

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ**

**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**

**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS EN BIOPROCESOS**

**“ANÁLISIS Y EVALUACIÓN DE CICLO DE VIDA Y  
RIESGOS PARA EL DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE  
PROCESAMIENTO SUSTENTABLE DE LÍPIDOS”**

**TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
MAESTRO EN CIENCIAS EN BIOPROCESOS**

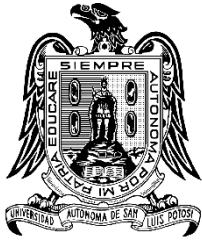
**PRESENTA:**

**I.Q. RAFAEL MONSIVÁIS ALONSO**

**DIRECTORA DE TESIS: DRA. ALICIA ROMÁN MARTÍNEZ**

**SAN LUIS POTOSÍ, S.L.P.**

**SEPTIEMBRE 2020**



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA  
DE SAN LUIS POTOSÍ



**FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS**

**PROGRAMA DE POSGRADO EN CIENCIAS EN BIOPROCESOS**

**“ANÁLISIS Y EVALUACIÓN DE CICLO DE VIDA Y  
RIESGOS PARA EL DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE  
PROCESAMIENTO SUSTENTABLE DE LÍPIDOS”**

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE  
**MAESTRO EN CIENCIAS EN BIOPROCESOS**

PRESENTA:

**I.Q. RAFAEL MONSIVÁIS ALONSO**

DIRECTOR DE TESIS:

**DRA. ALICIA ROMÁN MARTÍNEZ**

SINODALES

PRESIDENTE: DRA. ALICIA ROMÁN MARTÍNEZ \_\_\_\_\_

SECRETARIO: DR. ALEJANDRO ROCHA URIBE \_\_\_\_\_

VOCAL 1: DR. JORGE F. TORO VÁZQUEZ \_\_\_\_\_

VOCAL 2: M.C. FRIDA V. PÉREZ LÓPEZ \_\_\_\_\_  
HUVI INGENIERÍA, SAN LUIS POTOSÍ

VOCAL 3: DR. JUAN IGNACIO LAIGLECIA \_\_\_\_\_  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE RÍO NEGRO, ARGENTINA

**Proyecto realizado en el:**

Laboratorio de Intensificación de Procesos  
y en el Centro de Cómputo de Posgrado de la  
Facultad de Ciencias Químicas de la  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

**Con el financiamiento de:**

Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT)  
Beca-Tesis  
Del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología  
(CONACyT) No. de apoyo: 931139  
No. de convocatoria: 130918

El programa de Maestría en Ciencias en Bioprocesos  
de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí  
Pertenece al Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC)  
del CONACyT, registro 000588 en el Nivel Maestría (Consolidado).  
Número de registro de la beca otorgada por CONACyT: 931139



Thesis: “Análisis y Evaluación de Ciclo de Vida y Riesgos para el Diseño y Optimización  
de Procesamiento Sustentable de Lípidos”

Authors: Rafael Monsiváis Alonso / Alicia Román Martínez

This work is licensed under a [Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).



## **DEDICATORIAS Y AGRADECIMIENTOS**

Primero que nada, quiero agradecer a mi directora de tesis, la Doctora Alicia Román Martínez, ya que, sin su valiosa instrucción y constante apoyo, este trabajo no hubiera sido posible. Su incesante confianza en el proyecto y en mí como investigador, son la piedra angular del mismo.

A mis tutores, el doctor Alejandro Rocha Uribe, y el doctor Jorge Fernando Toro Vázquez por las sugerencias, comentarios, asesoramiento y apoyo en cuestiones teóricas y experimentales que consolidaron el desarrollo del trabajo.

A Humberto López Montiel y Frida Violeta Pérez de HUVI Ingeniería, así como a Alma Delia Montante Montelongo por la propuesta del proyecto y otorgarme la oportunidad de llevarlo a cabo.

A mis compañeros del PCBP que fueron un importante apoyo moral, principalmente a Ismael por su retroalimentación y paciencia, a Emmanuel por su invaluable amistad y a Felipe por su acompañamiento y guía. Agradecimientos especiales a mis compañeros y docentes del Laboratorio de Ingeniería en Alimentos por su asesoramiento en la cuestión de análisis experimentales.

Un agradecimiento especial a mis padres Gabriel y María del Pilar por ser los principales promotores de mis sueños, de mi crecimiento como persona y como profesional. Les dedico el presente trabajo ya que todo lo que soy y lo que he logrado no hubiera sido posible sin su apoyo incondicional y cada una de sus acciones que me han guiado durante mi vida.

A mis hermanos María del Pilar, Elisa, Gabriel y Ernesto; y a mi pareja Ana, que me han apoyado durante toda mi trayectoria, así como a mis amigos y familiares. Gracias por ayudarme a trabajar cuando debía y obligarme a divertirme cuando lo necesitaba.

Finalmente, agradezco a la Universidad Autónoma de San Luis Potosí y la Facultad de Ciencias Químicas por brindar todas las facilidades en mi formación, así como a todos aquellos investigadores y docentes en cuyos hombros pude apoyarme para realizar este proyecto.



## Resumen

Los lípidos constituyen una parte importante de la dieta y participan en numerosas funciones biológicas vitales. Particularmente, el aceite de pescado es un valioso producto rico en ácidos grasos poliinsaturados Omega-3, que en la actualidad se considera atractivo por sus efectos benéficos a la salud humana. Los aceites marinos a menudo se descartan como desecho en muchas industrias pesqueras, principalmente debido a la falta de implementación de procesos innovadores de recuperación y refinado de estos recursos de forma lucrativa y sustentable.

En este trabajo se aborda dicha problemática al proponer una metodología sistemática con el objetivo de integrar los aspectos económicos, ambientales y sociales en las decisiones de diseño de procesos de una refinería de aceite de pescado crudo, enfocado en la producción de concentrados de Omega-3 a partir del aceite residual de una planta procesadora de harina de atún en México. Esto puede realizarse mediante la formulación y solución de un problema de optimización multi-objetivo que incluye opciones de procesamiento convencionales, así como intensificadas dentro una superestructura. El problema MINLP (Mixed Integer Non-Linear Programming) resultante es solucionado con una combinación de métodos lexicográfico y de restricción épsilon ( $\epsilon$ -constraint), para luego someter a una evaluación comparativa las soluciones obtenidas en forma de frente de Pareto utilizando Análisis de Ciclo de Vida y Análisis de Riesgos con la asistencia de un software de simulación de procesos (SuperPro Designer®).

La metodología de búsqueda del diseño de proceso óptimo sustentable arrojó tres configuraciones factibles, destacando la selección de procesos intensificados como nano-neutralización, destilación molecular, transesterificación con ultrasonido y cromatografías argentométrica y con CO<sub>2</sub>. De los cuales, el proceso utilizando cromatografía con CO<sub>2</sub> supercrítico resultó tener mejor desempeño en términos de indicadores de Análisis de Ciclo de Vida y seguridad industrial.

A su vez, este trabajo proporciona una base de datos de propiedades de los compuestos lipídicos y técnicas de procesamiento que puede ser implementada en futuros proyectos. Además, ayuda a demostrar que la revalorización de los aceites marinos, así como de los desechos de la industria alimentaria en general, es importante para lograr un modelo de economía circular dentro del desarrollo productivo sustentable.

**Palabras clave:** Producción de Omega-3, Lípidos, Sustentabilidad, Economía Circular, Análisis de Ciclo de Vida, Optimización Multi-objetivo, MINLP.





## Abstract

Lipids constitute an important part of the diet and participate in numerous vital biological functions. Fish oil, in particular, is a valuable nutritious product, mainly due to its Omega-3 polyunsaturated fatty acids content that is currently attractive for its beneficial health effects. Marine oils are often discarded as waste in many seafood industries, primarily due to the lack of implementation of innovative resource recovery and oil refining processes in a lucrative and sustainable way.

This work tackles this issue by proposing a systematic framework with the objective to integrate the economic, environmental and social aspects together in the process design decisions of a crude fish oil refinery focused on the production of Omega-3 concentrates from waste oil of a tuna processing plant in Mexico. This is addressed by the formulation and solution of a multi-objective optimization design problem that includes conventional and intensified processing options in a superstructure. The resulting MINLP (Mixed Integer Non-Linear Programming) problem is solved with a combination of lexicographic and  $\epsilon$ -constraint methods. Then, the solutions provided in the form of a Pareto front are subject to benchmarking with a Life Cycle Assessment and risk analysis methodology with the assistance of a process simulation software (SuperPro Designer®).

The search methodology of the sustainable optimal process design resulted in three feasible configurations, highlighting the selection of intensified processes such as nano-neutralization, molecular distillation, ultrasound assisted transesterification, and argentometric and CO<sub>2</sub> chromatography. Among these, the process using supercritical CO<sub>2</sub> chromatography has the best performance in terms of Life Cycle Assessment and industrial safety indicators.

At the same time, this work provides a database of lipid compound properties and processing techniques that can be implemented in future projects. In addition, it helps to demonstrate that the revalorization of marine oils, as well as other waste from the food industry in general, is relevant to achieve a circular economy model within sustainable productive development.

**Keywords:** Omega-3 production, Lipids, Sustainability, Circular Economy, Life Cycle Assessment, Multi-objective Optimization, MINLP.



# Contenido

Contenido.....	i
Lista de figuras. ....	ii
Lista de tablas.....	iii
Simbología.....	iv
1. Capítulo Uno. Introducción.....	1
2. Capítulo Dos. Antecedentes teóricos.....	2
3. Capítulo Tres. Metodología de diseño de procesamiento óptimo sustentable.....	3
4. Capítulo Cuatro. Resultados de la optimización de un proceso sustentable de lípidos. ....	4
5. Capítulo Cinco. Conclusiones.....	5
6. Capítulo Seis. Trabajo a Futuro.....	7
7. Referencias.....	8
APÉNDICES.....	34
Apéndice A. Caracterización experimental del aceite de pescado. ....	34
Apéndice B. Factores de separación y rendimientos por proceso.....	44
Apéndice C. Costos operativos (OPEX) y capitales (CAPEX) por procesos. ....	48
Apéndice D. Cálculo de propiedades mediante Contribución de Grupos.....	59
Apéndice E. Cálculo de Análisis de Ciclo de Vida mediante ReCiPe.....	64
Apéndice F. Cálculo de Índice Total de Seguridad Inherente. ....	68
Apéndice G. Código GAMS 24.0.2 para caso corto de desgomado. ....	74

## Lista de figuras.

Figura A.1 Diagrama de flujo del tratamiento y estado de las muestras para su caracterización.....	37
Figura A.2 Comparativa de % AGL contra estado de la muestra en las distintas etapas.....	38
Figura A.3 Comparativa de IP contra estado de la muestra en las distintas etapas.....	39
Figura A.4 Comparativa de IY contra estado de la muestra en las distintas etapas.....	40
Figura A.5 Cromatograma obtenido de la mezcla estándar de esteres metílicos Supelco®.....	41
Figura A.6 Cromatograma obtenido del perfil de ácidos grasos de la muestra M1.....	41
Figura A.7 Cromatograma obtenido del perfil de ácidos grasos de la muestra M2.....	42
Figura A.8 Cromatograma obtenido del perfil de ácidos grasos de la muestra M3.....	42
Figura A.9 Estructura molecular de la trioleína.....	59
Figura A.10 Datos de presión de vapor calculados mediante Contribución de Grupos, y su posterior ajuste para la obtención de los parámetros de la ecuación de Antoine.....	62
Figura A.11 Datos de entalpía de vaporización calculados mediante Contribución de Grupos, y su posterior ajuste para la obtención de parámetros a y b.....	63
Figura A.12 Descripción general de las categorías de impacto cubiertas en la metodología ReCiPe 2016 y su relación con las áreas de protección (Endpoint).....	64

## Lista de tablas.

Tabla A.1 Resultados de los parámetros de calidad medidos en las muestras de aceite.....	38
Tabla A.2 Perfil de ácidos grasos de las muestras de aceite de atún.....	43
Tabla A.3 Temperatura de ebullición ponderada de los triacilglicéridos saturados (k=11).....	63
Tabla A.4 Categorías de impacto ReCiPe, nomenclatura y unidades.....	64
Tabla A.5 Clasificación de contaminantes de todos los procesos de la superestructura.....	65
Tabla A.6 Inventario de Ciclo de Vida para el desgomado ácido.....	66
Tabla A.7 Puntuaciones para calcular el Índice de Seguridad de Sustancias Químicas. ....	68
Tabla A.8 Puntuaciones para calcular el Índice de Seguridad de Procesos.....	69
Tabla A.9 Cálculo del Índice Total de Seguridad Inherente para el proceso de desgomado ácido.....	71

## Simbología

$ACV$	Puntuación ponderada de análisis de ciclo de vida
$C_{CAPEX}$	Costos capitales de inversión (MXN\$)
$C_{OPEX}$	Costos operativos (MXN\$/año)
$C_R$	Costo de reactivo $R_{v_j}$ (MXN\$/kg)
$Cp_k^0$	Capacidad calorífica del componente $k$ (J/molK)
$DP_\omega$	Cantidad de producto Omega-3 donado (MXN\$/año)
$EC_{me}$	Indicador Endpoint ReCiPe
$F_B$	Flujo de salida en el desgomado (kg/h)
$F_0$	Flujo inicial de aceite al proceso (kg/h)
$F_{PUFA}$	Flujo de producto concentrado Omega-3 (kg/h)
$F_{TOTAL}$	Flujo total de productos (kg/h)
$F_{m \rightarrow E,e}$	Factor de conversión ReCiPe Midpoint a Endpoint
$F_{w \rightarrow M,m}$	Factor de conversión ReCiPe flujo a Midpoint
$F_{v_j}^{in}$	Flujo total de entrada a proceso $v_j$ (kg/h)
$F_{v_j}^{out}$	Flujo total de salida de proceso $v_j$ (kg/h)
$F_{v_j}^{k(in)}$	Flujo de entrada del componente $k$ a $v_j$ (kg/h)
$F_{v_j}^{k(out)}$	Flujo de salida del componente $k$ a $v_j$ (kg/h)
$H_k^0$	Entalpía de formación del componente $k$ (J/mol)
$M_C$	Restricción Big-M de costos
$M_F$	Restricción Big-M de flujo
$MC_{me}$	Indicador Midpoint ReCiPe
$NF_e$	Factor de normalización ReCiPe
$NIU_v$	Número de opciones que tiene el proceso $u$ para conectarse
$NIU_{com}$	Número de combinaciones en la superestructura
$OPEX_{Rv}$	Costos de reactivos (MXN\$/kg)
$OPEX_{\Delta H}$	Costos energéticos (MXN\$/kJ)
$P_{ajuste}$	Ajuste a la propiedad calculada por Contribución de Grupos
$P_{CG}$	Valor de la propiedad calculada por Contribución de Grupos
$P_{exp}$	Valor de la propiedad experimental

$P_{SP}$	Ganancias obtenidas por subproductos (MXN\$/año)
$P_{\omega 3}$	Ganancias del aceite Omega-3 producido (MXN\$/año)
$Ph_{inicial}$	Cantidad inicial de fósforo en el aceite (ppm)
$Q_{CO_2}$	Emisiones equivalentes de CO <sub>2</sub> (kg/h)
$Q_w$	Flujos de estrés al medio ambiente (kg/h o kJ/h)
$R_{v_j}$	Flujo de recursos o reactivos al proceso $v_j$ (kg/h)
$r_{v_j}^k$	Término de generación o consumo para $k$
$SR$	Porcentaje de ingresos compartidos (%)
$T_{v_j}$	Temperatura de operación de la unidad $v_j$ (K)
$T_{v_{j+1}}$	Temperatura de salida de la unidad $v_j$ (K)
$TOC$	Porcentaje de retención de tocoferoles (%)
$TP$	Ganancia Total Anual (MXN\$/año)
$v_j$	Unidad de procesamiento $j$
$W_{v_j}$	Flujo de desechos del proceso $v_j$ (kg/h)
$WF_e$	Factor de ponderación ReCiPe
$Y_{djC}$	Variable binaria Big-M de costos
$Y_{djF}$	Variable binaria Big-M de flujo
$\%ARD$	Porcentaje promedio de desviación relativa (%)
$\%RD$	Porcentaje de desviación relativa (%)
$\Delta H_{vap}^k$	Entalpía de vaporización del componente $k$ .
$\Delta H_{v_j}$	Entalpía de entrada al proceso $v_j$ (J/mol)
$\Delta H_{v_{j+1}}$	Entalpía de salida del proceso $v_j$ (J/mol)
$\Delta H_{Tot}$	Entalpía total de la unidad $v_j$ (J/mol)
$\varepsilon$	Restricción épsilon
$\xi_{v_j}^k$	Factor de separación para $k$ en $v_j$
$\rho$	Densidad líquida (g/L)





# **1. Capítulo Uno. Introducción**

## **2. Capítulo Dos. Antecedentes teóricos**

### **3. Capítulo Tres. Metodología de diseño de procesamiento óptimo sustentable**

## **4. Capítulo Cuatro. Resultados de la optimización de un proceso sustentable de lípidos.**

## 5. Capítulo Cinco. Conclusiones

La revalorización de desechos y subproductos, principalmente en industrias alimenticias y oleoquímicas, es parte fundamental dentro de la necesaria transición hacia un modelo económico más sustentable y de carácter circular. En la metodología propuesta en el presente trabajo, diferentes herramientas y técnicas bajo este enfoque sustentable se lograron integrar para abordar un caso de estudio que involucra la producción de concentrados de Omega-3 a partir de aceite de pescado desechado.

De manera objetiva, los resultados obtenidos son los siguientes:

- i) Se consiguió recopilar una base de datos con propiedades físicas y termodinámicas de compuestos lipídicos, así como de los métodos de predicción adecuados para complementar las propiedades cuando escasean datos experimentales.
- ii) La base de datos incluye también información teórica y práctica para la síntesis de procesos de refinación de aceites y concentrado de ácidos grasos de interés nutracéutico, lo que sirve como precedente académico para futuros trabajos relacionados al procesamiento de lípidos.
- iii) Se consiguió realizar una caracterización básica experimental de las muestras de aceite de atún para determinar parámetros críticos de calidad, así como su perfil de ácidos grasos y corroborar la presencia de Omega-3, particularmente DHA en un 26% aproximadamente. Estos datos son prometedores para buscar una aplicación en la industria y llevar los resultados obtenidos a la práctica.
- iv) Se formuló un modelo matemático de optimización que permite evaluar los tres criterios de la sustentabilidad de manera funcional, además de incluir una evaluación comparativa utilizando un enfoque más profundo del Análisis de Ciclo de Vida, así como del análisis de riesgos. Esta metodología permitió obtener un diseño óptimo sustentable que mejora en gran medida los indicadores analizados en comparación con un proceso tradicional. La implementación de las opciones de proceso se realizó en el simulador SuperPro Designer® para obtener resultados rigurosos.

- v) La superestructura planteada permite visualizar una gran cantidad de procesos disponibles para el procesamiento de aceites marinos, y tiene el potencial de ser replanteada con otros procesos nuevos para extender su aplicación a distintos tipos de sistemas oleoquímicos.
- vi) Se evaluaron opciones de Intensificación de Procesos, obteniendo resultados prometedores para su implementación en comparación con opciones convencionales de procesamiento.
- vii) El proceso diseñado demostró ser rentable económicamente, además de tener la capacidad de incluir un beneficio social al donar un porcentaje de los suplementos producidos a las comunidades más necesitadas.

Con base en los resultados obtenidos de los distintos escenarios, la elección de alternativas en diferentes etapas puede tener un efecto significativo en el impacto ambiental, económico o social final inherente al producto, generando así varias formas de mejorar el modelo de Economía Circular. El objetivo principal de la Economía Circular es optimizar los flujos de material y energía a través del funcionamiento cuasi-cíclico del sistema, de la misma manera que funciona un ecosistema natural. En este contexto, el diseño de proceso más rentable no siempre es la opción más sustentable y, por lo tanto, maximizar la ventaja económica no garantiza la implementación de una Economía Circular.

El desarrollo futuro de la industria no debe dejar de lado los problemas sociales y debe enfocarse en proporcionar productos de calidad y accesibles a las comunidades que representan la fuerza laboral y el progreso de la humanidad de manera cooperativa. En conclusión, la revalorización de residuos de alimentos (aceite de pescado) en un enfoque de Economía Circular es una oportunidad para cerrar el nexo entre alimentos, agua y energía, así como incorporar la perspectiva sustentable al progreso humano.

## 6. Capítulo Seis. Trabajo a Futuro

Algunas posibles aplicaciones pueden surgir al analizar los resultados y limitantes del presente trabajo, del cual se desprenden distintos enfoques de trabajo a futuro:

- i) En esta tesis no toma en cuenta la variabilidad de la composición en aceites marinos, ya que su perfil lipídico depende de la región y la estación del año en que son pescados. Esto puede llevar a la implementación de un problema de optimización bajo incertidumbre y análisis de sensibilidad que permita lidiar con esta situación.
- ii) Incorporar otros análisis a la caracterización experimental del aceite con la finalidad de tener datos más completos que sean de utilidad para el modelado del proceso; por ejemplo, calcular propiedades termodinámicas o el perfil de triacilglicéridos del aceite.
- iii) Probar otras funciones objetivo como valor presente neto o retorno sobre la inversión, donde se incluyen flujos de efectivo.
- iv) Trabajo actual y futuro implica la incorporación de otros índices de evaluación social, ya que es el criterio de la sustentabilidad que menor atención suele recibir en el diseño de procesos.
- v) Incorporar la integración del tratamiento de aguas residuales y desechos del proceso.

Sin embargo, se debe tomar en cuenta que, aumentar la complejidad del sistema al incorporar y evaluar mayor número de funciones objetivo sustentables, o al agregar opciones/alternativas de proceso a la superestructura, puede generar fuentes de no-convexidades y complicar la resolución del problema de optimización. Por lo tanto, la implementación de estrategias de modelado matemático y una evaluación continua del modelo propuesto es siempre necesaria para garantizar la correcta resolución del mismo.

## 7. Referencias

- ACGIH. (2012). *TLVs and BEIs. Based on the Documentation of the Threshold Limit Values for Chemical Substances and Physical Agents & Biological Exposure Indices. Appendix B* (7<sup>ma</sup> ed.). American Conference of Governmental Industrial Hygienists (ACGIH).
- Adeoti, I. A., & Hawboldt, K. (2014). A review of lipid extraction from fish processing by-product for use as a biofuel. *Biomass and Bioenergy*, 63, 330–340.
- Akoh, C. C., & Min, D. B. (2002). *Food Lipids: Chemistry, Nutrition and Biotechnology* (2<sup>a</sup> ed.). Marcel Dekker Inc.
- Alfa Laval Inc. (2010). *Multiple choice for fats and oils refining: Alfa Laval degumming and neutralization solutions*. 2010 Report, Sweden.
- Alkio, M., Gonzalez, C., Jäntti, M., & Aaltonen, O. (2000). Purification of polyunsaturated fatty acid esters from tuna oil with supercritical fluid chromatography. *JAOCS, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 77(3), 315–321.
- Álvarez del Castillo-Romo, A., Morales-Rodríguez, R., & Román-Martínez, A. (2018). Multiobjective optimization for the socio-eco-efficient conversion of lignocellulosic biomass to biofuels and bioproducts. *Clean Technologies and Environmental Policy*, 20(3), 603–620.
- Ambrose, D. (1978). Correlation and estimation of vapor–liquid critical properties. I. Critical temperatures of organic components. *NPL Report Chem. National Physical Laboratory, Teddington, UK*, 92(09).
- André Feil, A., & Schreiber, D. (2017). Sustainability and sustainable development: unraveling overlays and scope of their meanings. *Cadernos EBAPE.BR*, 14(3), 667–681.
- Angulo, B., Fraile, J. M., Gil, L., & Herrerías, C. I. (2020). Comparison of Chemical and Enzymatic Methods for the Transesterification of Waste Fish Oil Fatty Ethyl Esters with Different Alcohols. *ACS Omega*, 5(3), 1479–1487.
- AOCS. (2003a). *Introduction to the Processing of Fats and Oils*. American Oil Chemists' Society. Champaign, Illinois.
- AOCS. (2003b). *Official method Cd 18-90. Sampling and analysis of commercial fats and oils: Anisidine value*. American Oil Chemists' Society.
- AOCS. (2003c). *Official method Cd 1d-92. Sampling and analysis of commercial fats and oils: Iodine Value of Fats and Oils Cyclohexane-Acetic Acid Method*.



American Oil Chemists' Society.

AOCS. (2003d). *Official method Cd 8b-90. Sampling and analysis of commercial fats and oils: Peroxide value*. American Oil Chemists' Society.

AOCS. (2009a). *Official method Ca 5a-40. Sampling and analysis of commercial fats and oils: free fatty acids*. American Oil Chemists' Society.

AOCS. (2009b). *Official Method Ce 1b-89. Sampling and analysis of commercial fats and oils: fatty acid composition of marine oils by GLC*. American Oil Chemists' Society.

Arab-tehrany, E., Jacquot, M., Gaiani, C., Imran, M., Linder, M., Universit, N., Les, V., & Cedex, N. (2012). Beneficial effects and oxidative stability of polyunsaturated fatty acids. *Trends in Food Science & Technology*, 25(1), 24–33.

Armenta, R. E., Vinatoru, M., Burja, A. M., Kralovec, J. A., & Barrow, C. J. (2007). Transesterification of Fish Oil to Produce Fatty Acid Ethyl Esters Using Ultrasonic Energy. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 84(11), 1045–1052.

Arora, J. S. (2017). Multi-objective Optimum Design Concepts and Methods. En *Introduction to Optimum Design* (4th Ed., pp. 771–794). Elsevier Inc.

Ashour, I., & Wennersten, R. (1989). Modified Carnahan-Starling-Soave equation for the calculation of vapor pressures for saturated fatty acids. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2(2–3), 73–79.

Avinash, A., & Murugesan, A. (2017). Economic analysis of biodiesel production from waste cooking oil. *Energy Sources, Part B: Economics, Planning, and Policy*, 12(10), 890–894.

Azapig, A., & Perdan, S. (2000). Indicators of sustainable development for industry: a general framework. *Process Safety and Environmental Protection*, 78(4), 243–261.

Bakshi, B. R. (2014). Methods and tools for sustainable process design. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 6, 69–74.

Balle, T., & Cowen, D. (2013). Enzymatic concentration of Omega-3 fatty acids. En F. De Meester, R. R. Watson, & S. Zibadi (Eds.), *Omega-6/3 Fatty Acids: Functions, Sustainability Strategies and Perspectives* (pp. 341–352). Springer Science & Business Media.

