

# Predicción del número de cetano de biocombustibles a partir de su composición de ácidos grasos

## Cetane number estimation of biofuels from their fatty acid composition

Yisel Sánchez-Borroto, Ramón Piloto-Rodríguez, Leonardo Goyos-Pérez,  
Nayvi Ferrer-Frontela

Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría. Facultad de Ingeniería Mecánica. La Habana, Cuba.  
Correo electrónico: [ysanchez@ceter.cujae.edu.cu](mailto:ysanchez@ceter.cujae.edu.cu)

Recibido: 4 de octubre de 2011      Aceptado: 10 de abril de 2012

---

### Resumen

El número de cetano (CN) es una de las propiedades más importantes para evaluar la calidad del proceso de combustión de un combustible tipo diesel. El CN de biocombustibles derivados de aceites vegetales está influenciado por su composición de ácidos grasos. El objetivo de esta investigación es obtener dos modelos físico-matemáticos que establezcan una relación entre el número de cetano de biocombustibles derivados de aceites vegetales y su composición de ácidos grasos esenciales. Para predecir el CN se desarrollaron dos modelos mediante un análisis de regresión múltiple, basado en datos experimentales extraídos de bases de datos referenciadas. El ajuste de los coeficientes del modelo se basa en la obtención de residuales mínimos. Se realiza una validación parcial del modelo y se establecen las pautas para la validación total del mismo. A partir de estos resultados queda establecida una herramienta muy útil para la determinación del número de cetano.

**Palabras claves:** número de cetano, biodiesel, aceites vegetales, ácidos grasos.

### Abstract

The cetane number is one of the main properties for characterization of the ignition quality of a fuel for its use in a diesel engine. The cetane number of biofuels obtained from different vegetable oils is strongly considerably by their fatty acid composition. The scope of this research is to obtain two physical-mathematical models that establish a relationship between the cetane number and the composition of different biofuels derived from vegetable oils. The models were developed using an analysis of multiple regression, based on experimental data available in the literature. The coefficients adjustment of the model was based on the obtaining of lower residual in the capacity of prediction of the model. A partial validation of the model was developed. Starting from these results it a very useful tool for the determination of such an important parameter was established.

**Key words:** cetane number, biodiesel, vegetable oils, fatty acid.

## Introducción

El combustible diesel juega un papel importante en la economía de un país [2]. La mayor parte de la energía que consumen los motores de combustión interna (MCI) en todo el mundo proviene del petróleo. Con el agotamiento de este recurso, el cual no es renovable, se hace necesaria la búsqueda de combustibles alternativos que sustituyan a los tradicionales en los MCI, tanto en motores estacionarios como en el transporte automotor. El biodiesel (BD), los aceites vegetales y el etanol son los biocombustibles que más atención reciben en el mundo en cuanto al desarrollo de su tecnología de producción y uso en MCI [3].

El primer reporte de uso de biocombustibles provenientes de plantas oleaginosas data de 1900, cuando Rudolf Diesel (1858-1913), inventor del motor diesel, utilizó aceite vegetal de maní para demostrar su invención. Hablando a la sociedad de ingeniería de St. Louis, Missouri, en 1912, Diesel dijo, "El uso de los aceites vegetales como combustibles de motor puede parecer insignificantes hoy, tales aceites pueden ser en el curso del tiempo tan importantes como el petróleo y los productos de alquitrán de carbón de estos tiempos".[4]

La definición de biodiesel (BD) está establecida para los derivados de aceites vegetales para la síntesis química que emplea metanol como reactivo [5]. Debido a que el uso de etanol en la síntesis es mucho más económico para las condiciones de Cuba, es más factible la obtención de los derivados de ésteres etílicos, por ello será empleado el término biodiesel en este trabajo para ambos tipos de derivados.

El uso de biodiesel en motores diesel en Cuba, puede contribuir en parte a la reducción de nuestra dependencia energética, y puede llegar a ser una variante muy económica en flotas locales o directamente en la explotación de vehículos vinculados con la producción agrícola [6].

La utilización del biodiesel tiene algunas ventajas medio ambientales respecto al combustible diesel, en cuanto a la reducción de la carga contaminante emitida por el motor. Se reportan resultados de pruebas con biodiesel donde se observa reducción de emisiones de azufre hasta en un 20% respecto al combustible diesel, 10% de monóxido de carbono (CO), 14 % de hidrocarburos (HC) y 26 % de partículas sólidas. En cuanto a las emisiones de NO<sub>x</sub>, no hay un criterio unánime [6].

La composición química de un biocombustible derivado de aceites vegetales se basa en el porcentaje de ésteres metílicos derivados de ácidos grasos (fatty acid methyl ester, FAME) presentes en el biocombustible. Los ácidos grasos varían la longitud de su cadena de carbono y el número de doble enlaces. Los ácidos grasos pueden ser saturados, insaturados, lineales o ramificados [7, 8].

La estructura química para diferentes ácidos grasos se muestra en la tabla 1, tomando en cuenta su fórmula química y el número de átomos de carbono e insaturaciones o doble enlace. Los números representados en la columna estructura significan el número de átomos de carbono y de doble enlaces presentes en cada ácido graso, por ejemplo el ácido graso palmítico (16:0) tiene 16 átomos de carbono y ninguna insaturación, sin embargo el linolénico 18:3 muestra 18 átomos de carbono y 3 dobles enlaces.

