

# **Modelo de Mezclas – Mezcla de Biocombustible mediante Ecuaciones Diferenciales de Primer Orden**

## **Autores:**

Luisa Fernanda Chacón

Juan Mosquera

Sebastián Barragán

Santiago Pérez Solano

Wilfredo Quintana

## **Docente:**

Jesús Alberto León Tordecilla

Programa de Ingeniería

Universidad del Sinú – Elías Bechara Zainúm

Facultad de Ingeniería

Cartagena, Bolívar

---

**2025 – II**

## Resumen

Este estudio aborda la modelación matemática del proceso de producción y mezcla del biocombustible a partir de aceite reciclado. El propósito fue determinar las proporciones óptimas de los componentes y el tiempo requerido para alcanzar una mezcla adecuada, especialmente en contextos de pequeña escala.

La metodología se basó en la formulación de Ecuaciones Diferenciales Lineales de Primer Orden, aplicando la Ley de Acción de Masas y un modelo simplificado de pseudo primer orden para la reacción de transesterificación.

Los resultados indican que para lograr una conversión del 90 % del aceite reciclado se requieren aproximadamente 18 horas de reacción continua. Además, el modelo de mezcla predice que el tiempo necesario para que un tanque, partiendo de diésel puro, alcance una concentración del 10 % de biocombustible (mezcla B10) es de 1.05 horas.

Se concluye que las ecuaciones diferenciales son herramientas efectivas para predecir la dinámica de estos procesos de ingeniería.

**Palabras clave:** Ecuaciones Diferenciales, Biodiésel, Transesterificación, Modelo de Mezcla, Pseudo Primer Orden.

## Abstract

This study addresses the mathematical modeling of the production and blending process of biofuel obtained from recycled oil. The purpose was to determine the optimal component proportions and the time required to achieve an adequate mixture, especially in small-scale contexts.

The methodology was based on the formulation of First-Order Linear Differential Equations, applying the Law of Mass Action and a simplified pseudo first-order model for the transesterification reaction.

The results indicate that to achieve a 90 % conversion of recycled oil, approximately 18 hours of continuous reaction are required. In addition, the mixing model predicts that the time needed for a tank starting with pure diesel to reach a 10 % biofuel concentration (B10 blend) is about 1.05 hours.

It is concluded that differential equations are effective tools for predicting the dynamics of these engineering processes.

**Keywords:** Differential Equations, Biodiesel, Transesterification, Mixture Model, Pseudo First Order.

## 1. Introducción

### 1.1 Planteamiento del Problema

En contextos educativos o de pequeña escala, como laboratorios universitarios, se experimenta con la producción de biocombustible a partir de aceite reciclado. Para su uso en motores, es necesario garantizar un poder calorífico adecuado, lo que requiere determinar las proporciones óptimas de los componentes.

El problema central radica en modelar la cinética química de la producción y la dinámica física de la mezcla continua con diésel.

### 1.2 Pregunta de Investigación

¿Cómo se puede formular un modelo matemático, utilizando ecuaciones diferenciales, para determinar la proporción óptima de una mezcla en base a los componentes del biocombustible, asegurando un rendimiento energético suficiente?

### 1.3 Objetivos del Estudio

**Objetivo General:** Modelar y resolver una serie de ecuaciones diferenciales que describan la dinámica de mezcla continua de biocombustible con diésel.

**Objetivos Específicos:**

1. Formular el modelo matemático con hipótesis simples y coherentes.
2. Resolver analíticamente la ecuación diferencial obtenida.
3. Simular escenarios con parámetros estimados y comparar con la solución analítica.
4. Evaluar el tiempo necesario para alcanzar una concentración objetivo de biocombustible.

## 2. Marco Teórico

### 2.1 1. Ecuaciones Diferenciales en el Modelado Químico

Las Ecuaciones Diferenciales (ED) son la herramienta matemática fundamental utilizada en este proyecto, ya que permiten traducir fenómenos físicos o químicos en expresiones matemáticas que describen su evolución en el tiempo. En el contexto de este trabajo, las ED permiten representar cómo cambia la concentración de los componentes del sistema (aceite, metanol, biodiésel y glicerina) con respecto al tiempo  $t$ .

