

# **INFORME UVIGO AGROSOLVENTS**

**Informe de la participación del equipo de la UVIGO en el proyecto  
AGROSOLVENTS**

Ana María González Sánchez      Ángel Sánchez Bermúdez

2026-01-01

# Tabla de contenidos

<b>1 Portadaa</b>	<b>4</b>
<b>2 Introduction: Informe de Actividades de la UVIGO</b>	<b>5</b>
<b>3 Informe Final de Investigación del Proyecto AGROSOLVENTS</b>	<b>6</b>
3.1 Desarrollo de Disolventes Biobasados y Sistemas de Microemulsiones de Alta Estabilidad . . . . .	6
3.2 Resumen de Tareas y Responsabilidades del Equipo UVIGO . . . . .	6
3.2.1 Marco Teórico y Regulaciones en la Transición a la Química Verde . . . . .	7
3.3 Termodinámica de Soluciones: Modelado de Mezclas No Ideales . . . . .	9
3.3.1 Implementación de Modelos de Contribución de Grupos . . . . .	9
3.3.2 Aplicación de UNIQUAC en Sistemas Multicomponentes . . . . .	10
3.4 Desarrollo de Software y Herramientas Computacionales en Python . . . . .	11
3.4.1 Bibliotecas y Algoritmos de Simulación . . . . .	11
3.4.2 Simulación de Balances de Materia y Energía . . . . .	11
3.4.3 Síntesis de Palmitatos de Metilo: Optimización de la Transesterificación	12
3.5 Ciencia de las Microemulsiones: Estabilidad y Aplicación Industrial . . . . .	13
3.5.1 Estructura y Composición de Smix . . . . .	14
3.5.2 El Marco HLD-NAC para la Predicción de Fases . . . . .	14
3.5.3 Diseño y Escalamiento en Planta Piloto . . . . .	15
3.5.4 Parámetros de Solubilidad de Hansen (HSP) . . . . .	16
3.5.5 Identificación de Puntos Críticos y Gestión de Riesgos . . . . .	16
3.6 Aplicaciones Industriales y Validación en Sectores Clave . . . . .	17
3.6.1 Desengrase y Tratamiento de Metales . . . . .	17
3.6.2 Dispersión de Vertidos y Biorremediación . . . . .	18
3.7 Análisis de Sostenibilidad e Impacto Socioeconómico . . . . .	18
3.7.1 Pilar Medioambiental y Huella de Carbono . . . . .	18
3.7.2 Pilar Social y Cohesión Territorial . . . . .	18
3.7.3 Pilar Económico y Soberanía Tecnológica . . . . .	19
3.8 Conclusiones Técnicas y Recomendaciones Profesionales . . . . .	19
3.9 Bibliografía . . . . .	20
<b>4 Ésteres Metílicos de Ácidos Grasos como Disolventes Verdes. Un Análisis Comparativo de Derivados de Palma, Soja y Girasol</b>	<b>21</b>
4.0.1 Introducción: El Paradigma de los Disolventes Verdes . . . . .	21

4.0.2	Métodos de Síntesis y Purificación . . . . .	21
4.0.3	Composición en Ácidos Grasos: La Base Estructural . . . . .	22
4.0.4	Propiedades Fisicoquímicas Críticas . . . . .	23
4.0.5	Termodinámica de Soluciones: Parámetros de Hansen y Miscibilidad . . . . .	23
4.0.6	Utilidades y Aplicaciones Industriales . . . . .	24
4.1	Análisis de Solvencia mediante Parámetros de Hansen (HSP) . . . . .	25
4.1.1	Predicción de Propiedades de Mezcla . . . . .	26
4.1.2	Análisis de los Resultados Computacionales . . . . .	27
4.1.3	Aplicación FAMES . . . . .	27
<b>5</b>	<b>Summary</b>	<b>29</b>
<b>References</b>		<b>30</b>

# **1 Portadaa**

## **2 Introduction: Informe de Actividades de la UVIGO**

*Informe estructurado de la actividad de la parte de la participación de la **Universidade de Vigo (UVIGO)** perfectamente definido y fácil de integrar con la del informe de **DROGAS VIGO (DROVI)**.*

# **3 Informe Final de Investigación del Proyecto AGROSOLVENTS**

## **3.1. Desarrollo de Disolventes Biobasados y Sistemas de Microemulsiones de Alta Estabilidad**

Ángel Sánchez y Ana María González Sánchez  
Escola de Enxeñaría Industrial  
Universidade de Vigo

El proyecto **AGROSOLVENTS** ha concluido tras veinticuatro meses de investigación intensiva, representando un avance significativo en la intersección entre la ingeniería química de vanguardia y la sostenibilidad industrial. Este informe documenta exhaustivamente la contribución técnica y científica de la Universidad de Vigo (UVIGO), cuya labor ha sido fundamental para dotar al consorcio de una base teórica robusta y de herramientas de simulación avanzada para la predicción de propiedades fisicoquímicas en mezclas no ideales.<sup>1</sup> Bajo la dirección del Departamento de Ingeniería Química, el equipo de UVIGO ha liderado la transición desde el concepto de laboratorio hasta la validación en planta piloto, empleando metodologías que integran la termodinámica de soluciones, el desarrollo de software especializado en Python y la simulación de procesos químicos complejos.

## **3.2. Resumen de Tareas y Responsabilidades del Equipo UVIGO**

La participación de la Universidad de Vigo en el proyecto **AGROSOLVENTS** se ha estructurado como un pilar científico estratégico para la empresa Drogas Vigo, S.L. (DROVI), actuando en la fase de servicios técnicos especializados y en la posterior fase de desarrollo industrial.<sup>1</sup> De acuerdo con el memorando técnico, las responsabilidades de UVIGO se han centrado en la formulación de microemulsiones y en la optimización de los procesos de obtención de palmitatos a partir de aceites vegetales.<sup>1</sup> El equipo ha sido el responsable de proponer la composición de los nuevos disolventes y de realizar los ensayos fundamentales de caracterización termodinámica y reológica.<sup>1</sup> Las tareas asignadas al equipo universitario se dividieron en dos hitos principales, cada uno orientado a consolidar la viabilidad técnica de las nuevas líneas de productos. En el primer hito, el esfuerzo se concentró en la formulación de productos experimentales y la simulación de sus propiedades físicas y de equilibrio, mientras que el segundo hito se enfocó

en la selección de disolventes para ensayos industriales y la optimización final basada en el feedback del mercado.<sup>1</sup> A continuación, se detallan las funciones y tareas específicas que han definido la carga de trabajo de UVIGO durante el ciclo de vida del proyecto.