El número de cetano (CN) es uno de los parámetros más importantes que caracterizan un combustible diesel desde el punto de vista químico y de su proceso de combustión [6, 9-11]. La determinación del CN está basada en mediciones experimentales en bancos de motores diesel. Estas pruebas se realizan en un motor empleando un combustible determinado y comparando las prestaciones obtenidas con las del propio motor utilizando un compuesto químico denominado cetano o sus mezclas. De ahí se deriva la numeración que se da de CN para un combustible. Por ende, resulta obvio que la determinación experimental de esta propiedad para combustibles diesel es un proceso costoso y que pasa por estrictas normas para su determinación en un banco de motores. Sin embargo, es bien conocido que el CN depende fundamentalmente de la composición química del combustible analizado [12,13]. Por tal motivo plantea Gopinath en [7] que todas las propiedades del BD están fuertemente influenciadas por las propiedades de sus ácidos grasos individualmente, por lo que es importante saber que ácidos grasos pueden ser manipulados con el objetivo de mejorar el CN. En el futuro será factible variar las propiedades de un biocombustible de este tipo a partir de la manipulación de los aceites de partida mediante la ingeniería genética, con lo cual podría lograrse un combustible enriquecido en ciertas cantidades de ácidos grasos. Para todo ello es necesario profundizar en las relaciones entre contenido de ácidos grasos y el CN para diferentes tipos de fuentes primarias de ácidos grasos.

Conociendo la existencia de un vínculo directo entre la composición química de un combustible diesel, (entre los que se incluyen los aceites vegetales y sus derivados (biodiesel)) y su CN se plantea como objetivo de este trabajo la obtención de modelos para la predicción del número de cetano de diferentes tipos de biocombustibles para motor diesel a partir de su composición de ácidos grasos.

**Tabla 1.** Estructura química de ácidos grasos [3, 7, 8]

Ácidos Grasos	Estructura	Tipo	Fórmula
caprílico	8:0	S	C <sub>8</sub> H <sub>16</sub> O <sub>2</sub>
cáprico	10:0	S	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub> O <sub>2</sub>
laúrico	12:0	S	C <sub>12</sub> H <sub>24</sub> O <sub>2</sub>
mirístico	14:0	S	C <sub>14</sub> H <sub>28</sub> O <sub>2</sub>
palmítico	16:0	S	C <sub>16</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>
esteárico	18:0	S	C <sub>18</sub> H <sub>36</sub> O <sub>2</sub>
oleico	18:1	IS	C <sub>18</sub> H <sub>34</sub> O <sub>2</sub>
linoleico	18:2	IS	C <sub>18</sub> H <sub>32</sub> O <sub>2</sub>
linolénico	18:3	IS	C <sub>18</sub> H <sub>30</sub> O <sub>2</sub>
araquídico	20:0	S	C <sub>20</sub> H <sub>40</sub> O <sub>2</sub>
behénico	22:0	S	C <sub>22</sub> H <sub>44</sub> O <sub>2</sub>
erúcico	22:1	IS	C <sub>22</sub> H <sub>42</sub> O <sub>2</sub>
lignocérico	24:0	S	C <sub>24</sub> H <sub>48</sub> O <sub>2</sub>

\*S: saturados; IS: insaturados

## Materiales y Métodos

Para la obtención de los modelos de predicción de CN se realizó un análisis bibliográfico del estado del arte en la temática. Se consultaron 38 artículos extraídos de bases de datos referenciadas y se tomaron valores reportados por diferentes autores [2-38] en cuanto a CN y composición de ácidos grasos de una amplia gama de biocombustibles. En la bibliografía consultada no se encontró ningún modelo para determinar CN de aceites vegetales a partir de su composición química. Los datos extraídos de la literatura son mostrados en las tablas 2, 3 y 4.

En el proceso de obtención del biodiesel de *Jatropha* todas las semillas fueron seleccionadas manualmente de su fruto. Los frutos fueron cosechados en abril de 2010. El proceso de secado de las semillas se produjo a través de su exposición a la radiación solar, y luego fueron descascaradas manualmente.

Las semillas fueron guardadas en bolsas y transportadas al laboratorio para la extracción de aceites y ésteres etílicos de ácidos grasos. Para la obtención del aceite, los granos fueron presionados con una prensa manual. Las muestras líquidas preparadas (aceites y derivados de ésteres etílicos de ácidos grasos) fueron guardadas en recipientes de vidrio.

Los biodiesel utilizados como referencia en esta investigación fueron obtenidos mediante un proceso llamado transesterificación. Este proceso fue desarrollado por los científicos E. Duffy y J. Patrick a mediados del siglo XIX, cuarenta años antes que Diesel desarrollara su motor de combustión interna. La transesterificación es una reacción química de un aceite vegetal o grasa con un alcohol (fue usado el metanol debido a su bajo costo) en presencia de un catalizador. Los productos de esta reacción son los monoalquílicos, comúnmente denominado biodiesel.

