a marrón
<b>TEMP. EBULLICIÓN</b>	189 °C
<b>TEMP. FUSIÓN</b>	17.9 °C
<b>DENSIDAD</b>	1.61 kg/l a 25 °C
<b>VISCOSIDAD</b>	1.5 Pas a 20 °C

*Nota.* Propiedades fisicoquímicas del glicerol. Tomado de: Obtención de propilenglicol a partir de glicerol refinado [Artículo de revista, 2020 p.25] Disponible:[12] [Acceso: Nov,21,2023]

### **1.3. Glicerina cruda: un subproducto de la industria de biodiésel**

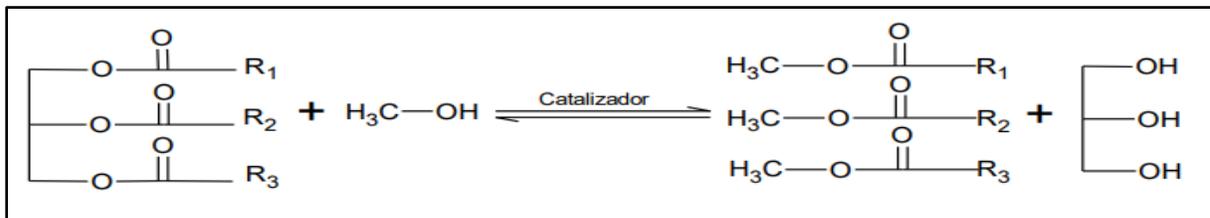
El biodiésel tiene un impacto ambiental menor que los combustibles fósiles, dado que produce menos emisiones de gases de efecto invernadero (GEI). Además, la producción biodiésel es una buena opción de creación de empleo y promover el desarrollo rural. En Colombia, el uso de

biodiésel en el transporte representa una gran oportunidad para cumplir con el compromiso del país de reducir las emisiones de GEI en un 51% para el 2030 [13]. El biodiésel de materias primas vegetales es cada vez más popular a nivel mundial, el aumento de su popularidad ha provocado un crecimiento de la producción de aceites vegetales en los últimos años, como el aceite de palma, de colza, de girasol, entre otros [14]. Actualmente, Colombia se posiciona como el cuarto productor mundial de aceite de palma, reportando en agosto de 2023 una producción de 142,400 toneladas. Esta cifra la convierte en el país líder en América en la producción de este cultivo [15]. En el año 2022 el 43% de la producción de aceite de palma fue destinado a la industria de biodiésel [16].

Como se había mencionado anteriormente, la reacción de transesterificación (Ver Figura 3) se utiliza para producir biodiésel a partir de aceites vegetales. En esta reacción, los triglicéridos (moléculas que componen los aceites vegetales), reaccionan con un alcohol, como el metanol o el etanol en presencia de un catalizador. La reacción produce ésteres metílicos o etílicos, que son los compuestos que forman el biodiésel y la glicerina cruda como subproducto [14].

**Figura 3.**

*Reacción de transesterificación para la producción de biodiésel*



*Nota.* Obtención de biodiésel a partir de transesterificación. Tomado de: Obtención de propilenglicol a partir de glicerol refinado Obtención de carbonato de glicerol a partir de glicerol y CO<sub>2</sub> empleando óxidos de La y La/Zr [Artículo de revista, 2023 p.15] Disponible:[14] [Acceso: Nov,21,2023]

Normalmente, la glicerina obtenida es impura dado que contiene aproximadamente un 50% de glicerol, junto con agua, metanol, catalizador residual, sales inorgánicas, materiales orgánicos distintos del glicerol (MONG), jabones, ácidos grasos libres, residuos de materia prima y ésteres metílicos. La oferta de glicerina bruta en el mercado se mantuvo relativamente estable hasta 2003. Sin embargo, con el aumento sustancial de la producción de biodiésel en Estados Unidos, la disponibilidad de glicerina cruda casi se ha duplicado, mientras que la demanda del producto apenas ha variado. Este exceso de oferta y esta demanda limitada han dado lugar a unos precios

bajos de la glicerina cruda. Actualmente, la mayor parte de la glicerina que se comercializa es glicerina refinada, fabricada para cumplir los estrictos requisitos de la Farmacopea de Estados Unidos (USP) y el Códice de Productos Químicos Alimentarios (FCC) [17].

#### 1.4. Plantas productoras de biodiésel en Colombia

Actualmente, hay siete plantas de producción de biodiésel en operación continua en Colombia, repartidas por distintas regiones del país. Las plantas productoras son: Aceites manuelita, Bio D, Ecodiesel, BioSC, Bgree, Alpo, Inversiones la paz, entre otros. La distribución de las plantas de biodiésel en Colombia se puede ver en la Tabla 2. Estas plantas cuentan con una capacidad instalada de 750 mil toneladas anuales de producto [17].

**Tabla 2.**

*Ubicación de plantas productoras de biodiésel en Colombia*

PLANTA DE PRODUCCIÓN - BIODIESEL	
BioSC	Magdalena
BGreen	Magdalena
Odin Energy	Magdalena
Romil de la costa	Atlantico
Biodiesel de la costa	Atlantico
Oleoflore	Cesar
Ecodiesel Colombia	Santander
Alpo	Santander
Biodiesel y Derivados	Santander
Bio D	Cundinamarca
Aceite Manuelita	Meta
Inversiones la paz	Meta

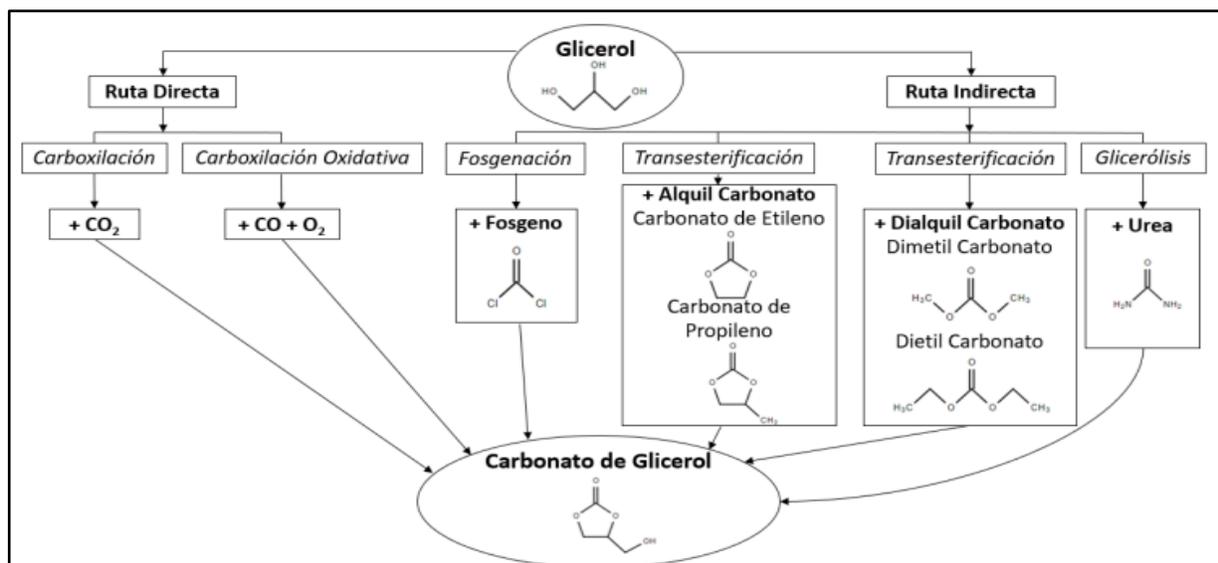
*Nota.* Tabla de las diferentes plantas de biodiésel a partir de aceite de palma Tomado de: Vademecum [Artículo de revista,2023 p.44] Disponible:[18] [Acceso: Nov,21,202]

#### 1.5. Producción de carbonato de glicerol

Las vías de obtención del carbonato de glicerol comprenden tanto métodos directos como indirectos. En la Figura 4 se presentan las diversas rutas empleadas para la síntesis de este compuesto, ya sea a través de Transesterificación, carbonilación oxidativa o glicerólisis [14].

**Figura 4.**

*Rutas de síntesis*



*Nota.* Rutas de síntesis hacia el carbonato de glicerol. Tomado de: Obtención de carbonato de glicerol a partir de glicerol y CO<sub>2</sub> empleando óxidos de La y La/Zr, [Artículo de revista,2023. p.17] Disponible:[14] [Acceso: Nov,21,2023]

### **1.5.1. Transesterificación**

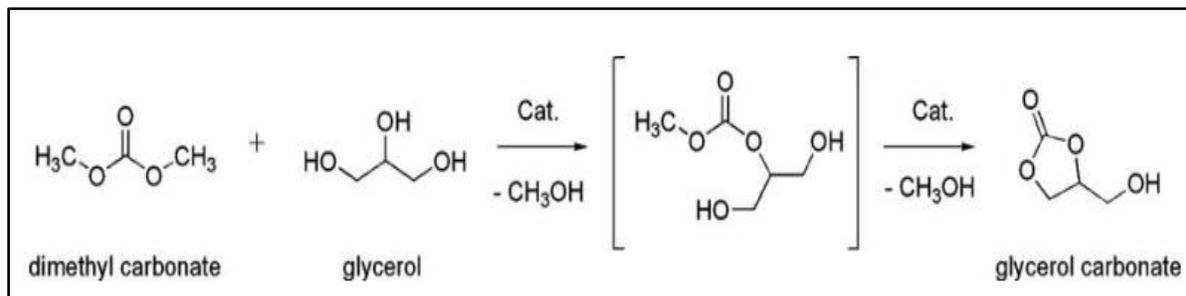
Este tipo de reacción se caracteriza generalmente por un intercambio de grupos funcionales entre un carbonato orgánico y un alcohol o polialcohol. Puede ser catalizada tanto por ácidos como por bases. En presencia de un catalizador básico, la reacción se produce cuando el alcóxido, formado por la reacción del alcohol con el catalizador, ataca el átomo de carbono del grupo oxo del carbonato. Las reacciones químicas pueden producirse en ambas direcciones, y el uso de catalizadores permite que se produzcan de forma más eficiente [7].

El carbonato de glicerol (CG) se puede sintetizar a partir de la reacción de transesterificación en fase heterogénea, donde el glicerol reacciona con dimetil carbonato (DMC). En primer lugar, el glicerol entra en contacto con el catalizador para producir el anión gliceróxido más el ácido conjugado de la base, posteriormente, el anión ataca al DMC para formar carbonato de metilglicerilo como intermedio, más un anión metóxido que reacciona con el ácido conjugado formado al inicio, produciendo metanol.

Finalmente, el carbonato de metilglicerilo sufre una reacción de ciclación a través de un ataque nucleofílico intramolecular para generar CG. Se puede ver un esquema de la reacción de síntesis mencionada en la Figura 5. En este caso la separación del CG es sencilla, gracias a las condiciones de la mezcla obtenida [1].

**Figura 5.**

*Esquema de síntesis de carbonato de glicerol a partir de DMC*



*Nota.* Esquema de síntesis de carbonato de glicerol a partir de carbonato de dimetilo y glicerol mediante transesterificación. Tomado de :Synthesis of glycerol carbonate from glycerol and dimethyl carbonate by transesterification: Catalyst screening and reaction optimization [Artículo de revista,2009. p.4] Disponible:[1] [Acceso: Nov,21,2023]

En las primeras prácticas experimentales la reacción de transesterificación se realizó en fase homogénea utilizando el carbonato de etileno como reemplazo al DMC, utilizando este reactante la reacción da lugar al carbonato de glicerol y etilenglicol como subproducto. El principal problema de este proceso consiste en la purificación del producto deseado, dado que el catalizador se encuentra en una sola fase con la mezcla y ambos productos tienen un elevado punto de ebullición [7].

### **1.5.2. Purificación del carbonato de glicerol**

En la mayoría de los procesos de reacción descritos en los apartados anteriores, es necesario purificar el carbonato de glicerol, ya que aparece mezclado con otros subproductos (principalmente alcoholes y oligómeros) y restos de reactivos (glicerol). Aunque el método más común consiste en destilar el producto de la reacción, a veces este proceso puede resultar complicado debido a los elevados puntos de ebullición de los compuestos implicados.

Hérault et al [19]. Patentaron un proceso para purificar el carbonato de glicerol crudo compuesto por carbonato de glicerol (90%), glicerol (5%) y oligómeros de carbonato de glicerol (3,7%). El proceso consistía en tratar el producto impuro con bases muy fuertes (en una proporción en masa de 1-10% respecto al carbonato de glicerol), sin agua, a 21 °C durante una hora. Una vez filtrado, el producto resultante se trataba con ácido fosfórico y se filtró de nuevo, obteniéndose carbonato de glicerol con una pureza del 95% [7].

## **1.6. Catalizadores**

Un catalizador es una sustancia, simple o compleja, que acelera o reduce una reacción química, proceso conocido como catálisis. En el campo de la química, los catalizadores se estudian ampliamente, y pueden ser líquidos, gases o sólidos, compuestos orgánicos o inorgánicos, o incluso combinaciones complejas de ambos. Una de las características fundamentales de un catalizador es que no experimenta ningún cambio de masa durante su participación en una reacción química. Por tanto, no se considera reactante ni producto según la estequiometría de la reacción. Las sustancias catalizadoras tienen un uso muy extendido en diversos procesos industriales, como en la industria petrolera. Algunos de los catalizadores más utilizados son sustancias sólidas, como el boro, el aluminio, el níquel, el paladio, el silicio y el platino, así como sulfuros y cloruros, entre otros.

Los catalizadores pueden clasificarse en dos tipos: catalizadores positivos y catalizadores negativos

- Los catalizadores positivos son los más utilizados, ya que ayudan a acelerar las reacciones químicas
- Los catalizadores negativos, también conocidos como catalizadores inhibidores, reducen las reacciones químicas. Aunque no son tan comunes, se utilizan a menudo en la industria alimentaria para evitar el deterioro de los alimentos [7].

### ***1.6.1. Tipos de catalizadores***

A continuación, se presentan los principales tipos de catalizadores [7].

- **CATALIZADOR HOMOGÉNEO:** Es aquel que está disuelto con los reactivos o que se encuentra en su misma fase. Sin embargo, el catalizador no afecta el equilibrio de la reacción.

- **CATALIZADOR HETEROGÉNEO:** También se conoce como catalizador de contacto. No se encuentra en la misma fase que los reactivos y es común en los catalizadores en estado sólido. Es ampliamente utilizado en la industria química.
- **ELECTROCATALIZADOR:** Son aquellos que se emplean para mejorar la velocidad de semirreacción de las pilas de combustible.
- **CATALIZADOR BIOLÓGICO:** También se conoce como enzima. Estos catalizadores son compuestos químicos propios de los seres vivos, cuya función es aumentar la velocidad de colación molecular en reacciones bioquímicas.

## 1.7. Cinética química

La cinética de reacción química permite medir cuantitativa o cualitativamente la(s) velocidad(es) de las reacciones y aporta información sobre la dependencia de dichas velocidades sobre variables tales como la concentración, la temperatura, la presión, la presencia de catalizadores y el estado físico de los reactivos, entre otros factores. Dado que las reacciones químicas dependen de la concentración de las moléculas reactivas y de las condiciones que posibilitan su capacidad funcional, comprender el efecto de las variables sobre estas interacciones resulta de vital importancia para controlar la reacción y, de este modo, obtener un resultado satisfactorio. La información suministrada por las mediciones de la cinética de las reacciones permite corroborar o refutar los mecanismos postulados de la reacción y permiten crear modelos matemáticos de la reacción. Medir el progreso de una reacción en función del tiempo da como resultado las velocidades de la reacción y, a partir de estos datos, se derivan las leyes de velocidad, las constantes de velocidad, las energías de activación y otros parámetros cinéticos [20]. El estudio de esta rama de la química es importante por varias razones, entre las que destaca la necesidad que tiene de conocer la cinética de la reacción para poder diseñar un reactor eficiente a escala industrial.

### 1.7.1. Velocidad de reacción

En termodinámica, la atención se centra únicamente en los estados inicial y final de un proceso químico, descuidando las etapas intermedias que se producen durante la transformación de los reactantes en productos. Sin embargo, para una comprensión completa del mecanismo de reacción y de los cambios atómicos o moleculares, los estudios cinéticos son imprescindibles. Aquí es

donde entra en juego la cinética química, que constituye una valiosa herramienta en los procesos industriales.

La cinética química es la rama de la ciencia que profundiza en la velocidad de las reacciones químicas, los factores que influyen en la velocidad de reacción y el mecanismo subyacente de la reacción. Cada reacción química tiene lugar a un ritmo diferente: algunas se producen instantáneamente, mientras que otras pueden tardar minutos o incluso años. Por ejemplo, una explosión ocurre en un abrir y cerrar de ojos, mientras que la oxidación de las puertas de hierro puede tardar años.

La velocidad de reacción se refiere a la alteración de la concentración de uno de los reactivos o productos en un intervalo de tiempo determinado. Esto permite conocer la velocidad media de la reacción. Comprender la velocidad de la reacción ayuda a determinar las condiciones óptimas de los procesos industriales, mejorando así la eficacia y el rendimiento [21].

### **1.8. Diseño de reactores**

Todo proceso químico se compone de una serie de operaciones unitarias interconectadas. Estas operaciones pueden ser de naturaleza física o química. El proceso implica la construcción de unidades de tamaño progresivamente creciente (de laboratorio a escala de banco, planta piloto y escala industrial), al tiempo que se garantiza que los grupos de parámetros geométricos y fisicoquímicos ( $Re=Reynolds$ ,  $Pr=Prandtl$ ,  $Nu=Nusselt$ ,  $Da=Damköhler$ , etc.) permanecen constantes. Esto garantiza que el proceso funciona en el mismo régimen en todas las etapas, Tabla 3 se presentan las ecuaciones de diseño [22].

Se consideran los siguientes parámetros al diseñar un reactor, que incluyen:

- Balance de materia o ecuación de diseño (salida = f (entrada, cinética, modelo de flujo, modelo de contacto))
- Balance de energía
- Balance de energía mecánica
- Ecuaciones de estado cuando sea preciso
- Ecuaciones de equilibrio físico y/o químico

**Tabla 3.***Ecuaciones de diseño*

	DIFERENCIAL	ALGEBRAICO	INTEGRAL
Batch	$N_{A0} = \frac{dX}{dt} = -r_A V$		$t = N_{A0} \int_0^x \frac{dX}{-r_A V}$
Reactor de tanque agitado (CSTR)		$V = \frac{F_{A0} X}{-r_A}$	
Reactor fluidizado (CSTR)		$W = \frac{F_{A0} X}{-r'_A}$	
Reactor de flujo pistón (PFR)	$F_{A0} \frac{dX}{dV} = -r_A$		$V = F_{A0} \int_0^x \frac{dX}{-r_A}$
Reactor de cama empacada (PBR)	$F_{A0} \frac{dX}{dW} = -r'_A$		$W = F_{A0} \int_0^x \frac{dX}{-r'_A}$

*Nota.* Ecuación de diseño para diferentes reactores. Tomado de: H. Fogler - Elements of Chemical Reaction Engineering, -Pearson [Libro,2022. p.139] Disponible:[23] [Acceso: Nov,21,2023]

### 1.8.1. Clasificación de los reactores

La clasificación de los reactores químicos es un proceso mediante el cual se categorizan y agrupan estos dispositivos con base en diversos criterios, con la finalidad de comprender y describir sus características y comportamientos en una variedad de aplicaciones. Entre los criterios comúnmente empleados para llevar a cabo esta clasificación, se encuentran los siguientes criterios mostrados en las Tabla 4 y Tabla 5 [22]:

- **Tipo de modelo de flujo:** ideal al que tiende (mezcla perfecta, flujo en pistón) o real.
- **Número de fases en contacto:** homogénea (1 fase), heterogénea (2 fases = bifásica, 3 fases = trifásica, o multifásica)
- **Modo de operación:** continuo, semicontinuo, discontinuo.
- **Evolución en el tiempo:** régimen estacionario y régimen no estacionario
- **Tipo de reacción química:** catalítica, bioquímica, esterificación, entre otros.

**Tabla 4.***Criterios para la clasificación de reactores*

<b>CRITERIO</b>	<b>TIPO DE REACTOR</b>	<b>EJEMPLOS INDUSTRIALES</b>
Modo de tratamiento de la carga	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Cerrado (sin intercambio de materia con el exterior)</li> <li>● Semicerrado (una parte de la carga es añadida o extraída en el curso de la reacción)</li> <li>● Abierto (la carga circula dentro del reactor)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Química fina, polimerización en discontinuo</li> <li>● Cloración orgánica de “pequeños productos”</li> <li>● Intermediarios o productos básicos petroquímicos de gran tonelaje</li> </ul>
Evolución en el tiempo	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Régimen no estacionario</li> <li>● Régimen estacionario</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Sulfonaciones, nitraciones, polimerizaciones</li> <li>● Marcha continua de los reactores abiertos</li> </ul>
Modelo de flujo idea	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Reactor prácticamente agitado (composición uniforme)</li> <li>● Reactor de circulación en pistón (progresión en bloque)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Sulfonaciones, nitraciones, polimerizaciones</li> <li>● Reactores catalíticos en lecho fijo, reactores homogéneos en circulación turbulenta.</li> </ul>
Puesta en contacto de las fases	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Co-corriente</li> <li>● Contra-corriente</li> <li>● Corrientes cruzadas</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>● Hidrodesulfuración de las fracciones petrolíferas</li> <li>● Absorción y reacción química gas-líquido</li> <li>● Combustión del carbón sobre soporte transportador</li> </ul>

*Nota.* Presentan esquematizados, con ejemplos industriales. Tomado de: Reactores químicos [Artículo de revista,2010, p.13] Disponible [24] [Acceso: Nov,21,2023]

**Figura 5.**

*Ejemplos de reactores químicos.*

<b>PROCESO</b>	<b>REACTOR</b>	<b>REACCIÓN QUÍMICA</b>	<b>ASPECTOS DE DISEÑO</b>
<b>Craqueo de nafta</b>	Horno tubular en fase gas y homogéneo	Reacciones consecutivas endotérmicas	Rendimiento de producto, rápido calentamiento y enfriamiento
<b>Reformado de vapor</b>	Lecho fijo, heterogéneo sólido-gas	Reacción reversible endotérmica	Balance de calor, flujo de calor, catalizador
<b>Producción de epoxi-resinas</b>	Reactor tanque agitado en fase líquida	Reacción de polimerización exotérmica	Eliminación de calor, control de la polimerización
<b>Hidrotratamiento</b>	Lecho fijo, heterogéneo líquido-gas	Reacción exotérmica a elevada presión	Consumo de hidrógeno, eliminación de calor, catalizador
<b>Craqueo catalítico</b>	Lecho fluidizado continuo, heterogéneo líquido-gas-sólido	Reacciones consecutivas endotérmicas	Distribución de producto, regeneración de catalizador en continuo
<b>Desulfuración de gas seco</b>	Tanque de borboteo, heterogéneo líquido-gas-sólido	Reacción ácido-base	Transferencia de materia y ahorro de energía

*Nota.* Se presentan ejemplos de reactores en diferentes procesos químicos. Tomado de: Reactores químicos [Artículo de revista,2010, p.13] Disponible:[24] [Acceso: Nov,21,2023]

## 1.9. Matlab®

Matlab® es una plataforma de programación diseñada específicamente para ingenieros y científicos, que les permite analizar y diseñar sistemas y productos que dan forma a nuestro mundo. Funciona como un lenguaje basado en matrices, facilitando la expresión más intuitiva de las matemáticas computacionales. En él se integran operaciones de cálculo, visualización y programación, donde la interacción con el usuario emplea una notación matemática clásica. Los usos y aplicaciones típicos de Matlab® son: Matemáticas y cálculo, desarrollo de algoritmos, adquisición de datos, modelado, simulación y prototipado, análisis y procesado de datos, gráficos científicos y de ingeniería, desarrollo de aplicaciones, mencionan que las cuatro partes fundamentales de Matlab® son:

- **Entorno de desarrollo:** Se refiere a un conjunto de herramientas que permiten utilizar las funciones de Matlab® y los archivos en general. Muchas de estas herramientas son interfaces gráficas de usuario [25].
- **La librería de funciones matemáticas Matlab®:** Se trata de un amplio conjunto de algoritmos de cálculo, comprendiendo las funciones más elementales como la suma, senos y cosenos o la aritmética compleja, hasta funciones más sofisticadas como la inversión de matrices, el cálculo de autovalores, funciones de Bessel y transformadas rápidas de Fourier [25].
- **Gráfico Matlab® (plot):** ofrece diversas herramientas para visualizar vectores y matrices como gráficos. Hay numerosas opciones disponibles para personalizar el aspecto de los gráficos, incluida la visualización tridimensional con opciones de iluminación y sombreado, así como la posibilidad de crear animaciones [25].
- **Interfaz de aplicación de Matlab®:** Consiste en una librería que permite escribir programas ejecutables independientes en C y otros lenguajes, accediendo, mediante DLLs, a las utilidades de cálculo matricial de Matlab® [25].

