



CIENCIA *ergo-sum*

Universidad Autónoma del Estado de México

ciencia.ergosum@yahoo.com.mx

E-ISSN: 2395-8782

Modelo cinético de la hidrólisis de aceite vegetal de *Jatropha curcas* L para producir ácidos grasos libres

Velázquez Rodríguez, F., Laurenes García, S. y Elizalde Martínez, I. (2026). Modelo cinético de la hidrólisis de aceite vegetal de *Jatropha curcas* L para producir ácidos grasos libres. [*Postprint*]. CIENCIA *ergo-sum*, 33

<https://doi.org/10.30878/ces.v33n0a71>

Sección: Ciencias Exactas y Aplicadas

Universidad Autónoma del Estado de México, México

Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivar 4.0 Internacional.



Esta versión del artículo es una “versión final del autor” que fue aceptada por un proceso de **evaluación por pares ciegos**. Este documento diferirá en formato respecto a la “versión del editor”, la cual se someterá a un proceso de corrección de estilo y de diseño editorial. De ninguna forma se modificará el contenido. Todas las ideas que se presentan son responsabilidad del autor.

Modelo cinético de la hidrólisis de aceite vegetal de *Jatropha curcas* L para producir ácidos grasos libres
Kinetic model of the hydrolysis of vegetable oil from *Jatropha curcas* L to produce free fatty acids

Fernanda Velázquez Rodríguez, Centro Mexicano para la Producción más Limpia, Instituto Politécnico Nacional, México

Correo electrónico: fvelazquezr1401@alumno.ipn.mx

ORCID: <https://orcid.org/0009-0009-1632-0248>

Sara Laurenes García, Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas, Instituto Politécnico Nacional, México

Correo electrónico: laurenes.garcia.sara@gmail.com

ORCID: <https://orcid.org/0009-0008-5588-6714>

Ignacio Elizalde Martínez, Centro Mexicano para la Producción más Limpia, Instituto Politécnico Nacional, México¹

Correo electrónico: ielizaldem@gmail.com

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8755-5812>

Recepción: 27 de agosto de 2025

Aprobación: 7 de enero de 2026

RESUMEN

Se realiza la estimación de los parámetros cinéticos de un modelo de ley de potencias de la hidrólisis de aceite de *Jatropha curcas* L para producir ácidos grasos libres considerando dependencia de primer orden respecto al triglicérido para lo se utilizó un reactor discontinuo que operó entre 30-180 minutos y 220-260 °C. El análisis de los productos de reacción se realizó mediante titulación siguiendo la norma NMX-F-101-SCFI-2012. Como resultados se obtuvieron la energía de activación de 103.846 kJ/mol y el factor de frecuencia de $3.1828 \times 10^{10} \text{ h}^{-1}$ con un coeficiente de determinación de 0.9981. Las predicciones del modelo con datos independientes tuvieron un error menor al 5% lo cual valida el modelo cinético desarrollado.

PALABRAS CLAVE: ácido graso libre, hidrólisis, modelo cinético, ley de potencias.

ABSTRACT

The kinetic parameters of a power-law model for the hydrolysis of *Jatropha curcas* L. oil to produce free fatty acids were estimated, considering a first-order dependence on the triglyceride. A batch reactor was used, operating between 30 and 180 minutes at 220 and 260 °C. The reaction products were analyzed by titration following the NMX-F-101-SCFI-2012 standard. The results showed an activation energy of 103.846 kJ/mol and a frequency factor of $3.1828 \times 10^{10} \text{ h}^{-1}$, with a coefficient of

¹ Autor para correspondencia.

determination of 0.9981. The model predictions using independent data had an error of less than 5%, validating the developed kinetic model.

KEYWORDS: free fatty acid, hydroesterification, kinetic model, power law.

INTRODUCCIÓN

Los aceites vegetales se utilizan ampliamente para la obtención de productos químicos de alta especialidad (Shakinova et al., 2022), así como para obtener biocombustibles como diésel, nafta y keroseno verdes o biodiésel (Polo et al., 2020; Hernández et al., 2025; Velázquez et al., 2025).

Los ácidos grasos libres (AGLs) se pueden obtener a partir de los aceites vegetales; los AGLs se pueden utilizar como intermediarios en varias reacciones (Peters et al., 2022). Dentro de las alternativas para producir los ácidos grasos libres está la hidrólisis. El proceso de hidrólisis aplicada a los aceites vegetales consiste en romper los triglicéridos por medio del agua, la cual previamente se descompone en iones hidroxilo y protones. Para promover la reacción de hidrólisis se puede utilizar un catalizador básico o ácido, homogéneo, heterogéneo o enzimático; a condiciones supercríticas o cercanas al punto crítico la reacción de hidrólisis ocurre sin necesidad de catalizadores (Basu, 2010; Machado et al., 2021).

Menalla et al., (2024) realizaron la hidrólisis de triacetina y aceite de girasol para producir ácidos grasos libres y acilglicéridos en un reactor continuo a escala piloto, con la finalidad de obtener un modelo cinético a temperaturas entre 250 y 400 °C y presiones de 22-25 MPa, variando la longitud del reactor entre 6.9 y 230 cm para estudiar el efecto del tiempo de contacto entre los triglicéridos y el catalizador. Los autores asumieron una cinética de ley de potencias considerando diferentes rutas de reacción; ellos observaron que, dependiendo de la temperatura de reacción, así como la presión y la condición del agua en estado subcrítico o supercrítico sobre la conversión de la triacetina y aceite vegetal, los parámetros cinéticos fueron distintos para cada tipo de alimentación y condiciones de reacción.

Por otra parte, dos Santos et al., (2017) llevaron a cabo la producción de AGLs en un reactor batch con tiempos de reacción entre 30 y 120 min, relación agua: aceite de 50:1 a 100:1, variando la agitación entre 500 y 1000 rpm. Los autores derivaron una ecuación bilineal que predice el porcentaje de AGLs como función de la temperatura y tiempo de reacción a partir

de análisis estadístico. Usando el modelo los autores predijeron que las condiciones óptimas para producir 95% peso de AGLs fueron 250 °C, 120 min, 700 rpm y una relación 100:1 molar agua-aceite.

Kamyab et al., (2024) estudiaron la conversión de aceite de canola en un reactor batch y sus mejores condiciones, encontradas experimentalmente, fueron: 200 °C, 6 h de tiempo de reacción, relación molar agua: aceite de 30:1 con 5% peso de ácido sulfúrico como catalizador. A pesar de la información experimental obtenida los autores no formularon un modelo cinético para su sistema de reacción química.

Peters et al., (2022) realizaron la reacción de hidrólisis de aceite de colza, de donde determinaron las mejores condiciones que fueron 1 h de tiempo de reacción, 300 °C, relación másica agua: aceite de 2:1. Con dichas condiciones llevó a cabo la hidrólisis de aceite de cocina gastado produciendo 97% de ácidos grasos libres determinados por titulación. Tampoco en este caso se obtuvo un modelo cinético pero los resultados experimentales permiten contrastar el efecto de las variables en la reacción de hidrólisis de aceites vegetales.

Para la hidrólisis del aceite gastado, si se lleva a cabo a temperaturas moderadas, se prefiere el uso de catalizadores ácidos, ya que la tecnología se puede aplicar tanto para aceites gastados como para aceites frescos con contenidos altos de ácidos grasos libres evitando la formación de jabones. Sin embargo, el ácido debe utilizarse en baja concentración para reducir la corrosión, problema al cual contribuyen también los ácidos grasos libres (Andari et al., 2022). También debe haber un balance entre temperatura y tiempo, ya que se ha documentado que bajas temperaturas requieren mayor tiempo de reacción, pero también muy altas temperaturas conducen al deterioro de los productos, así como también es causa de la reversibilidad de las reacciones químicas (Peters et al., 2022).

