

Predicción de propiedades de componentes del aceite de soya para su modelado como componente hipotético

Predicting component properties of soybean oil and its modeling as a hypothetical component

Maribel Rondón-Martínez¹<https://orcid.org/0000-0002-0651-0146>

Margarita Penedo-Medina²<https://orcid.org/0000-0003-1423-0109>

¹Empresa Procesadora de Soya. MINAL. Santiago de Cuba. Cuba

²Facultad de Ingeniería Química y Agronomía. Universidad de Oriente. Santiago de Cuba. Cuba

*Autor para correspondencia: correo electrónico: mpenedo@uo.edu.cu

RESUMEN

El trabajo presenta la aplicación del método de contribución por grupos, de Marrero y Gani y el método de los fragmentos químicos constituyentes, en la determinación de las propiedades críticas, temperatura de ebullición, presión de vapor y densidad de triglicéridos y α -Tocoferol. Los resultados se aplicaron en el modelado del aceite de soya crudo como componente hipotético utilizando el simulador Hysys 8.8, a partir de un perfil de concentración característico. Aplicando la herramienta *Attached Analysis*, se determinaron las propiedades termo físicas del aceite de soya a temperaturas entre 20°C y 140°C. Por el método de fragmentos se determinó la presión de vapor de triglicéridos y de la mezcla de triglicéridos, (tripalmitina, tristearina, trioleina, trilioleina y

trilonenina) y de la mezcla de triglicéridos, los parámetros de la ecuación de Antoine, y la curva de presión de vapor del aceite de soya crudo. El procedimiento puede constituir una valiosa herramienta en la simulación de procesos de obtención de aceites comestibles, así como de aceites no comestibles (biodiesel).

Palabras clave: aceite de soya; triglicéridos; presión de vapor; Hysys; modelo contribución por grupos; fragmentos químicos constituyentes.

ABSTRACT

The work presents the application of the method of contribution by groups of Marrero and Gani and the method of the constituent chemical fragments, in the determination of the critical properties, boiling temperature, vapor pressure and density of triglycerides and α -tocopherol, present in soybean oil. The results were applied in the modeling of crude soybean oil as a hypothetical component using the Hysys 8.8 simulator, based on a characteristic concentration profile. Applying the Attached Analysis tool, the thermo-physical properties of soybean oil were determined at temperatures between 20 ° C and 140 °C. By the fragment method, the vapor pressure of triglycerides (tripalmitin, tristearin, triolein, triliolein and trilonenin) and of the triglyceride mixture were determined; the parameters of the Antoine equation, and the vapor pressure curve of crude soybean oil are presented. The procedure can be a valuable tool in the simulation of processes for obtaining edible oils, as well as non-edible oils (biodiesel).

Keywords: soybean oil; triacylglycerols; vapor pressure; Hysys; group contribution model; chemical constituent fragments.

Recibido: 08/08/2021

Aceptado: 15/12/2021

Introducción

En los cálculos ingenieriles relacionados con procesos de obtención de aceites vegetales, son necesarios datos experimentales y modelos para evaluar propiedades tales como presión de vapor, entalpía de vaporización, viscosidad, densidad y temperatura de ebullición de los aceites y sus constituyentes, entre otras propiedades. Esta información no abunda en la literatura especializada, existiendo dispersión y resultados no coincidentes en los valores reportados. El método experimental constituye la vía más idónea para evaluar las propiedades de las sustancias, pero no siempre es posible su aplicación, como en los aceites vegetales; los cuales se descomponen a temperatura y presión por debajo de las críticas y hasta por debajo de la temperatura normal de ebullición. De ahí la importancia de métodos predictivos.^(1, 2)

Los aceites vegetales están compuestos fundamentalmente por glicéridos de ácidos grasos de origen vegetal, y en menor medida por materia insaponificable, ácidos grasos libres, fosfolípidos, esteroides, tocoferoles e hidrocarburos entre otras sustancias. Los glicéridos son ésteres de los ácidos grasos con el glicerol, y pueden estar constituidos por una, dos o tres moléculas de ácidos grasos (monoglicéridos, diglicéridos y triglicéridos, respectivamente). Los triglicéridos son ésteres de una molécula de glicerol con tres moléculas de ácidos grasos, y pueden ser simples y mixtos. Los triglicéridos simples tienen tres cadenas de ácidos grasos idénticas y los triglicéridos mixtos poseen dos o tres ácidos grasos diferentes.⁽²⁾

Sustancias como los ácidos grasos y triglicéridos se pueden crear como sustancias hipotéticas en simuladores de procesos, partiendo de su estructura molecular o de sus propiedades críticas, densidad, temperatura normal de ebullición, masa molecular, presión de vapor, entre otras. En el caso de los aceites vegetales, para determinar estas propiedades se pueden aplicar los métodos de contribución de grupos y el método de fragmentos.^(1, 2)