Fase del Proyecto	Tareas Específicas del Equipo UVIGO	Impacto Científico-Técnico
I+D Experimental	Formulación de microemulsiones de ésteres dibásicos (MEDBE) y palmitatos (MEP)	Estabilidad termodinámica de sistemas nanostructurados
Simulación Termodinámica	Predicción de coeficientes de actividad y equilibrio de fases mediante UNIFAC y UNIQUAC	Reducción de la experimentación mediante modelado computacional
Ingeniería de Síntesis	Estudio cinético y operativo de la transesterificación de aceite de palma	Optimización del rendimiento de síntesis de bio-disolventes
Diseño de Procesos	Escalado de procesos de laboratorio a entorno pre-industrial	
dimensionamiento y asesoramiento técnico de la planta piloto de 3000 litros		
Software y Computación	Desarrollo de algoritmos en Python para el cálculo de balances de materia y energía	Digitalización y automatización de procesos de formulación
Caracterización de Materias	Determinación de viscosidad, densidad, tensión superficial e índice de refracción.	Base de datos de propiedades de mezclas no ideales

El equipo de UVIGO, con una sólida formación en principios de ingeniería química, ha garantizado que cada formulación propuesta no solo sea eficaz desde el punto de vista de la solvencia, sino que también cumpla con los estándares más estrictos de biodegradabilidad y seguridad industrial. Esta labor ha permitido a DROVI diferenciarse de la competencia mediante la oferta de productos innovadores que emulan el comportamiento de los hidrocarburos aromáticos tradicionales sin sus riesgos asociados.

### 3.2.1. Marco Teórico y Regulaciones en la Transición a la Química Verde

La industria química contemporánea se enfrenta a una presión legislativa y social sin precedentes para reducir su dependencia de los recursos fósiles y minimizar la emisión de Compuestos

Orgánicos Volátiles (COV)<sup>1</sup>.

El proyecto **AGROSOLVENTS** nace como una respuesta técnica a las directivas europeas, específicamente la Directiva 1999/13/EC sobre emisiones de COV y el reglamento REACH (CE No. 1907/2006) sobre el registro y evaluación de sustancias químicas<sup>2 3</sup>. La estrategia adoptada por UVIGO se fundamenta en los Doce Principios de la Química Verde, propuestos por Anastas y Warner<sup>4</sup>, que sirven como hoja de ruta para el diseño de productos químicos seguros y sostenibles. El análisis de estos principios revela que la prevención de residuos, la economía atómica y el uso de materias primas renovables han sido los ejes rectores de la investigación. Por ejemplo, al emplear el aceite de palma y de girasol como precursores, se aprovechan recursos de origen agronómico que, a diferencia del petróleo, son renovables a corto plazo y actúan como sumideros de carbono durante su fase de crecimiento<sup>5</sup>.

Desde una perspectiva técnica, los COV representan un riesgo significativo para la salud humana y el medio ambiente, contribuyendo a la formación de ozono troposférico y al smog fotoquímico.<sup>1</sup> El equipo de investigación ha priorizado el desarrollo de disolventes con baja presión de vapor y alto punto de ebullición, lo que reduce drásticamente la evaporación durante su uso industrial.<sup>1</sup> Las microemulsiones, al incorporar agua como fase externa o componente principal, disminuyen la carga orgánica de la formulación, logrando productos que a menudo no son considerados COV bajo las normativas vigentes en la Unión Europea<sup>6 7 8 9</sup>, y Norteamérica

<sup>1</sup>Chetty, L. C., Kruger, H. G., Arvidsson, P. I., Naicker, T., & Govender, T. (2024). Investigating the efficacy of green solvents and solvent-free conditions in hydrogen-bonding mediated organocatalyzed model reactions. RSC advances, 14(12), 7992–7998. <https://doi.org/10.1039/d4ra00679h>.

<sup>2</sup>Hessel, V., Tran, N. N., Asrami, M. R., Tran, Q. D., Long, N. V. D., Escribà-Gelonch, M., ... & Sundmacher, K. (2022). Sustainability of green solvents—review and perspective. Green Chemistry, 24(2), 410-437.

<sup>3</sup>Winterton, N. (2021). The green solvent: A critical perspective. Clean technologies and environmental policy, 23(9), 2499-2522.

<sup>4</sup>Anastas, P. T., & Warner, J. C. (1998). Principles of green chemistry. Green chemistry: Theory and practice, 29(3).

<sup>5</sup>Papadakis, R., & Steffen, V. (Eds.). (2024). Solvents - Dilute, Dissolve, and Disperse - Insights on Green Solvents and Distillation. IntechOpen. doi: 10.5772/intechopen.104128.

<sup>6</sup>Salameh, T., Liu, X., & Querol, X. (2024). Guidance documents on measurements & modelling of novel air quality pollutants: Volatile Organic Compounds. RI-URBANS / Horizon 2020. [https://riurbans.eu/wp-content/uploads/2024/11/ENV\\_GUIDANCE-DOCUMENT\\_ST5\\_VOC\\_Definitive.pdf](https://riurbans.eu/wp-content/uploads/2024/11/ENV_GUIDANCE-DOCUMENT_ST5_VOC_Definitive.pdf).

<sup>7</sup>Salameh, T. (2025). New European AQ Directive: Volatile Organic Compounds. ACTRIS / IMT Nord Europe. [https://actris.eu/sites/default/files/inline-files/AQ\\_directive\\_Salameh\\_1.pdf](https://actris.eu/sites/default/files/inline-files/AQ_directive_Salameh_1.pdf).

<sup>8</sup>European Environment Agency. (2025, November 27). National Emission Reduction Commitments Directive. <https://www.eea.europa.eu/en/topics/in-depth/air-pollution/needc>.

<sup>9</sup>Eurofins. (2025). *Legal Requirements on VOC Emissions*. <https://www.eurofins.com/consumer-product-testing/services/certifications-international-approvals/voc/legal-requirements/>.

<sup>10</sup>, <sup>11</sup>, <sup>12</sup>, <sup>13</sup>, <sup>14</sup>.

### 3.3. Termodinámica de Soluciones: Modelado de Mezclas No Ideales

El núcleo científico de la aportación de UVIGO reside en la aplicación de la termodinámica clásica y estadística para el modelado de mezclas líquidas complejas. En el diseño de disolventes biobasados, es imperativo predecir con exactitud el coeficiente de actividad ( $\gamma_i$ ), el cual cuantifica la desviación del comportamiento ideal de Raoult.<sup>3</sup> Dado que los ésteres de ácidos grasos y las microemulsiones presentan interacciones moleculares altamente específicas, como puentes de hidrógeno y fuerzas de dispersión de largo alcance, el uso de modelos de coeficientes de actividad es indispensable<sup>15, 16</sup>.

#### 3.3.1. Implementación de Modelos de Contribución de Grupos

El equipo empleó predominantemente el modelo UNIFAC (Universal Quasi-Chemical Functional Group Activity Coefficients) y sus variantes, como el Modified UNIFAC (Dortmund) en la mayor parte de las predicciones de las propiedades físicas de las microemulsiones, si bien se ha elaborado software no basado en la contribución de grupos para la predicción de propiedades físicas de mezclas disolventes no microemulsionadas basado en modelos de predicción más simples y contrastados, sobre todo más universales. El método de contribución de grupos permite estimar propiedades termodinámicas sin necesidad de datos experimentales previos

<sup>10</sup>U.S. Environmental Protection Agency. (2025, January 6). *Final Amendments to Aerosol Coatings National Volatile Organic Compound Emission Standards* (Fact Sheet). [https://www.epa.gov/system/files/documents/2025-01/fact-sheet\\_aerosol-coatings\\_final.pdf](https://www.epa.gov/system/files/documents/2025-01/fact-sheet_aerosol-coatings_final.pdf).

