

**ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL**

**Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas**

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE DESTILACIÓN POR CARGAS PARA  
LA DETERMINACIÓN DEL RENDIMIENTO DEL ACEITE ESENCIAL  
YLANG YLANG

**PROYECTO INTEGRADOR**

Previo la obtención del Título de:

**Ingeniero Químico**

Presentado por:

Ariana Eloisa González De La Torre

Jhon Abel Ríos Sánchez

GUAYAQUIL - ECUADOR

Año: 2021

## DEDICATORIA

Dedico con todo mi corazón el presente proyecto a mis padres, sin su apoyo incondicional nada de esto sería posible. A mi hermana, por darme una razón más para nunca darme por vencida. Los amo.

Ariana González De La Torre

A mis padres, abuelos y hermano, por ser mi compañía y motivación para lograr mis metas.

Jhon Ríos Sánchez

## **AGRADECIMIENTOS**

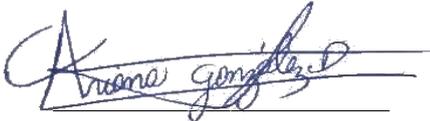
Agradecemos profundamente a todos los docentes que fueron parte de nuestra formación por compartir su conocimiento.

A nuestra tutora y cotutor por su invaluable dirección y compromiso en toda la extensión de este trabajo.

Y también, a nuestros compañeros, amigos y familia, por ser un apoyo constante en este proceso.

## DECLARACIÓN EXPRESA

“Los derechos de titularidad y explotación, nos corresponde conforme al reglamento de propiedad intelectual de la institución; *Ariana Eloisa González De La Torre* y *Jhon Abel Ríos Sánchez* y damos nuestro consentimiento para que la ESPOL realice la comunicación pública de la obra por cualquier medio con el fin de promover la consulta, difusión y uso público de la producción intelectual”



Ariana González De La  
Torre



Jhon Ríos Sánchez

# EVALUADORES

.....  
**Nadia Magaly Flores Manrique**

PROFESOR DE LA MATERIA

.....  
**Yris Kenelma Gonzalez Triana**

PROFESOR TUTOR

-----  
**Wilfredo Antonio Angulo Sánchez**

PROFESOR COTUTOR

## RESUMEN

La destilación por arrastre de vapor para la obtención de aceites esenciales siempre se ha mantenido como un proceso tradicional, de prueba y error, sin un sustento tecnológico para desarrollarse de manera sistemática. Es aquí donde surge la necesidad de emplear la simulación de procesos, como una alternativa tecnológica.

En este trabajo se realizó la simulación del proceso de destilación por arrastre de vapor del aceite esencial de Ylang-Ylang mediante Aspen Plus V12. El esquema de simulación contenía: el bloque "BatchSep", un mezclador, un decantador, dos equipos auxiliares de intercambio de calor, además de un calculador de rendimiento incluido dentro del simulador.

Se consideraron 2 tecnologías en el proceso de extracción, sobre las cuales se analizaron los efectos de la variación del flujo de vapor, observándose buenas aproximaciones en comparación con el análisis cromatográfico del aceite esencial y el rendimiento (ml/Kg). El promedio de los errores para ambas tecnologías fue de 1,25% y 1,71% calculado en relación al rendimiento experimental frente al rendimiento simulado dado por Aspen Plus; infiriendo que dicha diferencia de errores entre tecnologías se debe principalmente a las disimilitudes que poseen ambos equipos por los criterios de diseño en los que se basó su construcción.

Finalmente, este modelo validado permitirá la realización del análisis de sensibilidad para las variables: holdup, reflux, humedad, número de etapas y flujo de vapor, con el fin de conocer la influencia que tienen con respecto al rendimiento final y el consumo energético del proceso.

**Palabras Clave:** Rendimiento, destilación, BatchSep, aceites esenciales.

## **ABSTRACT**

*Steam distillation to obtain essential oils has always been a traditional process, trial and error, without a technological support to develop it systematically. For this reason, the need arises to use process simulation, as a technological alternative.*

*In this work, the simulation of the Ylang-Ylang essential oil steam distillation process was performed using Aspen Plus V12. The simulation scheme contained: the "BatchSep" block, a mixer, a decanter, two auxiliary heat exchange equipment, as well as a performance calculator included within the simulator.*

*Two technologies were considered in the extraction process, on which the effects of the variation of the vapor flow were analyzed, observing good approximations in comparison with the chromatographic analysis of the essential oil and the yield (ml/Kg). The average of the errors for both technologies was 1.25% and 1.71% calculated between experimental yield vs. simulated yield provided by Aspen Plus; inferring that this difference in errors between technologies is mainly due to the dissimilarities that both equipments have due to the design criteria on which their construction was based. Finally, this validated model will allow the performance of sensitivity analysis for the variables: holdup, reflux, humidity, number of stages and steam flow, in order to know the influence they have with respect to the final yield and energy consumption of the process.*