Experimentalmente se ha reportado la optimización de condiciones de tiempo y temperatura de reacción para valores fijos o parámetros que involucran la rapidez de agitación, relación agua: aceite, así como concentración de catalizador (dos Santos et al., 2017). Si se cuenta con un modelo cinético que pueda utilizarse para hacer las predicciones necesarias sin necesidad de hacer muchos experimentos se pueden evitar inconvenientes, desafortunadamente los modelos cinéticos para la hidrólisis de aceites vegetales en particular son muy escasos,

algunos sin una estructura formal (como los modelos lineales que dependen de la presión y temperatura), y otros modelos muy complejos (asumiendo diferentes rutas de reacción); y para la mayoría de los aceites vegetales los modelos cinéticos son inexistentes. Además, la información cinética obtenida para un conjunto de condiciones, tipo de catalizador y aceite vegetal no es extrapolable para otras condiciones, por lo cual la cinética química de cada materia prima que se hidroliza debe estudiarse por separado.

El objetivo del presente trabajo fue obtener los parámetros cinéticos de una expresión de ley de potencias para la hidrólisis del aceite fresco de *Jatropha curcas* L., manteniendo fijos el grado de agitación, la relación agua: aceite y la concentración del catalizador con base en los trabajos previos reportados, dejando como variables libres únicamente la temperatura y el tiempo de reacción, lo cual es compatible con la cinética de ley de potencias propuesta, con la finalidad de disponer de una herramienta que permita la toma de decisiones para la producción de ácidos grasos libres a partir del aceite vegetal, el cual tiene el potencial de masificarse en nuestro país.

1. MODELO MATEMÁTICO DE LA CINÉTICA DE HIDRÓLISIS

Las reacciones que ocurren durante la hidrólisis son las siguientes, donde TG representa a los triglicéridos o aceite vegetal, DG representa los diglicéridos, MG son los monoglicéridos, AGL son los ácidos grasos libres y G es el glicerol (dos Santos et al., 2017).



En suma, por cada molécula de triglicérido se producen tres moléculas de ácidos grasos libres y una molécula de glicerol considerando una conversión completa en cada etapa, esto es:



Otras reacciones posibles son (Menalla et al., 2024):





La cinética de la descomposición del aceite vegetal para producir ácidos grasos libres depende de las especies en cada etapa. Sin embargo, atendiendo a la reacción global (4), la expresión de rapidez de reacción se puede escribir como sigue (Fogler, 2022):

$$-r_{TG} = k' C_{TG}^m * C_{H_2O}^n \quad (8)$$

Donde:

m y n son los órdenes de reacción para el aceite y agua, respectivamente.

k' es la constante de rapidez de reacción.

C_{TG} es la concentración del aceite.

C_{H_2O} es la concentración del agua.

Si se considera el exceso de agua (mol agua: mol aceite $\geq 50:1$) y asumiendo una dependencia de primer orden con respecto a la concentración del aceite, la expresión de rapidez dada en la ecuación (8) se puede reducir a la ecuación (9):

$$-r_{TG} = k C_{TG} \quad (9)$$

Mientras que la rapidez de formación de los ácidos grasos libres, siguiendo un procedimiento similar que para el aceite, se puede escribir de la siguiente manera:

$$r_{AGLs} = k C_{TG} \quad (10)$$

Donde:

k = la constante de rapidez de reacción.

Para un sistema cerrado el balance de materia para los triglicéridos se puede escribir de la siguiente manera, considerando temperatura constante, agitación perfecta y sin cambio de volumen de la mezcla de reacción, lo cual se justifica si se usa un sistema hermético como es en el caso reportado en este estudio (Elizalde y Mederos, 2018).

$$\frac{dC_{TG}}{dt} = -kC_{TG} \quad (11)$$

Mientras que el balance de materia en el reactor batch para los AGLs está dado por:

$$\frac{dC_{AGL}}{dt} = kC_{TG} \quad (12)$$

Donde t es el tiempo de reacción.

Con las siguientes condiciones iniciales:

$$t = 0, C_{TG} = C_{TG,0} \quad (13)$$

$$t = 0, C_{AGL} = C_{AGL,0} \quad (14)$$

Donde:

$C_{TG,0}$ = concentración de triglicéridos al inicio de la reacción.

$C_{AGL,0}$ = concentración de ácidos grasos libres al inicio de la reacción.

Para la estimación de los parámetros del modelo cinético el problema se formuló como una minimización del error ($\min J$) obtenido al comparar los datos experimentales a diferentes tiempos de reacción y temperatura con las concentraciones calculadas, de la siguiente manera:

$$J = \sum_{i=1}^N (C_{AGL}^{exp} - C_{AGL}^{cal})^2 \quad (15)$$

Las restricciones son:

$$k_i > 0$$

Donde:

N = número de datos experimentales a cada temperatura de reacción o el total de datos, dependiendo si la regresión es para cada temperatura o para todas las temperaturas y tiempos.

Es importante mencionar que en la estimación del error para obtener los parámetros cinéticos se debe descartar el valor de la concentración inicial debido a que éste se emplea en la

solución del balance de materia.

Una vez que se obtienen las constantes de rapidez de reacción a cada temperatura, se toman logaritmos naturales de dichas constantes y se grafican como una función del recíproco de la temperatura absoluta. A partir de la regresión lineal de los tres pares de puntos ($1/T, \ln(k)$) se estimó la energía de activación (E_a) y factor de frecuencia (k_0). Con estos dos parámetros cinéticos se formuló el problema de optimización global considerando simultáneamente todos los datos obtenidos a los diferentes tiempos y temperaturas de reacción. Para la solución del modelo cinético se empleó el software institucional Matlab R2025a (The MathWorks, 2025); algunas funciones utilizadas fueron *ode45* para resolver las ecuaciones diferenciales del balance de materia, así como *fmincon* y *fminsearch* para minimizar la función error, variando los métodos de resolución y algunas opciones tales como el número de iteraciones, la diferencia máxima de cambio, entre otros, con la finalidad de garantizar una solución robusta del problema.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

Se siguió la norma NMX-F-101-SCFI-2012 para determinar la concentración de ácidos grasos libres tanto en el aceite vegetal como en los productos de la reacción. Se utilizó alcohol etílico absoluto (Fermont, 99.9%) en una mezcla de 95% volumen de alcohol-5% volumen de agua desionizada. Además se utilizó hidróxido de sodio (Macron, $\geq 98\%$) para preparar las diferentes soluciones titulantes valoradas con biftalato de potasio químicamente puro (J.T. Baker) (Orozco, 1989). Se utilizó el indicador de fenolftaleína Hycel preparada de acuerdo con la norma antes mencionada. En todos los casos se usó agua desionizada (conductividad eléctrica $< 0.06 \mu\text{S/cm}$, TOC $< 0.3 \text{ mg/L}$).