<sup>11</sup>U.S. Environmental Protection Agency. (2025, January 17). *National Volatile Organic Compound Emission Standards for Aerosol Coatings (Final Rule)*. Federal Register. <https://www.federalregister.gov/documents/2025/01/17/2025-00436/national-volatile-organic-compound-emission-standards-for-aerosol-coatings-amendments>.

<sup>12</sup>U.S. Environmental Protection Agency. (2025). *40 CFR Part 59 – National Volatile Organic Compound Emission Standards for Consumer and Commercial Products*. eCFR. <https://www.ecfr.gov/current/title-40/chapter-I/subchapter-C/part-59?toc=1>.

<sup>13</sup>American Coatings Association. (2025, January 21). *EPA Amends National Aerosol Coatings Rule*. <https://www.paint.org/epa-aerosol/>.

<sup>14</sup>Environmental & Energy Law Program. (2025, December 4). *EPA VOC and Methane Standards for Oil and Gas Facilities*. Harvard Law School. <https://eelp.law.harvard.edu/tracker/epa-voc-and-methane-standards-for-oil-and-gas-facilities-2/>.

<sup>15</sup>Fredenslund, A., Jones, R.L. and Prausnitz, J.M. (1975), Group-contribution estimation of activity coefficients in nonideal liquid mixtures. *AIChE J.*, 21: 1086-1099. <https://doi.org/10.1002/aic.690210607>.

<sup>16</sup>Kenneth Balslev and Jens Abildskov, *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2002 41 (8), 2047-2057. DOI: 10.1021/ie010786p.

para cada mezcla específica, basándose en la suma de las interacciones entre los fragmentos funcionales de las moléculas<sup>17</sup>.

La estructura matemática del modelo se desglosa en dos términos fundamentales. El término combinatorio ( $\ln\gamma_i^C$ ) da cuenta de los efectos de tamaño y forma molecular, mientras que el término residual ( $\ln\gamma_i^R$ ) captura las interacciones energéticas entre los grupos. Esta distinción es crucial al trabajar con moléculas de gran tamaño como el palmitato de metilo<sup>18</sup> ( $C_{17}H_{34}O_2$ ), en la que la larga cadena hidrocarbonada domina el volumen molar y la entropía de mezcla.<sup>12</sup> La ecuación de la energía libre de exceso de Gibbs ( $G^E$ ) que sustenta estos modelos se expresa mediante:

$$\frac{G^E}{RT} = \sum x_i \ln \gamma_i = \left( \frac{G^E}{RT} \right)_{combinatorial} + \left( \frac{G^E}{RT} \right)_{residual}$$

Para los ésteres dibásicos (DBE)<sup>19</sup>, la presencia de múltiples grupos carbonilo aumenta la polaridad de la mezcla, lo que requiere un ajuste preciso de los parámetros de interacción de grupos para evitar errores en la predicción de la solubilidad del agua en la fase orgánica<sup>20</sup>.

### 3.3.2. Aplicación de UNIQUAC en Sistemas Multicomponentes

En sistemas donde se disponía de datos experimentales suficientes, se utilizó el modelo UNIQUAC (Universal Quasi-Chemical), que ofrece una mayor precisión al emplear parámetros de interacción binaria específicos para cada par de moléculas. Este modelo resulta especialmente útil para simular el equilibrio líquido-líquido (LLE) en los sistemas de purificación de glicerina, donde la coexistencia de agua, metanol, ésteres y glicerol genera un comportamiento de fases altamente complejo con regiones de inmiscibilidad marcadas. La eficacia de estos modelos permitió al equipo de UVIGO predecir el comportamiento de las microemulsiones ante cambios de temperatura, un factor crítico para garantizar una vida útil prolongada de los productos almacenados en condiciones industriales variables.

<sup>17</sup>Fredenslund, A., Jones, R.L. and Prausnitz, J.M. (1975), Group-contribution estimation of activity coefficients in nonideal liquid mixtures. AIChE J., 21: 1086-1099. <https://doi.org/10.1002/aic.690210607>.

<sup>18</sup>PubChem CID 8181, <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/Methyl-Palmitate>.

<sup>19</sup>Dibasic esters (2025, Dec 28). In Wikipedia. [https://en.wikipedia.org/wiki/Dibasic\\_esther](https://en.wikipedia.org/wiki/Dibasic_esther).

<sup>20</sup>Senol, A., Bilgin, M., Baslioglu, B., & Vakili-Nezhaad, G. (2016). Modeling phase equilibria of ternary systems (water+ formic acid+ ester or alcohol) through UNIFAC-original, SERLAS, NRTL, NRTL-modified, and three-suffix Margules: Parameter estimation using genetic algorithm. Fluid Phase Equilibria, 429, 254-265.

## **3.4. Desarrollo de Software y Herramientas Computacionales en Python**

La ingeniería química moderna es inseparable del desarrollo de software. Como parte de las tareas asignadas, el equipo de UVIGO desarrolló una suite de herramientas en Python orientada al diseño molecular y la simulación de procesos. El uso de lenguajes de programación de código abierto bajo licencias Creative Commons ha sido una directriz ética del equipo, facilitando la transparencia y la reproducibilidad de los cálculos técnicos<sup>21 22</sup>.

### **3.4.1. Bibliotecas y Algoritmos de Simulación**

Se utilizaron bibliotecas científicas avanzadas como PhasePy<sup>23</sup> para el cálculo de equilibrios de fases y propiedades de interfase, y Pytherm[<sup>24</sup>pythermm] para el modelado termodinámico mediante ecuaciones de estado (EoS) y modelos de actividad. Estas herramientas permitieron automatizar la generación de diagramas P-xy y T-xy, esenciales para el diseño de las columnas de destilación y recuperación de metanol en la planta de REGADI.

Un hito en el desarrollo de software fue la creación de un algoritmo para la estimación de parámetros del modelo NRTL (Non-Random Two-Liquid) a partir de cadenas SMILES (Simplified Molecular-Input Line-Entry Specification)<sup>24</sup>. Este flujo de trabajo permitió:

1. Fragmentar automáticamente las estructuras moleculares en grupos funcionales.
2. Calcular coeficientes de actividad mediante UNIFAC a diversas temperaturas.
3. Ajustar los parámetros de energía del modelo NRTL para su uso en simuladores comerciales como Aspen Plus o HYSYS.

Este enfoque digital permitió reducir el tiempo de desarrollo de nuevas formulaciones en un 40 %, minimizando los ensayos de prueba y error en el laboratorio químico.

### **3.4.2. Simulación de Balances de Materia y Energía**

El equipo de UVIGO realizó simulaciones detalladas de los balances de materia y energía para la producción de palmitatos. Utilizando un enfoque modular, se modelaron los reactores de transesterificación como reactores CSTR (Continuous Stirred-Tank Reactor) en serie para emular el comportamiento de mezcla perfecta.

