

# Simulación mediante DWSim de la producción de biodiesel y gasificación de biomasa de *Jatropha curcas*

Lainet Escobar Barroso<sup>a</sup>, Indira Tobío-Pérez<sup>b</sup>, Arael Alfonso Cardero<sup>a</sup>,  
Ramón Piloto-Rodríguez<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup>Facultad de Ingeniería Química. Universidad Tecnológica de La Habana.  
Calle 114, No. 11901 e/119 y 127, Marianao 15. La Habana, Cuba.

<sup>b</sup>Centro de Estudio de Tecnologías Energéticas Renovables. Universidad Tecnológica de La Habana.  
Calle 114, No. 11901 e/119 y 127, Marianao 15. La Habana, Cuba.

*DWSim simulation of biodiesel production and gasification from Jatropha curcas biomass*

*Simulació mitjançant DWSim de la producció de biodièsel i gasificació de biomassa de Jatropha curcas*

RECEIVED: 13 MARCH 2022; ACCEPTED: 15 DECEMBER 2022 ; DOI: <https://doi.org/10.55815/413410>

## SUMMARY

Process simulation plays an important role in the development of new technologies and enables assistance in the design, operation and optimization of plants. In the present investigation, the simulation in DWSim of the transesterification processes of *Jatropha curcas* oil and the shell gasification. In the simulation of the biodiesel production process, five stages were used: methoxide preparation, transesterification, alcohol recovery, glycerol separation, washing and biodiesel purification. The simulation of gasification was carried out using a stoichiometric model taking into account the fundamental reactions present in the pyrolysis, combustion and reduction stages that occur in a downstream gasifier. The products obtained from the transesterification process brought high yields: 11% glycerol and 98% biodiesel. The properties of the biodiesel obtained were compared with the ASTM D6751 standard. The composition of the synthesis gas obtained in the gasification process corresponds to those reported in literature. A gas volumetric flow of 92.38 m<sup>3</sup>/h was obtained with a lower heating value of 5.67 MJ/Nm<sup>3</sup>, properties that established a 72% efficiency of the process. Due to the limitations found during the simulation, a validation was carried out in Aspen Plus showing similar results.

**Keywords:** DWSim, gasification, *Jatropha curcas*, simulation, transesterification



## RESUMEN

La simulación de procesos desempeña un papel importante para el desarrollo de nuevas tecnologías y permite la asistencia en el diseño, operación y optimización de plantas. En la presente investigación se simuló mediante DWSim los procesos de transesterificación del aceite de *Jatropha curcas* y la gasificación de la corteza de su fruto. En la simulación del proceso de producción de biodiesel se emplearon cinco etapas: preparación del metóxido, transesterificación, recuperación del alcohol, separación del glicerol, lavado y purificación del biodiesel. La simulación del proceso de gasificación se realizó mediante un modelo estequiométrico teniendo en cuenta las reacciones fundamentales presentes en las etapas de pirólisis, combustión y reducción que ocurren en un gasificador en corriente descendente. Los productos obtenidos de la transesterificación mostraron altos rendimientos: 11% de glicerol y 98% de biodiesel. La composición del gas de síntesis de la gasificación se correspondió con las reportadas en la literatura. Se obtuvo un flujo volumétrico de gas de 92,38 m<sup>3</sup>/h con un poder calorífico inferior de 5,67 MJ/Nm<sup>3</sup>, con un 72% de eficiencia del proceso. Debido a las limitaciones encontradas en la simulación del proceso de gasificación, se realizó una validación en Aspen Plus que mostró igualdad de resultados entre ambos simuladores.

**Palabras clave:** DWSim, gasificación, *Jatropha curcas*, simulación, transesterificación

\*Corresponding author: [rpiloto@tesla.cujae.edu.cu](mailto:rpiloto@tesla.cujae.edu.cu)

## RESUM

La simulació de processos exerceix un paper important per al desenvolupament de noves tecnologies i permet l'assistència en el disseny, operació i optimització de plantes. En aquesta investigació es van simular mitjançant DWSim els processos de transesterificació de l'oli de *Jatropha curcas* i la gasificació de l'escorça del seu fruit. En la simulació del procés de producció de biodièsel es van fer servir cinc etapes: preparació del metàxid, transesterificació, recuperació de l'alcohol, separació del glicerol, rentat i purificació del biodièsel. La simulació del procés de gasificació es va realitzar mitjançant un model estequiomètric tenint en compte les reaccions fonamentals presents a les etapes de piròlisi, combustió i reducció que ocorren en un gasificador en corrent descendent. Els productes obtinguts de la transesterificació van mostrar alts rendiments: 11% de glicerol i 98% de biodièsel. La composició del gas de síntesi de la gasificació es va correspondre amb les reportades a la literatura. S'obtingué un flux volumètric de gas de 92,38 m<sup>3</sup>/h amb un poder calòric inferior de 5,67 MJ/Nm<sup>3</sup>, amb un 72% d'eficiència del procés. A causa de les limitacions trobades a la simulació del procés de gasificació, es va realitzar una validació a Aspen Plus que va mostrar igualtat de resultats entre ambdós simuladors.

**Paraules clau:** DWSim, gasificació, *Jatropha curcas*, simulació, transesterificació

## 1. INTRODUCCIÓ

El empleo de los combustibles fósiles ha marcado el desarrollo del mundo. Sin embargo, su posible agotamiento a largo plazo y su impacto en el medio ambiente han impulsado la búsqueda de combustibles alternativos y fuentes renovables de energía con menor impacto ambiental. En este contexto, el empleo de la biomasa como fuente de energía aporta una serie de ventajas como la utilidad de suelos anteriormente no productivos, la creación de empleo o mejoras en la balanza de pagos<sup>1</sup>.

<sup>2</sup>La biomasa es una de las fuentes renovables de energía que tiene mayor potencial de crecimiento. A nivel mundial aporta el 10% del total de producción de energías primarias y según el Panel Intergubernamental sobre Cambio Climático (IPCC) en el 2050 llegará a alcanzar cuotas de entre un 26% a un 54%<sup>3</sup>. Uno de los mayores usos de la biomasa es la producción de biodiesel, una alternativa energética ya implementada en el mundo, que es menos contaminante que el combustible diesel, biodegradable y renovable<sup>4-6</sup>.

Tradicionalmente el biodiesel es producido a partir de aceite de soya, colza y palma, aunque debido a consideraciones sociales y económicas se ha dirigido la atención a materias primas que no compiten directamente con la producción de alimentos, consideradas de segunda generación; tal es el caso del aceite de *Jatropha curcas*<sup>7-13</sup>. Por otra parte, la conversión termoquímica de biomasa ha adquirido un mayor interés comercial frente a la conversión bioquímica, debido a su flexibilidad con

diferentes calidades y más variedades de materia prima, su productividad relativamente más alta debido a la naturaleza completamente química de la reacción, su independencia de las condiciones del medio y operar a temperaturas superiores<sup>14, 15</sup>. La cáscara del fruto de *Jatropha curcas* está reportada por varios autores como fuente de relativamente alto potencial energético para llevar a cabo procesos de conversión termoquímica como gasificación o pirólisis<sup>12, 16-18</sup>. La gasificación posee una eficiencia superior al generar electricidad y una gran capacidad de integración con otros sistemas productores de energía como ciclo de vapor, turbinas y motores a gas<sup>19, 20</sup>. Por tales motivos, aprovechar con fines energéticos la corteza del fruto de *Jatropha curcas*, generada como subproducto de la producción de biodiesel, como materia prima en procesos de conversión termoquímica, constituye una alternativa energética y ambientalmente atractiva.

La simulación es una herramienta eficaz y efectiva para describir el comportamiento de procesos industriales con adecuada precisión, posibilitando su análisis y optimización<sup>21</sup>. Los simuladores profesionales de procesos, como el Aspen Plus, Aspen HYSYS, ProSim Plus y UniSim son muy potentes, pero de alto costo. Existen otros softwares que son libres de costos como: DWSim, COCO, HYDROFLO y OpenModelica. DWSim se ha convertido en un simulador de procesos de gran interés para los investigadores debido a sus grandes ventajas por ser de código abierto y descarga libre, con fácil capacidad para adaptarlo a las necesidades o corregir errores<sup>22</sup>.