- Banchero, M., Kusumaningtyas, R. D., & Gozzelino, G. (2014). Reactive distillation in the intensification of oleic acid esterification with methanol - A simulation case-study. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 20(6), 4242–4249.
- Barr, W. J., & Landis, A. E. (2018). Comparative life cycle assessment of a commercial algal multiproduct biorefinery and wild caught fishery for small pelagic fish. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 23(5), 1141–1150.
- Baumann, H., & Tillman, A.-M. (2004). *The Hitch Hiker's Guide to LCA - An orientation in LCA methodology and application* (1.3<sup>a</sup> ed.). Studentlitteratur AB, Lund.
- Beare-Rogers, J. L., Dieffenbacher, A., & Holm, J. V. (2001). Lexicon of lipid nutrition (IUPAC Technical Report). *Pure and Applied Chemistry*, 73(4), 685–744.
- Belarbi, E. H., Molina, E., & Chisti, Y. (2000). A process for high yield and scaleable recovery of high purity eicosapentaenoic acid esters from microalgae and fish oil. *Enzyme and Microbial Technology*, 26(7), 516–529.
- Belotti, P., Lee, J., Liberti, L., Margot, F., & Wächter, A. (2009). Branching and bounds tightening techniques for non-convex MINLP. *Optimization Methods and Software*, 24(4–5), 597–634.
- Bernal, J. L., Martín, M. T., & Toribio, L. (2013). Supercritical fluid chromatography in food analysis. *Journal of Chromatography A*, 1313, 24–36.
- Bertran, M. O., Frauzem, R., Sanchez-Arcilla, A. S., Zhang, L., Woodley, J. M., & Gani, R. (2017). A generic methodology for processing route synthesis and design based on superstructure optimization. *Computers and Chemical Engineering*, 106, 892–910.
- Bhattacharyya, S., & Bhattacharyya, D. K. (1989). Biorefining of high acid rice bran oil. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 66(12), 1809–1811.
- Bhosle, B. M., & Subramanian, R. (2005). New approaches in deacidification of edible oils - A review. *Journal of Food Engineering*, 69(4), 481–494.
- Biegler, L. T., & Grossmann, I. E. (2004). Retrospective on optimization. *Computers and Chemical Engineering*, 28(8), 1169–1192.
- Biegler, L. T., Westerberg, A., & Grossmann, I. E. (1999). *Systematic Methods of Chemical Process Design*. Prentice Hall International Series.
- Bimbo, A. P. (1998). Guidelines for characterizing food-grade fish oil. *INFORM*, 9(5), 473–483.

- Bimbo, A. P. (2007). The Production and Processing of Marine Oils. En H. Breivik (Ed.), *Long Chain Omega-3 Specialty Oils* (pp. 77–109). The Oily Press Bridgwater England.
- Blanco Rodríguez, P. (2007). *Diseño de una planta piloto de refinación de aceites vegetales*. (tesis de pregrado) Universidad de Cádiz, España.
- Bockisch, M. (1998). *Fats and oils handbook*. AOCS Press. Champaign, Illinois.
- Bonilla-Mendez, J. R., & Hoyos-Concha, J. L. (2018). Methods of extraction, refining and concentration of fish oil as a source of omega-3 fatty acids. *Corpoica Ciencia y Tecnología Agropecuaria*, 19(3), 645–668.
- Breivik, H. (2007). *Long-chain omega-3 specialty oils*. Woodhead Publishing in Food Science, Technology and Nutrition. The Oily Press: Porsgrunn, Norway.
- Breivik, H., Haraldsson, G. G., & Kristinsson, B. (1997). Preparation of highly purified concentrates of eicosapentaenoic acid and docosahexaenoic acid. *JAOCS, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 74(11), 1425–1429.
- Bucio, S. L., Solaesa, Á. G., Sanz, M. T., Melgosa, R., Beltrán, S., & Sovová, H. (2015). Kinetic study for the ethanolysis of fish oil catalyzed by Lipozyme® 435 in different reaction media. *Journal of Oleo Science*, 64(4), 431–441.
- Calder, P. C. (2014). Very long chain omega-3 (n-3) fatty acids and human health. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 116(10), 1280–1300.
- Carvajal, A. K., & Mozuraityte, R. (2016). Fish Oils: Production and Properties. *Encyclopedia of Food and Health*, 693–698.
- Carvajal, Ana Karina, Mozuraityte, R., Standal, I. B., Storrø, I., & Aursand, M. (2014). Antioxidants in fish oil production for improved quality. *JAOCS, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 91(9), 1611–1621.
- Carvalho, A., Mimoso, A. F., Mendes, A. N., & Matos, H. A. (2014). From a literature review to a framework for environmental process impact assessment index. *Journal of Cleaner Production*, 64, 36–62.
- Ceriani, R., Gani, R., & Liu, Y. A. (2013). Prediction of vapor pressure and heats of vaporization of edible oil/fat compounds by group contribution. *Fluid Phase Equilibria*, 337, 53–59.
- Ceriani, R., Gani, R., & Meirelles, A. J. A. (2009). Prediction of heat capacities and heats of vaporization of organic liquids by group contribution methods. *Fluid Phase Equilibria*, 283(1–2), 49–55.

- Ceriani, R., Gonçalves, C. B., & Coutinho, J. A. P. (2011). Prediction of viscosities of fatty compounds and biodiesel by group contribution. *Energy and Fuels*, 25(8), 3712–3717.
- Ceriani, R., & Meirelles, A. J. A. (2004). Simulation of continuous deodorizers: Effects on product streams. *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 81(11), 1059–1069.
- Chakrabarty, M. M. (2003). *Chemistry and Technology of Oils & Fats* (Vol. 1). Allied Publishers.
- Chakraborty, K., & Joseph, D. (2015). Production and characterization of refined oils obtained from indian oil sardine (*Sardinella longiceps*). *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 63(3), 998–1009.
- Chakraborty, K., & Raj, R. P. (2007). Eicosapentaenoic acid enrichment from sardine oil by argentation chromatography. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 55(18), 7586–7595.
- Chein-Hsiun, T. (1995). Group-contribution estimation of critical temperature with only chemical structure. *Chemical Engineering Science*, 50(22), 3515–3520.
- Chircop, K., & Zammit-Mangion, D. (2013). On Epsilon-Constraint Based Methods for the Generation of Pareto Frontiers. *Journal of Mechanics Engineering and Automation*, 3, 279–289.
- Choukri, A., Kinany, M. A., Gibon, V., Tirtiaux, A., & Jamil, S. (2001). Improved oil treatment conditions for soft degumming. *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 78(11), 1157–1160.
- Ciriminna, R., Meneguzzo, F., Delisi, R., & Pagliaro, M. (2017). Enhancing and improving the extraction of omega-3 from fish oil. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, 5, 54–59.
- Constantinou, L., & Gani, R. (1994). New Group Contribution Method for Estimating Properties of Pure Compounds. *AIChE Journal*, 40(10), 1697–1710.
- Cowan, J. C. (1976). Degumming, refining, bleaching, and deodorization theory. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 53(6), 344–346.
- Crexi, V. T., Monte, M. L., Soares, L. A. de S., & Pinto, L. A. A. (2010). Production and refinement of oil from carp (*Cyprinus carpio*) viscera. *Food Chemistry*, 119(3), 945–950.
- Cunha, D. C., Crexi, T., Antonio, L., & Pinto, A. (2009). Winterization of fish oil with solvent. *Ciência e Tecnologia de Alimentos*, 29(1), 207–213.

- Cunico, L. P., Ceriani, R., Sarup, B., O'Connell, J. P., & Gani, R. (2014). Data, analysis and modeling of physical properties for process design of systems involving lipids. *Fluid Phase Equilibria*, *362*, 318–327.
- Cunico, L. P., Hukkerikar, A. S., Ceriani, R., Sarup, B., & Gani, R. (2013). Molecular structure-based methods of property prediction in application to lipids: A review and refinement. *Fluid Phase Equilibria*, *357*, 2–18.
- Damaceno, D. S., Perederic, O. A., Ceriani, R., Kontogeorgis, G. M., & Gani, R. (2018). Improvement of predictive tools for vapor-liquid equilibrium based on group contribution methods applied to lipid technology. *Fluid Phase Equilibria*, *470*, 249–258.
- Das, U. (2006). Essential Fatty Acids - A Review. *Current Pharmaceutical Biotechnology*, *7*(6), 467–482.
- Dayton, C. L. G. (2014). Enzymatic Interesterification. En W.E. Farr, A. Proctor (Ed.), *Green Vegetable Oil Processing* (pp. 205–224). AOCS Press.
- Dayton, C. L. G., & Galhardo, F. (2014). Enzymatic Degumming. En W.E. Farr, A. Proctor (Ed.), *Green Vegetable Oil Processing*. (pp. 107–145). AOCS Press.
- De Greyt, W. F. J. (2012). Current and future technologies for the sustainable and cost-efficient production of high quality food oils. *European Journal of Lipid Science and Technology*, *114*(10), 1126–1139.
- Dean, J. A. (1999). *Lange's Handbook of Chemistry*. (2<sup>a</sup> ed.). McGraw-Hill.
- DeMan, J. M. (1999). *Principles of Food Chemistry*. (3<sup>a</sup> ed.). NLN publications. Springer, USA.
- Diaz-Tovar, C. A., Ceriani, R., Gani, R., & Bent, S. (2010). Systematic Methodology and Property Prediction of Fatty Systems for Process Design / Analysis in the Oil and Fat Industry. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, *27*(03), 401–412.
- Díaz-Tovar, C. A., Gani, R., & Sarup, B. (2011). Lipid technology: Property prediction and process design/analysis in the edible oil and biodiesel industries. *Fluid Phase Equilibria*, *302*(1–2), 284–293.
- Diaz-Tovar, C. A., Mustaffa, A. A., Hukkerikar, A., Quaglia, A., Sin, G., Kontogeorgis, G., Sarup, B., & Gani, R. (2011). Lipid Processing Technology: Building a Multilevel Modeling Network. *Computer Aided Chemical Engineering*, *29*, 256–260.
- Dijkstra, A. J. (2010). Enzymatic degumming. *European Journal of Lipid Science and Technology*, *112*, 1178–1189.

- Dijkstra, A. J. (2013). Degumming. En *Edible Oil Processing from a Patent Perspective*. (pp. 121–155). Springer Science.
- Dijkstra, A. J., & Van Opstal, M. (1989). The total degumming process. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 66(7), 1002–1009.
- Dillon, J. T., Aponte, J. C., Tarozo, R., & Huang, Y. (2013). Purification of omega-3 polyunsaturated fatty acids from fish oil using silver-thiolate chromatographic material and high performance liquid chromatography. *Journal of Chromatography A*, 1312, 18–25.
- Dinamarca, E., Garrido, F., & Valenzuela, A. (1990). Simple high vacuum distillation equipment for deodorizing fish oil for human consumption. *Lipids*, 25(3), 170–171.
- Ding, H., Ye, W., Wang, Y., Wang, X., Li, L., Liu, D., Gui, J., Song, C., & Ji, N. (2018). Process intensification of transesterification for biodiesel production from palm oil: Microwave irradiation on transesterification reaction catalyzed by acidic imidazolium ionic liquids. *Energy*, 144, 957–967.
- Dołowy, M., & Pyka, A. (2015). Chromatographic methods in the separation of long-chain mono- and polyunsaturated fatty acids. *Journal of Chemistry*, 2015, 1–20.
- Dyerberg, J., & Bang, H. O. (1979). Haemostatic Function and Platelet Polyunsaturated Fatty Acids in Eskimos. *The Lancet*, 314(8140), 433–435.
- Eslick, G. D., Howe, P. R. C., Smith, C., Priest, R., & Bensoussan, A. (2009). Benefits of fish oil supplementation in hyperlipidemia: a systematic review and meta-analysis. *International Journal of Cardiology*, 136(1), 4–16.
- Fagan, P., & Wijesundera, C. (2013). Rapid isolation of Omega-3 long-chain polyunsaturated fatty acids using monolithic high performance liquid chromatography columns. *Journal of Separation Science*, 36(11), 1743–1752.
- Fahy, E., Subramaniam, S., Murphy, R. C., Nishijima, M., Raetz, C. R. H., Shimizu, T., Spener, F., van Meer, G., Wakelam, M. J. O., & Dennis, E. A. (2009). Update of the LIPID MAPS comprehensive classification system for lipids. *Journal of Lipid Research*, 50(Supplement), S9–S14.
- Fang, Y., Gu, S., Zhang, J., Liu, S., Ding, Y., & Liu, J. (2018). Deodorisation of fish oil by nanofiltration membrane process: focus on volatile flavour compounds and fatty acids composition. *International Journal of Food Science and Technology*, 53(3), 692–699.
- FAO. (2017). *Standard for Fish Oils*. Food and Agriculture Organization of the United Nations. Codex Alimentarius Commission Report STAN 329-2017.

- Farooqui, A. A. (2009). *Beneficial effects of fish oil on human brain*. (1<sup>a</sup> Ed.). Springer Science.
- Feng, X., Patterson, D. A., Balaban, M., Fauconnier, G., & Emanuelsson, E. A. C. (2013). The spinning cloth disc reactor for immobilized enzymes: A new process intensification technology for enzymatic reactions. *Chemical Engineering Journal*, 221, 407–417.
- Ferdosh, S., Sarker, Z. I., Norulaini, N., Oliveira, A., Yunus, K., Chowdury, A. J., Akanda, J., & Omar, M. (2015). Quality of Tuna Fish Oils Extracted from Processing the By-Products of Three Species of Neritic Tuna Using Supercritical Carbon Dioxide. *Journal of Food Processing and Preservation*, 39(4), 432–441.
- Fernandez-Lafuente, R. (2010). Lipase from *Thermomyces lanuginosus*: Uses and prospects as an industrial biocatalyst. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, 62(3–4), 197–212.
- Finco, A. M. de O., Mamani, L. D. G., Carvalho, J. C. de, de Melo Pereira, G. V., Thomaz-Soccol, V., & Soccol, C. R. (2017). Technological trends and market perspectives for production of microbial oils rich in omega-3. *Critical Reviews in Biotechnology*, 37(5), 656–671.
- Fiori, L., Manfrini, M., & Castello, D. (2014). Supercritical CO<sub>2</sub> fractionation of Omega-3 lipids from fish by-products: Plant and process design, modeling, economic feasibility. *Food and Bioproducts Processing*, 92(2), pp.120–132.
- Fiori, L., Volpe, M., Lucian, M., Anesi, A., Manfrini, M., & Guella, G. (2017). From Fish Waste to Omega-3 Concentrates in a Biorefinery Concept. *Waste and Biomass Valorization*, 8(8), 2609–2620.
- Fischedick, M., Roy, J., Abdel-Aziz, A., Acquaye, A., Allwood, J. M., Ceron, J. P., Geng, Y., Kheshgi, H., Lanza, A., Perczyk, D., Price, L., Santalla, E., Sheinbaum, C., & Tanaka, K. (2014). Chapter 10: Industry. En *Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change. Contribution of Working Group III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change*. (pp. 739–810). Cambridge University Press.
- Floudas, C. A. (1995). *Nonlinear and Mixed-Integer Optimization. Fundamentals and Applications*. New York: Oxford University Press.
- Fournier, V., Destailats, F., Lambelet, P., Dionisi, F., Sébédio, J.-L., & Berdeaux, O. (2007). Degradation products formed from long-chain PUFA during deodorization of fish oil. *Lipid Technology*, 19(1), 9–11.

- Freund, H., & Sundmacher, K. (2008). Towards a methodology for the systematic analysis and design of efficient chemical processes. Part 1. From unit operations to elementary process functions. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 47(12), 2051–2060.
- Gani, R., & Marrero, J. (2001). Group-contribution based estimation of pure component properties. *Fluid Phase Equilibria*, 183, 183–208.
- García-Moreno, P. J., Guadix, A., Gómez-Robledo, L., Melgosa, M., & Guadix, E. M. (2013). Optimization of bleaching conditions for sardine oil. *Journal of Food Engineering*, 116(2), 606–612.
- García-Santander, C. M., Gómez-Rueda, S. M., De Lima Da Silva, N., De Camargo, C. L., Kieckbusch, T. G., & Wolf Maclel, M. R. (2012). Measurements of normal boiling points of fatty acid ethyl esters and triacylglycerols by thermogravimetric analysis. *Fuel*, 92(1), 158–161.
- García, A., Álvarez, S., Riera, F., Álvarez, R., & Coca, J. (2006). Sunflower oil miscella degumming with polyethersulfone membranes: Effect of process conditions and MWCO on fluxes and rejections. *Journal of Food Engineering*, 74(4), 516–522.
- Gargalo, C. L., Cheali, P., Posada, J. A., Gernaey, K. V., & Sin, G. (2016). Economic Risk Assessment of Early Stage Designs for Glycerol Valorization in Biorefinery Concepts. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55, 6801–6814.
- Ghasemian, S., Sahari, M. A., Barzegar, M., & Ahmadi Gavlighi, H. (2017). Omega-3 PUFA concentration by a novel PVDF nano-composite membrane filled with nano-porous silica particles. *Food Chemistry*, 230, 454–462.
- Ghasemian, S., Sahari, M. A., Barzegar, M., & Gavlighi, H. A. (2015). Concentration of Omega-3 polyunsaturated fatty acids by polymeric membrane. *International Journal of Food Science and Technology*, 50(11), 2411–2418.
- Ghisellini, P., Cialani, C., & Ulgiati, S. (2016). A review on circular economy: The expected transition to a balanced interplay of environmental and economic systems. *Journal of Cleaner Production*, 114(7), 11–32.
- Gironi, F., & Maschietti, M. (2006). Separation of fish oils ethyl esters by means of supercritical carbon dioxide: Thermodynamic analysis and process modelling. *Chemical Engineering Science*, 61(15), 5114–5126.
- Gmehling, J., Li, J., & Schiller, M. (1993). A Modified UNIFAC Model. 2. Present Parameter Matrix and Results for Different Thermodynamic Properties. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 32(1), 178–193.
- GOED. (2017). *GOED best practice guidelines: oxidation control (Reporte 2017)*.



- Goedkoop, M., & Spriensma, R. (2001). *The Eco-indicator 99 - A damage oriented method for Life Cycle Impact Assessment. Manual for Designers. Report* (3<sup>a</sup> ed.). PRé Consultants B.V.
- Gogate, P. R. (2008). Cavitational reactors for process intensification of chemical processing applications: A critical review. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification.*, 47(4), 515–527.
- Goodrum, J. W., & Geller, D. P. (2002). Rapid thermogravimetric measurements of boiling points and vapor pressure of saturated medium- and long-chain triglycerides. *Bioresource Technology*, 84(1), 75–80.
- Grace & Co., W. R. (2011). *TRISYL® Silica Gel for Refining Edible Oil*. Disponible en: [www.grace.com/food-and-beverage/en-US/edible-oil-refining-aids](http://www.grace.com/food-and-beverage/en-US/edible-oil-refining-aids).
- Grand View Research. (2018). Omega 3 Market Size, Share & Trend Analysis Report By Application (Supplements & Functional Foods, Pharmaceuticals, Infant formulas, Pet & Animal Feed), By Region, And Segment Forecasts, 2012-2022. (*Industry Analysis Report*).
- Gullapalli, R. P. (2010). Review: Soft Gelatin Capsules (Softgels). *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 99(10), 4107–4148.
- Gunstone, F. D. (2008). The Major Sources of Oils and Fats. In *Oils and Fats in the Food Industry: Food Industry Briefing Series*. (pp. 11–25). Blackwell Publishing Ltd.
- Gunstone, F. D., Harwood, J. L., & Dijkstra, A. (2007). *The Lipid Handbook* (3<sup>a</sup> ed.). CRC Press.
- Gupta, M. K. (2017). *Practical Guide to Vegetable Oil Processing*. (2<sup>a</sup> ed.). AOCS Press. Elsevier Inc.
- Hamm, W., Hamilton, R. J., & Desmet, G. C. (2013). *Edible Oil Processing* (2<sup>a</sup> ed.). Wiley-Blackwell.
- Haraldsson, G. G., & Kristinsson, B. (1998). Separation of eicosapentaenoic acid and docosahexaenoic acid in fish oil by kinetic resolution using lipase. *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 75(11), 1551–1556.
- Hatayama, H. K., Chen, J. J., De Vera, E. R., Stephens, R. D., & Storm, D. L. (1980). *A Method for Determining the Compatibility of Hazardous Wastes*. Environmental Protection Agency (EPA).
- Heikkilä, A. M. (1999). Inherent safety in process plant design. An index-based approach. *VTT Publications* (tesis doctoral). Technical Research Centre of Finland. Espoo, Finlandia.

- Hielscher Ultrasound Technology. (2020). *Biodiesel Production & Transesterification*. Disponible en: [https://www.hielscher.com/biodiesel\\_transesterification\\_01.htm](https://www.hielscher.com/biodiesel_transesterification_01.htm)
- Ho, W. W. S., Ng, H. K., & Gan, S. (2016). Advances in ultrasound-assisted transesterification for biodiesel production. *Applied Thermal Engineering*, 100, 553–563.
- Holm, H. C., & Cowan, D. (2008). The evolution of enzymatic interesterification in the oils and fats industry. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 110(8), 679–691.
- Homayooni, B., Sahari, M. A., & Barzegar, M. (2014). Concentrations of omega-3 fatty acids from rainbow sardine fish oil by various methods. *International Food Research Journal*, 21(2), 743–748.
- Huerta-Yépez, S., Tirado-Rodriguez, A. B., & Hankinson, O. (2016). Role of diets rich in omega-3 and omega-6 in the development of cancer. *Boletín Medico Del Hospital Infantil de Mexico*, 73(6), 446–456.
- Huijbregts, M. A. J., Steinmann, Z. J. N., Elshout, P. M. F., Stam, G., Verones, F., Vieria, M., Zijp, M., Hollander, A., & Van Zelm, R. (2016). ReCiPe2016: A harmonized life cycle impact assessment method at midpoint and endpoint level. *The International Journal of Life Cycle Assessment*, 22, 138–147.
- Hukkerikar, A. S., Sarup, B., Ten Kate, A., Abildskov, J., Sin, G., & Gani, R. (2012). Group-contribution + (GC +) based estimation of properties of pure components: Improved property estimation and uncertainty analysis. *Fluid Phase Equilibria*, 321, 25–43.
- Innis, S. M. (2007). Dietary (n-3) Fatty Acids and Brain Development. *The Journal of Nutrition*, 137(4), 855–859.
- International Standards Organization. (2001). *ISO 5555:2001. Animal and vegetable fats and oils - Sampling*.
- Ismail, A., Bannenberg, G., Rice, H. B., Schutt, E., & Mackay, D. (2016). Oxidation in EPA and DHA rich oils: An overview. *Lipid Technology*, 28(3–4), 55–59.
- ISO 14040. (2006). Environmental management - Life Cycle Assessment - Principles and Framework. En *International Organization for Standardization*.
- ISO 14044. (2006). Environmental management - Life Cycle Assessment - Requirements and guidelines. En *International Organization for Standardization*
- Ivanovs, K., & Blumberga, D. (2017). Extraction of fish oil using green extraction methods: A short review. *Energy Procedia*, 128, 477–483.

- Jayathilakan, K., Sultana, K., Radhakrishna, K., & Bawa, A. S. (2012). Utilization of byproducts and waste materials from meat, poultry and fish processing industries: a review. *Journal of Food Science and Technology*, 49(3), 278–293.
- Jefferies, D., Muñoz, I., Hodges, J., King, V. J., Aldaya, M., Ertug, A., Milà, L., & Hoekstra, A. Y. (2012). Water Footprint and Life Cycle Assessment as approaches to assess potential impacts of products on water consumption. Key learning points from pilot studies on tea and margarine. *Journal of Cleaner Production*, 33, 155–166.
- Joback, K. G., & Reid, R. C. (1987). Estimation of pure component properties from Group Contributions. *Chemical Engineering Communications*, 57(1–6), 233–243.
- Johnson, E. P. (2012). Carbon footprints of heating oil and LPG heating systems. *Environmental Impact Assessment Review*, 35, 11–22.
- Jones, M., Forero-Hernandez, H., Zubov, A., Sarup, B., & Sin, G. (2018). Superstructure Optimization of Oleochemical Processes with Surrogate Models. *Computer Aided Chemical Engineering*. 44(1), 277-282.
- Kalakul, S., Malakul, P., Siemanond, K., & Gani, R. (2013). Software Integration of Life Cycle Assessment and Economic Analysis for Process Evaluation. *Proceedings of the 6th International Conference on Process Systems Engineering (PSE ASIA)*. 917–922.
- Kamarden, H., Kidam, K., Hashim, H., Hassim, M. H., Shahlan, S. S., Ngadi, N., Johari, A., Kamaruddin, M. J., & Ten, J. Y. (2018). Process simulation of integrated palm oil mill, refinery and oleochemical processes. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 458(012062), 1-6.
- Kashiwagi, S., & Huang, P. L. (2012). Dietary Supplements and Cardiovascular Disease: What is the Evidence and What Should We Recommend? *Cardiovascular Risk Factors, March*, 449-464.
- Kaynak, G., Ersoz, M., & Kara, H. (2004). Investigation of the properties of oil at the bleaching unit of an oil refinery. *Journal of Colloid and Interface Science*, 280(1), 131–138.
- Khatri, P., & Jain, S. (2017). Environmental life cycle assessment of edible oils: A review of current knowledge and future research challenges. *Journal of Cleaner Production*, 152, 63–76.
- Kim, S. jin, & Kim, H. K. (2016). Production of Omega-3 Fatty Acid Ethyl Esters from Menhaden Oil Using *Proteus vulgaris* Lipase-Mediated One-Step Transesterification and Urea Complexation. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 179(2), 347–360.

- Klincewicz, K. M., & Reid, R. C. (1984). Estimation of Critical Properties with Group Contribution Methods. *AIChE Journal*, 30(1), 137–142.
- Kolska, Z., Kukul, J., Zábanský, M., & Ruzicka, V. (2008). Estimation of the Heat Capacity of Organic Liquids as a Function of Temperature by a Three-Level Group Contribution Method. *Industrial & Engineering Chemical Research*, 47, 2075–2085.
- Kolská, Z., Ruzicka, V., & Gani, R. (2005). Estimation of the Enthalpy of Vaporization and the Entropy of Vaporization for Pure Organic Compounds at 298.15 K and at Normal Boiling Temperature by a Group Contribution Method. *Industrial & Engineering Chemical Research*, 44, 8436–8454.
- Kossoy, R. A., & Akhmetshin, Y. G. (2012). Simulation-based approach to design of inherently safer processes. *Process Safety and Environmental Protection*, 90(5), 349–356.
- Kravanja, S., Šilih, S., & Kravanja, Z. (2005). The multilevel MINLP optimization approach to structural synthesis: The simultaneous topology, material, standard and rounded dimension optimization. *Advances in Engineering Software*, 36(9), 568–583.
- Kreulen, H. P. (1976). Fractionation and winterization of edible fats and oils. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 53(6), 393–396.
- Krey, V., Masera, O., Blanforde, G., Bruckner, T., Cooke, R., Fish-Vanden, K., Haberl, H., Hertwich, E., Kriegler, E., Müller, D., Paltsev, S., Price, L., Schlömer, S., Uerge-Vorsatz, D., Van Vuuren, D., & Zwickel, T. (2014). Annex II: Metrics & Methodology. En *Climate Change 2014: Mitigation of Climate Change. Contribution of Working Group III to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change* (pp. 1281–1328).
- Kris-Etherton, P. M., Harris, W. S., & Appel, L. J. (2002). Fish consumption, fish oil, omega-3 fatty acids, and cardiovascular disease. *Circulation*, 106(21), 2747–2757.
- Laguerre, M., Lecomte, J., & Villeneuve, P. (2007). Evaluation of the ability of antioxidants to counteract lipid oxidation: Existing methods, new trends and challenges. *Progress in Lipid Research*, 46(5), 244–282.
- Lamas, D. L., & Massa, A. E. (2017). Enzymatic Degumming of Ray Liver Oil Using Phospholipase A1: Efficiency, Yield and Effect on Physicochemical Parameters. *International Journal of Bioorganic Chemistry*, 2(3), 87–93.
- Lands, W. E. M. (2005). *Fish, Omega-3 and Human Health*. (2<sup>a</sup> ed.). AOCS Press.