### *1.9.1. Tipo de ode*

En el ámbito de las ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE), un solucionador es un algoritmo empleado para calcular la solución de una ecuación diferencial. Los solucionadores de ODE pueden utilizarse para resolver una amplia gama de ecuaciones diferenciales, que abarcan ecuaciones explícitas, implícitas, lineales y no lineales, tanto de primer orden como de orden superior. Los solucionadores de ODE se basan en una serie de métodos numéricos, como los métodos Runge-Kutta, los métodos Adams-Bashforth-Moulton y los métodos de diferencias finitas. La selección del método numérico adecuado para resolver una ecuación diferencial depende de varios factores, como el tipo de ecuación diferencial, el orden de la ecuación diferencial y la precisión de la solución requerida [33].

Se pudieron encontrar las distintas formas de resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias mostradas en la siguiente Tabla 6 [34].

**Tabla 6.***Rutas para resolver ode en Matlab®*

<b>RUTINA</b>	<b>TIPO DE PROBLEMA</b>	<b>CUANDO UTILIZARLA</b>	<b>CÓDIGO</b>	<b>REFERENCIA</b>
<b>ode23</b>	No rígido	La mayoría de las veces, puede ser el primer solucionador que se utilice.	<code>[t,y]=ode23(od efun,tspan,y0)</code>	[35]
<b>ode45</b>	Baja	Para problemas con niveles de error aceptables.	<code>[t,y]=ode45(od efun,tspan,y0)</code>	[36]
<b>ode113</b>	Moderadamente alta	Para problemas con niveles de error rigurosos o para problemas resueltos computacionalmente.	<code>[t,y]=ode113(o defun,tspan,y0 )</code>	[37]
<b>ode15s</b>	Moderadamente media	Si ode45 no es el adecuado por problemas de rigidez.	<code>[t,y]=ode15s(o defun,tspan,y0 )</code>	[38]
<b>ode23s</b>	Rígido	Si utiliza tolerancias aceptables para resolver sistemas rígidos y matrices de masa constante.	<code>[t,y]=ode23s(o defun,tspan,y0 )</code>	[39]
<b>ode23t</b>	Moderadamente Rígido	Para casos de problemas moderadamente rígidos y si no se necesita una solución sin amortiguación numérica.	<code>[t,y]=ode23t(o defun,tspan,y0 )</code>	[40]

<b>ode23tb</b>	Rígido	Solo utiliza tolerancias aceptables para resolver sistemas rígidos.	<code>[t,y]=ode23tb(odefun,tspan,y0)</code>	[41]
----------------	--------	---	---	------

*Nota.* Rutinas para resolver ode para diferentes ecuaciones en Matlab® Tomado de: Simulación con Matlab® y Scilab de un reactor tipo tanque agitado [Artículo de revista,2012 p.33] Disponible:[42] [Acceso: Nov,21,2023]

## 2. APROVECHAMIENTO QUE SE LE DA AL GLICEROL GENERADO EN LA INDUSTRIA DE BIODIESEL

### 2.1. El glicerol como recurso valioso

La glicerina refinada es un compuesto químico versátil con múltiples aplicaciones, tanto industriales como comerciales. Se puede utilizar como un humectante, emulsionante y estabilizante natural, no es tóxica y tiene una capacidad única para mejorar las propiedades de los productos finales, como la estabilidad y la compatibilidad con otros compuestos químicos [3].

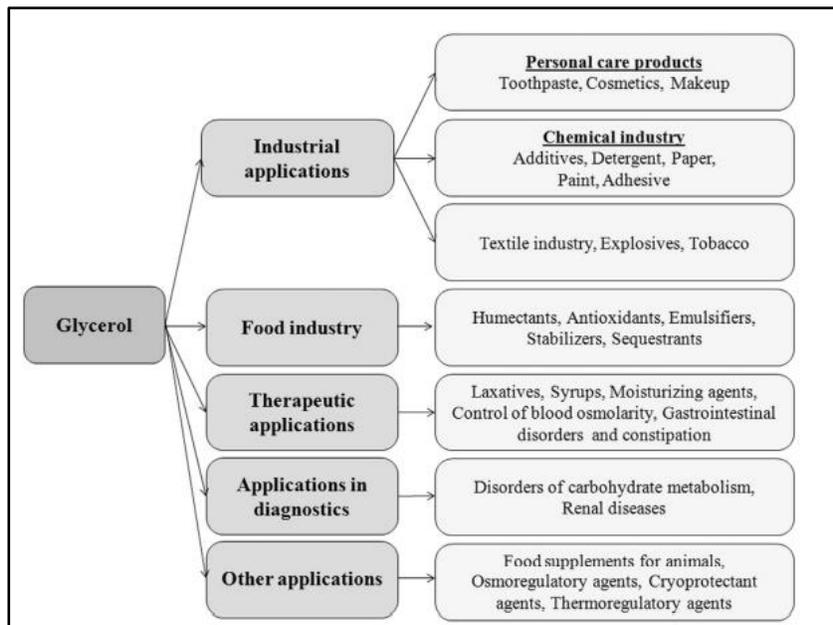
La glicerina refinada es un ingrediente de alta calidad que cumple con los estrictos estándares de seguridad y pureza. Por eso se puede utilizar en una amplia gama de productos de consumo [3], como:

- **Cosméticos:** La glicerina se utiliza como humectante para mantener la piel hidratada. También se utiliza como emulsionante para mezclar diferentes ingredientes cosméticos [43].
- **Artículos de cuidado personal:** La glicerina se utiliza como emoliente para suavizar la piel y el cabello. También se utiliza como espesante para mejorar la textura de los productos de cuidado personal [44].
- **Medicamentos:** La glicerina se utiliza como excipiente, el cual es un ingrediente que se utiliza para dar forma, consistencia y mantener la humedad de los medicamentos [4].
- **Productos alimentarios:** La glicerina se utiliza como humectante y edulcorante para mantener la humedad y endulzar los alimentos [3].

La glicerina refinada es un recurso valioso con un gran potencial de crecimiento. Su valor se debe a su versatilidad, su abundancia y su pureza. La producción de biodiésel a nivel mundial tuvo un crecimiento acumulado del 94% entre la década del 2012 al 2021, y en este último año la producción mostró un incremento interanual de 5%, evidenciándose un aumento en la generación de glicerina cruda y, por tanto, en la producción de glicerina refinada [45]. La producción de glicerina cruda como subproducto de la producción de biodiésel es del 10% en masa. Esto significa que por cada 100 toneladas de biodiésel producidas, se generan 10 toneladas de glicerina cruda [46]. Este producto tiene una amplia gama de aplicaciones, que se muestran en la Figura 6.

**Figura 6.**

*Diversas aplicaciones del glicerol en la industria*



*Nota.* Las diferentes aplicaciones en la industria del glicerol crudo.

Tomado de: Glycerol from biodiésel production: Technological paths for sustainability, [Artículo de revista,2018, p.5] Disponible:[47] [Acceso: Nov,21,2023]

En Colombia, la producción de biocombustible creció un 40% en 2022, en comparación con el año 2021, alcanzando las 685,000 toneladas. Este aumento se debió principalmente al incremento de la producción de biodiésel a partir del aceite de palma. Esto significa que se produjeron aproximadamente 68,500 toneladas de glicerina cruda ese año [48]. Esto representa una oportunidad para la industria para aprovechar este recurso valioso y desarrollar nuevas aplicaciones para la glicerina refinada.

### ***2.1.1. Usos de la glicerina en Colombia***

Gran parte de la glicerina cruda producida en Colombia se exporta a otros países para procesarla. En 2021, se registraron en Colombia exportaciones por \$20.4 millones de esta materia prima [49]. Algunas empresas colombianas ofrecen ahora glicerina refinada que cumple las normas USP y Kosher [3]. Una de estas empresas es Manuelita - Aceites y Energía, que es uno de los principales productores de glicerina de Colombia y se utiliza en diversas aplicaciones, como cosméticos, alimentos, medicamentos y fines industriales [3].

En Colombia, la planta de producción de glicerol Bio D en Facatativá, se comercializa como complemento alimenticio en la dieta de ganado vacuno, que cuenta con un valor calórico similar al maíz, en la Figura 7 se muestra las especificaciones del periodo de adaptación (al menos 14 días) y la cantidad suministrada para cada bovino; El glicerol Bio D proporciona amplios beneficios para la salud de ganado como [50]:

- Mejora los parámetros reproductivos.
- Incrementa la cantidad y calidad de la leche.
- Reduce la probabilidad de enfermedades.
- Favorece la condición corporal.
- El glicerol bio d es 100% energía.

**Figura 7.**

*Ficha técnica de nutrición de bovinos Bio-D (Facatativá)*



**Nota.** La empresa de glicerol Bio-D habla de las especificaciones del suministro y el manejo de su materia prima. Tomado de: Alternativas de aprovechamiento del glicerol [Artículo de revista,2020, p.72] Disponible:[51] [Acceso: Nov,21,2023]

En el año 2010, existió una propuesta de colaboración con Ecopetrol para producir éteres de glicerina junto a la planta de Ecodiesel en Barrancabermeja, que tenía una capacidad de 810 toneladas al mes. Ésta era sólo una de las muchas alternativas sugeridas para aprovechar plenamente el potencial de la glicerina. En 2016, Ecodiesel y Ecopetrol llevaron su colaboración al siguiente nivel asociándose con el Instituto de Biotecnología de la Universidad Nacional de Colombia. Juntos, establecieron una planta piloto centrada en la producción industrial de 1,3 propanediol (1,3 DOP) utilizando glicerina como materia prima. El producto final, crucial en la

fabricación de polímeros como el PTT y el poliuretano, además de tensioactivos, se logra mediante la degradación de la glicerina por la bacteria *Clostridium* sp. Este avance innovador ha sido posible gracias al destacado equipo de investigadores especializados en Bioprocesos y Bioprospección del IBUN [3].

## **2.2. Proceso industrial**

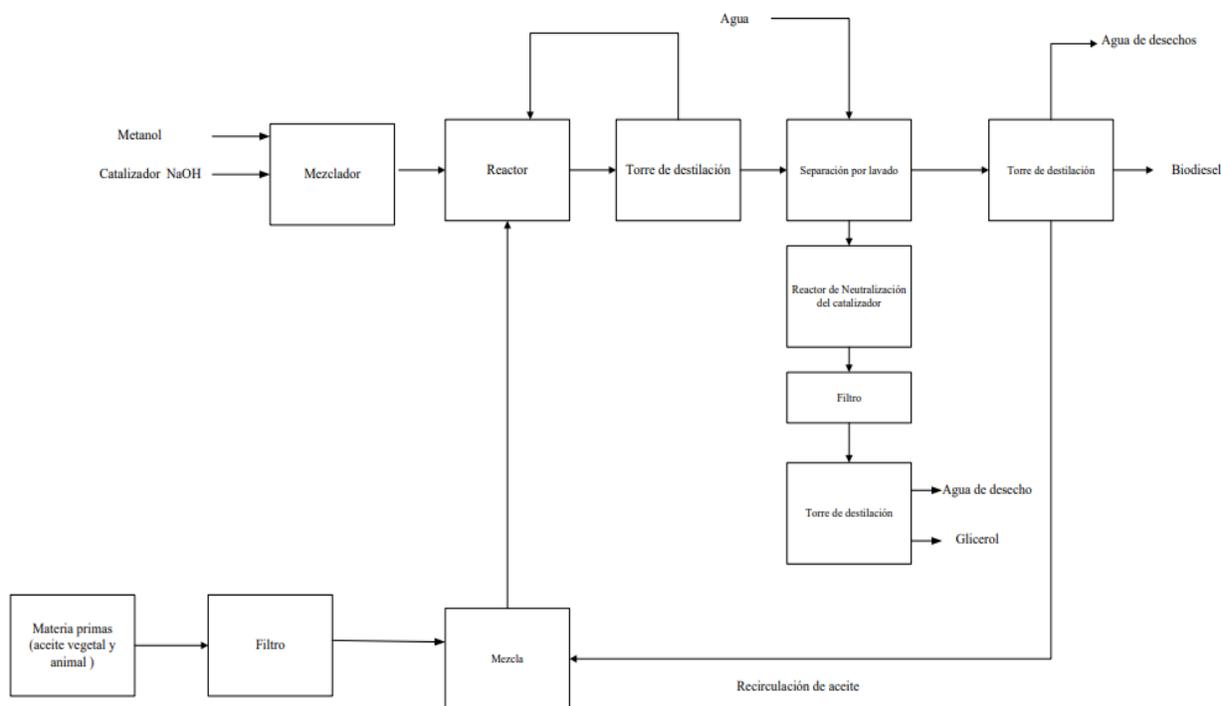
### ***2.2.1. Proceso del biodiesel en la industrial***

El proceso de producción de biodiesel Figura 8, más usado en la industria es la catálisis básica homogénea, donde el catalizador NaOH es mezclado con metanol y aceite. Esta mezcla es calentada a 60°C y bombeada al reactor de transesterificación, donde los aceites son convertidos en glicerol y ésteres metílicos (biodiesel). Debido a que la conversión no es completa hay una gran cantidad de aceite y metanol que debe ser separada y recirculada al reactor.

El proceso de separación comienza con una torre de destilación donde el metanol es separado del resto de componentes y bombeado de nuevo al reactor. La corriente de fondos de la columna de destilación es llevada a una columna de separación líquido-líquido donde el solvente usado es agua. El agua separa el glicerol y el catalizador del biodiesel y el aceite. Una vez separado el biodiesel, se procede a su purificación, proceso donde se usa una columna de destilación que separa el agua residual y el aceite del biodiesel. Posteriormente el aceite es recirculado al reactor. Para poder vender el glicerol este debe tener un alto grado de pureza, por ello se procede a eliminar el catalizador y el agua residual que contenga. La corriente del glicerol es bombeada a un reactor donde se le agrega ácido fosfórico para neutralizar el NaOH y formar la sal sólida fosfato de sodio que se separa del glicerol mediante un filtro. Finalmente, el glicerol se purifica eliminando el agua residual en una torre de destilación [52].

**Figura 8.**

*Esquema de proceso para la producción de biodiesel*



*Nota.* Diagrama del proceso convencional de producción de biodiesel Tomado Análisis de nuevas tecnologías para la producción de biodiesel con fluidos supercríticos [Trabajo de grado ,2021., p.27] Disponible: [53] [Acceso: Dic,14,2023]

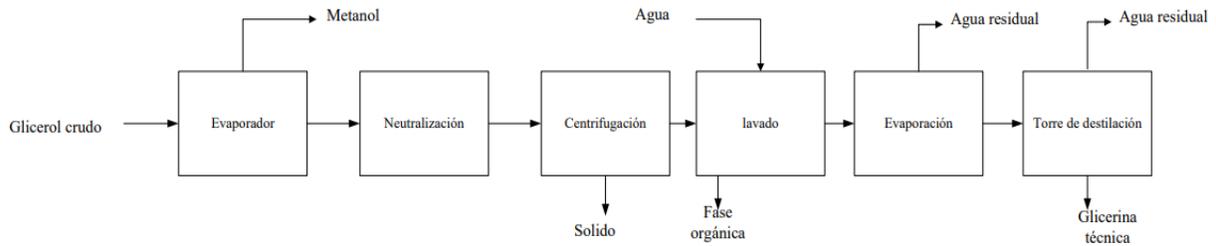
### **2.2.2. Proceso del glicerol refinado en la industria**

El procedimiento de purificación en la Figura 9, empleando como materia prima la glicerina cruda, una composición que incluye glicerol, agua, sales, metanol y ácidos grasos libres. Esta glicerina se obtiene como subproducto derivado de la producción de biodiesel. En una primera fase, se somete a un proceso de evaporación, del cual se extrae una corriente de metanol. Posteriormente, una segunda corriente ingresa al proceso de neutralización, utilizando una solución ácida específica. Las sales generadas, así como las cenizas o proteínas presentes, son eliminadas durante la etapa de centrifugación. La corriente resultante, dirigida hacia la centrífuga, es sometida a un lavado con agua para eliminar los triglicéridos presentes en la mezcla.

Acto seguido, la mezcla avanza hacia la etapa de evaporación, donde se procede a la extracción del agua residual del proceso. Simultáneamente, se implementó una ruta adicional para obtener glicerol a través de una torre de destilación, generando dos corrientes separadas: una de agua residual y otra de glicerol refinado [54].

**Figura 9.**

*Esquema de proceso para la producción de glicerol refinado*



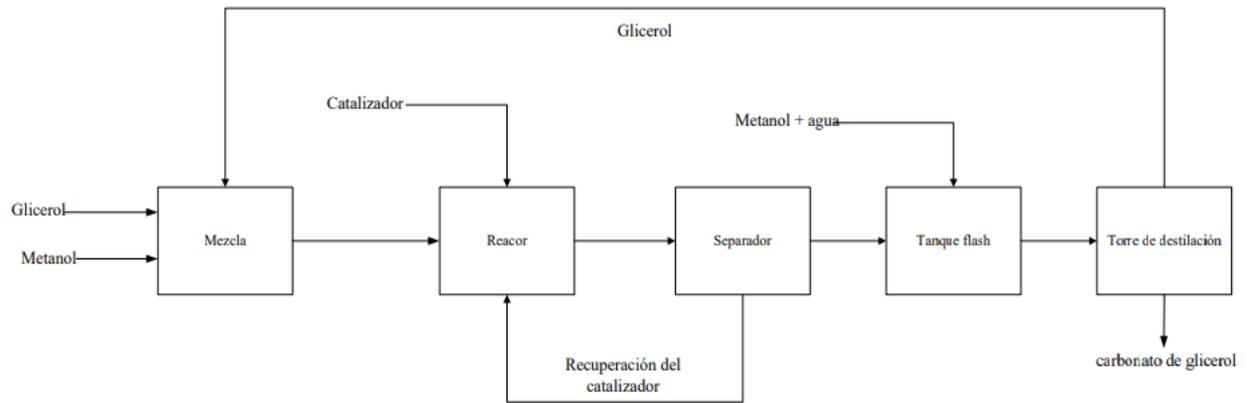
*Nota.* Diagrama del proceso convencional de producción de glicerol refinado [Artículo científico ,2011.]Disponible:[55], [56] [Acceso: Dic,14,2023]

**2.2.3. Proceso de carbonato de glicerol en la industria**

En el proceso de producción de carbonato de glicerol, se ejecutan una serie de etapas en un sistema de transesterificación, como se representa en la Figura 10 del esquema de proceso industrial. En la primera fase, se procede a la mezcla de metanol con glicerol, ambas sustancias son introducidas en el reactor. Se adiciona una segunda corriente que contiene el catalizador, lo que conduce a la formación de una mezcla que contiene carbonato de glicerol y catalizador. Esta mezcla se dirige luego hacia un separador, donde se divide en dos corrientes distintas: una destinada a la recuperación del catalizador y otra que se dirige hacia un tanque flash. En este tanque flash se lleva a cabo la separación de metanol y agua, generando así una segunda corriente que se canaliza hacia una torre de destilación, se producen dos corrientes adicionales: la primera, es la recirculación de glicerol. Por otro lado, la segunda corriente de fondos es la producción del carbonato de glicerol [57].

**Figura 10.**

*Esquema de proceso para la producción de carbonato de glicerol*



*Nota.* Diagrama del proceso convencional de producción de carbonato de glicerol [Artículo científico ,2011.]Disponible [58], [59] [Acceso: Dic,14,2023]

### 3. DETERMINAR LOS PARÁMETROS CINÉTICOS Y ESPECIFICACIONES

#### 3.1. Cinética aparente

Para plantear la cinética aparente de la reacción de transesterificación entre el glicerol y DMC que se propone en los artículos [1], [2], se asume un sistema de reacción heterogéneo, debido a que los catalizadores usados son óxido de calcio (CaO) y escoria de carburo residual en estado sólido y los reactivos se encuentran en fase líquida. La reacción que representa esta ruta catalítica es la que se indica a continuación:

#### Reacción 1.

Transesterificación del glicerol y DMC



Como consecuencia, la velocidad de la reacción puede ser expresada en relación con una reacción reversible mediante la siguiente ecuación.

#### Ecuación 2.

Velocidad de reacción

$$-r'_A = kC_A^\alpha C_B^\beta - k_{inv}C_C^\gamma C_D^\delta$$
$$-r'_A = k[Glicerol]^\alpha [DMC]^\beta - k_{inv}[CG]^\gamma [Metanol]^\delta$$

Donde:

- k: Constante de velocidad de la reacción directa.
- C<sub>A</sub>: Concentración del glicerol (mol/L).
- C<sub>B</sub>: Concentración del DMC (mol/L).
- k<sub>inv</sub>: Constante de velocidad de la reacción indirecta.
- C<sub>C</sub>: Concentración del carbonato de glicerol(mol/L).
- C<sub>D</sub>: Concentración del metanol (mol/L).
- α : Orden de reacción del glicerol.
- β : Orden de reacción del dimetil carbonato.
- γ : Orden de reacción del carbonato de glicerol.
- δ : Orden de reacción del metanol

Las concentraciones en un tiempo determinado tiempo se calculan a partir de la conversión y las concentraciones iniciales, como se muestra en la Tabla 7 [23].