El perfil de ácidos grasos libres de la carga de alimentación se obtuvo a partir del espectro de resonancia magnética nuclear del protón, utilizando un espectrómetro Bruker Avance III de 750 MHz, que posee una sonda de banda ancha de 5 mm, con los siguientes parámetros: 32 escaneos, tiempo de relajación de 1 segundo, amplitud espectral de 15 kHz y temperatura de 298.1 K. Se utilizó tetrametilsilano con un desplazamiento químico asignado de cero y el espectro del aceite vegetal se obtuvo entre 0 y 16 ppm. Además, se empleó el algoritmo de Barison et al., (2010) para estimar la composición del aceite vegetal en términos de ácidos grasos usando las siguientes fórmulas y el resto del algoritmo reportado en la referencia antes

citada:

Para el ácido linolénico:

$$C_{0.98} = \frac{2 \cdot A_{0.98}}{9 \cdot A_{4.27}}$$

(16)

Ácido linoleico:

$$C_{2.74} = \frac{2 \cdot A_{2.74}}{6 \cdot A_{4.27}} - C_{0.98} \quad (17)$$

Ácido oleico:

$$C_{2.02} = \frac{A_{2.02}}{6 \cdot A_{4.27}} - C_{2.74} - C_{0.98}$$

(18)

Saturados:

$$C_{2.28} = \frac{A_{2.28}}{3 \cdot A_{4.27}} - C_{2.74} - C_{0.98} - C_{2.02}$$

(19)

Donde:

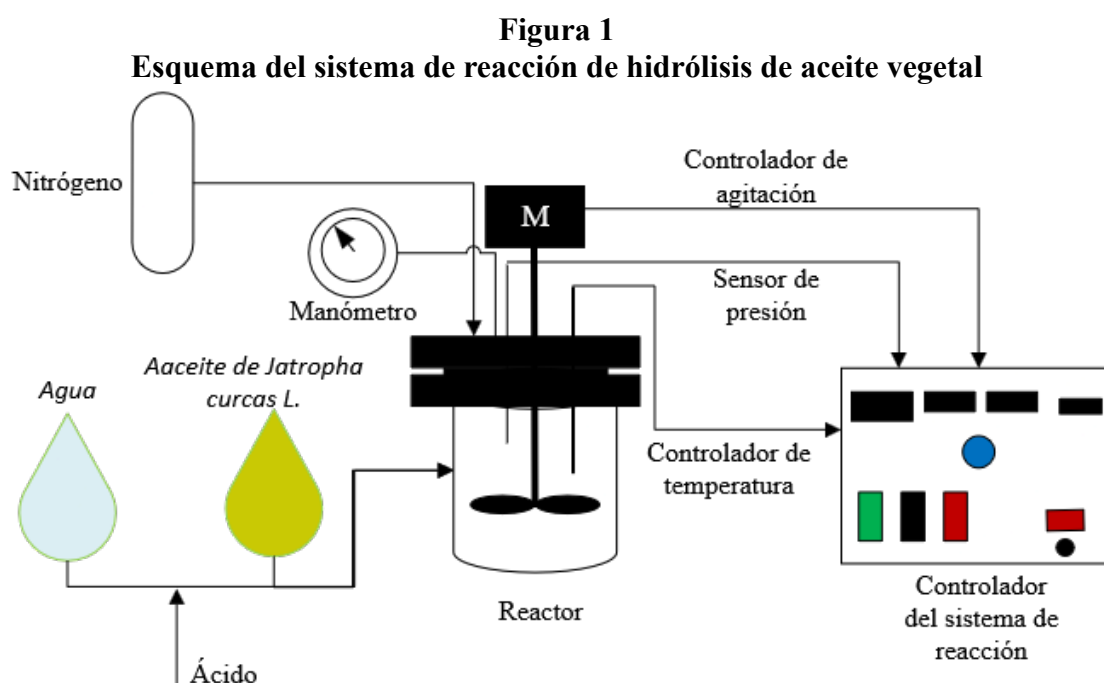
A es el área bajo la curva de la señal correspondiente en el espectro de H-RMN y el subíndice del área es la señal de desplazamiento químico en ppm (Spinsolve).

C es la concentración fraccional másica del ácido graso.

Para el aceite vegetal también se determinó la densidad y la viscosidad del aceite a 25 °C usando un equipo Stabinger SVM™ 3001 marca Anton Paar siguiendo los métodos ASTM D1298-12b y ASTM D7042-16e2, respectivamente.

Para llevar a cabo las reacciones de hidrólisis se utilizaron 25 mL de aceite vegetal por cada corrida experimental junto con 25 mL de agua desionizada; previamente se adicionó ácido sulfúrico (J.T. Baker, >97.8%) al agua desionizada utilizando una micropipeta y puntas desechables, para obtener 1% en peso de ácido con respecto al aceite vegetal. La mezcla de

reacción se vertió al reactor de acero inoxidable marca Parr de 100 mL de volumen nominal, dotado de agitación mecánica y sistema de control de temperatura e indicador de presión (Figura 1). Se pesó el reactor tanto vacío como una vez cargado con la mezcla de reacción para el balance de materia. Se montó el reactor y se realizaron purgas con nitrógeno (Infra, 99.997%), para remover el aire y reducir la oxidación (Sakaino et al., 2022); además se realizaron pruebas de hermeticidad hasta 50 bares, utilizando el mismo gas nitrógeno. En caso de detectar fugas se reemplazó el sello de grafito del reactor por un sello nuevo. El sellado del reactor se realizó con un torque de 12 pie-libra el cual se logró con la ayuda de un torquímetro calibrado para dicho propósito.



Fuente: elaboración propia.

La operación del reactor comenzó con el calentamiento de la mezcla de reacción desde temperatura ambiente hasta la temperatura de reacción a la cual se estudió el proceso. Al alcanzar la temperatura de reacción se estableció la agitación a 750 rpm. Se registraron los perfiles de temperatura y presión como función del tiempo para cada reacción efectuada. Una vez que se cumplió el tiempo de reacción, se apagó el sistema de calentamiento y se enfrió el reactor con la ayuda de ventilación con aire del ambiente. Aproximadamente a 40 °C se purgaron los gases de la reacción, además se introdujo nitrógeno para terminar de purgar los gases.

Posteriormente se extrajo el producto de la reacción y mediante embudo de separación se separaron las fases. Una vez recuperada la fase orgánica, se le adicionó sulfato de sodio (Meyer, >99%) para adsorber el remanente de agua y el producto se almacenó en viales de vidrio. A partir de los productos se realizó la titulación siguiendo la norma establecida, hasta la neutralización la cual ocurre una vez que hay un vire de color del indicador. El cálculo del porcentaje de ácidos grasos libres se realizó conforme a la norma mencionada.

Las variables independientes analizadas en la presente contribución fueron la temperatura (entre 220 y 260 °C) y el tiempo de reacción (30 a 180 minutos). Para las temperaturas de 220 y 240 °C los tiempos fueron de 30, 60, 120 y 180 minutos, mientras que para 260 °C se analizaron además tiempos de 90 y 150 minutos debido a las mayores tasas de variación en la variable de respuesta. Todos los experimentos se realizaron por duplicado.

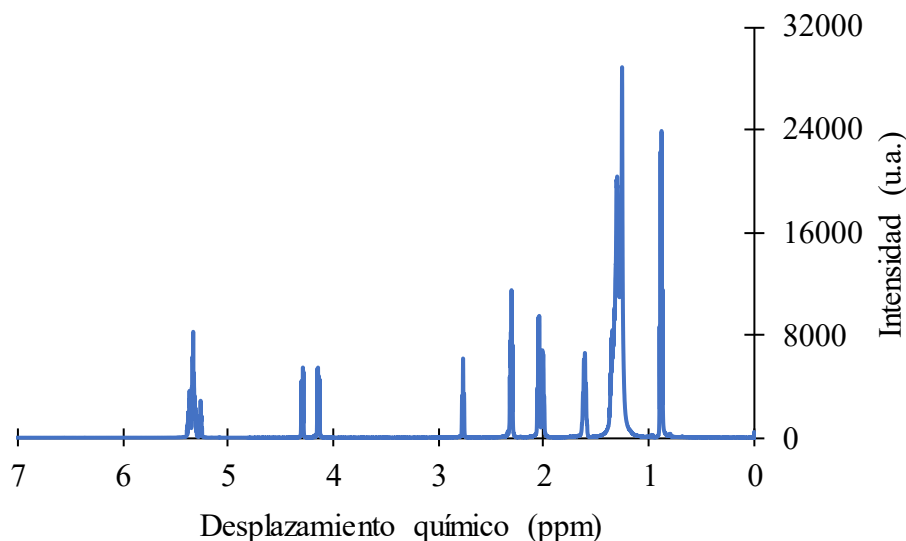
Para validar las predicciones del modelo cinético con datos independientes se condujeron experimentos adicionales a 230, 235, 240 y 250 °C a tiempos de entre 30 y 150 minutos. Estos últimos datos no se utilizaron para el ajuste de parámetros del modelo cinético.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Gráfica 1 se muestra el espectro de Resonancia Magnética Nuclear para el aceite de *Jatropha curcas* L. Las principales señales atribuidas a los ácidos grasos libres se muestran en el Cuadro 1, mientras que la señal a 4.27 ppm se atribuyó al glicerol.