En el método de contribución de grupos, con base en la estructura de la molécula, la propiedad del compuesto es función de la frecuencia en que aparecen estos grupos y sus contribuciones. Entre los métodos más antiguos están los que permiten estimaciones rápidas sin requerir recursos computacionales sustanciales.^(1, 3) Otros autores⁽⁴⁾ propusieron un método que realiza la estimación en dos niveles: un nivel

básico con las contribuciones de grupos simples, y un segundo nivel, que permite diferenciar moléculas de isómeros, moléculas que tienen los mismos grupos, localizados en conjunto o no, estructuras de resonancia, etcétera.

Existe un método para la estimación de propiedades de compuestos orgánicos puros ⁽³⁾ con tres niveles de estimación. El nivel primario utiliza contribuciones de grupos simples; el segundo y tercer nivel incluyen grupos poli funcionales y estructurales que brindan más información sobre fragmentos moleculares. El método permite estimar las propiedades críticas y el punto normal de ebullición entre otras propiedades.

Se ha propuesto otro método de estimación, ⁽²⁾ el cual se basa en fragmentos de los constituyentes químicos. De acuerdo con este método, los TG, DG y MG son divididos en fragmentos de glicerol y de ácidos grasos presentes. Se aplica en el cálculo de la presión de vapor, entalpía de vaporización, capacidad calorífica de líquidos, densidades y viscosidades de triglicéridos.

Dada la amplia aplicación y eficacia de los métodos de contribución por grupos y el método de fragmentos constituyentes, en la determinación de propiedades de triglicéridos, ácidos grasos y otros compuestos presentes en los aceites vegetales, este trabajo se planteó como objetivo aplicarlos en la determinación de propiedades de los componentes del aceite de soya y realizar la modelación del aceite de soya crudo, como componente hipotético, a partir las propiedades de sus constituyentes, aplicando el simulador Hysys 8.8; y validar los resultados comparando sus propiedades con valores experimentales reportados.

Materiales y métodos

Componentes característicos del aceite de soya crudo

En este trabajo, la composición del aceite de soya crudo, se estableció a partir de la composición global del aceite crudo reportada por, ⁽⁵⁾ donde los triglicéridos (TG) representan un 95,8 % m/m; y el contenido de TG reportado por, ⁽⁶⁾ que consideraron los TG simples que se muestran en la tabla 1. Con la masa molecular (M) de cada

componente se determinó la fracción molar y másica de los mismos, obteniéndose el perfil de concentración de la tabla 1.

Tabla 1- Composición del aceite de soya crudo*

Componente	Composición (% m)	M g/gmol	Fracción molar	Fracción másica
Triglicéridos	95,8			
Tripalmitina		807,30	0,1061	0,10410
Triestearina		891,47	0,0285	0,03085
Trioleina		885,43	0,2101	0,22620
Trilinoleina		879,40	0,5016	0,53630
Trilinolenina		873,34	0,0570	0,06060
Ácido linoleico libre	1,3	280,50	0,0381	0,01300
β-Colesterol	1,5	386,70	0,0267	0,01500
α-Tocoferol	1,4	430,70	0,0319	0,01400

*Adaptado de Díaz-Tovar (2011)⁽⁵⁾ y Zong y col. 2010⁽²⁾

Método de Marrero y Gani: propiedades críticas y temperatura de ebullición. Factor acéntrico

Las propiedades críticas son constantes importantes para determinar los límites entre las fases de un compuesto. La determinación experimental de estas propiedades es difícil, pues puede ocurrir la degradación química a altas temperaturas. En este trabajo se aplicó el método de contribución por grupos, de Marrero y Gani, basado en los grupos del modelo termodinámico *Universal Functional Activity Coefficient (UNIFAC)*.⁽³⁾ Las ecuaciones básicas son:

$$f(Pro) = \exp \frac{T_c}{231,239K} = \sum_i N_i T_{c1i} + W \sum_j M_j T_{c2j} + Z \sum_k O_k T_{c3k} \quad (1)$$

$$f(Pro) = (P_c - 5,9827)^{-0.5} - 0.108998 = \sum_i N_i P_{c1i} + W \sum_j M_j P_{c2j} + Z \sum_k O_k P_{c3k} \quad (2)$$

$$f(Pro) = V_c - 7,95 = \sum_i N_i V_{c1i} + W \sum_j M_j V_{c2j} + Z \sum_k O_k V_{c3k} \quad (3)$$

donde:

T_c : Temperatura crítica,

K ; P_c : Presión crítica, bar;

V_c : Volumen crítico,

cm^3/mol ; T_{c1i} , P_{c1i} y V_{c1i} : Contribuciones de los grupos de primer orden, tipo i. T_{c2j} , P_{c2j} , V_{c2j} : Contribuciones de los grupos de segundo orden, tipo j. T_{c3} , P_{c3} , V_{c3} : Contribuciones de los grupos de tercer orden, tipo k. T_{c0} , P_{c1} , P_{c2} , y V_{c0} : Parámetros adicionales de ajuste (constantes universales).