**Tabla 7.**

*Estequiométrica*

ESPECIE	INICIO	FINAL
A (glicerol)	$C_{A0}$	$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$
B (dimetil carbonato)	$C_{B0}$	$C_B = C_{B0} - C_{A0}X_A$
C (carbonato de glicerol)	$C_{C0} = 0$	$C_C = C_{A0}X_A$
D (metanol)	$C_{D0} = 0$	$C_D = 2C_{A0}X_A$
Inertes	$C_{I0}$	$C_I = C_{I0}$

*Nota.* Tabla de estequiometría de glicerol. Tomado de: H. Fogler - Elements of Chemical Reaction Engineering,- Pearson Disponible[23] [libro.2022]

### 3.2. Reactor Batch: Estudio de Modelado de Synthesis of glycerol carbonate from glycerol and dimethyl carbonate by transesterification: Catalyst screening and reaction optimization

#### 3.2.1. Ecuaciones para el diseño del reactor Batch [1]

Se modeló un reactor discontinuo ideal en estado estacionario, con reactivos uniformemente distribuidos. Se asumió que no hay problemas de transferencia de masa. La velocidad de reacción se basa en la masa del catalizador sólido, W, debido a que la reacción es heterogénea (líquido-sólido).

- Balance de moles del glicerol dentro del sistema

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$$

Un reactor discontinuo no tiene flujo de entrada ni flujo de salida mientras se lleva a cabo la reacción. Por lo tanto, la suma de los flujos de materia de entrada y salida es igual a cero. Lo que implica que la ecuación de balance de materia se simplifica a:

$$\text{Generación} = \text{Acumulación}$$

Se supone que la velocidad de reacción es constante en todo el volumen del reactor. Por lo tanto, el balance de moles del sistema se puede representar de la siguiente forma:

### Ecuación 3.

Balance de moles para el reactor Batch

$$r'_A \cdot W = \frac{dN_A}{dt}$$

Donde:

- t: Tiempo (min).
- $r'_A$ : Velocidad de desaparición del glicerol (mol/(g<sub>cat</sub>·s))
- W: Masa del catalizador CaO (g<sub>cat</sub>).
- $N_A$ : Número de moles de la especie A (glicerol) en un tiempo determinado (mol).

Para expresar la ecuación (3) en términos de conversión de la especie A ( $X_A$ ) y la concentración inicial ( $N_{A0}$ ), se utiliza la siguiente ecuación [23]:

### Ecuación 4.

Concentración de la especie A en determinado tiempo

$$N_A = N_{A0}(1 - X_A)$$

Se relaciona el cambio en el número de moles de la especie A en función de la conversión con la siguiente ecuación:

### Ecuación 5.

Relación entre la variación de la concentración y la conversión

$$dN_A = d(N_{A0} - N_{A0}X_A)$$

$$dN_A = d(-N_{A0}X_A)$$

La ecuación (5) indica que a medida que aumenta la tasa de conversión ( $dX_A$ ), el cambio en el número de moles de la especie A ( $dN_A$ ) disminuye.

Sustituyendo la ecuación (5) en el balance de moles y despejando la conversión en función del tiempo, se obtiene:

### **Ecuación 6.**

Conversión en función del tiempo

$$\frac{dX_A}{dt} = - \frac{r'_A \cdot W}{N_{A0}}$$

La ecuación (6) se puede expresar en términos de moles de catalizador ( $N_{cat}$ ) y peso molecular de catalizador ( $PM_{cat}$ ) utilizando la siguiente ecuación [46]

### **Ecuación 7.**

Masa de catalizador

$$W = N_{cat} \cdot PM_{cat}$$

Reemplazando la ecuación (7) en la ecuación (6), se obtiene la ecuación final de diseño del reactor Batch:

### **Ecuación 8.**

Conversión del reactor Batch

$$\frac{dX_A}{dt} = - \frac{r'_A \cdot N_{cat} \cdot PM_{cat}}{N_{A0}}$$
$$\frac{dX_A}{dt} = -r'_A \cdot CGR \cdot PM_{cat}$$

Donde:

- CGR: Relación molar de catalizador/glicerol.
- $PM_{cat}$ : Peso molecular del catalizador CaO (g/mol).

- $-r'_A$ : Velocidad de desaparición del glicerol (mol/(g<sub>cat</sub>·s)).

$$\frac{dX_A}{d\tau} = -\frac{r'_A \cdot \rho_{lecho}}{C_{A0}}$$

Donde:

- $\rho_{lecho}$ : Densidad del lecho (g/L).
- $C_{A0}$ : Concentración inicial del glicerol (mol/L).
- $-r'_A$ : Velocidad de desaparición del glicerol (mol/(g<sub>cat</sub>·s)).

### Ecuación 9.

*Función objetivo*

$$F.O. = \min \sum_{i=1}^n (X_{A_{Experimental,i}} - X_{A_{Calculada,i}})^2$$

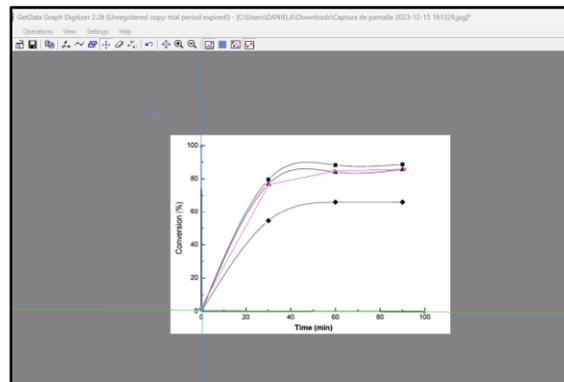
#### 3.2.2. Selección de los pasos

Se recopiló la toma de los datos de conversión a partir de la gráfica [1], presentada como la figura 5 en sus artículos. Sin embargo, el artículo no proporciona los valores numéricos de las diferentes correlaciones; en su lugar, se utilizó un software llamado GetData Graph Digitizer.

La Figura 11 y la Tabla 8 presenta la lectura de datos utilizando la herramienta GetData Graph Digitizer, para obtener los datos de conversión en los ejes (x, y) a diferentes temperaturas de 363.15 K y 348.15 K, también a tiempos determinados (0, 30, 60 y 90) minutos.

**Figura 11.**

*Toma de datos del artículo [1]*



**Nota.** Se utiliza el software GetData Graph Digitizer para obtener la variación de la conversión versus el tiempo de reacción. Tomado:[1]

**Tabla 8.***Datos experimentales*

# Prueba	T (K)	Conversión (%)			
		Tiempo (min)			
		0	30	60	90
1	363.15	0	76.886%	83.949%	85.714%
2	348.15	0	54.414%	65.971%	65.971%

*Nota.* La tabla muestra los datos experimentales utilizados para el cálculo de los parámetros cinéticos. Relación molar catalizador/glicerol (CGR) de 0.12 y una relación molar dimetil carbonato/glicerol ( $\theta_B$ ) de 7. Tomada [1]

### 3.2.3. Parámetros cinéticos

Las condiciones iniciales, datos experimentales e información adicional utilizados en la elaboración del modelo del reactor Batch se encuentran detallados en las Tablas 8, 9 y 10, respectivamente. Estos datos han sido obtenidos a partir de dos pruebas realizadas de acuerdo con la descripción proporcionada en el primer artículo [1].

**Tabla 9.***Condiciones iniciales*

Parámetro	Valor	Dimensión
Número de moles iniciales de glicerol	0.217	mol
Número de moles iniciales de DMC	1.5191	mol
Número de moles iniciales del catalizador (CaO)	0.026	mol
Volumen del reactor	0.25	L

*Nota.* La tabla muestra las condiciones iniciales para el diseño del reactor Batch.

**Tabla 10.***Parámetros adicionales*

Parámetro	Valor	Dimensión
Peso molecular del catalizador CaO	56.08	g/mol
Constante de los gases ideales	0.008314	kJ/(mol·K)
Densidad del lecho	3340	g/L

*Nota.* La tabla muestra los parámetros adicionales para el diseño del reactor Batch.

En el modelamiento del reactor Batch se estudiaron dos tipos de modelos cinéticos: elemental y no elemental. Los parámetros cinéticos calculados para el primer modelo se detallan en la Tabla 11, mientras que los correspondientes al segundo modelo se presentan en la Tabla 12.

**Tabla 11.***Parámetros cinéticos de la reacción elemental*

Parámetro	Valor	Dimensión
Factor preexponencial (A)	$1.9405 \times 10^8$	$L^2/(g_{cat} \cdot s \cdot mol)$
Factor preexponencial inverso ( $A_{inv}$ )	00.0013	$L^3/(g_{cat} \cdot s \cdot mol^2)$
Constante de velocidad (k)	$8.0908 \times 10^{-4}$	$L^2/(g_{cat} \cdot s \cdot mol)$
Constante de velocidad inversa ( $k_{inv}$ )	$1.4 \times 10^{-3}$	$L^3/(g_{cat} \cdot s \cdot mol^2)$
Energía de activación ( $E_a$ )	75.8501	kJ/mol
Energía de activación inversa ( $E_{a\ inv}$ )	$1.3827 \times 10^{-5}$	kJ/mol
Orden de reacción del glicerol ( $\alpha$ )	1	
Orden de reacción del DMC ( $\beta$ )	1	
Orden de reacción del CG ( $\gamma$ )	1	
Orden de reacción del metanol ( $\delta$ )	2	

*Nota.* La tabla muestra los parámetros cinéticos para la reacción elemental.

**Tabla 12.***Parámetros cinéticos de la reacción no elemental*

<b>Parámetro</b>	<b>Valor</b>	<b>Dimensión</b>
Factor preexponencial (A)	4.431305 x 10 <sup>3</sup>	L <sup>1.0896</sup> /(g <sub>cat</sub> · s · mol <sup>0.0896</sup> )
Factor preexponencial inverso (A <sub>inv</sub> )	0.00444	L <sup>1.6719</sup> /(g <sub>cat</sub> · s · mol <sup>0.6719</sup> )
Constante de velocidad (k)	0.00106	L <sup>1.0896</sup> /(g <sub>cat</sub> · s · mol <sup>0.0896</sup> )
Constante de velocidad inversa (k <sub>inv</sub> )	0.00435	L <sup>1.6719</sup> /(g <sub>cat</sub> · s · mol <sup>0.6719</sup> )
Energía de activación (E <sub>a</sub> )	44.11815	kJ/mol
Energía de activación inversa (E <sub>a inv</sub> )	0.0587	kJ/mol
Orden de reacción del glicerol (α)	0.30914	
Orden de reacción del DMC (β)	0.78054	
Orden de reacción del CG (γ)	1.05367	
Orden de reacción del metanol (δ)	0.61822	

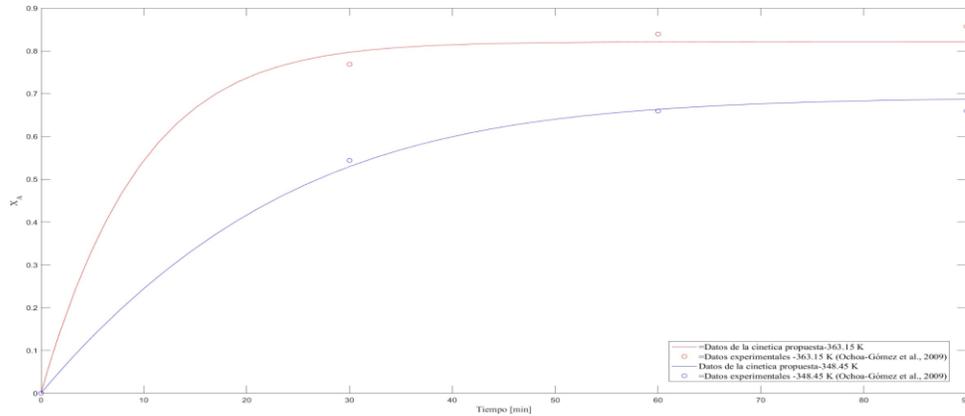
*Nota.* La tabla muestra los parámetros cinéticos para la reacción no elemental.

### **3.2.4. Perfiles de conversión del reactor Batch: Modelo cinético elemental y no elemental**

En la Figura 12, se presentó una comparación visual entre los perfiles de conversión a lo largo del tiempo, evaluando el comportamiento hasta un tiempo de 90 minutos. En esta representación gráfica, los círculos reflejaron los datos experimentales recopilados [1], proporcionando una representación visual de la dinámica de la conversión en condiciones experimentales reales. Las curvas trazadas representan la evolución teórica de la conversión calculada mediante el modelo cinético elemental, donde el eje de abscisas corresponde al tiempo y el eje de ordenadas a la conversión.

**Figura 12.**

*Comparación entre los perfiles de conversión experimental y modelada mediante cinética elemental (1)*



**Nota.** La figura muestra los perfiles de conversión de los datos experimentales y de los valores predichos mediante el modelado cinético (elemental) a temperaturas de 348.15 K (curva y círculos azules) y 363.15 K (curva y círculos rojos), con una relación molar catalizador/glicerol (CGR) de 0.12 y una relación molar dimetil carbonato/glicerol ( $\theta_B$ ) de 7.

Para una comprensión más detallada de la evolución temporal de la conversión, se presentó la Tabla 13, proporcionando de manera precisa la información representada en la Figura 12. Esta tabla resume con detalle los datos teóricos en diferentes puntos temporales, ofreciendo una visión cuantitativa de la convergencia de los valores teóricos del modelo cinético elemental a lo largo del tiempo.

**Tabla 13.**

*Evolución de la conversión modelada mediante cinética elemental (1)*

<b>TIEMPO (min)</b>		<b>0</b>	<b>30</b>	<b>60</b>	<b>90</b>
<b>CONVERSIÓN TEÓRICA-MODELO CINÉTICO ELEMENTAL</b>	<b>348.15 K</b>	0	0.529973	0.664589	0.687533
	<b>363.15 K</b>	0	0.797613	0.821353	0.822546

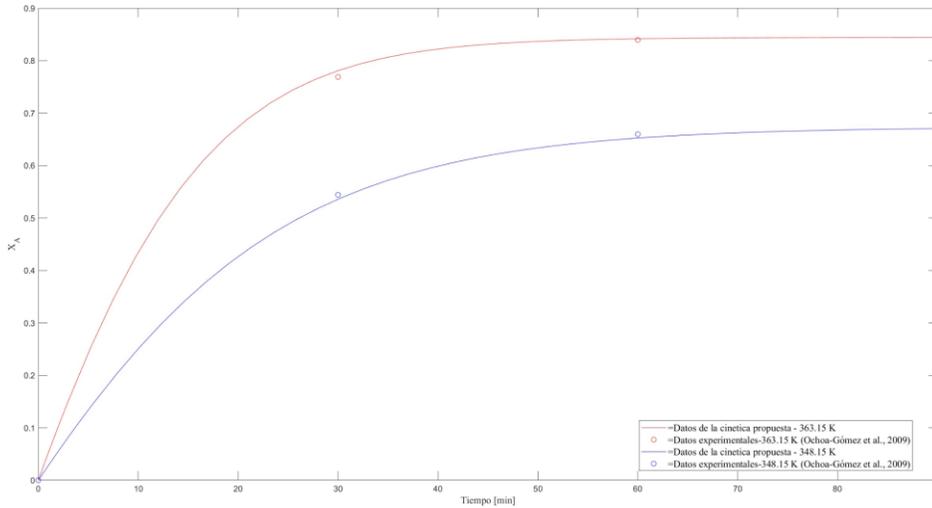
**Nota.** La tabla presenta la evolución de la conversión a diferentes puntos temporales, mostrando los valores teóricos del modelo cinético elemental.

En la Figura 13, se profundizó en la comprensión de la cinética del proceso, ofreciendo otra perspectiva visual de la comparación entre datos experimentales y valores teóricos a lo largo de un periodo de 90 minutos. Al igual que en la Figura 12, donde el eje de las abscisas representa el

tiempo y el eje de ordenadas la conversión, los círculos denotan los datos experimentales, mientras que las curvas ilustraron las predicciones teóricas del modelo cinético no elemental.

**Figura 13.**

*Comparación entre los perfiles de conversión experimental y modelada mediante cinética no elemental (1)*



**Nota.** La figura muestra los perfiles de conversión de los datos experimentales y de los valores predichos mediante el modelo cinético (no elemental) a temperaturas de 348.15 K (curva y círculos azules) y 363.15 K (curva y círculos rojos), con una relación molar catalizador/glicerol (CGR) de 0.12 y una relación molar dimetil carbonato/glicerol ( $\theta_B$ ) de 7.

La Tabla 14 ofrece un resumen detallado de los datos teóricos generados por el modelo cinético no elemental en varios momentos temporales indicados en la Figura 13.

**Tabla 14.**

*Evolución de la conversión modelada mediante cinética no elemental (1)*

<b>TIEMPO (min)</b>		<i>0</i>	<i>30</i>	<i>60</i>	<i>90</i>
<b>CONVERSIÓN TEÓRICA- MODELO CINÉTICO NO ELEMENTAL</b>	<i>348.15 K</i>	0	0.536074	0.65305	0.670324
	<i>363.15 K</i>	0	0.781302	0.842706	0.844169

**Nota.** La tabla presenta la evolución de la conversión a diferentes puntos temporales, mostrando los valores teóricos del modelo cinético no elemental.

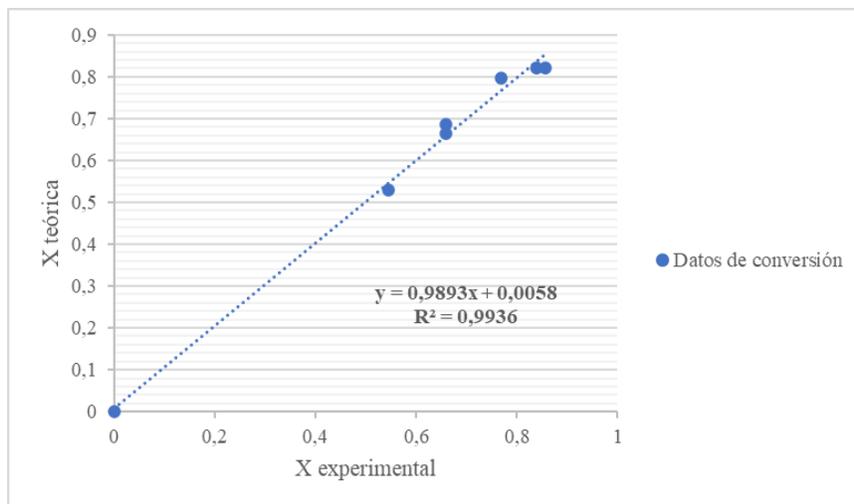
Al examinar el comportamiento de las reacción elemental y no elemental a través de los datos experimentales presentados en el primer artículo analizado en este trabajo [1], se observa una notable similitud entre ambas. Sin embargo, es evidente que la curva cinética asociada con la reacción no elemental muestra una mayor concordancia con los datos experimentales. Ambas representaciones gráficas revelan un incremento sustancial en la conversión, manteniéndose constante hasta aproximadamente los 60 minutos, momento en el cual la conversión se estabiliza en ambas curvas.

### 3.2.5 Gráficas de paridad de conversión del glicerol teórica y experimental

Las Figuras 14 y 15, representadas mediante gráficos de dispersión, presentan de manera visual los datos experimentales y teóricos calculados (modelo cinético elemental y no elemental). En el eje x se encuentran los resultados experimentales extraídos del primer artículo [1], mientras que en el eje y se sitúan los valores teóricos generados por el software de modelación Matlab®. Esta representación facilita la comparación entre la dispersión de los datos experimentales y los obtenidos mediante el modelado, permitiendo una evaluación con un índice R2 cercano a 1 para ambos conjuntos de resultados.

**Figura 14.**

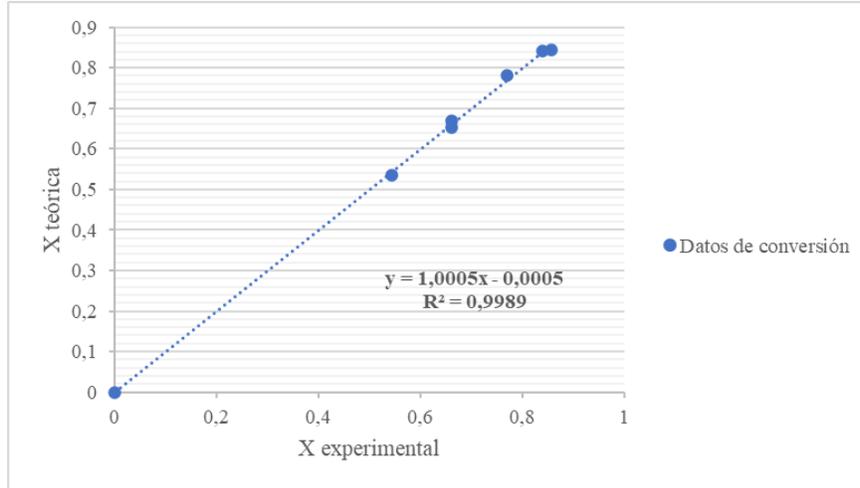
*Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética elemental) (1)*



**Nota.** La gráfica exhibe la conversión teórica ( $X_{teórica}$ ) para la cinética elemental (eje y), en contraste con la conversión experimental ( $X_{Exp}$ ) expuesta en el primer artículo (eje x) [1]. Se evidencia un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) de 0.9936.

**Figura 15.**

*Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética no elemental) (1)*



*Nota.* La gráfica exhibe la conversión teórica ( $X_{teórica}$ ) para la cinética no elemental (eje y), en contraste con la conversión experimental ( $X_{Exp}$ ) expuesta en el primer artículo (eje x) [1]. Se evidencia un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) de 0,9989.

Se observó que la linealización más adecuada y cercana a los datos suministrados se logró mediante la cinética no elemental, exhibiendo un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) de 0,9989, que se aproximó significativamente a la unidad. De manera comparable, la linealización de la cinética elemental también presentó una proximidad notable a los datos experimentales, con un  $R^2$  de 0,9936. Las diferencias observadas en esta comparación entre ambas cinéticas con los datos experimentales no son sustancialmente elevadas.

### **3.2.6. Análisis estadístico para la selección del modelo cinético: Elemental o no elemental**

La presente investigación ha sido sometida a un análisis que abarca tanto el modelo cinético elemental como el no elemental, con el propósito de determinar cuál de ellos se ajusta adecuadamente al comportamiento experimental de la reacción, evaluando simultáneamente la conversión del glicerol. Este análisis se llevó a cabo mediante la aplicación de la prueba t de Student para muestras independientes. Los resultados se detallan en la Tabla 13, que incluye los valores del artículo [1], así como los valores obtenidos para cada cinética propuesta.

**Tabla 15.***Conversión del glicerol (1)*

<b>DATOS DEL ARTÍCULO</b> “SYNTHESIS OF GLYCEROL CARBONATE FROM GLYCEROL AND DIMETHYL CARBONATE BY TRANSESTERIFICATION: CATALYST SCREENING AND REACTION OPTIMIZATION” [1].	<b>DATOS DE CONVERSIÓN - MODELO CINÉTICO NO ELEMENTAL</b>	<b>DATOS DE CONVERSIÓN - MODELO CINÉTICO ELEMENTAL</b>
0	0	0
0.544141	0.536074	0.529973
0.659711	0.65305	0.664589
0.659711	0.670324	0.687533
0.76886	0.781302	0.797613
0.839486	0.842706	0.821353
0.857143	0.844169	0.822546

*Nota.* Datos de conversión de glicerol.