*Keywords: Yield, distillation, BatchSep, essential oils.*

## ÍNDICE GENERAL

<b>RESUMEN</b> .....	<b>I</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>II</b>
<b>ABREVIATURAS</b> .....	<b>VI</b>
<b>ÍNDICE DE FIGURAS</b> .....	<b>VII</b>
<b>ÍNDICE DE TABLAS</b> .....	<b>VIII</b>
<b>CAPÍTULO 1</b> .....	<b>1</b>
<b>1. Introducción</b> .....	<b>1</b>
1.1 Descripción del problema .....	1
1.2 Justificación del problema.....	2
1.3 Objetivos.....	4
1.3.1 Objetivo General .....	4
1.3.2 Objetivos Específicos .....	4
1.4 Marco teórico .....	4
1.4.1 Ylang Ylang.....	4
1.4.2 Proceso industrial de aceites esenciales.....	5
1.4.3 Simulación.....	6
<b>CAPÍTULO 2</b> .....	<b>18</b>
<b>2. Metodología</b> .....	<b>18</b>
2.1 Operación característica en Aspen Plus .....	18
2.2 Composición del Ylang Ylang .....	20
2.3 Caracterización de componentes del aceite Ylang Ylang .....	20
2.4 Selección del método termodinámico .....	21
2.5 Desarrollo del bloque de simulación BatchSep.....	22
2.5.1 Definir corrientes .....	22

2.5.2	Setup del BatchSep.....	23
2.5.3	Operating Steps, Heat Transfer e Initial Conditions del BatchSep .....	24
2.6	Unidades Auxiliares .....	24
2.6.1	Horno .....	25
2.6.2	Condensador.....	25
2.7	Operaciones Especiales .....	26
2.8	Análisis de sensibilidad.....	27
2.8.1	Holdup.....	29
2.8.2	Número de etapas.....	29
2.8.3	Humedad.....	29
2.8.4	Reflujo .....	29
2.8.5	Flujo de vapor .....	30
<b>CAPÍTULO 3.....</b>		<b>31</b>
<b>3.</b>	<b>Resultados Y ANÁLISIS.....</b>	<b>31</b>
3.1	Definición del caso de diseño .....	31
3.1.1	Caracterización de la alimentación.....	33
3.2	Datos experimentales para validación .....	34
3.3	Ajuste del modelo .....	34
3.4	Validación del modelo.....	37
3.4.1	Validación Tecnología 1 .....	38
3.4.2	Validación Tecnología 0 .....	42
3.4.3	Análisis de resultados .....	45
<b>CAPÍTULO 4.....</b>		<b>47</b>
<b>4.</b>	<b>Conclusiones Y Recomendaciones.....</b>	<b>47</b>
	Conclusiones .....	47
	Recomendaciones .....	48

<b>BIBLIOGRAFÍA .....</b>	<b>50</b>
---------------------------	-----------

## ABREVIATURAS

BENZ-01	Benzyl Benzoate
BENZY-02	Benzyl Acetate
METHY-01	Methyl Benzoate
METHY-02	P. M. Anisole
GERMA-D	Delta Germacrene
LINALOOL	Linalool
ALFAFARS	E.E, Alpha Farnesene
BCARIOFI	Trans Caryphyllene

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 Flores Ylang-Ylang [Naturalista, s.f.].....	5
Figura 1.2 Esquema del proceso [Cabezas & Álava, 2019].....	5
Figura 1.3 Flujograma de caracterización de componentes [Kamal & Malah, 2017] .....	8
Figura 1.4 Árbol de decisión para selección de método termodinámico [Carlson, 1996].....	10
Figura 1.5 BatchSep [Schefflan, 2011].....	10
Figura 1.6 Algoritmo de ingreso de datos para la operación BatchSep/Columna de destilación [Elaboración propia].....	17
Figura 2.1 Esquema del proceso [Elaboración propia].....	20
Figura 2.2 Estructura y grupo funcional [Aspen Plus V12].....	21
Figura 2.3 Ingreso de propiedades [Aspen Plus V12].....	21
Figura 2.4 Ingreso de propiedades [Aspen Plus V12].....	26
Figura 2.5 Ingreso del Cálculo [Aspen Plus V12].....	27
figura 2.6 ingreso de la variable calculada [Aspen Plus V12].....	28
Figura 2.7 Ingreso de la variable manipulada y sus límites [Aspen Plus V12]...	28
Figura 3.1 Diagrama de simulación propuesto en Aspen Plus [Elaboración propia].....	31
Figura 3.2 Errores obtenidos en la tecnología 1 en base al rendimiento [Elaboración propia].....	42
Figura 3.3 Errores obtenidos en la tecnología 0 en base al rendimiento [Elaboración propia].....	45

## ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Condiciones de equipos utilizados en el simulador Equipos Cabezas y Álava, 2019] .....	11
Tabla 1.2 Composición del aceite esencial Ylang Ylang [Cabezas y Álava, 2019]12	
Tabla 1.3 Composición de la materia vegetal [C. Ververis, 2006].....	13
Tabla 1.4 Rango de humedad de flores en extracción de aceites [Sebiha y Seemin, 2020; Tonguino, 2011; Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, 2010].....	13
Tabla 1.5 Setup del BatchSep [Agudelo y Barrera Zapata, 2016] .....	14
Tabla 1.6 Rendimientos experimentales de la tecnología 1. [Cabezas & Álava, 2019].....	14
Tabla 1.7 Rendimientos experimentales de la tecnología 0. [Cabezas & Álava, 2019].....	15
Tabla 2.1 Información del análisis de sensibilidad [Elaboración propia] .....	30
Tabla 3.1 Condiciones de operación de los equipos [Elaboración Propia].....	32
Tabla 3.2 Composición del Ylang Ylang [Elaboración propia].....	33
Tabla 3.3 Composición de la materia vegetal [Elaboración propia] .....	33
Tabla 3.4 Compuestos definidos y no definidos en Aspen Plus [Elaboración Propia] .....	34
Tabla 3.5 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 5-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....	36
Tabla 3.6 Comparación de cromatografías para Caso 5-Tecnología 1 [Elaboración Propia] .....	36
Tabla 3.7 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 1-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....	37
Tabla 3.8 Comparación de cromatografías para Caso 1-Tecnología 0 [Elaboración Propia] .....	37

<b>Tabla 3.9 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 1-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>39</b>
<b>Tabla 3.10 Comparación de cromatografías para Caso 1-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>39</b>
<b>Tabla 3.11 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 2-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>39</b>
<b>Tabla 3.12 Comparación de cromatografías para Caso 2-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>40</b>
<b>Tabla 3.13 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 3-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>40</b>
<b>Tabla 3.14 Comparación de cromatografías para Caso 3-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>40</b>
<b>Tabla 3.15 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 4-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>41</b>
<b>Tabla 3.16 Comparación de cromatografías para Caso 4-Tecnología 1 [Elaboración Propia].....</b>	<b>41</b>
<b>Tabla 3.17 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 2-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>42</b>
<b>Tabla 3.18 Comparación de cromatografías para Caso 2-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>42</b>
<b>Tabla 3.19 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 3-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>43</b>
<b>Tabla 3.20 Comparación de cromatografías para Caso 3-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>43</b>
<b>Tabla 3.21 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 4-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>43</b>
<b>Tabla 3.22 Comparación de cromatografías para Caso 4-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>44</b>

<b>Tabla 3.23 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 5-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>44</b>
<b>Tabla 3.24 Comparación de cromatografías para Caso 5-Tecnología 0 [Elaboración Propia].....</b>	<b>44</b>

# CAPÍTULO 1

## 1. INTRODUCCIÓN

### 1.1 Descripción del problema

En Ecuador existen 18 empresas dedicadas a la producción y exportación de aceites esenciales, las cuales actualmente operan con sistemas tradicionales de extracción (cocción y arrastre de vapor) que producen rendimientos aceptables; sin embargo, con el incremento en el tamaño y la participación del mercado de aceites esenciales en los últimos años estos sistemas dejan de ser los más recomendables. Este crecimiento del mercado se evidenció con el incremento del 14,6% en las exportaciones del año 2018 (1,73 millones de dólares) en comparación con las del año 2017 (Vistazo, 2018). Además, cabe señalar que para el año 2026, se prevé que las exportaciones de estos productos alcancen los 14,1 mil millones de dólares (Intrado, 2020).

Este desfase entre el fuerte crecimiento económico mencionado y el poco desarrollo tecnológico de esta industria en el país, se debe a que no se han incorporado recursos científicos acordes para avanzar en consonancia del actual mundo globalizado (Masango, 2001). De ahí que sea imprescindible innovar en el campo tecnológico de la industria para lograr abastecer la demanda del mercado. En este sentido, una posible mejora en la productividad de aceites esenciales constituiría el desarrollo de simulaciones y modelados en el proceso de destilación por arrastre de vapor; no obstante, ambos recursos son complejos, ya que en estos intervienen una gran cantidad de variables y no siempre se cuenta con las capacidades técnicas y logísticas para medir sus valores dentro de la operación. Un claro ejemplo de esto aparece en el estudio de Cerpa (2015), en el que se describe el modelado de la destilación del aceite esencial de lavandín como un proceso que crece en complejidad debido a los fenómenos que ocurren dentro de la matriz vegetal: difusión, exudación térmica y evaporación superficial.

Hace poco se realizaron simulaciones del proceso de extracción de aceites esenciales mediante arrastre de vapor utilizando Aspen Plus, descritos en los casos de estudio de Moncada et al. (2015) y Cerón-Salazar y Cardona-Alzate (2011). En el primero de estos casos se empleó una columna de extracción para el aceite esencial de Citronela

y Lemongrass, mientras que para el segundo estudio se usó el módulo RadFrac, el cual consiste en una columna de destilación para obtener aceite esencial de naranja (*Citrus sinensis*). Dichos estudios, a pesar de lograr resultados satisfactorios, se realizaron en estado estacionario, sin cumplir con la característica esencial del proceso de simulación de aceites esenciales, que es seguir un proceso *batch*; es decir, un proceso en estado transitorio.