El objetivo del presente trabajo es simular mediante DWSim los procesos de producción de biodiesel de *Jatropha curcas*, así como del aprovechamiento de la corteza generada, con fines energéticos mediante gasificación. DWSim es recomendado por varios autores como una herramienta eficaz para simular el proceso de producción de biodiesel<sup>22-24</sup>. Sin embargo, no existen reportes en la literatura sobre el empleo de este simulador para procesos de gasificación de biomasa. Debido a esto, la utilidad de la presente investigación se basa en comprobar la capacidad de este software para emplearlo en la simulación de estos procesos y comprobar que permite realizar las mismas tareas que un simulador comercial.

En el trabajo se muestra la estrategia empleada para la simulación de ambos procesos. Durante la simulación del proceso de gasificación se identifican algunas limitaciones de los módulos existentes en DWSim para realizar los modelos de equilibrio termodinámico que son los más empleados en la literatura. Debido a estas limitaciones se desarrolla un modelo basado en la estequiometría y se realiza su validación mediante el empleo de Aspen Plus manteniendo las condiciones de simulación. La investigación realizada representa una contribución al enfoque de economía circular y de eficiencia energética que debe tener una mini industria de producción de biodiesel a partir de *Jatropha curcas*, siendo muy útil para fines de implementación, demostrando que es factible el uso de la biomasa residual con fines energéticos en la propia industria como portador energético importante para producir biodiesel.

## 2. MATERIALES Y MÉTODOS

### 2.1 Simulación de la producción de biodiesel de *Jatropha curcas*

El DWSim está programado en conformidad con el estándar CAPE-OPEN, un estándar de ingeniería de procesos que promueve la interoperabilidad de las soluciones de simulación, permitiendo combinar interfaces de componentes de modelación de diferentes softwares entre sí. El software presenta seis bases de datos de componentes con más de 1500 componentes<sup>23</sup>. Para simular el proceso de producción de biodiesel se utilizó la versión 6.1 Update 2 y se emplearon cuatro bases de datos (ChemSep, Biodiesel, CoolProp, y Electrolytes).

#### 2.1.1 Definición de los componentes

La materia prima utilizada fue el aceite extraído de la semilla de *Jatropha Curcas*, planta oleaginosa con potencial de producción de biodiesel, con rendimientos relativamente altos de producción a bajos costos<sup>24</sup>. La caracterización físico-química del aceite extraído de semillas cosechadas es basada en la literatura<sup>26</sup>. En el proceso de transesterificación se consideró el aceite de *Jatropha curcas* compuesto por sus tres ácidos grasos mayoritarios (ácido linoleico, ácido oleico y ácido palmítico). El alcohol empleado fue el metanol con una relación molar de 6:1 y el catalizador hidróxido de sodio al 1% en peso de aceite.

#### 2.1.2 Paquete de propiedades

El paquete termodinámico influye directamente en los resultados del simulador, debido a que cada modelo fue creado con base en ecuaciones matemáticas y resultados empíricos de procesos. En este caso se escogió como

modelo termodinámico el NRTL (*Non Random Two Liquids*) basado en los coeficientes de actividad para la fase líquida e idóneo para compuestos altamente polares como el metanol y el glicerol. Este paquete de propiedades es empleado por varios autores que lo reportan con buenos resultados para la simulación de producción de biodiesel<sup>25-27</sup>.

#### 2.1.3 Descripción del proceso

Para la simulación del proceso de producción de biodiesel mostrado en la Figura 1 se emplearon cinco etapas: preparación del metóxido, transesterificación, recuperación del alcohol, separación del glicerol, lavado y purificación del biodiesel (ver Tabla 1).

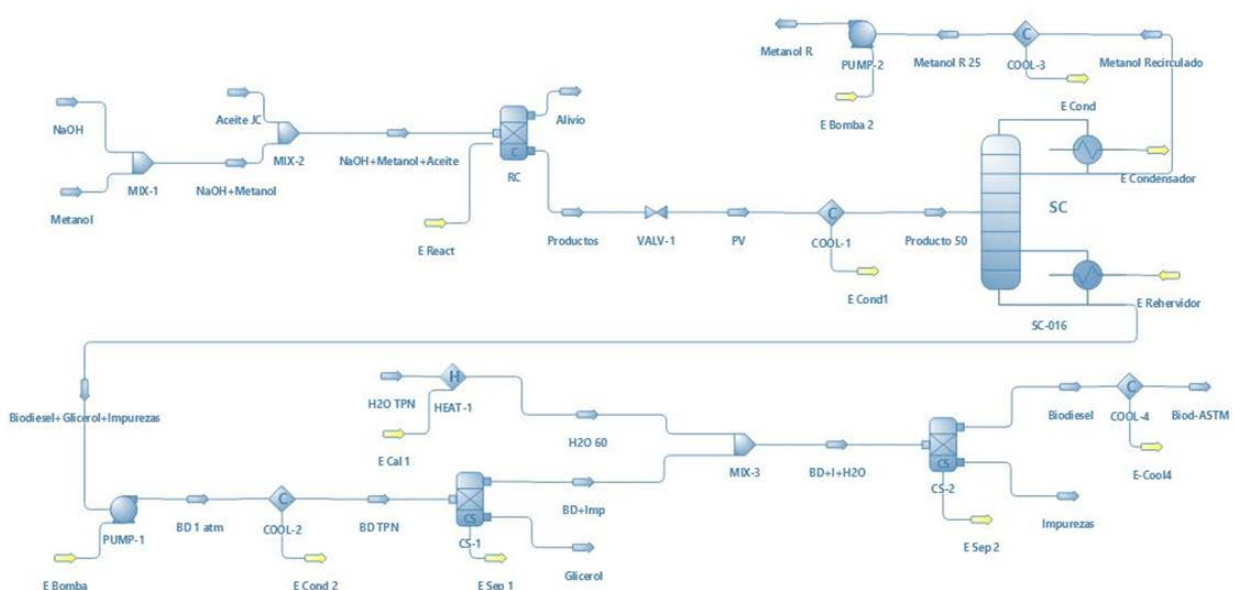
#### 2.1.4 Consideraciones para la simulación

En la simulación se realizaron las siguientes consideraciones:

- El sistema se encuentra en estado estacionario.
- Se asume que el reactor está aislado térmicamente.
- El aceite de *Jatropha curcas* tiene un bajo contenido de ácidos grasos libres (menor de un 2%) y se compone solamente de ácido linoleico, ácido oleico, ácido palmítico (Poli). En este caso se indica el empleo de un aceite con contenido de ácidos grasos libres menor de 2% debido a que es un parámetro crítico para evitar la saponificación, y así se controla en la industria en cuestión.

- La reacción de transesterificación ocurre con un 98% de conversión<sup>28-31</sup>.

- Se asume que la separación de los componentes en los dos módulos separadores se define como ideal con el propósito de obtener el mayor rendimiento de biodiesel, y con fines de simulación de procesos es una práctica común. Desde el punto de vista práctico, debe esperarse un rendimiento ligeramente menor del producto en cuestión.



**Figura 1.** Diagrama de flujo de la simulación del proceso de producción de biodiesel en DWSim

### 2.1.5 Estimación de propiedades del biodiesel obtenido en la simulación

De acuerdo a las correlaciones presentes en la literatura, se calcularon algunas de las propiedades del biodiesel obtenido en la simulación, con el fin de verificar que éstas se encontraran dentro de los parámetros que las regulan y acorde con el biodiesel obtenido en los estudios experimentales de biodiesel de *Jatropha curcas* desarrollados por diferentes autores. El poder calórico superior (PCS) se calculó mediante la Ecuación 1<sup>29</sup>. El número de cetano (CN) fue determinado mediante la Ecuación 2<sup>30</sup>.