Las Ecuaciones Diferenciales describen cómo una cantidad varía con respecto a otra, en este caso, cómo la concentración de los triglicéridos (aceite reciclado) disminuye conforme avanza la reacción de transesterificación. El modelo de la concentración de triglicéridos es una ecuación diferencial lineal de primer orden y separable.

**Solución:** La solución analítica de la ecuación diferencial:

$$\frac{dT}{dt} = -k_{app}T(t)$$

es:

$$T(t) = T_0 e^{-k_{app}t}$$

Esta solución, obtenida por separación de variables, describe un decaimiento exponencial de la concentración de triglicéridos con el tiempo, reflejando cómo el aceite se transforma progresivamente en biodiésel y glicerina.

### 2.2 2. Fundamentos de la Reacción de Transesterificación

La producción de biocombustible (éster metílico o biodiésel) a partir de aceite reciclado se lleva a cabo mediante el proceso de transesterificación, una reacción química ampliamente utilizada en la industria de los biocombustibles.

**Reacción Química:**



**Componentes Principales:**

- **Triglicéridos ( $T$ ):** Aceite reciclado que actúa como reactivo principal y fuente del biodiésel.
- **Metanol ( $M$ ):** Alcohol utilizado como segundo reactivo; participa en la ruptura de enlaces de los triglicéridos.
- **Éster Metílico ( $E$ ):** Producto principal de la reacción, comúnmente conocido como biodiésel.
- **Glicerina ( $G$ ):** Subproducto de la reacción, de menor valor energético.

Este proceso ocurre en presencia de un catalizador (generalmente hidróxido de sodio o potasio), que acelera la reacción sin consumirse.

### 2.3 3. Ley de Acción de Masas y Balances de Materia

La formulación del modelo de reacción se fundamenta en dos principios clave de la ingeniería química: la Ley de Acción de Masas y los Balances de Materia.

**Ley de Acción de Masas:** Establece que la velocidad de una reacción química es proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos, cada una elevada a un exponente igual a su coeficiente estequiométrico. Así, la velocidad de consumo de triglicéridos se expresa como:

$$r_T = k[T](t) \cdot [M](t)^3$$

**Balances de Materia:** La variación temporal de la concentración de cada componente está determinada por su consumo o formación en la reacción y su coeficiente estequiométrico:

$$\frac{dT}{dt} = -r_T, \quad \frac{dM}{dt} = -3r_T, \quad \frac{dE}{dt} = +3r_T, \quad \frac{dG}{dt} = +r_T$$

Estas ecuaciones reflejan que a medida que se consumen triglicéridos y metanol, se generan biodiésel y glicerina en proporciones fijas de 3:1.

### 2.4 4. Modelo de Pseudo Primer Orden (Simplificación Práctica)

Para simplificar el sistema y hacerlo resoluble analíticamente, se aplica una aproximación común en la cinética química: el modelo de pseudo primer orden.

**Hipótesis de Concentración Constante:** Se asume que el metanol ( $M$ ) se encuentra en exceso, por lo que su concentración permanece prácticamente constante durante la reacción ( $M \approx M_0$ ).

**Constante de Velocidad Aparente ( $k_{app}$ ):** Esta hipótesis permite definir una constante de velocidad efectiva o aparente:

$$k_{app} = k[M_0]^3$$

El modelo cinético se reduce entonces a una ecuación diferencial lineal de primer orden:

$$\frac{dT}{dt} = -k_{app}T$$

### Impacto de los Parámetros:

- $k_{app}$  controla la rapidez de la reacción; puede modificarse mediante la temperatura, la cantidad de catalizador o la concentración inicial de metanol.
- $T_0$  afecta la cantidad máxima de producto ( $E_{max} = 3T_0$ ), pero no la velocidad de reacción.

## 2.5 5. Interpretación de la Solución y Conversión

La solución analítica del modelo permite predecir el comportamiento de los componentes en el tiempo y cuantificar el avance de la reacción.