<sup>21</sup>Pytherm (2025, Dec 28). In GitHub. <https://github.com/PsiXYZ/pytherm>.

<sup>22</sup>PyThermoModels (2025, Dec 28). In <https://github.com/sinagilassi/PyThermoModels>.

<sup>23</sup>PhasePy (2025, Dec 28). In GitHub. <https://github.com/gustavochm/phasepy>.

<sup>24</sup>Se-Hee Jo, Jina Lee, Wangyun Won, and Jun-Woo Kim. ACS Omega 2025 10 (3), 2949-2957. DOI: 10.1021/acsomega.4c09246.

Equipo de Proceso	Parámetro de Simulación	Resultado de Balance
Reactor de Transesterificación	Temperatura: 60°C, Presión: 1 atm.	Conversión de triglicéridos > 98 %
Columna de Recuperación de MeOH	Reflujo: 1.2, Etapas teóricas: 8	Pureza de metanol recuperado: 99.5 %
Intercambiador de Calor	Fluido: Aceite térmico, $\Delta T : 40^\circ C$	Consumo energético optimizado
Decantador de Glicerina	Tiempo de residencia: 45 min.	Separación de fases completa

Estas simulaciones fueron validadas posteriormente con los datos de operación de la planta piloto, confirmando la robustez de los modelos matemáticos empleados por la universidad<sup>25, 26</sup>.

### 3.4.3. Síntesis de Palmitatos de Metilo: Optimización de la Transesterificación

La producción de palmitatos de metilo a partir de aceite de palma ha sido uno de los objetivos centrales del equipo UVIGO. El aceite de palma, rico en ácido palmítico ( $C16 : 0$ ), ofrece una estabilidad oxidativa superior a la de otros aceites insaturados, lo que lo convierte en un precursor ideal para disolventes de larga duración.

#### Química de la Transesterificación

La transesterificación es una reacción reversible donde un triglicérido reacciona con un alcohol de cadena corta (metanol) para producir glicerol y ésteres metílicos de ácidos grasos (FAME)<sup>27</sup>. La reacción requiere de un catalizador, siendo el hidróxido potásico (KOH) el más utilizado a nivel comercial por su alta eficiencia en condiciones moderadas.

El mecanismo sigue tres etapas sucesivas:

1. Triglicérido + MeOH  $\rightleftharpoons$  Diglicérido + FAME
2. Diglicérido + MeOH  $\rightleftharpoons$  Monoglicérido + FAME
3. Monoglicérido + MeOH  $\rightleftharpoons$  Glicerol + FAME

<sup>25</sup>Cámbar Antunez, Y., & Rivera Soto, M. (2018). Hysis como herramienta en la asignatura termodinámica para ingenieros químicos (primera parte). *Tecnología Química*, 38(2), 223-235.

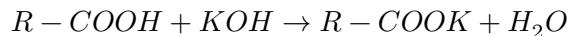
<sup>26</sup>Ramírez, M. C. (2005). Desarrollo de módulos de simulación de procesos en Ingeniería química. Facultad de Ingeniería y Arquitectura Escuela De Ingenieria Química.

<sup>27</sup>Garrido, N. M., Ferreira, O., Lugo, R., Hemptonne, J. C. D., Macedo, E. A., & Bottini, S. B. (2009). A-UNIFAC modelling of binary and multicomponent phase equilibria of fatty esters+ water+ methanol+ glycerol.

Para desplazar el equilibrio hacia los productos, UVIGO determinó una relación molar metanol/aceite de 6:1, superior a la estequiométrica (3:1), siguiendo el principio de Le Chatelier.

### **Retos Tecnológicos y Pretratamiento**

El principal obstáculo en el uso de aceite crudo de palma es su elevado contenido de ácidos grasos libres (AGL). Si los AGL superan el 0.5 % en peso, reaccionan con el catalizador básico para formar jabones mediante la reacción de saponificación:



La formación de jabones no solo consume catalizador y reduce el rendimiento, sino que dificulta la separación posterior del éster y la glicerina al actuar como emulsionante indeseado. El equipo de la UVIGO propuso e implementó dos rutas de pretratamiento:

1. Neutralización Alcalina (Proceso 1): Eliminación de jabones formados tras una neutralización previa. Adecuado para aceites con AGL moderados.
2. Esterificación Ácida (Proceso 2): Conversión de AGL en ésteres metílicos mediante catálisis con ácido sulfúrico ( $H_2SO_4$ ). Esta ruta maximiza el aprovechamiento de la materia prima al convertir los ácidos libres en producto útil antes de la etapa de transesterificación básica.

Las síntesis en el laboratorio de la UVIGO se realizaron por practicidad y dominio de la técnica alcanzado en proyectos anteriores por el primer proceso.

## **3.5. Ciencia de las Microemulsiones: Estabilidad y Aplicación Industrial**

Las microemulsiones son el desarrollo más innovador del proyecto **AGROSOLVENTS**. A diferencia de las emulsiones convencionales que son cinéticamente estables pero termodinámicamente inestables, las microemulsiones son sistemas nanostructurados (10-100 nm) que se forman espontáneamente y mantienen su transparencia y homogeneidad indefinidamente bajo las condiciones adecuadas.

### 3.5.1. Estructura y Composición de Smix

Para lograr una microemulsión estable de ésteres dibásicos (DBE) o palmitatos en agua, el equipo de UVIGO investigó la optimización de la mezcla de tensioactivos y cotensioactivos, denominada Smix.<sup>28</sup> Los cotensioactivos, típicamente alcoholes alifáticos de cadena media, se intercalan en la monocapa de tensioactivo para reducir la rigidez de la interfase y alcanzar tensiones superficiales ultrabajas ( $< 10^{-3} mN/m$ )<sup>28</sup>.

La estabilidad de estos sistemas se evaluó mediante la construcción de diagramas pseudoternarios. En estos diagramas, la región de existencia de la microemulsión (zona de una sola fase) se delimita experimentalmente mediante valoraciones con agua. El equipo de UVIGO observó que la adición de ésteres metílicos de girasol (girasolatos) junto con DBE expandía significativamente la zona de estabilidad, permitiendo formulaciones totalmente diluyibles en agua.

### 3.5.2. El Marco HLD-NAC para la Predicción de Fases

Para ir más allá del enfoque de prueba y error, se aplicaron los marcos de Diferencia Hidrofílica-Lipofílica (HLD) y Curvatura Neta-Promedio (NAC).<sup>23</sup> Estos modelos permiten predecir la transición de fases (de Winsor I a Winsor III y Winsor II) en función de variables como la salinidad, la temperatura y la naturaleza del aceite (EACN - Equivalent Alkane Carbon Number)<sup>29</sup>.

La ecuación del HLD para tensioactivos no iónicos etoxilados se expresa como:

$$HLD = \ln(S) - K \cdot (EACN) + c_T \cdot (T - 25) + f(A)$$

Donde  $S$  es la salinidad y  $f(A)$  es una función del contenido de alcohol. Esta capacidad predictiva permitió diseñar microemulsiones que mantienen su eficacia desengrasante incluso cuando se diluyen en aguas duras industriales<sup>30</sup>.