A partir de la fórmula química, estructura y masa molecular de los TG simples y el α -Tocoferol, que se sometieron a evaluación de sus propiedades (al no aparecer como componentes puros en la librería del simulador Hysys aplicado en este trabajo), se identificaron los grupos de primer orden, segundo orden y tercer orden, así como el número de grupos (tabla 2).

Tabla 2- Frecuencia de los grupos en los triglicéridos simples y α -Tocoferol

	PPP	SSS	OOO	LiLiLi	LnLnLn	α -Tocoferol
Grupos de primer orden						
CH ₃	3	3	3	3	3	5
CH ₂	42	48	42	36	30	9
CH-COO	1	1	1	1	1	3
CH ₂ COO	2	2	2	2	2	2
CH=CH	-	-	3	6	9	3
AC	-	-	-	-	-	2
AC-CH ₃	-	-	-	-	-	3
AC-OH	-	-	-	-	-	1
CH ₂ (cyc)	-	-	-	-	-	2
C(cyc)	-	-	-	-	-	1
O(cyc)	-	-	-	-	-	1
Grupos de segundo orden						
(CH ₃) ₂ CH	3	3	3	3	3	1
CH ₂ -CH=CH	-	-	6	12	18	-
C(cyc)-CH ₃	-	-	-	-	-	1
C(cyc)-CH ₂	-	-	-	-	-	1
Grupos de tercer orden						
CH _{ncyc} (fused rings)	-	-	-	-	-	1
aC-Ocyc (fused rings)	-	-	-	-	-	1

Determinación de la temperatura normal de ebullición: la temperatura normal de ebullición de un fluido es la temperatura a la cual la presión de vapor se iguala a la presión atmosférica externa. La ecuación (4) es la función $f(Pro)$, del método de Marrero y Gani, para la temperatura de ebullición:

$$f(Pro) = \exp \frac{T_b}{204.359 K} = \sum N_i T_{b1i} + W \sum M_j T_{b2j} + Z \sum O_k T_{b3k} \quad (4)$$

donde:

T_{b1i} : Contribución de los grupos de primer orden, tipo i.

T_{b2j} : Contribución de los grupos de segundo orden, tipo j.

T_{b3k} : Contribución de los grupos de tercer orden, tipo k. Los términos de contribución de grupos para cada propiedad que aparecen en las ecuaciones 1-4 se obtuvieron por la literatura.⁽³⁾

El factor acéntrico se determinó aplicando la regla de Pitzer, a partir de las propiedades críticas de los compuestos. La regla de Pitzer ⁽¹⁾ relaciona el factor de compresibilidad crítico y el factor acéntrico:

$$Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c} \quad (6)$$

donde:

Z_c : es el factor de compresibilidad crítico:

Método basado en fragmentos. Presión de vapor y densidad de triglicéridos

El método basado en fragmentos químicos constituyentes de un compuesto fue propuesto por algunos autores.⁽²⁾ Según este método, los compuestos se dividen en fragmentos, por ejemplo, para la Tripalmitina (PPP) (figura 1), se identifica un fragmento de glicerol y tres fragmentos de ácido graso Palmítico. De igual modo se procedió para identificar los fragmentos en cada compuesto a partir de su estructura molecular.

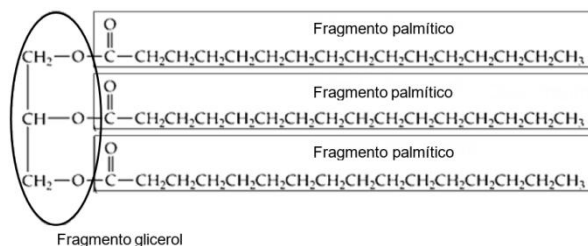


Fig. 1 - Representación de los fragmentos de una molécula de TG simple (PPP)

Determinación de la presión de vapor: la presión de vapor de un compuesto dado es la presión del vapor en equilibrio termodinámico con la fase líquida en un sistema cerrado. Para predecir la presión de vapor de aceites vegetales se aplicó el método basado en fragmentos, ⁽²⁾ y la ecuación de Clausius-Clapeyron, ⁽¹²⁾ en base a la ecuación 7:

$$\log P_v = A - \frac{B}{T} = \frac{-\Delta G_{\theta}^{vap}}{R\theta \ln 10} + \frac{-\Delta H_{\theta}^{vap}}{R \ln 10} \left(\frac{1}{\theta} - \frac{1}{T} \right) \quad (7)$$

donde:

P_v : Presión de vapor (kPa);

T: Temperatura absoluta (K);

R : Constante de los gases;

θ : Temperatura de referencia (298,15 K);

ΔH_{θ}^{vap} : Calor o entalpía de vaporización, a la temperatura de referencia;

ΔG_{θ}^{vap} : Energía libre de Gibbs, a la temperatura de referencia. Aplicando la ecuación (7) a varias temperaturas, se pueden evaluar los parámetros A y B. La entalpía de vaporización $\Delta G_{\theta, TG}^{vap}$ y la energía libre de Gibbs ΔG_{θ}^{vap} a la temperatura de referencia, se determinan por:

$$\Delta H_{\theta, TG}^{vap} = \sum N_{frag, A} \Delta H_{\theta, A}^{vap} \quad (8)$$

$$\Delta G_{\theta, TG}^{vap} = \sum N_{frag, A} \Delta G_{\theta, A}^{vap} \quad (9)$$

donde:

$N_{frga,A}$: Número de fragmentos "A" en el componente;

$\Delta H_{\theta,A}^{vap}$: Contribución del fragmento "A", a la entalpía de vaporización;

$\Delta G_{\theta,A}^{vap}$: contribución del fragmento "A", a la energía libre de Gibbs. Los parámetros $\Delta H_{\theta,A}^{vap}$ y $\Delta G_{\theta,A}^{vap}$ aparecen en ⁽²⁾ para los fragmentos constituyentes glicerol y ácidos grasos con átomos de carbono de 4 a 22, que conforman los TG simples y mixtos.

Con la presión de vapor de los TG se determinó la presión de vapor de la mezcla de TG, por la regla ideal de mezcla, a varias temperaturas, para obtener la curva de presión de vapor y evaluar las constantes de la ecuación de Antoine.

Determinación de la densidad de líquidos: el método basado en fragmentos ⁽²⁾ parte de determinar el volumen molar de los fragmentos en función de la temperatura (fragmento glicerol y fragmentos de los ácidos grasos presentes en cada triglicérido) por la ecuación:

$$V_A^l = \frac{1 + B_{2,A} \cdot T}{B_{1,A}} \quad (10)$$

Con el volumen molar de cada fragmento y el número de fragmentos, se determina el volumen molar de cada compuesto (TG, por ejemplo) por: ^(1, 2)

$$V^l = \sum N_{frga,A} V_A^l \quad (11)$$

$B_{1,A}$ y $B_{2,A}$ son los parámetros de correlación de dependencia de la temperatura del fragmento A, y reportados en ⁽²⁾. $N_{frga,A}$ es el número de fragmentos en un componente; Una vez calculado el volumen molar del compuesto, V^l , se determinó la densidad:

$$\rho = \frac{MW}{V^l} \quad (12)$$

Modelado de los triglicéridos, α -Tocoferol y aceite de soya crudo como componentes hipotéticos

El simulador Hysys 8.8 cuenta con una base de datos amplia; sin embargo, de los componentes incluidos en el perfil del aceite de soya crudo, en la librería de Hysys aparecen solamente el ácido linoleico, β -colesterol y el TG Trioleina como componentes puros. Los TG (PPP, SSS, LiLiLi y LnLnLn) y el α -Tocoferol, no están disponibles; por ello se crearon como componentes hipotéticos. Los datos introducidos para crearlos fueron: propiedades críticas, temperatura normal de ebullición y densidad.⁽⁷⁾

Con el conjunto de componentes, puros e hipotéticos, se creó la lista de componentes. Como paquete termodinámico para las propiedades se seleccionó NRTL (Non-Random Two-Liquid). Con todos los componentes presentes en el aceite de soya crudo, y el perfil de composición (tabla 1) se creó una corriente denominada "Mezcla de componentes"; obteniéndose su densidad, punto normal de ebullición y masa molecular. Con las propiedades de esta corriente y las constantes de la ecuación de Antoine (acápite 2.3), se conformó el aceite de soya crudo hipotético.

Resultados y discusión

Resultados de las propiedades propiedades críticas, tempertura de ebullicion y factor acéntrico

Para la estimación de las propiedades críticas de TG y α -Tocoferol se aplicaron las ecuaciones (1-3). Los resultados se muestran en la tabla 3; los mismos fueron concordantes con los obtenidos por ⁽⁸⁾, aplicando el método de Constantino y Gani ⁽⁴⁾,

para Trioleina, Trilioneina y Trilonenina; ($T_c=1035,8$ K; la $P_c=7.371$ bar; y el $V_c=3.16m^3$). Se pueden observar los bajos valores de desviación relativa (DR).