Finalmente, en el estudio realizado por Cabezas y Álava (2019), se logró simular el proceso de obtención de aceite esencial Ylang Ylang, en el que fue empleado el simulador comercial PRO/II. Este al igual que los anteriores casos de estudios mencionados suponen un proceso continuo, pero utilizando una columna de absorción y sin considerar la biomasa vegetal. Por este motivo, el presente estudio pretende ir más allá, tomando en cuenta características inherentes al proceso real como es el estado transitorio (*batch*) por medio del bloque BatchSep de Aspen Plus, considerando la biomasa vegetal y caracterizando todos los compuestos que no se encuentren en la base de datos, lo cual no se ha realizado de manera conjunta tal como indican los estudios antes mencionados.

Así mismo, en el presente caso de estudio existen ciertas restricciones técnicas y de recursos. La primera habla acerca de las herramientas de simulación; puesto que presentan ciertas restricciones para representar el proceso real. En este caso el simulador empleado no contiene en sus operaciones un hidrodestilador para realizar el proceso de arrastre de vapor; sin embargo, este puede ser reemplazado por otra operación que cumpla con las características de operación. Como segundo se tiene una restricción de recursos, debido a que se cuenta con datos experimentales obtenidos de investigaciones previas; no obstante, estos son limitados, lo que conlleva a hacer asunciones basados en la literatura; puesto a que muchas variables no se han logrado medir en la planta.

## **1.2 Justificación del problema**

En la actualidad se puede reconocer que el avance económico de la industria de los aceites esenciales va desalineada a los avances tecnológicos sobre el proceso. En

Ecuador, se comercializan aproximadamente 62 tipos de aceites esenciales que son exportados hacia Estados Unidos, Alemania, Hong Kong, etc. (Vistazo, 2018). De manera general se tiene un crecimiento en ventas cada año, por ejemplo, estudios de mercado realizados entre los años 2012 y 2015, indican un incremento del 20% de las ventas en dicho lapso, siendo el Ylang Ylang uno de los aceites mayormente exportados, gracias a sus propiedades organolépticas (Hernández y Jibaja, 2017). Este crecimiento se justifica por la mayor apertura de los aceites esenciales en industrias como la perfumería, cosmética y medicina, debido a los descubrimientos e investigaciones de sus propiedades.

No obstante, la gran cantidad de avances tecnológicos han sido orientados hacia los procesos que usan aceites esenciales como materia prima, lo cual ha dejado sin mayores avances al proceso fundamental. La destilación por arrastre de vapor se ha mantenido como un proceso de experiencia, prueba y error e incluso artesanal, sin un desarrollo sistemático (Masango, 2001), es por esto por lo que simular el proceso tendría impactos económicos positivos para la industria.

Desde la optimización del proceso, hasta la obtención de mayores rendimientos y principalmente tener un sustento tecnológico que permita generar nuevas estrategias, además de reducir el riesgo en pruebas reales y ejecutar ensayos en menores tiempos con mejores resultados (Hosseinpour y Hajihosseini, 2009).

Sin duda alguna, sería la simulación una gran herramienta para las empresas dedicadas a la extracción de aceites esenciales, ya que este trabajo tiene potencial para su comercialización, puesto que pueden ser fácilmente adaptados a otros procesos similares considerando las características del aceite a extraer de manera personalizada para su uso en plantas.

## **1.3 Objetivos**

### **1.3.1 Objetivo General**

Desarrollar la simulación del proceso de destilación por arrastre de vapor por cargas del aceite esencial Ylang-Ylang usando Aspen Plus para la estimación del rendimiento del proceso.

### **1.3.2 Objetivos Específicos**

1. Definir el modelo de obtención de aceites esenciales basados en el mejoramiento de los procesos de simulaciones actuales por cargas
2. Desarrollar el modelo a partir de datos bibliográficos y de las herramientas que el software ofrece, para la determinación de variables que afecten directamente el rendimiento del aceite Ylang Ylang.
3. Resolver el modelo, utilizando el software de simulación Aspen Plus para su posterior validación con los datos experimentales.
4. Plantear el desarrollo del análisis de sensibilidad para la evaluación de la influencia de las variables de operación en el rendimiento de la extracción y demás variables calculadas.

## **1.4 Marco teórico**

En este capítulo se describen los conceptos centrales de este tema de investigación que han ayudado a sustentar el desarrollo de esta. Entre los conceptos que se revisan están el proceso actualmente usado para la extracción de aceites esenciales, definición de la flor Ylang Ylang y sus aplicaciones e importancia en diferentes campos, entre otros.