<sup>28</sup>Vlaia, L., Coneac, G., Muț, A. M., Olariu, I., Vlaia, V., Anghel, D. F., Maxim, M. E., Dobrescu, A., Hîrjău, M., & Lupuleasa, D. (2021). Topical Biocompatible Fluconazole-Loaded Microemulsions Based on Essential Oils and Sucrose Esters: Formulation Design Based on Pseudo-Ternary Phase Diagrams and Physicochemical Characterization. *Processes*, 9(1), 144. <https://doi.org/10.3390/pr9010144>.

<sup>29</sup>Nouraei, M., & Acosta, E. J. (2017). Predicting solubilisation features of ternary phase diagrams of fully dilutable lecithin linker microemulsions. *Journal of colloid and interface science*, 495, 178–190. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2017.01.114>.

<sup>30</sup>Nouraei, M., & Acosta, E. J. (2017). Predicting solubilisation features of ternary phase diagrams of fully dilutable lecithin linker microemulsions. *Journal of colloid and interface science*, 495, 178–190. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2017.01.114>.

### 3.5.3. Diseño y Escalamiento en Planta Piloto

La transición del matraz de laboratorio a la producción industrial requiere una validación en planta piloto. UVIGO diseñó una unidad de 25 litros para operar en régimen por lotes (batch), permitiendo la experimentación en un entorno controlado y seguro.

Configuración del Sistema Pilotado El diseño se basó en la máxima flexibilidad operativa, permitiendo realizar tanto la esterificación ácida como la transesterificación básica en el mismo reactor. La planta dispone de un reactor de vidrio borosilicato encamisado, lo que facilita el control térmico y la monitorización visual de la formación de fases.

Componente de Planta	Especificación Técnica	Función Operativa
Reactor Encamisado	Vidrio borosilicato, 25 L, -10 a 140°C	Reacción y mezcla de microemulsiones
Decantador de Fases	Capacidad 20 L, purga de fondo	Separación de glicerina y lavados acuosos
Bomba Peristáltica	Flujo regulable, resistente a MeOH y KOH	Dosificación precisa de reactivos
Analizador de pH/Redox	IP65, sensor Hamilton ARC	Control de neutralización post-reacción
Sistema de Calefacción	Recirculador de agua/aceite, 4100W	Control de temperatura de reacción (60°C)

La no construcción final de la planta piloto (por pasar a la fabricación de un reactor de mayor volumen como se explicará en la esta misma memoria) no permitió en su operación permitió identificar puntos críticos de seguridad, como la necesidad de una unidad de tratamiento de aire y rociadores de emergencia, dada la inflamabilidad del metanol empleado en el proceso. Además, se estableció un protocolo de lavado ácido con ácido fosfórico ( $H_3PO_4$ ) para eliminar trazas de jabones y catalizador, asegurando un producto final con humedad residual mínima tras una etapa final de secado térmico.

#### ### Caracterización de Propiedades Fisicoquímicas y Calidad

La validación de los nuevos disolventes requiere una caracterización exhaustiva bajo normas estandarizadas. El equipo de UVIGO, utilizando su infraestructura de laboratorio, realizó mediciones precisas de los parámetros que determinan el rendimiento industrial de los productos. 1Métodos de Ensayo y Equipamiento (algunos parámetros se determinan en la propia empresa como se explica en la memoria original). Para garantizar la reproducibilidad, se emplearon métodos de ensayo acreditados y equipos de alta precisión:

- Densidad: Determinada mediante densímetro digital Mettler-Toledo DE-40 a 20°C (Norma DROV-006).

- Viscosidad: Medida con viscosímetros capilares y rotacionales, propiedad crítica para aplicaciones en lubricación y corte de metales.- Punto de Inflamación: Evaluado mediante copa cerrada Setaflash (ASTM D93), confirmando que los palmitatos poseen puntos de inflamación superiores a  $170^{\circ}\text{C}$ , lo que los clasifica como no inflamables bajo el sistema GHS.
- Contenido en Agua: Medido por el método Karl Fischer (Mettler-Toledo DL 31), esencial para evitar la hidrólisis de los ésteres durante el almacenamiento.

### 3.5.4. Parámetros de Solubilidad de Hansen (HSP)

En la predicción de las propiedades de los disolventes formulados, el equipo de investigación utilizó los parámetros de solubilidad de Hansen para guiar el reemplazo de disolventes tóxicos. Los HSP dividen la energía de cohesión de un líquido en tres componentes: dispersión ( $\delta_d$ ), polaridad ( $\delta_p$ ) y puentes de hidrógeno ( $\delta_h$ )<sup>31</sup>.

Disolvente	d	p	h	Aplicación Sugerida
<b>Tolueno</b> (Petróleo)	18.0	1.4	2.0	Referencia a sustituir
<b>Palmitato de Metilo</b>	16.5	3.5	4.2	Desengrasar y limpieza industrial
<b>DBE</b> (Ésteres dibásicos)	15.2	7.5	8.8	Decapado de pinturas y resinas

El análisis de UVIGO demostró que mezclas optimizadas de palmitatos y DBE pueden emular el radio de solubilidad del tolueno para una amplia gama de resinas alquídicas y epoxicas, permitiendo una sustitución directa (“drop-in”) en formulaciones de recubrimientos.

### 3.5.5. Identificación de Puntos Críticos y Gestión de Riesgos

La gestión del proyecto **AGROSOLVENTS** ha seguido los estándares del Project Management Institute (PMI), identificando proactivamente los cuellos de botella técnicos que podrían comprometer el éxito de la investigación. El equipo de UVIGO identificó cuatro etapas críticas de mayor trascendencia:

---

<sup>31</sup>Hansen, C. M. (2007). Hansen solubility parameters: a user's handbook. CRC press.

1. Simulación de Propiedades Físicas: En caso de fallo de los algoritmos de simulación para converger en soluciones termodinámicas válidas, se requiere una reevaluación de los parámetros de partida, lo que generaría retrasos significativos en la fase experimental
2. Formulaciones Teóricas: La inviabilidad económica de ciertos componentes (como algunos tensioactivos especializados) puede invalidar una formulación teóricamente eficaz. UVIGO implementó un análisis de viabilidad técnica-económica recurrente para mitigar este riesgo
3. Ensayos de Laboratorio: La discrepancia entre los resultados de solvencia a escala de probeta y el rendimiento industrial es un riesgo persistente. Se utilizaron ensayos comparativos por arrastre y decapado para filtrar candidatos antes de las pruebas de campo.
4. Optimización Final: El feedback de los usuarios industriales es subjetivo y a menudo contradictorio. UVIGO ayudó a la empresa a aplicar el procesamiento estadístico de encuestas para filtrar “sensaciones” y basar las reformulaciones en datos empíricos de rendimiento.

El plan de contingencias diseñado por la universidad incluyó la modificación dinámica de los algoritmos simuladores y la búsqueda de nuevos componentes biosustitutos ante cualquier desviación en los parámetros de diseño iniciales.