Tabla 3- Propiedades críticas de los componentes ⁽³⁾

TG	T_c , K	P_c , bar	V_c , $m^3/kmol$	$Z_c = \frac{P_c V_c}{RT_c}$	ω
PPP	1006,74	7,5024	2,9732	0,27	0,31
SSS	1029,37	7,2382	3,3109	0,28	0,14
OOO	1033,07(0,26%)*	7,2592(1,51%)*	3,2693(3,46%)*	0,28	0,18
LiLiLi	1036,71(0,43%)*	7,2808(1,22%)*	3,2277(2,14%)*	0,27	0,23
LnLnLn	1040,3(0,43%)*	7,3029(0,92%)*	3,1706(0,34%)*	0,27	0,29
α -Tocoferol	947,65	11,33	1,5412	0,22	0,87

*Desviación relativa (DR) con respecto a resultados de ⁽⁶⁾

Para determinar la temperatura normal de ebullición de los compuestos se aplicó la ecuación (4), del método de Marrero y Gani. ⁽³⁾ En la tabla 4 se muestran los valores calculados y valores experimentales reportados por; ⁽⁵⁾ obteniéndose desviaciones relativas (DR) de la temperatura normal de ebullición, entre 14,33 % y 26,26 % para los TG; y de 2,44 % en el caso de α -Tocoferol.

Tabla 4 -Temperatura normal de ebullición de triglicéridos y α -Tocoferol

Componentes	Valores experimentales (Díaz-Trovar, 2011) ⁽⁵⁾	Este trabajo. (Marrero y Gani, 2001) ⁽³⁾	
	T_b , K	T_b , K	%DR
Tripalmitina	721,8	825,26	14,33%
Triestearina	705,0	847,49	20,21%
Trioleina	727,7	847,85	16,51%
Trilinoleina	687,2	848,21	23,42%
Trilinolenina	672,1	848,56	26,26%
α -Tocoferol	706,49	723,77	2,44%

Resultados de la densidad de los triglicéridos y su mezcla

Para determinar la densidad de los TG se aplicaron las ecuaciones 10 a 12. ⁽²⁾ Los resultados para 25°C se muestran en la tabla 5. Aplicando la regla ideal de mezcla, se determinó la densidad de la mezcla de triglicéridos, resultando un valor de $P_{TG}=928,23 \text{ kg/m}^3$

Tabla 5 - Densidad de los triglicéridos simples a 25°C

TG	Densidad, kg/m ³
PPP	911,81
SSS	908,79
OOO	916,80
LiLiLi	935,40
LnLnLn	946,12

Resultados de la presión de vapor de triglicéridos y su mezcla

La presión de vapor de los TG fue obtenida por el método de los fragmentos, en el intervalo de 250-350°C. La figura 2 muestra los resultados para la Tripalmitina y la Triestearina (para Trioleina, Triloleina y Trilinolenina, los resultados son semejantes a los de la Triestearina). Los valores de la presión de vapor de la mezcla de TG se ubicaron en el intervalo de la presión de vapor de los triglicéridos simples, y se obtuvieron los parámetros de la ecuación de Antoine, según la ecuación siguiente: ⁽⁹⁾

$$\ln P_v = 29,015 - \frac{19855}{T} \quad R^2 = 1 \quad (14)$$

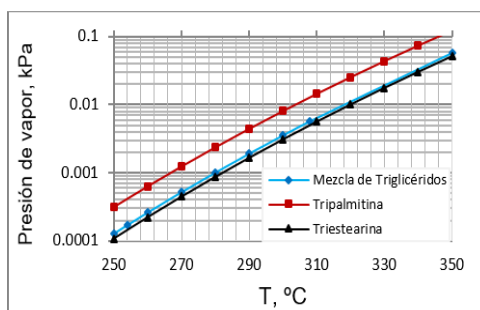


Fig. 2 -Presión de vapor de Triglicéridos y mezcla de Triglicéridos

Propiedades del aceite de soya crudo hipotético

Con los resultados obtenidos de las propiedades de los compuestos incluidos en el perfil de aceite de soya crudo, se creó la corriente "Mezcla de componentes"; con las propiedades de esta corriente y los parámetros de la ecuación de Antoine, ecuación (7); se creó el Aceite Hipotético. En la figura 3 se muestran las interfaces con los datos introducidos en Hysys para el Aceite* hipotético; se pueden observar sus propiedades críticas: temperatura crítica, 881,3K; presión crítica, 11,31 bar; volumen crítico, 1,446 m³/kgmol; factor acéntrico, 0,835 3.