Gráfica 1

Espectro de Resonancia Magnética Nuclear del Protón para el aceite vegetal utilizado como alimentación al reactor para producir ácidos grasos libres



Fuente: elaboración propia.

Utilizando la señal del glicerol como dato para normalizar el resto de las áreas, se le asignó un valor unitario y se calcularon el resto de las áreas de las señales; la concentración de ácidos grasos obtenidas con las ecuaciones (16)-(19) se reportan en el Cuadro 1. Como se observa, la mayor concentración de ácidos grasos en el aceite pertenece a los ácidos oleico y linoleico, por lo cual reportar el contenido de ácidos grasos libres en términos de ácido oleico es una aproximación adecuada.

Cuadro 1
Composición estimada del aceite de *Jatropha curcas* obtenida por H-RMN

Componente	Señal (ppm)	Concentración (%)
Ácido Linolénico	0.98	0.22
Ácido Linoleico	2.74	45.23
Ácido Oleico	2.02	44.22
Ácidos Saturados	2.28	10.33

Fuente: elaboración propia.

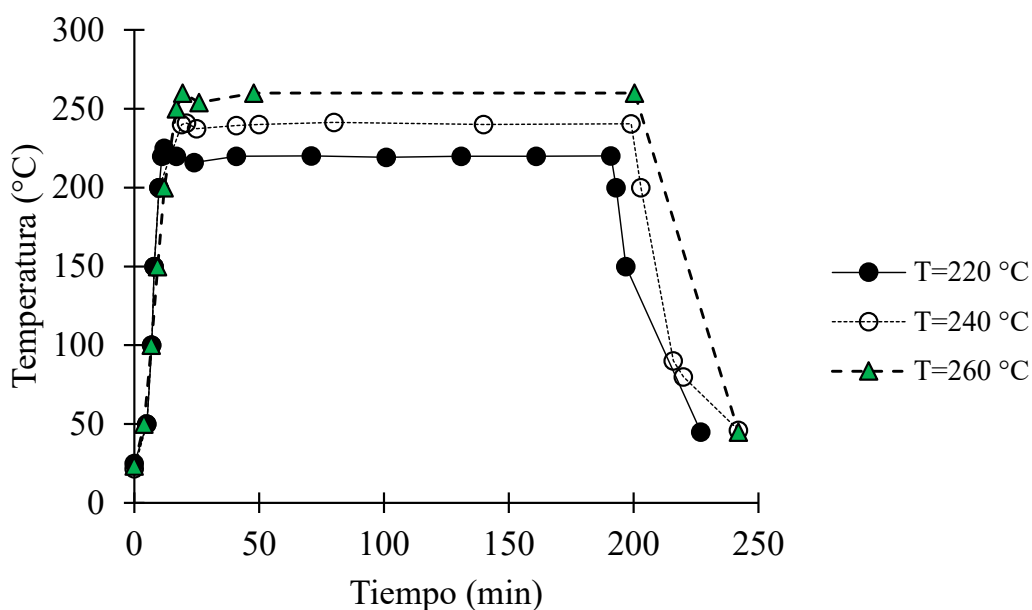
La densidad y viscosidad del aceite a 25 °C fueron 0.9123 g/cm³ y 53.97 mPa·s, respectivamente, mientras que el contenido de ácidos grasos libres fue de 0.46 %.

Como ejemplo de desempeño del reactor, los perfiles de temperatura para tres experimentos realizados a 3 horas de tiempo de reacción y 220, 240 y 260 °C se muestran en la Gráfica 2,

mientras que en la Gráfica 3 se observan los perfiles de presión para los mismos tres experimentos citados.

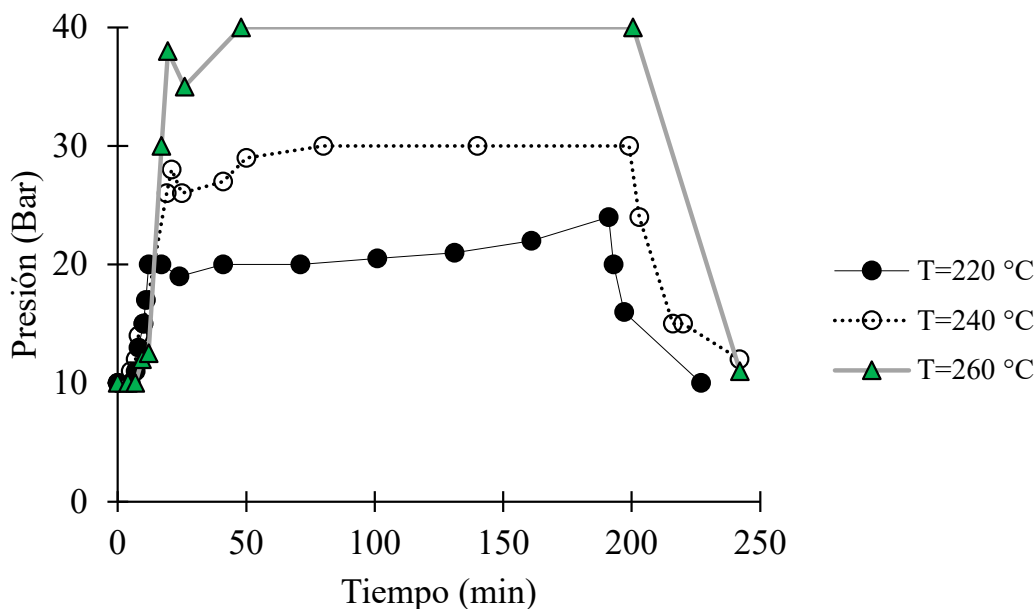
Tal como puede constatarse en los perfiles de temperatura, la mayor parte del tiempo de reacción la temperatura permaneció sin cambio apreciable, salvo al inicio, ya que al alcanzar el “set point“, debido al sistema de control del calentamiento la temperatura temporalmente oscila, alcanzando su valor predeterminado alrededor de los 30 minutos, aunque la diferencia alrededor de la temperatura programada ronda en los 5 °C en promedio. Asimismo, se observa que, tanto al inicio del calentamiento como al enfriarse el sistema de reacción, el tiempo empleado es relativamente corto por lo cual puede descartarse una influencia importante en el avance de reacción. Perfiles similares de temperatura se observaron para el resto de las pruebas experimentales.

Gráfica 2
Perfiles de temperatura durante arranque, reacción y paro del sistema para 180 minutos de tiempo de reacción y temperaturas de 220, 240 y 260 °C



Fuente: elaboración propia.