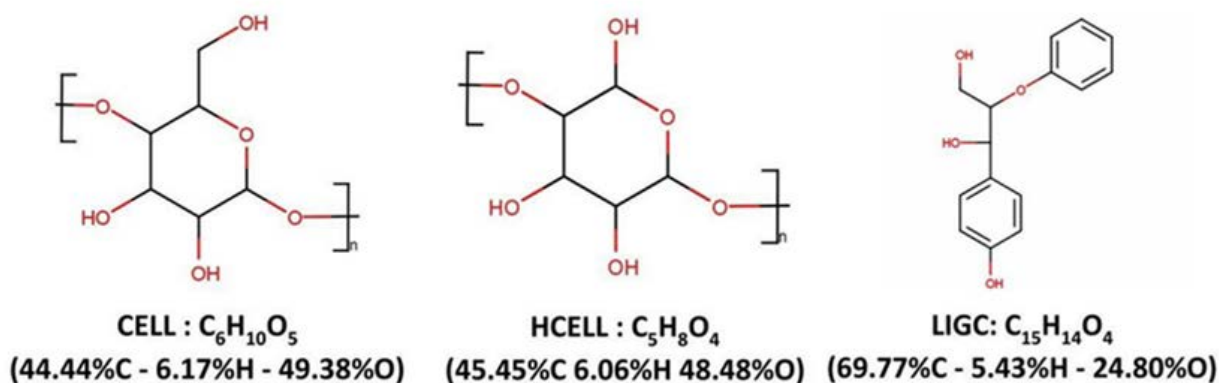
$$PCS = (0,4625 \cdot v) + 39,450 \quad eq (1)$$

$$CN = 0,858 \cdot P + 0,742 \cdot S + 0,561 \cdot O + 0,427 \cdot L + 0,322 \cdot LL \quad eq (2)$$

## 2.2 Simulación de la gasificación de la corteza de *Jatropha curcas*

### 2.2.1 Definición de los componentes

En numerosos estudios de conversión termoquímica de biomasa<sup>31-35</sup>, es usual representar los polímeros de la biomasa por sus monómeros fundamentales; la celulosa (CEL) se asume como el monómero de glucosa (C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>5</sub>)<sub>n</sub>, la hemicelulosa (HEM) como el monómero xilano (C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>O<sub>4</sub>)<sub>n</sub> y la lignina (LIG) por su estructura irregular puede ser caracterizada con tres componentes de referencia: LIG-C, LIG-H, and LIG-O (rica en C, H, y O, respectivamente)<sup>36</sup>. Debido a que la *Jatropha curcas* es considerada una planta de madera blanda y la lignina de este tipo de árboles es más rica en carbono, se consideró como representante de la lignina solo el monómero LIG-C. En varios estudios<sup>34, 37</sup> aparece reflejada la composición mayoritaria de este monómero en diferentes biomásas y según la caracterización de la lignina del fruto y semilla de *Jatropha curcas* por Yamamura<sup>38</sup> y Tobimatsu<sup>39</sup>, está constituida fundamentalmente por unidades de guacil, componentes fundamentales de la lignina rica en carbono. En la Figura 2 se muestran las estructuras orgánicas y composición elemental correspondientes a cada monómero empleado en la simulación para representar la corteza del fruto de *Jatropha curcas*.



**Figura 2.** Representación de los monómeros de la biomasa lignocelulósica<sup>36</sup>

**Tabla 1.** Descripción del proceso mediante sus etapas, módulos y condiciones de temperatura y presión

Etapa	Módulos	Temperatura y Presión	
Preparación del metóxido	Mezclador 1 y 2	298 K	
		101,3 kPa	
Transesterificación	Reactor de conversión	363 K	
		101,3 kPa	
		Válvula	71,3 kPa
		Condensador 1	323,15 K
Recuperación del metanol	Columna de destilación	323,15 K	
		30 kPa	
		Condensador de la columna	309,7 K
		30 kPa	
		Rehervidor de la columna	502,4 K
		30 kPa	
	Bomba 1	71,3 kPa	
Separación del glicerol	Condensador 2	298 K	
		Separador de componentes 1	298 K
		101,3 kPa	
Lavado y purificación del biodiesel	Calentador 1	333,15 K	
		Separador de componentes 2	339,95 K
		101,3 kPa	
		Condensador 3	313 K

Se utilizó la herramienta *Compound Creator* para crear cada monómero descomponiendo las moléculas en grupos funcionales, aplicando el método de contribución de grupos UNIFAC. Se verificaron las propiedades estimadas auxiliándose de los sitios web chemeo (<http://www.chemeo.com>) y PubChem (<http://www.pubchem.com>) para conocer las masas molares, estructuras moleculares, densidades, entalpías y energías libres de formación de los compuestos en cuestión.

En la composición de la corteza del fruto de *Jatropha curcas* caracterizada por Rastrog<sup>40</sup> y García<sup>41</sup> se encuentran porcentajes semejantes de celulosa, hemicelulosa y lignina siendo este último el mayor de los tres. García<sup>41</sup> muestra una composición más detallada en cuanto a contenido de xilano y glucano. Por otra parte, Pfeil<sup>42</sup> reporta el análisis inmediato donde se presenta el porcentaje de agua de la biomasa a gasificar. A partir de los

datos reportados por estos autores se calculó la composición de la biomasa. El flujo de biomasa empleado fue 35 kg/h y el agente gasificante utilizado en la simulación fue aire seco con una composición de 79% de N<sub>2</sub> y 21% de O<sub>2</sub>. El flujo másico de aire se estimó a partir de la relación de equivalencia (RE). El intervalo de RE que recomiendan algunos autores se encuentra entre 0,2 y 0,4<sup>43, 44</sup>. Los procesos optimizados de gasificación de biomasa suelen operar con RE próximas a 0,3<sup>44</sup>. Para la determinación del flujo de aire se emplearon las Ecuaciones (3-5).

$$Re_{A/C} = 11,5 \cdot C + 34,5 \cdot (H - O/8) + 4,32 \cdot S \quad Eq. (3)$$

$$Rr_{A/C} = RE \cdot Re_{A/C} \quad Eq. (4)$$

$$F_{aire} = Rr_{A/C} \cdot F_{biomasa} \quad Eq. (5)$$

donde  $Re_{A/C}$  es la relación estequiométrica aire/combustible, C, H, O y S corresponde a la composición de carbono, hidrógeno, oxígeno y azufre en la biomasa,  $Rr_{A/C}$  es la relación real aire/combustible,  $F_{biomasa}$  y  $F_{aire}$  el flujo másico de biomasa en la alimentación del gasificador y de aire para la combustión de la biomasa, respectivamente. La composición de C, H, O y S fue tomada del análisis elemental presentado por Tobío<sup>45</sup>, que corresponde con el de la corteza de *Jatropha curcas*, donde obtiene un flujo de aire de 62,15 kg/h.

### 2.2.2 Paquete de propiedades

Generalmente para el cálculo de las propiedades termodinámicas en los procesos de gasificación se emplea el modelo basado en la ecuación de estado de Redlich-Kwong-Soave con modificaciones de Boston-Mathias (RKS-BM). Este modelo es el recomendado para mezclas formadas por hidrocarburos y gases ligeros. En el caso de DWSim este paquete no fue capaz de desarrollar la gasificación con predicciones correctas ya que existen limitaciones del software a la hora de trabajar con

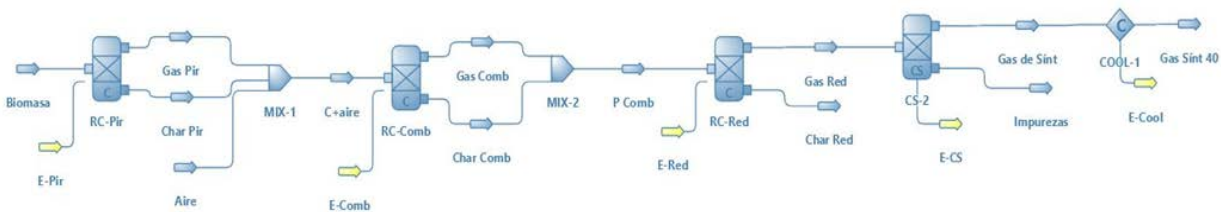
reacciones en fase sólida y con compuestos creados a partir de sus grupos funcionales. Se utilizó el paquete de propiedades NRTL debido a que fue el que mejor resultados brindó en la predicción de la composición de las corrientes obtenidas en las complejas reacciones de las etapas del proceso y en la descripción adecuada del comportamiento de la mayoría de los sistemas binarios presentes. Este paquete de propiedades junto con RKS-BM y Peng Robinson (PR), se suelen utilizar con componentes no polares y reales en sistemas de producción y procesamiento de gas junto con la separación de hidrocarburos<sup>46</sup>. Las ecuaciones de Soave-Redlich-Kwong (SRK), Peng-Robinson (PR) y sus variantes, requieren el uso de coeficientes de interacción binarias para considerar adecuadamente las mezclas multicomponentes. El modelo de solución NRTL es la mejor alternativa para mezclas orgánicas con presencia de agua<sup>47</sup>. Aunque el paquete de propiedades NRTL no es el más empleado, sí ha sido utilizado para la simulación del proceso de gasificación por otros autores<sup>46,48</sup> con Aspen Plus.