### **1.4.1 Ylang Ylang**

*Cananga odorata* es una planta nativa de las regiones tropicales (Indonesia, Filipinas). Para su cultivo se prefieren suelos ácidos. Tiene hojas y flores con una fragancia muy penetrante y persistente; las flores son de color amarillo verdoso, aunque cuando florecen poseen un color amarillo intenso, y cuando maduran, un color marrón amarillento. Las flores tienen tres sépalos y seis pétalos de unos 8 cm de largo que aparecen en racimos colgantes con 4 a 12 flores (Couic-Marinié y Laurain-Mattar, 2019).

El aceite de Ylang Ylang tiene diferentes aplicaciones en diversas ramas. Por su intensa fragancia es muy apreciado en la industria de la perfumería y de la alimentación. En el campo de la salud es muy utilizado en aromaterapia contra la inflamación, el dolor, las contracturas, el estrés, el insomnio y la depresión (Mallavarapu, 2016).



Figura 1.1 Flores Ylang-Ylang [Naturalista, s.f.]

#### 1.4.2 Proceso industrial de aceites esenciales

El aceite esencial de Ylang Ylang se obtiene mediante los procesos de arrastre de vapor o hidrodestilación de las flores maduras de *Cananga odorata*. Este es uno de los procesos que con mayor frecuencia se emplea para la obtención de aceites esenciales, debido a su fácil operabilidad y su eficiencia para obtener aceites de alta calidad (Armijo et al., 2012).

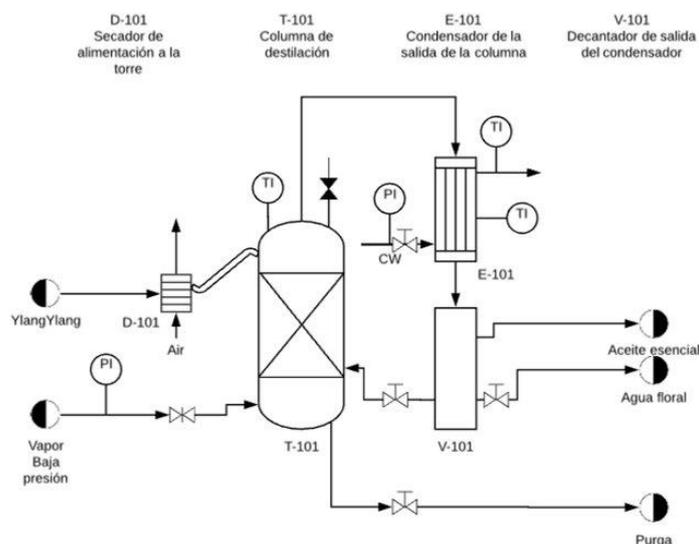


Figura 1.2 Esquema del proceso [Cabezas y Álava, 2019]

El proceso consiste en dos corrientes, la primera es una mezcla de agua y aceite, la segunda el agua que es transformada en vapor de agua con ayuda de la caldera, ambas corrientes ingresan al hidrodestilador. Dentro, la mezcla de aceite-agua y vapor de agua entran en contacto, lo cual calienta la mezcla de aceite-agua, arrastrando las partículas de aceite y a su vez las partículas de agua se van evaporando, obteniendo en el tope aceite esencial y trazas de vapor de agua y por la cola agua y trazas de aceite esencial, el producto obtenido por el tope ingresa al condensador que es alimentado por cold water, con esto la mezcla es enfriada para su posterior ingreso al decantador o florentino, en donde ambas fases (aceite-agua) se separan por efecto de la densidad, dando como resultado aceite esencial por el tope (Producto deseado) y por la cola el agua floral y parte de este es recirculado hacia el hidrodestilador (Cabezas y Álava, 2019).

### **1.4.3 Simulación.**

El simulador comercial seleccionado para este estudio es Aspen Plus, el cual proporciona modelados rigurosos, tanto para operaciones continuas como por lotes. Según Aspentech (2021), este simulador permite “maximizar de forma rápida e intuitiva la eficacia del equipo de destilación y reducir el tiempo del ciclo del lote” (párr. 1).

Para realizar la simulación que reproduzca las características del proceso real, es necesario establecer condiciones críticas, como la definición de compuestos, la selección de rangos de componentes, el método termodinámico y las operaciones unitarias seleccionadas.

#### **1.4.3.1 Definición de compuestos**

Para modelar un proceso de extracción de aceites esenciales es necesario conocer o al menos estimar sus propiedades fisicoquímicas. En algunas ocasiones dichos valores no se encuentran dentro de la base de datos incorporada en el simulador, esto se puede deber a su complejidad o a su poco uso a nivel industrial, y es ahí donde surge la necesidad de la definición de compuestos.

Aspen contiene una sección denominada Aspen Properties, la cual permite la caracterización de compuestos. Estos pueden ser disolventes, solutos, etc. Para ello, se sigue una serie de pasos definiendo al nuevo compuesto como componente puro. A continuación, se presenta un flujograma indicando los pasos que se deben seguir para la caracterización del componente requerido.