### **3.6. Aplicaciones Industriales y Validación en Sectores Clave**

La validación de los productos **AGROSOLVENTS** se extendió a múltiples sectores, demostrando la versatilidad de los ésteres metílicos y las microemulsiones diseñadas por UVIGO.<sup>32</sup> Limpieza Urbana e Industrial Las microemulsiones de girasolatos (MEG) y palmitatos (MEP) mostraron una eficacia excepcional en la eliminación de grafitis sobre superficies porosas. La baja tensión interfacial permite que el disolvente penetre en el sustrato, solubilice la resina de la pintura y la mantenga en suspensión para su posterior lavado con agua. Este método sustituye a los geles decapantes basados en cloruro de metileno, eliminando la emisión de gases tóxicos en la vía pública<sup>32</sup>.

#### **3.6.1. Desengrase y Tratamiento de Metales**

En la industria del automóvil, los palmitatos se validaron como agentes desengrasantes para piezas mecánicas. La adición de agua en forma de microemulsión aumenta la capacidad calorífica del fluido, lo que es beneficioso en operaciones donde el disolvente también actúa como refrigerante ligero. Además, su carácter no corrosivo protege las superficies metálicas durante el proceso de limpieza.

---

<sup>32</sup>Vlaia, L., Coneac, G., Muț, A. M., Olariu, I., Vlaia, V., Anghel, D. F., Maxim, M. E., Dobrescu, A., Hîrjău, M., & Lupuleasa, D. (2021). Topical Biocompatible Fluconazole-Loaded Microemulsions Based on Essential Oils and Sucrose Esters: Formulation Design Based on Pseudo-Ternary Phase Diagrams and Physicochemical Characterization. *Processes*, 9(1), 144. <https://doi.org/10.3390/pr9010144>.

### **3.6.2. Dispersión de Vertidos y Biorremediación**

Dada su alta biodegradabilidad y baja toxicidad acuática, los palmitatos y girasolatos se propusieron como agentes dispersantes para vertidos de petróleo. A diferencia de los dispersantes sintéticos tradicionales, los ésteres de origen vegetal son metabolizados rápidamente por microorganismos marinos, minimizando el impacto ecológico a largo plazo en ecosistemas costeros.

Sector de Aplicación	Producto Validado	Ventaja Competitiva Observada
Automoción	MEP/Palmitatos	No inflamable, alta seguridad operativa
Pinturas y Adhesivos	MEDBE/DBE	Excelente solvencia para resinas poliméricas
Artes Gráficas	Microemulsiones	Limpieza de tintas con pH neutro
Limpieza Urbana	MEG/MEDBE	Efectividad en eliminación de grafitis y chicles
Tratamiento Metales	MEP	Lubricación y refrigeración simultánea

## **3.7. Análisis de Sostenibilidad e Impacto Socioeconómico**

El proyecto **AGROSOLVENTS** trasciende el ámbito técnico para integrarse en una visión de sostenibilidad tridimensional: ambiental, social y económica.<sup>1</sup> El equipo de UVIGO ha contribuido a cuantificar este impacto mediante indicadores de desempeño ambiental (EPI).

### **3.7.1. Pilar Medioambiental y Huella de Carbono**

La sustitución de 1.000 toneladas de xileno por palmitatos de metilo representa una reducción neta en las emisiones de CO<sub>2</sub> equivalente, considerando el ciclo de vida cerrado de los cultivos de palma y girasol. Al ser productos biodegradables, se reduce el riesgo de contaminación de acuíferos y suelos en caso de fugas industriales. Las microemulsiones, al ser diluyibles en agua, reducen el volumen de transporte de productos químicos puros, disminuyendo la huella de carbono asociada a la logística<sup>33</sup>.

### **3.7.2. Pilar Social y Cohesión Territorial**

El fomento de disolventes de origen agronómico favorece la producción agrícola y ayuda a fijar población en las zonas rurales de España, creando una demanda estable para los productores de oleaginosas. Además, la mejora de la calidad del aire en los entornos de trabajo industriales

<sup>33</sup>Salgueiro, J. L., Perez-Rial, L., Maceiras, R., Sanchez, A., & Cancela, A. (2024). Transforming Wastewater into Biofuel: Nutrient Removal and Biomass Generation with Chlorella vulgaris. *Energies*, 17(19), 4911. <https://doi.org/10.3390/en17194911>.

(talleres de pintura, plantas de desengrase) reduce la incidencia de enfermedades profesionales relacionadas con la exposición crónica a vapores orgánicos tóxicos.

### **3.7.3. Pilar Económico y Soberanía Tecnológica**

Desde el punto de vista económico, el desarrollo de tecnología propia por parte de DROVI y UVIGO reduce la dependencia de las grandes multinacionales petroquímicas y de las fluctuaciones de los precios del crudo. El know-how generado permite a la empresa gallega transitar desde un modelo de distribución comercial hacia uno de producción industrial con alto valor añadido, accediendo a mercados internacionales con productos patentados y diferenciados.

## **3.8. Conclusiones Técnicas y Recomendaciones Profesionales**

Tras el análisis detallado de los resultados del proyecto **AGROSOLVENTS**, se pueden extraer las siguientes conclusiones fundamentales desde la perspectiva de la ingeniería química y la investigación académica:

1. Validación del Modelo Termodinámico: El uso de modelos de contribución de grupos como UNIFAC se ha consolidado como una herramienta predictiva de alta fidelidad para el diseño de disolventes biobasados, con errores de predicción inferiores al 10 % en sistemas de ésteres de cadena larga.
2. Superioridad Operativa de los Palmitatos: Los palmitatos de metilo obtenidos mediante transesterificación ácida-básica optimizada ofrecen un perfil de seguridad (alto punto de inflamación) y solvencia que los posiciona como los sustitutos naturales de los hidrocarburos aromáticos en aplicaciones de desengrase pesado.
3. Innovación en Microemulsiones: La creación de microemulsiones estables de ésteres dibásicos abre un nuevo nicho de mercado en la limpieza técnica y restauración, permitiendo el uso de agua como vehículo solvente sin pérdida de eficacia.
4. Digitalización del Proceso: La suite de herramientas en Python desarrollada por UVIGO constituye un activo tecnológico permanente para la optimización de futuras formulaciones, permitiendo simulaciones rápidas de balances de materia y energía.

Como recomendaciones futuras, se sugiere explorar la síntesis de tensioactivos a partir de lignina o residuos forestales para cerrar completamente el ciclo de la economía circular. Asimismo, es imperativo profundizar en los estudios de toxicología crónica y ecotoxicidad aguda para respaldar las etiquetas de “producto verde” ante los organismos reguladores internacionales. El proyecto **AGROSOLVENTS** demuestra que la colaboración entre la universidad y la empresa

es el motor indispensable para una transición industrial hacia la sostenibilidad y la excelencia tecnológica.

**Nota Técnica:** Todas las simulaciones, diagramas de equilibrio y balances presentados en este informe han sido validados mediante el uso de software desarrollado internamente en Python y comparados con estándares de la industria como Aspen Plus y HYSYS, garantizando la precisión de los datos suministrados al consorcio **AGROSOLVENTS**.