### Comportamiento:

- La concentración de triglicéridos  $T(t)$  disminuye exponencialmente.
- Las concentraciones de biodiésel  $E(t)$  y glicerina  $G(t)$  aumentan hasta alcanzar un valor máximo.

**Conversión:** La conversión porcentual representa el fracción de aceite que ha reaccionado en función del tiempo:

$$X(t) = 1 - \frac{T(t)}{T_0}$$

A partir de la simulación, se observa que la conversión alcanza aproximadamente un 30 % en

3 horas, un 67 % en 9 horas y hasta un 90 % en 18 horas, evidenciando el avance gradual y exponencial de la reacción de transesterificación.



### 3. Metodología

#### 3.1 1. Diseño del Estudio: Modelado Matemático con Ecuaciones Diferenciales

El estudio se desarrolló bajo un diseño de modelado y simulación, enfocado en la aplicación de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) para describir la cinética de la reacción química de transesterificación en un reactor por lotes batch.

El objetivo general de esta etapa fue modelar y resolver un conjunto de ecuaciones diferenciales que representen la dinámica temporal de la conversión del aceite reciclado (triglicéridos) en biodiésel (éster metílico) y glicerina, aplicando principios de balance de materia y la Ley de Acción de Masas.

#### 3.2 2. Formulación del Modelo Matemático (Fase 2)

Se establecieron las bases del modelo químico para la producción de biocombustible, considerando la reacción de **Triglicérido** ( $T$ ) con **Metanol** ( $M$ ), dando lugar a la formación de **Éster Metílico** ( $E$ ) (biodiésel) y **Glicerina** ( $G$ ).

##### Identificación de Variables:

- **Variables Dependientes (Concentraciones):** Triglicéridos ( $T$ ), Metanol ( $M$ ), Éster Metílico ( $E$ ) y Glicerina ( $G$ ).
- **Variable Independiente:** Tiempo ( $t$ ).
- **Parámetros y Constantes:** Constante de velocidad de reacción ( $k$ ), Constante de velocidad aparente ( $k_{app}$ ), y concentración inicial de metanol ( $[M]_0$ ).

**Formulación por Ley de Acción de Masas:** La velocidad de reacción se describe como proporcional al producto de las concentraciones de los reactivos, según:

$$r_T = k[T](t) \cdot [M](t)^3$$

**Balances de Materia:** Considerando la estequiometría 3 : 1 entre metanol y triglicérido,

las ecuaciones diferenciales iniciales para cada componente son:

$$\frac{dT}{dt} = -r_T, \quad \frac{dM}{dt} = -3r_T, \quad \frac{dE}{dt} = +3r_T, \quad \frac{dG}{dt} = +r_T$$

**Simplificación a Modelo de Pseudo Primer Orden:** En un entorno experimental o de laboratorio, el metanol se usa en exceso, por lo que su concentración se considera constante ( $M \approx M_0$ ). Esta hipótesis simplifica el modelo a un sistema lineal de primer orden, definiendo:

$$k_{app} = k[M_0]^3$$

De esta forma, la ecuación central del modelo se expresa como:

$$\frac{dT}{dt} = -k_{app}T(t)$$

### 3.3 3. Solución y Análisis Analítico (Fase 3)

La ecuación diferencial simplificada fue resuelta analíticamente para obtener las expresiones de concentración de los reactivos y productos en función del tiempo.

**Método de Solución:** La ecuación para los triglicéridos se resolvió mediante **separación de variables e integración directa**, obteniendo la siguiente solución general:

$$T(t) = T_0 e^{-k_{app}t}$$

**Expresiones de los Productos:** Aplicando la relación estequiométrica, se obtienen las expresiones analíticas para los productos:

$$E(t) = 3T_0(1 - e^{-k_{app}t}) \quad \text{y} \quad G(t) = T_0(1 - e^{-k_{app}t})$$

### 3.4 4. Simulación y Prueba del Modelo (Fases 3 y 4)

La simulación numérica permitió validar los resultados analíticos y observar el comportamiento dinámico de las concentraciones bajo condiciones experimentales controladas.