Los biocombustibles fueron preparados simultáneamente y las muestras fueron probadas un mes después de su preparación. El biodiesel de *Jatropha* tenía un valor ácido de 0.7 KOH g<sup>-1</sup>, un valor de peróxido de 5.9 meq. O<sub>2</sub> kg<sup>-1</sup> y un valor de p-anisidina de 0.6 AV.

El análisis de datos fue realizado por separado en dos grupos: uno para BD y otro para aceites vegetales. Debido a esto, en este trabajo se obtienen dos modelos, uno para cada tipo de biocombustible.

Los modelos para la predicción de CN fueron obtenidos mediante un análisis estadístico de regresión múltiple buscando la correlación de los diferentes FAME con los valores de CN. Para el desarrollo del modelo correspondiente a BD fueron dados como datos de entrada 9 BD (palma, linaza, soya, semilla de colza, girasol, *Jatropha*, maní, semilla de algodón y karanja) y 7 ácidos grasos puros (laúrico, mirístico, palmítico, esteárico, oleico, linoleico y linolénico), mientras que para los aceites vegetales fueron 13 los usados (maíz, semilla de algodón, crambe, linaza, maní, cártamo, cártamo alto en oleico, sésamo, soya, girasol, babasú, coco, palma, neem y *jatropha*) e igual ácidos grasos puros que en el caso de los BD. Para ello fue utilizado el software estadístico *Statgraphics Centurion XV.II*.

Una vez obtenidos los modelos preliminares, se realizó un análisis de significación de las diferentes variables independientes (contenidos de diferentes FAME), eliminando algunos de los FAME que pueden estar presentes en estos biocombustibles pero en cantidades despreciables buscando modelos lo más simplificados posibles desde el punto de vista matemático. Este análisis fue complementado con el análisis de la inclusión o no en el modelo de una constante tratando de garantizar los mayores valores del coeficiente de determinación. También se analizaron las magnitudes y signos de los coeficientes de regresión para conocer la dependencia entre las variables independientes y las dependientes. Este análisis es mostrado en las ecuaciones 1, 2, 3 y 4 y tablas 5 y 6.

Para los modelos obtenidos se realizó un análisis de residuales con vistas a evaluar la capacidad de predicción de los modelos. Los residuales se definen mediante la diferencia entre el valor predicho por el modelo para CN y su valor experimental para un combustible dado con una composición determinada.

El criterio de aceptación en el análisis de residuales estuvo basado en el criterio de sumatoria de residuales al cuadrado o varianza residual buscando la mínima sumatoria.

En el caso de uno de los biocombustibles analizados, el aceite de *Jatropha Curcas* y su derivado biodiesel, se realizó la determinación experimental de su contenido de FAME mediante aplicación de Cromatografía de Gases (GC).

El equipamiento y método utilizado para la GC fue el siguiente: Cromatógrafo de Gases *Carlo Erba* 8065 equipado con detector FID y columna capilar HT8. La programación de temperatura fue: 2 min a 70 °C, calentamiento a 30 °C·min<sup>-1</sup> y mantenido 30 min a 260 °C. Las muestras fueron inyectadas en volúmenes de 1 µL a 260 °C, split 1:40. Los derivados fueron determinados mediante Espectrometría de Masas (MS), equipo *Fisons* MD 800, Detección EI+ y energía de ionización de 70 eV.

## Resultados Experimentales

El análisis de valores reportados en la literatura para CN de ácidos grasos puros y contenido de FAME se muestran en las tablas 2, 3 y 4. En estas tablas están expuestos solamente los ácidos grasos que muestran mejor correlación respecto al CN, así como los de mayor por ciento en cuanto a peso molecular.

En las mismas (tablas 3 y 4) aparece una columna llamada Otros, en la que están reflejados aquellos ácidos grasos que su por ciento no es significativo para este análisis. Por ejemplo en el caso del biodiesel los ácidos grasos araquídico, behénico y erúcico tienen un 0.30% de composición por lo que no es conveniente su utilización en el modelo. Igual ocurre con los aceites vegetales en el caso de caprílico, cáprico, araquídico, behénico y lignocérico.

En el caso de la determinación experimental de contenidos de FAME para derivados de *Jatropha Curcas*, estos se encuentran expuestos en dichas Tablas.

Los modelos obtenidos en este trabajo se pueden ver en las ecuaciones (5) y (6). Ambos modelos muestran la relación que existe entre el CN y la composición de ácidos grasos de biocombustibles derivados de aceites vegetales. En los modelos se puede observar que para ácidos grasos saturados e insaturados los coeficientes de regresión en orden de magnitud (linolénico 0.342; linoleico 0.427; oleico 0.561; palmítico 0.742; esteárico 0.858, para el caso de modelo para BD y (linolénico 0.242, linoleico 0.320; oleico 0.427; erúcico 0.510; laúrico 0.551; palmítico 0.656; mirístico 0.568; esteárico 0.841 para aceites vegetales) se incrementan a medida que aumenta el peso molecular de los ácidos grasos, lo que trae por consiguiente un aumento del CN.