- Landucci, G., Nucci, B., Pelagagge, L., & Nicoletta, C. (2011). Hazard assessment of edible oil refining: Formation of flammable mixtures in storage tanks. *Journal of Food Engineering*, 105, 105–111.
- Lardon, L., Hélias, A., & Sialve, B. (2009). Life-cycle assessment of biodiesel production from microalgae. *Environmental Science & Technology*, 43(17), 6475–6481.
- Lee, S. J., & Ying, D. Y. (2008). Encapsulation of fish oils. En N. Garti (Ed.), *Delivery and Controlled Release of Bioactives in Foods and Nutraceuticals* (pp. 370–403). Woodhead Publishing Limited.
- Lee, S., Posarac, D., & Ellis, N. (2011). Process simulation and economic analysis of biodiesel production processes using fresh and waste vegetable oil and supercritical methanol. *Chemical Engineering Research and Design*, 89(12), 2626–2642.
- Lehninger, A. L., Nelson, D. L., & Cox, M. M. (2005). *Lehninger principles of biochemistry*. (6<sup>a</sup> ed.). Macmillan.
- Lei, Q., Ba, S., Zhang, H., Wei, Y., Lee, J. Y., & Li, T. (2016). Enrichment of omega-3 fatty acids in cod liver oil via alternate solvent winterization and enzymatic interesterification. *Food Chemistry*, 199, 364–371.
- Lembke, P. (2013). Production techniques for Omega-3 concentrates. In F. De Meester, R. R. Watson, & S. Zibadi (Eds.), *Omega-6/3 Fatty Acids: Functions, Sustainability Strategies and Perspectives* (pp. 353–364). Springer Science & Business Media.
- Lewandowski, M. (2016). Designing the business models for circular economy-towards the conceptual framework. *Sustainability*, 8(1), 1–28.
- Likožar, B., Pohar, A., & Levec, J. (2016). Transesterification of oil to biodiesel in a continuous tubular reactor with static mixers: Modelling reaction kinetics, mass transfer, scale-up and optimization considering fatty acid composition. *Fuel Processing Technology*, 142, 326–336.
- Linder, M., Matouba, E., Fanni, J., & Parmentier, M. (2002). Enrichment of salmon oil with n-3 PUFA by lipolysis, filtration and enzymatic re-esterification. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 104(8), 455–462.
- Liu, S., Zhang, C., Hong, P., & Ji, H. (2006). Concentration of docosahexaenoic acid (DHA) and eicosapentaenoic acid (EPA) of tuna oil by urea complexation: Optimization of process parameters. *Journal of Food Engineering*, 73(3), 203–209.

- Lourinho, G., & Brito, P. (2015). Advanced biodiesel production technologies: novel developments. *Reviews in Environmental Science and Biotechnology*, 14(2), 287–316.
- Lutze, P., Román-Martinez, A., Woodley, J. M., & Gani, R. (2012). A systematic synthesis and design methodology to achieve process intensification in (bio) chemical processes. *Computers and Chemical Engineering*, 36(1), 189–207.
- Lydersen, A. L. (1955). Estimation of critical properties of organic compounds. *College Engineering University Wisconsin, Engineering Experimental Station, Report 3, Madison, WI, April*.
- Maes, J., De Meulenaer, B., Van Heerswynghe, P., De Greyt, W., Eppe, G., De Pauw, E., & Huyghebaert, A. (2005). Removal of dioxins and PCB from fish oil by activated carbon and its influence on the nutritional quality of the oil. *JAACS, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 82(8), 593–597.
- Mag, T. (2007). *Process of converting rendered triglyceride oil from marine sources into bland, stable oil*. (US Patent No. 7,179,491).
- Magallanes, L. M., Tarditto, L. V., Grosso, N. R., Pramparo, M. C., & Gayol, M. F. (2019). Highly concentrated omega-3 fatty acid ethyl esters by urea complexation and molecular distillation. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 99(2), 877–884.
- Magnussen, T., Rasmussen, P., & Fredenslund, A. (1981). Unifac Parameter Table for Prediction of Liquid-Liquid Equilibria. *Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development*, 20(2), 331–339.
- Maina, S., Kachrimanidou, V., & Koutinas, A. (2017). A roadmap towards a circular and sustainable bioeconomy through waste valorization. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 8, 18–23.
- Manjula, S., & Subramanian, R. (2006). Membrane technology in degumming, dewaxing, deacidifying, and decolorizing edible oils. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 46(7), 569–592.
- Mansouri, S. S., Udugama, I. A., Cignitti, S., Mitic, A., Flores-alsina, X., & Gernaey, K. V. (2017). Resource recovery from bio-based production processes: a future necessity?. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 18, 1–9.
- Marangoni, A. G., & Rousseau, D. (1995). Engineering triacylglycerols: The role of interesterification. *Trends in Food Science and Technology*, 6(10), 329–335.
- Marchese, J., Ochoa, N. A., Pagliero, C., & Almandoz, C. (2000). Pilot-scale ultrafiltration of an emulsified oil wastewater. *Environmental Science and Technology*, 34(14), 2990–2996.

- Mariem, K., & Fatima, B. (2017). Reduction of Free Fatty Acid Content of Crude Sardine Oil by Enzymatic Esterification at Laboratory Scale. *International Journal of Biological Chemistry*, 11(2), 23–29.
- Marques, M. R. C., Cole, E., Kruep, D., Gray, V., Murachanian, D., Brown, W. E., & Giancaspro, G. I. (2009). Liquid-filled Gelatin Capsules. *Pharmacoepial Forum*, 35(4), 1029–1041.
- Marrero, J., & Pardillo, E. (1999). Estimation of Pure Compound Properties Using Group-Interaction Contributions. *AIChE Journal*, 45(3), 615–621.
- Martín, M., & Grossmann, I. E. (2014). Simultaneous optimization and heat integration for the coproduction of diesel substitutes: Biodiesel (FAME and FAEE) and glycerol ethers from algae oil. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 53(28), 11371–11383.
- Maschietti, M., & Pedacchia, A. (2014). Supercritical carbon dioxide separation of fish oil ethyl esters by means of a continuous countercurrent process with an internal reflux. *Journal of Supercritical Fluids*, 86, 76–84.
- Matricarde-Falleiro, R. M., Akisawa-Silva, L. Y., Meirelles, A. J. A., & Krähenbühl, M. A. (2012). Vapor pressure data for fatty acids obtained using an adaptation of the DSC technique. *Thermochimica Acta*, 547, 6–12.
- Maza, A., Ormsbee, R. A., & Strecker, L. R. (1992). Effects of deodorization and steam-refining parameters on finished oil quality. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 69(10), 1003–1008.
- Menea, F., & Tréton, J. (2013). Trans-fatty acids, dangerous bonds for health? A background review paper of their use, consumption, health implications and regulation in France. *European Journal of Nutrition*, 52(4), 1289–1302.
- Mendow, G., & Querini, C. A. (2013). High performance purification process of methyl and ethyl esters produced by transesterification. *Chemical Engineering Journal*, 228, 93–101.
- Mensink, R. P., Zock, P. L., Kester, A. D. M., & Katan, M. B. (2003). Effects of dietary fatty acids and carbohydrates on the ratio of serum total to HDL cholesterol and on serum lipids and apolipoproteins: A meta-analysis of 60 controlled trials. *American Journal of Clinical Nutrition*, 77(5), 1146–1155.
- Micha, R., Khatibzadeh, S., Shi, P., Fahimi, S., Lim, S., Andrews, K. G., Engell, R. E., Powles, J., Ezzati, M., & Mozaffarian, D. (2014). Global, regional, and national consumption levels of dietary fats and oils in 1990 and 2010: A systematic analysis including 266 country-specific nutrition surveys. *The BMJ*, 348(g2272), 1-20.

- Monte, M. L., Monte, M. L., Pohndorf, R. S., Crexi, V. T., & Pinto, L. A. A. (2015). Bleaching with blends of bleaching earth and activated carbon reduces color and oxidation products of carp oil. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 117(6), 829–836.
- Moorthy, A. S., Liu, R., Mazzanti, G., & Wesdorp, L. H. (2016). Estimating Thermodynamic Properties of Pure Triglyceride Systems Using the Triglyceride Property Calculator. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 94(2), 187–199.
- Morais, S., Mata, T. M., Martins, A. A., Pinto, G. A., & Costa, C. A. V. (2010). Simulation and life cycle assessment of process design alternatives for biodiesel production from waste vegetable oils. *Journal of Cleaner Production*, 18(13), 1251–1259.
- Moreno-Pérez, S., Guisan, J. M., & Fernandez-Lorente, G. (2014). Selective ethanolysis of fish oil catalyzed by immobilized lipases. *JAACS, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 91(1), 63–69.
- Mota, B., Gomes, M. I., Carvalho, A., & Barbosa-Povoa, A. P. (2015). Towards supply chain sustainability: Economic, environmental and social design and planning. *Journal of Cleaner Production*, 105, 14–27.
- Mousavi-Avval, S. H., Rafiee, S., Sharifi, M., Hosseinpour, S., Notarnicola, B., Tassielli, G., & Renzulli, P. A. (2016). Application of multi-objective genetic algorithms for optimization of energy, economics and environmental life cycle assessment in oilseed production. *Journal of Cleaner Production*, 140(2017), 804–815.
- Mu, H., Xu, X., & Høy, C. E. (1998). Production of specific-structured triacylglycerols by lipase-catalyzed interesterification in a laboratory-scale continuous reactor. *JAACS, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 75(9), 1187–1193.
- Munir, M. T., Soheil, S., Udugama, I. A., Baroutian, S., Gernaey, K. V., & Young, B. R. (2018). Resource recovery from organic solid waste using hydrothermal processing: Opportunities and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 96, 64–75.
- Murray, R. K., Granner, D. K., Mayes, P. A., & Rodwell, V. W. (2009). *Harper's Illustrated Biochemistry*. (28<sup>a</sup> ed.). McGraw Hill Medical.
- Nascimento, V. L. V., Bermúdez, V. M. S., Oliveira, A. L. L., Kleinberg, M. N., Ribeiro, R. T. M., Abreu, R. F. A., & Carioca, J. O. B. (2015). Characterization of a hydrolyzed oil obtained from fish waste for nutraceutical application. *Food Science and Technology*, 35(2), 321–325.



- Neubronner, J., Schuchardt, J. P., Kressel, G., Merkel, M., Von Schacky, C., & Hahn, A. (2011). Enhanced increase of omega-3 index in response to long-term n-3 fatty acid supplementation from triacylglycerides versus ethyl esters. *European Journal of Clinical Nutrition*, 65(2), 247–254.
- Nieto, S., Galleguillos, A., Sanhueza, J., & Valenzuela, A. (1993). Desodorización de aceite de pescado mediante destilación a alto vacío: preservación de las características químicas del aceite. *Grasas y Aceites*, 44(1), 35–38.
- Nonhebel, S. (2004). On resource use in food production systems: The value of livestock as “rest-stream upgrading system.” *Ecological Economics*, 48(2), 221–230.
- Noureddini, H., Teoh, B. C., & Clements, L. D. (1992). Densities of Vegetable Oils and Fatty Acids. *Journal of the American Oil Chemists’ Society*, 69(12), 1184–1188.
- O’Brien, R. D. (2008). *Fats and Oils. Formulating and Processing for Applications*. (3<sup>a</sup> ed.). CRC Press.
- Ochoa, N., Pagliero, C., Marchese, J., & Mattea, M. (2001). Ultrafiltration of vegetable oils degumming by polymeric membranes. *Separation and Purification Technology*, 22–23(August), 417–422.
- Oliveira, A. C. M., & Miller, M. R. (2014). Purification of Alaskan walleye pollock (*Gadus chalcogrammus*) and New Zealand hoki (*Macruronus novaezelandiae*) liver oil using short path distillation. *Nutrients*, 6(5), 2059–2076.
- Olli, J. J., Breivik, H., & Thorstad, O. (2013). Removal of persistent organic pollutants in fish oils using short-path distillation with a working fluid. *Chemosphere*, 92(3), 273–278.
- Omegavia. (2010). *How to Buy the Best Fish Oil Supplements – Part 3: Freshness*. Disponible en <https://omegavia.com/best-fish-oil-supplement-3/>
- Ortiz, C., Ferreira, M. L., Barbosa, O., Dos Santos, J. C. S., Rodrigues, R. C., Berenguer-Murcia, Á., Briand, L. E., & Fernandez-Lafuente, R. (2019). Novozym 435: The “perfect” lipase immobilized biocatalyst?. *Catalysis Science and Technology*, 9(10), 2380–2420.
- Oterhals, Å., Kvamme, B., & Berntssen, M. H. G. (2010). Modeling of a short-path distillation process to remove persistent organic pollutants in fish oil based on process parameters and quantitative structure properties relationships. *Chemosphere*, 80(2), 83–92.

- Oterhals, Å., & Vogt, G. (2013). Impact of extraction, refining and concentration stages on the stability of fish oil. En *Food Enrichment with Omega-3 Fatty Acids* (pp. 111–129). Woodhead Publishing.
- Othman, M. R., Repke, J. U., Wozny, G., & Huang, Y. L. (2010). A modular approach to sustainability assessment and decision support in chemical process design. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(17), 7870–7881.
- Padrón Páez, J. I., Carvalho, A., Prado-Rubio, O. A., & Román-Martínez, A. (2017). Assessment of sustainable wastewater treatment networks design applying LCA. *Proceedings of the 27th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE 27*, 40, 2707–2712.
- Patterson, H. B. W. (2009). Adsorption. En *Bleaching and Purifying Fats and Oils: Theory and Practice* (2<sup>a</sup> ed., pp. 53–67). AOCS Press.
- Perederic, O. A., Cunico, L. P., Kalakul, S., Sarup, B., Woodley, J. M., Kontogeorgis, G. M., & Gani, R. (2018). Systematic identification method for data analysis and phase equilibria modelling for lipids systems. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 121, 153–169.
- Perederic, O. A., Mansouri, S. S., Appel, S., Sarup, B., Woodley, J. M., & Kontogeorgis, G. M. (2020). Process Analysis of Shea Butter Solvent Fractionation Using a Generic Systematic Approach. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 59, 9152–9164.
- Pereira, E., Meirelles, A. J. A., & Maximo, G. J. (2020). Predictive models for physical properties of fats, oils, and biodiesel fuels. *Fluid Phase Equilibria*, 508(112440), 1-20.
- Pettinello, G., Bertucco, A., Pallado, P., & Stassi, A. (2000). Production of EPA enriched mixtures by supercritical fluid chromatography: From the laboratory scale to the pilot plant. *Journal of Supercritical Fluids*, 19(1), 51–60.
- Piacentini, R. D., & Della Ceca, L. S. (2017). The use of environmental sustainability criteria in industrial processes. *Drying Technology*, 35(1), 1–3.
- Pieragostini, C., Mussati, M. C., & Aguirre, P. (2012). On process optimization considering LCA methodology. *Journal of Environmental Management*, 96(1), 43–54.
- Poling, B. E., Prausnitz, J. M., & O'Connell, J. P. (2001). *The Properties of Gases and Liquids*. (5<sup>a</sup> ed.). New York: McGraw-Hill.
- Ponce-ortega, J. M., Al-thubaiti, M. M., & El-halwagi, M. M. (2012). Process intensification: New understanding and systematic approach. *Chemical Engineering & Processing: Process Intensification*, 53, 63–75.

- Popovic, T., Barbosa-Póvoa, A., Kraslawski, A., & Carvalho, A. (2018). Quantitative indicators for social sustainability assessment of supply chains. *Journal of Cleaner Production*, 180, 748–768.
- Popovic, T., Kraslawski, A., Barbosa-Póvoa, A., & Carvalho, A. (2017). Quantitative indicators for social sustainability assessment of society and product responsibility aspects in supply chains. *Journal of International Studies*, 10(4), 9–36.
- Proctor, A., & Toro-Vázquez, J. F. (1996). The Freundlich isotherm in studying adsorption in oil processing. *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 73(12), 1627–1633.
- Raj, A. (2015). Soft Gelatin Capsules (Softgels). *PharmaTutor*, 3(10), 16–18.
- Rangaiah, G. P., & Bonilla-Petriciolet, A. (2013). *Multi-Objective Optimization in Chemical Engineering: Developments and Applications* (1<sup>a</sup> ed.). Wiley: New York.
- Ribeiro, M. H. L., Lourenço, P. A. S., Monteiro, J. P., & Ferreira-Dias, S. (2001). Kinetics of selective adsorption of impurities from a crude vegetable oil in hexane to activated earths and carbons. *European Food Research and Technology*, 213(2), 132–138.
- Riha, V., & Brunner, G. (2000). Separation of fish oil ethyl esters with supercritical carbon dioxide. *Journal of Supercritical Fluids*, 17(1), 55–64.
- Rohm, H., Schäper, C., & Zahn, S. (2018). Interesterified fats in chocolate and bakery products: A concise review. *LWT - Food Science and Technology*, 87, 379–384.
- Román-Martínez, A. (2011). *A model-based framework for design of intensified enzyme-based processes* (tesis doctoral). Department of Chemical and Biochemical Engineering, Technical University of Denmark.
- Rossi, P., Grosso, N. R., Pramparo, M. del C., & Nepote, V. (2012). Fractionation and concentration of Omega-3 by molecular distillation. En T. G. Bradley & F. P. Vargas (Eds.), *Eicosapentaenoic Acid: Sources, Health Effects and Role in Disease Prevention* (pp. 177–203). Nova Biomedical.
- Roy, N., Eljack, F., Jiménez-Gutiérrez, A., Zhang, B., Thiruvengataswamy, P., El-Halwagi, M., & Mannan, M. S. (2016). A review of safety indices for process design. *Current Opinion in Chemical Engineering*, 14, 42–48.

- Rubio-Rodríguez, N., Beltrán, S., Jaime, I., Diego, S. M. De, Sanz, M. T., & Carballido, J. R. (2010). Production of Omega-3 polyunsaturated fatty acid concentrates: A review. *Innovative Food Science and Emerging Technologies*, 11(1), 1–12.
- SaintyCo. (2019). *Capsule Size: The Definitive Guide*. Disponible en: <https://www.saintytec.com/capsule-size-the-definitive-guide/>
- Sánchez, B. S., Benitez, B., Querini, C. A., & Mendow, G. (2015). Transesterification of sunflower oil with ethanol using sodium ethoxide as catalyst. Effect of the reaction conditions. *Fuel Processing Technology*, 131, 29–35.
- Sathivel, S., & Prinyawiwatkul, W. (2004). Adsorption of FFA in crude catfish oil onto chitosan, activated carbon, and activated earth: A kinetics study. *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 81(5), 493–496.
- Schmidt, J. H. (2010). Comparative life cycle assessment of rapeseed oil and palm oil. *International Journal of Life Cycle Assessment*, 15(2), 183–197.
- Schmidt, J. H. (2015). Life cycle assessment of five vegetable oils. *Journal of Cleaner Production*, 87(C), 130–138.
- Schuchardt, J. P., & Hahn, A. (2013). Bioavailability of long-chain omega-3 fatty acids. *Prostaglandins Leukotrienes and Essential Fatty Acids*, 89(1), 1–8.
- Seider, W. D., Lewin, D. R., Seader, J. D., Widagdo, S., Gani, R., & Ming Ng, K. (2018). *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis and Evaluation* (4<sup>a</sup> Ed.). John Wiley & Sons.
- Sereewatthanawut, I., Baptista, I. I. R., Boam, A. T., Hodgson, A., & Livingston, A. G. (2011). Nanofiltration process for the nutritional enrichment and refining of rice bran oil. *Journal of Food Engineering*, 102(1), 16–24.
- Shabbir, Z., Tay, D. H. S., & Ng, D. K. S. (2012). A hybrid optimisation model for the synthesis of sustainable gasification-based integrated biorefinery. *Chemical Engineering Research and Design*, 90(10), 1568–1581.
- Shahidi, F. (2005). *Bailey's Industrial Oil & Fat Products* (6<sup>a</sup> ed.). John Wiley & Sons.
- Shahidi, F., & Wanasundara, U. N. (1998). Omega-3 fatty acid concentrates: Nutritional aspects and production technologies. *Trends in Food Science & Technology*, 9(6), 230–240.
- Sharma, Y. C., Singh, B., Madhu, D., Liu, Y., & Yaakob, Z. (2014). Fast synthesis of high quality biodiesel from “waste fish oil” by single step transesterification. *Biofuel Research Journal*, 1(3), 78–80.

- Sharma, Y. C., Yadav, M., & Upadhyay, S. N. (2019). Latest advances in degumming feedstock oils for large-scale biodiesel production. *Biofuels, Bioproducts and Biorefining*, 13(1), 174–191.
- Shimada, Y., Ogawa, J., Watanabe, Y., Nagao, T., Kawashima, A., Kobayashi, T., & Shimizu, S. (2003). Regiospecific Analysis by Ethanolysis of Oil with Immobilized *Candida antarctica* Lipase. *Lipids*, 38(12), 1281–1286.
- Shimada, Y., Watanabe, Y., Sugihara, A., Baba, T., Ooguri, T., Moriyama, S., Terai, T., & Tominaga, Y. (2001). Ethyl esterification of docosahexaenoic acid in an organic solvent-free system with immobilized *Candida antarctica* lipase. *Journal of Bioscience and Bioengineering*, 92(1), 19–23.
- Silk, D., Mazzali, B., Gargalo, C. L., Pinelo, M., A Udugama, I., & Mansouri, S. S. (2020). A decision-support framework for techno-economic-sustainability assessment of resource recovery alternatives. *Journal of Cleaner Production*, 266(121854), 1-18.
- Simat, V., Vlahovic, J., Soldo, B., Skroza, D., Ljubenkovic, I., & Generalic, I. (2019). Production and Refinement of Omega-3 Rich Oils. *Foods*, 8(4), 125., 1-14.
- Soccol, M. C. H., & Oetterer, M. (2003). Seafood as functional food. *Brazilian Archives of Biology and Technology*, 46(3), 443–454.
- Solaesa, Á. G., Sanz, M. T., Falkeborg, M., Beltrán, S., & Guo, Z. (2016). Production and concentration of monoacylglycerols rich in omega-3 polyunsaturated fatty acids by enzymatic glycerolysis and molecular distillation. *Food Chemistry*, 190, 960–967.
- Song, G., Zhang, M., Peng, X., Yu, X., Dai, Z., & Shen, Q. (2018). Effect of deodorization method on the chemical and nutritional properties of fish oil during refining. *Lwt - Food, Science and Technology*, 96(149), 560–567.
- Sotoft, L. F., Rong, B., Christensen, K. V, & Norddahl, B. (2010). Process simulation and economical evaluation of enzymatic biodiesel production plant. *Bioresource Technology*, 101(14), 5266–5274.
- Sousa, J., Souza, A., Torres, A., & Freire, D. (2014). Production of MLM-Type structured lipids from fish oil catalyzed by *Thermomyces lanuginosus* lipase. *BMC Proceedings*, 8(S4), 44.
- Stankiewicz, A., & Drinkenburg, A. A. H. (2004). Process Intensification: History, Philosophy, Principles. En A. Stankiewicz & J. A. Moulijn (Eds.), *Re-engineering the chemical processing plant*. (pp. 1–32).

- Stavarache, C., Vinatoru, M., & Maeda, Y. (2007). Aspects of ultrasonically assisted transesterification of various vegetable oils with methanol. *Ultrasonics Sonochemistry*, 14(3), 380–386.
- Stavarache, C., Vinatoru, M., Nishimura, R., & Maeda, Y. (2005). Fatty acids methyl esters from vegetable oil by means of ultrasonic energy. *Ultrasonics Sonochemistry*, 12(5), 367–372.
- Stout, L. E., Chamberlain, D. F., & McKelvey, J. M. (1949). Factors influencing vegetable oil bleaching by adsorption. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 26(3), 120–126.
- Suseno, S. H., Nurnafisah, I., Jacob, A. M., & Izaki, A. F. (2015). Optimization of Bleaching Condition for Sardine Oil from Fish Meal By-Product. *World Journal of Fish and Marine Sciences*, 7(4), 334–340.
- Suseno, S. H., Sri Hayati, S., & Izaki, A. F. (2014). Fatty Acid Composition of Some Potential Fish Oil from Production Centers in Indonesia. *Oriental Journal of Chemistry*, 30(3), 975–980.
- Svatoňová, T., Herák, D., & Kabutey, A. (2015). Financial Profitability and Sensitivity Analysis of Palm Oil Plantation in Indonesia. *Acta Universitatis Agriculturae et Silviculturae Mendelianae Brunensis*, 63(4), 1365–1373.
- Svenson, E., & Willits, J. (2014). Nano Neutralization. En W.E. Farr, A. Proctor (Ed.), *Green Vegetable Oil Processing* (pp. 147–157). AOCS Press.
- Tena, N., Lobo-Prieto, A., Aparicio, R., & García, D. L. (2018). Storage and Preservation of Fats and Oils. En *Encyclopedia of Food Security and Sustainability* (Vol. 2, pp. 605–618). Elsevier Inc.
- Thomas, A., & Trentesaux, D. (2014). Are intelligent manufacturing systems sustainable? *Studies in Computational Intelligence*, 544, 3–14.
- Tolstorebrov, I., Eikevik, T. M., & Bantle, M. (2014). A DSC determination of phase transitions and liquid fraction in fish oils and mixtures of triacylglycerides. *Food Research International*, 58, 132–140.
- Tomei, J., & Helliwell, R. (2016). Food versus fuel? Going beyond biofuels. *Land Use Policy*, 56, 320–326.
- Tran, N. N., Tišma, M., Budžaki, S., McMurchie, E. J., Gonzalez, O. M. M., Hessel, V., & Ngothai, Y. (2018). Scale-up and economic analysis of biodiesel production from recycled grease trap waste. *Applied Energy*, 229, 142–150.