**Herramienta de Simulación:** El modelo fue implementado y graficado en el software MATLAB (versión R2023b), permitiendo comparar los resultados teóricos con escenarios simulados a distintos tiempos de reacción.

**Análisis de Escenarios:** Se analizaron diferentes duraciones de reacción:

- A las 3 horas, se alcanzó aproximadamente un 30 % de conversión.
- A las 18 horas, se alcanzó una conversión del 90 %.

**Prueba de Consistencia del Modelo:**

- **Consistencia de Hipótesis:** El supuesto de pseudo primer orden es razonable, ya que el metanol en exceso asegura una concentración prácticamente constante.
- **Consistencia Dimensional:** Las unidades en ambos lados de la ecuación  $\frac{dT}{dt} = -k_{app}T(t)$  coinciden, con [Concentración/Tiempo].
- **Consistencia Estequiométrica:** El modelo conserva la proporción 3:1 entre biodiésel y glicerina, cumpliendo la Ley de Acción de Masas.

## 4. Resultados

### 4.1 Soluciones Analíticas

$$T(t) = T_0 e^{-k_{app} t} \quad (1)$$

$$[E](t) = 3[T]_0(1 - e^{-k_{app} t}) \quad (2)$$

$$[G](t) = [T]_0(1 - e^{-k_{app} t}) \quad (3)$$

### 4.2 Prueba del Modelo

Una vez resuelto el modelo matemático, se analizaron los resultados bajo parámetros simulados con concentraciones obtenidas de un experimento real. Se utilizó la herramienta **MATLAB** para graficar los resultados y generar un código que simule la predicción bajo condiciones experimentales.

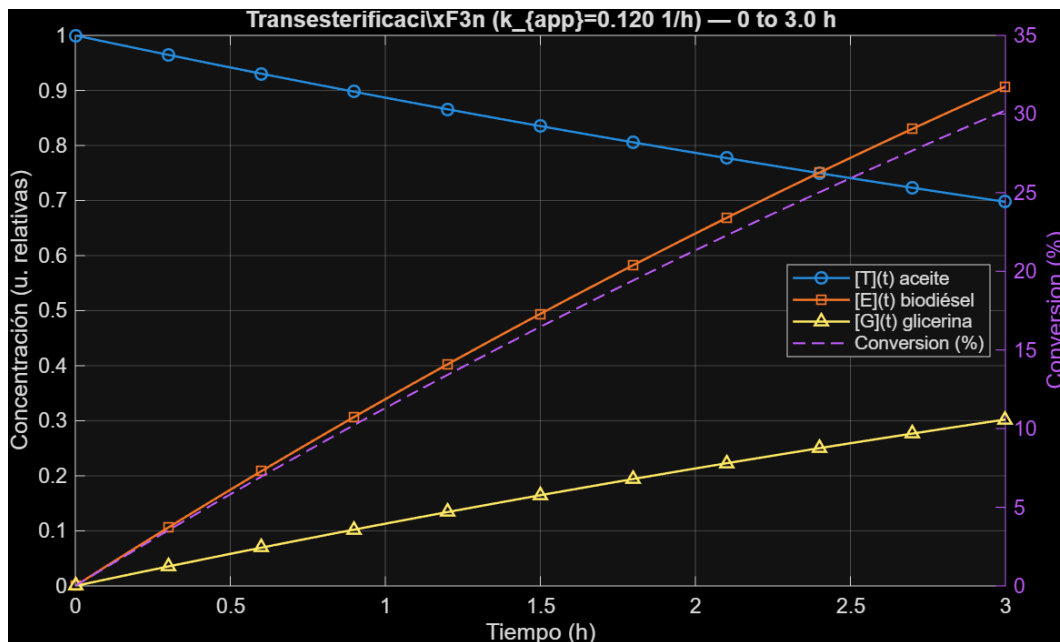


Figura 1: Comportamiento de la transesterificación en 3 horas.

En esta gráfica se observa que los triglicéridos disminuyen exponencialmente con el tiempo, mientras que el biodiésel aumenta rápidamente hasta estabilizarse. La glicerina tam-

bién aumenta, pero de manera más lenta.