### 2.2.3 Elección del gasificador y tipo de modelo

La conversión óptima de energía química de la biomasa en el gas deseado depende de la configuración apropiada según: elección del gasificador, sus dimensiones y las condiciones en que opera. De acuerdo a la caracterización de la corteza de *Jatropha curcas* presentada por Pfeil<sup>42</sup>, se identificó a esta biomasa como fuente potencial para gasificar debido a su bajo contenido de humedad y de cenizas y por su alto contenido calórico. Pfeil<sup>42</sup> y Tobío<sup>45</sup> demostraron que el gasificador de lecho fijo en corriente descendente (downdraft) es el adecuado para esta biomasa según los valores reportados en el análisis inmediato, donde el contenido de humedad es 9% y el contenido de cenizas 4%. Este tipo de reactor opera con biomasa que tengan un tamaño uniforme de partículas y un contenido de humedad y cenizas menor de 25% y 6% respectivamente<sup>49</sup>.

**Tabla 2.** Reacciones, condiciones de operación y porcentajes de conversión empleados en la simulación

Etapas	Nombre	Reacción	Temperatura (K)	Conversión (%)
	Pirólisis Celulosa	$C_3H_8O_5 \rightarrow 2,2C_{(s)} + 1,898H_2 + 0,71CO + 0,525CH_4 + 1,284CO_2 + 0,092C_2H_4 + 0,049C_2H_6 + 0,722H_2O$		100
Pirólisis	Pirólisis Hemicelulosa	$C_6H_{10}O_5 \rightarrow 0,877C_{(s)} + 0,889H_2 + 2,163CO + 1,488CH_4 + 1,067CO_2 + 0,175C_2H_4 + 0,028C_2H_6 + 0,703H_2O$	573	100
	Pirólisis Lignina	$C_{15}H_{14}O_4 \rightarrow 9,675C_{(s)} + 3,685H_2 + 1,95CO + 0,403CO_2 + 0,234CH_4 + 1,136C_2H_2 + 0,234C_2H_4 + 1,24H_2O$		100
Combustión	Combustión Completa	$C + O_2 \rightarrow CO_2$	1673	55
Reducción	Boudouard	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	1323	55
	Agua-Gas	$C + H_2O \rightarrow H_2 + CO$		45



**Figura 3.** Diagrama de flujo de la simulación del proceso de gasificación en DWSim

Para la simulación se escogieron los modelos de equilibrio termodinámico debido a su simplicidad, reducido tiempo de cálculo y que permiten predecir el máximo rendimiento alcanzable por el sistema<sup>50, 51</sup>. Los modelos de equilibrio tienen dos enfoques generales: estequiométrico y no estequiométrico. El enfoque estequiométrico requiere un mecanismo de reacción claramente definido que incorpore todas las reacciones químicas y las especies implicadas; el no estequiométrico se basa en la minimización de la energía libre de Gibbs en el sistema sin especificar las posibles reacciones que tienen lugar<sup>52</sup>. Se realizaron varias configuraciones de modelos no estequiométricos con diferentes módulos, pero no fueron satisfactorios debido a las limitaciones del software para trabajar con fase sólida y con el método de minimización de energía libre de Gibbs en fase no gaseosa. A pesar de las limitaciones encontradas al desarrollar modelos de equilibrio termodinámico en DWSim, se logró desarrollar un modelo estequiométrico de manera satisfactoria.

### 2.2.4 Definición de las reacciones

Las reacciones para modelar la etapa de pirólisis para cada uno de los monómeros de la biomasa fueron basadas en los estudios desarrollados por Baliban<sup>35</sup>, quien desarrolló los cálculos de los coeficientes estequiométricos apoyándose en los rendimientos reportados por Yang<sup>53</sup> y en el modelo cinético de Ranzi<sup>32</sup>. Estas reacciones han sido empleadas por otros autores como Onel<sup>31</sup> para explicar la etapa de pirólisis. Las etapas de combustión y reducción fueron representadas por las reacciones heterogéneas fundamentales para los gasificadores de lecho fijo en corriente descendente<sup>49</sup>. En la Tabla 2 se presentan las condiciones de reacción para las etapas del gasificador<sup>54</sup> modeladas cada una por un módulo de reactor de conversión (RC) en DWSim. El flowsheet implementado en DWSim se muestra en la Figura 3.

Los porcentajes de conversión de los reactivos fueron asignados considerando la descomposición total de la biomasa en la pirólisis. En la etapa de combustión se estableció la mayor conversión para que ocurra la reacción completa y de la misma manera en la etapa de reducción para que entre las dos reacciones simultáneas se alcance un 100% de conversión final del carbono. Las conversiones asignadas están acordes a las asunciones presentadas en las diferentes simulaciones reportadas en la literatura donde se considera

una conversión completa del carbono para garantizar el mayor rendimiento.

### 2.2.5 Consideraciones para la simulación

Para la realización de la simulación se realizaron las siguientes consideraciones:

- El sistema es cero dimensional y se encuentra en estado estacionario.

- El gasificador está aislado del exterior; por tanto, se desprecian las pérdidas por transferencia de calor.

- Los principales constituyentes de la biomasa son la celulosa, la hemicelulosa y la lignina, que se representan por los monómeros  $C_6H_{10}O_5$ ,  $C_5H_8O_4$ ,  $C_{15}H_{14}O_4$  respectivamente.

- El carbón vegetal se modela explícitamente como carbono sólido y se considera que se convierte un 100% con el objetivo de alcanzar el mayor rendimiento en el gas de síntesis.

- La producción de alquitrán no se tiene en cuenta, porque se considera que todo el alquitrán formado se reforma mediante  $O_2$  o  $H_2O$  dentro del gasificador según las hipótesis del modelo estequiométrico de Baliban<sup>35</sup>.

- Todos los productos de la reacción de pirólisis consistirán en los siguientes compuestos:  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_2H_2$ ,  $C_2H_4$ ,  $C_2H_6$ , y carbón vegetal.

### 2.2.6 Influencia de parámetros de operación en el gas de síntesis

El comportamiento de la composición del gas de síntesis y su calidad están determinados por parámetros como la razón de equivalencia (RE). Se realizó un análisis de sensibilidad para estudiar la composición del gas producto para una variación de RE entre 0,2-0,4. Se determinó la eficiencia del gas frío ( $\eta_g$ ) mediante la Ecuación 6, donde PCI es el poder calorífico inferior en condiciones normales ( $MJ/Nm^3$ ) y  $V_{gas}$  es el flujo volumétrico del gas de síntesis en condiciones normales ( $Nm^3/h$ ). El poder calorífico del gas se determinó a partir de la Ecuación 7, donde x es la composición molar de cada compuesto en el gas<sup>55</sup>.

$$\eta_g = \frac{V_{gas} \cdot PCI_{gas}}{F_{biomasa} \cdot PCI_{biomasa}} \quad Eq. (6)$$

$$PCI_{gas} = x(CO) \cdot PCI(CO) + x(H_2) \cdot PCI(H_2) + x(CH_4) \cdot PCI(CH_4) \quad Eq. (7)$$

### 2.2.7 Validación del modelo de gasificación en Aspen Plus

En la literatura se ha demostrado la eficacia de DWSim para simular numerosos procesos químicos en comparación con softwares profesionales, como los procesos de producción de biodiesel; sin embargo, no hay reportes de simulaciones de gasificación de biomasa realizados en DWSim. Debido a la no existencia de literatura de referencia, a la creación de componentes y reacciones complejas y al empleo de un paquete de propiedades que no es el más utilizado para simular un proceso de gasificación, se realizaron con fines de validación dos simulaciones en Aspen Plus basadas en las mismas condiciones de operación. La diferencia entre las simulaciones fue el paquete de propiedades; en la primera se utilizó NRTL al igual que en DWSim y en la segunda se empleó RKS-BM, que es el más recomendado en la literatura. Para simular se mantuvo el mismo diagrama de flujo con tres reactores de conversión e iguales reacciones, condiciones de operación y porcentajes de conversión que aparecen en la Tabla 2.

## 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

### 3.1. Simulación del proceso de producción de biodiesel de *Jatropha curcas*

#### 3.1.1. Características del biodiesel obtenido

A partir de las características del aceite de *Jatropha curcas* y las condiciones de operación definidas, la simulación de la planta de producción de biodiesel permitió la estimación de propiedades y la composición de los tres productos fundamentales obtenidos: metanol, glicerol y biodiesel, que se muestran en la Tabla 3.