- Tugnoli, A., Santarelli, F., & Cozzani, V. (2008). An approach to quantitative sustainability assessment in the early stages of process design. *Environmental Science and Technology*, 42(12), 4555–4562.
- Udugama, I. A., Petersen, L. A. H., Falco, F. C., Junicke, H., Mitic, A., Alsina, X. F., Mansouri, S. S., & Gernaey, K. V. (2020). Resource recovery from waste streams in a water-energy-food nexus perspective: Toward more sustainable food processing. *Food and Bioproducts Processing*, 119, 133–147.
- Ulrich, G. D. (1984). *A guide to chemical engineering process design and economics* (1<sup>a</sup> ed.). John Wiley & Sons.
- USDA. (2019). *United States Department of Agriculture*. Disponible en: [www.fas.usda.gov](http://www.fas.usda.gov) (Consultado: 04/02/2020).
- Vaisali, C., Charanyaa, S., Belur, P. D., & Regupathi, I. (2015). Refining of edible oils: A critical appraisal of current and potential technologies. *International Journal of Food Science and Technology*, 50(1), 13–23.
- Valenzuela B, R., Bascuñan G, K., Valenzuela B, A., & Chamorro M, R. (2009). Acidos grasos omega-3, enfermedades psiquiátricas y neurodegenerativas: Un nuevo enfoque preventivo y terapéutico. *Revista Chilena de Nutricion*, 36(4), 1120–1128.
- Van de Sande, R. L. K. M., & Segers, J. . (1989). *Method of refining glyceride oils*. (European Patent 0 348 004 assigned to Unilever®).
- Vázquez, L., & Akoh, C. C. (2012). Enrichment of stearidonic acid in modified soybean oil by low temperature crystallisation. *Food Chemistry*, 130(1), 147–155.
- Venkata Mohan, S., Nikhil, G. N., Chiranjeevi, P., Reddy, C. N., Rohit, M. V, & Kumar, A. N. (2016). Waste biorefinery models towards sustainable circular bioeconomy: Critical review and future perspectives. *Bioresource Technology*, 215, 2–12.
- Vezzoli, C. (2018). *Design for environmental sustainability. Life Cycle Design of Products* (2<sup>a</sup> ed.). Springer.
- Vijayan, G. (2013). *Enzymatic transesterification of fish oil for the production of biodiesel*. (tesis de maestría) Dalhousie University. Halifax, Nova Scotia.
- Wanasundara, U. N., & Fereidoon, S. (1998). Antioxidant and pro-oxidant activity of green tea extracts in marine oils. *Food Chemistry*, 63(3), 335–342.

- Wanasundara, U. N., & Shahidi, F. (1998). Lipase-assisted concentration of n-3 polyunsaturated fatty acids in acylglycerols from marine oils. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 75(8), 945–951.
- Wanasundara, U. N., & Shahidi, F. (1999). Concentration of omega 3-polyunsaturated fatty acids of seal blubber oil by urea complexation: Optimization of reaction conditions. *Food Chemistry*, 65(1), 41–49.
- Wang, W., Li, T., Ning, Z., Wang, Y., Yang, B., Ma, Y., & Yang, X. (2012). A process for the synthesis of PUFA-enriched triglycerides from high-acid crude fish oil. *Journal of Food Engineering*, 109(3), 366–371.
- Watters, C. A., Edmonds, C. M., Rosner, L. S., Sloss, K. P., & Leung, P. (2012). A Cost Analysis of EPA and DHA in Fish, Supplements, and Foods. *Journal of Nutrition & Food Sciences*, 2(8), 1-5.
- Wittig, R., Lohmann, J., & Gmehling, J. (2003). Vapor-liquid equilibria by UNIFAC group contribution. 6. Revision and extension. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 42(1), 183–188.
- Woollard, D. C., & Indyk, H. E. (2004). Tocopherols. Properties and Determination. In *Encyclopedia of Food Sciences and Nutrition* (pp. 5789–5796). Elsevier Science Ltd.
- Xu, X. (2003). Engineering of enzymatic reactions and reactors for lipid modification and synthesis. *European Journal of Lipid Science and Technology*, 105(6), 289–304.
- Xu, X., Porsgaard, T., Zhang, H., Adler-Nissen, J., & Høy, C. E. (2002). Production of structured lipids in a packed-bed reactor with *Thermomyces lanuginosa* lipase. *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 79(6), 561–565.
- Yan, X., Zhao, X., Ma, G., Dai, L., Du, W., & Liu, D. (2018). Enzymatic ethanolysis of fish oil for selective concentration of polyunsaturated fatty acids (PUFAs) with flexible production of corresponding glycerides and ethyl esters. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 93(8), 2399–2405.
- Yang, S., Zhang, Y., Yue, W., Wang, W., Wang, Y. Y., Yuan, T. Q., & Sun, R. C. (2016). Valorization of lignin and cellulose in acid-steam-exploded corn stover by a moderate alkaline ethanol post-treatment based on an integrated biorefinery concept. *Biotechnology for Biofuels*, 9(1), 1–14.
- Yang, T., Fruekilde, M. B., & Xu, X. (2003). Applications of immobilized *Thermomyces Lanuginosa* lipase in interesterification. *JAOCs, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 80(9), 881–887.



- Yashodhara, B. M., Umakanth, S., Pappachan, J. M., Bhat, S. K., Kamath, R., & Choo, B. H. (2009). Omega-3 fatty acids : a comprehensive review of their role in health and disease. *British Medical Journal*, 85(March), 84–90.
- Yates, R. A., Caldwell, J. D., & Perkins, E. G. (1997). Diffuse reflectance fourier transform infrared spectroscopy of triacylglycerol and oleic acid adsorption on synthetic magnesium silicate. *JAOCS, Journal of the American Oil Chemists' Society*, 74(3), 289–292.
- Yee, K. F., Tan, K. T., Abdullah, A. Z., & Lee, K. T. (2009). Life cycle assessment of palm biodiesel: Revealing facts and benefits for sustainability. *Applied Energy*, 86, S189–S196.
- Young, F. V. K. (1986a). The Chemical & Physical Properties of Crude Fish Oils for Refiners & Hydrogenators. *Fish Oil Bulletin. International Fishmeal and Fishoil Organization (IFFO)*, No. 18. 1-18.
- Young, F. V. K. (1986b). The Refining and Hydrogenation of Fish Oil. *Fish Oil Bulletin. International Fishmeal and Fishoil Organization (IFFO)*, No. 17. 1-27.
- Yves, H., Korma, S. A., Ali, A. H., Tuyishime, M. A., Habinshuti, I., & Abed, S. M. (2016). Extraction, Refining and Purification of  $\omega$ -3 PUFA through Different Techniques – A Review. *American Journal of Food Science and Nutrition Research*, 4(1), 18-26.
- Zeberg-Mikkelsen, C. K., & Stenby, E. H. (1999). Predicting the melting points and the enthalpies of fusion of saturated triglycerides by a group contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 162, 7–17.
- Zhang, C., Chen, M., Mao, Z., & Zu, G. (2012). Concentration of DHA and EPA from marine fish oil by urea complexation. *Advanced Materials Research*, 581–582(1), 54–57.
- Zhang, H., Shen, Y., Zhang, Y., Li, L., & Wang, X. (2018). Regiospecific Analysis of Fatty Acids and Calculation of Triglyceride Molecular Species in Marine Fish Oils. *BioMed Research International*, 2018, 1–7.
- Zhang, H., Zhao, H., Zhang, Y., Shen, Y., Su, H., Jin, J., Jin, Q., & Wang, X. (2018). Characterization of Positional Distribution of Fatty Acids and Triacylglycerol Molecular Compositions of Marine Fish Oils Rich in Omega-3 Polyunsaturated Fatty Acids. *BioMed Research International*, 2018, 1-10.

# APÉNDICES

## Apéndice A. Caracterización experimental del aceite de pescado.

### i) Recolección de muestras.

En la planta procesadora de harina de atún se obtuvieron tres muestras de aceite de distintas secciones del proceso, con la finalidad de conocer en qué punto se puede extraer el aceite con la mejor calidad, así como el grado de deterioro que ocasiona en el mismo la obtención de la harina:

- Muestra 1 (M1). Recolectada del tanque de almacenamiento final del aceite para ser enviado a combustión en calderas; es importante mencionar que se encuentra al exterior y abierto a la atmósfera.
- Muestra 2 (M2). Recolectada inmediatamente a partir de la salida de la centrifuga que separa el aceite del agua en el proceso.
- Muestra 3 (M3). Obtenida de la sección interna de la planta; esta muestra presentaba un color amarillento claro a comparación de las otras muestras mucho más oscuras, debido a la gran cantidad de agua presente en la misma.

Una vez trasladadas, las muestras se almacenaron bajo refrigeración en atmósfera de nitrógeno hasta su análisis.

### ii) Tratamiento de las muestras.

Los análisis de calidad básicos planteados para las muestras de aceite, así como para obtener la composición de ácidos grasos son los siguientes:

- *Porcentaje de ácidos grasos libres (% AGL)*: Representa el grado de deterioro causado por la hidrólisis enzimática de los ácidos grasos en el aceite. La metodología adaptada de la American Oil Chemists' Society Ca 5a-40 (AOCS, 2009a), consiste en pesar 5 g de muestra en un matraz Erlenmeyer, añadir 25 ml de una solución de alcohol neutralizado, adicionar 1 ml de fenolftaleína como indicador y titular con una solución de NaOH 0.1 N. El contenido de ácidos grasos libres (%AGL) se calcula con la siguiente fórmula:

$$\% AGL = \frac{V_{NaOH} \times N \times 28.2}{W} \quad (A.1)$$

Donde %AGL representa el valor de ácidos grasos libres como % de ácido oleico,  $V_{NaOH}$  es el volumen de NaOH gastado para titular la muestra en ml,  $N$  es la normalidad de la solución de NaOH (0.1 N), y  $W$  es el peso de la muestra (g).

- *Índice de peróxidos (IP)*: Indica el estado de oxidación inicial del aceite, determinando la cantidad de peróxidos en la muestra. El método empleado, AOCS CD 8b-90 (AOCS, 2003d), indica pesar 5 g del aceite en un matraz, adicionar 30 ml de una mezcla de ácido acético-cloroformo en proporción 3:2, agitar para suspender la mezcla y agregar 0.5 ml de una solución saturada de KI. Se agita la mezcla por un minuto y se adicionan 30 ml de agua destilada para parar la reacción. Se comienza a titular con tiosulfato de sodio ( $Na_2S_2O_3$ ) 0.01 N, y poco antes de la desaparición del color amarillo se agrega 1 ml de una solución de almidón al 1%, continuando con la titulación hasta la desaparición del color oscuro. El cálculo se realiza como:

$$IP = \frac{(S - B) \times N \times 1000}{W} \quad (A.2)$$

Donde  $IP$  es el valor de peróxidos (miliequivalentes de peróxido / 1000 g de muestra),  $B$  y  $S$  son el volumen de  $Na_2S_2O_3$  gastado para titular el blanco y la muestra respectivamente (ml),  $N$  es la normalidad de la solución de  $Na_2S_2O_3$  (0.01 N), y  $W$  es el peso de la muestra (g).

- *Índice de Yodo*: Es una medida de la insaturación de grasas y aceites, expresado en términos de porcentaje de yodo absorbido por gramo de muestra. La metodología AOCS Cd 1d-92 (AOCS, 2003c) indica pesar 0.13 g de muestra (esto debido al rango de IY esperado), adicionar 15 ml de una solución de ciclohexano-ácido acético en proporción 1:1 y mezclar hasta disolver la muestra. Se añaden 25 ml de solución de Wijs (monocloruro de yodo), se agita y se coloca una hora en la oscuridad. Después se adicionan 20 ml de una solución de KI al 10%, se añaden 150 ml de agua destilada y se agita bruscamente para parar la reacción. Se comienza a titular con tiosulfato de sodio ( $Na_2S_2O_3$ ) 0.1 N, y poco antes de la desaparición del color amarillo se agrega 1 ml de una solución de almidón al 1%, continuando con la titulación hasta la desaparición del color oscuro. El IY se obtiene como:

$$IY = \frac{(B - S) \times N \times 12.69}{W} \quad (A.3)$$

Donde  $IY$  es el valor del índice de yodo ( $\text{ml I}_2 / 100 \text{ g}$  de muestra),  $B$  y  $S$  son el volumen de  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  gastado para titular el blanco y la muestra respectivamente ( $\text{ml}$ ),  $N$  es la normalidad de la solución de  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  ( $0.1 \text{ N}$ ), y  $W$  es el peso de la muestra ( $\text{g}$ ).

- *Perfil de ácidos grasos:* Se evalúa por cromatografía de gases de acuerdo con el siguiente protocolo: Se realiza la metilación reaccionando alícuotas de  $10 \text{ mg}$  del aceite con  $0.5 \text{ ml}$  de una solución al  $5\%$  de metóxido de sodio en metanol. La reacción se lleva a cabo calentando a  $60^\circ\text{C}$  durante  $30 \text{ min}$  y se detiene por la adición de  $0.5 \text{ ml}$  de una solución saturada de  $\text{NaCl}$ . Los metil-ésteres se extraen con  $1 \text{ ml}$  de hexano (grado HPLC) para posteriormente inyectar  $1 \mu\text{l}$  de cada muestra por duplicado en el cromatógrafo de gases (VARIAN CP-3800, columna capilar Agilent J&W® HP-INNOWax de  $60\text{m} \times 0.25\text{mm} \times 0.25\mu\text{m}$ ) y detector de ionización de llama. Los ácidos grasos se identifican por comparación con una mezcla estándar de ésteres metílicos (Supelco 37®) de concentración conocida y se cuantifican como porcentaje del ácido graso ( $A$ ) dividiendo el área de su pico correspondiente ( $SA$ ) entre la sumatoria de las áreas de todos los picos ( $\sum S$ ), por  $100$ :

$$\% A = \frac{SA}{\sum A} \times 100 \quad (\text{A.4})$$

### iii) Refinado de las muestras en laboratorio.

Para poder realizar el análisis del perfil de ácidos grasos por cromatografía de gases, es necesario refinar las muestras de aceite crudo llevando a cabo la metodología descrita a continuación (Crexi et al., 2010), procurando no exceder una temperatura de  $60^\circ\text{C}$  en presencia de oxígeno atmosférico:

- Filtrar las muestras para retirar sólidos mayores.
- Para la etapa de desgomado, agregar  $1\%$  p/p de agua y  $1\%$  p/p de ácido fosfórico, y calentar a  $55^\circ\text{C}$  durante  $15 \text{ min}$ .
- Para la neutralización, calentar y agitar durante  $15 \text{ min}$  a  $50^\circ\text{C}$  con la adición de una solución de hidróxido de sodio ( $20\%$  p/p utilizando los gramos de solución en relación con el %AGL obtenido después del desgomado).
- Después de cada etapa, se centrifuga a  $4700 \text{ rpm}$  durante  $20 \text{ min}$  para recuperar el aceite de los fosfátidos y jabones.
- Realizar una etapa de blanqueado agregando  $1\%$  p/p de Trisyl® para eliminar jabones y  $2\%$  p/p de tierras de blanqueo Engelhard®, colocar bajo

vacío poco a poco cuidando la formación de espuma y mantener a 100°C durante 15 min.

- Finalmente, enfriar hasta 50°C sin retirar el vacío, adicionar 0.7% de celite (ayuda filtro), filtrar a vacío dos veces y dejar enfriar a temperatura ambiente para obtener el aceite refinado (desgomado, neutralizado y blanqueado).

Es importante mencionar que para la muestra M3 fue necesario implementar otra metodología para extraer la fracción de grasa (Método de Roesse-Gottlieb), ya que se encontraba en emulsión con gran cantidad de agua, cuyo fundamento puede encontrarse en la literatura (AOCS, 2003a).

#### iv) Análisis experimental.

Una vez recolectadas las tres muestras, se realizaron en el momento los análisis básicos de calidad (%AGL, IP e IY) por triplicado. Estos resultados se consideran en “estado crudo”. Posteriormente, se almacenaron adecuadamente y se trasladaron desde Tapachula hasta San Luis Potosí, donde en el transcurso de la semana se repitieron los análisis nuevamente por triplicado. A continuación, se realizó el refinado de las muestras, se almacenaron y tres meses después se repitieron los análisis de calidad antes de realizar la determinación del perfil de ácidos grasos. Este proceso está ilustrado en la Figura A.1.



Figura A.1 Diagrama de flujo del tratamiento y estado de las muestras para su caracterización.

#### v) Resultados del análisis.

Los promedios de los resultados obtenidos se muestran en la Tabla A.1; los análisis realizados por triplicado incluyen la respectiva desviación estándar.

Tabla A.1 Resultados de los parámetros de calidad medidos en las muestras de aceite.

Muestra aceite	Estado	Parámetro medido		
		%AGL	IP	IY
M1	Crudo	15.88 ± 0.35	17.00	134.15
	Traslado	17.89 ± 0.32	19.82 ± 0.60	132.70 ± 0.18
	Refinado/Almacenado	2.63 ± 0.05	23.16 ± 0.39	129.04 ± 3.52
M2	Crudo	7.28 ± 0.26	8.00	142.76
	Traslado	7.07 ± 0.14	8.65 ± 0.60	139.27 ± 1.30
	Refinado/Almacenado	1.69 ± 0.00	11.25 ± 0.66	135.93 ± 3.47
M3	Crudo	2.91 ± 0.39	8.55 ± 1.09	146.75 ± 7.40
	Traslado	3.14 ± 0.03	8.51 ± 0.46	144.45 ± 1.38
	Almacenado	3.07 ± 0.07	8.63 ± 0.28	138.76 ± 2.56

Estos resultados fueron analizados estadísticamente considerando un diseño factorial donde las variables dependientes son los parámetros medidos (%AGL, IP e IY), y las variables independientes son las distintas muestras (M1, M2 y M3) y el efecto de los “tratamientos” (estado de la muestra: ya sea cruda, después del traslado, y una vez refinada y/o almacenada durante los tres meses). El análisis fue implementado en el software Statistica® ver. 12 y los resultados se pueden visualizar en las Figuras A.2, A.3 y A.4, realizadas en el mismo software.

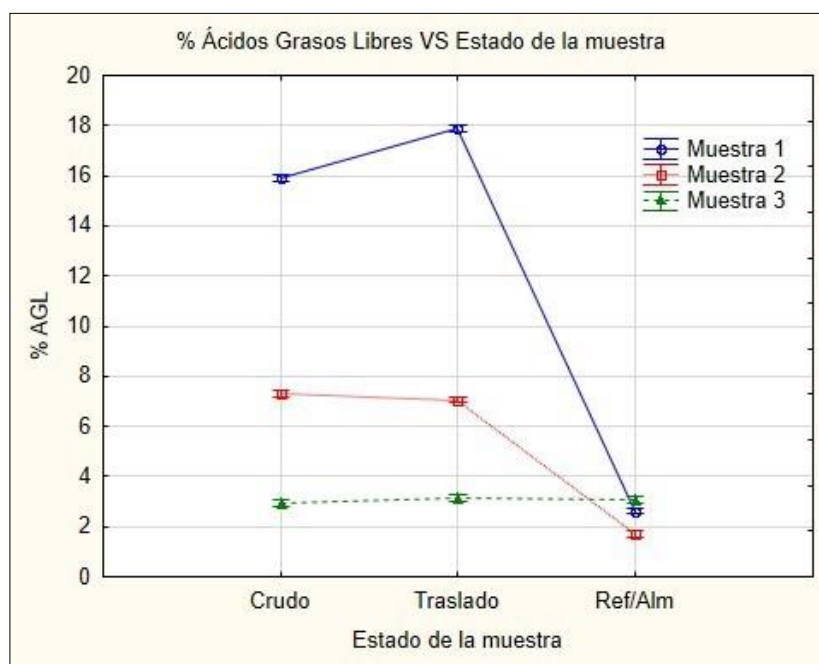


Figura A.2 Comparativa de %AGL contra estado de la muestra en las distintas etapas.

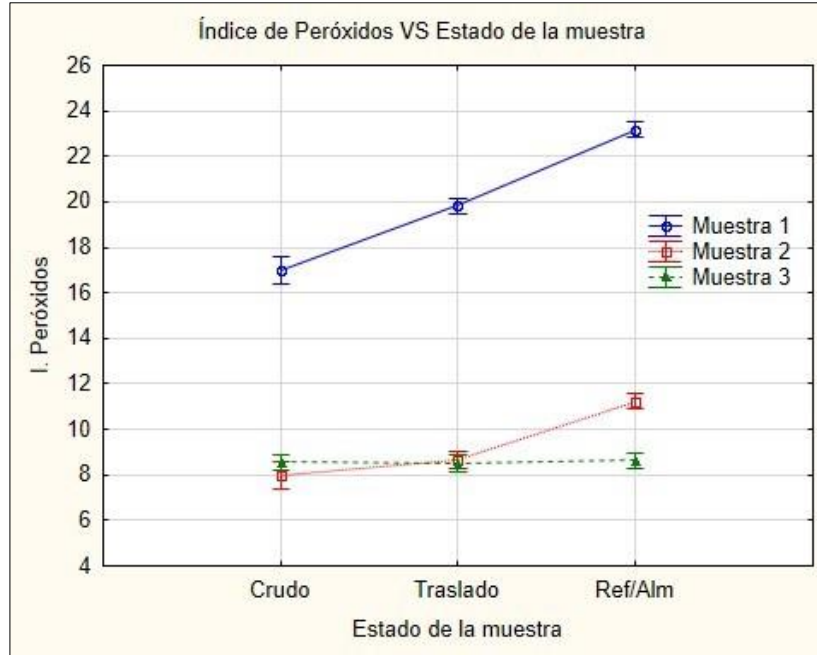


Figura A.3 Comparativa de IP contra estado de la muestra en las distintas etapas.

Observando los valores de % AGL e IP iniciales, se puede deducir que las tres muestras presentan un grado importante de deterioro desde el proceso de extracción, particularmente M1 que se obtuvo de un tanque de almacenamiento al exterior. Reportes de la literatura indican que normalmente los aceites marinos crudos contienen alrededor de 5% de AGL (Young, 1986b), mientras que el Índice de Peróxidos se recomienda que sea menor a 10 meq. O<sub>2</sub>/kg (Omegavia, 2010).

En cuanto a la muestra M3, como se mencionó anteriormente, se encontraba en emulsión con agua; al realizar la extracción de la fracción lipídica mediante el método Roesse-Gottlieb se obtuvo un porcentaje de grasa de 3.78% del total de la muestra pesada, por lo que, aunque esta muestra presentó buenos resultados, la cantidad de grasa que contiene es relativamente baja y difícilmente sería rentable su procesamiento para romper la emulsión.

Por otro lado, se observa que el traslado de las muestras hasta San Luis Potosí no tuvo un efecto significativo en los parámetros medidos para las muestras menos deterioradas (M2 y M3), mientras que en el caso de M1, este traslado aumentó significativamente ( $p < 0.05$ ) el %AGL y el valor de IP. Esto se traduce en que, mientras mayor sea el deterioro inicial de una muestra, ésta será más propensa a continuar sufriendo estos procesos de oxidación e hidrólisis.

En cuanto al efecto de la refinación de las muestras y almacenamiento, evidentemente se redujo el %AGL al neutralizar los ácidos grasos libres, aunque esto implicó un aumento en el IP ya que es necesario aún implementar una etapa de deodorización para complementar este refinado y retirar los productos de oxidación formados. Cabe mencionar que para M3, que únicamente fue almacenada en frío sin refinación, no hubo cambios significativos en los parámetros.

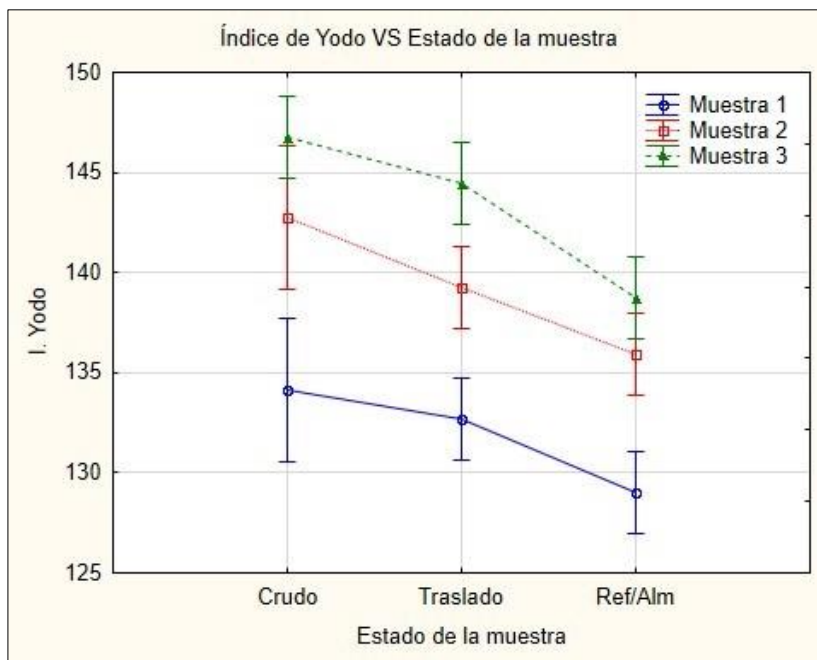


Figura A.4 Comparativa de IY contra estado de la muestra en las distintas etapas.

Finalmente, el análisis de IY mostró valores prometedores desde el inicio, indicando la presencia de insaturaciones en los ácidos grasos; los valores reportados en la literatura de IY para aceites marinos van desde 120 hasta 180 (AOCS, 2003c), obteniéndose en las muestras valores dentro del rango. El refinado y almacenamiento de las muestras tuvo un efecto significativo ( $p < 0.05$ ) negativo al reducir este índice, sin embargo, aún se mantiene superior a 125, por lo que estos aceites conservan gran cantidad de insaturaciones después de los tratamientos.

Conociendo los parámetros básicos de calidad de las muestras, fue necesario verificar que las insaturaciones detectadas pertenecieran a ácidos grasos de la familia  $\omega$ -3. El perfil de ácidos grasos se determinó por duplicado de cada muestra, y para identificar las respuestas obtenidas en el cromatograma se compara mediante un estándar que contiene varios ácidos grasos (Figura A.5). Los cromatogramas de las muestras M1, M2 y M3 se muestran en las Figuras A.6, A.7 y A.8 respectivamente, con los ácidos grasos identificados. Por su parte, los resultados de los porcentajes obtenidos se muestran en la Tabla A.2, donde se



observa que efectivamente se encuentra gran cantidad de PUFAs, particularmente DHA en todas las muestras.

Estos datos permitieron establecer que la mejor muestra a partir de la cual se recomendaría diseñar el proceso de obtención de concentrados de  $\omega$ -3 fue la muestra M2, ya que, además de la presencia de DHA, el grado de deterioro obtenido es aceptable a comparación de M1, y no se encuentra en emulsión como M3. El perfil de ácidos grasos de M2, así como el %AGL inicial (~7%) se tomarán como punto de partida para el diseño del caso base de procesamiento. En cuanto a la composición de la fracción insaponificable y otras impurezas, estas fueron propuestas mediante una revisión de la literatura (Bimbo, 1998; Breivik, 2007; Young, 1986a), para complementar el perfil de los componentes del aceite de atún.