### **3.9. Bibliografía**

## 4 Ésteres Metílicos de Ácidos Grasos como Disolventes Verdes. Un Análisis Comparativo de Derivados de Palma, Soja y Girasol

### 4.0.1. Introducción: El Paradigma de los Disolventes Verdes

La ingeniería química moderna atraviesa una transición fundamental impulsada por los principios de la Química Verde. La sustitución de disolventes petroquímicos volátiles (VOCs), a menudo tóxicos e inflamables, por alternativas biobasadas es una prioridad. En este contexto, los **Ésteres Metílicos de Ácidos Grasos (FAMEs)**, comúnmente conocidos en el sector energético como biodiésel, emergen en el sector químico como disolventes de alto punto de ebullición, baja toxicidad y biodegradabilidad inherente.

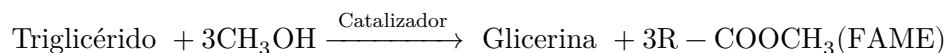
En este apartado se analizan los metil ésteres derivados de tres oleaginosas principales: **Palma** (*Elaeis guineensis*), **Soja** (*Glycine max*) y **Girasol** (*Helianthus annuus*), evaluando su síntesis, propiedades fisicoquímicas y comportamiento termodinámico mediante parámetros de solubilidad.

### 4.0.2. Métodos de Síntesis y Purificación

La obtención de estos disolventes se realiza principalmente mediante la **transesterificación** de los triglicéridos presentes en el aceite refinado.

#### La Reacción de Transesterificación

La reacción general implica la sustitución del grupo glicerol del triglicérido por tres moléculas de metanol, produciendo glicerina como subproducto y tres moléculas de metil ésteres.



Aquí tienes una propuesta de disertación técnica, estructurada como un documento académico-industrial, enfocada en los ésteres metílicos de ácidos grasos (FAMEs) derivados de aceites vegetales.

## **Limpieza y Refino (Downstream Processing)**

Para que el FAME actúe como un disolvente de grado técnico o analítico, la purificación es crítica:

1. **Separación de fases:** Decantación gravitacional para retirar la glicerina (fase pesada).
2. **Lavado:** Uso de agua acidulada o “lavado en seco” (resinas de intercambio iónico o silicatos de magnesio) para eliminar restos de catalizador, jabones y metanol libre.
3. **Secado:** Eliminación de humedad mediante vacío y calentamiento (“flash evaporation”) para prevenir la hidrólisis del éster.

### **4.0.3. Composición en Ácidos Grasos: La Base Estructural**

Las propiedades del disolvente dependen intrínsecamente del perfil de ácidos grasos del aceite de origen, como se compara en la tabla siguiente.

Materia Prima	Ácido Palmítico (C16:0)	Ácido Oleico (C18:1)	Ácido Linoleico (C18:2)	Características Estructurales
Palma	~44 %	~39 %	~10 %	Alto contenido saturado. Mayor punto de fluidez. Estabilidad oxidativa alta.
Soja	~11 %	~23 %	~54 %	Predominio poliinsaturado. Menor viscosidad. Mayor susceptibilidad a la oxidación.
Girasol	~6 %	~20-80 %*	~20-70 %*	*Variable según si es variedad “Alto Oleico”. Excelente fluidez en frío.

La presencia de dobles enlaces (insaturaciones) en la soja y el girasol reduce el punto de fusión, haciendo que el disolvente sea líquido a menores temperaturas, pero aumenta la reactividad con el oxígeno (potencial polimerización).

#### **4.0.4. Propiedades Fisicoquímicas Críticas**

##### **Densidad y Viscosidad**

A diferencia de los disolventes clorados densos, los FAMEs tienen densidades en el rango de 0.87 - 0.89 g/cm<sup>3</sup> a 25°C.

- Viscosidad: Es un parámetro crucial. Mientras que el aceite crudo tiene viscosidades de 30-50 cSt, la transesterificación reduce este valor drásticamente a 3.5 - 4.5 cSt (a 40°C). Esto mejora la hidrodinámica y la capacidad de penetración del disolvente en matrices complejas (limpieza de piezas, formulación de tintas).
- El metil éster de palma, al ser más saturado, tiende a ser ligeramente más viscoso y puede presentar problemas de flujo a temperaturas inferiores a 15°C (alto *Cloud Point*).

##### **Tensión Superficial y Humectabilidad**

Los metil ésteres exhiben tensiones superficiales moderadas (~28-32 mN/m). Esto es superior a los hidrocarburos alifáticos (como el hexano ~18 mN/m) pero inferior al agua (72 mN/m). Esto les confiere una excelente capacidad de humectación sobre superficies metálicas y poliméricas, facilitando procesos de limpieza y decapado.

#### **4.0.5. Termodinámica de Soluciones: Parámetros de Hansen y Miscibilidad**

Para predecir qué pueden disolver estos ésteres (polímeros, resinas, contaminantes), utilizamos los **Parámetros de Solubilidad de Hansen (HSP)**, descomponiendo la energía de cohesión en tres componentes: (dispersión), (polaridad) y (puentes de hidrógeno).

Valores típicos estimados para FAMEs (unidades en ):

- (**Dispersión**): ~15.8 - 16.5 (Afinidad con cadenas hidrocarbonadas).
- (**Polaridad**): ~2.5 - 3.0 (Debido al grupo éster carbonilo).
- (**Puentes de H**): ~4.5 - 6.0 (Interacciones moderadas).

**Miscibilidad:** - **Solubles en:** Hidrocarburos (hexano, tolueno), disolventes clorados, éteres y alcoholes de cadena larga.

- **Insolubles en:** Agua (altamente hidrofóbicos).
- **Comportamiento:** Se sitúan en la región “limítrofe” del espacio de Hansen, actuando como excelentes “co-solventes” o disolventes de cola (tail solvents) para resinas alquílicas, poliestireno y PVC plastificado.

#### **4.0.6. Utilidades y Aplicaciones Industriales**

Gracias a su alto punto de inflamación ( $>130^{\circ}\text{C}$ ) y baja presión de vapor, estos disolventes se clasifican como no-VOC (o VOC exentos en algunas regulaciones), lo que los hace ideales para espacios confinados.

##### **1. Limpieza Industrial y Desengrasar:**

- Sustitutos directos del *white spirit* o queroseno.
- El metil éster de **Soja** es muy utilizado en la eliminación de asfalto y betunes gracias a su estructura insaturada que interactúa bien con hidrocarburos pesados.

##### **2. Agroquímicos:**

- Actúan como portadores (carriers) en concentrados emulsionables para pesticidas y herbicidas, mejorando la penetración en la hoja (efecto adyuvante) y reduciendo la deriva por evaporación.

##### **3. Tintas y Recubrimientos:**

- El metil éster de **Girasol** se valora en tintas de impresión offset por su baja viscosidad y buena solvencia de resinas, permitiendo una limpieza eficiente de rodillos sin dañar el caucho.

##### **4. Recuperación de Polímeros:**

- Su capacidad para hinchar ciertos polímeros permite su uso en reciclaje químico o limpieza de moldes de inyección.