Se presentan los resultados de la prueba t para muestras independientes en relación con tanto el modelo cinético elemental como el no elemental. El objetivo es discernir cuál de estos modelos se adapta mejor a la información experimental y si sus varianzas presentan similitudes. Asimismo, se lleva a cabo un análisis de hipótesis para evaluar la validez de la hipótesis nula y alternativa, proporcionando un enfoque detallado para respaldar las conclusiones derivadas del estudio.

**Hipótesis nula**

$$H_0: \mu_1 = \mu_2$$

**Hipótesis alternativa**

$$H_i: \mu_1 \neq \mu_2$$

- $H_0$ : No hay una diferencia significativa de la conversión entre los datos del artículo y los datos

de la cinética no elemental y la elemental.

- $H_i$ : Si hay una diferencia significativa de la conversión entre datos del artículo y los datos de la cinética no elemental y elemental.

Se efectúa una prueba estadística para evaluar la existencia de diferencias de los valores de conversión de los dos conjuntos de datos obtenidos a partir de los modelos cinéticos propuestos (elemental y no elemental) en comparación con los valores experimentales, mediante la siguiente ecuación:

#### **Ecuación 10.**

Prueba t para muestras independientes [48].

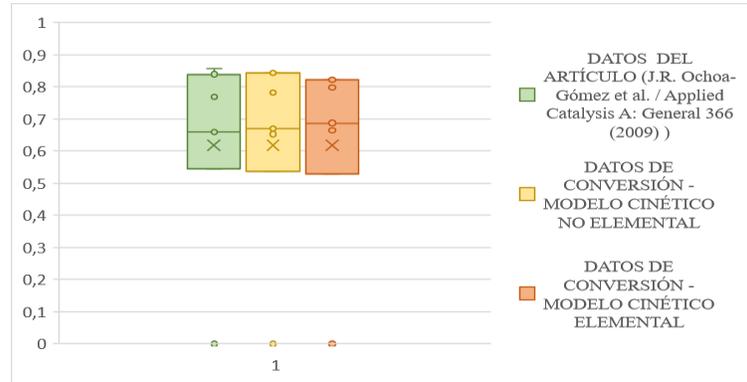
$$t = \frac{\underline{X}_1 - \underline{X}_2}{\sqrt{\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2}}}$$

- $\underline{X}_1$ : Valor medio del primer grupo
- $\underline{X}_2$ : Valor medio del segundo grupo
- $n_1$ : Tamaño del primer grupo
- $n_2$ : Tamaño del segundo grupo
- $s_1$ : Desviación típica del primer grupo
- $s_2$ : Desviación típica del segundo grupo

En la Figura 16, se presenta un diagrama de caja que ilustra los datos de conversión de glicerol para cada conjunto de datos. Los diagramas de caja se destacan como una herramienta valiosa para la visualización de la distribución de datos. En este contexto, se observa que los datos de ambas reacciones se encuentran altamente concentrados alrededor de la media, según la representación gráfica proporcionada.

**Figura 16.**

*Diagrama de caja*



*Nota.* Diagrama de cajas para mostrar los datos

Este estudio se ha centrado en realizar un análisis estadístico comparativo entre reacciones elementales y no elementales, utilizando muestras obtenidas de la simulación en Matlab® y del estudio realizado por Ochoa-Gómez et al. (2009). Los resultados obtenidos mostraron una sorprendente similitud en los datos entre ambas reacciones, lo que inicialmente sugiere una equivalencia en su comportamiento.

Sin embargo, se identificó un punto crucial de diferenciación en la reacción no elemental exhibió una precisión notablemente superior en los datos analizados, presentando un coeficiente de variación del 16.51%. Este indicador específico apunta hacia una menor dispersión de los datos asociados a la reacción no elemental en relación con su media, en contraposición a la mayor dispersión observada en los datos de la reacción elemental.

Este resultado enfatiza la asociación directa de la reacción no elemental con una mayor precisión y fiabilidad en las mediciones experimentales del artículo en comparación con la reacción elemental. Esta precisión mejorada puede tener implicaciones significativas en la interpretación y aplicación de estos resultados en diversos campos, destacando la importancia de considerar la fiabilidad de los datos en análisis posteriores o en la aplicación práctica de estos hallazgos.

### **3.3. Modelamiento del reactor Batch: Artículo [2]**

Este artículo *Synthesis of Glycerol Carbonate from Glycerol and Dimethyl Carbonate Catalyzed by Solid Base Catalyst Derived from Waste Carbide Slag* [2], presenta el desarrollo de un nuevo

catalizador de base sólida derivado de escoria de carburo residual para la síntesis de carbonato de glicerol (GC) a partir de glicerol y carbonato de dimetilo (DMC). El GC es un compuesto químico valioso con una amplia gama de aplicaciones, incluida la producción de plásticos, detergentes y cosméticos. Los métodos tradicionales para producir GC a menudo son costosos y perjudiciales para el medio ambiente. El uso de la escoria de carburo residual como fuente de material catalítico ofrece un enfoque más sostenible y rentable. Los investigadores prepararon el catalizador de base sólida impregnando la escoria de carburo residual con carbonato de sodio ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) y calcinándola a diferentes temperaturas. Luego evaluaron la actividad catalítica de los catalizadores preparados en la reacción de transesterificación de glicerol y DMC.

### 3.3.1. Ecuaciones para el diseño del reactor Batch

Balance de moles del glicerol dentro del sistema:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$$

En un reactor discontinuo, no hay flujos de entrada ni de salida mientras ocurre la reacción. Por tanto, la ecuación de balance de materia se reduce a:

$$\text{Generación} = \text{Acumulación}$$

Se asume que la velocidad de reacción es constante. Por lo tanto, el balance de moles del sistema se puede representar con la ecuación (3):

$$r'_A \cdot W = \frac{dN_A}{dt}$$

Donde:

- t: Tiempo (min).
- $r'_A$ : Velocidad de desaparición del glicerol ( $\text{mol}/(\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{s})$ ).
- W: Masa del catalizador CS ( $\text{g}_{\text{cat}}$ ).
- $N_A$ : Concentración de la especie A (glicerol) en un tiempo determinado (mol).

La ecuación (3) puede expresarse en función de la conversión de la especie A ( $X_A$ ) y la concentración inicial ( $N_{A0}$ ) mediante el uso de la ecuación (4), que se indica a continuación [23]:

$$N_A = N_{A0}(1 - X_A)$$

Para relacionar el cambio en el número de moles de la especie A en función de la conversión se utiliza la ecuación (5):

$$dN_A = d(-N_{A0}X_A)$$

A partir de la ecuación (5) y la ecuación (3), se puede obtener una expresión para el diseño del reactor Batch, representada por la ecuación (6):

$$\frac{dX_A}{dt} = -\frac{r'_A \cdot W}{N_{A0}}$$

Donde:

- W: Masa del catalizador CS (g<sub>cat</sub>).
- N<sub>A0</sub>: Moles iniciales del glicerol (mol).
- -r'<sub>A</sub>: Velocidad de desaparición del glicerol (mol/(g<sub>cat</sub>·s)).

Para los cálculos cinéticos se ha minimizado la función objetivo correspondiente al sumatorio del cuadrado de la diferencia entre la curva Conversión experimental y la curva Conversión calculada, esto se realiza integrando la ecuación diferencial correspondiente a la ecuación (8).

$$F.O. = \min \sum_{i=1}^n (X_{A_{Experimental,i}} - X_{A_{Calculada,i}})^2$$

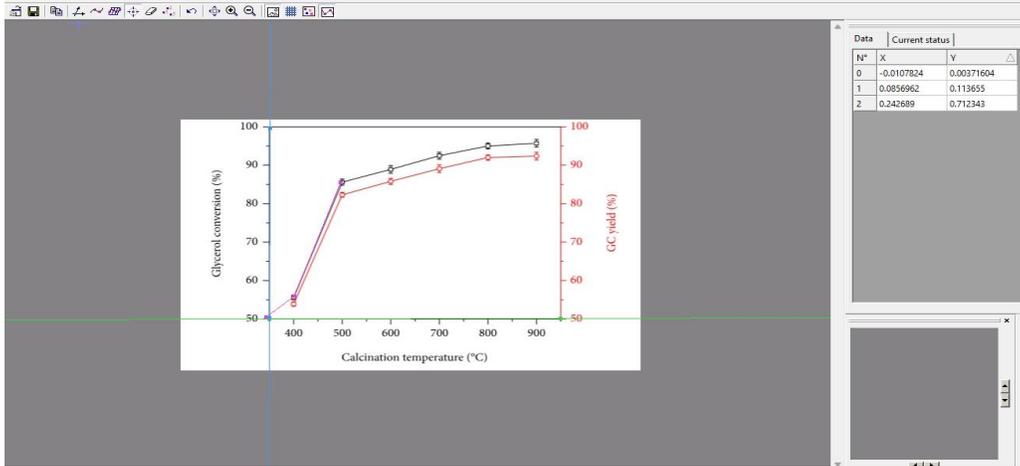
### 3.3.2. Selección de los pasos

Se recopiló la toma de los datos de conversión a partir de la gráfica [2], presentada como la figura 2 en sus artículos. Sin embargo, el artículo no proporciona los valores numéricos de las diferentes correlaciones; en su lugar, se utilizó un software llamado GetData Graph Digitizer.

En la Figura 15, se visualiza la recopilación de datos obtenidos a través de la herramienta GetData Graph. Además, en la Tabla 17 se detallan los datos experimentales proporcionados en el artículo [2].

**Figura 17.**

*Toma de datos del artículo [2]*



**Nota.** Se utiliza el software GetData Graph Digitizer para obtener la variación de la conversión versus el tiempo de reacción. Tomado:[2]

Estos datos se refieren a las conversiones de glicerol, representadas en el eje x, y el tiempo, representado en el eje y, a temperaturas de 348.15 K durante intervalos específicos de tiempo (0, 30, 60, 90, 120 y 150 minutos).

**Tabla 16.**

*Datos experimentales*

# Prueba	T (K)	Conversión (%)					
		Tiempo (min)					
		0	30	60	90	120	150
1	348.15	0	65.469%	85.469%	94.585%	94.989%	95.272%

**Nota.** La tabla muestra los datos experimentales para el diseño del reactor Batch Tomada: [2]

La Tabla 16 presenta los resultados experimentales obtenidos durante un lapso de tiempo, con intervalos de periodo de 30 minutos a una temperatura de 348.15 K, destinados al modelamiento del reactor Batch. Estos datos proporcionan una visión detallada del comportamiento de conversión del glicerol.

### 3.3.3. Parámetros cinéticos

La descripción detallada de las condiciones iniciales, datos experimentales e información adicional empleados para desarrollar el modelo del reactor Batch se halla especificada en las Tablas 16, 17

y 18, respectivamente. Estos datos han sido extraídos de dos pruebas llevadas a cabo según lo descrito en el segundo artículo estudiado [2].

**Tabla 17.**

*Condiciones iniciales*

Parámetro	Valor	Dimensión
Número de moles iniciales de glicerol	0.03	mol
Número de moles iniciales de DMC	0.15	mol
Masa del catalizador (Na <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> )	0.4881	g
Volumen del reactor	0.1	L

*Nota.* La tabla muestra las condiciones iniciales para el diseño del reactor Batch.

La Tabla 18 muestra los parámetros adicionales empleados en el modelamiento, los cuales fueron derivados de fuentes literarias [47][46].

**Tabla 18.**

*Parámetros adicionales*

Parámetro	Valor	Dimensión
Constante de los gases ideales	0.008314	kJ/(mol·K)
Densidad del lecho	925.22	g/L

*Nota.* La tabla muestra los parámetros adicionales para el diseño del reactor Batch.

En la simulación del reactor Batch, se examinaron dos cinéticas para la reacción: elemental y no elemental. Los parámetros cinéticos computados para la cinética elemental se presentan en la Tabla 19, mientras que los correspondientes a la cinética no elemental se detallan en la Tabla 20.

**Tabla 19.**

*Parámetros cinéticos de la reacción elemental*

Parámetro	Valor	Dimensión
Factor preexponencial (A)	$9.845 \times 10^6$	$L^2/(g_{cat} \cdot s \cdot mol)$
Factor preexponencial inverso (A <sub>inv</sub> )	$6.973 \times 10^{-4}$	$L^3/(g_{cat} \cdot s \cdot mol^2)$

Constante de velocidad (k)	0.0053	$L^2/(g_{cat} \cdot s \cdot mol)$
Constante de velocidad inversa ( $k_{inv}$ )	6.9730	$L^3/(g_{cat} \cdot s \cdot mol^2)$
Energía de activación ( $E_a$ )	61.7702	kJ/mol
Energía de activación inversa ( $E_{a inv}$ )	$4.0125 \times 10^{-6}$	kJ/mol
Orden de reacción del glicerol ( $\alpha$ )	1	
Orden de reacción del DMC ( $\beta$ )	1	
Orden de reacción del CG ( $\gamma$ )	1	
Orden de reacción del metanol ( $\delta$ )	2	

**Nota.** La tabla muestra los parámetros cinéticos para la reacción elemental.

### Tabla 20.

#### *Parámetros cinéticos de la reacción no elemental*

Parámetro	Valor	Dimensión
Factor preexponencial (A)	$9.443 \times 10^{-2}$	$L^{4.725}/(g_{cat} \cdot s \cdot mol^{3.725})$
Factor preexponencial inverso ( $A_{inv}$ )	$3.960 \times 10^{-4}$	$(L^{0.284} \cdot mol^{0.716}) / (g_{cat} \cdot s)$
Constante de velocidad (k)	$7.048 \times 10^{-4}$	$L^{4.725}/(g_{cat} \cdot s \cdot mol^{3.725})$
Constante de velocidad inversa ( $k_{inv}$ )	$3.955 \times 10^{-4}$	$(L^{0.284} \cdot mol^{0.716}) / (g_{cat} \cdot s)$
Energía de activación ( $E_a$ )	40.83	kJ/mol
Energía de activación inversa ( $E_{a inv}$ )	0.0031	kJ/mol
Orden de reacción del glicerol ( $\alpha$ )	0.361	
Orden de reacción del DMC ( $\beta$ )	4.364	
Orden de reacción del CG ( $\gamma$ )	0.0038	
Orden de reacción del metanol ( $\delta$ )	0.280	

**Nota.** La tabla muestra los parámetros cinéticos para la reacción no elemental.

Las Tablas 19 y 20 contienen los parámetros correspondientes a las cinéticas elementales y no elementales. En el caso de la cinética elemental, se especifican los órdenes de reacción atribuidos a cada componente. Para la cinética no elemental, se determinan los órdenes de reacción a partir de métodos iterativos utilizando el software Matlab®.

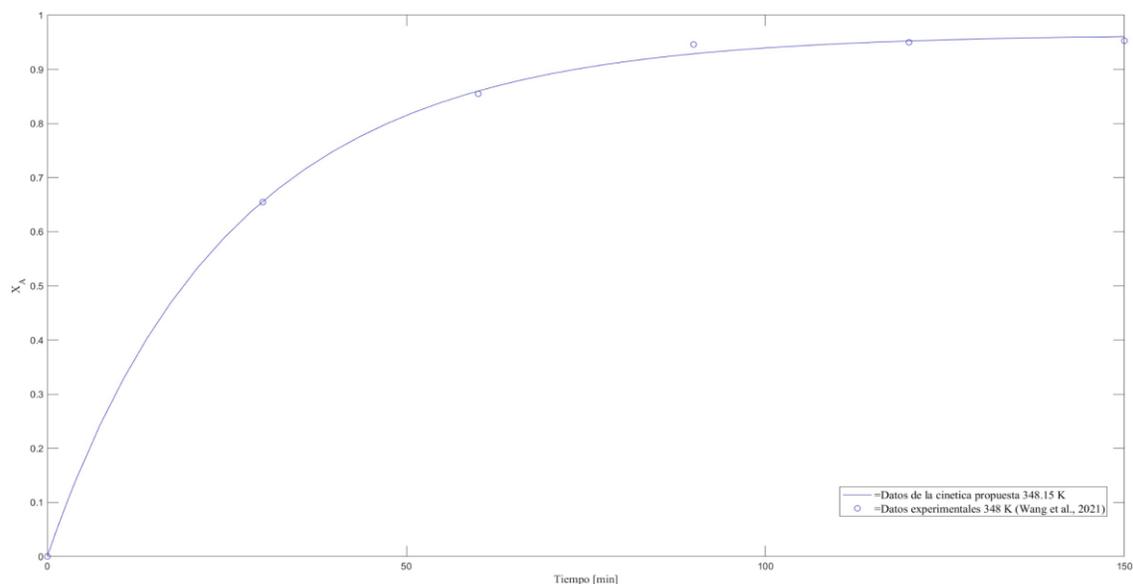
#### **3.3.4. Perfiles de conversión en el reactor Batch: Modelo cinético elemental y no elemental**

En la Figura 18, se mostró una comparación visual de los perfiles de conversión a lo largo del tiempo, analizando el comportamiento hasta un período de 90 minutos. En este gráfico, los círculos

representan los datos experimentales recopilados en el segundo artículo estudiado [2], ofreciendo una visualización de la dinámica de la conversión en condiciones experimentales reales. La curva trazada representa la progresión teórica de la conversión calculada mediante el modelo cinético elemental, donde el eje de abscisas corresponde al tiempo y el eje de ordenadas a la conversión.

**Figura 18.**

*Comparación de perfiles de conversión experimental y modelada de la reacción elemental*  
(2)



**Nota.** La figura muestra los perfiles de conversión de los datos experimentales y de los valores predichos mediante el modelado cinético (elemental) a una temperatura de 348.15 K, con una relación molar catalizador/glicerol (CGR) de 0.15 y una relación molar dimetil carbonato/glicerol ( $\theta_B$ ) de 5.

Con el fin de obtener una comprensión más minuciosa de la evolución temporal de la conversión, se exhibió la Tabla 21, la cual presenta de manera precisa la información reflejada en la Figura 18. Esta tabla sintetiza minuciosamente los datos teóricos en diversos momentos temporales, brindando una perspectiva cuantitativa sobre la convergencia de los valores teóricos del modelo cinético elemental a lo largo del tiempo.

**Tabla 21.**

*Evolución de la conversión modelada mediante cinética elemental (2)*

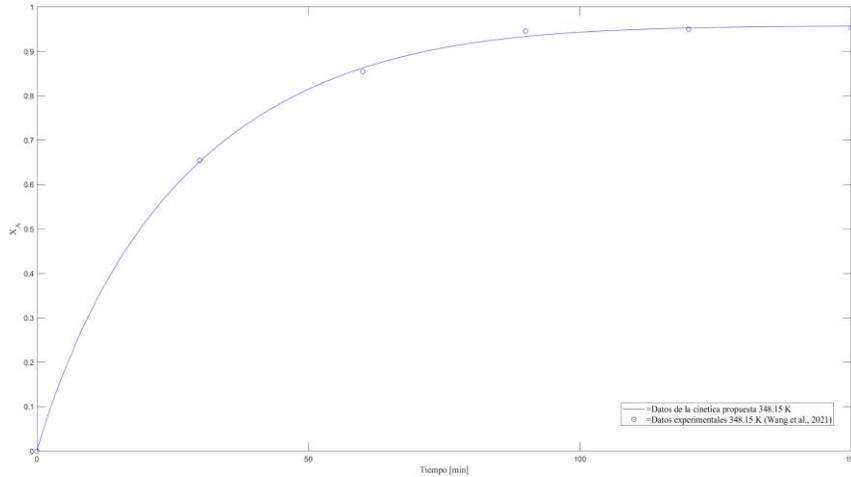
<i>TIEMPO (min)</i>		<i>0</i>	<i>30</i>	<i>60</i>	<i>90</i>	<i>120</i>	<i>150</i>
<b>CONVERSIÓN TEÓRICA- MODELO CINÉTICO ELEMENTAL</b>	<i>348.15 K</i>	0	0.652798	0.861492	0.952174	0.962112	0.968944

*Nota.* La tabla presenta la evolución de la conversión a diferentes puntos temporales, mostrando los valores teóricos del modelo cinético elemental.

En la Figura 19, se amplió la comprensión de la cinética del proceso al proporcionar una perspectiva adicional de la comparación entre los datos experimentales y los valores teóricos a lo largo de un periodo de 90 minutos. Al igual que en la Figura 18, donde el eje x representa el tiempo y el eje y la conversión, los datos experimentales están representados por círculos, mientras que la curva delinea las predicciones teóricas del modelo cinético no elemental.

**Figura 19.**

*Comparación de perfiles de conversión experimental y modelada de la reacción no elemental (2)*



*Nota.* La figura muestra los perfiles de conversión de los datos experimentales y de los valores predichos mediante el modelado cinético (no elemental) a una temperatura de 348.15 K, con una relación molar catalizador/glicerol (CGR) de 0.15 y una relación molar dimetil carbonato/glicerol ( $\theta_B$ ) de 5.

La Tabla 22 proporciona una síntesis pormenorizada de los datos teóricos generados por el modelo cinético no elemental en distintos instantes temporales de la Figura 19.

**Tabla 22.**

*Evolución de la conversión modelada mediante cinética elemental (2)*

<i>TIEMPO (min)</i>		<i>0</i>	<i>30</i>	<i>60</i>	<i>90</i>	<i>120</i>	<i>150</i>
<b>CONVERSIÓN TEÓRICA- MODELO CINÉTICO NO ELEMENTAL</b>	<i>348.15 K</i>	0	0.652174	0.863354	0.940994	0.9565522	0.9627 33

*Nota.* La tabla presenta la evolución de la conversión a diferentes puntos temporales, mostrando los valores teóricos del modelo cinético no elemental.

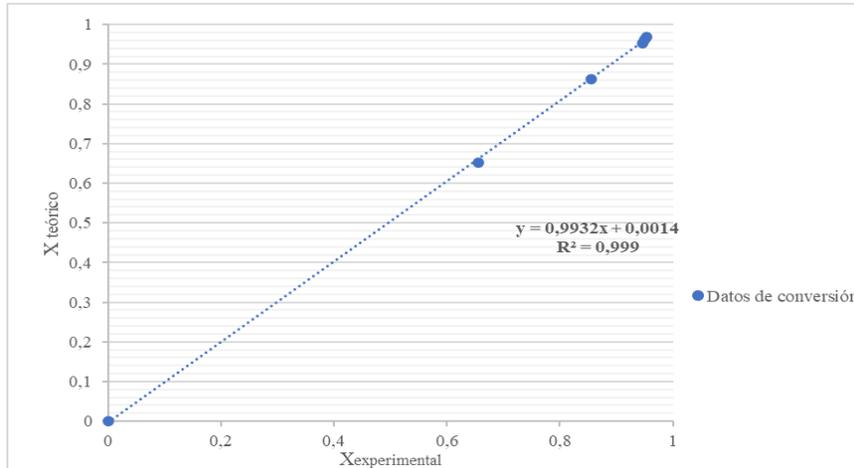
Al analizar el comportamiento de la cinética elemental y no elemental con los datos teóricos proporcionados del artículo [2], se evidencia una marcada similitud entre ambas. Ambas gráficas exhiben un aumento sustancial en la conversión que persiste hasta aproximadamente los 90 minutos, momento en el cual la conversión se estabiliza en ambas curvas.