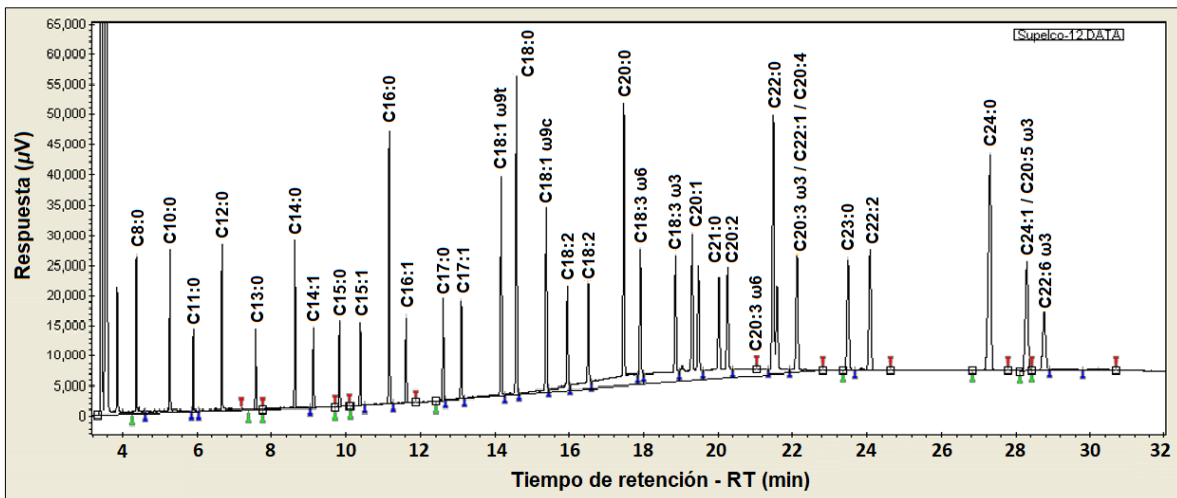


Figura A.5 Cromatograma obtenido de la mezcla estándar de esteres metílicos Supelco®.

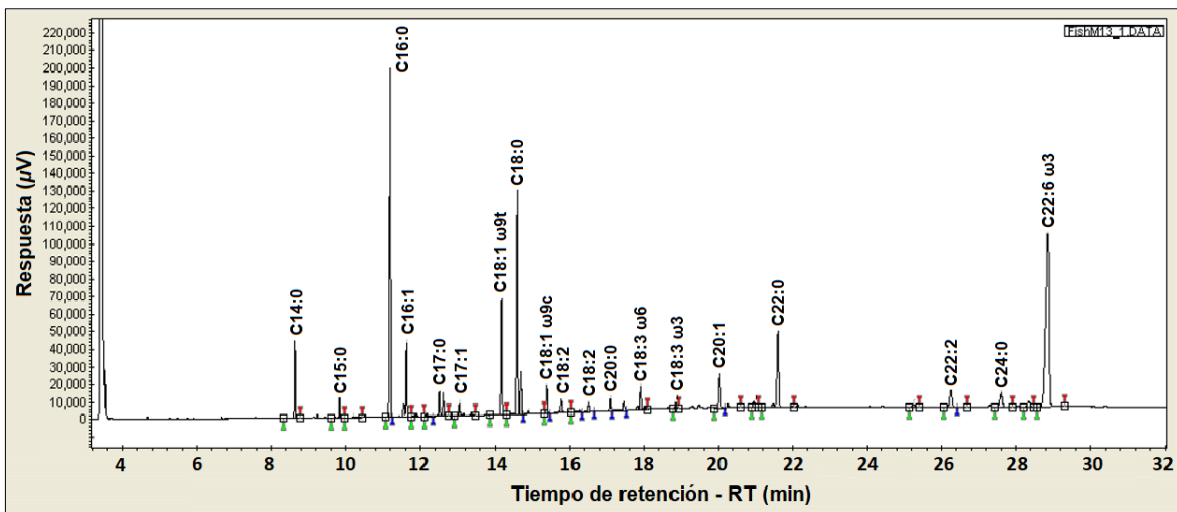


Figura A.6 Cromatograma obtenido del perfil de ácidos grasos de la muestra M1.

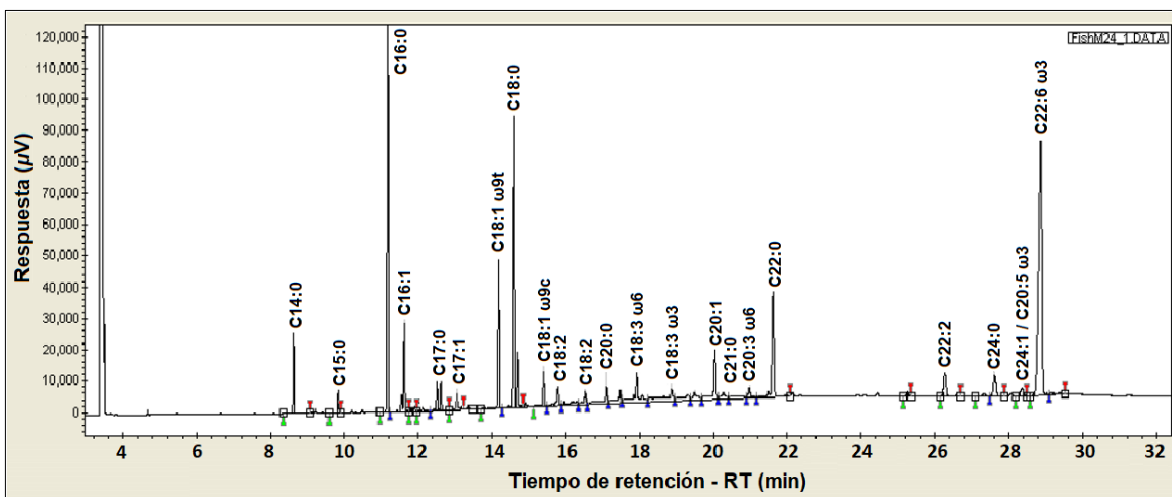


Figura A.7 Cromatograma obtenido del perfil de ácidos grasos de la muestra M2.

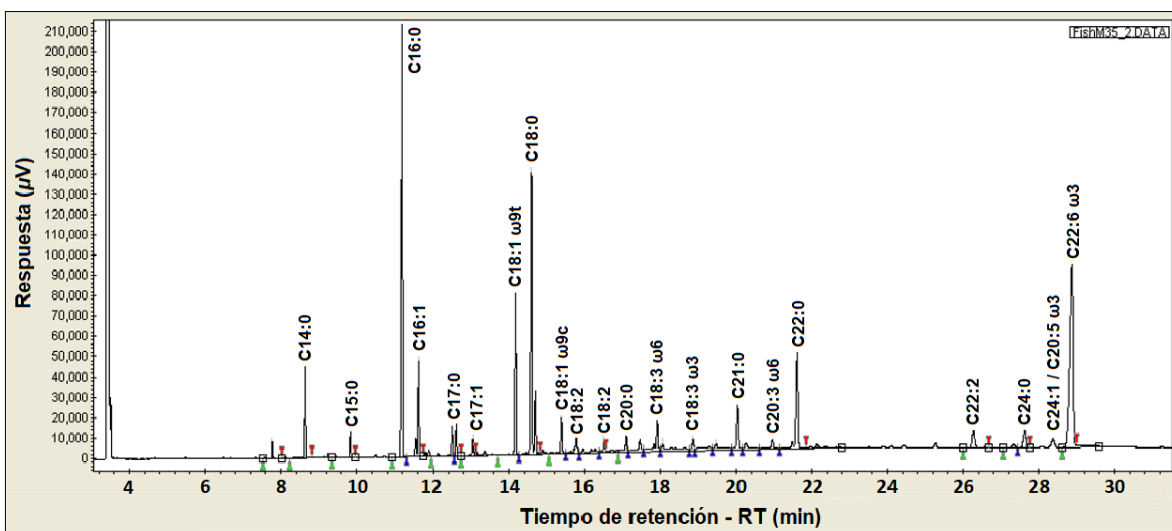


Figura A.8 Cromatograma obtenido del perfil de ácidos grasos de la muestra M3.

Tabla A.2 Perfil de ácidos grasos de las muestras de aceite de atún.

Ácido Graso			M1	M2	M3
			% p/p		
SATURADOS	Mirístico	C14:0	3.03 ± 0.17	2.51 ± 0.38	3.20 ± 0.54
	Pentadecanoico	C15:0	0.89 ± 0.04	0.76 ± 0.13	0.97 ± 0.08
	Palmítico	C16:0	17.70 ± 0.52	15.49 ± 2.38	18.15 ± 2.57
	Heptadecanoico	C17:0	2.55 ± 0.05	2.28 ± 0.32	2.64 ± 0.14
	Esteárico	C18:0	15.21 ± 0.02	14.20 ± 1.52	15.39 ± 1.26
	Araquídico	C20:0	0.66 ± 0.03	1.09 ± 0.55	0.99 ± 0.65
	Heneicosanoico	C21:0	2.92 ± 0.07	4.02 ± 1.86	3.34 ± 1.01
Behénico	C22:0	6.97 ± 0.08	6.86 ± 0.22	6.76 ± 0.07	
MONOINSATURADOS	Palmitoleico	C16:1	4.46 ± 0.15	3.99 ± 0.61	4.53 ± 0.46
	Heptadecenoico	C17:1	0.99 ± 0.18	0.79 ± 0.02	0.77 ± 0.09
	Oleic	C18:1 ω9c	6.32 ± 0.03	5.76 ± 0.58	6.82 ± 0.58
	Vaccenic	C18:1 ω9t	1.57 ± 0.01	1.47 ± 0.01	1.68 ± 0.07
	Elaidico	C18:1 ω6t	1.31 ± 0.01	1.23 ± 0.11	1.20 ± 0.08
	Gadoleico	C20:1	-	0.75 ± 1.06	1.40 ± 1.98
	Erucico	C22:1	-	-	-
POLIINSATURADOS	Linoleico	C18:2	0.75 ± 0.18	0.72 ± 0.21	1.21 ± 0.81
	γ-Linolenico	C18:3 ω6	1.98 ± 0.01	2.68 ± 1.44	2.15 ± 0.65
	α-Linolenico	C18:3 ω3	0.43 ± 0.00	1.61 ± 1.69	1.84 ± 1.91
	Estearidónico	C18:4	-	1.34 ± 0.76	0.93 ± 0.31
	Eicosadienoico	C20:2	-	0.38 ± 0.53	-
	Eicosatrienoico	C20:3 ω3	-	-	0.13 ± 0.18
	Eicosatrienoico	C20:3 ω6	-	0.65 ± 0.15	0.92 ± 0.54
	Araquidónico	C20:4 ω6	2.13 ± 0.10	1.98 ± 0.09	1.55 ± 0.06
	Eicosatetraenoico	C20:4 ω3	1.90 ± 0.04	1.79 ± 0.14	1.01 ± 0.99
	EPA	C20:5 ω3	-	0.79 ± 0.06	1.28 ± 0.37
	DHA	C22:6 ω3	28.24 ± 0.69	26.90 ± 1.91	21.15 ± 1.51
DPA	C22:5 ω3	-	-	-	

Total Saturados	49.93	47.21	51.44
Total Monoinsaturados	14.65	13.99	16.4
Total Poliinsaturados	35.43	38.84	32.17

## Apéndice B. Factores de separación y rendimientos por proceso.

### i) Factores (eficiencias) de separación

Representan el porcentaje de separación de cada compuesto por proceso.

- Desgomado:

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :				Referencias
	B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>3</sub>	B <sub>4</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	9%	10%	5.82%	21.6%	(Gupta, 2017) (Dijkstra, 2013) (Dijkstra, 2010) (Lamas & Massa, 2017) (Manjula & Subramanian, 2006)
Agua y jabones	95%	95%	95%	-	
Fosfolípidos hidratables	90%	91%	96%	96.8%	
Fosfolípidos no hidratables	5%	91%	96%	96.8%	
AGL	-	-	-	12.7%	
Solvente (hexano)	-	-	-	99.9%	

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :				Referencias
	B <sub>5</sub>	B <sub>6</sub>	B <sub>7</sub>	B <sub>8</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	7.5%	10%	10%	10%	(Dijkstra & Van Opstal, 1989) (Gupta, 2017) (Choukri et al., 2001) (Alfa Laval Inc., 2010)
Agua y jabones	95%	95%	96%	95%	
Fosfolípidos hidratables	95.3%	94.8%	98.1%	93%	
Fosfolípidos no hidratables	95.3%	94.8%	98.1%	93%	
AGL	10%	-	-	60%	

- Neutralización:

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :				Referencias
	B <sub>9</sub>	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	9%	11%	11%	5%	(Svenson & Willits, 2014) (Gupta, 2017) (Alfa Laval Inc., 2010) (Breivik, 2007) (Mariem & Fatima, 2017)
Agua y jabones	95%	95%	95%	95%	
Fosfolípidos hidratables	95%	90%	90%	90%	
Fosfolípidos no hidratables	95%	90%	90%	90%	
AGL	60%	45%	45%	91.1%	

- Lavado/Secado:

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :		Referencias
	D <sub>1</sub>	D <sub>2</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	13%	4.5%	(Gupta, 2017) (Mag, 2007) (Shahidi, 2005)(Grace & Co., 2011) (Blanco Rodríguez, 2007)
Agua (humedad)	95% (×3)	98.5%	
Jabones, sales y fosfolípidos	95% (×3)	98.5%	

- Blanqueado:

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :				Referencias
	E <sub>1</sub>	E <sub>2</sub>	E <sub>3</sub>	E <sub>4</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	0.55 g/g adsorbente	0.20 g/g adsorbente	0.30 g/g adsorbente	0.35 g/g adsorbente	(Ribeiro et al., 2001) (Maes et al., 2005) (Kaynak et al., 2004) (García-Moreno et al., 2013) (Gupta, 2017) (Suseno et al., 2015) (Stout et al., 1949)
Jabones, sales y fosfolípidos	50%	40%	20%	50%	
Pigmentos ( $\beta$ -caroteno)	75%	75%	75%	75%	
AGL	-	-	-	30.7%	
Volátiles	-	-	-	21.7%	

- Deodorización:

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :					Referencias
	F <sub>1</sub>	F <sub>2</sub>	F <sub>3</sub>	F <sub>4</sub>	F <sub>5</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	1%	1%	5%	5%	15%	(Ceriani & Meirelles, 2004) (Song et al., 2018) (Nieto et al., 1993) (Dinamarca et al., 1990) (Oterhals et al., 2010) (Fang et al., 2018) (Sereewatthanawut et al., 2011).
AGL	35%	20%	5%	5%	55%	
Volátiles	90%	92%	96.7%	69.7%	92.2%	
Tocoferoles	Ec. 4.11	20%	5%	5%	3%	
Agua (humedad)	99%	99%	95%	95%	95%	

- Modificación de aceite:

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :			
	G <sub>1</sub>	G <sub>2</sub>	G <sub>3</sub>	G <sub>4</sub>
Aceite neutro (pérdida)	16%	9%	8%	8%
Referencias	(Fiori et al., 2017) (Mendow & Querini, 2013) (Nascimento et al., 2015) (Armenta et al., 2007) (Stavarache et al., 2007) (Bucio et al., 2015) (Yan et al., 2018) (Lei et al., 2016) (Sousa et al., 2014)			

- Concentrado de Omega-3:

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :				Referencias
	H <sub>1</sub>	H <sub>2</sub>	H <sub>3</sub>	H <sub>4</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	2%	15%	2%	4%	(Solaesa et al., 2016) (Wang et al., 2012) (Zhang et al., 2012) (Kim & Kim, 2016) (Fiori et al., 2017) (Pettinello et al., 2000) (Alkio et al., 2000)
FAEEs poliinsaturados	65%	55%	85%	90%	
FAEEs monoinsaturados	20%	30%	10%	5%	
FAEEs saturados	15%	15%	5%	5%	

Componente	Eficiencias de separación $\xi_k$ :			Referencias
	H <sub>5</sub>	H <sub>6</sub>	H <sub>7</sub>	
Aceite neutro (pérdida)	6%	12%	5%	(Dillon et al., 2013) (Fagan & Wijesundera, 2013) (Ghasemian et al., 2015) (Ghasemian et al., 2017) (Lei et al., 2016) (Cunha et al., 2009)
FAEEs poliinsaturados	89%	-	-	
FAEEs monoinsaturados	5%	-	-	
FAEEs saturados	6%	-	-	
TAGs poliinsaturados	-	54%	56%	
TAGs monoinsaturados	-	16%	28%	
TAGs saturados	-	30%	16%	

Nota: El aceite neutro representa los triacilglicéridos y compuestos inocuos del aceite (colesterol, esteroides, tocoferoles, ceras, etc.). Se busca que su pérdida o porcentaje de separación sea lo menor posible.

## ii) Conversiones de reacción.

Proceso	Reacción	Conversión	Referencias
Desgomado: B <sub>2</sub> , B <sub>5</sub> , B <sub>8</sub> , B <sub>9</sub>	NHP + ácido fosfórico → HP + sales de fosfato $RPO_4X_2 + 2H_3PO_4 \rightarrow RPO_4H_2 + 2XH_2PO_4$	~55%	(Dijkstra, 2013)
Desgomado enzimático: B <sub>3</sub>	NHP → HP + AGL $RPO_4X_2 \rightarrow PO_4X_2 + RCOOH$	98%	(Dijkstra, 2010)
Desgomado Unilever: B <sub>6</sub>	NHP + ácido cítrico → HP + sales de fosfato $RPO_4X_2 + 2C_6H_8O_7 \rightarrow RPO_4H_2 + 2XC_6H_7O_7$	~55%	(Van de Sande & Segers, 1989)
Desgomado soft: B <sub>7</sub>	NHP + EDTA → HP + sales de EDTA $RPO_4X_2 + EDTA(H_2) \rightarrow RPO_4H_2 + EDTAX_2$	~98%	(Choukri et al., 2001)
Neutralización: B <sub>5</sub> , B <sub>6</sub> , B <sub>8</sub> , B <sub>9</sub> , C <sub>1</sub> , C <sub>2</sub>	AGL + NaOH → Jabones + agua $RCOOH + NaOH \rightarrow RCOONa + H_2O$	~80%	(Svenson & Willits, 2014)
Neutralización: B <sub>5</sub> , B <sub>6</sub> , B <sub>8</sub> , B <sub>9</sub> , C <sub>1</sub> , C <sub>2</sub>	TAG + NaOH → Jabones + glicerol $R_3C_6H_6O_5 + 3NaOH \rightarrow 3RCOONa + C_3H_8O_3$	~10%	(Svenson & Willits, 2014)
Neutralización: B <sub>5</sub> , B <sub>6</sub> , B <sub>8</sub> , B <sub>9</sub> , C <sub>1</sub> , C <sub>2</sub>	Ácido fosfórico + NaOH → Jabones + agua $H_3PO_4 + NaOH \rightarrow NaPO_4H_2 + H_2O$	~98%	(Svenson & Willits, 2014)
Neutralización enzimática: C <sub>3</sub>	AGL + glicerol → TAG + agua $3RCOOH + C_3H_8O_3 \rightarrow R_3C_6H_3O_5 + 4H_2O$	~91%	(Mariem & Fatima, 2017)
Transesterific. química: G <sub>1</sub> , G <sub>2</sub>	TAG + etanol → FAEEs + glicerol $R_3C_6H_6O_5 + 3C_2H_5OH \rightarrow 3RC_3H_5O_2 + C_3H_8O_3$	73%	(Fiori et al., 2017)
Transesterific. ultrasonido: G <sub>1</sub> , G <sub>2</sub>	TAG + etanol → FAEEs + glicerol $R_3C_6H_6O_5 + 3C_2H_5OH \rightarrow 3RC_3H_5O_2 + C_3H_8O_3$	98%	(Armenta et al., 2007)
Transesterific. enzimática: G <sub>3</sub>	TAG + etanol → FAEEs + glicerol $R_3C_6H_6O_5 + 3C_2H_5OH \rightarrow 3RC_3H_5O_2 + C_3H_8O_3$	85%	(Yan et al., 2018)
Interesterific. enzimática: G <sub>4</sub>	TAG → (SFA)TAG + (MUFA)TAG + (PUFA)TAG $3R_3C_6H_6O_5 \rightarrow R_3^{11}C_6H_6O_5 + R_3^{12}C_6H_6O_5 + R_3^{13}C_6H_6O_5$	~80%	(Lei et al., 2016)

## Apéndice C. Costos operativos (OPEX) y capitales (CAPEX) por procesos.

Costos en pesos mexicanos (MXN \$):

- Desgomado con agua ( $B_1$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	%(HP + NHP) = 0.013	0.0106
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Bomba centrífuga	2	283,601.1
	Calentador	1	70,286.6
	Reactor/mezclador	1	260,270.1
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>1,265,197.0</b>

- Desgomado ácido ( $B_2$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	%(HP + NHP) = 0.013	0.0106
	Ácido fosfórico (85%)	Ec. 4.1, exceso 5.0	40.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Bomba centrífuga	2	283,601.1
	Calentador	1	70,286.6
	Reactor/mezclador	2	260,270.1
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>1,525,467.0</b>

- Desgomado enzimático ( $B_3$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	%(HP + NHP) = 0.013	0.0106
	Fosfolipasa PLA1	200 ppm (0.0002)	365.47
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Bomba centrífuga	3	283,601.1
	Calentador	2	70,286.6
	Reactor/mezclador	2	260,270.1
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>1,879,355.0</b>



- Desgomado por ultrafiltración ( $B_4$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Hexano	30% p/p = 0.30	21.45
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Membrana UF	$m^2 = F_0[L]/24.5$	$36,300 \times m^2$
	Calentador	1	70,286.6
	Reactor/mezclador	2	260,270.1
	Bomba centrífuga	2	283,601.1
	Destilador solvente	1	303,805.7
	<b>TOTAL:</b>		<b>1,722,602.0</b>

- Desgomado TOP ( $B_5$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	$\%(\text{HP} + \text{NHP}) = 0.013$	0.0106
	Ácido fosfórico (85%)	Ec. 4.1, exceso 10.0	40.0
	NaOH (16° Be)	2% p/p aceite = 0.02	9.75
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Reactor/mezclador	3	260,270.1
	Bomba centrífuga	3	283,601.1
	Separador centrífuga	2	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,436,776.4</b>

- Desgomado especial Unilever® ( $B_6$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	2% p/p aceite = 0.02	0.0106
	Ácido cítrico	0.1% p/p aceite = 0.001	4.26
	NaOH (16° Be)	0.1% p/p aceite = 0.001	9.75
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Reactor/mezclador	4	260,270.1
	Bomba centrífuga	2	283,601.1
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,046,007.4</b>

- Desgomado Soft Tirtiaux® ( $B_7$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	$\%(\text{HP} + \text{NHP}) = 0.013$	0.0106
		5% p/p aceite = 0.05	0.0106
	EDTA	150 mM = 0.00219	351.0
	SDS	50 mM = 0.000721	390.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	2	70,286.6
	Reactor/mezclador	4	260,270.1
	Bomba centrífuga	4	283,601.1
	Separador centrífuga	2	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>3,050,934.0</b>

- Desgomado especial Combi-Mix Alfa-Laval® ( $B_8$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	2.5% + 3% = 0.055	0.0106
	Ácido fosfórico (85%)	Ec. 4.1, exceso 3.0	40.0
	NaOH (16° Be)	Ec. 4.3, exceso 30%	9.75
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	2	70,286.6
	Reactor/mezclador	3	260,270.1
	Bomba centrífuga	3	283,601.1
	Separador centrífuga	2	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,507,063.0</b>

- Nano-neutralización ( $B_9$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	%(HP + NHP) = 0.013 + Ec. 4.3	0.0106
	Ácido fosfórico (85%)	Ec. 4.1, exceso 10%	40.0
	NaOH (14° Be)	Ec. 4.3, exceso 9%	9.75
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	2	70,286.6
	Mezclador	1	260,270.1
	Bomba centrífuga	1	283,601.1
	Bomba alta presión	1	4,354,034.0
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	Nano-reactor	1	260,270.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>5,666,186.67</b>

- Neutralización química "short-mix" ( $C_1$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	Ec. 4.3 (100 - %NaOH)	0.0106
	NaOH (18° Be)	Ec. 4.3, exceso 30%	9.75
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Reactor/mezclador	1	260,270.1
	Bomba centrífuga	2	283,601.1
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>1,265,197.0</b>

- Neutralización química “long-mix” ( $C_2$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	Ec. 4.3 (100 - %NaOH)	0.0106
	NaOH (14° Be)	Ec. 4.3, exceso 20%	9.75
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	2	70,286.6
	Reactor/mezclador	3	260,270.1
	Bomba centrífuga	3	283,601.1
	Separador centrífuga	2	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,507,063.0</b>

- Desadificación enzimática ( $C_3$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Glicerol	2% p/p aceite	39.0
	Novozyme 435	1% p/p aceite	2585.7
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	2	70,286.6
	Mezclador	1	260,270.1
	Reactor enzimático	1	260,270.1
	Bomba centrífuga	3	283,601.1
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>1,879,355.0</b>

- Tratamiento con agua y secado a vacío ( $D_1$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	10% p/p aceite (x3)	0.0106
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Mezclador	3	260,270.1
	Bomba centrífuga	4	283,601.1
	Separador centrífuga	3	367,438.1
	Destilador flash	1	260,270.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>3,348,086.0</b>

- Tratamiento con hidrogeles de sílice Trisyl® ( $D_2$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Trisyl®	0.5% p/p aceite	350.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Mezclador	1	260,270.1
	Bomba centrífuga	3	283,601.1
	Filtros	2	440,318.7
	Destilador flash	1	260,270.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>3,348,086.0</b>

- Tratamiento con carbón activado ( $E_1$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	<i>Reactivos:</i> Carbón activado	Cantidad (kg/h) Ec. 4.6	Costo (\$/kg) 16.85
CAPEX	<i>Equipo:</i> Calentador Mezclador Bomba centrífuga Filtros Tanques de retención <i>TOTAL:</i>	Cantidad 1 1 3 2 2	Costo (\$/unidad) 70,286.6 260,270.1 283,601.1 440,318.7 260,270.1 2,582,537.5

- Tratamiento con tierras de blanqueado naturales ( $E_2$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	<i>Reactivos:</i> Arcillas naturales	Cantidad (kg/h) Ec. 4.6	Costo (\$/kg) 6.50
CAPEX	<i>Equipo:</i> Calentador Mezclador Bomba centrífuga Filtros Tanques de retención <i>TOTAL:</i>	Cantidad 1 1 3 2 2	Costo (\$/unidad) 70,286.6 260,270.1 283,601.1 440,318.7 260,270.1 2,582,537.5