Gráfica 3
Perfiles de presión durante arranque, reacción y enfriamiento del sistema para 180 minutos de tiempo de reacción y temperaturas de 220, 240 y 260 °C

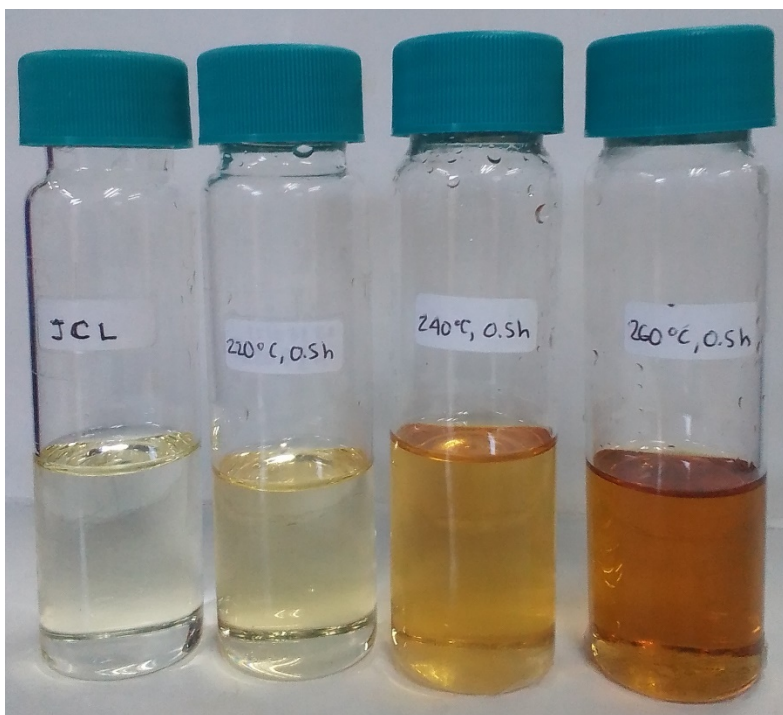


Fuente: elaboración propia.

Con relación a la presión dentro del reactor, los perfiles de la Gráfica 3 muestran que dicha variable es proporcional a la temperatura de la reacción, y se debe principalmente a la presencia de nitrógeno con el cual se presurizó el sistema a 10 bar inicialmente. También los perfiles de presión presentan una oscilación cerca del arranque de la reacción, lo cual se debe a las variaciones de temperatura correspondientes. La presión se estabiliza alrededor de los 30 minutos aunque para el caso de la operación a 220 °C, la presión se eleva lentamente hacia el final de las 3 h. Perfiles similares se observaron para el resto de las pruebas a tiempos más cortos de reacción.

En la Figura 1 se observan los productos de reacción obtenidos a 30 minutos de tiempo de reacción y a las diferentes temperaturas estudiadas, esto es a 220, 240 y 260 °C. Se incluye la materia prima como referencia.

Figura 1
Apariencia del aceite de *Jatropha curcas* L. y productos de reacción obtenidos a 30 minutos y 220, 240 y 260 °C

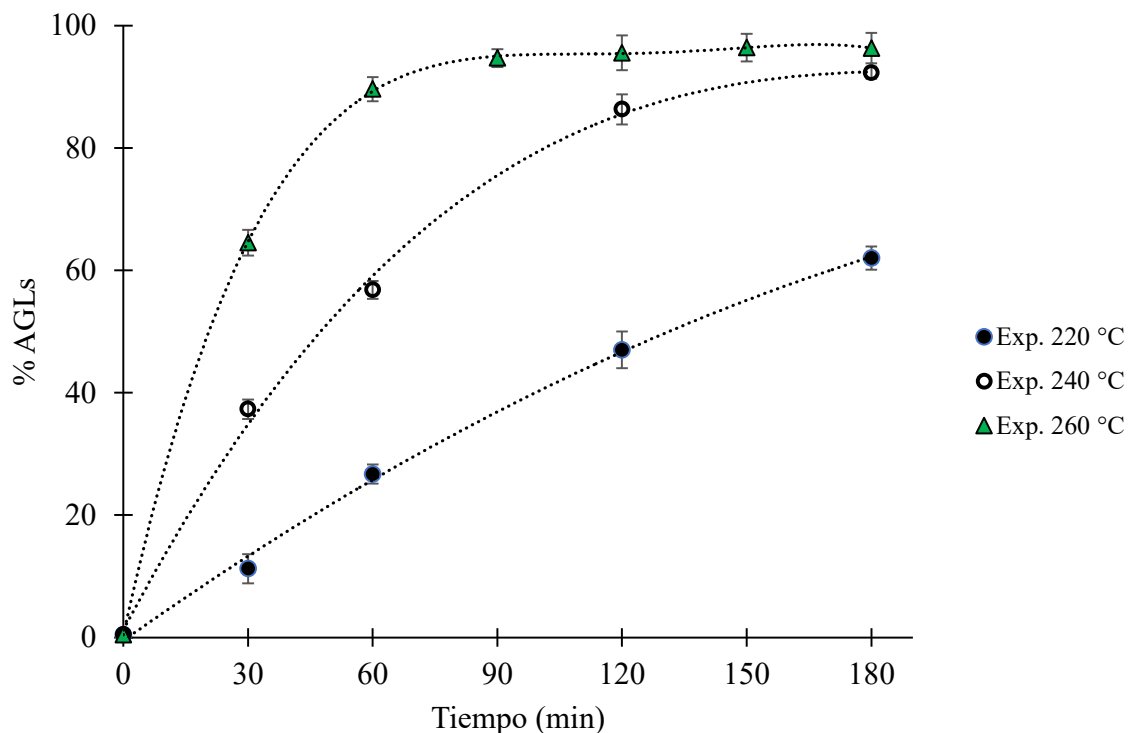


Fuente: elaboración propia.

Tal como se ha reportado previamente, a medida que la severidad de las reacciones se incrementa la calidad de los productos se deteriora debido a posibles reacciones de polimerización, lo cual se manifiesta por cambios en la coloración; asimismo se ha reportado que el rendimiento líquido disminuye con el aumento de la temperatura lo cual puede deberse al rompimiento de las moléculas en fragmentos volátiles que se pierden durante la recuperación del producto líquido (Kamyab et al., 2024). Incluso la corrosión del reactor puede contribuir a coloración de los productos de reacción por lo cual se deben tener en consideración estos aspectos en la operación del reactor y no solamente atender el tema del rendimiento de los AGLs para tomar una determinación en su producción (Andari et al., 2022).

En la Gráfica 4 se observan las concentraciones de ácidos grasos libres en los productos de reacción, destacando cada conjunto de datos a la misma temperatura con un tipo de símbolo único.

Gráfica 4
Perfiles de concentración de ácidos grasos libres en los productos de reacción de hidrólisis de aceite vegetal a tiempos de 0-180 minutos y temperaturas de 220, 240 y 260 °C. Las líneas solo son guía para el ojo no son simulaciones

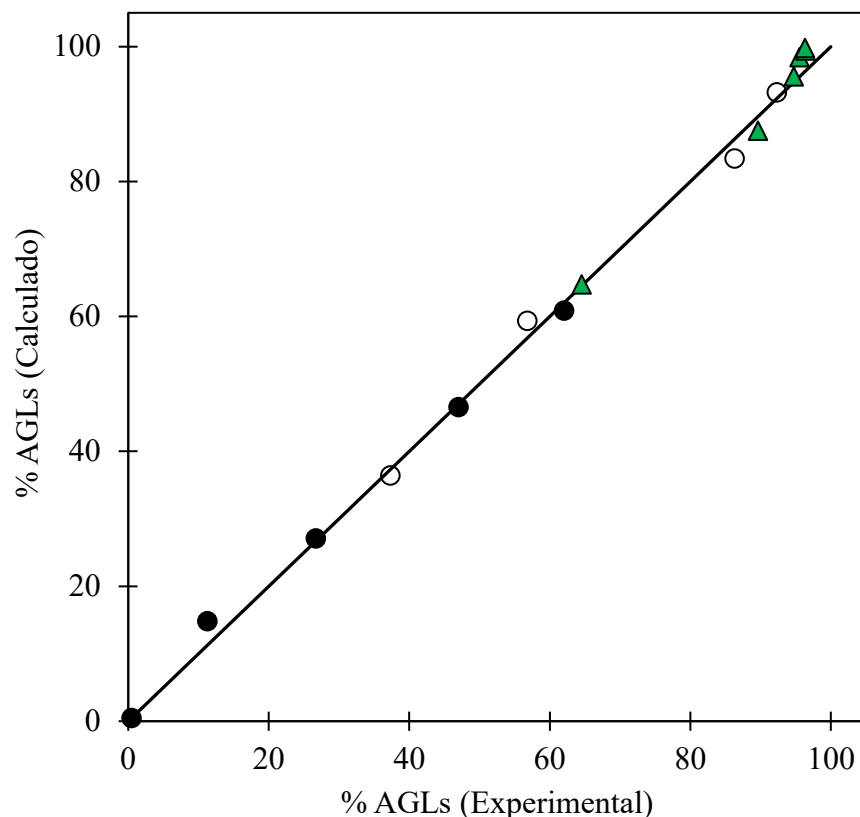


Fuente: elaboración propia.