### ***3.3.5 Gráficas de paridad de conversión del glicerol teórica y experimental***

Las Figuras 20 y 21, ilustradas a través de gráficos de dispersión, muestran de forma gráfica tanto los datos experimentales como los cálculos teóricos realizados mediante los modelos cinéticos elemental y no elemental. En el eje x se presentan los resultados experimentales obtenidos del segundo artículo [2], mientras que en el eje y se representan los valores teóricos generados por el software de modelación Matlab®. Esta representación visual facilita la comparación entre la dispersión de los datos experimentales y los resultados modelados, permitiendo una evaluación con un índice  $R^2$  cercano a 1 para ambos conjuntos de datos.

**Figura 20.**

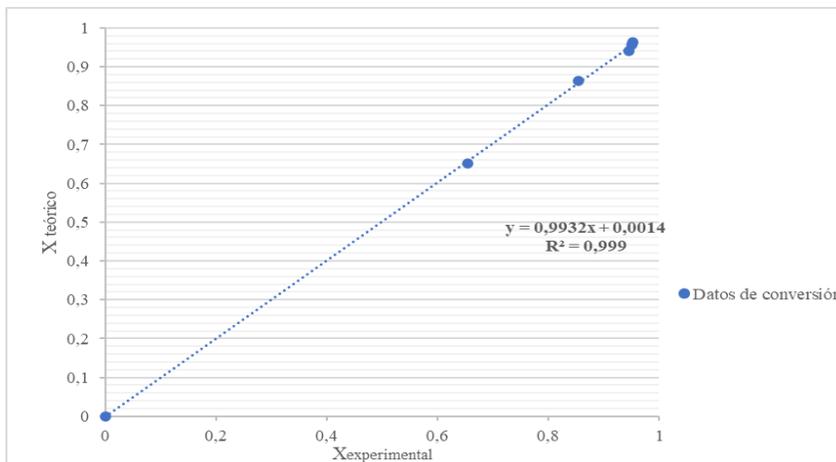
*Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética elemental) (2)*



**Nota.** La gráfica exhibe la conversión teórica ( $X_{teórica}$ ) para la cinética elemental (eje y), en contraste con la conversión experimental ( $X_{Exp}$ ) expuesta en el segundo artículo (eje x) [2]. Se evidencia un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) de 0.999.

**Figura 21.**

*Gráfica de paridad de la conversión experimental y de la conversión teórica (cinética no elemental) (2)*



**Nota.** La gráfica exhibe la conversión teórica ( $X_{teórica}$ ) para la cinética no elemental (eje y), en contraste con la conversión experimental ( $X_{Exp}$ ) expuesta en el segundo artículo (eje x) [2]. Se evidencia un coeficiente de determinación ( $R^2$ ) de 0.999.

En esta comparación, se destaca que tanto la cinética elemental como la no elemental exhiben un

coeficiente de determinación ( $R^2$ ) de 0.999, indicando una aproximación extraordinaria a los datos experimentales [2]. En ambos escenarios, se observa una marcada cercanía a 1 en la linealización, resaltando la consistente concordancia entre los resultados experimentales y los datos teóricos para ambas cinéticas.

### 3.3.6. Análisis estadístico para la selección del modelo cinético: Elemental o no elemental

Esta investigación se analizó con dos tipos de cinéticas (elemental y no elemental) para ver cuál de las dos es la que más se adapta al comportamiento cinético de la reacción de transesterificación y tiene mejor rendimiento de glicerol. La realización de este análisis involucró la implementación de la prueba t de Student para muestras independientes. Los resultados se encuentran especificados en la Tabla 23, la cual abarca tanto los valores del artículo [2] como los valores obtenidos para cada cinética propuesta.

**Tabla 23.**

*Conversión de glicerol (2)*

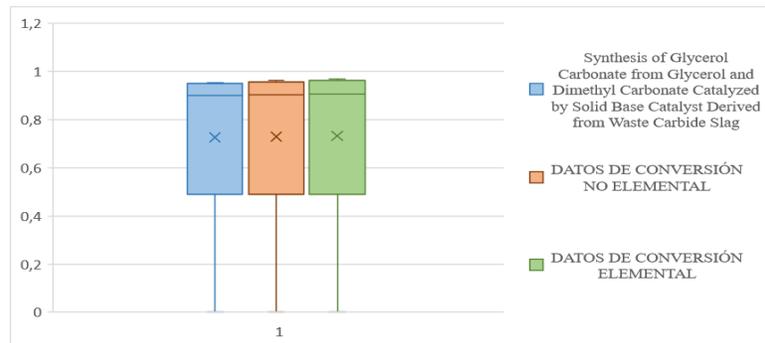
DATOS DEL ARTÍCULO “SYNTHESIS OF GLYCEROL CARBONATE FROM GLYCEROL AND DIMETHYL CARBONATE CATALYZED BY SOLID BASE CATALYST DERIVED FROM WASTE CARBIDE SLAG” [2].	DATOS DE CONVERSIÓN - MODELO CINÉTICO NO ELEMENTAL	DATOS DE CONVERSIÓN - MODELO CINÉTICO ELEMENTAL
0	0	0
0.654694	0.652174	0.652798
0.854694	0.863354	0.861492
0.945852	0.940994	0.952174
0.949891	0.9565522	0.962112
0.952729	0.962733	0.968944

*Nota.* Datos de conversión de glicerol.

La Figura 22 muestra un diagrama de caja de los datos de conversión del glicerol para las reacciones elementales y no elementales. Los gráficos de caja son una herramienta útil para visualizar la distribución de los datos, y revelan que, en este caso, los datos de ambas reacciones están muy concentrados en torno a sus respectivas medias.

**Figura 22.**

*Diagrama de caja*



*Nota.* Diagrama de cajas para mostrar los datos

El objetivo fundamental de este estudio ha sido realizar un análisis estadístico comparativo entre reacciones no elementales y elementales. Se emplearon muestras obtenidas tanto de la simulación en Matlab® como del estudio de [2]. Los resultados revelaron una notable similitud en los datos entre ambas reacciones. Sin embargo, se destacó que la reacción no elemental demostró una mayor precisión en los datos, exhibiendo un coeficiente de variación del 19.38%. Esto indica que la dispersión de los datos no elementales respecto a su media es menor en comparación con la dispersión de los datos elementales. La no elemental se asocia con una mayor precisión y fiabilidad en las mediciones experimentales en contraste con la reacción elemental.

### 3.3.7 Diagrama de flujo del modelo cinético elemental y no elemental

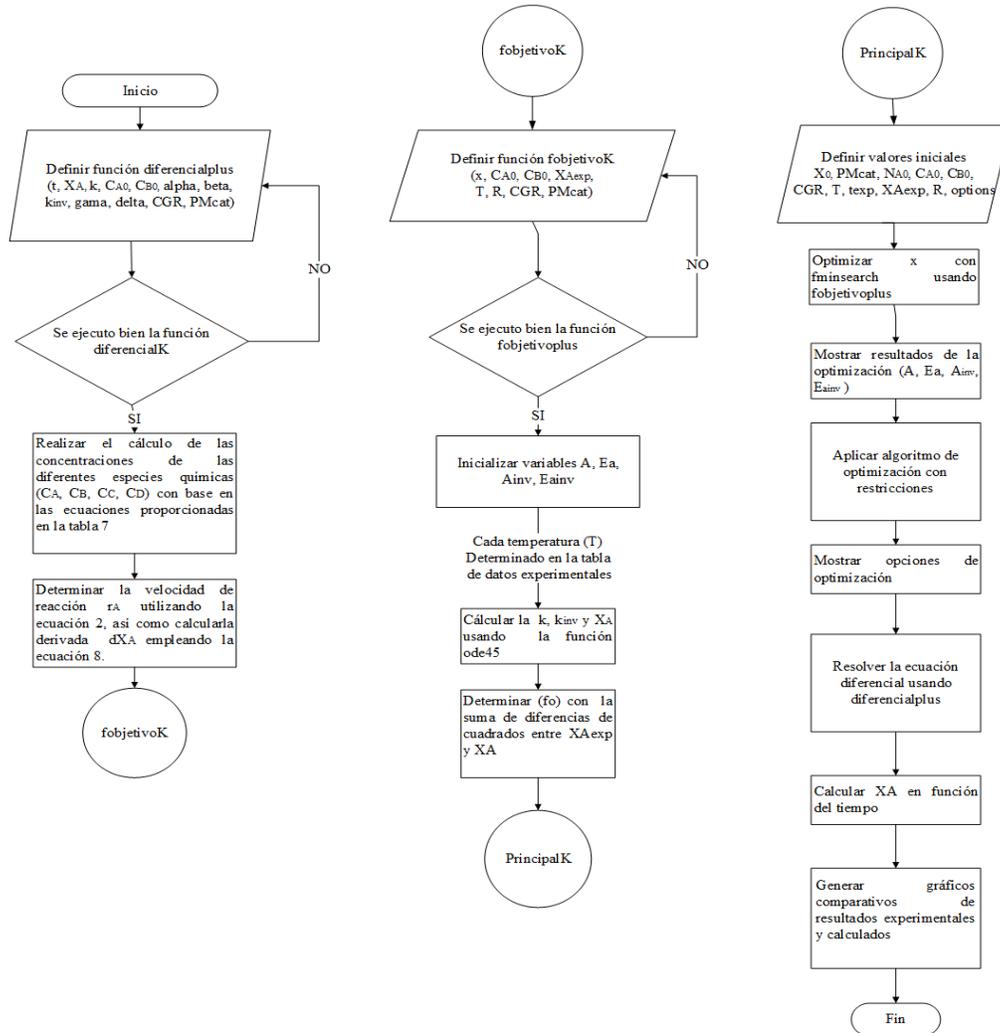
El diagrama de flujo representado en las Figura 23 y Figura 24 ofrece una detallada visualización del procedimiento de programación llevado a cabo en Matlab® por las funciones para la reacción elemental (*diferencialk*, *fobjetivok* y *Principalk*) y la no elemental (*diferencialplus*, *fobjetivoplus* y *Principalplus*). Este proceso se inicia con la introducción de parámetros específicos, los cuales se emplean en el cálculo de las concentraciones de las especies  $C_A$ ,  $C_B$ ,  $C_C$  y  $C_D$ , seguido por la determinación de la tasa de reacción  $r_A$  y la posterior derivada  $dX_A$ . Este diagrama no solo presenta los valores iniciales en cada fase del proceso dentro de la función, sino que también ilustra su papel en el cálculo de parámetros cruciales como  $A$ ,  $E_a$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $A_{inv}$ ,  $E_{ainv}$ ,  $\gamma$  y  $\delta$ .

Posteriormente, procede a través de un bucle 'for' que itera a lo largo de diferentes temperaturas. Durante cada iteración, se utilizan los valores calculados para resolver ecuaciones diferenciales

mediante ode45, obteniendo así el valor correspondiente de  $X_A$ . Finalmente, se determina el valor de (fobjetivoplus, fobjetivoK) como la suma de los errores cuadrados entre  $X_{Aexp}$  y  $X_A$ . Este diagrama abarca desde la asignación repetida de valores a  $X_0$  hasta la utilización de ode45 para realizar cálculos y generar gráficos basados en ecuaciones diferenciales.

**Figura 23.**

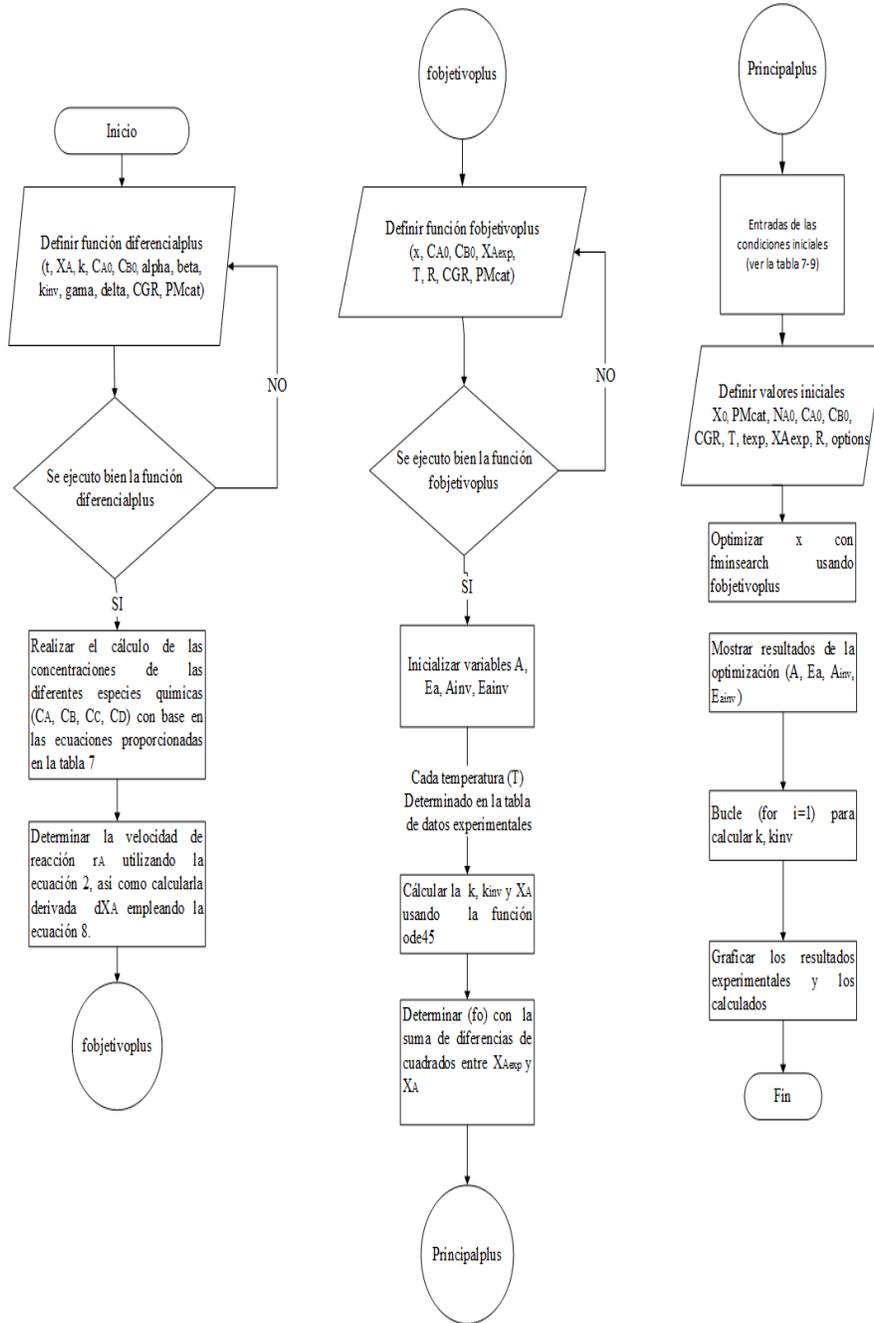
*Diagrama de flujo de la programación de la cinética no elemental*



**Nota.** La programación de código de Matlab® para obtener los parámetros cinéticos de la cinética no elemental.

**Figura 24**

*Diagrama de flujo de la programación de la cinética elemental*



**Nota:** La programación de código de Matlab® para obtener los parámetros cinéticos de la cinética elemental.

## 4.DISEÑO DE UN REACTOR DE ACUERDO CON EL MODELO SELECCIONADO

### 4.1. Cinética propuesta

Para el proceso de diseño, se propuso la implementación de un reactor de lecho empacado de flujo continuo (PBR), caracterizado por la presencia de un lecho compuesto por partículas sólidas, específicamente utilizando un catalizador de CaO. En este reactor, una corriente constante que contiene los reactivos (glicerol y DMC) fluye de manera ininterrumpida a través del lecho. Se adoptó la suposición de que no existen gradientes radiales en el reactor y que el flujo a lo largo del lecho es completamente uniforme, eliminando así posibles desviaciones en la difusión de los reactivos. El mecanismo operativo del reactor se definió en co-corriente, indicando que la reacción es predominantemente unidireccional. La reacción que representa este proceso químico es la reacción (1) descrita anteriormente:



Como se indicó previamente, la velocidad de la reacción para esta ruta química puede expresarse en relación con una reacción reversible mediante la ecuación (2).

$$-r'_A = kC_A^\alpha C_B^\beta - k_{inv}C_C^\gamma C_D^\delta$$

$$-r'_A = k[Glicerol]^\alpha [DMC]^\beta - k_{inv}[CG]^\gamma [Metanol]^\delta$$

Donde:

- k: Constante de velocidad de la reacción directa.
- C<sub>A</sub>: Concentración del glicerol (mol/L).
- C<sub>B</sub>: Concentración del DMC (mol/L).
- k<sub>inv</sub>: Constante de velocidad de la reacción indirecta.
- C<sub>C</sub>: Concentración del carbonato de glicerol(mol/L).
- C<sub>D</sub>: Concentración del metanol (mol/L).

- $\alpha$  : Orden de reacción del glicerol.
- $\beta$  : Orden de reacción del dimetil carbonato.
- $\gamma$  : Orden de reacción del carbonato de glicerol.
- $\delta$  : Orden de reacción del metanol

Las concentraciones en un tiempo determinado tiempo se calculan a partir de la conversión y las concentraciones iniciales, como se muestra en la Tabla 24 [46].

**Tabla 24.**

*Estequiométrica*

ESPECIE	INICIO	FINAL
A (glicerol)	$C_{A0}$	$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$
B (dimetil carbonato)	$C_{B0}$	$C_B = C_{B0} - C_{A0}X_A$
C (carbonato de glicerol)	$C_{C0} = 0$	$C_C = C_{A0}X_A$
D (metanol)	$C_{D0} = 0$	$C_D = 2C_{A0}X_A$
Inertes	$C_{I0}$	$C_I = C_{I0}$

*Nota.* Tabla de estequiometría de glicerol. tomado de: h. fogler - elements of chemical reaction engineering,-pearson Disponible[23] [libro.2022]

## 4.2. Ecuaciones para el diseño del reactor PBR

### 4.2.1. Balance de moles del reactor PBR

- Balance de moles del glicerol dentro del sistema

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida} + \text{Acumulación}$$

Se asume que el sistema opera sin acumulación de materia, lo que implica que no hay cambios en la cantidad total de material a lo largo del tiempo del proceso. Por lo tanto, el término de acumulación se cancela en el balance de masa, como se muestra a continuación:

$$\text{Entrada} + \text{Generación} = \text{Salida}$$

Teniendo en cuenta lo anterior, el balance general de moles para la especie A (glicerol) se puede expresar con la siguiente ecuación:

**Ecuación 12.**

Balance de moles para el reactor PBR

$$F_A|_w - F_A|_{w+\Delta w} + r'_A \cdot \Delta W = 0$$

Donde:

- $-r'_A$ : Velocidad de desaparición de la especie A (glicerol).
- $\Delta W$ : Masa de catalizador CaO.
- $F_A|_w$ : Flujo molar del compuesto A (glicerol) que ingresa al área del catalizador.
- $F_A|_{w+\Delta w}$ : Flujo molar del compuesto A (glicerol) después de pasar por el área del catalizador.

Se hace énfasis en el reactivo limitante (glicerol), para simplificar el balance de moles. De esta forma las tasas de reacción de las otras especies se expresan en función de la tasa de reacción del reactivo limitante ( $r_A'$ ).

Al despejar de la ecuación (12) la velocidad de desaparición de la especie A (glicerol) y tomar el límite cuando  $\Delta W \Rightarrow 0$ , se obtiene la siguiente ecuación diferencial:

**Ecuación 13.**

Diferencial del balance de moles para el reactor PBR

$$r'_A = \frac{dF_A}{dW}$$

Para obtener la ecuación de diseño en términos de conversión de la especie A ( $X_A$ ) se utiliza la siguiente ecuación:

**Ecuación 14.**

Flujo molar de la especie A

$$F_A = F_{A0} \cdot (1 - X_A)$$

Se relaciona el cambio en el flujo molar de la especie A en función de la conversión con la siguiente ecuación:

### **Ecuación 15.**

Relación entre la variación del flujo molar y la conversión

$$dF_A = d(F_{A0} - F_{A0} \cdot X_A)$$

$$dF_A = d(-F_{A0} \cdot X_A)$$

$$dF_A = -F_{A0} \cdot d(X_A)$$

La ecuación (15) indica que a medida que aumenta la tasa de conversión ( $dX_A$ ), el cambio en el flujo molar de la especie A ( $dF_A$ ) disminuye.

Reemplazando la ecuación (15) en la ecuación (13) y despejando, se obtiene:

### **Ecuación 16.**

Conversión del reactor PBR

$$\frac{dX_A}{dW} = -\frac{r'_A}{F_{A0}}$$

Donde:

- $F_{A0}$ : Flujo molar inicial del glicerol (mol/s).
- $-r'_A$ : Velocidad de desaparición del glicerol (mol/(g<sub>cat</sub>·s)).
- W: Masa de catalizador CaO (g).
- $X_A$ : Conversión del glicerol.

#### 4.2.2. Balance de energía del reactor PBR

Se realizó un balance de energía en relación al volumen  $\Delta V$ . Hasta el momento, no se ha llevado a cabo ningún trabajo, lo que implica que el valor de  $W = 0$ , como lo muestra la siguiente ecuación:

##### Ecuación 17.

*Balance de energía*

$$\Delta Q + \sum F_i \cdot H_i|_w - F_i \cdot H_i|_{w+\Delta w} = 0$$

El flujo de calor hacia el reactor  $\Delta Q$  se expresa en función de la transferencia total de calor, que se determina mediante el coeficiente de transferencia de calor,  $U$ , el área de intercambio de calor,  $\Delta A$ , y la diferencia de temperatura entre el fluido de servicio,  $T_a$ , y la temperatura del reactor (fluido de servicio),  $T$ .

##### Ecuación 18.

*Flujo de calor del reactor*

$$\Delta Q = U \cdot \Delta A \cdot (T_a - T) = U_a \cdot \Delta V \cdot (T_a - T)$$

En el caso de un reactor tubular, "a" representa la superficie de intercambio de calor por unidad de volumen del reactor.