**Tabla 2.** Número de Cetano de ácidos grasos puros [7, 10, 14, 35-37]

Ácidos Grasos	Promedio
laúrico	61.1
mirístico	69.9
palmítico	76.6
esteárico	85.9
oleico	56.9
linoleico	39.2
linolénico	28,0

**Tabla 3.** Composición o peso molecular de ácidos grasos para diferentes tipos de Biodiesel. [7, 15-17, 32-34, 38]

Biodiesel	16:0	18:0	18:1	18:2	18:3	Otros
Palma	46.7	3.7	39.6	8.4	0.2	1.4
Linaza	5.3	3.1	18.7	16.7	56.2	0,0
Soya	13.9	2.1	23.2	56.2	4.3	0.3
Semilla de Colza	4.4	1.2	65.1	20.6	6.9	1.8
Girasol	5.5	4.1	24.3	65.6	0.6	0,0
Jatropha	14.9	9.5	40.5	34.7	0.3	0.1
Maní	17.2	2.7	40.5	36.6	0.5	2.5
Semilla de algodón	20.1	2.6	19.2	55.2	0.6	2.3
Karanja	9.9	7.8	53.2	19.1	0,0	10,0

**Tabla 4.** Composición o peso molecular de ácidos grasos de aceites vegetales. [3, 18-22, 24, 25]

Aceites	12:0	14:0	16:0	18:0	18:1	18:2	18:3	22:1	Otros
Maíz	0,0	0,0	10,0	2.6	34,0	47.9	1.05	0,0	4.5
Semilla de algodón	0,0	1.2	25.4	2.9	16,0	54,0	0.5	0,0	0,0
Crambe	0,0	-	2,0	0.9	18.9	9,0	6.9	58.8	3.5
Linaza	0,0	-	5.3	2.7	21.6	16.5	50.9	0,0	3,0
Maní	0,0	-	10.2	5.1	48.0	30.6	0.8	0.2	5.1
Cártamo	0,0	0.1	7.7	2.5	12.1	77.9	0.1	0,0	0,0
Cártamo alto en oleico	0,0	0,0	4.9	5,0	76.3	15,0	0,0	0,0	0,0
Sésamo	0,0	-	11.4	4.9	48.8	33.9	0,0	0,0	1,0
Soya	0,0	-	10.2	4.1	23.5	53.7	7.0	0,0	1.5
Girasol	0,0	-	5.7	4.1	20.5	67.3	0.6	0,0	1.8
Babasú	44.5	16,0	7.4	4,0	14,0	2.2	0,0	0,0	11.9
Coco	47.5	15.8	9,0	2,0	6.6	1.8	0,0	0,0	17.3
Palma	0.9	1.5	39.2	5.2	45,0	9,0	4.7	0,0	0,0
Neem	0,0	0.2	14.9	19.3	55.5	9.1	0,0	0,0	1,0
Jatropha	0,0	-	10.9	3.9	45,0	37.2	0.2	0.2	2.6

### Modelos obtenidos en esta investigación

Los modelos fueron obtenidos mediante un análisis de regresión múltiple entre el CN de diferentes biocombustibles (biodiesel y aceites vegetales) y su composición de FAME.

Los modelos preliminares obtenidos luego de hacer un análisis de significación de los ácidos grasos presentes en cada biocombustible, la exclusión y no exclusión de la constante del modelo y el análisis de regresión se muestran en las ecuaciones (1), (2), (3) y (4) y en las tablas 5 y 6.

#### Modelos para Biodiesel

$$CN = 6,622 + 0,266 \cdot LL + 0,330 \cdot LI + 0,503 \cdot O + 0,686 \cdot P + 0,792 \cdot S \quad (1)$$

$$CN = 0.331 \cdot LL + 0.397 \cdot LI + 0.571 \cdot O + 0.752 \cdot P + 0.858 \cdot S \quad (2)$$

$$R^2 = 0.994 \quad R^2_{ajustado} = 0.893 \quad MAE = 2.408$$

### Modelos para aceites vegetales

$$CN = -21.724 + 0.491 \cdot LL + 0.550 \cdot LI + 0.656 \cdot O + 0.729 \cdot E + 0.797 \cdot L + 0.893 \cdot P + 0.902 \cdot M + 1.050 \cdot S$$

$$R^2 = 0.815 \quad R^2_{ajustado} = 0.693 \quad MAE = 4.433 \quad (3)$$

$$CN = 0.272 \cdot LL + 0.330 \cdot LI + 0.437 \cdot O + 0.500 \cdot E + 0.560 \cdot L + 0.676 \cdot P + 0.678 \cdot M + 0.831 \cdot S$$

$$R^2 = 0.984 \quad R^2_{ajustado} = 0.976 \quad MAE = 4.557 \quad (4)$$

Como se puede observar en las ecuaciones (2) y (4) cuando se elimina la constante del modelo, el coeficiente de determinación aumenta, esto es muy bueno debido a que un aumento de este coeficiente implica una mejor correlación entre el CN y la composición de FAME.

### Análisis de regresión

En las tablas 5 y 6 se muestra el análisis de regresión para cada uno de los biocombustibles.