Para tiempos de reacción cortos y temperaturas de 240 y 260 °C la concentración de ácidos grasos libres se incrementa rápidamente, tal como se ilustra entre el tiempo cero y 60 minutos; para tiempos de reacción más prolongados el cambio en la concentración de AGLs ya no es tan pronunciado, esto debido a la menor concentración de aceite vegetal remanente. Se observa que cuanto mayor es la temperatura de reacción, el contenido de ácidos grasos libres que se producen es mayor, lo cual demuestra el efecto de la temperatura sobre la producción de ácidos grasos libres. Para la temperatura de reacción de 220 °C, el perfil cambia en una menor proporción, ello debido a la menor reactividad de las especies a esas condiciones.

A partir de la minimización del error, ecuación (15), se estimaron los valores de concentración de ácidos grasos libres y los resultados calculados de AGLs se compararon en correspondencia con los datos experimentales, tal como se muestra en la Gráfica 5.

Gráfica 5
Representación de la paridad entre la concentración de ácidos grasos libres experimentales y calculados en la reacción de hidrólisis a 0-180 minutos y temperaturas de 220, 240 y 260 °C



Fuente: elaboración propia.

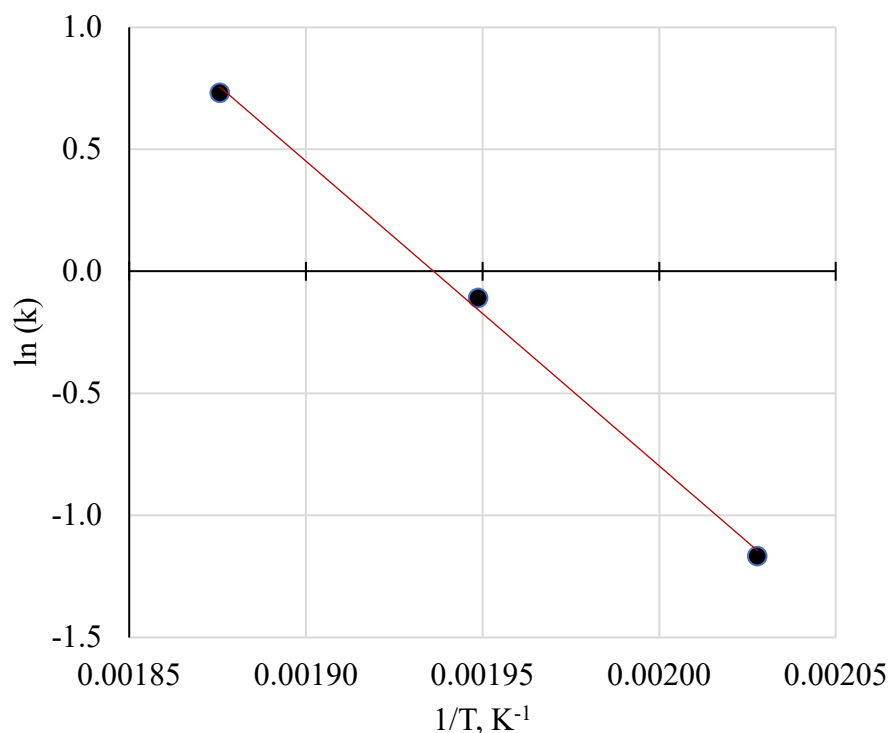
Al estimar la pendiente (m) e intercepto (b) a partir de la información de la Gráfica 5, se obtuvo $m=1.0037$ y $b=0.4663$, con un coeficiente de determinación de 0.9962. Por lo anterior, se puede afirmar que el ajuste de la información experimental con el modelo cinético de ley de potencias de primer orden es adecuado.

Siguiendo el procedimiento de linealización de los coeficientes de rapidez de reacción a cada temperatura, en la Gráfica 6 se muestra el logaritmo natural de la constante de reacción vs el recíproco de la temperatura absoluta en Kelvin. La recta de regresión para estos puntos dio como resultado una pendiente de -12491 mientras que la ordenada al origen fue de 24.184.

Por lo anterior, una vez multiplicada la pendiente de la curva de la Gráfica 5 por la constante de los gases se obtiene la Energía de activación (E_a) de 103.846 kJ/mol; el factor de frecuencia (k_0) se obtiene tomando la exponencial del intercepto, por lo cual el valor de k_0 es $3.1828 \times 10^{10} \text{ h}^{-1}$.

Gráfica 6

Linealización de la ecuación de Arrhenius para estimar los parámetros del coeficiente de rapidez de reacción de la hidrólisis del aceite vegetal



Fuente: elaboración propia.

Se realizó posteriormente una optimización no lineal para la energía de activación y el factor de frecuencia utilizando todos los datos experimentales. Sin embargo la aproximación no lineal no mejoró el error global por lo que se concluyó que la optimización con los parámetros cinéticos estimados con la aproximación lineal fue suficiente.

Por lo anterior el modelo cinético para la producción de ácidos grasos libres queda expresado como sigue (en unidades de h^{-1} por concentración):

$$r_{AGLS} = 3.1828 \times 10^{10} * e^{\frac{-103846 J/mol}{R * T}} * C_{TG} \quad (20)$$

Menalla y colaboradores (2024) encontraron energías de activación de la hidrólisis de triacetina entre 48.9 y 77.3 kJ/mol a temperaturas de 375 a 400 °C y condiciones supercríticas para el agua. Para el aceite de girasol, las energías de activación estuvieron en el intervalo de 50.9-152.2 kJ/mol. Tanto para la molécula modelo como para el aceite vegetal los autores

encontraron que la energía de activación varía dependiendo de las condiciones específicas de la reacción.

El promedio de la energía de activación obtenido por Menalla et al., (2024) (valor de 101.5 kJ/mol) concuerda con resultado de la energía de activación obtenido en el presente trabajo, a pesar de que el resto de las condiciones entre ambas investigaciones fueron distintas, principalmente la temperatura que tiene mucha influencia en la cinética de las reacciones, lo cual puede atribuirse a que la E_a es una verdadera constante. Los mejores niveles de producción de AGLs en nuestro caso (>95%) se alcanzaron a 260 °C y prácticamente desde los 90 minutos.

Respecto a la producción de ácidos grasos libres, en otras investigaciones se ha explorado el uso de catalizadores homogéneos en concentraciones de hasta 6% para rendimientos $\geq 95\%$ de ácidos grasos libres; dicha concentración de ácido es muy superior a la utilizada en la presente investigación.

Asimismo, se ha realizado hidrólisis de aceites vegetales a mayor temperatura que la máxima utilizada en la presente investigación para obtener rendimientos de AGLs similares a los que se lograron en este trabajo; sin embargo, la calidad el producto a alta temperatura se deteriora debido a la polimerización de los ácidos grasos libres y formación de otros subproductos indeseados e incluso coque (Machado et al., 2021; Kamyab et al., 2024; Menalla et al., 2024) además de requerir de reactores que soporten severidades altas incrementando los costos de inversión.