Se puede notar que:

- A medida que avanza el tiempo, el aceite se transforma en biodiésel y glicerina.
- Las curvas ascendentes representan la formación de productos; la descendente, la disminución del reactivo.
- La curva de conversión muestra cuánto del aceite inicial ha reaccionado.
- En este caso, solo se alcanzó aproximadamente un 30 % de conversión, lo que indica que faltó tiempo para completar la reacción.

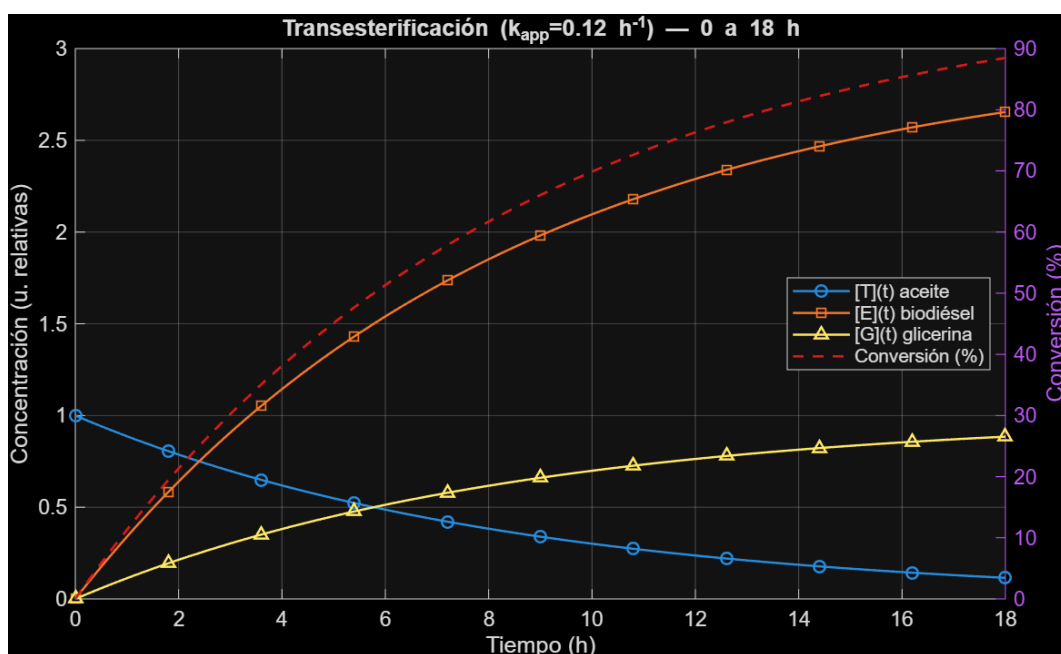


Figura 2: Comportamiento de la transesterificación en 18 horas.

Al extender el tiempo de reacción a 18 horas, se observan los siguientes resultados:

- El aceite  $[T]$  disminuye casi por completo, indicando que se ha consumido.
- El biodiésel  $[E]$  aumenta hasta su punto máximo, siendo el producto principal.
- La glicerina  $[G]$  también aumenta, aunque en menor proporción.

- La conversión alcanza cerca del 90 %, mostrando una reacción casi completa.

**En resumen:** En 18 horas, el aceite se transforma casi totalmente en biodiésel y glicerina, evidenciando un proceso de reacción muy avanzado y eficiente.

## 5. Discusión

### Verificación de Consistencia del Modelo

#### ¿Son razonables las hipótesis?

Sí. La principal hipótesis es el modelo de *pseudo primer orden*, que asume que la concentración del metanol  $[M]$  permanece constante, es decir:

$$[M] \approx [M]_0$$

Esta es una hipótesis razonable en el contexto práctico, ya que el metanol se utiliza en exceso para impulsar la reacción hacia la formación de productos (éster metílico o biodiésel y glicerina).