**Tabla 5.** Análisis de regresión múltiple para biodiesel

Variable dependiente: CN				
Parámetro	Error de estimación	Estadístico estándar	T	Probabilidad
Linoleico	0.396593	0.0311633	12.72630	0.0000
Linolénico	0.331888	0.0382190	8.68384	0.0000
Oleico	0.571139	0.0318832	17.91350	0.0000
Palmítico	0.752435	0.0395222	19.03830	0.0000
Esteárico	0.858043	0.0434834	19.73270	0.0000

**Tabla 6.** Análisis de regresión múltiple para aceites vegetales

Variable dependiente: CN				
Parámetro	Error de estimación	Estadístico estándar	T	Probabilidad
Erúcico	0.500278	0.1355420	3.69093	0.0027
Laúrico	0.560460	0.0668556	8.38313	0.0000
Linoleico	0.329562	0.0488910	6.74074	0.0000
Linolénico	0.271695	0.0705075	3.85343	0.0000
Mirístico	0.678351	0.0776756	8.73313	0.0000
Oleico	0.436689	0.0521182	8.37882	0.0000
Palmítico	0.676147	0.0727827	9.28994	0.0000
Esteárico	0.831285	0.0779015	10.67100	0.0000

Las tablas 5 y 6 muestran los resultados del ajuste del modelo de regresión múltiple describiendo la relación que existe entre el CN y la composición de FAME, así lo demuestran los valores de probabilidad determinado a partir de la prueba estadística de Durbin- Watson. El valor de probabilidad de cada parámetro tanto para aceites como para biodiesel es inferior a 0.01 lo que indica que existe una relación estadísticamente significativa entre las variables dependientes (CN) e independientes (FAME) para un nivel de confianza de un 99%.

Luego de haber obtenido los modelos preliminares se realizó un análisis de residuales con vistas a mejorar la capacidad de predicción de los modelos. El criterio de aceptación de los FAME en el modelo estuvo basado en la varianza residual buscando la mínima sumatoria.

Los modelos finales para biodiesel y aceites vegetales luego del análisis estadístico y el criterio de residuales son expuestos en la ecuaciones (5) y (6), donde se puede observar el alto coeficiente de determinación para ambos modelos (biodiesel  $R^2=0.996$  y para aceites vegetales  $R^2=0.9976$ ) lo cual muestra la buena correlación entre el CN y la composición de FAME. El  $R^2$  ajustado muestra la variabilidad entre las

variables independientes (FAME), en ambos casos este coeficiente es bastante alto significa que los modelos obtenidos se pueden comparar con otros modelos que tengan diferentes números de FAME. La desviación estándar  $S=4.371$  es una medida de la dispersión de los datos, un estadístico que define un tamaño promedio de la desviación para cada observación con respecto a su valor esperado. El error absoluto medio (MAE) muestra el error medio de los residuos.

$$CN = 0.342 \cdot LL + 0.427 \cdot LI + 0.561 \cdot O + 0.742 \cdot P + 0.858 \cdot S \quad (5)$$

$$R^2 = 0.996 \quad R^2_{ajustado} = 0.994 \quad S = 4.371 \quad MAE = 2.450$$

$$CN = 0.242 \cdot LL + 0.320 \cdot LI + 0.427 \cdot O + 0.510 \cdot E + 0.551 \cdot L + 0.656 \cdot P + 0.658 \cdot M + 0.841 \cdot S \quad (6)$$

$$R^2 = 0.984 \quad R^2_{ajustado} = 0.976 \quad MAE = 4.557$$

Donde  $LL, LI, O, P, S, E, L$  y  $M$  son el % de ácidos grasos de linolénico, linoleico, oleico, palmítico, esteárico, erúcico, laúrico y mirístico.

### Validación parcial de los modelos

Los modelos obtenidos mediante el análisis de regresión múltiple mostrado en las ecuaciones 5 y 6 fueron validados a través de una comparación con datos reportados en la literatura extraídos de bases de datos referenciadas, como se muestran en las tablas 7 y 8. En el caso del modelo para biodiesel se hizo una validación con el modelo de Gopinath en [7] (expuesto en la ecuación (7)). Este modelo al igual que el de esta investigación es obtenido a partir de la composición de ácidos grasos de diferentes biodiesel, para la determinación del modelo fueron utilizados 59 biodiesel, 7 ácidos grasos puros y una mezcla.

Para los aceites vegetales la validación solo fue hecha mediante una comparación con los datos de la literatura debido a que no se encontró ningún modelo para determinar  $CN$  de aceites vegetales a partir de su composición química.

#### Modelo obtenido en [7]

$$CN = 62.2 + 0.017 \cdot L + 0.074 \cdot M + 0.115 \cdot P + 0.177 \cdot S - 0.103 \cdot O - 0.279 \cdot LI - 0.366 \cdot LL$$

$$R^2 = 0.953 \quad R^2_{ajustado} = 0.947 \quad S = 2.271 \quad (7)$$

Donde  $L, M, P, S, O, LI, LL$ , son el % de ácidos grasos de laúrico, mirístico, palmítico, esteárico, oleico, linoleico, linolénico y erúcico,  $R^2$  es el coeficiente de determinación,  $R^2$  ajustado muestra la variabilidad entre variables independientes y el  $CN$ .