- Tratamiento con tierras activadas ( $E_3$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	<i>Reactivos:</i> Arcilla activada	Cantidad (kg/h) Ec. 4.6	Costo (\$/kg) 7.26
CAPEX	<i>Equipo:</i> Calentador Mezclador Bomba centrífuga Filtros Tanques de retención <i>TOTAL:</i>	Cantidad 1 1 3 2 2	Costo (\$/unidad) 70,286.6 260,270.1 283,601.1 440,318.7 260,270.1 2,582,537.5

- Tratamiento con silicatos ( $E_4$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	<i>Reactivos:</i> Silicato de magnesio	Cantidad (kg/h) Ec. 4.6	Costo (\$/kg) 12.97
CAPEX	<i>Equipo:</i> Calentador Mezclador Bomba centrífuga Filtros Tanques de retención <i>TOTAL:</i>	Cantidad 1 1 3 2 2	Costo (\$/unidad) 70,286.6 260,270.1 283,601.1 440,318.7 260,270.1 2,582,537.5

- Destilación (deodorización) con arrastre de vapor ( $F_1$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Vapor de agua	Ec. 4.9	2.43
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Intercambiador	2	70,286.6
	Enfriador	2	70,286.6
	Tanque desaireador	1	260,270.1
	Columna de destilación	1	234,390.5
	Condensador	1	70,286.6
	Bomba centrífuga	4	283,601.1
	Filtros	1	440,318.7
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,491,103.0</b>

- Destilación (deodorización) molecular / short-path ( $F_2$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Fluido de arrastre	7% p/p aceite	156.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiador	3	70,286.6
	Mezclador	1	260,270.1
	Tanque desaireador	1	260,270.1
	Columna de destilación	1	234,390.5
	Condensador	1	70,286.6
	Bomba centrífuga	4	283,601.1
	Filtros	1	440,318.7
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,610,800.0</b>

- Extracción líquido-líquido ( $F_3$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Etanol	(45:55 v/v) a 1:5 aceite/solvente	14.625
	Agua	(45:55 v/v) a 1:5 aceite/solvente	0.0106
	Hidróxido de potasio	0.5% p/p aceite	56.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiador	3	70,286.6
	Tanque mezclador	2	260,270.1
	Bomba centrífuga	5	283,601.1
	Separador centrífuga	1	367,438.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,610,800.0</b>

- Tratamiento GTP ( $F_4$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Extracto de polifenol	10% p/p aceite	503.3
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Enfriador	1	70,286.6
	Mezclador	1	260,270.1
	Bomba centrífuga	3	283,601.1
	Filtros	1	440,318.7
	Válvula de vacío	1	827,137.0
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,516,843.5</b>

- Nanofiltración con solvente ( $F_5$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Hexano	1:3 v/v solvente/aceite	21.45
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Calentador	1	70,286.6
	Sistema membrana NF	1	260,270.1
	Mezclador	1	260,270.1
	Bomba centrífuga	2	283,601.1
	Bomba HPLC	1	4,354,034.0
	Destilador solvente	1	260,270.1
	<b>TOTAL:</b>		<b>5,772,830.0</b>

- Transesterificación química ( $G_1$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Catalizador (NaOH)	1g/100mL aceite	9.75
	Reactivo (etanol)	16:1 molar etanol/aceite	14.625
	Agua	35% v/v ácido/aceite	0.0106
	Ácido clorhídrico 0.5 M	35% v/v ácido/aceite	3.27
	Ácido fosfórico	1% p/p aceite	40.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	4	70,286.6
	Reactor	1	212,933.6
	Mezclador	2	212,933.6
	Bomba centrífuga	8	267,574.9
	Separador centrífuga	2	300,610.4
	Decantadores	2	212,933.6
	Columna de destilación	2	234,390.5
	<b>TOTAL:</b>		<b>4,556,415.2</b>

- Transesterificación con ultrasonido ( $G_2$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Catalizador (NaOH)	0.8% p/p NaOH/aceite	9.75
	Reactivo (etanol)	6:1 molar etanol/aceite	14.625
	Agua	35% v/v ácido/aceite	0.0106
	Ácido clorhídrico 0.5 M	35% v/v ácido/aceite	3.27
	Ácido fosfórico	1% p/p aceite	40.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	3	70,286.6
	Equipo ultrasonido	1	280,000.0
	Reactor	1	212,933.6
	Mezclador	2	212,933.6
	Bomba centrífuga	8	267,574.9
	Separador centrífuga	2	300,610.4
	Decantadores	2	212,933.6
	Columna de destilación	2	234,390.5
	<b>TOTAL:</b>		<b>4,766,128.6</b>

- Transesterificación enzimática ( $G_3$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Lipasa (Novozym 435)	2% p/p aceite	2,585.7
	Solvente (etanol)	5:1 molar etanol/aceite	14.625
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	2	70,286.6
	Reactor enzimático	1	212,933.6
	Mezclador	1	212,933.6
	Bomba centrífuga	4	267,574.9
	Separador centrífuga	1	300,610.4
	Filtro enzima	1	356,150.4
	Columna de destilación	1	234,390.5
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,527,891.0</b>

- Interesterificación enzimática ( $G_4$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Lipasa (Lipozyme TL IM)	5% p/p aceite	2,585.7
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	2	70,286.6
	Reactor enzimático	1	212,933.6
	Mezclador	1	212,933.6
	Bomba centrífuga	4	267,574.9
	Separador centrífuga	1	300,610.4
	Filtro enzima	1	356,150.4
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,293,501.0</b>

- Destilación molecular / short-path ( $H_1$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	N/A	-	-
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	3	70,286.6
	Tanque desaireador	1	212,933.6
	Columna de destilación	1	234,390.5
	Bomba centrífuga	4	267,574.9
	Condensador	1	70,286.6
	Filtro	1	356,150.4
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,154,920.0</b>

- Formación de complejo de urea ( $H_2$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Urea	1:1 p/p urea/FAEEs	5.46
	Etanol	8:1 p/p urea/FAEEs	14.625
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	3	70,286.6
	Tanque de mezclado	2	212,933.6
	Destilador solvente	1	212,933.6
	Bomba centrífuga	4	267,574.9
	Filtro	1	356,150.4
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,276,110.5</b>

- Extracción con  $\text{CO}_2$  supercrítico ( $H_3$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	$\text{CO}_2$ supercrítico	100:1 p/p $\text{CO}_2$ /aceite	5.323
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	4	70,286.6
	Tanque de mezclado	1	212,933.6
	Columna de extracción	1	234,390.5
	Bomba centrífuga	3	267,574.9
	Bomba compresora $\text{CO}_2$	1	4,354,034.0
	Separador de fases	3	212,933.6
	Válvula de control	3	49,878.0
	<b>TOTAL:</b>		<b>6,673,664.0</b>



- Cromatografía con CO<sub>2</sub> supercrítico (H<sub>4</sub>):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	CO <sub>2</sub> supercrítico	25:1 p/p CO <sub>2</sub> /aceite	5.323
	Empaque columna	160 kg/año = 0.02 kg/h	9,776.0
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	2	70,286.6
	Tanque de mezclado	2	212,933.6
	Filtro	1	356,150.4
	Columna cromatográfica	2	234,390.5
	Bomba centrífuga	3	267,574.9
	Bomba compresora CO <sub>2</sub>	1	4,354,034.0
	Separador de fases	2	212,933.6
	Válvula de control	4	49,878.0
	<b>TOTAL:</b>		<b>7,173,509.5</b>

- Cromatografía argentométrica / HPLC (H<sub>5</sub>):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Nitrato de plata	0.65 kg/mes = 0.001 kg/h	5.323
	Empaque columna	160 kg/año = 0.02 kg/h	9,776.0
	Acetona	6 mL/min = 0.283 kg/h	27.105
	Acetonitrilo	1.5 mL/min = 0.072 kg/h	967.06
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	2	70,286.6
	Tanque de mezclado	2	212,933.6
	Filtro	1	356,150.4
	Columna cromatográfica	2	234,390.5
	Bomba centrífuga	4	267,574.9
	Bomba compresora	1	4,354,034.0
	Separador de fases	2	212,933.6
	Válvula de control	2	49,878.0
	<b>TOTAL:</b>		<b>7,341,328.5</b>

- Separación con membranas (H<sub>6</sub>):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	N/A	-	-
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	1	70,286.6
	Tanque de mezclado	1	212,933.6
	Bomba HPLC	1	4,354,034.0
	Bomba centrífuga	2	267,574.9
	Membrana PDVF/sílice	$m^2 = F_0[L]/6.3$	36,300×m <sup>2</sup>
	Módulo membrana	1	260,767.3
	<b>TOTAL:</b>		<b>2,154,920.0</b>

- Winterización / Cristalización a baja temperatura ( $H_7$ ):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Acetona	7.84/1 p/p acetona/aceite	27.105
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Intercambiadores	3	70,286.6
	Tanque de mezclado	2	212,933.6
	Cristalizador	2	914,879.3
	Bomba centrífuga	4	267,574.9
	Destilador solvente	2	212,933.6
	Filtro	1	356,150.4
	<b>TOTAL:</b>		<b>4,318,803.0</b>

- Encapsulado / adición de antioxidante ( $Y_1$ ) (SaintyCo, 2019):

Para procesar 1 kg de aceite:

OPEX	Reactivos:	Cantidad (kg/h)	Costo (\$/kg)
	Agua	25% de 0.15/1kg aceite	0.0106
	Gelatina	42.5% de 0.15/1kg aceite	48.75
	Glicerol	32.5% de 0.15/1kg aceite	39.0
	Antioxidante (BHT)	500 ppm = (0.0005)	278.16
CAPEX	Equipo:	Cantidad	Costo (\$/unidad)
	Equipo encapsulamiento SaintyCo® Aprila SG250	1	4,660,500.0

## Apéndice D. Cálculo de propiedades mediante Contribución de Grupos.

El uso de los métodos de Contribución de Grupos se basa en la información estructural de la molécula para predecir propiedades específicas: la propiedad del compuesto puro es función de la frecuencia en que aparecen estos grupos y sus contribuciones. Las contribuciones de cada grupo hacia una propiedad se suman para obtener el valor final aproximado de dicha propiedad.

A continuación, se presenta como ejemplo el cálculo de las propiedades de la trioleína, compuesto representativo de los triacilglicéridos monoinsaturados que consiste en tres moléculas de ácido oleico esterificados con glicerol. Su fórmula molecular es  $C_{57}H_{104}O_6$  y su peso molecular 885.432 g/mol.

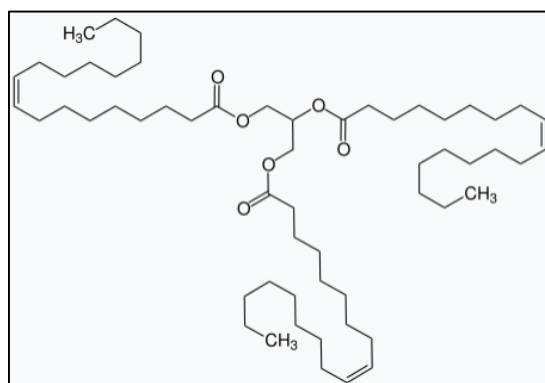


Figura A.9 Estructura molecular de la trioleína.

De acuerdo con la evaluación de métodos GC discutida en la sección 4.3, para calcular la mayoría de las propiedades de este grupo de TAGs los mejores resultados son obtenidos mediante el método de Constantinou-Gani (Constantinou & Gani, 1994). Este método clasifica los grupos en primer y segundo orden; para el caso de la trioleína, su estructura se encuentra compuesta por los siguientes grupos:

<u>Grupo (1° orden)</u>	<u>Nk:</u>	<u>Grupo (2° orden)</u>	<u>Nk:</u>
CH <sub>3</sub>	3	CH <sub>2</sub> -CH=CH	6
CH <sub>2</sub>	41		
CH	1		
CH <sub>2</sub> COO	3		
CH=CH	3		

Donde  $Nk$  es el número de veces que está presente cada grupo en la molécula. Teniendo la descomposición de los grupos, las propiedades se calculan mediante las siguientes ecuaciones:

- Temperatura de ebullición ( $T_b$ ):

$$T_b(K) = t_{b0} \ln\left(\sum_i Nk t_{bli}\right) \quad (\text{A.5})$$

- Temperatura crítica ( $T_c$ ):

$$T_c(K) = t_{c0} \ln\left(\sum_i Nk t_{cli}\right) \quad (\text{A.6})$$

- Presión crítica ( $P_c$ ):

$$P_c(\text{bar}) = p_{c2} + \left(p_{c1} + \sum_i Nk p_{cli}\right)^{-2} \quad (\text{A.7})$$

- Volumen crítico ( $V_c$ ):

$$V_c(\text{cm}^3 / \text{mol}) = v_{c0} + \sum_i Nk v_{cli} \quad (\text{A.8})$$

- Entalpía de formación ( $\Delta H_f^\circ$ ):

$$\Delta H_f^\circ(\text{KJ} / \text{mol}) = h_{f0} + \sum_i Nk h_{fli} \quad (\text{A.9})$$

Las cuales cuentan con constantes fijas:

$t_{b0}$	$t_{c0}$	$p_{c1}$	$p_{c2}$	$v_{c0}$	$h_{f0}$
204.359	181.128	1.3705	0.10022	-0.00435	10.835

Así como con constantes que dependen de los grupos que conforman la molécula:

Grupo	$t_{bli}$	$t_{cli}$	$p_{cli}$	$v_{cli}$	$h_{fli}$
CH <sub>3</sub>	0.8894	1.6781	0.019904	0.07504	-45.947
CH <sub>2</sub>	0.9225	3.492	0.010558	0.05576	-20.763
CH	0.6033	4.033	0.001315	0.03153	-3.766
CH <sub>2</sub> COO	3.3953	3.8116	0.021836	0.13649	-359.258
CH=CH	1.8433	7.3691	0.017865	0.09541	69.939
CH <sub>2</sub> -CH=CH	-0.1406	-0.5231	0.003538	0.00281	1.472

Estas constantes se utilizan en las ecuaciones A.5-A.9 considerando los grupos  $Nk$  de la molécula. Por ejemplo, para calcular la temperatura de ebullición de la trioleína el cálculo sería el siguiente:

$$T_b(K) = 204.359 \times \ln[3 \times 0.8894 + 41 \times 0.9225 + 1 \times 0.6033 + 3 \times 3.3953 + 3 \times 1.8433 + 6 \times (-0.1406)]$$

$$T_b = 822.49K$$

Para el resto de las propiedades los resultados son los siguientes:

$$T_c = 943.23K$$

$$P_c = 3.224 \text{ bar}$$

$$V_c = 3251.02 \text{ cm}^3 / \text{mol}$$

$$\Delta H_f^\circ = -1841.18 \text{ KJ} / \text{mol}$$

En cuanto a las propiedades dependientes de temperatura, por ejemplo, la presión de vapor, el procedimiento de cálculo es similar. De acuerdo con el método propuesto por Ceriani-Gani-Liu (Ceriani et al., 2013), la trioleína se conforma por los siguientes grupos:

Grupo	Nk:
CH <sub>3</sub>	3
CH <sub>2</sub>	42
CH=CH	6
COO	3
CH <sub>2</sub> -CH-CH <sub>2</sub>	1

Como se puede notar, la definición de los grupos también depende del método GC. En este caso, el cálculo de la presión de vapor se realiza como:

$$P^{vp} (Pa) = \exp \left[ A_i' + \frac{B_i'}{T} + C_i' \times \ln T \right] \quad (\text{A.10})$$

Donde:

$$A_i' = \sum_k Nk \times (A_{1k} + M_i A_{2k}) + \alpha(f_0 + N_c f_1) + (N_{cs} s_1) \quad (\text{A.11})$$

$$B_i' = \sum_k Nk \times (B_{1k} + M_i B_{2k}) + \beta(f_0 + N_c f_1) \quad (\text{A.12})$$

$$C_i' = \sum_k NK \times (C_{1k} + M_i C_{2k}) \quad (\text{A.13})$$

Para los acilglicéridos, los valores de las constantes son:  $f_0 = -0.4322$ ,  $f_1 = -0.0713$ ,  $s_0 = 0$ ,  $s_1 = 0$ ,  $\alpha = -3.8639$  y  $\beta = 2081.7$ . Para la trioleína,  $N_c = 57$  (número de carbonos en la molécula) y  $N_{cs} = 54$  (número de carbonos en las cadenas alifáticas).  $M_i$  es el peso molecular de la trioleína.

Los parámetros ajustados para el modelo de Ceriani-Gani-Liu son los siguientes:

Grupo	$A_{1k}$	$B_{1k}$	$C_{1k}$	$A_{2k}$	$B_{2k}$	$C_{2k}$
CH <sub>3</sub>	1.0583	1780.8	0.011484	0.2891	-87.312	-0.000039
CH <sub>2</sub>	-3.1789	1756.7	-0.64358	0.0000082404	-0.11714	0.0000474
COOH	40.658	1346.3	-7.7156	0.28661	-63.185	-0.0064767
CH=CH	-2.6923	1664.6	-0.64371	0.00000824	-0.11857	0.000048389
COO	3.6559	4880.9	-3.896	-0.012577	-1.2848	0.002455
OH	102.34	-6366.4	-13.915	0.11618	-75.611	0.024307
CH <sub>2</sub> -CH-CH <sub>2</sub>	-19.475	-15.76	-0.29666	-0.41479	124.96	0.009103

Estos valores se sustituyen en las ecuaciones A.10-A.13 y se evalúan a distintas temperaturas (K). Posteriormente, se realiza la correlación con la ecuación 4.16 (ver sección 4.3), la cual se minimiza para adaptar los resultados al modelo de Antoine (ecuación 4.15), y así obtener los parámetros  $a$ ,  $b$  y  $c$ . Gráficamente, esto se puede visualizar en la Figura A.10. Los valores para las nuevas constantes de la ecuación 4.16 para  $P^{vp}$  (mmHg) a  $T$  (K) son:

$$\begin{aligned}
 a &= 14.8697 \\
 b &= 9438.873 \\
 c &= -0.00086
 \end{aligned}$$

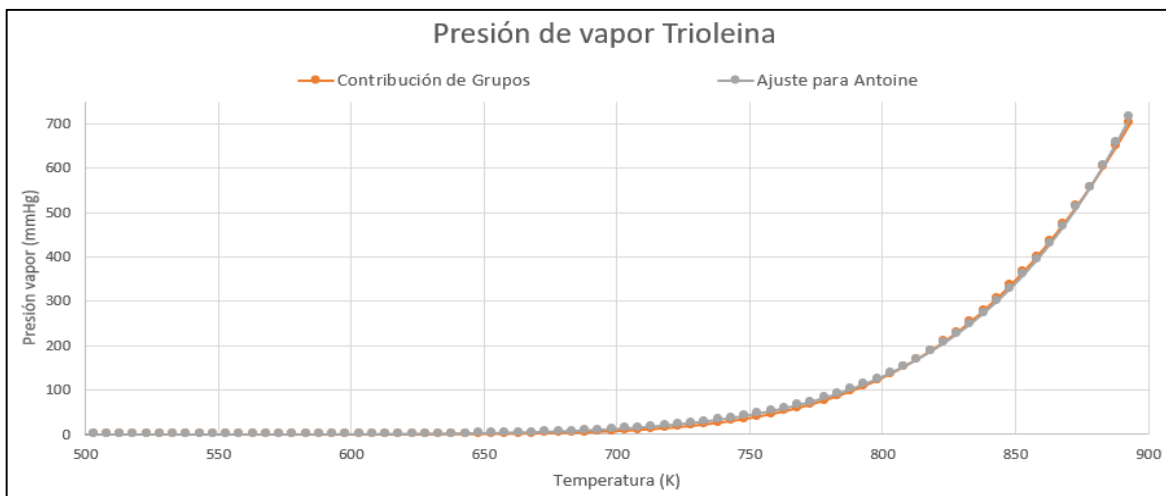


Figura A.10 Datos de presión de vapor calculados mediante Contribución de Grupos, y su posterior ajuste para la obtención de los parámetros de la ecuación de Antoine.

De igual forma, se obtiene la entalpía de vaporización mediante la ecuación:

$$\Delta H^{vap} (KJ / mol) = R \times (-B'_i + C'_i T) \left( 1 - \frac{T}{T_c} \right)^{\left( \frac{P^{vp}}{P_c} \right)} \quad (A.14)$$

Donde  $R$  es la constante de los gases (8.1344 J/mol-K) y tanto  $B_i'$  como  $C_i'$  son las constantes calculadas anteriormente para la presión de vapor. Nuevamente, se obtienen valores de  $\Delta H_v$ , en un rango de temperaturas y se realiza la corrección para calcular las constantes  $a$  y  $b$  requeridas para la ecuación 4.12. En el caso de la trioleína, se obtuvieron los valores de:

$$a = 273736.68$$

$$b = 0.51064$$

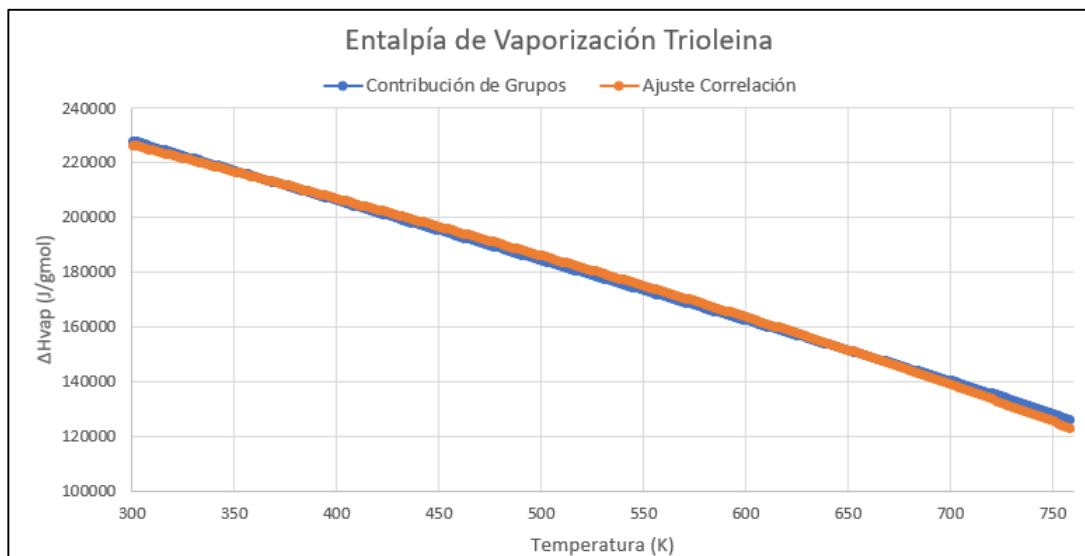


Figura A.11 Datos de entalpía de vaporización calculados mediante Contribución de Grupos, y su posterior ajuste para la obtención de parámetros  $a$  y  $b$ .

Finalmente, cabe destacar que, debido a la gran cantidad de compuestos presentes en el aceite de pescado, estos fueron agrupados en los componentes descritos en la Tabla 4.2 (ver sección 4.1). Las propiedades de dichos grupos se calcularon como un promedio ponderado de los TAGs o FAEEs individuales, de acuerdo a su porcentaje en el perfil de ácidos grasos. Esto se ejemplifica en la siguiente tabla:

Tabla A.3 Temperatura de ebullición ponderada de los triacilglicéridos saturados ( $k=11$ ).

Triacilglicéridos saturados	%p/p	$T_b$ (K)
Trimiristina	C14:0 2.5	672.40
Tripentadecanoína	C15:0 0.76	793.29
Tripalmitina	C16:0 15.49	690.02
Trimargarina	C17:0 2.28	815.36
Triestearina	C18:0 14.2	676.27
Triaraquidina	C20:0 1.09	844.57
Triheneicosanoína	C21:0 4.02	853.44
Tribehenina	C22:0 6.86	861.95
	<b><math>T_b</math> ponderado:</b>	<b>727.52</b>

## Apéndice E. Cálculo de Análisis de Ciclo de Vida mediante ReCiPe.

La metodología utilizada en el presente trabajo es ReCiPe 2016 (Huijbregts et al., 2016). La visualización general de las categorías de impacto de este método se muestra en la Figura A.12.

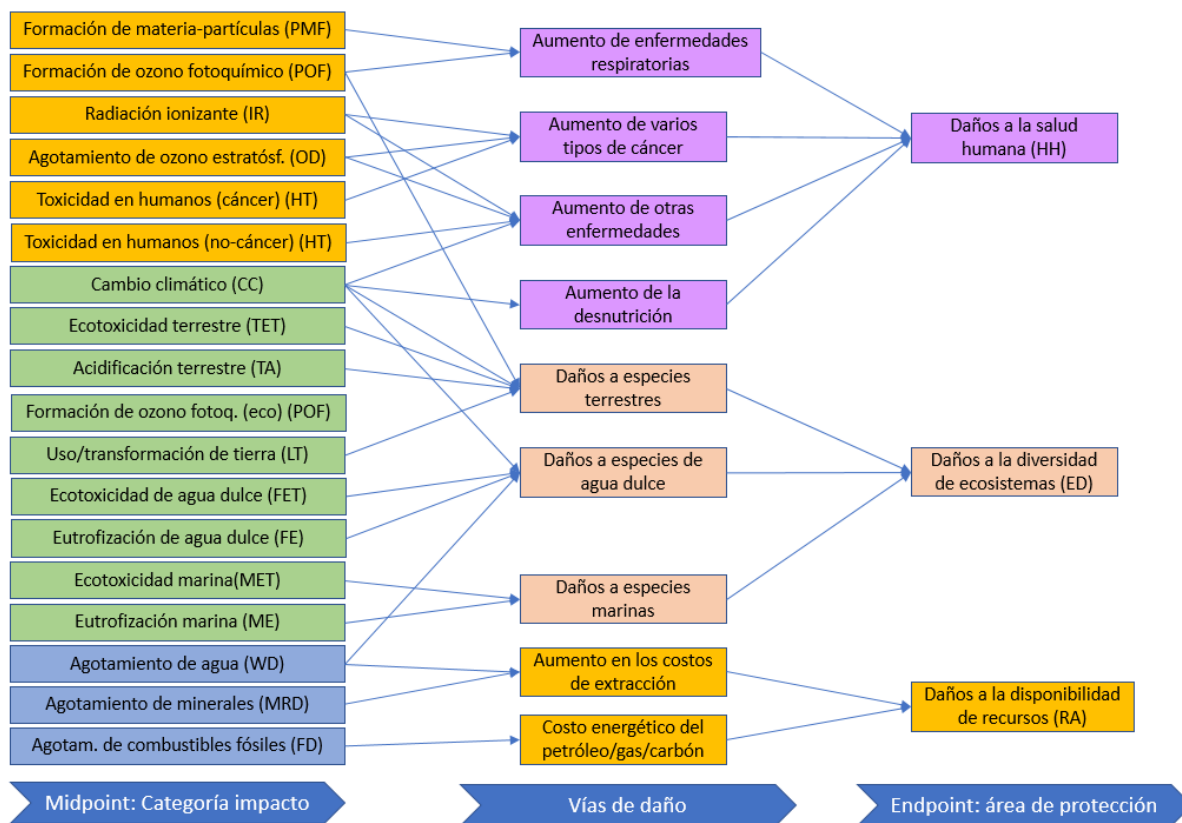


Figura A.12 Descripción general de las categorías de impacto cubiertas en la metodología ReCiPe 2016 y su relación con las áreas de protección (Endpoint).