El flujo másico de metanol obtenido indica que se recuperó el 46% de este componente, el cual se puede recircular al proceso y disminuir los costos de producción. El glicerol se generó en cantidades significativas de 11% en peso del aceite, de ahí su necesidad de recuperarlo. El rendimiento del proceso fue de un 98% (kg de biodiesel/kg de aceite) que se corresponde con lo reportado<sup>56</sup> según las condiciones de operación empleadas. La densidad y el peso molecular obtenidos son similares a los datos reportados por Paul<sup>57</sup> de 862 kg/m<sup>3</sup> y 282 respectivamente. En la Tabla 4 se puede apreciar que en los productos finales glicerol y biodiesel no existen impurezas, no ocurriendo así en la práctica. Esto es debido a la precisión del módulo "Separador de Componentes" que considera una separación total. Las fracciones másicas similares de los metil ésteres en el biodiesel obtenido es provocada por la igualdad en la composición molar de los tres ácidos grasos en el componente POLi definido así en la biblioteca de componentes Biodiesel del DWSim. En la simulación realizada por De La Rosa<sup>58</sup> reporta una composición en fracción másica de 0,1546 de metil palmitato, 0,4099 de metil oleato, 0,3589 de metil linoleato y 0,0639 de metil estearato a partir de

la composición de ácidos grasos de *Jatropha curcas* reportada por Castillo<sup>59</sup>. En el caso de las tablas 3 y 4, las magnitudes de los parámetros obtenidos en la simulación son acorde a lo esperado e indicado en trabajos experimentales y normas de producción de biodiesel<sup>60</sup>. Como comprobación de los resultados obtenidos con el simulador, en la Tabla 5 se evaluaron algunas de las principales propiedades fisicoquímicas del biodiesel de *Jatropha curcas* de acuerdo con la norma ASTM D6751.

**Tabla 3.** Propiedades de las corrientes obtenidas a partir de la simulación del biodiesel

Propiedades	Unidades	Metanol	Glicerol	Biodiesel
Temperatura	K	298	298	313
Presión	Pa	101 325	101 325	101 325
Flujo másico	kg/h	18,84	19,38	181,2
Densidad	kg/m <sup>3</sup>	788,8	1047,6	868,38
Peso molecular	kg/kmol	32,08	92,11	287,14
Viscosidad cinemática	mm <sup>2</sup> /s	0,69	1,82	0,896

**Tabla 4.** Composición de las corrientes obtenidas a partir de la simulación del biodiesel

Fracción másica (mezcla)	Metanol R	Glicerol	Biodiesel
Metanol	0,9988	0	0
Glicerol	0	1	0
Metil oleato	1,66·10 <sup>-4</sup>	0	0,3442
Metil palmitato	8,43·10 <sup>-4</sup>	0	0,3139
Metil linoleato	1,69·10 <sup>-4</sup>	0	0,3419

Los valores expuestos en la Tabla 5 demuestran que el biodiesel obtenido mediante la simulación posee una composición ideal de acuerdo a los estándares y similar respecto a la reportada en la literatura. Esto se debe a la separación total de las impurezas en los separadores de componentes que a su vez trae como consecuencia la desviación de la viscosidad cinemática y la densidad. Esta desviación de la viscosidad cinemática por debajo del límite inferior reportado puede atribuirse a las bajas viscosidades (menores de 1,3 mm<sup>2</sup>/s) de los metil ésteres y los ácidos grasos en las bibliotecas de componentes del DWSim.

Los valores obtenidos del número de cetano (60,84) y el poder calorífico del biocombustible (39,87 MJ/kg) fueron cercanos a los presentadas por otros autores para el biodiesel de *Jatropha curcas*. El número de cetano se encuentra en los intervalos reportados por Kho<sup>28</sup> y un poco más alejado de los reportados por Singh<sup>61</sup> debido a que el modelo, para calcular esta propiedad, se basa en la composición química de los ácidos grasos en el aceite, de los cuales fueron considerados solamente tres de estos y en iguales proporciones.

**Tabla 5.** Comparación del biodiesel obtenido en la simulación con la norma ASTM D6751

Propiedades	Unidades	Estándares	Biodiesel obtenido	Biodiesel de <i>Jatropha</i> <sup>28, 57, 61-65</sup>
Viscosidad cinemática a 40° C	mm <sup>2</sup> /s	1,9 - 6	0,896	1,5 - 5,2
Densidad a 15°C	kg/m <sup>3</sup>	860 - 900	906,9	872 - 882
Peso molecular	kg/kmol	alrededor de 292	287,14	282
Contenido de metil ésteres	% peso	> 96,5	100	98,52
Contenido de metanol	% peso	< 0,2	0	0 - 0,097
Contenido de glicerol	% peso	< 0,25	0	0 - 0,08
Contenido de agua	% peso	< 0,50	0	0 - 0,078
Número de cetano	-	> 47	60,84	51 - 63
Poder calórico	MJ/kg	-	39,87	38 - 42

### 3.2. Simulación del proceso de gasificación de corteza de *Jatropha curcas*

#### 3.2.1 Características del gas de síntesis

En la Tabla 6 se presenta la composición del gas de síntesis obtenido a partir de la simulación del proceso de gasificación en DWSim. También se muestran los valores reportados por cuatro autores con estudios realizados en un gasificador downdraft. Puig<sup>66</sup> reporta los intervalos típicos para este tipo de gasificador cuando el aire es el agente gasificante, Vyas<sup>67</sup> reporta los valores experimentales de una gasificación de la cáscara de la semilla de *Jatropha curcas* y Tobío<sup>45</sup> presenta la composición obtenida en la simulación de la gasificación de la corteza de *Jatropha curcas*. La comparación muestra que la composición del gas obtenido se encuentra dentro de los intervalos reportados por Puig, con los valores del CO por encima y del N<sub>2</sub> por debajo, ligeramente. Sin embargo, las composiciones molares de estos dos componentes se acercan a los reportados por los otros autores analizados. Las diferencias existentes entre las composiciones reportadas pueden estar causadas por las condiciones de operación, el tipo de biomasa y agente gasificante empleados en cada investigación. Otras características del gas de síntesis obtenido se presentan en la Tabla 7. La eficiencia de la gasificación y el poder calórico son los calculados a partir de las ecuaciones (6) y (7) respectivamente.

**Tabla 6.** Comparación de la composición del gas de síntesis obtenido con reportes

Componentes	Composición molar del gas de síntesis (%)			
	Obtenido	Puig <sup>66</sup>	Vyas <sup>67</sup>	Tobío <sup>45</sup>
H <sub>2</sub>	15,63	12-20	10,62	15,18
CO	23,11	17-22	19,26	23,43
CH <sub>4</sub>	2,98	2-3	1,71	-
CO <sub>2</sub>	10,94	9-15	10,33	6,84
N <sub>2</sub>	47,33	50-54	48,63	46,30

**Tabla 7.** Características del gas de síntesis obtenido y eficiencia de la gasificación

T (K)	V <sub>gas</sub> (m <sup>3</sup> /h)	ρ (kg/m <sup>3</sup> )	PCI (MJ/Nm <sup>3</sup> )	η <sub>g</sub> (%)
313	92,38	0,986	5,67	72

El poder calórico inferior del gas se corresponde con los reportados por Puig<sup>66</sup> (5-5,9 MJ/m<sup>3</sup>) y Cuoto<sup>67</sup> (5,7 MJ/m<sup>3</sup>) para un gasificador en corriente descendente con aire como agente gasificante y superior a los reportados por Singh<sup>69</sup> (4,6 MJ/m<sup>3</sup>) y Prasad<sup>70</sup> (2,55 MJ/m<sup>3</sup>) para el gas producto de la gasificación de la cáscara de la semilla de *Jatropha curcas*. El flujo volumétrico obtenido es inferior a los reportados por Pfeil<sup>42</sup> (101 m<sup>3</sup>/h) y Tobío<sup>45</sup> (112 m<sup>3</sup>/h) que realizaron simulaciones con las mismas condiciones de operación y biomasa que la presente investigación. Sin embargo, si en el gas de síntesis se tomaran en cuenta las demás especies gaseosas consideradas en la pirólisis que fueron separadas como impurezas (H<sub>2</sub>O, C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), el flujo volumétrico sería de 100 m<sup>3</sup>/h y el poder calórico inferior de 6,87 MJ/Nm<sup>3</sup>. La eficiencia de la gasificación es inferior a la reportada por estos dos autores (mayores de 80%) en sus simulaciones debido a las diferencias en el flujo volumétrico del gas final y superior a la alcanzada en los estudios de Singh<sup>69</sup> y Vyas<sup>67</sup> (inferiores al 70%) para la gasificación de la cáscara de la semilla de *Jatropha curcas*.