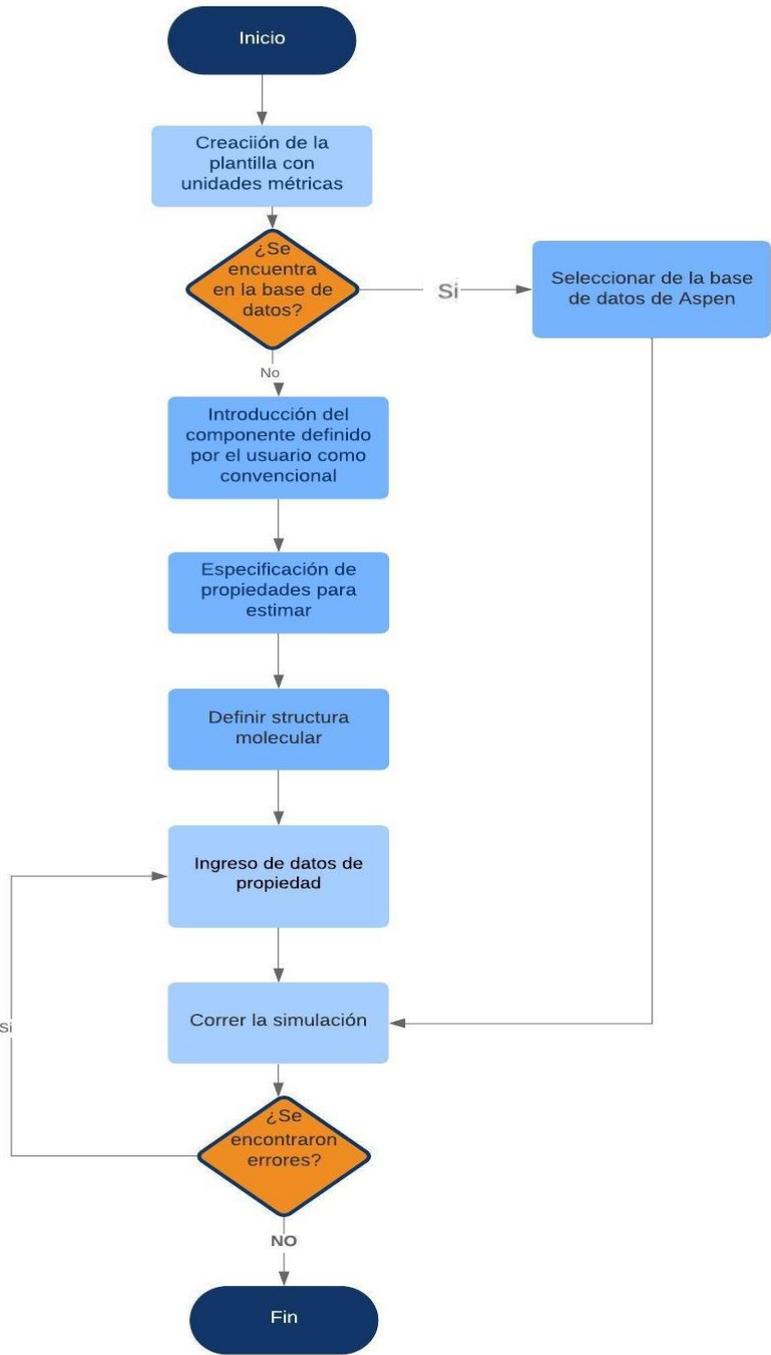


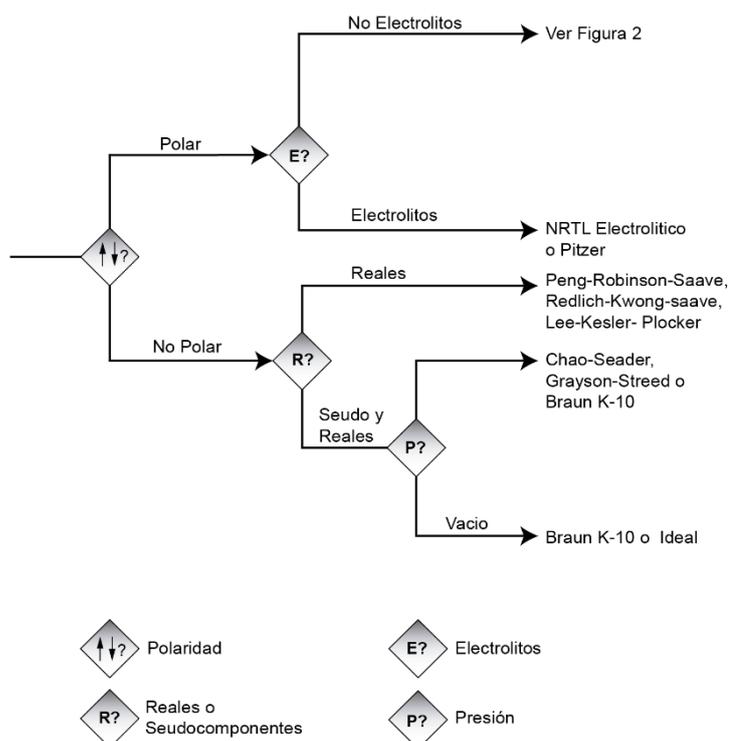
Figura 1.3 Flujograma de caracterización de componentes [Kamal y Malah, 2017]