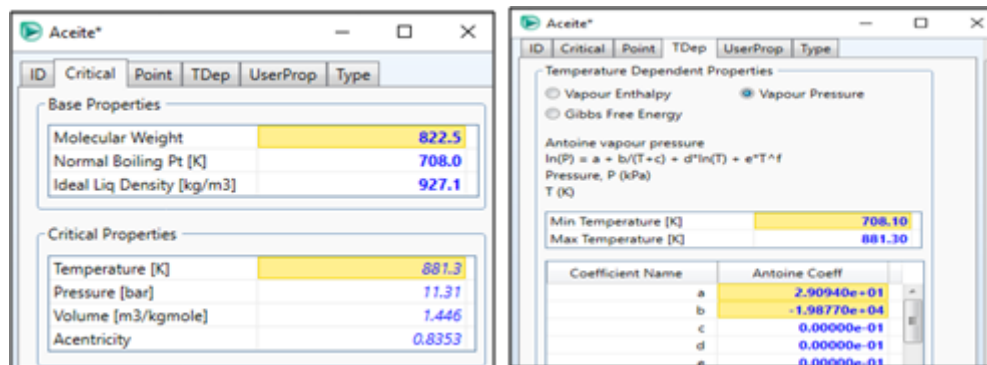


Fig. 3 - Interfaces de construcción del modelo para "Aceite*" hipotético

Para obtener las propiedades termo físicas del aceite, se aplicó la herramienta *Attached Analysis*; en el intervalo de 20°C a 140°C. Los resultados se compararon con valores experimentales reportados en la literatura (figura 4 a-e y tabla 6). Por la misma herramienta, se obtuvo la curva de presión de vapor para el aceite de soya crudo modelado (figura 5). Los resultados de la simulación se compararon con los resultados experimentales reportados por, siendo la desviación relativa de 0,54% a 6,25% entre los datos experimentales y los simulados. Resultados de presión de vapor de aceite de soya fueron también reportados por ⁽²⁾ entre 270 – 300°C, con valores entre 0,3 Pa y 5 Pa, concordando con los valores obtenidos en este trabajo.

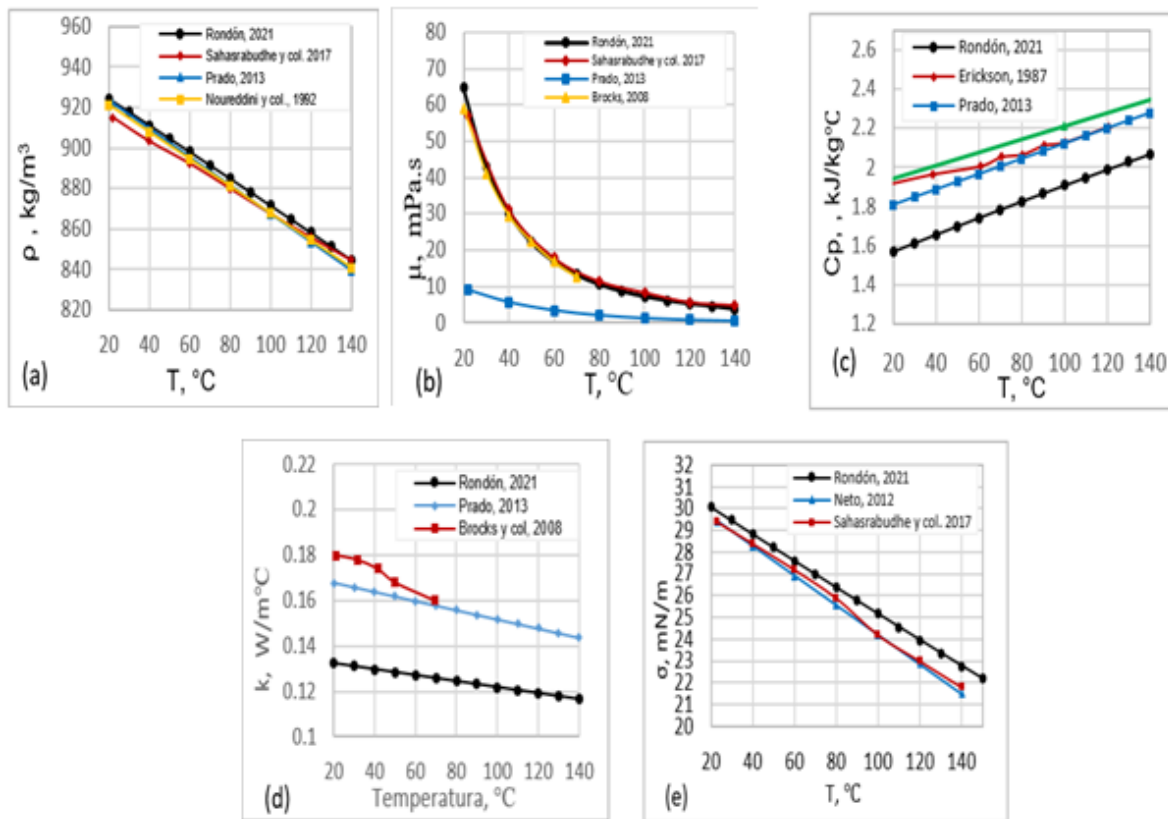


Fig.