Por lo anterior, es preferible llevar a cabo la reacción de hidrólisis del aceite a condiciones moderadas en términos de presión y temperatura, tal como se reporta en el presente trabajo, usando catalizadores en baja concentración. Aunque los catalizadores heterogéneos son prometedores su uso se puede ver limitado por la difusión en la interfase fluido-partícula e intrapartícula, e incluso puede ocurrir lixiviación de los sólidos, por lo cual el uso de los catalizadores homogéneos es una alternativa viable, aunque la pureza de los productos es un tema que debe ponerse atención por la dificultad de separar el catalizador de la mezcla de reacción final (The University of Manchester).

Con relación a la validación del modelo cinético con datos independientes, se compararon

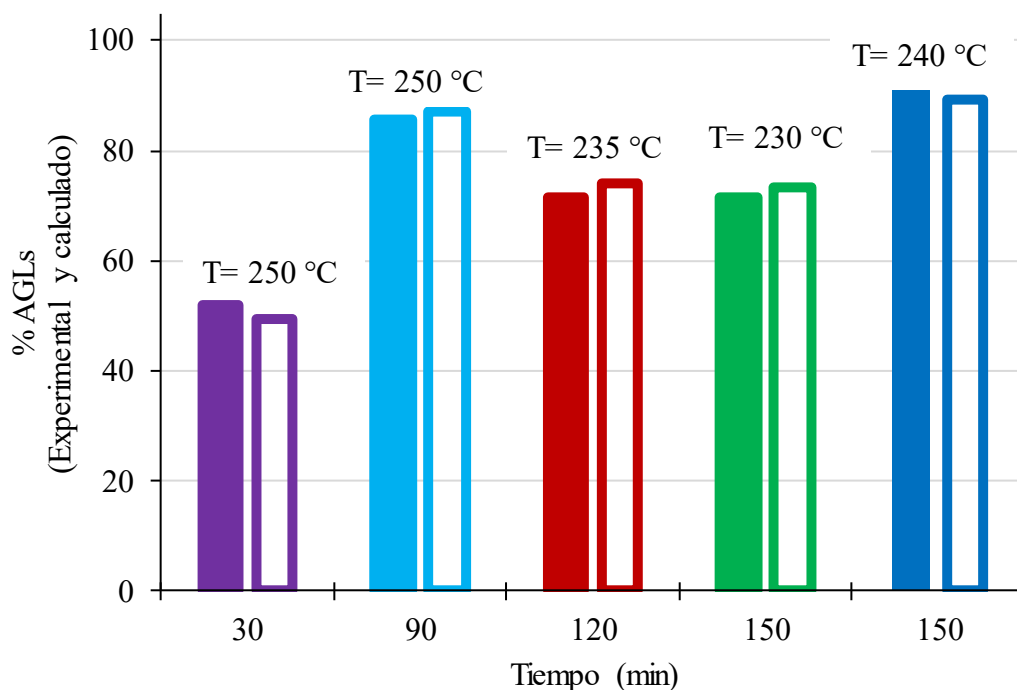
los resultados analíticos de laboratorio con la predicción del modelo cinético a las diferentes temperaturas y tiempos de reacción seleccionados. Los resultados se muestran en la Gráfica 7.

Tal como se puede apreciar en la Gráfica 7, la concordancia entre las predicciones a las diferentes condiciones de reacción y los datos experimentales es aceptable, si bien se observan desviaciones (menores al 5%) debidas a sobre predicción y sub predicción de las concentraciones de AGLs a las diferentes condiciones de validación del modelo cinético desarrollado. Estas desviaciones son producto de la falta de concordancia perfecta del modelo cinético con los datos de donde se derivan los parámetros, la complejidad de las reacciones químicas y la dificultad de tener controladas totalmente las condiciones de reacción tal como se observó en los perfiles reportados de presión y temperatura dentro del reactor. Además, al asumir una dependencia solo con respecto a la concentración del aceite vegetal en la reacción de hidrólisis se ignora la contribución del agua en la reacción química, que aunque está en exceso, presenta cierta variación debido a su consumo, lo cual también termina afectando las predicciones.

Aún con las desviaciones en la predicción mencionadas anteriormente, el modelo cinético desarrollado para la hidrólisis de aceite vegetal de *Jatropha curcas* L. permite representar adecuadamente la cinética de la reacción dentro de los intervalos de tiempo y temperatura estudiados, además de ser una expresión matemática simple.

El modelo desarrollado contribuye a la comprensión de la producción de ácidos grasos libres, mismos que sirven como fuente de materia prima para obtener distintos tipos de biocombustibles, tales como biodiésel o diésel renovable y otros productos de valor agregado. Particularmente en el proceso de hidrotratamiento de triglicéridos se ha observado que se presentan AGLs como intermediarios (García et al., 2025; Hernández et al., 2025; Velázquez et al., 2025), los cuales se podrían producir por hidrólisis y posteriormente usar estos ácidos para obtener hidrocarburos.

Gráfica 7
Comparación de concentración porcentual de AGLs a diferentes temperaturas de reacción: Experimental (barra rellena) vs Calculado (barra sin relleno)



Fuente: elaboración propia.

De esta manera, al hidrotratar AGLs en lugar de aceites puede ser ventajoso en comparación de hidrotratar directamente aceites vegetales, reduciendo la severidad global de la reacción de hidrotratamiento, ya que la producción de ácidos grasos libres ocurre a menor temperatura que en la hidrodesoxigenación de aceites vegetales.

PROSPECTIVA

La utilidad del modelo cinético desarrollado en la presente investigación radica en la posibilidad de usar este instrumento para predecir las condiciones de temperatura y tiempo a las cuales se pueden obtener distintos rendimientos de ácidos grasos libres partiendo de aceite vegetal de jatropha. Particularmente es de utilidad calcular, para un rendimiento dado, cuál es la temperatura requerida a tiempo fijo; o dada la temperatura a qué tiempo de reacción deberá operarse el sistema para alcanzar la concentración de ácidos grasos libres predeterminada. Adicionalmente y no de menor importancia es que el modelo cinético puede utilizarse para el diseño preliminar de un sistema de reacción a mayor escala. Aunque la mezcla de reacción es heterogénea, se espera que al escalar el proceso manteniendo los mismos parámetros de relación agua: aceite, concentración de catalizador y nivel de agitación los resultados pueden ser no muy disímiles a los obtenidos a escala menor. De esta manera

el resultado de la presente investigación puede ayudar a tomar decisiones con respecto a la producción de ácidos grasos libres a diferentes tiempos y temperaturas para la finalidad que se requiera. Además también el modelo puede servir para el estudio de otras variables tales como el efecto de la concentración del catalizador, relación agua: aceite y agitación para comparar esos nuevos resultados con los ya obtenidos a las condiciones de este estudio sin necesidad de utilizar las mismas temperaturas y tiempos de reacción que se emplearon en esta investigación, ya que dicho modelo permite que se evalúen distintos tiempos y temperaturas como variables independientes. El presente trabajo sirve también como base para investigaciones futuras que resulten en una aplicación del modelo cinético en reactores químicos que consideren fenómenos como el transporte de momento, calor y masa; además de consideraciones relacionadas con la potencia para agitación, entre otros factores.