#### ¿Son dimensionalmente consistentes las ecuaciones?

Sí. La ecuación diferencial para los triglicéridos es:

$$\frac{dT}{dt} = -k_{app} T(t)$$

En el lado izquierdo, la dimensión corresponde a concentración/tiempo, por ejemplo (kg/L)/h. En el lado derecho, las dimensiones son *constante de velocidad*  $\times$  *concentración*. Como  $k_{app} = k[M]_0^3$ , su unidad es 1/tiempo, por lo que ambos lados de la ecuación son dimensionalmente consistentes.

#### ¿Es el modelo internamente consistente?

Sí. El modelo es internamente consistente porque respeta la *Ley de Acción de Masas* y la *estequiometría* de la reacción.

La velocidad de consumo del reactivo  $[T]$  (aceite) es directamente proporcional a la velocidad de formación de los productos: biodiésel  $[E]$  y glicerina  $[G]$ . El factor estequiométrico 3:1 entre biodiésel y glicerina se mantiene en las soluciones, donde la tasa de formación

es:

Para biodiésel:  $3k_{app}[T]$ , y para glicerina:  $k_{app}[T]$ .

## Existencia y Unicidad de Soluciones

### ¿Tienen soluciones las ecuaciones? ¿Son únicas?

Sí. La ecuación diferencial

$$\frac{dT}{dt} = -k_{app}T(t)$$

es una ecuación lineal y separable de primer orden. Tiene una solución única dada la condición inicial  $T(0) = T_0$ :

$$[T](t) = [T]_0 e^{-k_{app}t}$$

La obtención de esta solución es sencilla mediante separación de variables e integración directa.

### ¿Proporcionan estas soluciones una respuesta al problema en estudio?

Sí. El modelo de reacción describe cómo se forman las proporciones de componentes (biodiésel y glicerina) en función del tiempo, cumpliendo con el objetivo principal del estudio. Además, el modelo de mezcla permite estimar el tiempo necesario para alcanzar una concentración objetivo de biocombustible, respondiendo al objetivo de análisis dinámico de la mezcla.

## Análisis de Variaciones

### ¿Qué variaciones se pueden hacer a las constantes?

La constante principal del modelo es la constante de velocidad aparente  $k_{app}$ , la cual puede modificarse ajustando:

- La temperatura (que incrementa  $k$ ).
- La concentración del catalizador (que afecta la cinética global).
- El exceso de metanol  $[M]_0$ , dado que  $k_{app} = k[M]_0^3$ .

Variar  $k_{app}$  afecta directamente la rapidez con la que el aceite se transforma en biodiésel y



glicerina.

**¿Qué variaciones se pueden hacer a las condiciones iniciales?**

La condición inicial principal es la concentración de triglicéridos  $T_0$ , correspondiente al aceite reciclado en el reactor. Variar  $T_0$  no afecta la rapidez de la reacción ( $k_{app}$ ), pero sí la cantidad máxima de producto formado, ya que:

$$[E]_{\max} = 3[T]_0$$

Por lo tanto,  $T_0$  determina la cantidad total de biodiésel que puede obtenerse, mientras que  $k_{app}$  controla la velocidad de la reacción.

## 6. Conclusiones

### 6.1 1. Respuesta a la Pregunta de Investigación

La pregunta de investigación planteada fue: “¿Cómo se puede formular un modelo matemático, utilizando ecuaciones diferenciales, para determinar la proporción óptima de una mezcla en base a las proporciones de componentes para crear biocombustible que genere suficiente poder calorífico?”

**Respuesta:** Se formuló un modelo matemático para la producción de biocombustible (éster metílico o biodiésel), basado en la de Acción de Masas y simplificado mediante el supuesto de pseudo primer orden. El modelo utiliza Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (EDO) de primer orden para describir la evolución de las concentraciones en el tiempo.

Dadas una concentración inicial de triglicéridos ( $T_0$ ) y una constante de velocidad aparente ( $k_{app}$ ), las soluciones analíticas del modelo son:

- **Concentración de Triglicéridos (aceite):**

$$T(t) = T_0 e^{-k_{app}t}$$

- **Concentración de Biodiésel (éster metílico):**

$$E(t) = 3T_0(1 - e^{-k_{app}t})$$

- **Concentración de Glicerina:**

$$G(t) = T_0(1 - e^{-k_{app}t})$$

Estas ecuaciones permiten predecir la cantidad de biocombustible producido ( $E(t)$ ) en cualquier instante de tiempo, lo cual es esencial para alcanzar una proporción de mezcla objetivo y estimar la eficiencia de conversión del aceite en biodiésel.