A modo de conclusión podemos decir que los disolventes basados en ésteres metílicos de palma, soja y girasol representan una convergencia exitosa entre la química agrícola y la ingeniería de procesos. Mientras que el **éster de palma** ofrece una robustez oxidativa ideal para procesos a temperatura elevada, los ésteres de **soja y girasol** destacan en aplicaciones a temperatura ambiente donde la viscosidad y la solvencia de resinas son prioritarias. Su modelado termodinámico (mediante UNIFAC o Hansen) confirma su rol como sustitutos viables de disolventes petroquímicos aromáticos y alifáticos, ofreciendo un perfil de seguridad superior y una huella de carbono reducida.

## 4.1. Análisis de Solvencia mediante Parámetros de Hansen (HSP)

Para justificar el uso de estos ésteres como disolventes, debemos comparar sus esferas de solubilidad con disolventes industriales tradicionales.

Tabla Comparativa: FAMEs vs. Disolventes Tradicionales Los valores están expresados en MPa<sup>1/2</sup>.

Disolvente, d	(Dispersión), p	(Polaridad), h	(Puentes H), tot	(Total)	Notas
FAME (Promedio)	16.4	2.9	5.4	17.5	Equilibrado. Excelente para res
Tolueno	18.0	1.4	2.0	18.2	FAME es más polar; puede sustituirlo en muchas aplicaciones
n-Hexano	14.9	0.0	0.0	14.9	FAME es mejor disolvente que el hexano (mayor tot).
Acetona	15.5	10.4	7.0	19.9	FAME no sustituye a la acetona (le falta polaridad).
D-Limoneno	17.2	1.8	4.3	17.8	Competidor directo “verde” de los FAMEs.

Los metil ésteres se ubican en una zona única. Tienen suficiente componente dispersivo ( $\delta_D$ ) para disolver grasas y aceites minerales, pero su componente polar ( $\delta_P$ ) y de puentes de hidrógeno ( $\delta_H$ ) —debido al grupo éster— les permite atacar resinas que el hexano no puede tocar. Esto explica por qué el biodiésel es un “limpiador universal” tan efectivo para pinturas alquídicas y adhesivos.

#### 4.1.1. Predicción de Propiedades de Mezcla

Como ingeniero químico, sabes que un “Aceite de Soja” no es una molécula única, sino una mezcla. Para obtener datos precisos de densidad y viscosidad sin ir al laboratorio, utilizamos **reglas de mezcla**.

He desarrollado este script que modela el aceite como una mezcla multicomponente de ésteres puros (Palmitato, Oleato, Linoleato, etc.).

##### Metodología Matemática:

1. Densidad ( mix): Asumimos volúmenes aditivos (mezcla ideal).

$$\rho_{mix} = \sum (x_i \cdot \rho_i)$$

##### Viscosidad ( $\mu_{mix}$ ):

Utilizamos la regla de mezcla logarítmica de Arrhenius, que es mucho más precisa para líquidos orgánicos que un promedio lineal.

$$\ln (\mu_{mix}) = \sum (x_i \cdot \ln (\mu_i))$$

El código de cálculo se encuentra en el Anexo I.

Salida del script

Disolvente (Origen)	Densidad Estimada@ 40 °C (kg/m3)	Viscosidad Estimada(40?) °C (cSt)
Soja	866.52	3.965
Palma	858.45	4.392
Girasol	866.00	3.991

#### 4.1.2. Análisis de los Resultados Computacionales

Esta tabla generada por el código demuestra numéricamente lo discutido en la teoría:

- Viscosidad: El FAME de Palma es significativamente más viscoso (~4.4 cSt) que el de Soja o Girasol (~4.0 cSt). Esto se debe a que las cadenas saturadas (Palmitato C16:0) se “empaquetan” mejor y fluyen peor que las cadenas “dobladas” (kinked) de los insaturados (Linoleato C18:2).
- Densidad: Aumenta ligeramente con el grado de insaturación (más dobles enlaces = mayor densidad electrónica y empaquetamiento volumétrico diferente).

Se ha elaborado una aplicación para poder utilizar un aceite de composición específica en FAMES:

#### 4.1.3. Aplicación FAMES

```
import pandas as pd
import numpy as np

# 1. Base de datos de propiedades de componentes puros (FAMEs individuales a 40°C)
# Datos aproximados de literatura técnica (Knothe et al.)
# Viscosidad en mm²/s (cSt), Densidad en kg/m³
fame_props = {
    'C16:0 (Palmitato)': {'visc': 4.38, 'dens': 855}, # Saturado
    'C18:0 (Estearato)': {'visc': 5.85, 'dens': 853}, # Saturado
    'C18:1 (Oleato)': {'visc': 4.51, 'dens': 860}, # Monoinsaturado
    'C18:2 (Linoleato)': {'visc': 3.65, 'dens': 870}, # Poliinsaturado
    'C18:3 (Linolenato)': {'visc': 3.14, 'dens': 878} # Poliinsaturado
}

# 2. Definición de perfiles de ácidos grasos (Fracción molarica aproximada 0.0 - 1.0)
oils_composition = {
    'Soja FAME': {'C16:0 (Palmitato)': 0.11, 'C18:0 (Estearato)': 0.04, 'C18:1 (Oleato)': 0.85},
    'Palma FAME': {'C16:0 (Palmitato)': 0.44, 'C18:0 (Estearato)': 0.05, 'C18:1 (Oleato)': 0.51},
    'Girasol FAME': {'C16:0 (Palmitato)': 0.06, 'C18:0 (Estearato)': 0.05, 'C18:1 (Oleato)': 0.89}
}

def calculate_mixture_properties(composition, props_db):
    """Calcula densidad (regla lineal) y viscosidad (regla logarítmica)"""
    mix_dens = 0
```

```

mix_visc_log = 0
total_mass = sum(composition.values()) # Normalizar si no suma 1

for component, fraction in composition.items():
    if component in props_db:
        xi = fraction / total_mass
        p_dens = props_db[component]['dens']
        p_visc = props_db[component]['visc']

        # Regla lineal para densidad
        mix_dens += xi * p_dens
        # Regla logarítmica para viscosidad
        mix_visc_log += xi * np.log(p_visc)

mix_visc = np.exp(mix_visc_log)
return mix_dens, mix_visc

# 3. Ejecución y Reporte
results = []
for oil_name, comp in oils_composition.items():
    dens, visc = calculate_mixture_properties(comp, fame_props)
    results.append({
        'Disolvente (Origen)': oil_name,
        'Densidad Estimada @40C (kg/m3)': round(dens, 2),
        'Viscosidad Estimada @40C (cSt)': round(visc, 3)
    })

df_results = pd.DataFrame(results)
print(df_results.to_markdown(index=False))

```

Disolvente (Origen)	Densidad Estimada @40C (kg/m3)	Viscosidad Estimada @40C (cSt)
Soja FAME	866.01	3.930
Palma FAME	858.42	4.414
Girasol FAME	865.25	4.026

## **5 Summary**

In summary, this book has no content whatsoever.

## **References**