#### 3.2.2 Influencia de la razón de equivalencia en la composición del gas de síntesis

Se realizó un análisis de sensibilidad modificando el flujo de agente gasificante calculado a partir de la variación de la razón de equivalencia (RE) para ver su efecto sobre la composición del gas obtenido. Se evidenció que las composiciones molares de N<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> aumentan con el incremento de RE, debido a que al alimentarse mayor cantidad de aire aumenta el contenido de N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> y a su vez una concentración más alta de O<sub>2</sub> favorece la conversión del carbono en la reacción de combustión completa obteniéndose una mayor concentración de CO<sub>2</sub>. El aumento de la conversión del carbono en la etapa de combustión con el incremento de RE, explica la disminución de las composiciones molares de CO y H<sub>2</sub>. Estos gases son generados en las reacciones Boudouard y Agua-Gas; al haber menor contenido de carbono en la etapa de reducción se produce menor cantidad de los mismos.

En la composición molar de CH<sub>4</sub> ocurre una ligera disminución con el incremento de RE, causada por el aumento de la cantidad de gas de síntesis producida al entrar mayor flujo de agente gasificante. Al mantenerse constante su concentración como producto de la etapa de pirólisis y aumentar el flujo de gas obtenido, disminuye su fracción molar en el gas producto.

El aumento del flujo volumétrico con el incremento de RE provoca una disminución en la eficiencia de la gasificación siendo la mínima en 0,3. Este comportamiento en la eficiencia se debe a la disminución del PCI con el aumento del RE. La disminución del poder calórico inferior es causada por la reducción de la com-

posición de H<sub>2</sub> y CO con el incremento de RE, debido a que estos gases son los que aportan energía química al gas de síntesis. El aumento de la composición de N<sub>2</sub> y CO<sub>2</sub> y la disminución de CO y H<sub>2</sub> indican que a RE >1 el gas producto de la gasificación estará compuesto únicamente por especies oxidativas y con un bajo poder calórico.

En la literatura se evidencia el mismo comportamiento de los parámetros analizados indicando que la mayor eficiencia se obtiene cuando el flujo de agente gasificante es el menor con una RE de 0,2. En estas condiciones, el gas de síntesis presenta las mayores concentraciones de H<sub>2</sub> y CO y el máximo poder calórico. Sin embargo, este escenario no es el óptimo porque el flujo volumétrico de gas es mínimo y el flujo de aire entrante no es suficiente para liberar la energía necesaria durante el proceso de combustión.

### 3.3.3 Limitaciones encontradas en la simulación en DWSim

Durante la simulación del proceso de gasificación en DWSim se encontraron diferentes limitaciones:

-El simulador no permite la creación de la biomasa como componente no convencional mediante su análisis elemental. Es necesario crear los componentes fundamentales de la biomasa lignocelulósica (celulosa, hemicelulosa y lignina).

-La herramienta *Compound Creator* solo estima las propiedades mediante la inserción de los grupos UNIFAC de la molécula, no permite crear el compuesto mediante otros métodos.

-El simulador no admite directamente reacciones con fase sólida; los componentes sólidos del proceso se deben declarar como líquidos o sólidos forzados para que este emplee el algoritmo de cálculo sólido-líquido-vapor eutéctico que considera la fase sólida como ideal.

-En la definición de las reacciones, el carbono sólido, que es la sustancia limitante, se debe declarar como mezcla para obtener las mayores conversiones.

-Las complejas reacciones del proceso solo se logran modelar mediante el paquete de propiedades NRTL y el algoritmo flash líquido-vapor, ya que otros paquetes de propiedades como PR, UNIFAC y RKS muestran errores.

-No es posible desarrollar modelos de equilibrio termodinámico mediante reactores de Gibbs o de equilibrio porque estos funcionan correctamente solo con reacciones en fase gaseosa.

-El método de minimización de energía libre de Gibbs muestra errores en el proceso de convergencia de Newton, que al parecer suele presentar inestabilidades cuando hay valores muy pequeños involucrados, especialmente en el caso donde se usan derivadas numéricas y cuando no se proporcionan buenas estimaciones iniciales para las cantidades de los compuestos en las fases esperadas.

### 3.3.4 Resultados de la validación

Debido a las limitaciones encontradas durante la simulación del proceso de gasificación en DWSim, se realizó la validación en el simulador Aspen Plus. Las composiciones obtenidas en ambos simuladores son aproximadamente iguales, lo mismo ocurre con las

demás propiedades para el gas de síntesis. Se obtuvieron resultados similares al emplear dos paquetes de propiedades diferentes en Aspen Plus; esto era de esperarse debido a que la simulación depende fundamentalmente de la estequiometría de las reacciones. La validación demostró la capacidad de DWSim para desarrollar modelos estequiométricos y para predecir las composiciones y propiedades de las corrientes cuando se simula con equilibrio líquido-vapor.

## 4. CONCLUSIONES

El simulador de procesos DWSim permitió la simulación de los procesos de transesterificación del aceite y gasificación de la corteza del fruto de *Jatropha curcas* para su empleo con fines energéticos. El biodiesel obtenido mediante el esquema propuesto posee propiedades similares a las reportadas en la literatura y la mayoría de ellas acordes con la Norma ASTM. La viscosidad fue la más alejada de los estándares debido a los bajos valores de esta propiedad en los metil ésteres pertenecientes a la biblioteca del software. Se obtuvieron altos rendimientos de los productos finales del proceso: 11% de glicerol y 98% de biodiesel; además se recuperó el 46% de metanol empleado para su recirculación. La composición del gas de síntesis obtenido a partir de la simulación es semejante a la reportada en la literatura en un gasificador en corriente descendente y a las reportadas para la biomasa empleada en otras simulaciones con las mismas condiciones de operación. Se obtuvo un flujo volumétrico de gas de 92,38 m<sup>3</sup>/h con un poder calórico inferior de 5,67 MJ/Nm<sup>3</sup>, propiedades que establecieron un 72% de eficiencia del proceso de gasificación. Durante la simulación del proceso de gasificación de biomasa en DWSim se encontraron limitaciones que impidieron el desarrollo de modelos de equilibrio termodinámico que lograran una buena predicción en cuanto a la composición del gas final. Sin embargo, la validación del proceso de gasificación mediante Aspen Plus confirmó la capacidad de DWSim para simular este tipo de procesos mediante un modelo estequiométrico con la utilización del paquete de propiedades NRTL permitiendo estimar las propiedades del gas de síntesis.

## REFERENCIAS

1. Malico, I., Nepomuceno Pereira, R., Gonçalves, A.C., Sousa, A.M.O., *Current status and future perspectives for energy production from solid biomass in the European industry*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2019. 112, 960–977. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.06.022>.
2. IRENA (2020), *Renewable Energy and Jobs – Annual Review 2020*. International Renewable Energy Agency, Abu Dhabi, 44. ISBN: 978-92-9260-266-6.
3. Reid, W.V., Ali, M.K., Field, C.B., *The future of bioenergy*. Global Change Biology, 2020. 26, 274–286. <https://doi.org/10.1111/gcb.14883>.