### 6.2 2. Puntos Clave del Estudio

El modelo de la reacción de transesterificación demostró ser un sistema matemáticamente robusto y físicamente coherente:

- **Modelo válido y consistente:** La ecuación principal  $\frac{dT}{dt} = -k_{app}T(t)$  es dimensionalmente coherente y respeta tanto la Ley de Acción de Masas como la estequiometría de la reacción (relación 3 : 1 entre biodiésel y glicerina).
- **Decaimiento exponencial del reactivo:** La concentración de aceite ( $T$ ) disminuye exponencialmente con el tiempo, mientras que los productos ( $E$  y  $G$ ) aumentan hasta alcanzar valores máximos.
- **Influencia del tiempo:** El tiempo de reacción es el factor más determinante en la conversión. Las simulaciones mostraron que en 3 horas se logra aproximadamente un **30 % de conversión**, mientras que en 18 horas la conversión se acerca al 90 %, lo que indica un proceso casi completo.
- **Influencia de parámetros:** La constante de velocidad aparente ( $k_{app}$ ) controla la rapidez de la reacción y puede modificarse variando la temperatura, la concentración de catalizador o el exceso de metanol. La concentración inicial de aceite ( $T_0$ ) determina la cantidad máxima de producto, aunque no afecta la rapidez de la reacción.

### 6.3 3. Líneas de Investigación Futura y Recomendaciones

A partir del desarrollo de este estudio, se proponen las siguientes líneas de mejora y ampliación del modelo:

- **Refinamiento de fases intermedias:** Incluir las etapas intermedias de la transesterificación (*Triglicérido*  $\rightarrow$  *Diglicérido*  $\rightarrow$  *Monoglicérido*  $\rightarrow$  *Glicerina*) para un modelado más preciso y una mejor correlación con datos experimentales.
- **Modelado del consumo de metanol:** En condiciones donde el exceso de metanol no sea alto, se recomienda modelar la variación temporal de  $[M]$  mediante una ecuación adicional para  $\frac{d[M]}{dt}$ , eliminando la suposición de concentración constante.
- **Evaluación práctica de la mezcla final:** Se sugiere incorporar una evaluación del poder calorífico de la mezcla final, correlacionando las proporciones teóricas obtenidas con la eficiencia energética en motores, para vincular los resultados matemáticos con aplicaciones prácticas reales.

En conclusión, el modelo desarrollado logra representar adecuadamente la cinética de producción de biodiésel a partir de aceite reciclado, proporcionando una base sólida para comprender, predecir y optimizar procesos de mezcla y conversión en sistemas de pequeña escala.

## Referencias

- Acosta-Rubio, D., Castro-Camacho, L., & Moreno-Arias, C. A. (2021). *Pirólisis rápida para producir biocombustibles con residuos sólidos urbanos: estudio de caso, Madrid, Cundinamarca*. Gestión y Ambiente, 24(Supl3), 47–58.
- Barón-Molina, M. J. (2013). *Modelo de programación matemática para la cadena productiva del biocombustible biodiésel, en el departamento del Meta, Colombia*. (Tesis de pregrado). Repositorio Institucional Universidad Católica de Colombia.
- Felder, R. M., & Rousseau, R. W. (2019). *Elementary Principles of Chemical Processes*. Wiley.
- HRom. (2024, 8 de septiembre). *HAZ COMBUSTIBLE POR MUY POCO DINERO - BIODIÉSEL* [Video]. YouTube. <http://www.youtube.com/watch?v=K87LU6d21w0>
- MATLAB (versión R2023b). (2023). Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc.
- Ministerio de Minas y Energía (2021). *Resolución 40421 de 2021*. <https://fedebiocombustibles.com>
- Zill, D. G. (2018). *A First Course in Differential Equations*. Cengage.