### 1.4.3.2 Método termodinámico

Escoger el método termodinámico adecuado es uno de los pilares fundamentales dentro de una simulación de cualquier proceso, esto es porque establece un conjunto de ecuaciones que ayudan en la representación de las propiedades físicas y termodinámicas con las cuales se sustentará la simulación (Feliu, 2006).

Es por esto por lo que, Eric C. Carlson propuso diferentes árboles de decisión publicados en el artículo "Don't Gamble with Physical Properties for Simulations", con su ayuda se logra la selección pertinente del modelo termodinámico (Tecnológico de Energía e Innovación, s.f.).

El árbol de decisión cubre un esquema global de los aspectos de las propiedades termodinámicas en la simulación, ya que este es dependiente a características como polaridad, presión e interacciones (Martínez, 2003). Cada método incluye una serie de ecuaciones que ayudan en el cálculo y estimación de variables y parámetros a diferentes condiciones de presión y temperatura (Cabezas y Álava, 2019).



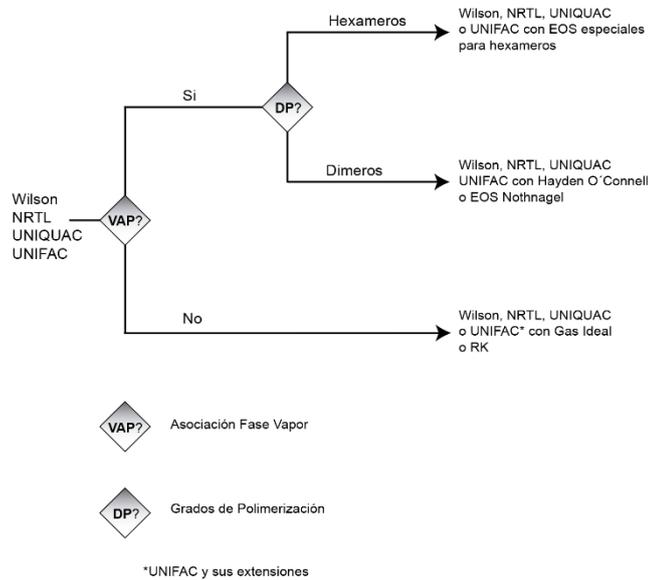
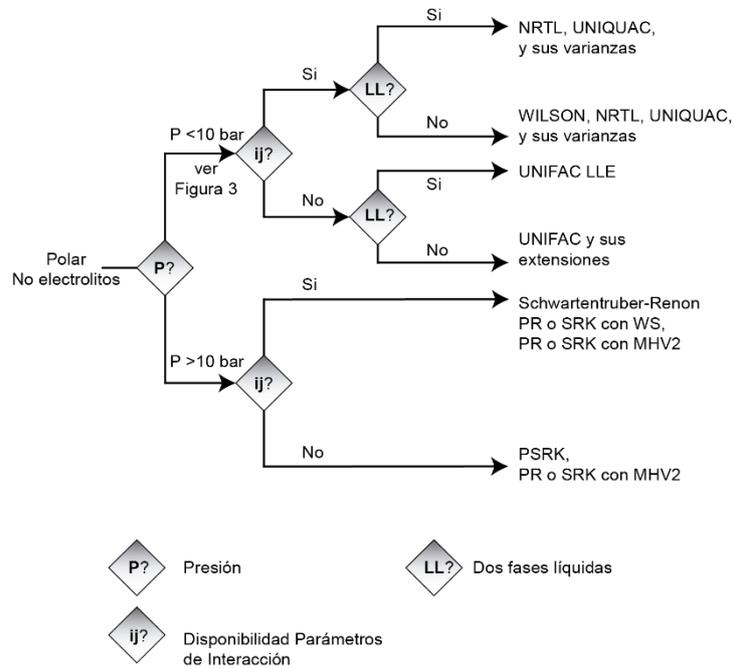
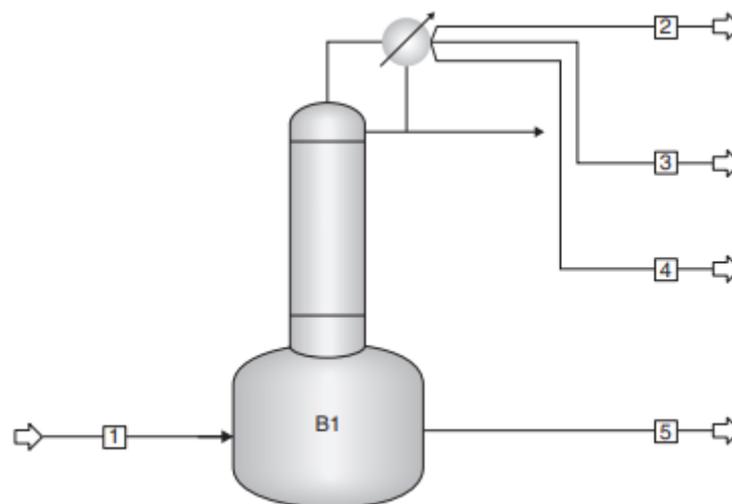