##### Ecuación 19.

*Relación de superficie de intercambio de calor por unidad de volumen*

$$a = \frac{A}{V} = \frac{\pi \cdot D \cdot L}{\frac{\pi \cdot D^2 \cdot L}{4}} = \frac{4}{D}$$

Sustituyendo en la ecuación (17), y luego tomando el límite como  $\Delta V \rightarrow 0$ , obtenemos:

**Ecuación 20.**

*Balance de energía modificado*

$$U_a \cdot (T_a - T) - \frac{d \sum (F_i H_i)}{dV} = 0$$

$$U_a \cdot (T_a - T) - \sum \frac{dF_i}{dW} H_i - \sum F_i \frac{dH_i}{dW} = 0$$

De acuerdo al balance molar de la especie i, se obtiene:

**Ecuación 21.**

*Balance molar*

$$\frac{dF_i}{dV} = r'_i = v_i \cdot r'_i$$

Diferencial de la entalpía respecto al volumen;

**Ecuación 22.**

*Entalpía*

$$\frac{dH_i}{dV} = C_{Pi} \cdot \frac{dT}{dV}$$

Sustituyendo las ecuaciones (22) y (21) en la ecuación (20), se obtiene:

$$U_a \cdot (T_a - T) - \sum v_i \cdot H_i \cdot (-r'_A) - \sum F_i \cdot C_{Pi} \cdot \frac{dT}{dV} = 0$$

$$U_a \cdot (T_a - T) - \Delta H_{RX} \cdot (-r_a) - \sum F_i \cdot C_{Pi} \cdot \frac{dT}{dV} = 0$$

Se reordena la ecuación (22) y se obtiene:

**Ecuación 23.**

*Diferencial de temperatura en función al volumen*

$$\frac{dT}{dV} = \frac{r'_a \cdot \Delta H_{RX} - U_a \cdot (T - T_a)}{\sum F_i \cdot C_p}$$

Para un reactor de lecho compacto  $dW = \rho_b dV$ , donde  $\rho_b$  es la densidad aparente. Reemplazando el volumen del reactor (V) por la masa de lecho catalítico (W), se obtiene:

**Ecuación 24.**

*Balance de energía*

$$\frac{dT}{dW} = \frac{r'_a \cdot \Delta H_{RX} - \frac{U_a \cdot (T - T_a)}{\rho_b}}{\sum F_i \cdot C_{Pi}}$$

En la siguiente sección, se presentará la ecuación diferencial de la temperatura del fluido de servicio en función de la masa del catalizador, para el reactor PBR en co-corriente:

**Ecuación 25.**

*Balance de energía-Fluido de servicio*

$$\frac{dT_a}{dW} = \frac{U_a \cdot (T - T_a)}{m_{Agua} \cdot C_{Agua}}$$

Donde:

- $U_a$ : Coeficiente de transferencia global de calor ( $\text{kJ}/(\text{L} \cdot \text{s} \cdot \text{K})$ )
- $T_a$ : Temperatura del fluido de servicio, Agua (K)
- $T$ : Temperatura del fluido del proceso (K)
- $m_c$ : Flujo másico del fluido de servicio, Agua ( $\text{g}/\text{s}$ )
- $C_{pi}$ : Capacidad calorífica del fluido de servicio, Agua ( $\text{kJ}/(\text{g} \cdot \text{K})$ )

#### 4.2.3. Caída de presión del reactor PBR

##### Ecuación 26.

*Caída de presión*

$$\frac{dP}{dW} = \left( \frac{\beta_o}{\rho_{CaO} \cdot (1 - \Phi) \cdot A_c} \right) \cdot \left( \frac{P_o}{P} \right) \cdot \left( \frac{T}{T_o} \right) \cdot \left( \frac{F_T}{F_{T0}} \right)$$

En el caso de reacciones químicas en fase líquida, se asume que el flujo volumétrico es constante a lo largo del proceso [23]. Por lo tanto, la ecuación de Ergun (ecuación (26)) se puede simplificar de la siguiente forma:

##### Ecuación 27.

*Caída de presión modificada*

$$\frac{dP}{dW} = \left( \frac{\beta_o}{\rho_{CaO} \cdot (1 - \Phi) \cdot A_c} \right)$$

Donde:

- $\rho_c$ : Densidad del lecho catalítico, CaO ( $\text{g}/\text{L}$ )
- $\Phi$ : Esfericidad del catalizador
- $A_c$ : Área de la sección transversal ( $\text{m}^2$ )

#### 4.3. Parámetros de diseño del reactor PBR

En la Tabla 25, se incorporan datos extraídos de diversas fuentes para el diseño del reactor PBR.

Para las entalpías de formación, se consultaron páginas de la base de datos NIST [60]. Respecto a la capacidad calorífica, esta se obtuvo de "Lange's Handbook of Chemistry"[61]. En cuanto a los valores del área de sección transversal ( $A_C$ ), factor " $\beta_0$ " de la ecuación de Ergun y el coeficiente global de transferencia de calor ( $U_a$ ), se recurrió al libro de "Elements of chemical reaction engineering" [23]. Esta información proveniente de distintas fuentes permite una caracterización detallada de los parámetros iniciales.

**Tabla 25.**

*Parámetros de diseño-Reactor PBR*

Parámetro	Valor	Dimensión
Entalpía de formación del glicerol ( $\Delta H_{f, \text{Glicerol}}^\circ$ )	-669.6	$kJ/mol$
Entalpía de formación del DMC ( $\Delta H_{f, \text{Dimetil de carbonato}}^\circ$ )	-31.466	$kJ/mol$
Entalpía de formación del CG ( $\Delta H_{f, \text{Carbonato de glicerol}}^\circ$ )	-785.15	$kJ/mol$
Entalpía de formación del metanol ( $\Delta H_{f, \text{metanol}}^\circ$ )	-239.5	$kJ/mol$
Capacidad calorífica del glicerol ( $C_{p, \text{Glicerol}}$ )	0.2189	$kJ/mol \cdot K$
Capacidad calorífica del DMC ( $C_{p, \text{Dimetil de carbonato}}$ )	0.1829	$kJ/mol \cdot K$
Capacidad calorífica del CG ( $C_{p, \text{Carbonato de glicerol}}$ )	0.0026633	$kJ/mol \cdot K$
Capacidad calorífica del metanol ( $C_{p, \text{metanol}}$ )	0.08111	$kJ/mol \cdot K$
Capacidad calorífica del fluido de servicio ( $C_{p, \text{Agua}}$ )	0.028	$kJ/mol \cdot K$
Coficiente global de transferencia de calor ( $U_a$ )	0.4184	$kJ(L \cdot s \cdot K)$
Temperatura inicial del fluido del proceso ( $T_0$ )	363.15	K
Temperatura inicial del fluido de servicio ( $T_{a0}$ )	315	K

Factor de forma ( $\beta_0$ )	0.2542	
Densidad del lecho catalítico ( $\rho_{cat}$ )	3340	g/L
Esfericidad del catalizador ( $\phi$ )	0.8	
Área de la sección transversal ( $A_C$ )	0.0019	m <sup>2</sup>
Diámetro equivalente (D)	0.04918	m
Constante de los gases ideales (R)	0.008314	kJ/(mol·K)
Masa de catalizador CaO (W)	0.6	g
Flujo molar total del fluido del proceso ( $m_{glicerol+DMC}$ )	$4.822 \times 10^{-3}$	mol/s
Flujo molar del glicerol ( $m_{glicerol}$ )	$1.374 \times 10^{-3}$	mol/s
Flujo molar del DMC ( $m_{DMC}$ )	$3.448 \times 10^{-3}$	mol/s
Flujo másico del fluido de servicio ( $m_{Agua}$ )	2	g/s
Concentración inicial del glicerol ( $C_{A0}$ )	0.868	mol/L
Concentración inicial del DMC ( $C_{B0}$ )	6.0764	mol/L
Presión inicial ( $P_0$ )	1	atm

**Nota.** En la tabla se muestran los datos fundamentales para el diseño del reactor PBR. Tomado de: NIST, Elements of chemical reaction engineering, lange's handbook of chemistry. Disponible: [acceso: nov,21,2023]

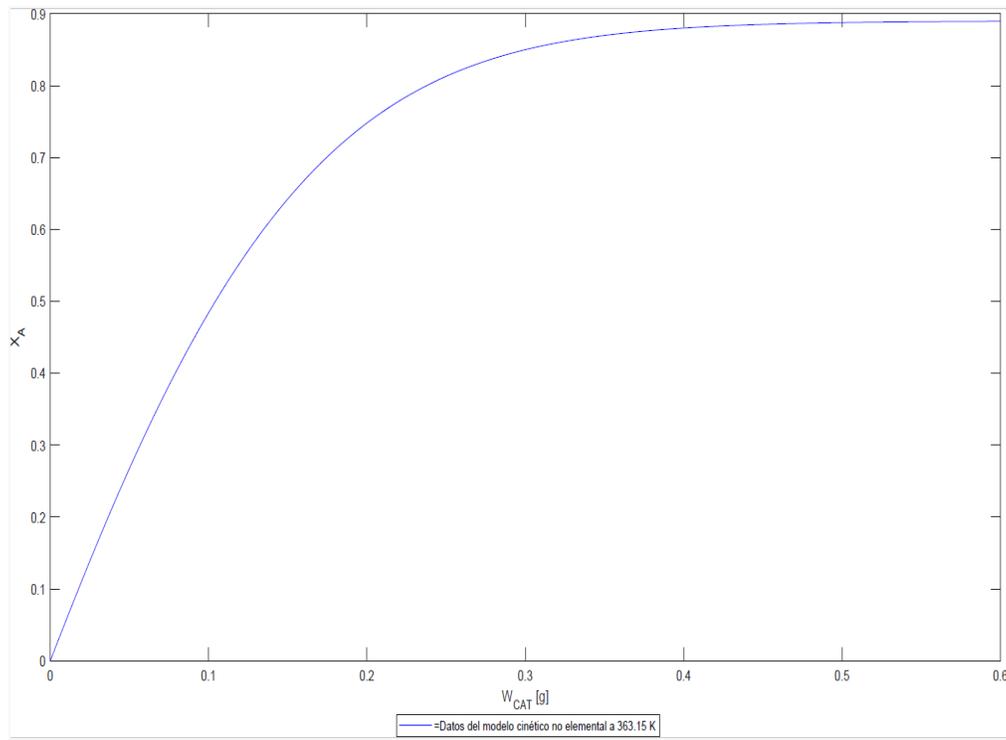
Adicional a los datos de la tabla 25, se utilizaron para el diseño del reactor PBR los parámetros cinéticos detallados en la tabla 12, que hace referencia a la reacción no elemental modelada del primer artículo [1].

#### 4.4. Comportamiento del reactor PBR: Conversión, balance de energía y caída de presión

Las Figuras 25, 26 y 27 muestran la influencia de la masa del catalizador (CaO) en el perfil de conversión, las variaciones de temperatura del reactor y del fluido de servicio y la caída de presión.

**Figura 25.**

*Perfil de conversión- Reactor PBR*

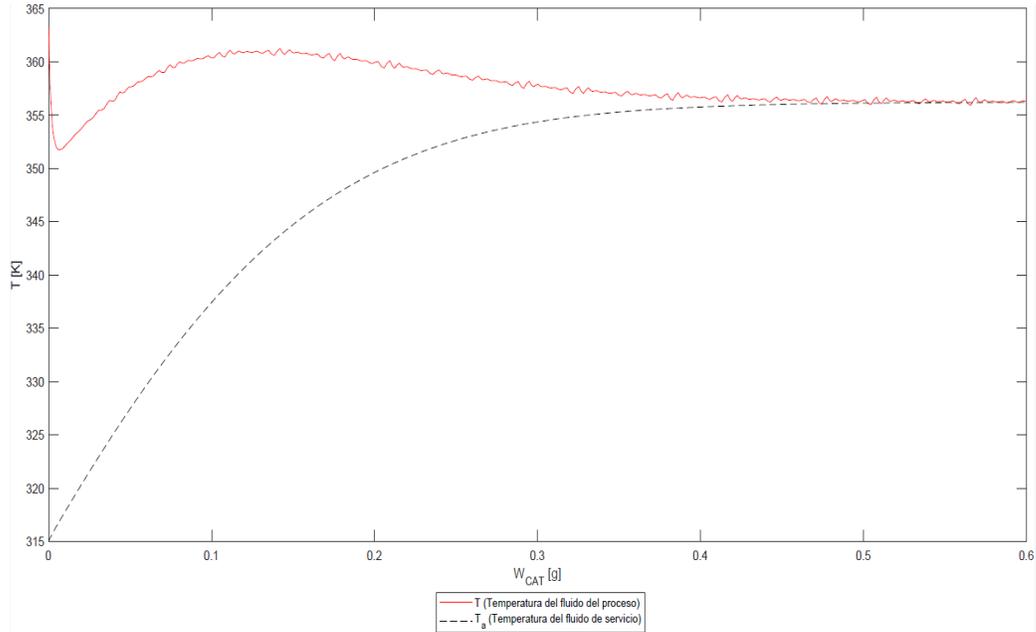


**Nota.** Curva de conversión del glicerol ( $X_A$ ) con respecto a la masa del catalizador CaO ( $W_{Cat}$ ). Temperatura de 363.15 K.

Los perfiles de conversión, representados en la Figura 25, evidencian una clara relación entre la masa del catalizador y la eficiencia de conversión en el reactor PBR. A medida que la masa del catalizador aumenta y alcanza el valor de 0.5 g, se percibe un incremento proporcional en la tasa de conversión, la cual se estabiliza posteriormente. En este punto, la conversión no tiene cambios significativos y se mantiene en un valor aproximado del 88%.

**Figura 26.**

*Cambio de la temperatura - Reactor PBR*

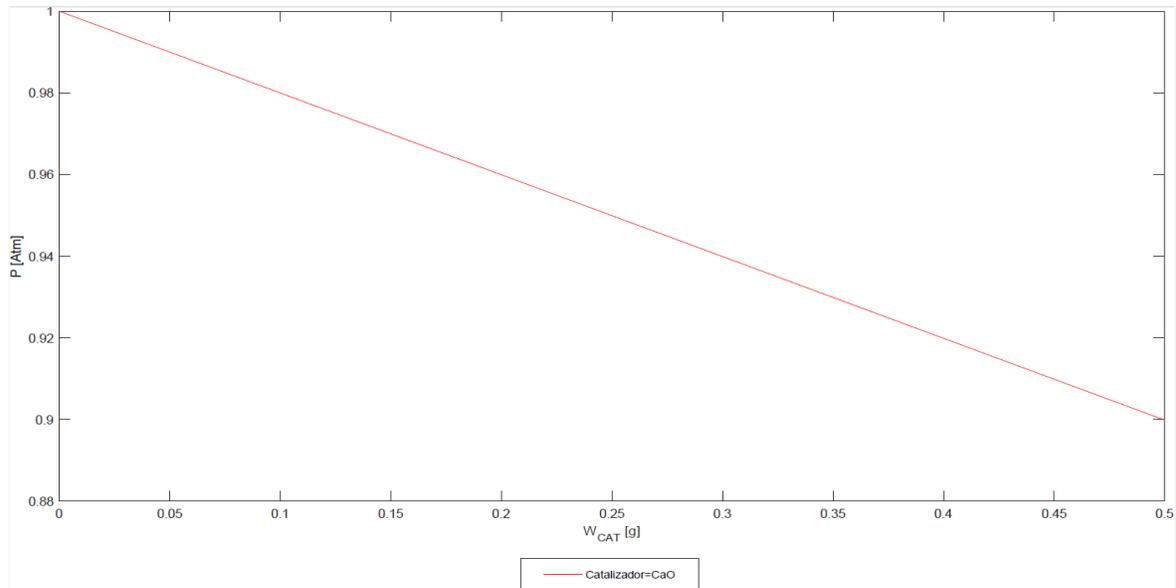


**Nota.** Curvas de variación de la temperatura del fluido del proceso (T) y de la temperatura del fluido de servicio (T<sub>a</sub>) con respecto a la masa del lecho catalítico (W<sub>Cat</sub>). Temperatura de 363.15 K.

Los cambios de temperatura se representan visualmente en la Figura 26, donde la línea de color rojo indica la temperatura del fluido del proceso, mientras que la línea discontinua corresponde a la temperatura del fluido de servicio. Durante un momento específico de la reacción, que se caracteriza como exotérmica, se observa un ascenso en la temperatura del fluido del proceso, indicando la liberación de calor en este punto crítico contribuye a mantener la temperatura estable. En consecuencia, el fluido de servicio comienza a recibir este calor liberado, lo que da lugar a un aumento gradual en su temperatura. Este intercambio térmico contribuye a mantener la temperatura del fluido del proceso en un rango estable.

**Figura 27.**

*Caída de presión-Reactor PBR*



**Nota.** Se muestra la caída de presión con respecto al cambio de la masa del lecho catalítico ( $W_{\text{Cat}}$ ). Temperatura de 363.15 K.

En la Figura 27, se aprecia claramente cómo la presión disminuye a medida que aumenta la masa del catalizador. Este descenso en la presión exhibe un comportamiento inversamente proporcional a la masa de catalizador, manifestándose de manera lineal en la gráfica. Es importante destacar que al alcanzar una masa de catalizador de 0.5 g, se registra una caída de presión de 0.12 atmósferas, resaltando la relación inversa entre estas variables.

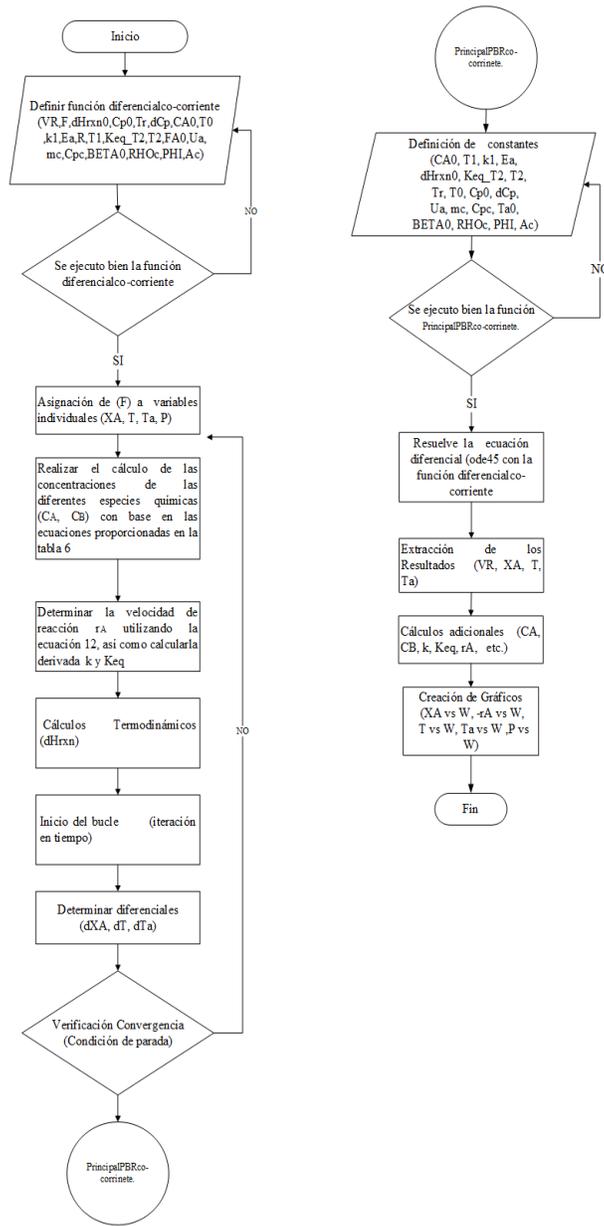
#### 4.5. Diagrama de flujo de diseño del reactor PBR

En este código Matlab®, se implementa un modelo para simular el comportamiento de un reactor químico y resolver las ecuaciones diferenciales asociadas. La función diferencialco-corrinete toma como entrada las condiciones iniciales y los parámetros del sistema, desglosa las variables de estado, como la conversión de glicerol (A), la temperatura, la temperatura del refrigerante y la presión. Luego, utiliza la ecuación de velocidad de reacción y considera los cambios en la entalpía de reacción para calcular las derivadas de estas variables. La función ode45 se emplea para integrar las ecuaciones diferenciales a lo largo del volumen del reactor.

En el segundo módulo de PrincipalPBRco-corrinete, se establecen las condiciones iniciales y los parámetros del sistema, y se resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales usando ode45. Los resultados se utilizan para generar gráficos que ilustran la evolución de la conversión de glicerol (A), la velocidad de reacción y las temperaturas a lo largo del volumen del reactor PBR.

**Figura 28.**

*Diagrama de flujo de la programación del reactor PBR*



**Nota.** La programación de código de Matlab® para obtener el diseño de reactor PBR

## 5. ANÁLISIS

Los resultados derivados del modelamiento de la reacción de transesterificación entre glicerol y dimetil carbonato (DMC), analizados a partir de los estudios de [1], [2], revelan una notable concordancia entre la cinética propuesta en este trabajo y los datos experimentales correspondientes a cada proceso. Esta consistencia ha sido rigurosamente validada mediante un análisis estadístico, específicamente a través de una prueba t de Student, que ha demostrado la ausencia de una diferencia significativa entre los datos del modelo cinético no elemental y los datos experimentales. Es relevante destacar que los resultados del modelo cinético no elemental exhiben una precisión mayor en comparación con los datos proporcionados por el modelo cinético elemental.

La proximidad observada entre los valores de conversión obtenidos mediante el modelamiento y los datos experimentales subraya de manera concluyente que el método empleado para el cálculo de los parámetros cinéticos se muestra idóneo para prever con exactitud la información cinética asociada a esta específica ruta química. Esta validación refuerza la confiabilidad y solidez del modelo propuesto, destacando la eficacia del enfoque metodológico utilizado en la determinación de los parámetros cinéticos para la reacción de síntesis de carbonato de glicerol (CG) bajo las condiciones especificadas en este trabajo.

Como se mencionó anteriormente, se ha observado que a una temperatura de 363.15 K, y bajo las condiciones iniciales establecidas, se logra una conversión del 84% de glicerol en un lapso de 57 minutos en el reactor por lotes. Estos resultados se respaldan en el modelamiento basado en datos experimentales presentados en el artículo de [1]. Asimismo, este patrón se repite en otro estudio, como se describe en el artículo de [2]. En esta ocasión, a una temperatura de 348.15 K, y siguiendo las condiciones iniciales detalladas en la Tabla 14, se alcanza una conversión del 93% en el reactor por lotes en un período de 90 minutos.

Se distingue por un análisis exhaustivo que prioriza la variación de la masa del catalizador en un reactor PBR no isotérmico para la transesterificación. Este enfoque estratégico revela una correlación directa entre la masa del catalizador y la conversión del proceso, identificando un punto óptimo para maximizar la eficiencia. Sin embargo, se destaca la complejidad de esta relación al

observar cómo el aumento de la masa puede generar una caída de presión más pronunciada. El análisis señala puntos críticos donde pequeños ajustes en la masa del catalizador tienen un impacto significativo en la conversión y la caída de presión. Este enfoque permite una optimización precisa del diseño del reactor, buscando un equilibrio entre la mejora de la conversión y la gestión eficiente de la caída de presión, en última instancia, proporcionando una herramienta valiosa para diseñadores y operadores en la producción de carbonato de glicerol.

## 6. CONCLUSIONES

El glicerol, subproducto del biodiésel, muestra una versatilidad excepcional. Desde su refinamiento para cumplir estándares de calidad hasta su uso en cosméticos, alimentos y salud animal, su valor es innegable. Su función esencial en productos de cuidado personal y medicamentos, y su impacto en la industria alimentaria, destacan su relevancia. En Colombia, su exportación y refinamiento demuestran su crecimiento. Las investigaciones para nuevos usos, como la producción de carbonato de glicerol, prometen innovación. Este avance, impulsado por el crecimiento en la producción de biodiésel, abre oportunidades económicas e innovadoras en múltiples sectores industriales, consolidando al glicerol como un recurso invaluable en la industria del biodiésel.