4. Chintagunta, A.D., Zuccaro, G., Kumar, M., Kumar, S.P.J., Garlapati, V.K., Postemsky, P.D., Kumar, N.S.S., Chandel, A.K., Simal-Gandara, J., *Biodiesel Production From Lignocellulosic Biomass Using Oleaginous Microbes: Prospects for Integrated Biofuel Production*. *Frontiers in Microbiology*, 2021. 12(2080). <https://doi.org/10.3389/fmicb.2021.658284>.
5. Rizwanul Fattah, I.M., Ong, H.C., Mahlia, T.M.I., Mofijur, M., Silitonga, A.S., Rahman, S.M.A., Ahmad, A., *State of the Art of Catalysts for Biodiesel Production*. *Frontiers in Energy Research*, 2020. 8(101). <https://doi.org/10.3389/fenrg.2020.00101>.
6. Piloto-Rodríguez, R., *Un acercamiento al desarrollo del biodiesel en Cuba*. *Revista Cubana de Ingeniería*, 2021. XII(2), e285.
7. Kamel, D.A., Farag, H.A., Amin, N.K., Zatout, A.A., Ali, R.M., *Smart utilization of jatropha (Jatropha curcas Linnaeus) seeds for biodiesel production: Optimization and mechanism*. *Industrial Crops and Products*, 2018. 111, 407–413. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2017.10.0>.
8. Ramón Valencia, J.A., Saavedra Rincón, S., Porras, O.O., Bermúdez, S.C., Palacios Gonzalez, J.R., *Obtención de Biodiésel a partir de aceite y semillas de Jatropha curcas, utilizando catalizadores inmovilizados y transesterificación in situ asistida por ultra sonido*. *Revista ESPACIOS*, 2018. 39(16), 24.
9. Ewunie, G.A., Morken, J., Lekang, O.I., Yigezu, Z.D., *Factors affecting the potential of Jatropha curcas for sustainable biodiesel production: A critical review*. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2020. xxx, 110500. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110500>.
10. Maftuchah, Z., A., Ikhwan, A., Winaya, A., Purnama, A., Sudarmo, H., *The potential of physic nut (Jatropha curcas Linn.) hybrid plant as a source of biodiesel at different planting location for dry land utilization*. *Energy Reports*, 2020. 6, 921-926. <https://doi.org/10.1016/j.egy.2019.12.006>.
11. Suarez, J., Martin, G., *La biomasa como fuente renovable de energía en el medio rural*. 2012: Matanzas, Cuba: Estación Experimental de Pastos y Forrajes Indio Hatuey.
12. Piloto-Rodríguez, R., Tobío, I., Ortiz-Alvarez, M., Díaz, Y., Konradi, S., Pohl, S., *An approach to the use of Jatropha curcas by products as energy source in agroindustry*. *Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects*, 2020. <https://doi.org/10.1080/15567036.2020.1749192>.
13. Tobío-Pérez, I., Díaz-Domínguez, Y., Rodríguez Machín, L., Pohl, S., Lapuerta, M., Piloto-Rodríguez, R., *Biomass-based heterogeneous catalysts for biodiesel production: A comprehensive review*. *International Journal of Energy Research*, 2021. <https://doi.org/10.1002/er.7436>.
14. Verma, M., Godbout, S., Brar, S.K., Solomatnikova, O., Lemay, S.P., Larouche, J.P., *Biofuels Production from Biomass by Thermochemical Conversion Technologies*. *International Journal of Chemical Engineering*, 2012. 2012, 19. <https://doi.org/10.1155/2012/542426>.
15. Chandraratne, M., Gezae, A., *Recent Advances in Thermochemical Conversion of Biomass*. 2021. <https://doi.org/10.5772/intechopen.100060>.
16. Konaka, T., Tadano, S., Takahashi, T., Suharsono, S., *A diverse range of physicochemically-distinct biochars made from a combination of different feedstock tissues and pyrolysis temperatures from a biodiesel plant Jatropha curcas: A comparative study*. *Industrial Crops & Products*, 2021. 159, 113060. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2020.113060>.
17. Alherbawi, M., AlNouss, A., McKay, G., Al-Ansari, T., *Optimum sustainable utilisation of the whole fruit of Jatropha curcas: An energy, water and food nexus approach*. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021. 137, 110605. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.110605>.
18. Chim, M.O., *Evaluación de los rendimientos y caracterización de los productos de pirólisis de los residuos lignocelulósicos de Jatropha Curcas*. Tesis de Maestría. 2013.
19. Saghir, M., Rehan, M., Nizami, A.-S., *Recent Trends in Gasification Based Waste-to-Energy*. 2018, 97-113. <https://doi.org/10.5772/intechopen.74487>.
20. Situmorang, Y.A., Zhao, Z., Yoshida, A., Abudula, A., Guan, G., *Small-scale biomass gasification systems for power generation (<200 kW class): A review*. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2021. 117, 109486. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.109486>.
21. Castro, E., Teixeira, N., Emmi, M., *Simulação do processo de produção de biodiesel de óleo de palma utilizando os softwares ASPEN HYSYS e DWSIM*. 14 Encontro de Profissionais de Química de Amazônia, 2015, 796-803. <https://doi.org/10.13140/RG.2.1.4836.6163>.
22. Tangsriwong, K., Lapchit, P., Kittijungjit, T., Klamrassamee, T., Sukjai, Y., Laoonual, Y., *Modeling of chemical processes using commercial and open-source software: A comparison between Aspen Plus and DWSIM*. *IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science*, 2020. 463, 012057. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/463/1/012057>.
23. Scodelaro, F. *DWSIM: simulador de procesos gratuitos*. 2017. <https://www.ingenieriaquimica.org>.
24. Rodríguez Ramos, P.A., Tobío Pérez, I., Suárez-Hernández, J., Piloto-Rodríguez, R., Pohl, S., *On the environmental and economic issues associated with the Jatropha curcas shell gasification to heat and electricity for biodiesel production*. *Afinidad. Journal of Chemical Engineering Theoretical and Applied Chemistry*, 2022. 79(596). <https://doi.org/10.55815/401271>.
25. Adeniyi, A.G., Ighalo, J.O., Adeoye, A.S., Onifade, D.V., *Modelling and optimisation of biodiesel production from Euphorbia lathyris using ASPEN Hysys*. *SN Applied Sciences*, 2019. 1(1452). <https://doi.org/10.1007/s42452-019-1522-0>.
26. Albuquerque, A.A., Ng, F.T.T., Danielski, L., Stragevitch, L., *Phase equilibrium modeling in biodiesel production by reactive distillation*. *Fuel*, 2020. 271, 117688. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.117688>.