**Tabla 7.** Comparación de los valores de número de cetano del modelo con los reportados en la literatura y con el modelo de Gopinath en [7]

Biodiesel	Reportados en la literatura	Promedio	Obtenidos por el modelo	Obtenido por Gopinath [7]
Palma	62 [3], 60.4 [23], 62.3 [7]	61.6	63.7	61.9
Linaza	52 [3]	52,0	43.4	36.2
Soya	45 [3], 37-45 [28], 48.8 [7]	44.9	50.6	44.5
Semilla de Colza	54.5 [17], 51-54, [28] 52.2 [7]	53.1	51.9	47.9
Girasol	49 [3], 45-52 [28], 53.4 [7]	50.3	49.4	42.5
Jatropha	50-51 [28], 53,6 [7]	52.1	56.8	51.6
Maní	54 [3]	54,0	53.6	50.1
Semilla de algodón	51.6 [7]	51.6	51.7	47.4
Karanja	52.5 [7]	52.5	52,0	53.9

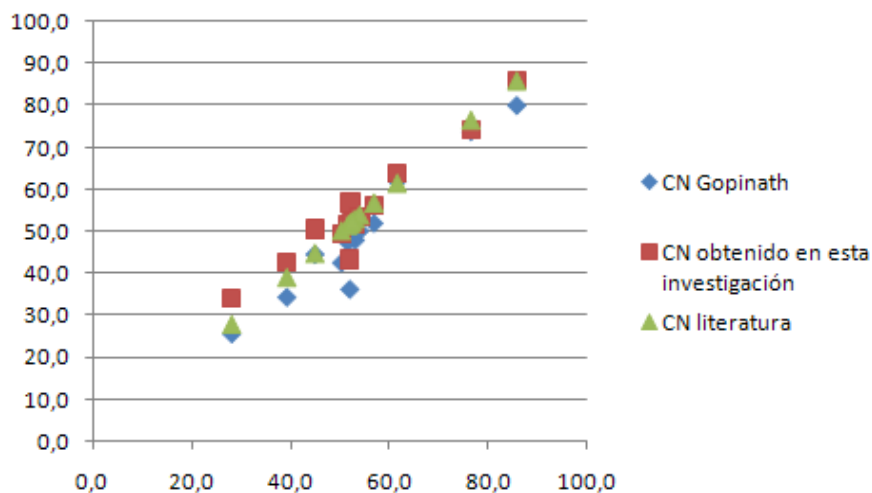
**Tabla 8.** Comparación de los valores de número de cetano predichos por el modelo con los reportados en la literatura.

Aceites	Valores reportados	Promedio	Obtenidos por el modelo
Maíz	37.6 [21, 26]	37.6	38.8
Semilla de algodón	41.8 [21, 26] 40.7 [9]	41.3	44.1
Crambe	44.6 [21, 26]	44.6	44.7
Linaza	34.6 [21, 26, 27]	34.6	32.5
Maní	41.8 [21, 27]	41.8	41.5
Cártamo	41.3 [21, 26]	41.3	37.2
Cártamo alto en oleico	49.1 [21]	49.1	44.8
Sésamo	40.2 [21, 26]	40.2	43.3
Soya	37.9 [21, 26]	37.9	39.1
Girasol	37.1 [21, 26, 27]	37.1	37.6
Babasú	38 [21]	38,0	49.9
Coco	50.3 [9]	50.3	47.5
Palma	42 [21, 26]	42,0	54.7
Neem	47 [26]	47,0	52.7
Jatropha	(41-51) [29], 51 [50], 45 [31]	47.3	41.7

En la columna tres de las tablas 5 y 6 se calcula el promedio de los valores de CN reportados en la literatura.

En estas tablas se puede observar que los resultados que aportan los modelos obtenidos en este trabajo no están muy distantes de los datos reportados en la literatura, ni de los obtenidos por Gopinath en [7]. Por ejemplo para el caso del BD el valor máximo residual entre el promedio de los datos reportados en la literatura con respecto al obtenido por el modelo es de 8.6; y con respecto al obtenido por Gopinath, es de 7.2 ambos en el caso del BD de Linaza. Las diferencias que existen pueden estar influenciadas por el lugar de procedencia, la temperatura entre otros factores los cuales pueden afectar la composición química del biocombustible.

La figura 1 muestra una comparación entre los CN reportados en la literatura, los obtenidos por el modelo de Gopinath y el de esta investigación. El mismo permita comparar gráficamente la capacidad de predicción de ambos modelos con los datos de la literatura.



**Fig. 1.** Comparación entre diferentes CN.



Es necesario señalar que los modelos desarrollados en este trabajo pueden ser usados para predecir número de cetano tanto para ácidos grasos puros, como bien para aceites vegetales y biodiesel. Sin embargo, la predicción del CN a partir de la composición de ácidos grasos está limitada a números de átomos de carbono que estén entre 16:0 y 18:3 para el caso del biodiesel y de 12:0 a 22:1 para aceites vegetales. Otros ácidos grasos fuera de este intervalo no fueron considerados para la obtención de estos modelos.

