

EQUILIBRIO LÍQUIDO-LÍQUIDO EN EL SISTEMA BIODIESEL-GLICERINA-METANOL: REGRESIÓN DE PARÁMETROS PERTENECIENTES A LOS MODELOS NRTL Y UNIQUAQ

Juan P. Camponovo y Juan I. Manassaldi

Centro de aplicaciones informáticas y modelado en ingeniería (CAIMI), Universidad Tecnológica Nacional – Facultad Regional Rosario, Zeballos 1341, S2000BQA Rosario, Argentina, jcamponovo@frro.utn.edu.ar, jmanassaldi@frro.utn.edu.ar <http://www.modeladoeningenieria.edu.ar>

Palabras Clave: UNIQUAQ, NRTL, LLE, biodiesel.

Resumen. Posterior a la reacción de producción de biodiesel se generan dos fases líquidas inmiscibles las cuales deben ser separadas. Para abordar el diseño de cualquier equipo de separación es necesario disponer de un modelo fisicoquímico que represente de forma adecuada el comportamiento del equilibrio existente entre ambas fases líquidas.

En general se utilizan NRTL o UNIQUAC y los parámetros asociados son obtenidos a partir de estimaciones basadas en la estructura molecular de los compuestos, sin utilizar datos experimentales. A diferencia de ese enfoque, el objetivo de este trabajo es determinar los parámetros de interacción binaria de ambos modelos a partir de datos experimentales correspondientes al sistema Biodiesel-Metanos-Glicerina [A. Andreatta et al., Ind. Eng. Chem. Res. 2008, 47, 5157–5164]. Para esto, se propone desarrollar un problema de optimización que minimice la diferencia entre los valores estimados por el modelo y los datos experimentales.

Ambos modelos, de carácter fuertemente no lineal, fueron implementados en GAMS (General Algebraic Modeling System). El ajuste de los parámetros correspondientes para ambos modelos es satisfactorio y la bondad de dicho ajuste se ilustra mediante diagramas ternarios y el estadístico RMSD (root mean square deviation), comparándolo además con valores extraídos de simuladores comerciales.