La clasificación de las categorías Midpoint y Endpoint, su nomenclatura y unidades se describen en la siguiente tabla:

Tabla A.4 Categorías de impacto ReCiPe, nomenclatura y unidades.

Categoría de impacto	Nomenclatura	Unidades
<b>Midpoint:</b>		
Formación de materia/partículas	PMF	kg equiv. PM2.5
Formación de ozono fotoquímico (daño humano)	POF-H	kg equiv. NO <sub>x</sub>
Radiación ionizante	IR	kg equiv. Co-60
Agotamiento de ozono	OD	kg equiv. CFC-11
Toxicidad en humanos (cancerígeno)	HT-C	kg equiv. 1,4-DB
Toxicidad en humanos (no cancerígeno)	HT-NC	kg equiv. 1,4-DB
Cambio climático	CC	kg equiv. CO <sub>2</sub>
Ecotoxicidad terrestre	TET	kg equiv. 1,4-DB



Acidificación terrestre	TA	kg equiv. SO <sub>2</sub>
Formación de ozono fotoquímico (daño ecosist.)	POF-E	kg equiv. NO <sub>x</sub>
Uso/transformación de tierra	LT	m <sup>2</sup>
Ecotoxicidad de agua dulce	FET	kg equiv. 1,4-DB
Eutrofización de agua dulce	FE	kg equiv. P
Ecotoxicidad marina	MET	kg equiv. 1,4-DB
Eutrofización marina	ME	kg equiv. N
Agotamiento de agua	WD	m <sup>3</sup>
Agotamiento de minerales	MRD	kg equiv. Fe
Agotamiento de combustibles fósiles	FD	kg equiv. petróleo
<b>Endpoint:</b>		
Daños a la salud humana	HH	DALY (años de vida afectados)
Daños a la diversidad de ecosistemas	ED	Especies/año
Daños a la disponibilidad de recursos	RA	US\$/año

Dentro de todas las etapas de procesamiento de la superestructura se consideran las siguientes clasificaciones y nomenclatura de flujos de contaminantes:

Tabla A.5 Clasificación de contaminantes de todos los procesos de la superestructura.

Tipo de desecho/contaminante	Nom.	Procesos donde son desechados	Categorías Midpoint donde tienen impacto
Grasas y aceites	wtI	Todos	FET, MET, TET
DBO (compuestos volátiles)	wtII	Todos	POF-H, POF-E
Fosfátidos/fósforo	wtIII	Todos	FE
Ácido fosfórico	wtIV	B <sub>2</sub> , B <sub>5</sub> , B <sub>8</sub> , B <sub>9</sub> , G <sub>1</sub> , G <sub>2</sub>	MRD, FE
Jabones/sales	wtV	Desgomado (B <sub>b</sub> ) hasta modificación (G <sub>g</sub> )	FET, MET, TET
Tierras de blanqueado (bentonita)	wtVI	E <sub>2</sub> , E <sub>3</sub>	MRD, FET, MET, TET
Enzimas/componentes biológicos	wtVII	B <sub>3</sub> , C <sub>3</sub> , G <sub>3</sub> , G <sub>4</sub>	-
Hexano	wtVIII	B <sub>4</sub> , F <sub>5</sub>	POF-H, POF-E, FET, MET, TET, HT-C, HT-NC
Ácido cítrico	wtIX	B <sub>6</sub>	FET, MET, TET
EDTA	wtX	B <sub>7</sub>	FET, MET, TET
Dodecil sulfato de sodio (SDS)	wtXI	B <sub>7</sub>	FET, MET, TET
Glicerol	wtXII	C <sub>3</sub>	FET, MET, TET
Silicatos y gel de sílice (Trisyl®)	wtXIII	D <sub>2</sub> , E <sub>4</sub> , H <sub>4</sub> , H <sub>5</sub> , H <sub>6</sub>	MRD
Carbón activado	wtXIV	E <sub>1</sub>	MRD
Etanol	wtXV	F <sub>3</sub> , G <sub>1</sub> , G <sub>2</sub> , G <sub>3</sub> , H <sub>2</sub>	POF-H, POF-E, FET, MET, TET, HT-C
Urea	wtXVI	H <sub>2</sub>	FET, MET, TET
Dióxido de carbono CO <sub>2</sub>	wtXVII	Todos	CC
Nitrato de plata	wtXVIII	H <sub>5</sub>	MRD
Acetonitrilo	wtXI	H <sub>5</sub>	FET, MET, TET, HT-NC
Acetona	wtXX	H <sub>5</sub> , H <sub>7</sub>	POF-H, POF-E, FET, MET, TET, HT-NC

Estas clasificaciones son seleccionadas de acuerdo con los contaminantes incluidos en la base de datos de ReCiPe 2016. Por ejemplo, “grasas y aceites” engloba todos los componentes lipídicos como TAGs, AGL, colesterol, ceras, etc.

Con la finalidad de ejemplificar el cálculo de un ACV utilizando ReCiPe, se toma como base la etapa de desgomado ácido (B<sub>2</sub>) de la superestructura general (ver Figura 4.39) para el aceite de pescado.

Los pasos llevados a cabo para la realización del ACV son los siguientes:

- i) **Definición de objetivos y alcance:** El objetivo del trabajo es desarrollar una opción sustentable de procesamiento de aceite de pescado para obtener concentrados de  $\omega$ -3, evaluando entre distintas alternativas con el fin de discernir aquella con menor impacto en los indicadores evaluados. La unidad funcional del análisis es el flujo inicial de aceite procesado (162 kg/h).
- ii) **Inventario de Ciclo de Vida:** El inventario debe incluir las entradas y salidas del sistema delimitado: como ejemplo de cálculo, se considera el desgomado ácido (B<sub>2</sub>).

Tabla A.6 Inventario de Ciclo de Vida para el desgomado ácido.

Entradas de material	Cantidad	Unidad	Categorías de impacto y factor Midpoint	Flujo x factor
Aceite de atún crudo	162.0	kg/h	-	-
Ácido fosfórico 85% (wt/V)	1.619	kg/h	MRD= 0.166907	0.2702 kg eq. Fe
Consumo de agua	0.3562	m <sup>3</sup> /h	WD= 1.0	0.3562 m <sup>3</sup> agua
Salidas de material	Cantidad	Unidad		
Aceite desgomado	150.74	kg/h	-	-
Ác. fosfórico residuo (wt/V)	1.415	kg/h	FE= 0.32	0.4528 kg eq. P
Fosfolípidos/fósforo (wt/II)	2.196	kg/h	FE= 1.0	2.196 kg eq. P
Aceite residual (wt)	7.894	kg/h	FET= 0.214 MET= 0.00517 TET= 5.11 x10 <sup>-5</sup>	1.689 kg eq. 1,4-DB 0.041 kg eq. 1,4-DB 0.0004 kg eq. 1,4-DB
Compuestos volátiles (wt/II)	0.0162	kg/h	POF-H= 0.18 POF-E= 0.29	0.00291 kg eq. NO <sub>x</sub> 0.0047 kg eq. NO <sub>x</sub>
Agua residual	0.3562	m <sup>3</sup> /h	-	-
Consumo de energía	Cantidad	Unidad		
Gas natural (electricidad)	0.0475	kg/h	FD= 1.12249	0.0533 kg eq. petr.
Gas natural (servicios)	0.0243	kg/h	FD= 1.12249	0.0273 kg eq. petr.
Emisión eq. CO <sub>2</sub> (wtXVII)	0.4733	kg/h	CC= 1.0	0.4733 kg eq. CO <sub>2</sub>

- iii) **Evaluación del impacto de ciclo de vida:** Se multiplican los flujos del inventario por los factores de caracterización de la metodología seleccionada (ReCiPe) como se muestra en la Tabla A.6, y se realiza la sumatoria para cada categoría Midpoint:

Categoría de impacto Midpoint		Sumatoria	Unidades
Formación de ozono fotoquímico (daño humano)	POF-H	0.00291	kg eq. NO <sub>x</sub>
Formación de ozono fotoquímico (daño ecosist.)	POF-E	0.0047	kg eq. NO <sub>x</sub>
Eutrofización de agua dulce	FE	2.6488	kg eq. P
Ecotoxicidad de agua dulce	FET	1.689	kg eq. 1,4-DB
Ecotoxicidad marina	MET	0.041	kg eq. 1,4-DB
Ecotoxicidad terrestre	TET	0.0004	kg eq. 1,4-DB
Cambio climático	CC	0.4733	kg eq. CO <sub>2</sub>
Agotamiento de minerales	MRD	0.2702	kg eq. Fe
Agotamiento de combustibles fósiles	FD	0.0806	kg eq. petróleo
Agotamiento de agua	WD	0.3562	m <sup>3</sup> agua

Estos valores se multiplican a su vez, por los factores de conversión Endpoint para obtener los resultados en las mismas unidades y realizar la sumatoria a estas categorías finales.

Valor Midpoint	Unidades	Categorías y factor Endpoint	Flujo valor x factor	SUMATORIA
POF-H	0.00291 kg eq. NO <sub>x</sub>	HH= 9.10 x10 <sup>-7</sup>	2.65x10 <sup>-9</sup> DALY	HH= 1.23 x10 <sup>-6</sup> DALY
POF-E	0.0047 kg eq. NO <sub>x</sub>	ED= 1.29 x10 <sup>-7</sup>	6.06 x10 <sup>-10</sup> esp./año	
FE	2.6488 kg eq. P	ED= 6.71 x10 <sup>-7</sup>	1.78 x10 <sup>-6</sup> esp./año	ED= 1.78 x10 <sup>-6</sup> especies/año
FET	1.689 kg eq. 1,4-DB	ED= 6.95 x10 <sup>-10</sup>	1.17 x10 <sup>-9</sup> esp./año	
MET	0.041 kg eq. 1,4-DB	ED= 1.05 x10 <sup>-10</sup>	4.31 x10 <sup>-12</sup> esp./año	RA= 8.66 x10 <sup>-2</sup> US\$/año
TET	0.0004 kg eq. 1,4-DB	ED= 1.14 x10 <sup>-11</sup>	4.56 x10 <sup>-15</sup> esp./año	
CC	0.4733 kg eq. CO <sub>2</sub>	HH= 9.28 x10 <sup>-7</sup> ED= 2.80 x10 <sup>-9</sup>	4.39 x10 <sup>-7</sup> DALY 1.33 x10 <sup>-9</sup> esp./año	
MRD	0.2702 kg eq. Fe	RA= 0.23108	6.24 x10 <sup>-2</sup> US\$/año	
FD	0.0806 kg eq. petróleo	RA= 0.30	2.42 x10 <sup>-2</sup> US\$/año	
WD	0.3562 m <sup>3</sup> agua	HH= 2.22 x10 <sup>-6</sup> ED= 6.04 x10 <sup>-13</sup>	7.91 x10 <sup>-7</sup> DALY 2.15 x10 <sup>-13</sup> esp./año	

Finalmente, se utilizan valores de normalización y ponderación para agregar estos valores al indicador de puntuación final ACV mediante la ecuación 4.21.

Valor Endpoint	Unidades	Factor normalización	Flujo/factor	Factor ponderación	Resultado x factor pond.
HH	1.23 x10 <sup>-6</sup> DALY	0.0136389	9.04 x10 <sup>-5</sup>	400	0.0362
ED	1.78 x10 <sup>-6</sup> especies/año	0.0009171	1.94 x10 <sup>-3</sup>	400	0.7766
RA	8.66 x10 <sup>-2</sup> US\$/año	245.00904	3.54 x10 <sup>-4</sup>	200	0.0707
<b>Sumatoria puntaje ACV:</b>					<b>0.8834</b>

**iv) Interpretación de resultados:** Los resultados obtenidos son interpretados de acuerdo a los objetivos y alcance del trabajo, con el fin de presentar conclusiones y recomendaciones para la toma de decisiones. En este caso, se puede comparar el resultado con otras opciones de desgomado.

## Apéndice F. Cálculo de Índice Total de Seguridad Inherente.

El Índice Total de Seguridad Inherente (ISI) discutido en la sección 2.5.3 está conformado por dos grupos de subíndices, el primero referente a la seguridad química (ICI), y el segundo a las condiciones del proceso (IPI). Para calcular cada subíndice existen puntajes establecidos para determinados rangos de parámetros de operación o características del proceso (Heikkilä, 1999), los cuales se describen a continuación en las Tablas A.7 y A.8.

Tabla A.7 Puntuaciones para calcular el Índice de Seguridad de Sustancias Químicas.

<b>Índice de Seguridad Inherente a Sustancias Químicas (ICI)</b>		
<b>Calor de la reacción principal</b>	<i>Descripción</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>RM</sub></b>	Térmicamente neutra < 200 J/g	0
	Levemente exotérmica < 600 J/g	1
	Moderadamente exotérmica < 1,200 J/g	2
	Fuertemente exotérmica < 3,000 J/g	3
	Extremadamente exotérmica > 3,000 J/g	4
<b>Calor de reacción secundaria</b>	<i>Descripción</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>RS,max</sub></b>	Térmicamente neutra <200 J/g	0
	Levemente exotérmica <600 J/g	1
	Moderadamente exotérmica <1,200 J/g	2
	Fuertemente exotérmica <3,000 J/g	3
	Extremadamente exotérmica >3,000 J/g	4
<b>Interacción química</b>	<i>Descripción</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>INT</sub></b>	Formación de calor (H)	3
	Riesgo de fuego (F)	4
	Formación de gases no inflamables (G)	1
	Formación de gases tóxicos (GT)	3
	Formación de gases inflamables (GF)	3
	Riesgo de explosión (E)	4
	Polimerización rápida (P)	3
	Formación de químicos tóxicos solubles (S)	1
<b>Inflamabilidad</b>	<i>Descripción</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>FL</sub></b>	No inflamable	0
	Combustible (punto flash >55°C)	1
	Poco inflamable (punto flash <55°C)	2
	Inflamable (punto flash <21°C)	3
	Muy inflamable (punto flash <55°C & T <sub>b</sub> <35°C)	4
<b>Explosividad</b>	<i>Descripción (UEL-LEL) %vol</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>EX</sub></b>	No explosivo	0
	0-20	1
	20-45	2
	45-70	3
	70-100	4
<b>Toxicidad</b>	<i>Descripción. Límite tóxico (ppm)</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>TOX</sub></b>	TLV > 10,000	0
	TLV < 10,000	1
	TLV < 1,000	2

	TLV < 100	3
	TLV < 10	4
	TLV < 1	5
	TLV < 0.1	6
<b>Corrosividad</b>	<i>Material de construcción requerido</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>COR,max</sub></b>	Acero al carbono	0
	Acero inoxidable	1
	Requiere mejor material	2

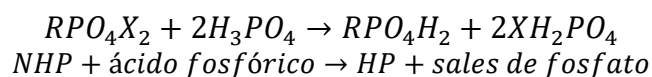
Tabla A.8 Puntuaciones para calcular el Índice de Seguridad de Procesos.

<b>Índice de Seguridad Inherente a Procesos (IPI)</b>			
<b>Inventario de sustancias</b>	<i>Al interior de planta</i>	<i>Al exterior de planta</i>	<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>I</sub></b>	0-1 ton	0-10 ton	0
	1-10 ton	10-100 ton	1
	10-50 ton	100-500 ton	2
	50-200 ton	500-2,000 ton	3
	200-500 ton	2,000-5,000 ton	4
	500-1,000 ton	5,000-10,000 ton	5
<b>Temperatura de operación</b>	<i>Descripción</i>		<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>T</sub></b>	< 0°C		1
	0-79°C		0
	70-150°C		1
	150-300°C		2
	300-600°C		3
	> 600°C		4
<b>Seguridad de equipo (al interior de planta)</b>	<i>Descripción</i>		<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>EQ</sub></b>	Equipos para manejo de materiales no inflamables, no tóxicos		0
	Intercambiadores de calor, bombas, tanques		1
	Enfriadores de aire, reactores, bombas de riesgo		2
	Compresores, reactores de alto riesgo		3
	Hornos, calderas		4
<b>Seguridad de equipo (al exterior de planta)</b>	<i>Descripción</i>		<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>EQ</sub></b>	Equipos para manejo de materiales no inflamables, no tóxicos		0
	Tanques abiertos a la atmósfera, bombas		1
	Torres de enfriamiento, compresores, sistemas de purga, tanques presurizados o refrigerados		2
	Hornos, calderas		3
<b>Seguridad del proceso</b>	<i>Nivel de seguridad de la estructura del proceso</i>		<b>Puntaje</b>
<b>I<sub>ST</sub></b>	Recomendada (seguridad normativa estándar)		0
	Buena práctica de ingeniería		1
	Neutral o no existen datos		2
	Probablemente inseguro		3
	Accidentes menores registrados		4
	Accidentes mayores registrados		5

Más información teórica acerca de estos subíndices fue proporcionada en la Tabla 2.13. Para el cálculo del Índice Total de Seguridad Inherente (ISI) discutido en la sección 2.5.3, se tomará como ejemplo la etapa de desgomado ácido (B<sub>2</sub>) de la superestructura general (ver Figura 4.39) para el aceite de pescado. La descripción de este proceso se encuentra en la sección 4.2.1.2.

Las sustancias químicas involucradas pueden ser inflamables y/o tóxicas en distintos grados. Las corrientes del proceso presentan diferentes peligros según el tipo y la cantidad de productos químicos presentes. Para el caso de la etapa de desgomado, la capacidad del proceso se considera de 176 L/h (161.92 kg/h), que es el flujo inicial de aceite crudo, además del flujo de reactivos (~165 kg/h).

El calor de la reacción principal entre el ácido fosfórico y los fosfolípidos no hidratables se calcula mediante las ecuaciones 3.16 y 3.17 del balance de energía, considerando el flujo total de materia. Para esta reacción, el calor generado es de ~78.07 J/g. No se consideran reacciones secundarias.



La sustancia química más peligrosa involucrada es el ácido fosfórico. No se considera inflamable ni explosivo, pero su índice de toxicidad da un puntaje de 5 al tener un umbral límite de exposición o TLV (threshold limit value) de 1 ppm (ACGIH, 2012). La interacción química más peligrosa que podría aparecer es la formación de calor al reaccionar el ácido con las grasas, la cual se determina mediante tablas de compatibilidad de sustancias químicas publicadas (Hatayama et al., 1980). Como material de construcción, se requiere acero inoxidable 316 al ser un proceso que involucra alimentos.

La temperatura máxima considerada en el reactor es de 55°C, y la reacción se lleva a cabo a presión atmosférica. En cuanto a la seguridad de equipos, este proceso involucra un reactor, bombas, intercambiador, tanque de mezclado y separador centrífuga, de los cuales el reactor sería el equipo más peligroso con una puntuación de 2 en el índice de seguridad de equipos al interior de la planta.

Con esta información, se calcula el ISI como la suma de los subíndices que conforman el ICI y el IPI.

Tabla A.9 Cálculo del Índice Total de Seguridad Inherente para el proceso de desgomado ácido.

Proceso de desgomado ácido		Puntaje
<b>Índice de Seguridad Inherente a Sustancias Químicas (ICI)</b>		
Calor de reacción principal	~78.09 J/g	0
Calor de reacción secundaria	N/A	0
Inflamabilidad, explosividad, toxicidad	Máximo para ácido fosfórico	5
Corrosividad	Acero inoxidable 316	2
Peor interacción química	Grasas + ácido fosfórico	3
		<b>Σ10</b>
<b>Índice de Seguridad Inherente a Procesos (IPI)</b>		
Inventario	~165 kg/h	0
Temperatura de operación	55°C	0
Presión de operación	101.3 kPa	0
Seguridad de equipos	Reactor	2
		<b>Σ2</b>
<b>Índice Total de Seguridad Inherente (ISI)</b>		<b>Σ12</b>

Para el presente trabajo, el cálculo del ISI se realizó de manera similar para todas las opciones de procesamiento consideradas en la superestructura. Los resultados condensados se muestran a continuación.

- Desgomado:

Subíndices de seguridad inherente		B <sub>1</sub>	B <sub>2</sub>	B <sub>3</sub>	B <sub>4</sub>
<b>Sustancias químicas ICI:</b>	I <sub>RM</sub>	0	0	0	0
	I <sub>RS,max</sub>	0	0	0	0
	I <sub>FI, IEX, ITOX</sub>	1	5	1	7
	I <sub>COR,max</sub>	2	2	2	2
	I <sub>INT</sub>	0	3	1	3
<b>Procesos IPI:</b>	I <sub>I</sub>	0	0	0	0
	I <sub>T</sub>	0	0	0	0
	I <sub>P</sub>	0	0	0	0
	I <sub>EQ</sub>	2	2	2	3
<b>Índice Total ISI:</b>		<b>5</b>	<b>12</b>	<b>6</b>	<b>15</b>

Subíndices de seguridad inherente		B <sub>5</sub>	B <sub>6</sub>	B <sub>7</sub>	B <sub>8</sub>
<b>Sustancias químicas ICI:</b>	I <sub>RM</sub>	0	0	0	1
	I <sub>RS,max</sub>	1	0	0	1
	I <sub>FI, IEX, ITOX</sub>	5	4	2	5
	I <sub>COR,max</sub>	2	2	2	2
	I <sub>INT</sub>	3	3	4	3
<b>Procesos IPI:</b>	I <sub>I</sub>	0	0	0	0
	I <sub>T</sub>	1	0	0	0
	I <sub>P</sub>	0	0	0	0
	I <sub>EQ</sub>	2	2	2	2
<b>Índice Total ISI:</b>		<b>14</b>	<b>11</b>	<b>10</b>	<b>14</b>

- Neutralización:

Subíndices de seguridad inherente		B <sub>9</sub>	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>
Sustancias químicas ICI:	I <sub>RM</sub>	1	1	1	3
	I <sub>RS,max</sub>	1	1	1	0
	I <sub>FI, IEX, ITOX</sub>	5	4	4	6
	I <sub>COR,max</sub>	2	2	2	2
	I <sub>INT</sub>	3	1	1	3
Procesos IPI:	I <sub>I</sub>	0	0	0	0
	I <sub>T</sub>	0	0	0	1
	I <sub>P</sub>	3	0	0	1
	I <sub>EQ</sub>	3	2	2	2
<b>Índice Total ISI:</b>		<b>18</b>	<b>11</b>	<b>11</b>	<b>18</b>

- Lavado/Secado y Blanqueado:

Subíndices de seguridad inherente		D <sub>1</sub>	D <sub>2</sub>	E <sub>1</sub>	E <sub>2</sub>	E <sub>3</sub>	E <sub>4</sub>
Sustancias químicas ICI:	I <sub>RM</sub>	0	0	0	0	0	0
	I <sub>RS,max</sub>	0	0	0	0	0	0
	I <sub>FI, IEX, ITOX</sub>	1	2	3	1	1	2
	I <sub>COR,max</sub>	2	2	2	2	2	2
	I <sub>INT</sub>	1	0	3	3	3	0
Procesos IPI:	I <sub>I</sub>	1	0	0	0	0	0
	I <sub>T</sub>	1	1	1	1	1	0
	I <sub>P</sub>	1	1	1	1	1	0
	I <sub>EQ</sub>	2	2	2	2	2	2
<b>Índice Total ISI:</b>		<b>9</b>	<b>8</b>	<b>12</b>	<b>10</b>	<b>10</b>	<b>6</b>

- Deodorización:

Subíndices de seguridad inherente		F <sub>1</sub>	F <sub>2</sub>	F <sub>3</sub>	F <sub>4</sub>	F <sub>5</sub>
Sustancias químicas ICI:	I <sub>RM</sub>	0	0	0	0	0
	I <sub>RS,max</sub>	0	0	0	0	0
	I <sub>FI, IEX, ITOX</sub>	2	2	6	2	7
	I <sub>COR,max</sub>	2	2	2	2	2
	I <sub>INT</sub>	1	1	1	1	1
Procesos IPI:	I <sub>I</sub>	0	0	1	0	1
	I <sub>T</sub>	2	2	1	0	0
	I <sub>P</sub>	1	1	0	0	1
	I <sub>EQ</sub>	2	2	1	2	2
<b>Índice Total ISI:</b>		<b>10</b>	<b>10</b>	<b>12</b>	<b>7</b>	<b>14</b>



- Modificación de aceite y concentrado de Omega-3:

Subíndices de seguridad inherente		G <sub>1</sub>	G <sub>2</sub>	G <sub>3</sub>	G <sub>4</sub>	H <sub>1</sub>	H <sub>2</sub>
Sustancias químicas ICI:	I <sub>RM</sub>	4	4	4	2	0	0
	I <sub>RS,max</sub>	0	0	0	0	0	0
	I <sub>FI, IEX, ITOX</sub>	6	6	6	1	1	6
	I <sub>COR,max</sub>	2	2	2	2	2	2
	I <sub>INT</sub>	2	2	2	1	1	3
Procesos IPI:	I <sub>I</sub>	1	0	0	0	0	1
	I <sub>T</sub>	2	0	0	0	2	0
	I <sub>P</sub>	1	0	1	0	1	0
	I <sub>EQ</sub>	2	3	2	2	2	2
Índice Total ISI:		<b>20</b>	<b>17</b>	<b>17</b>	<b>8</b>	<b>9</b>	<b>14</b>

- Concentrado de Omega-3 y encapsulado:

Subíndices de seguridad inherente		H <sub>3</sub>	H <sub>4</sub>	H <sub>5</sub>	H <sub>6</sub>	H <sub>7</sub>	Y <sub>1</sub>
Sustancias químicas ICI:	I <sub>RM</sub>	0	0	0	0	0	0
	I <sub>RS,max</sub>	0	0	0	0	0	0
	I <sub>FI, IEX, ITOX</sub>	2	3	7	3	6	6
	I <sub>COR,max</sub>	2	2	2	2	2	2
	I <sub>INT</sub>	0	0	2	0	2	0
Procesos IPI:	I <sub>I</sub>	0	0	1	0	1	0
	I <sub>T</sub>	0	0	0	0	1	0
	I <sub>P</sub>	3	3	2	0	0	0
	I <sub>EQ</sub>	3	3	3	3	2	1
Índice Total ISI:		<b>10</b>	<b>11</b>	<b>17</b>	<b>8</b>	<b>14</b>	<b>9</b>