Los modelos cinéticos empleados respaldan la idoneidad del enfoque no elemental para representar la reacción de transesterificación en la producción de carbonato de glicerol. Aunque no coincide exactamente con los datos experimentales, su capacidad para ajustarse cercanamente a ellos indica su eficacia en prever el comportamiento cinético de la reacción. Este respaldo valida su utilidad como herramienta tanto descriptiva como predictiva en la comprensión y optimización del proceso de producción. La relación directa entre la temperatura y la eficiencia de la transesterificación del glicerol con DMC es evidente en los perfiles de conversión en el reactor Batch. El aumento de la temperatura de 348.15 K a 363.15 K genera un aumento significativo en la conversión de glicerol en un tiempo de reacción de 90 minutos, mientras que en el artículo de [1], [2], la temperatura de 348.15 K resulta en una conversión mayor, pero en un tiempo de reacción de 150 minutos. Este hallazgo destaca la relevancia crítica de la temperatura en la cinética de la reacción. Manipular estratégicamente la temperatura emerge como un enfoque fundamental para optimizar la eficiencia de la transesterificación, enfatizando la importancia clave de este parámetro para aumentar la conversión del glicerol en el reactor Batch.

En resumen, ambos catalizadores demuestran eficacia en la síntesis de carbonato de glicerol (CG). No obstante, el catalizador compuesto de escoria de carburo (CS), utilizado en el estudio de [2], exhibe una conversión de glicerol significativamente superior en comparación con el catalizador de óxido de calcio (CaO) empleado en la investigación de [1]. Esta disparidad en la conversión puede atribuirse a las condiciones específicas de preparación de cada catalizador. En particular, el

catalizador CS se impregna con carbonato de sodio ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) para mejorar su estabilidad y luego se somete a una calcinación a  $800\text{ }^\circ\text{C}$ . Este método de preparación se revela como un factor crucial que contribuye al aumento de su actividad catalítica, resultando en una conversión más elevada de glicerol como se evidencia en los datos experimentales [1], [2].

En esta investigación, se desarrolló el diseño y la simulación de un reactor de lecho empacado (PBR) no isotérmico para llevar a cabo el proceso de transesterificación entre dimetil carbonato y glicerol. La simulación a una temperatura de  $363.15\text{ K}$  reveló que la conversión experimenta un aumento proporcional con la masa de catalizador, alcanzando su punto máximo, un  $88\%$ , con una masa de  $0.5\text{ g}$ , considerado como el valor óptimo de catalizador. Este descubrimiento se sustenta en la observación de que al incrementar la masa del catalizador más allá de este punto, no se observan diferencias significativas en la conversión.

Adicionalmente, se logró mantener la temperatura del proceso dentro de un rango controlado cercano a la temperatura operacional propuesta en la simulación ( $363.15\text{ K}$ ), manteniendo un flujo constante del fluido de servicio a  $2\text{ g/s}$ . Este resultado reviste importancia esencial, ya que contribuye a prevenir la degradación térmica del producto. La caída de presión registrada fue de  $0.12\text{ atm}$ , indicando un comportamiento positivo de las variables bajo las condiciones estudiadas.

## REFERENCIAS

- [1] j. r. ochoa-gómez *et al.*, “synthesis of glycerol carbonate from glycerol and dimethyl carbonate by transesterification: catalyst screening and reaction optimization,” *appl catal a gen*, vol. 366, no. 2, pp. 315–324, sep. 2009, doi: 10.1016/j.apcata.2009.07.020.
- [2] j. wang, z. wang, h. liu, s. wang, and y. sun, “synthesis of glycerol carbonate from glycerol and dimethyl carbonate catalyzed by solid base catalyst derived from waste carbide slag,” *int j polym sci*, vol. 2021, 2021, doi: 10.1155/2021/9300442.
- [3] j. diego and u. contreras, “alternativas de aprovechamiento del glicerol universidad nacional de colombia facultad de ciencias, departamento de química bogotá, colombia 2020”.
- [4] n. l. polich, “universidad nacional del litoral glicerol, residuo de la producción de biodiesel: posibles alternativas como materia prima para productos de mayor valor agregado”.
- [5] “incineración de glicerina, subproducto de la industria de biodiésel - blog bluer medioambienteblog bluer medioambiente.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://blog.bluermedioambiente.com/2020/03/26/incineracion-de-glicerina-subproducto-de-la-industria-de-biodiesel/>
- [6] “obtencion del carbonato de glicerol a partir de glicerina y urea mediante el empleo de catalizador heterogeneo oxido de cobre soportado en gama alumina (cuo/ y -ai2o3).” accessed: jan. 15, 2024. [online]. available: <https://repository.unilibre.edu.co/handle/10901/8113>
- [7] o. gómez and m. jiménez de aberasturi, “síntesis de carbonato de glicerol a partir de glicerol y derivados de co2 y glicerol,” 2012.
- [8] “‘glicerol: síntesis y aplicaciones’ autor: gustavo lafuente aranda tutora: maría del pilar cornago ramírez facultad de ciencias departamento de química orgánica y bio-orgánica universidad nacional de educación a distancia máster universitario en ciencia y tecnología química,” 2017.
- [9] a. mesoamericana, “pdf generado a partir de xml-jats4r por redalyc proyecto académico sin fines de lucro, desarrollado bajo la iniciativa de acceso abierto,” 2020, doi: 10.15517/am.v31i3.39259.

- [10] c. a. g. quispe, c. j. r. coronado, and j. a. carvalho, “glycerol: production, consumption, prices, characterization and new trends in combustion,” *renewable and sustainable energy reviews*, vol. 27, pp. 475–493, nov. 2013, doi: 10.1016/j.rser.2013.06.017.
- [11] c. a. g. quispe, c. j. r. coronado, and j. a. carvalho, “glycerol: production, consumption, prices, characterization and new trends in combustion,” *renewable and sustainable energy reviews*, vol. 27, pp. 475–493, nov. 2013, doi: 10.1016/j.rser.2013.06.017.
- [12] o. de propilenglicol a partir de glicerol refinado, “proyecto final-ingeniería química universidad tecnológica nacional-facultad regional villa maría”.
- [13] “biodiésel y bioetanol: imprescindibles en la transición energética - sac - sociedad de agricultores de colombia.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://sac.org.co/biodiesel-y-bioetanol-imprescindibles-en-la-transicion-energetica/>
- [14] w. andrés quiroga mateus licenciado en química director and l. mauricio velásquez márquez químico, “obtención de carbonato de glicerol a partir de glicerol y co<sub>2</sub> empleando óxidos de la y la/zr,” 2023.
- [15] “buen comportamiento en producción de aceite de palma y récord de ventas en mercado local caracterizan palmicultura colombiana en agosto de 2023 - fedepalma.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://fedepalma.org/noticias/buen-comportamiento-en-produccion-de-aceite-de-palma-y-record-de-ventas-en-mercado-local-caracterizan-palmicultura-colombiana-en-agosto-de-2023/>
- [16] “entrevista fedepalma: el potencial de los biocombustibles elaborados con aceite de palma | economía | portafolio.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://www.portafolio.co/economia/entrevista-fedepalma-el-potencial-de-los-biocombustibles-elaborados-con-aceite-de-palma-583866>
- [17] j. a. posada-duque and c. a. cardona-alzate, “validation of glycerin refining obtained as a by-product of biodiesel production,” *ingeniería y universidad*, vol. 14, no. 1, pp. 9–27, oct. 2010, doi: 10.11144/javeriana.iyu14-1.argo.
- [18] “vademecum.” accessed: jan. 15, 2024. [online]. available: <https://fedebiocombustibles.com/wp-content/uploads/2023/05/vademecum.pdf>
- [19] y. k. endah, m. s. kim, j. choi, j. jae, s. d. lee, and h. lee, “consecutive carbonylation and decarboxylation of glycerol with urea for the synthesis of glycidol via glycerol carbonate,” *catal today*, vol. 293–294, pp. 136–141, sep. 2017, doi: 10.1016/j.cattod.2016.12.039.

- [20] “cinética de reacción química | estudios cinéticos de las reacciones.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: [https://www.mt.com/es/es/home/applications/11\\_autochem\\_applications/12\\_processdevelopment/wr\\_13\\_appl\\_kinetics.html](https://www.mt.com/es/es/home/applications/11_autochem_applications/12_processdevelopment/wr_13_appl_kinetics.html)
- [21] “velocidad de reacción.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://www.portaleducativo.net/tercero-medio/54/velocidad-de-reaccion>
- [22] j. tejero, “reactores químicos apuntes fidel cunill. montserrat iborra”.
- [23] h. s. fogler, “elements of chemical hngineering,” *elements of chemical reaction engineering*, pp. 175–185, 2004.
- [24] j. tejero, “reactores químicos apuntes fidel cunill. montserrat iborra”.
- [25] c. de and i. química, “escuela superior politécnica de chimborazo facultad de ciencias ‘modelado, simulación y control de un reactor de tanque agitado continuo (cstr) como herramienta didáctica para control de procesos,’” 2021.
- [26] “7. bucles.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://estadistica-dma.ulpgc.es/fcc/matlab-07-bucles.html>
- [27] “el problema con clc; claro; cierra todo;? - respuestas de matlab - matlab central.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/matlabcentral/answers/1565416-the-problem-with-clc-clear-close-all>
- [28] “el problema con clc; claro; cierra todo;? - respuestas de matlab - matlab central.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/matlabcentral/answers/1565416-the-problem-with-clc-clear-close-all>
- [29] “añadir leyendas a las gráficas - matlab & simulink - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: [https://la.mathworks.com/help/matlab/creating\\_plots/add-legend-to-graph.html](https://la.mathworks.com/help/matlab/creating_plots/add-legend-to-graph.html)
- [30] “solve stiff differential equations — trapezoidal rule + backward differentiation formula - matlab ode23tb - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode23tb.html>

- [31] “crear o modificar una estructura de opciones de optimización - matlab optimset - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/optim/ug/optimset.html#d126e87717>
- [32] “trabajo con objetos de gráficas - matlab & simulink - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: [https://la.mathworks.com/help/matlab/learn\\_matlab/understanding-handle-graphics-objects.html](https://la.mathworks.com/help/matlab/learn_matlab/understanding-handle-graphics-objects.html)
- [33] “métodos numéricos para ecuaciones diferenciales ordinarias métodos numéricos para ecuaciones diferenciales ordinarias objetivos objetivos”, accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <http://www-lacan.upc.eshttp://www-lacan.upc.es>
- [34] d. braccialarghe and m. s. montelar, “ecuaciones diferenciales ordinarias (edos) primer orden”.
- [35] “resolver ecuaciones diferenciales no rígidas; método de orden bajo - matlab ode23 - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode23.html>
- [36] “resolver ecuaciones diferenciales no rígidas; método de orden intermedio - matlab ode45 - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode45.html?fbclid=iwar3m0tmn3ay93b9bzudy-0hnrwbnrsvkc9xmllafffgeuh0n-uw4fztzp8#d126e105375>
- [37] “solve nonstiff differential equations — variable order method - matlab ode113 - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode113.html>
- [38] “solve stiff differential equations and daes — variable order method - matlab ode15s - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode15s.html>
- [39] “solve stiff differential equations — low order method - matlab ode23s - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode23s.html>
- [40] “solve moderately stiff odes and daes — trapezoidal rule - matlab ode23t - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode23t.html>

- [41] “solve stiff differential equations — trapezoidal rule + backward differentiation formula - matlab ode23tb - mathworks américa latina.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://la.mathworks.com/help/matlab/ref/ode23tb.html>
- [42] r. j. cuadro, a. teddy, and c. buelvas, “simulación con matlab y scilab de un reactor tipo tanque agitado. autores”.
- [43] “esta página no está disponible - nivea.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://www.nivea.es/consejos/piel-bonita/que-es-la-glicerina>
- [44] “glicerina: qué es, para qué sirve y por qué es buena para humectar la piel | vogue.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://www.vogue.mx/belleza/articulo/que-es-la-glicerina>
- [45] “programa innovación y bioeconomía”, accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <http://www.iica.int>.
- [46] “bacteria que vuelve útil la glicerina se estrena en planta piloto.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://agenciadenoticias.unal.edu.co/detalle/bacteria-que-vuelve-util-la-glicerina-se-estrena-en-planta-piloto>
- [47] m. r. monteiro, c. l. kugelmeier, r. s. pinheiro, m. o. batalha, and a. da silva César, “glycerol from biodiesel production: technological paths for sustainability,” *renewable and sustainable energy reviews*, vol. 88, pp. 109–122, may 2018, doi: 10.1016/j.rser.2018.02.019.
- [48] “el sector productivo de biocombustibles registró un crecimiento de 40% en 2022.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://www.larepublica.co/economia/el-sector-productivo-de-biocombustibles-registro-un-crecimiento-de-40-en-2022-3530938>
- [49] “observatorio de complejidad económica.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://oec.world/es/404>
- [50] “web desing - gliserol bio-d :: behance.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://www.behance.net/gallery/69874371/web-desing-gliserol-bio-d>
- [51] “web desing - gliserol bio-d :: behance.” accessed: jan. 15, 2024. [online]. available: <https://www.behance.net/gallery/69874371/web-desing-gliserol-bio-d>
- [52] m. en ciencias -química, j. enrique, and g. lópez, “cristhian david cañón gaitán trabajo final presentado como requisito parcial para optar al título de”.

- [53] m. en ciencias -química, j. enrique, and g. lópez, “cristhian david cañón gaitán trabajo final presentado como requisito parcial para optar al título de”.
- [54] “exportación y simulación.” accessed: jan. 08, 2024. [online]. available: <https://repositorio.uniandes.edu.co/server/api/core/bitstreams/3faf83fa-b319-41e5-ad59-caaa4132000b/content>
- [55] f. cardeno, l. j. gallego, and l. a. rios, “refinación de la fase glicerina del biodiesel de aceite de palma empleando ácidos minerales,” *información tecnológica*, vol. 22, no. 6, pp. 15–24, 2011, doi: 10.4067/s0718-07642011000600003.
- [56] “valorización de la glicerina.” accessed: jan. 15, 2024. [online]. available: <http://www.knowledgevalley.com/valorizacionglicerina.aspx>
- [57] r. sarode-dolas, “manufacturing of glycerol carbonate in aspen plus,” 2018.
- [58] n. nguyen and y. demirel, “economic analysis of biodiesel and glycerol carbonate production plant by glycerolysis,” *j sustain bioenergy syst*, vol. 03, no. 03, pp. 209–216, jul. 2013, doi: 10.4236/jsbs.2013.33029.
- [59] r. sarode-dolas, “manufacturing of glycerol carbonate in aspen plus,” 2018.
- [60] T. Kusakawa, G. Niwa, T. Sasaki, R. Oosawa, W. Himeno, and M. Kato, “Observation of a hydrogen-bonded 3d structure of crystalline glycerol,” *Bull Chem Soc Jpn*, vol. 86, no. 3, pp. 351–353, 2013, doi: 10.1246/BCSJ.20120300.
- [61] J. G. Speight, *Lange’s Handbook of Chemistry*. McGraw-Hill Education, 2017. Accessed: Jan. 18, 2024. [Online]. Available: <https://www.accessengineeringlibrary.com/content/book/9781259586095>

## GLOSARIO

**Bucle:** es frecuente que al realizar un algoritmo sea preciso repetir un paso durante un número determinado de veces. Estas repeticiones se conocen como bucles y en Matlab se implementan mediante los comandos `for` y `while`, dependiendo de si se conoce o no por anticipado el número de repeticiones del bucle.[20]

**clc:** limpia la ventana de comandos y ahora se puede trabajar sin confundirse con los comandos de ejecuciones anteriores.

**clear:** borra las variables de ejecuciones anteriores, esto reducirá las posibilidades de error en ejecuciones posteriores y el programador no tiene que preocuparse por variables basura innecesarias [21].

**close all:** cierra todas las figuras abiertas actualmente. Esto puede resultar muy útil durante ejecuciones posteriores del mismo script. Si la figura de la ejecución anterior no se ha cerrado, la ejecución posterior trazará los datos en la figura ya abierta. Lo cual por supuesto es un desperdicio total [22].

**fminsearch:** es una función utilizada en el lenguaje de programación MATLAB. Se emplea para realizar optimizaciones numéricas y encontrar el mínimo de una función en un espacio multidimensional sin necesidad de conocer su forma matemática exacta. Esta función utiliza métodos de búsqueda iterativos para encontrar el mínimo local de una función objetivo dada. Se usa comúnmente en problemas de optimización no lineales donde se busca minimizar una función de varias variables ajustando parámetros para obtener el mejor resultado posible [24].

**legend:** las leyendas son una forma útil de etiquetar las series de datos representadas en una gráfica. Estos ejemplos muestran cómo crear una leyenda y cómo efectuar algunas modificaciones habituales, como cambiar la ubicación, configurar el tamaño de la fuente y añadir un título [23].

**optimset:** es una función en Matlab® que se utiliza para configurar opciones de parámetros en

algoritmos de optimización. Es comúnmente utilizada en combinación con funciones de optimización, como `fminsearch`, `fminunc`, y otras funciones relacionadas. Cuando se trabaja con algoritmos de optimización, es crucial poder ajustar diversos parámetros para adaptarse a las características específicas del problema [25].

**set:** establece las propiedades `Marker` y `MarkerFaceColor` de todas las líneas con el mismo valor [26].

**xlabel:** etiqueta el eje x de los ejes actuales o de la visualización independiente. Volver a emitir el comando `xlabel` sustituye la etiqueta antigua por la nueva [22].

## **ANEXOS**

## ANEXO 1

### APÉNDICE

#### Descripción del código

Se empleó la función `ode45` de Matlab® para resolver una ecuación (7). Esta función es una herramienta fundamental en el proceso de integración numérica. Su eficacia radica en su capacidad para realizar pasos de integración variables, lo que la convierte en una opción poderosa para obtener soluciones precisas a ecuaciones diferenciales. En este contexto, se empleó el código correspondiente a la función.

```
[uu,vv]=ode45(@diferencialplus,[0306090],0,[],k,CA0(i),CB0(i),alpha,beta,kinv  
,gama,delta,CGR(i),PMcat);
```

La función "fobjetivoplus" en el código cumple la función objetivo que buscas minimizar. Al recibir el vector  $x$  como entrada, esta función calcula el resultado del modelo utilizando esos parámetros específicos ( $A$ ,  $Ea$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $A_{inv}$ ,  $E_{inv}$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ). Luego, contrastar estos resultados con los datos experimentales ( $XA_{exp}$ ) para evaluar qué tan preciso es el ajuste del modelo a dichos datos. El objetivo primordial radica en reducir al mínimo la discrepancia entre las predicciones generadas por el modelo y los valores reales observados en el experimento.

```
fobjetivoplus(x,CA0,CB0,XAexp,T,R,CGR,PMcat),x0,options);
```

Por otra parte, la función "fminsearch" se encarga de iterar y ajustar los valores contenidos en el vector  $x$ . Su cometido es encontrar aquella combinación específica de parámetros que conduzca a la función objetivo (`fobjetivoplus`) a alcanzar su mínimo más bajo posible. Este proceso implica realizar cambios iterativos en los valores de  $x$ , acercándose progresivamente hacia la combinación óptima que minimiza la función objetivo. La iteración continúa hasta que se logra alcanzar un mínimo local o se cumple alguna condición de convergencia definida por las opciones (`options`) o la tolerancia establecida.

```
x = fminsearch(@(x) fobjetivoplus(x,CA0,CB0,XAexp,T,R,CGR,PMcat),x0,options);
```

Para los cálculos cinéticos se ha minimizado la función objetivo correspondiente a la sumatoria del cuadrado de la diferencia entre la curva conversión experimental y la curva conversión calculada, esto se realiza integrando la ecuación diferencial correspondiente a la ecuación (7).

Se grafican los resultados junto con los datos experimentales en una figura, mediante el código correspondiente a la función.

```
plot(uu,vv,'k',texp,XAexp(i,:),'ok')
```

Esta línea de código genera un gráfico que visualiza la relación entre los valores calculados (vv respecto al tiempo uu) representados en línea continua en negro ('k') y los datos experimentales (XAexp(i,:)) señalados como puntos negros ('ok').