## Conclusiones

- Se obtuvieron dos modelos físico-matemáticos para predecir el número de cetano a partir de la composición de ácidos grasos de biocombustibles derivados de aceites vegetales.
- Se determinó que el número de cetano está estrechamente influenciado por la composición de ácidos grasos.
- Los modelos obtenidos tienen un grado de precisión de un 99,6% en el caso del biodiesel y 98,4 % para aceites vegetales, lo cual muestra su utilidad práctica y adecuada capacidad de predicción de CN.

## Recomendaciones

Validar totalmente los modelos obtenidos a través de la determinación experimental del número de cetano de un grupo de biocombustibles seleccionados mediante la caracterización de su proceso de combustión en una cámara de combustión a volumen constante o en un banco de motores de pruebas habilitado para ello.

## Agradecimientos

Los autores agradecen al Departamento de Mecánica de la Combustión de la Universidad de Gante, Bélgica por proporcionar el financiamiento y parte de los medios para el desarrollo de esta investigación.

## Referencias

1. Piloto Rodríguez, R., *et al.* "Thermal behavior of Jatropha curcas oils and their derived fatty acid ethyl esters as potential feedstocks for energy production in Cuba". *J Therm Anal Calorim.* 2011, vol. 90, nº. 2, p. 1-10. ISSN 1388-6150.
2. Dmytryshyn, S. L., *et al.* "Synthesis and characterization of vegetable oil derived esters: evaluation for their diesel additive properties". *Bioresource Technology.* 2004, vol. 92, p. 55–64. ISSN 0960-8524.
3. Kumar Agarwal, A. "Biofuels (alcohols and biodiesel) applications as fuels for internal combustion engines". *Progress in Energy and Combustion Science.* 2007, vol. 33, p. 233–271. ISSN 0360-1285.
4. Agarwal, A.K., J. Bijwe, y L.M. Das. "Effect of Biodiesel Utilization of Wear of Vital Parts in Compression Ignition Engine". *Engineering for Gas Turbines and Power.* 2003, vol. 125, p. 604-611. ISSN 1528-8919.
5. Lois, E. "Letter to the editor". *Fuel.* 2007, vol. 87, p. 1212-1213. ISSN 0016-2361.
6. Piloto Rodriguez, R. *Determination of Biodiesel Influence on the Performance of Diesel Engines.* Tutor: S. Verhelst. PhD Thesis, Department of Flow, Heat & Combustion Mechanics. Ghent University, Ghent. 2010.
7. Gopinath, A., S. Puhan, y G. Nagarajan. "Relating the cetane number of biodiesel fuels to their fatty acid composition: a critical study". *J. Automobile Engineering,* 2009, vol. 223, nº. 4, p. 565-583 ISSN 1745-2651. DOI 10.1243/09544070JAUTO950.
8. Gopinath, A., S. Puhan, y G. Nagarajan. "Effect of biodiesel structural configuration on its ignition quality". *Energy and Environment.* 2010, vol. 1, nº 2, p. 295-306. ISSN 2076-2909.
9. Lujaji, F., *et al.* "Cetane number and thermal properties of vegetable oil, biodiesel, 1-butanol and diesel blends". *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry.* 2010, vol. 102, nº. 3. p 1175-1181. ISSN 1572-8943
10. Knothe, G., Matheaus, A. C. y Ryan, T. W.. "Cetane numbers of branched and straight-chain fatty esters determined in an ignition quality tester". *FUEL.* 2003, vol. 82, p. 971–975. ISSN 0016-2361.
11. Liotta, F.J. *A Peroxide Based Cetane Improvement Additive with Favorable Blending Properties.* USA: SAE Technical Papers. 1993
12. Piloto Rodríguez, R., Sierens, R. y Verhelst, S. "Thermal and kinetic evaluation of biodiesel derived from soybean oil and higuera oil". *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry.* 2009, vol. 96, nº 3, p. 897-901. ISSN 1572-8943