4- Comparación de los resultados de las propiedades físicas del aceite de soya hipotético con resultados de la literatura

Tabla 6- Desviación relativa de los resultados de las propiedades termo físicas del aceite de soya, con respecto a valores reportados en la literatura

Propiedad del aceite de soya	DR, %	Referencia bibliográfica
Densidad (figura 4a)	0,34-0,45	(10)
	0,25-0,63	(11)
Viscosidad dinámica (figura 4b)	3,5-12.	(10)
	80-91	(11)
	4,32	(12)
	7,4	(13)
Capacidad calorífica (figura 4c)	12,43	(14)
	12,23	(15)
Conductividad térmica (figura 4d)	21,06	(12)
	25,1	(11)
Tensión superficial (figura 4e)	2,96	(10)
	3,46	(11)

Las propiedades del aceite de soja que aparecen en la tabla 6 fueron obtenidas de las siguientes referencias bibliográficas:

Densidad (figura 4 a), ^(10,11) viscosidad dinámica (figura 4b), ^(10,11,12,13) tensión superficial (figura 4 e), ^(10,11) Capacidad calorífica (figura 4c), ^(14,15) Conductividad térmica (figura 4d) ^(11,12)

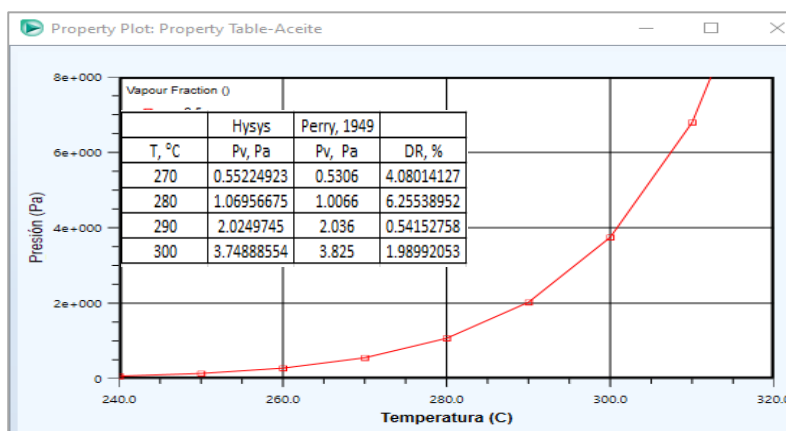


Fig. 5- Presión de vapor del aceite de soja crudo hipotético

Anteriormente se mostró el resultado de la determinación de la presión de vapor para los triglicéridos y su mezcla, así como la ecuación de Antoine y sus parámetros. Por simulación del aceite de soja sobre la base de esta información suministrada, se obtuvo la curva de presión de vapor generada por el simulador, con resultados que demuestran la efectividad del procedimiento, por comparación con datos experimentales, y muy bajos valores de desviación relativa. Los datos de presión de vapor obtenidos pueden ser útiles para cálculos de diseño y operación de procesos de obtención de aceite vegetal.

Conclusiones

En este trabajo se ha mostrado la aplicación del método planteado por la literatura ⁽³⁾ en la determinación de las propiedades críticas y temperatura normal de ebullición de componentes del aceite de soja; así como el método de fragmentos

constituyentes en la determinación de la densidad y la presión de vapor de los triglicéridos y de la mezcla de triglicéridos. El modelado del aceite de soya crudo a partir de las propiedades de los componentes considerados, permitió evaluar propiedades termo físicas tales como densidad, viscosidad dinámica, tensión superficial, capacidad calorífica y conductividad térmica, los cuales resultaron concordantes con resultados experimentales publicados.

El método basado en fragmentos se aplicó en la determinación de la presión de vapor de los triglicéridos y de los parámetros de la ecuación de Antoine. Estos datos fueron aplicados con éxito en el modelado del aceite de soya hipotético, obteniéndose la curva de presión de vapor. La comparación con datos experimentales permitió validar el procedimiento, existiendo una buena correlación entre los resultados de la presión de vapor obtenidos para el aceite simulado y valores experimentales reportados, con desviaciones relativas muy bajas, entre 0,54 % a 6,25 %. El procedimiento puede constituir una valiosa herramienta en la simulación de procesos de obtención de aceites comestibles, así como de aceites no comestibles (biodiesel).