CONCLUSIONES

Se realizó la modelación cinética de la hidrólisis de aceite vegetal de *Jatropha curcas* L., utilizando una expresión cinética de ley de potencias con dependencia de primer orden con respecto a la concentración del triglicérido para la producción de ácidos grasos libres sin considerar dependencia del resto de las especies químicas. Las variables de la expresión cinética fueron el tiempo de reacción y la temperatura, siguiendo la producción de ácidos grasos libres obtenidos en un reactor batch que operó a 750 rpm, 50% vol. de agua:50% volumen de aceite con 1% peso de catalizador. Los parámetros cinéticos hallados fueron: 103.846 kJ/mol para la energía de activación y $3.1828 \times 10^{10} \text{ h}^{-1}$ para el factor de frecuencia. La recta de regresión obtenida al comparar datos experimentales contra datos calculados con los parámetros cinéticos estimados tuvo una pendiente de 1.014 y una intersección de -0.632 con un coeficiente de determinación de 0.9939. El modelo cinético obtenido se probó con datos independientes obtenidos a distintos tiempos y temperaturas de reacción y se observó una concordancia satisfactoria en cada caso, a pesar de la complejidad de las reacciones durante la hidrólisis, con lo cual se concluye que la aproximación cinética utilizada en el presente estudio para el conjunto de parámetros e intervalos de variables de reacción resultó adecuada.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el financiamiento parcial de la Secretaría de Investigación y Posgrado

del IPN a través del proyecto SIP 20252380. F. Velázquez también agradece la beca otorgada por el programa BEIFI-IPN (2025-2026) para el desarrollo de la presente investigación. I. Elizalde pertenece a la Red del Medio Ambiente del IPN.

Los autores expresan agradecimiento a los árbitros quienes aportaron una mejora a la estructura del artículo.

REFERENCIAS

- Andari, F., Kittel, J., Fernandes, J., Godin, N., Ter-Ovanessian, B., Ropital, F. (2022). High temperature corrosion in various grades of vegetable and waste oils used for bio-fuel production. *Corrosion Science*, 206: 110501. doi: 10.1016/j.corsci.2022.110501
- ASTM D1298-12b(2017). Standard Test Method for Density, Relative Density, or API Gravity of Crude Petroleum and Liquid Petroleum Products by Hydrometer Method. doi: 10.1520/D1298-12BR17E01
- ASTM D7042-16e2(2016). Standard Test Method for Dynamic Viscosity and Density of Liquids by Stabinger Viscometer (and the Calculation of Kinematic Viscosity). doi: 10.1520/D7042-16E02
- Barison, A., Pereira, C., Ramos, F., Simonelli, F., Lenz, C., Ferreira, A. (2010). A simple methodology for the determination of fatty acid composition in edible oils through ^1H NMR spectroscopy. *Magnetic Resonance in Chemistry*, 48: 642-650. doi: 10.1002/mrc.2629
- Basu, P. (2010) Chapter 7 Hydrothermal gasification of Biomass, In *Biomass Gasification and Pyrolysis*. Prabir Basu Editor, Academic Press. ISBN 9780123749888
- Dos Santos, L., Rodrigues, R., de Oliveira, J., Flumigan, D. (2017). Experimental factorial design on hydroesterification of waste cooking oil by subcritical conditions for biodiesel production. *Renewable Energy*, 114: 574-580.
- Elizalde, I., Mederos F. (2018). Propuesta de una secuencia para la modelación matemática con aplicaciones en fenómenos con variación continua típicos de ingeniería química. *Temas de Ciencia y Tecnología*, 22(64): 69-74. ISSN: 2007-0977. Disponible en: https://www.utm.mx/edi_anteriores/temas64/T64_N02_Propuesta.pdf

Fogler, S. (2022). Elements of Chemical Reaction Engineering (6a. Edición). Pearson.

ISBN: 978-1292416663

García, M.A., Restrepo, J.R., Mederos, F.S., Elizalde I. (2025). Modeling the kinetics of hydrodeoxygenation of *Jatropha curcas* L. oil to produce green hydrocarbons by hydrotreating process. Clean Technologies and Environmental Policy, in press.

<https://doi.org/10.1007/s10098-025-03333-3>

Hernández, E., Elizalde, I., Sánchez, F., Reza, C., Ramírez, L. (2025). Oxygen removal from poor-quality refined edible oil to produce hydrocarbon-type biofuels using the hydrotreating process. Reaction Kinetics, Mechanism and Catalysis, 138: 1469-1477. doi: 10.1007/s11144-025-02820-4

Kamyab, B., Wang, H., Xu, C., Chambers, D., Bassi, A. (2024). Preparing vegetable oil-based metalworking fluids by hydrolysis-esterification two-step process. Biomass and Bioenergy, 183: 107175. doi: 10.1016/j.biombioe.2024.107175

Machado, S., Da-Ros, P., Castro, H., Giordani, D. (2021). Hydrolysis of vegetable oil and microbial oils catalyzed by a solid preparation of castor bean lipase. Biocatalysts and Agricultural Biotechnology, 37: 102188. doi: 10.1016/j.bcab.2021.102188

Menalla, E., Garcia, J., Cantero, D., Cocero J. (2024). Hydrothermal hydrolysis of triglycerides: tunable and intensified production of diglycerides, monoglycerides, and free fatty acids. Chemical Engineering Journal, 493: 152391. doi: 10.1016/j.cej.2024.152391

Orozco, F. (1989). Análisis Químico Cuantitativo. Editorial Porrúa. ISBN: 9789684320048

Peters, M., Tondo, C., Wang, J., Onwudili, A. (2022). Subcritical water hydrolysis of fresh and waste cooking oils to fatty acids followed by esterification to fatty acid methyl esters: detailed characterization of feedstocks and products. ACS Omega, 7:46870-46883. doi: 10.1021/acsomega.2c05972

Polo, L., Elizalde, I., Mederos, F., Trejo, F., Ramírez, E., Sánchez F. (2020). Assessing different alternatives by simulation to optimize a homogeneous transesterification process to improve the produced/consumed energy. Reaction Kinetics, Mechanism and Catalysis,

129:41-56. doi: 10.1007/s11144-019-01713-7

Sakaino, M., Sano, T., Kato, S., Shimizu, N., Ito, J., Rahmania, H., Imagi, J., Nakagawa, H. (2022). Carboxylic acids derived from triacylglycerols that contribute in acidic value during the thermal oxidation of oils. *Scientific Reports*, 12:124600. doi: 10.1038/s41598-022-15627-3

Secretaría de Economía (2012). Alimentos-Aceites y grasas vegetales o animales-Determinación de ácidos grasos libres-Método de prueba. NMX-F-101-SCFI-2012 DOF 2012- 09- 17. Disponible en: <https://platiica.economia.gob.mx/normalizacion/nmx-f-101-scfi-2012/>

Shakinova, F., Shishov, A., Bulatov, A. (2022). Hydrolysis of triglycerides in milk to provide fatty acids as precursors in the formation of deep eutectic solvent for extraction of polycyclic aromatic hydrocarbons. *Talanta*, 237: 122968. doi: 10.1016/j.talanta.2021.122968

Spinsolve (s.f.). Characterizing fatty acids with advanced multinuclear NMR methods. Magritek. Disponible en: <https://magritek.com/wp-content/uploads/2020/03/Application-Note-Characterizing-Fatty-Acids-with-multinuclear-NMR-Magritek-060418-back.pdf>

The MathWorks Inc. (2025). MATLAB version 25.1.0.2973910 (R2025a) Update 1 Natick, Massachusetts: The MathWorks Inc. <https://www.mathworks.com>

The University of Manchester (s.f.) Mass transfer effects on catalytic reactions. Disponible en: https://www.training.itservices.manchester.ac.uk/public/gced/Cat_mass_trans/cat_mass_trans.html

Velázquez, F., Sánchez, F., Romero, I., Elizalde, I. (2025). Hydrodeoxygenation process to obtain green naphtha, kerosene and diesel fractions from mesocarp and kernel oil from *Elaeis guineensis* fruit. *Chemical Papers*, 79:5775-5783. doi: 10.1007/s11696-025-04152-y

CC BY-NC-ND