27. Pasha, M.K., Dai, L., Liu, D., Guo, M., Du, W., *An overview to process design, simulation and sustainability evaluation of biodiesel production*. Biotechnol Biofuels, 2021. 14(129), 23. <https://doi.org/10.1186/s13068-021-01977-z>.
28. Kho, Y.M., Ghazi, T.I.M., *A review of biodiesel production from Jatropha curcas L. oil*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2011. 15, 2240–2251. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2011.02.013>.
29. Demirbas, A., *Relationships derived from physical properties of vegetable oil and biodiesel fuels*. Fuel, 2008. 87 1743–1748. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2007.08.007>.
30. Espitia-Cubillos, A.A., Delgado-Tobón, A.E., Camargo-Vargas, S.A., *Estimación teórica del efecto de la temperatura en la densidad, viscosidad, poder calorífico, capacidad calorífica y gravedad API de biocombustibles*. Scientia et Technica Año XXIV, 2019. 24(2), 190-199.
31. Onel, O., Niziolek, A.M., Hasan, M.M.F., Floudas, C.A., *Municipal solid waste to liquid transportation fuels – Part I: Mathematical modeling of a municipal solid waste gasifier*. Computers and Chemical Engineering, 2014. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compchemeng.2014.03.008>.
32. Ranzi, E., Cuoci, A., Faravelli, T., Frassoldati, A., Migliavacca, G., Pierucci, S., Sommariva, S., *Chemical Kinetics of Biomass Pyrolysis*. Energy & Fuels 2008. 22(6), 4292–4300. <https://doi.org/10.1021/ef800551t>.
33. Shemfe, M.B., Gu, S., Ranganathan, P., *Techno-economic performance analysis of biofuel production and miniature electric power generation from biomass fast pyrolysis and bio-oil upgrading*. Fuel, 2015. 143 361–372. <http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2014.11.078>.
34. Anca-Couce, A., Obernberger, I., *Application of a detailed biomass pyrolysis kinetic scheme to hardwood and softwood torrefaction*. 2015, 1-33. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2015.11.062>.
35. Baliban, R.C., Elia, J.A., Floudas, C.A., *Toward Novel Hybrid Biomass, Coal, and Natural Gas Processes for Satisfying Current Transportation Fuel Demands, 1: Process Alternatives, Gasification Modeling, Process Simulation, and Economic Analysis*. Ind. Eng. Chem. Res. , 2010. 49, 7343–7370. <https://doi.org/10.1021/ie100063>.
36. Debiagi, P.E.A., Pecchi, C., Gentile, G., Frassoldati, A., Cuoci, A., Faravelli, T., Ranzi, E. *Extractives Extend the Applicability of Multistep Kinetic Scheme of Biomass Pyrolysis*. 2015.
37. Faravelli, T., Frassoldati, A., Migliavacca, G., Ranzi, E., *Detailed kinetic modeling of the thermal degradation of lignins*. Biomass and bioenergy 2010. 34, 290-301. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2009.10.018>.
38. Yamamura, M., Akashi, K., Yokota, A., Hattori, T., Suzuki, S., Shibata, D., Umezawa, T., *Characterization of Jatropha curcas lignins*. Plant Biotechnology, 2012. 29, 179–183. <https://doi.org/10.5511/plantbiotechnology.12.0515b>.
39. Tobimatsu, Y., Chen, F., Nakashima, J., Escamilla-Treviño, L.L., Jackson, L., Dixon, R.A., Ralph, J., *Coexistence but Independent Biosynthesis of Catechyl and Guaiacyl/Syringyl Lignin Polymers in Seed Coats*. The Plant Cell, 2013. 25, 2587–2600. <http://www.plantcell.org/cgi/doi/10.1105/tpc.113.113142>.
40. Rastrogi, A., Jha, M.K., Sarma, A.K., *A comparative study of kinetics for combustion versus pyrolysis of Mesua ferrea husk, soya husk, and Jatropha curcas husk using thermogravimetry and different methods*. Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects, 2016. 38(10), 1355-1363. <https://doi.org/10.1080/15567036.2014.913094>.
41. García, A., López, Y., Karimi, K., Benítez, A., Lundin, M., Taherzadeh, M., Martín, C., *Chemical and physical characterization and acid hydrolysis of a mixture of Jatropha Curcas shells and husks*. Cellulose Chemistry And Technology, 2015. 49, 737-744
42. Pfeil, M., Tobío-Pérez, I., Denfeld, D., Díaz, Y., Pohl, S., Piloto-Rodríguez, R., *Characterization and assessment of Jatropha curcas and Moringa oleifera husk and their potential use in gasification*. Energ. Ecol. Environ., 2020, 1-13. <https://doi.org/10.1007/s40974-020-00179-x>.
43. Juárez, M., *Análisis de la problemática e investigación de aspectos avanzados de la generación eléctrica con biomasa*. España, Universidad de La Rioja. 2013.
44. Rodríguez, D.A., Zuleta, A., Olivares, A., Torres, C., Francisco, F., *Análisis y diseño de un sistema de gasificación de biomasa*. XVI Congreso Internacional Anual de la SOMIM, México, 2010.
45. Tobío-Pérez, I., Díaz-Domínguez, Y., Pfeil, M., Denfeld, D., Piloto-Rodríguez, R., Pohl, S., *Simulación del proceso de gasificación de biomasa a partir de Jatropha curcas y Dichrostachys cinerea*. Afinidad, 2020.
46. AlNouss, A., McKay, G., Al-Ansari, T., *A comparison of steam and oxygen fed biomass gasification through a techno-economic-environmental study*. Energy Conversion and Management 2020. 208. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.112612>.
47. Pimentel, I., *Selección de modelos termodinámicos*. 2013: Venezuela.
48. Lozano, A.M., Silva, E.E., Escobar, J.C., Rocha, M.H., Restrepo, J.C., Venturini, O.J., Ratner, A., *Refuse Derived Fuel (RDF) production and gasification in a pilot plant integrated with an Otto cycle ICE through Aspen plus™ modelling: Thermodynamic and economic viability*. Waste Management 2017. <http://dx.doi.org/10.1016/j.wasman.2017.08.006>.
49. Bazu, P., *Biomass gasification and pyrolysis: Practical desing and theory*. 2010: Elsevier Inc. 364. ISBN: 978-0-12-374988-8
50. Costaa, M., La Villetta, M., Massarotti, N., *Optimal Tuning of a Thermo-Chemical Equilibrium Model for Downdraft Biomass Gasifiers*. Chemical Engineering Transactions, 2015. 43, 439-444. <https://doi.org/10.3303/CET1543074>.

51. Moretti, L., Arpino, F., Cortellessa, G., Di Fraia 2, S., Di Palma, M., Vanoli, L., *Reliability of Equilibrium Gasification Models for Selected Biomass Types and Compositions: An Overview*. Energies, 2022. 15(61). <https://doi.org/10.3390/en15010061>.
52. Safarian, S., Unnthorsson, R., Richter, C., *A review of biomass gasification modelling*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2019. 110(378-391). <https://doi.org/10.1016/j.rser.2019.05.003>.
53. Yang, H., Yan, R., Chen, H., Lee, D.H., Zheng, C., *Characteristics of hemicellulose, cellulose and lignin pyrolysis*. Fuel 2007. 86, 1781–1788. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2006.12.013>.
54. Basu, P., *Biomass Gasification and Pyrolysis. Practical Design*. Elsevier, 2010.
55. Olayanju, T., Dairo, O., Sobukola, P., Odebiyi, O., Dahunsi, O., *Performance evaluation of downdraft gasifiers under various conditions*. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2020. 445, 012057. <https://doi.org/10.1088/1755-1315/445/1/012057>.
56. Rodríguez Ramos, P.A., Hernández Milán, A., Melo Espinosa, E.A., Zumalacárregui de Cárdenas, L.M., Pérez Ones, O., Pérez Ruiz, L., Piloto-Rodríguez, R., *Caracterización del biodiesel obtenido del aceite de Jatropha curcas L.* 2018, 45-51.
57. Paul, G., Datta, A., Mandal, B.K., *An Experimental and Numerical Investigation of the Performance, Combustion and Emission Characteristics of a Diesel Engine Fueled with Jatropha Biodiesel*. Energy Procedia, 2014. 54, 455-467. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.07.288>.
58. De la Rosa, L.R., Henríquez, E., Sánchez, E., Ojeda, K.A., *Diseño y simulación de una planta para la producción de biodiésel a partir de Jatropha curcas L. en el departamento de Bolívar*. Revista Ion, 2015. 28(1), 73-85.
59. Castillo, A.M., Velásquez, J.A., Cuartas, P.A., *Obtención de biodiesel a partir de aceite de Jatropha curcas L por transesterificación etanólica*. Revista Investigaciones Aplicadas, 2011. 5 (1), 34-41. <http://hdl.handle.net/20.500.11912/7069>.
60. Colectivo de Autores, *Biodiésel: producción y uso*. Editorial Pastos y Forrajes. Matanzas, 2021. ISBN 978-959-7138-48-8.
61. Singh, D., Sharma, D., Soni, S.L., Singh Inda, C., Sharma, S., Kumar Sharma, P., Jhalani, A., *A comprehensive review of physicochemical properties, production process, performance and emissions characteristics of 2nd generation biodiesel feedstock: Jatropha curcas*. Fuel, 2021. 285, 1-19. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119110>.
62. Castillo, A., Labrada, B.L., Penedo, M., Sánchez, A.E., *Simulación del proceso de producción de biodiésel a partir del aceite de Jatropha curcas*. Tecnología Química, 2013. XXXIII, 107-120.
63. Neupane, D., Bhattarai, D., Ahmed, Z., Das, B., Pandey, S., Solomon, J., Qin, R., *Growing Jatropha (Jatropha curcas L.) as a Potential Second-Generation Biodiesel Feedstock*. Inventions, 2021. 6, 60. <https://doi.org/10.3390/inventions6040060>.
64. Vijaya, S., *Experimental analysis of di diesel engine performance fueled with jatropha biodiesel*. International Journal of Engineering Science and Technology (IJEST), 2017. 9(2), 60-65.
65. Che Hamzah, N.H., Khairuddin, N., Siddique, B.M., Hassan, M.A., *Potential of Jatropha curcas L. as Biodiesel Feedstock in Malaysia: A Concise Review*. Processes, 2020. 8(7), 786. <https://www.mdpi.com/2227-9717/8/7/786>.
66. Puig-Arnavat, M., Bruno, J.C., Coronas, A., *Review and analysis of biomass gasification models*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2010. 14, 2841–2851. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2010.07.030>.
67. Vyas, D.K., Singh, R.N., *Feasibility study of Jatropha seed husk as an open core gasifier feedstock*. Renewable Energy, 2007. 32, 512–517. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2006.06.006>.
68. Couto, N., Rouboa, A., Silva, V., Monteiro, E., Bouziane, K., *Influence of the Biomass Gasification Processes on the Final Composition of Syngas*. Energy Procedia, 2013. 36, 596 – 606. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2013.07.068>.
69. Singh, R.N., Vyas, D.K., Srivastava, N.S.L., Narra, M., *SPRERI experience on holistic approach to utilize all parts of Jatropha curcas fruit for energy*. Renewable Energy, 2008. 33, 1868–1873. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2007.10.007>.
70. Prasad, L., *Experimental Study on Gasification of Jatropha Shells in a Downdraft Open Top Gasifier*. Waste Biomass Valor, 2015. 6, 117–122. <https://doi.org/10.1007/s12649-014-9321-8>.