## Apéndice G. Código GAMS 24.0.2 para caso corto de desgomado.

\*Fish oil-Omega3 degumming

Set Ok /k1\*k16/; \*Oil components k1 – k16  
 Parameter P0k(Ok) /k1 0.88, k2 0.07, k3 0.01, k4 0.01, k5 0.003,  
 k6 0.015, k7 0.007, k8 0.002, k9 0.002, k10 0.001/;  
 \*initial fraction of components "k" in feed  
 Set Prop /mw, DHf, CpA, CpB, Tcr, DHvA, DHvB, PvpA, PvpB, PvpC/;  
 \*Thermo-physical properties  
 Scalar F0 /161.92/; \*initial oil mass flow fed to the process (kg-h)  
 Scalar T0 /298.15/; \*initial oil temperature (K)  
 Scalar P0 /101.3/; \*initial oil pressure (kPa)  
 Parameter F0k(Ok);  
 F0k(Ok)=F0\*P0k(Ok); \*initial mass flow of each component;  
 Table Pk(Ok,Prop) \*thermo-physical properties for each component "k"  
 mw DHf CpA CpB Tcr DHvA DHvB PvpA PvpB PvpC  
 k1 0.91382 -882.66 1419.11 3.4076 938.08 281915.8 0.5009 15.278 9689.686 -0.0009  
 k2 0.29404 -335.52 -364.49 1.7666 814.87 189240.4 0.7239 11.156 5130.214 -0.0009  
 k3 0.01801 -285.83 7.701 0.00046 647.34 60334.5 0.4132 8.06 1725.328 -40.019  
 k4 0.76007 -805.55 1073.50 4.2569 989.33 282647.2 0.5650 15.164 9570.695 -0.00089  
 k5 0.72152 -805.55 1073.50 4.2569 989.33 282647.2 0.5650 15.164 9570.695 -0.00089  
 k6 0.43071 -736.25 820.725 0.0000 928.62 158268.9 0.6882 14.978 8368.618 0.00028  
 k7 0.38865 -736.25 1807.85 0.0000 1639.98 -138.703 0.2764 14.792 8509.742 0.00028  
 k8 0.53690 -736.25 1807.85 0.0000 1639.98 13604.14 0.2883 61.545 5061.700 0.00000  
 k9 0.10016 -248.40 118.968 0.3301 592.80 47516.1 0.1813 7.7629 1962.419 0.00110  
 k10 0.4808 -1026.8 621.992 1.3394 892.01 215041.8 0.5548 14.097 1962.419 0.00110  
 k11 0.87750 -2169.8 1222.70 1.9448 916.85 269642.5 0.4592 14.857 9427.069 -0.0009  
 k12 0.86123 -1806.4 298.712 4.9811 939.54 266205.5 0.5057 14.566 9173.354 -0.0009  
 k13 0.98505 -463.24 -2598.9 17.099 964.71 305300.6 0.5609 16.117 10244.33 -0.0009  
 k14 0.28703 -756.34 351.777 0.8115 779.69 143180.9 0.6386 9.8927 4173.138 -0.00087  
 k15 0.30874 -676.75 79.0469 1.8958 800.33 156912.6 0.7112 10.012 4357.662 -0.00087  
 k16 0.34540 -219.79 -1008.5 6.2362 779.34 157767.3 0.5643 10.437 4732.841 -0.00087  
 ;  
 Binary variables  
 B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9 denotes selection of degumming process equal to one  
 BigM1, BigM2 degumming Big M restrictions;  
 Scalar  
 TB1 /60/, TB2 /55/, TB3 /50/, TB4 /40/, TB5 /70/, TB6 /40/, TB7 /65/, TB8 /60/, TB9 /60/  
 \*operating temperature in processes B1-B9 (°C)  
 PB1 /101.3/, PB2 /101.3/, PB3 /101.3/, PB4 /400/, PB5 /101.3/, PB6 /101.3/, PB7 /101.3/,  
 PB8 /101.3/, PB9 /6900/;  
 \*operating pressure in processes B1-B9 (kPa)  
 Positive variables  
 FBk1, FBk2, FBk3, FBk4, FBk5, FBk6, FBk7, FBk8, FBk9, FBk10  
 \*mass output flow of each component in degumming process (kg-h)  
 SBk1, SBk2, SBk3, SBk4, SBk5, SBk6, SBk7, SBk8, SBk9, SBk10

\*Split fraction of each component in degumming process  
 RBk1, RBk2, RBk3, RBk4, RBk5, RBk6, RBk7, RBk8, RBk9, RBk10  
 \*generation-consumption of component "k" en degumming process (kg-h)  
 FB total degumming mass output flow (kg-h)  
 WatB water consumption in degumming process selected (kg-h)  
 BSoap soap generated in degumming process and present in neutral oil (kg-h)  
 PhFinal total phosphorus content in degumming output (ppm)  
 PhInit total phosphorus content in crude oil (ppm)  
 HPO Stoichiometric phosphoric acid mass flow (kg-h)  
 AGLb total percentage of free fatty acids after degumming (%)  
 TB, PB temperature and pressure selected for degumming (K KPa)  
 NEqB number of equipment for degumming process selected  
 HBcost total energy cost for degumming process selected (\$-h)  
 MB1, MB2, MB3, MB4, MB5, MB6, MB7, MB8, MB9  
 \*material, reactants, solvents consumption cost in each degumming process (\$-h)  
 CostB total OPEX of degumming process selected (\$-h)  
 CapexB total CAPEX (equipment) of degumming process selected (\$)  
 Pw3 Omega-3 oil price  
 CAPEX total CAPEX (equipment) (\$)  
 OPEX total OPEX (material consumption and energy utilities) (\$-year);

#### Free Variables

DHk1, DHk2, DHk3, DHk4, DHk5, DHk6, DHk7, DHk8, DHk9, DHk10  
 \*initial enthalpy for components k1-k10 (KJ-h)  
 DH0 Total enthalpy for initial oil mass flow (KJ-h)  
 DHk1B, DHk2B, DHk3B, DHk4B, DHk5B, DHk6B, DHk7B, DHk8B, DHk9B, DHk10B  
 \*final enthalpy for components k1-k10 after degumming (KJ-h)  
 DHB Total enthalpy after degumming (KJ-h)  
 TotHB Energy balance around selected degumming stage (KJ-h);

Variable TotProfit Economic objective function;

#### Equations

EqB1 Select at most one of the process B1 - B9  
 EqB2 mass balance for k1 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB3 mass balance for k2 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB4 mass balance for k3 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB5 mass balance for k4 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB6 mass balance for k5 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB7 mass balance for k6 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB8 mass balance for k7 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB9 mass balance for k8 in selected degumming process(kh-h)  
 EqB10 mass balance for k9 in selected degumming process (kh-h)  
 EqB11 mass balance for k10 in selected degumming process (kg-h)  
 EqB12 split fraction for k1 in deg  
 EqB13 split fraction for k2 in deg  
 EqB14 split fraction for k3 in deg  
 EqB15 split fraction for k4 in deg  
 EqB16 split fraction for k5 in deg  
 EqB17 split fraction for k6 in deg  
 EqB18 split fraction for k7 in deg

EqB19 split fraction for k8 in deg  
EqB20 split fraction for k9 in deg  
EqB21 split fraction for k10 in deg  
EqB22 generation-consumption of k1 (kg-h) in deg  
EqB23 generation-consumption of k2 (kg-h) in deg  
EqB24 generation-consumption of k3 (kg-h) in deg  
EqB25 generation-consumption of k4 (kg-h) in deg  
EqB26 generation-consumption of k5 (kg-h) in deg  
EqB27 generation-consumption of k6 (kg-h) in deg  
EqB28 generation-consumption of k7 (kg-h) in deg  
EqB29 generation-consumption of k8 (kg-h) in deg  
EqB30 generation-consumption of k9 (kg-h) in deg  
EqB31 generation-consumption of k10 (kg-h) in deg  
EqB32 Total product mass output in degumming (kg-h)  
EqB33 Water consumption in degumming process selected (kg-h)  
EqB34 Soap generated in degumming process selected present in neutral oil (kg-h)  
EqB35 conversion of phospholipids in total phosphorus content in output (ppm)  
EqB36 conversion of phospholipids in total phosphorus content in crude oil (ppm)  
EqB37 Stoichiometric phosphoric acid necessary (kg)  
EqB38 Final Phosphorus content restriction (ppm)  
EqB39 AGL percentage after degumming (%)  
EqB40 temperature of the degumming process selected (K)  
EqB41 pressure of the degumming process selected (KPa)  
EqB42 initial enthalpy for component k1 at T0 (KJ-h)  
EqB43 initial enthalpy for component k2 at T0 (KJ-h)  
EqB44 initial enthalpy for component k3 at T0 (KJ-h)  
EqB45 initial enthalpy for component k4 at T0 (KJ-h)  
EqB46 initial enthalpy for component k5 at T0 (KJ-h)  
EqB47 initial enthalpy for component k6 at T0 (KJ-h)  
EqB48 initial enthalpy for component k7 at T0 (KJ-h)  
EqB49 initial enthalpy for component k8 at T0 (KJ-h)  
EqB50 initial enthalpy for component k9 at T0 (KJ-h)  
EqB51 initial enthalpy for component k10 at T0 (KJ-h)  
EqB52 enthalpy summatory for inital oil mass flow (KJ-h)  
EqB53 final degumming enthalpy for component k1 at TB selected (KJ-h)  
EqB54 final degumming enthalpy for component k2 at TB selected (KJ-h)  
EqB55 final degumming enthalpy for component k3 at TB selected (KJ-h)  
EqB56 final degumming enthalpy for component k4 at TB selected (KJ-h)  
EqB57 final degumming enthalpy for component k5 at TB selected (KJ-h)  
EqB58 final degumming enthalpy for component k6 at TB selected (KJ-h)  
EqB59 final degumming enthalpy for component k7 at TB selected (KJ-h)  
EqB60 final degumming enthalpy for component k8 at TB selected (KJ-h)  
EqB61 final degumming enthalpy for component k9 at TB selected (KJ-h)  
EqB62 final degumming enthalpy for component k10 at TB selected (KJ-h)  
EqB63 enthalpy summatory for degumming output flow (KJ-h)  
EqB64 Energy balance for degumming stage (final-initial) (KJ-h)  
EqB65 Number of equipments for degumming stage selected  
EqB66 Energy cost for degumming stage selected (\$-h)  
EqB67 material consumption cost for process B1 (\$-h)  
EqB68 material consumption cost for process B2 (\$-h)  
EqB69 material consumption cost for process B3 (\$-h)

EqB70 material consumption cost for process B4 (\$-h)  
 EqB71 material consumption cost for process B5 (\$-h)  
 EqB72 material consumption cost for process B6 (\$-h)  
 EqB73 material consumption cost for process B7 (\$-h)  
 EqB74 material consumption cost for process B8 (\$-h)  
 EqB75 material consumption cost for process B9 (\$-h)  
 EqB76 Selected degumming process material cost (\$-h)  
 EqB77 Selected degumming process capex (equipment) cost (\$)  
 EqBc1 Big M1  
 EqBc2 Big M2  
 Eq1 concentrate omega-3 oil price (\$-kg)  
 Eq3 total CAPEX costs (\$)  
 Eq4 total OPEX costs (\$-h)  
 ObjEco Economic objective function (\$-year);

EqB1..  $B1 + B2 + B3 + B4 + B5 + B6 + B7 + B8 + B9 = 1$ ;  
 EqB2..  $FBk1 = (F0k('k1') - RBk1) * SBk1$ ;  
 EqB3..  $FBk2 = (F0k('k2') - RBk2) * SBk2$ ;  
 EqB4..  $FBk3 = (F0k('k3') + RBk3) * SBk3$ ;  
 EqB5..  $FBk4 = (F0k('k4') + RBk4) * SBk4$ ;  
 EqB6..  $FBk5 = (F0k('k5') - RBk5) * SBk5$ ;  
 EqB7..  $FBk6 = (F0k('k6') + RBk6) * SBk6$ ;  
 EqB8..  $FBk7 = (F0k('k7') + RBk7) * SBk7$ ;  
 EqB9..  $FBk8 = (F0k('k8') + RBk8) * SBk8$ ;  
 EqB10..  $FBk9 = (F0k('k9') + RBk9) * SBk9$ ;  
 EqB11..  $FBk10 = (F0k('k10') + RBk10) * SBk10$ ;  
 EqB12..  $SBk1 = 0.91*B1 + 0.90*B2 + 0.9418*B3 + 0.784*B4 + 0.925*B5 + 0.90*B6 + 0.90*B7 + 0.90*B8 + 0.91*B9$ ;  
 EqB13..  $SBk2 = 0.91*B1 + 0.90*B2 + 0.9418*B3 + 0.657*B4 + 0.900*B5 + 0.90*B6 + 0.90*B7 + 0.50*B8 + 0.40*B9$ ;  
 EqB14..  $SBk3 = 0.05*B1 + 0.05*B2 + 0.05*B3 + 0.05*B4 + 0.050*B5 + 0.05*B6 + 0.04*B7 + 0.05*B8 + 0.05*B9$ ;  
 EqB15..  $SBk4 = 0.10*B1 + 0.09*B2 + 0.04*B3 + 0.032*B4 + 0.047*B5 + 0.052*B6 + 0.019*B7 + 0.07*B8 + 0.05*B9$ ;  
 EqB16..  $SBk5 = 0.95*B1 + 0.09*B2 + 0.04*B3 + 0.032*B4 + 0.047*B5 + 0.052*B6 + 0.019*B7 + 0.07*B8 + 0.05*B9$ ;  
 EqB17..  $SBk6 = 0.91*B1 + 0.90*B2 + 0.9418*B3 + 0.784*B4 + 0.925*B5 + 0.90*B6 + 0.90*B7 + 0.90*B8 + 0.91*B9$ ;  
 EqB18..  $SBk7 = 0.91*B1 + 0.90*B2 + 0.9418*B3 + 0.784*B4 + 0.925*B5 + 0.90*B6 + 0.90*B7 + 0.90*B8 + 0.91*B9$ ;  
 EqB19..  $SBk8 = 0.91*B1 + 0.90*B2 + 0.9418*B3 + 0.784*B4 + 0.925*B5 + 0.90*B6 + 0.90*B7 + 0.90*B8 + 0.91*B9$ ;  
 EqB20..  $SBk9 = 0.91*B1 + 0.90*B2 + 0.9418*B3 + 0.784*B4 + 0.925*B5 + 0.90*B6 + 0.90*B7 + 0.90*B8 + 0.91*B9$ ;  
 EqB21..  $SBk10 = 0.91*B1 + 0.90*B2 + 0.9418*B3 + 0.784*B4 + 0.925*B5 + 0.90*B6 + 0.90*B7 + 0.90*B8 + 0.91*B9$ ;  
 EqB22..  $RBk1 = 0*B1 + 0*B2 + 0*B3 + 0*B4 + 0*B5 + 0*B6 + 0*B7 + (0.05*F0k('k1'))*(B8+B9)$ ;  
 EqB23..  $RBk2 = 0*B1 + 0*B2 + (0.12*F0k('k2'))*B3 + 0*B4 + 0*B5 + 0*B6 + 0*B7 + (0.8*F0k('k2'))*(B8+B9)$ ;  
 EqB24..  $RBk3 = WatB*B1 + WatB*B2 + WatB*B3 + 0*B4 + WatB*B5 + WatB*B6 + WatB*B7 + WatB*B8 + WatB*B9$ ;

EqB25.. RBk4 =e= 0\*B1 +(0.55\*F0k('k5'))\*B2 +(0.98\*F0k('k5'))\*B3 +0\*B4  
+(0.55\*F0k('k5'))\*(B5+B6+B8+B9) +(0.98\*F0k('k5'))\*B7;  
EqB26.. RBk5 =e= 0\*B1 +(0.55\*F0k('k5'))\*B2 +(0.98\*F0k('k5'))\*B3 +0\*B4  
+(0.55\*F0k('k5'))\*(B5+B6+B8+B9) +(0.98\*F0k('k5'))\*B7;  
EqB27.. RBk6 =e= 0\*B1 +0\*B2 +0\*B3 +0\*B4 +0\*B5 +0\*B6 +0\*B7 +0\*B8 +0\*B9;  
EqB28.. RBk7 =e= 0\*B1 +0\*B2 +0\*B3 +0\*B4 +0\*B5 +0\*B6 +0\*B7 +0\*B8 +0\*B9;  
EqB29.. RBk8 =e= 0\*B1 +0\*B2 +0\*B3 +0\*B4 +0\*B5 +0\*B6 +0\*B7 +0\*B8 +0\*B9;  
EqB30.. RBk9 =e= 0\*B1 +0\*B2 +0\*B3 +0\*B4 +0\*B5 +0\*B6 +0\*B7 +0\*B8 +0\*B9;  
EqB31.. RBk10 =e= 0\*B1 +0\*B2 +0\*B3 +0\*B4 +0\*B5 +0\*B6 +0\*B7 +0\*B8 +0\*B9;  
EqB32.. FB =e= FBk1+FBk2+FBk3+FBk4+FBk5+FBk6+FBk7+FBk8+FBk9+FBk10;  
EqB33.. WatB =e= (F0k('k4')+F0k('k5'))\*(B1+B2+B3+B5+B8+B9) +0\*B4 +(F0\*0.02)\*B6  
+(F0\*0.055)\*B7+(((((((F0k('k2')/F0)\*100)\*0.142+0.3)\*F0)/11.06)\*100)/11.06 +F0\*0.05)\*B8  
+(((((((F0k('k2')/F0)\*100)\*0.142+0.09)\*F0)/9.5)\*100)/9.5)\*B9;  
EqB34.. BSoap =e= (F0k('k5')\*0.45\*0.05)\*(B2+B5+B6) +(F0k('k5')\*0.98\*0.05)\*B7  
+((F0k('k5')\*0.45 + F0k('k2')\*0.80)\*0.05)\*(B8+B9);  
EqB35.. PhFinal =e= (((FBk4+FBk5)/FB)\*100)\*(10000/31.7);  
EqB36.. PhInit =e= (((F0k('k4')+F0k('k5'))/F0)\*100)\*(10000/31.7);  
EqB37.. HPO =e= (2.72\*PhInit)/(1000\*0.85);  
EqB38.. PhFinal =l= 50;  
EqB39.. AGLb =e= (FBk2/FB)\*100;  
EqB40.. TB =e= (TB1\*B1 + TB2\*B2 + TB3\*B3 + TB4\*B4 + TB5\*B5 + TB6\*B6 + TB7\*B7 +  
TB8\*B8 + TB9\*B9) +273.15;  
EqB41.. PB =e= PB1\*B1 + PB2\*B2 + PB3\*B3 + PB4\*B4 + PB5\*B5 + PB6\*B6 + PB7\*B7 +  
PB8\*B8 + PB9\*B9;  
EqB42.. DHk1 =e= (F0k('k1')/Pk('k1','mW'))\*{(Pk('k1','DHf')) + [((Pk('k1','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k1','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k1','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k1','Tcr'))\*\*Pk('k1','DHvB')))/1000]};  
EqB43.. DHk2 =e= (F0k('k2')/Pk('k2','mW'))\*{(Pk('k2','DHf')) + [((Pk('k2','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k2','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k2','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k2','Tcr'))\*\*Pk('k2','DHvB')))/1000]};  
EqB44.. DHk3 =e= (F0k('k3')/Pk('k3','mW'))\*{(Pk('k3','DHf')) + [((Pk('k3','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k3','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000]\*4.1868 - [(Pk('k3','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k3','Tcr'))\*\*Pk('k3','DHvB')))/1000]};  
EqB45.. DHk4 =e= (F0k('k4')/Pk('k4','mW'))\*{(Pk('k4','DHf')) + [((Pk('k4','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k4','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k4','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k4','Tcr'))\*\*Pk('k4','DHvB')))/1000]};  
EqB46.. DHk5 =e= (F0k('k5')/Pk('k5','mW'))\*{(Pk('k5','DHf')) + [((Pk('k5','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k5','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k5','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k5','Tcr'))\*\*Pk('k5','DHvB')))/1000]};  
EqB47.. DHk6 =e= (F0k('k6')/Pk('k6','mW'))\*{(Pk('k6','DHf')) + [((Pk('k6','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k6','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k6','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k6','Tcr'))\*\*Pk('k6','DHvB')))/1000]};  
EqB48.. DHk7 =e= (F0k('k7')/Pk('k7','mW'))\*{(Pk('k7','DHf')) + [((Pk('k7','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k7','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k7','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k7','Tcr'))\*\*Pk('k7','DHvB')))/1000]};  
EqB49.. DHk8 =e= (F0k('k8')/Pk('k8','mW'))\*{(Pk('k8','DHf')) + [((Pk('k8','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k8','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k8','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k8','Tcr'))\*\*Pk('k8','DHvB')))/1000]};  
EqB50.. DHk9 =e= (F0k('k9')/Pk('k9','mW'))\*{(Pk('k9','DHf')) + [((Pk('k9','CpA'))\*(T0-  
298.15)+(Pk('k9','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k9','DHvA'))\*((1-  
(T0/Pk('k9','Tcr'))\*\*Pk('k9','DHvB')))/1000]};

EqB51.. DHk10 =e= (F0k('k10')/Pk('k10','mW'))\*(Pk('k10','DHf')) + [((Pk('k10','CpA'))\*(T0-298.15)+(Pk('k10','CpB')/2)\*((T0\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k10','DHvA'))\*((1-(T0/Pk('k10','Tcr')))\*\*(Pk('k10','DHvB')))/1000];

EqB52.. DH0 =e= DHk1+DHk2+DHk3+DHk4+DHk5+DHk6+DHk7+DHk8+DHk9+DHk10;

EqB53.. DHk1B =e= (FBk1/Pk('k1','mW'))\*(Pk('k1','DHf')) + [((Pk('k1','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k1','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k1','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k1','Tcr')))\*\*(Pk('k1','DHvB')))/1000];

EqB54.. DHk2B =e= (FBk2/Pk('k2','mW'))\*(Pk('k2','DHf')) + [((Pk('k2','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k2','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k2','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k2','Tcr')))\*\*(Pk('k2','DHvB')))/1000];

EqB55.. DHk3B =e= (FBk3/Pk('k3','mW'))\*(Pk('k3','DHf')) + [((Pk('k3','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k3','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000]\*4.1868 - [(Pk('k3','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k3','Tcr')))\*\*(Pk('k3','DHvB')))/1000];

EqB56.. DHk4B =e= (FBk4/Pk('k4','mW'))\*(Pk('k4','DHf')) + [((Pk('k4','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k4','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k4','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k4','Tcr')))\*\*(Pk('k4','DHvB')))/1000];

EqB57.. DHk5B =e= (FBk5/Pk('k5','mW'))\*(Pk('k5','DHf')) + [((Pk('k5','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k5','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k5','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k5','Tcr')))\*\*(Pk('k5','DHvB')))/1000];

EqB58.. DHk6B =e= (FBk6/Pk('k6','mW'))\*(Pk('k6','DHf')) + [((Pk('k6','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k6','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k6','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k6','Tcr')))\*\*(Pk('k6','DHvB')))/1000];

EqB59.. DHk7B =e= (FBk7/Pk('k7','mW'))\*(Pk('k7','DHf')) + [((Pk('k7','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k7','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k7','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k7','Tcr')))\*\*(Pk('k7','DHvB')))/1000];

EqB60.. DHk8B =e= (FBk8/Pk('k8','mW'))\*(Pk('k8','DHf')) + [((Pk('k8','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k8','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k8','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k8','Tcr')))\*\*(Pk('k8','DHvB')))/1000];

EqB61.. DHk9B =e= (FBk9/Pk('k9','mW'))\*(Pk('k9','DHf')) + [((Pk('k9','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k9','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k9','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k9','Tcr')))\*\*(Pk('k9','DHvB')))/1000];

EqB62.. DHk10B =e= (FBk10/Pk('k10','mW'))\*(Pk('k10','DHf')) + [((Pk('k10','CpA'))\*(TB-298.15)+(Pk('k10','CpB')/2)\*((TB\*\*2)-(298.15\*\*2)))/1000] - [(Pk('k10','DHvA'))\*((1-(TB/Pk('k10','Tcr')))\*\*(Pk('k10','DHvB')))/1000];

EqB63.. DHB =e= DHk1B+DHk2B+DHk3B+DHk4B+DHk5B+DHk6B+DHk7B+DHk8B+DHk9B +DHk10B;

EqB64.. TotHB =e= 0.0001 + DHB-DH0;

EqB65.. NEqB =e= 5\*B1 + 6\*B2 + 8\*B3 + 6\*B4 + 9\*B5 + 8\*B6 + 12\*B7 + 10\*B8 + 7\*B9;

EqB66.. HBcost =e= (abs(TotHB))\*(0.2778/1000)\*2.47;

EqB67.. MB1 =e= 0.0001 + B1\*(WatB\*0.0106);

EqB68.. MB2 =e= 0.0001 + B2\*(WatB\*0.0106 + [F0\*((HPO/1000)\*5)\*40]);

EqB69.. MB3 =e= 0.0001 + B3\*(WatB\*0.0106 + F0\*0.02\*3654.7);

EqB70.. MB4 =e= 0.0001 + B4\*(F0\*0.3\*21.45);

EqB71.. MB5 =e= 0.0001 + B5\*(WatB\*0.0106 + F0\*((HPO/1000)\*10)\*40 + F0\*0.02\*9.75);

EqB72.. MB6 =e= 0.0001 + B6\*(WatB\*0.0106 + F0\*0.001\*4.26 + F0\*0.002\*9.75);

EqB73.. MB7 =e= 0.0001 + B7\*(WatB\*0.0106 + F0\*0.00219\*351 + F0\*0.000721\*390);

EqB74.. MB8 =e= 0.0001 + B8\*(WatB\*0.0106 + F0\*((HPO/1000)\*3)\*40 + (((F0k('k2')/F0)\*100)\*0.142+0.3)\*F0/11.06)\*9.75);

EqB75.. MB9 =e= 0.0001 + B9\*(WatB\*0.0106 + F0\*((HPO/1000)\*1.5)\*40 + (((F0k('k2')/F0)\*100)\*0.142+0.3)\*F0/11.06)\*9.75);

EqB76.. CostB =e= MB1+MB2+MB3+MB4+MB5+MB6+MB7+MB8+MB9+NEqB\*HBcost;

```
EqB77.. CapexB =e= 1265197*B1 +1525467.1*B2 +1879354.8*B3 +1722602.1*B4
+2436776.4*B5 +2046007.4*B6 +3050934.2*B7 +2507063*B8 +5666186.7*B9;
EqBc1.. FB =l= 162*BigM1;
EqBc2.. CostB =l= 15000*BigM2;
AGLb.lo = 0;
FB.lo = 80;
CostB.lo = 1;
Eq1.. Pw3 =e= FB*1864.9*(330*24);
Eq3.. CAPEX =e= CapexB;
Eq4.. OPEX =e= CostB*(330*24);
ObjEco.. TotProfit =e= Pw3 -CAPEX -OPEX;
Pw3.lo = 100;
```

```
Model Omega3 /all/;
Option MINLP=COUENNE;
Solve Omega3 using MINLP maximizing TotProfit
```