Referencias bibliográficas

1. RABELO SILVA, G.C, Caño de Andrade M.H. "Estimation of thermophysical properties of vegetable oils for creation database to engineering calculations". *Journal of Engineering and Technology for Industrial Applications*, 2020. Edition. 23. **06**, p. 2447-0228. ISSN: 2447-0228
2. ZONG, L. Sundaram R. CHAU-CHYUN C. "Fragment-based approach for estimating thermophysical properties of fats and vegetable oils for modeling. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2010. **49** (2), p. 876-886. ISSN: 1520-5045
3. MARRERO J., R. GANI. Group-contribution based estimation of pure component properties. *Fluid Phase Equilibria*. Elsevier Science B.V, 2001, p.183–208.

4. CONSTANTINOU L., R. GANI. "New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds". *AIChE Journal*. 1994, **40**(10), p. 1697-1710. ISSN:1547-5905
5. DIAZ-TOVAR, C. *Computer-Aided Modeling of Lipid Processing Technology*. Process-Product Engineering Center Department of Chemical Engineering and Biochemical Engineering. Technical University of Denmark. 2011.
6. NDIAYE P.M., F.W. TAVARES, I. DALMOLIN. C. DARIVA. D. OLIVERA. Vapor Pressure Data of Soybean Oil, Castor Oil, and Their Fatty Acid Ethyl Ester Derivatives. *J. Chem. Eng. Data* 2005, **50**, p. 330-333. ISSN: 1520-5134
7. GARCÍA RODRÍGUEZ. M. *Estudio y simulación del proceso de producción de biodiesel: aplicación a la predicción de las propiedades físicas*. Universidad de Zaragoza. Tesis doctoral. 2012.
8. USSEGLIO M.C. *Modelado avanzado de desodorización y refinación física de aceites vegetales con columnas de relleno estructurado*. Tesis de Doctorado. Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata. 2017.
9. HINCAPIÉ S.L. Modelamiento del Proceso de Extracción del Aceite de Sacha Inchi (PLUKENETIA VOLUBILIS L.) por Solventes. Trabajo de Grado. Escuela de Química. Universidad Tecnológica de Pereira. 2016
10. SAHASRABUDHE S.N., V. RODRIGUEZ, M. O'Meara, B. E. Farkas. "Density, viscosity and surface tension of five vegetable oils at elevated temperatures Measurement and modeling". *International Journal of Food Properties*, 2017. **20** (S2). 1965-1981. ISSN: 1532-2386
11. DE ALMEIDA PRADO, E.R. *Modelagem e simulação do sistema de evaporadores de miscela de uma destilaria de oleo de soya*. Maringá – PR – Brasil. *Maio de 2013*.
12. BROCK, J.; NOGUEIRA, M. R.; ZAKRZEWSKI, C.; CORAZZA, F. C.; CORAZZA, M. L.; OLIVEIRA, J. V. "Determinação experimental da viscosidade e condutividade térmica de óleos vegetais". *Ciênc. Tecnol. Aliment.* 2008.**28** (3), p. 564-570. ISSN 0101 2061.

13. DIAMANTE L. M., Tianying Lan. "Absolute Viscosities of Vegetable Oils at Different Temperatures and Shear Rate Range of 64.5 to 4835 s⁻¹". *Journal of Food Processing*. 2014. ID: 234583. <http://dx.doi.org/10.1155/2014/234583>. p. 1-6
14. CLARK, P. E.; WALDELAND, C. R.; CROSS, R. P. "Specific heats of vegetable oils". *J. Ind. Eng. Chem.* **38**, p. 350-353, 1946.
15. ERICKSON, D. R.; Pryde, E. H.; Brekke, O. L. ; Mouts, T. L. & Falb, R. A. *Handbook of Soy Oil Processing and Utilization*, American Soybean Association and American Oil Chemists' Society. 1987. 598 p.

Conflicto de interés

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses.

Contribución de autores

Maribel Rondón Martínez: revisión bibliográfica. Fundamentación teórica. Desarrollo de los procedimientos de cálculo, simulación de los compuestos hipotéticos (triglicéridos, α -Tocoferol y aceite de soya) y evaluación de sus propiedades. Búsqueda de datos experimentales de propiedades y comparación con resultados de la simulación. Análisis de resultados y redacción del informe.

Margarita Penedo Medina: diseño de la investigación, gestión de la bibliografía, evaluación de métodos aplicados. Apoyo en la simulación de los compuestos hipotéticos y elaboración de datos de presión de vapor. Análisis de los resultados y revisión del artículo.