## Artículo de “Synthesis of glycerol carbonate from glycerol and dimethyl carbonate by transesterification [1]: Catalyst screening and reaction optimization”: Cinética elemental y no elemental

### NO ELEMENTAL

```
%APROVECHAMIENTO DEL GLICEROL PRODUCIDO EN LA INDUSTRIA DE BIODIÉSEL EN
COLOMBIA-----
NOMBRES DE INTEGRANTES :MARYURI DANIELA PEÑA REINOSO, PABLO ANDRÉS ORDOÑEZ
LANDINEZ -----
DIRECTOR :JUAN CARLOS OJEDA TORO-----
DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS REACTOR BATCH-----
%----diferencialK-----
function dXA = diferencialK(t, XA, k, CA0, CB0, kinv, CGR, PMcat)
%-----
CA = CA0*(1-XA);
CB = CB0-CA0*XA;
CC = CA0*XA;
CD = 2*CA0*XA;
%-----
rA = -k*CA*CB+kinv*CC*CD^2;
```

```

dXA = -rA*CGR*PMcat;
end

%-----fobjetivoK-----
function fo = fobjetivoK(x,CA0,CB0,XAexp,T,R,CGR,PMcat)
%-----
A = abs(x(1));
Ea = abs(x(2));
Ainv = abs(x(3));
Eainv = abs(x(4));
%-----
for i=1:length(T)
    k = A*exp(-Ea/(R*T(i)));
    kinv = Ainv*exp(-Eainv/(R*T(i)));
    [uu,vv]= ode45(@diferencialK,[0 30 60
90],0,[],k,CA0(i),CB0(i),kinv,CGR(i),PMcat);
    XA(i,:) = vv';
end
%-----
fo = sum(sum((XAexp-XA).^2))
end

%-----principalK-----
clc, clear variables, close all
%-----
x0 = 0.01*ones(1,4);
x0 = [2352968162505.75          100.434214357103          37.0991256589409
27.8433165966715];
x0 = [1879938006.37647          79.9766485065843          712.436314036433
37.22923955161];
x0 = [1608444842.32672          79.5811944788702          18834.6017429483
46.9918505536165];
x0 = [291836239.359424          74.6352004765979          3294.46442815682
41.9341508090386];
x0 = [95914856.30593           71.4285132301324          1462.30471656706
39.6227888220356];
x0 = [8786338.82009306          64.4981317842408          44.771002259309
29.4536041879559];
x0 = [174558.41455175           53.1951885486165          1.34232436625803

```



```

disp(x)
A = abs(x(1))
Ea = abs(x(2))
Ainv = abs(x(3))
Eainv = abs(x(4))
NA0 = 0.217;          %mol
CA0 = [0.217/0.25 0.217/0.25];    %mol/L
CB0 = [1.5191/0.25 1.5191/0.25];    %mol/L
CGR = [0.12;0.12];
T = [90 75]+273.15;
texp = [0 30 60 90];    %min
XAexp = [0 0.76886 0.839486 0.857143;0 0.544141 0.659711 0.659711];
%-----
for i=1:length(T)
    k = A*exp(-Ea/(R*T(i)));
    kinv = Ainv*exp(-Eainv/(R*T(i)));
    [uu,vv] = ode45(@diferencialK,[0
90],0,[],k,CA0(i),CB0(i),kinv,CGR(i),PMcat);
    f1 = figure(1);

    set(f1,'color',[1 1 1])
    plot(uu,vv,'k',texp,XAexp(i,:),'ok')
    xlabel('Tiempo [min]')
    ylabel('X_{A}')
    legend('=Datos de la cinetica propuesta','=Datos experimentales (Ochoa-
Gómez et al., 2009) ')
    hold on
    uu = [];
    vv = [];
end

```

## ELEMENTAL

```

%APROVECHAMIENTO DEL GLICEROL PRODUCIDO EN LA INDUSTRIA DE BIODIÉSEL EN
COLOMBIA-----
NOMBRES DE INTEGRANTES :MARYURI DANIELA PEÑA REINOSO, PABLO ANDRÉS ORDOÑEZ
LANDINEZ -----
DIRECTOR :JUAN CARLOS OJEDA TORO-----

```

```

DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS REACTOR BATCH-----
%-----diferencialplus-----
----
function dXA =
diferencialplus(t,XA,k,CA0,CB0,alpha,beta,kinv,gama,delta,CGR,PMcat)
%-----
CA = CA0*(1-XA);
CB = CB0-CA0*XA;
CC = CA0*XA;
CD = 2*CA0*XA;
%-----
-----
rA = -k*CA^alpha*CB^beta+kinv*CC^gama*CD^delta;
dXA = -rA*CGR*PMcat;
end
%-----fobjetivoplus-----
function fo = fobjetivoplus(x,CA0,CB0,XAexp,T,R,CGR,PMcat)
%-----
A = abs(x(1));
Ea = abs(x(2));
alpha = abs(x(3));
beta = abs(x(4));
Ainv = abs(x(5));
Eainv = abs(x(6));
gama = abs(x(7));
delta = abs(x(8));
% A = x(1);
% Ea = x(2);
% Ainv = x(3);
% Eainv = x(4);
%-----
for i=1:length(T)
    k = A*exp(-Ea/(R*T(i)));
    kinv = Ainv*exp(-Eainv/(R*T(i)));

[uu,vv]=ode45(@diferencialplus,[0306090],0,[],k,CA0(i),CB0(i),alpha,beta,kinv
,gama,delta,CGR(i),PMcat);
    XA(i,:) = vv';

```

```

end
%-----
fo = sum(sum((XAexp-XA).^2))
end
%-----
% function [ fun ] = fminsearch (x)
% fun = @(x) x.^2 + 2*x + 1;
% options = optimset('MaxIter', 1000);
% x = fminsearch(fun, 0, options);
% end
%-----principalplus-----
clc, clear variables, close all
%-----
x0 = 0.01*ones(1,4);
x0 = [0.0127833975603278      0.00983275915403778      0.00675783610035804
0.0112694923011808];
x0 = [ 0.441100321693988      11.2905661789036      0.00576582748498329
-0.269753908334675];
x0 = [71.7281296761469      26.6879713544912      0.00738087717541669
1.24653064737382];
x0 = [1858.41330943439      35.8619521611469      0.013608060013178
-2.58401372022137];
x0 = [437602.393972609      53.7995864657123      0.00299256660282543
0.0114329548624436];
x0 = [448368648.581857      75.0596174559281      0.00887632837825851
4.28695096765613];
x0 = [91041484117.0966      90.938057159139      1.0627233390384
18.6396332948388];
x0 = [703126568238.933      96.8100524931574      0.00478408538737384
2.38937818869243];
x0 = [33259973042440.8      108.162472520185      0.0874421046007941
10.9441898963717];
x0 = [21048035473776.9      106.791356214365      0.105440607043274
11.4682302100849];
x0 = [46773757116639.7      109.194959399279      0.201572039026099
13.4527889286584];
x0 = [37886049405487.5      108.561612907432      0.212851542372922
13.6062433788132];

```

```

x0 = [37442140090282.2          108.535006882679          0.235887374242285
13.9162016207671];
x0 = [29542569575127.5          107.820087711333          0.290263868388747
14.5071369946782];
x0 = [6.574321996216553e+06          70.096137478319950          1          1
0.02438813276086 1.386984359856285e-6 1 2];
x0 = [8.776627348518293e+2          66.417523824359140 1.624714725741661
1.627658424229765          0.016424696130027 2.029474520143843e-06
1.259298031394632 0.256870077572212];
x0 = [877.3627348518293          66.417523824359140 1.624714725741661
1.627658424229765          0.016424696130027 2.029474520143843e-2
1.259298031394632 0.256870077572212];
%x0 = [876.9627348518293          66.417523824359140 1.624714725741661
1.627658424229765          0.016424696130027 2.029474520143843e-2
1.259298031394632 0.256870077572212];
%x0 = [8.176627348518293e+04          62.617523824359140 0.694714725741661
1.647658424229765          0.017424696130027 0.9979474520143843 1.419298031394632
0.356870077572212];
%x0 = [604683396575759          116.644557822405          15.3508248286916
26.1419482760555];
%x0 = [955335994630860          118.024709005643          36.7863477304501
28.7832626577208];
%x0 = [736287448952215          117.248472269288          56.7198986497415
30.0493554454186];
%x0 = [902888161109260          117.867790498791          116.351070527029
32.2057139482335];
%x0 = [1.02591432523868e+15          118.251471093933
122.858616153209          32.3774034388966];
%x0 = [1.00664371238108e+15          118.194602372255
124.071585204208          32.4055068018767];
%x0 = [996162408519747          118.163346892743          125.436365322786
32.4371371345176];
%x0 = [993803720064879          118.156253191743          125.756750591784
32.4445809189647];
%x0 = [993485108773557          118.155294596159          125.800449595412
32.4455913600842];
%x0 = [1.0374525840459e+15          118.286938025711
148.369493533001          32.9402959494962];

```

```

%x0 = [ 1.08932198486067e+15          118.433690883778
156.898521503405          33.1112395168921];
%x0 = [1.08823583806111e+15          118.430782860223
156.980291811502          33.1123897479791];
%x0 = [3.445077408480640e+14 1.161830309921070e+02 0.178133234753758
12.992119377048564];
%x0 = [5.127418714809976e+15 1.242281910074340e+02 0.011992177318479
5.048961401764830];
%x0 = [1.325253587317536e+18 1.406923058143768e+02 0.047881514465549
9.170377663578982];
%x0 = [1.778055211765133e+21 1.619661287722478e+02 42.693582620590021
29.367129437876386];
%x0 = [2.001906986379022e+21 1.623145479158909e+02 16.608085492513268
26.584744279352734];
%x0 = [2.157059506773016e+22 1.691619513590414e+02 11.987012217109042
25.353634024475671];
%x0 = [2.448566079105533e+22 1.695422368476414e+02 12.376043533781697
25.458643903732728];
%x0 = [ 2.822853763936605e+22 1.699701250640283e+02 14.358202411354192
25.913702540147710];
%x0 = [ 1.953938925110144e+19 1.711781184878819e+02 0.010807518176763
11.627158435832783];
%x0 = [ 3.410743084669997e+16 1.711781184878819e+02 2.708593016295866 1
0.035423939999478 16.285529689206620 1 2];
%x0 = [ 5.834819652348468e+14 1.493129402413308e+02 3.311878722255953
7.766608647114810 27.238599357952765 5.339318668572774e+03
84.975744680005050 1.803446501884160e+03];
PMcat = 56.08;
NA0 = 0.217;          %mol
CA0 = [0.217/0.25 0.217/0.25];          %mol/L
% CB0 = [1.5191/0.25 0.7595/0.25 0.7595/0.25];          %mol/L
CB0 = [1.5191/0.25 1.5191/0.25];          %mol/L
ThetaB =CB0/CA0;
CGR = [0.12;0.12];
T = [90 75]+273.15;
texp = [0 30 60 90];          %min
XAexp = [0 0.76886 0.839486 0.857143;0 0.544141 0.659711 0.659711];
% R = (1*22.414/(1*273.15));

```



```

xlabel('Tiempo [min]')
ylabel('X_{A}')
legend('=Datos de la cinetica propuesta', '=Datos experimentales (Ochoa-
Gómez et al., 2009) ')

hold on
uu = [];
vv = [];
end

```

**Artículo de “Synthesis of Glycerol Carbonate from Glycerol and Dimethyl Carbonate Catalyzed by Solid Base Catalyst Derived from Waste Carbide Slag”[2]: Cinética elemental y no elemental**

**ELEMENTAL**

```

%APROVECHAMIENTO DEL GLICEROL PRODUCIDO EN LA INDUSTRIA DE BIODIÉSEL EN
COLOMBIA-----
NOMBRES DE INTEGRANTES :MARYURI DANIELA PEÑA REINOSO, PABLO ANDRÉS ORDOÑEZ
LANDINEZ -----
DIRECTOR :JUAN CARLOS OJEDA TORO-----
DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS REACTOR BATCH-----

%-----diferencialk1-----
-----
function dXA = diferencialk1(t, XA, k, CA0, CB0, kinv, Wcat, NA0)
%-----
-----
CA = CA0*(1-XA);
CB = CB0-CA0*XA;
CC = CA0*XA;
CD = 2*CA0*XA;
%-----
-----
rA = -k*CA*CB+kinv*CC*CD^2;

```

```

dXA = -rA*Wcat/NA0;
end
%-----fobjetivok1-----
-----
function fo = fobjetivok1(x, CA0, CB0, XAexp, T, R, Wcat, NA0)
%-----
-----
A = abs(x(1));
Ea = abs(x(2));
Ainv = abs(x(3));
Eainv = abs(x(4));
%-----
-----
for i=1:length(T)
    k = A*exp(-Ea/(R*T(i)));
    kinv = Ainv*exp(-Eainv/(R*T(i)));
    [uu,vv] = ode45(@diferencialk1,[0 30 60 90 120
150],0,[],k,CA0(i),CB0(i),kinv,Wcat(i),NA0);
    XA(i,:) = vv';
end
%-----
fo = sum(sum((XAexp-XA).^2))
end
%---principalk1-----
clc, clear variables, close all
%-----
x0 = 0.01*ones(1,4);
x0 = [2352968162505.75          100.434214357103          37.0991256589409
27.8433165966715];
x0 = [1879938006.37647          79.9766485065843          712.436314036433
37.22923955161];
x0 = [1608444842.32672          79.5811944788702          18834.6017429483
46.9918505536165];
x0 = [291836239.359424          74.6352004765979          3294.46442815682
41.9341508090386];
x0 = [95914856.30593           71.4285132301324          1462.30471656706
39.6227888220356];
x0 = [8786338.82009306          64.4981317842408          44.771002259309

```

```

29.4536041879559];
x0 = [174558.41455175          53.1951885486165          1.34232436625803
19.3773807475384];
%x0 = [44342.9011491139          49.2596741785606          0.119749012679155
12.393073171408];
%x0 = [375.429894576961          35.4945252826402          0.00157809954699265
-0.0047227714533804];
%x0 = [5.9671540685781          23.6266988635402          0.00135905543717039
0.0843760156715125];
%x0 = [3.65507492215895          22.2168107416525          0.00129024597541624
1.42085544325064e-09];
x0 = [8.4659e+05 60.1490 0.0011 2.2493e-09];
x0 = [2.121619554019878e+08 76.096448650896860 0.001374139771135
6.208550561228207e-07];
x0 = [6.574241278850124e+08 79.349067902913291 0.001438813961067
2.952527189310611e-06];
x0 = [6.574322528766148e+08 79.349103322093185 0.001438813276086
1.715825400106973e-13];
x0 =[6.574322528766148e+08 79.349103322093185 0.001438813276086
1.758721035109647e-13];
x0 =[6.574321996216553e+06 70.096137478319950 0.02438813276086
1.386984359856285e-6];
x0 =[6.574321996216553e+06 70.096137478319950 0.02438813276086
1.386984359856285e-6];
x0 =[7.400603801732931e+06 55.343846502892950 0.024601690593931
1.453186473066360e-06];
x0 =[7.400603801732931e+06 55.343846502892950 0.014601690593931
1.453186473066360e-06];
x0 =[9.845841333063738e+06 61.770220259618580 6.973013415314860e-04
4.012521983568052e-06];
Wcat = 0.4881;
NA0 = 0.03;          %mol
CA0 = [0.03/0.1];   %mol/L
% CB0 = [1.5191/0.25 0.7595/0.25 0.7595/0.25];   %mol/L
CB0 = [0.15/0.1];   %mol/L
ThetaB =CB0/CA0;
T = [75]+273.15;
texp = [0 30 60 90 120 150];   %min

```



```

    hold on
    uu = [];
    vv = [];
end

```

## NO ELEMENTAL

```

%APROVECHAMIENTO DEL GLICEROL PRODUCIDO EN LA INDUSTRIA DE BIODIÉSEL EN
COLOMBIA-----

```

```

NOMBRES DE INTEGRANTES :MARYURI DANIELA PEÑA REINOSO, PABLO ANDRÉS ORDOÑEZ
LANDINEZ -----

```

```

DIRECTOR :JUAN CARLOS OJEDA TORO-----

```

```

DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS REACTOR BATCH-----

```

```

function dXA =
diferencialplus1(t, XA, k, CA0, CB0, alpha, beta, kinv, gama, delta, Wcat, NA0)

```

```

%-----

```

```

CA = CA0*(1-XA);

```

```

CB = CB0-CA0*XA;

```

```

CC = CA0*XA;

```

```

CD = 2*CA0*XA;

```

```

%-----

```

```

rA = -k*CA^alpha*CB^beta+kinv*CC^gama*CD^delta;

```

```

dXA = -rA*Wcat/NA0;

```

```

end

```

```

%-----fobjetivoplus1-----

```

```

function fo = fobjetivoplus1(x, CA0, CB0, XAexp, T, R, Wcat, NA0)

```

```

%-----

```

```

A = abs(x(1));

```

```

Ea = abs(x(2));

```

```

alpha = abs(x(3));

```

```

beta = abs(x(4));

```

```

Ainv = abs(x(5));

```

```

Eainv = abs(x(6));

```

```

gama = abs(x(7));

```

```

delta = abs(x(8));

```

```

% A = x(1);

```

```

% Ea = x(2);

```

```

% Ainv = x(3);
% Eainv = x(4);
%-----
---
for i=1:length(T)
    k = A*exp(-Ea/(R*T(i)));
    kinv = Ainv*exp(-Eainv/(R*T(i)));
    [uu,vv] = ode45(@diferencialplus1,[0 30 60 90 120
150],0,[],k,CA0(i),CB0(i),alpha,beta,kinv,gama,delta,Wcat(i),NA0);
    XA(i,:) = vv';
end
%-----
fo = sum(sum((XAexp-XA).^2))
end
%-----
% function [ fun ] = fminsearch (x)
% fun = @(x) x.^2 + 2*x + 1;
% options = optimset('MaxIter', 1000);
% x = fminsearch(fun, 0, options);
% end
%-----Principalplus1-----
-----
clc, clear variables, close all
%-----
-----
x0 = 0.01*ones(1,4);
x0 = [0.0127833975603278 0.00983275915403778 0.00675783610035804
0.0112694923011808];
x0 = [ 0.441100321693988 11.2905661789036 0.00576582748498329 -
0.269753908334675];
x0 = [71.7281296761469 26.6879713544912 0.00738087717541669
1.24653064737382];
x0 = [1858.41330943439 35.8619521611469 0.013608060013178 -
2.58401372022137];
x0 = [437602.393972609 53.7995864657123 0.00299256660282543
0.0114329548624436];
x0 = [448368648.581857 75.0596174559281 0.00887632837825851
4.28695096765613];

```

```

x0 = [91041484117.0966    90.938057159139    1.0627233390384
18.6396332948388];
x0 = [703126568238.933    96.8100524931574    0.00478408538737384
2.38937818869243];
x0 = [33259973042440.8    108.162472520185    0.0874421046007941
10.9441898963717];
x0 = [21048035473776.9    106.791356214365    0.105440607043274
11.4682302100849];
x0 = [46773757116639.7    109.194959399279    0.201572039026099
13.4527889286584];
x0 = [37886049405487.5    108.561612907432    0.212851542372922
13.6062433788132];
x0 = [37442140090282.2    108.535006882679    0.235887374242285
13.9162016207671];
x0 = [29542569575127.5    107.820087711333    0.290263868388747
14.5071369946782];
x0 = [6.574321996216553e+06    70.096137478319950    1    1    0.02438813276086
1.386984359856285e-6    1    2];
x0 = [6.574321996216553e+02    70.096137478319950    1    1    0.02438813276086
1.386984359856285e-6    1    2];
x0 = [6.387119779301550e+02    29.405842850450570    1.001308526609580
1.340686233933898    0.036875808027768    4.400843844309434e-04
0.912495631732898    3.214162943140760];
x0 = [5.518020669415585e+02    60.748248174111010    0.732842381323552
3.899581482209934    0.031191145730040    1.110445735311699e-05
0.001028174128749    4.754300870620433];
x0 = [2.123324777474962e+03    45.073743543619290    0.330832586726754
5.730753543112300    0.001007917762934    4.326812548462536e-05
0.002140467995137    2.457553234462744];
x0 = [2.013324777474962e+03    45.073743543619290    0.330832586726754
5.730753543112300    0.001007917762934    4.426812548462536e-05
0.002140467995137    2.457553234462744];
x0 = [2.262798049669786e+03    42.178640257571530    0.505234148080737
3.674893298946634    2.878586485698563e-04    7.241606061512252e-05
0.002990711974789    0.356496212263448];
Wcat = 0.4881;
NA0 = 0.03;    %mol
CA0 = [0.03/0.1];    %mol/L

```



```

ylim([0, 1]);
    legend('=Datos de la cinética propuesta', '=Datos experimentales (Wang et
al., 2021) ')
    hold on
    uu = [];
    vv = [];
end

```

## REACTOR PBR

```

%APROVECHAMIENTO DEL GLICEROL PRODUCIDO EN LA INDUSTRIA DE BIODIÉSEL EN
COLOMBIA-----
NOMBRES DE INTEGRANTES :MARYURI DANIELA PEÑA REINOSO, PABLO ANDRÉS ORDOÑEZ
LANDINEZ -----
DIRECTOR :JUAN CARLOS OJEDA TORO-----
DETERMINACION DE PARAMETROS CINETICOS REACTOR BATCH-----
%diferencialPBRCOCORRIENTE-----
function df =
diferencialPBRCOCO(W, F, dHrxn0, Cp0, Tr, dCp, CA0, CB0, T0, A, Ea, R, Ainv, Eainv, alpha, bet
a, gama, delta, FA0, Ua, mc, Cpc, BETA0, RHOC, PHI, Ac)
%-----
XA = F(1);
T = F(2);
Ta = F(3);
P = F(4);
%-----
CA = CA0*(1-XA);
CB = CB0+CA0*XA;
CC = CA0*XA;
CD = 2*CA0*XA;
%-----
k = A*exp(-Ea/(R*T0));
kinv = Ainv*exp(-Eainv/(R*T0));
rA = -k*CA^alpha*CB^beta+kinv*CC^gama*CD^delta;
%-----
dHrxn=dHrxn0+dCp*(T-Tr);
%-----

```

```

dXA = -rA/FA0;
dT = (Ua*(Ta-T)+(-dHrxn)*(-rA))/(FA0*(Cp0+XA*dCp));
dTa = Ua*(T-Ta)/(mc*Cpc);
dP= -(BETA0/(RHOC*(1-PHI)*Ac));
%-----
df = [dXA dT dTa dP]';
%-----
end

%PrincipalPBRCORRIENTE-----
%-----
clc, clear all, close all
%-----
FT0 = 0.217/45;          %mol/seg
FA0 = 0.285*FT0;
FB0 = 0.715*FT0;
FI0 = 0;
CA0 = 0.868;           %mol/L
CB0 = 6.0764;         %mol/L
%-----
%K
A = 4431.305; % L^(1.0896)/(g cat * seg * mol^(0.0896))
Ea = 44.1182; %kJ/mol
Ainv = 0.00444; % L^(1.6719)/(g cat * seg * mol^(0.6719))
Eainv = 0.0587; %kJ/mol
alpha = 0.3091;
beta = 0.7805;
gama = 1.0537;
delta = 0.6182;
dHrxn0 = -1882.966; %kJ/mol
Tr = 298.15; %K
%-----
T0 = 363.15; %K
%-----
Cp0 = 0.566653; %kJ/(mol*K)
dCp = 0;
%-----
Ua = 0.4184; %kJ/(L*s*K)

```

```

mc = 2;          %g/s
Cpc= 0.028;      %kJ/(M*K)
Ta0 = 315;       %K
%-----
BETA0 = 0.2542;
RHOC = 3340; %g/L
PHI = 0.8; %ADIMENSIONAL
Ac = 0.0019; % m^2
%-----
R = (101.325*22.414/(1000*273.15)); %kJ/(mol*K)
W = 0.6;          %g
XA0 = 0;
P0 = 1;
[uu,vv] = ode45(@diferencialPBRCOCO,[0 W],[XA0 T0 Ta0
P0],[],dHrxn0,Cp0,Tr,dCp,CA0,CB0,T0,A,Ea,R,Ainv,Eainv,alpha,beta,gama,delta,FA0
,Ua,mc,Cpc,BETA0,RHOC,PHI,Ac);
%-----
W = uu;
XA = vv(:,1);
T = vv(:,2);
Ta = vv(:,3);
P = vv(:,4);
%-----
CA = CA0*(1-XA);
CB = CB0-CA0*XA;
CC = CA0*XA;
CD = 2*CA0*XA;
%-----
k = A*exp(-Ea/(R*T));% L^(1.0896)/(g cat * seg * mol^(0.0896)
kinv = Ainv*exp(-Eainv/(R*T));% L^(1.6719)/(g cat * seg * mol^(0.6719)
rA = -k*CA.^alpha*CB.^beta+kinv*CC.^gama*CD.^delta;
%-----
f1 = figure(1);
set(f1,'color',[1 1 1])
plot(W,XA,'b')
legend('=Datos del modelo cinético no elemental a 363.15 K')
xlabel('W_{CAT} [g]')
ylabel('X_{A}')

```

```

%-----
%-----
f3 = figure(2);
set(f3, 'color', [1 1 1])
plot(W,T, 'r', W, Ta, '--k')
legend('T (Temperatura del fluido del proceso)', 'T_{a} (Temperatura del fluido
de servicio)')
xlabel('W_{CAT} [g]')
ylabel('T [K]')
%-----

f4 = figure(3);
set(f4, 'color', [1 1 1])
plot(W,P, 'r')
legend('Catalizador=CaO')
xlabel('W_{CAT} [g]')
ylabel('P [Atm]')

```

## **ANEXO 2**

### **RECOMENDACIONES**

Se recomienda llevar a cabo estudios más detallados que aborden diversas temperaturas y condiciones de reacción en la ruta química estudiada en este trabajo. La variación sistemática de estos parámetros tiene el potencial de identificar condiciones óptimas que maximicen la eficacia del proceso, al tiempo que minimizan la formación de subproductos no deseados.

Adicionalmente, se sugiere considerar la realización de nuevas investigaciones destinadas a mejorar aún más la eficiencia del proceso. Un área particularmente prometedora es la exploración de catalizadores heterogéneos. Estos podrían presentar ventajas significativas en términos de recuperación y reutilización del catalizador, además de facilitar la separación de productos. La optimización de la configuración del reactor también se presenta como un tema clave de investigación para maximizar la conversión y la selectividad del producto final.