13. Piloto Rodríguez, R., Sierens, R. y Verhelst, S. "Ignition delay in a palm oil and rapeseed oil biodiesel fuelled engine and predictive correlations for the ignition delay period". *Fuel*. 2011, vol. 90, p. 766-772. ISSN 0016-2361.
14. Bamgboye, A.I. y Hansen, A.C. "Prediction of cetane number of biodiesel fuel from the fatty acid methyl ester (FAME) composition". *International Agrophysics*. 2008, vol. 22, p. 21-29. ISSN 0236-8722.
15. Lin, B.F., Huang, J.H. y Huang, D.Y. "Experimental study of the effects of vegetable oil methyl ester on DI diesel engine performance characteristics and pollutant emissions". *Fuel*. 2009, vol. 88, p. 1779–1785. ISSN 0016-2361.
16. Gopinath, A., Puhan, S. y Nagarajan, G.. "Theoretical modeling of iodine value and saponification value of biodiesel fuels from their fatty acid composition". *Renewable Energy*. 2009, vol. 34, p. 1806–1811. ISSN 1757-398X.
17. Marshall, W., Schumacher, L.G. y Howell, S. "Engine Exhaust Emissions Evaluation of a Cummins L10E When Fueled with a Biodiesel Blend". *SAE*. 1995, vol. 952363, ISSN 0096-736X.
18. W. Allen, C.A., *et al.* "Predicting the viscosity of biodiesel fuels from their fatty acid ester composition". *Fuel*. 1999, vol. 78 p. 1319–1326. ISSN 0016-2361.
19. Akbar, E., *et al.* "Characteristic and Composition of Jatropha Curcas Oil Seed from Malaysia and its Potential as Biodiesel Feedstock". *Scientific Research*. 2009, vol. 29 n<sup>o</sup>.3, p. 396-403. ISSN 1450-216X.
20. Demirbas, A. *Biodiesel. A realistic fuel alternative for diesel engines*. London: Springer-Verlag. 2008. ISBN 10: 1846289947.
21. Knothe, G., Dunn, R.O. y Bagby, M.O. *Biodiesel: The Use of Vegetable Oils and Their Derivatives as Alternative Diesel Fuels*. USA: SAE Technical Papers, 2003. Report IL 61604., USA.
22. Mormino, I. *Vegetable oils and animal fats for use in compression ignition engines: chemical and physical properties, engine performance and emissions*. Belgium, Gent: Department of Flow, Heat and Combustion Mechanics, 2007-2008.
23. Necati Ozsezen, A., *et al.* "Performance and combustion characteristics of a DI diesel engine fueled with waste palm oil and canola oil methyl esters". *Fuel*. 2009, vol. 88, p. 629–636. ISSN 0016-2361.
24. Raja, S.A., Smart, D.S.R. y Robert Lee, C.L. "Biodiesel production from jatropha oil and its characterization". *Research Journal of Chemical Sciences*. 2011, vol. 1, n<sup>o</sup>. 1, p. 1-7. ISSN 0973-7103.
25. Yuan, W., Hansen, A.C. y Q. Zhang. "Vapor pressure and normal boiling point predictions for pure methyl esters and biodiesel fuels". *Fuel*. 2005, vol. 84, p. 943–950. ISSN 0016-2361.
26. Babu, A.K. y G. Devaradjane. "Vegetable Oils And Their Derivatives As Fuels For CI Engines: An Overview".. *SAE Technical Paper Series*. 2003, vol. 2003-01-0767, p. 1-16. ISSN 0148-7191.
27. Castro, P., J. Coello, y L. Castillo. *Opciones para la producción y uso de Biodiesel en el Perú*. Ed. 51. Pías, Perú: Editorial Soluciones Prácticas. 2007. p 1-176. ISBN 978-9972-47-136-0.
28. Ganapathy, T., Murugesan, K. y Gakkhar, R. P. "Performance optimization of Jatropha biodiesel engine model using Taguchi approach". *Applied Energy*. 2009, vol. 86 p. 2476–2486. ISSN 0306-2619.
29. Piloto Rodríguez, R., *et al.* "Characterization of pure oils and biodiesel obtained from two different Jatropha Curcas plantations in Cuba for their use in internal combustion engines". *Biomass and Bioenergy*. 2011, vol. 35, p. 4092-4098. ISSN 0961-9534.
30. Henning, R. K. *The Jatropha System. An integrated approach of rural development*. Weissensberg, Alemania. 2009. p. 1-105. [Consultado el: 12 de septiembre de 2011] Disponible en: [www.jatropha.de](http://www.jatropha.de) ISBN 978-92-5-106438-2.
31. Narayana Reddy, J. and Ramesh, A. "Parametric studies for improving the performance of a Jatropha oil-fuelled compression ignition engine". *Renewable Energy*. 2006, vol. 31 p. 1994–2016. ISSN 1757-398X
32. Demirbas, A. "Fuel properties and calculation of higher heating values of vegetable oils". *Fuel*. 1998, vol. 77, n<sup>o</sup>. 9/10 p. 1117–20. ISSN 0016-2361.
33. Ghadge Shashikant, V. and Raheman, H. "Biodiesel production from mahua (*Madhuca indica*) oil having high free fatty acids". *Biomass and Bioenergy*. 2005 vol. 28, p. 601–5. ISSN 0961-9534.
34. Graboski, M.S. and McCormick, R. L. "Combustion of fat and vegetable oil derived fuels in diesel engines". *Progress in Energy and Combustion Science*. 1998, vol. 24, p. 125–64. ISSN 0360-1285.

35. Kinoshita, E., Myo, T., y Hamasaki, K. " Diesel combustion characteristics of coconut oil and palm oil biodiesels". *SAE Technical Paper Series*. 2006, ISSN 0148-7191.
36. Knothe, G. "Dependence of biodiesel fuel properties on the structure of fatty acid alkyl esters". *Fuel Processing Technology*. 2005, vol. 86, p. 1059–1070. ISSN 0378-3820.
37. Ramadhas, A.S., *et al.* "Artificial neural networks used for the prediction of the cetane number of biodiesel fuel". *Renewable Energy*. 2006, vol. 31, p. 2524–2533. ISSN 0960-1481.
38. Senthil, K.M., Ramesh, A. y Nagalingam, B. "An experimental comparison of methods to use methonal and Jatropha oil in a compression ignition engine". *Biomass and Bioenergy* 2003, vol. 25, p. 309–18. ISSN 0961-9534.