Figura 1.4 Árbol de decisión para selección de método termodinámico [Carlson, 1996]

### 1.4.3.3 Operaciones

#### **BatchSep**

A menudo dentro de los simuladores no se encuentra disponible la operación llamada “hidrodestilación” o “arrastre de vapor”, es por esto que se selecciona la operación unitaria con las características que represente al proceso real. Tal es el caso de la columna de destilación por lotes (BatchSep), logrando de esta manera que la simulación se acerca más a la realidad ya que el producto es obtenido después de que la operación finalice en determinado rango de tiempo.



**Figura 1.5 BatchSep [Schefflan, 2011]**

La unidad cuenta con dos configuraciones disponibles, como olla y como unidad de destilación con platos, la cual tiene un rehervidor y un condensador. BatchSep resuelve la simulación utilizando ecuaciones diferenciales de materia y energía y ecuaciones de fracciones por etapas que son resueltas numéricamente, por medio de condiciones iniciales.

Dentro de esta operación se encuentran gráficos informativos e interactivos, las principales son las configuraciones de niveles de líquido, temperaturas y flujos. Dichos gráficos son dinámicos y muestran la temperatura y los niveles a lo largo del tiempo. Además de que permite el ingreso de sólidos dentro de la operación y cuenta con

información disponible en la opción “Help” de la pestaña “Resources” del simulador y en papers como “Modeling and simulation of a batch distillation column for recovering limonene epoxide”.

El proceso batch inicia con la carga de una cantidad de materia vegetal en el calderín, se enciende el vapor y después de un breve período de tiempo, se empieza a extraer el producto del tope de la columna. Cuando finaliza la destilación, se apaga el calor y se retira el material que queda en el calderín. Entonces se puede iniciar un nuevo lote (Wankat, 2012).

La importancia del proceso radica en su diferencia de uso, mientras el proceso de destilación continua es un método eficiente para la producción de cantidades elevadas de producto, en el que se requiere que su composición se mantenga constante, la destilación por lotes es utilizada cuando en el mismo equipo se realizan destilaciones de varios productos (2012).

#### **1.4.3.4 Parámetros de operación**

Según Cabezas y Álava (2019), el proceso de extracción de Ylang Ylang opera bajo las siguientes condiciones:

**Tabla 1.1 Condiciones de equipos utilizados en el simulador Equipos Cabezas y Álava, 2019]**

	Columna de destilación	Intercambiador de calor	Separador
<b>Presión [bar]</b>	1,048	1,048	1,048
<b>Temperatura [°C]</b>	100	30	30
<b>Etapas</b>	4	-	-

Donde “las condiciones de presión y temperatura se fijaron en base a mediciones efectuadas sobre el proceso real de extracción de aceites esenciales” (2019, p.28).

#### 1.4.3.5 Rangos de componentes

Para iniciar con la simulación de extracción de aceite esencial, es necesario definir la composición de las flores Ylang Ylang que se utilizan como materia prima para que ocurra el proceso. Dicha materia vegetal está compuesta principalmente por aceite, biomasa y humedad.

Debido a que los componentes del aceite esencial Ylang Ylang varían con respecto a la ubicación geográfica existe un rango de variabilidad de estos datos (Kristiawan et al., 2020). No obstante, se conoce de investigaciones previas tanto de los componentes como de los rangos próximos que presenta este tipo de especie (Cabezas y Álava, 2019).

**Tabla 1.2 Composición del aceite esencial Ylang Ylang [Cabezas y Álava, 2019]**

Compuestos	Composición (%)
Benzyl Benzoate	18,323
Benzyl Acetate	17,748
Delta Germacrene	15,594
Linalool	9,804
E.E, Alpha Farnesene	6,911
Methyl Benzoate	4,837
P. M. Anisole	4,428
Trans Caryphyllene	3,255

En el caso de la materia vegetal que conforma la corriente de alimentación, de forma análoga se obtiene su composición; la cual está constituida de compuestos orgánicos como celulosa, hemicelulosa, lignina y ceniza (C. Ververis, 2006).

**Tabla 1.3 Composición de la materia vegetal [C. Ververis, 2006]**

<b>Compuestos</b>	<b>Composición (%)</b>
Cellulose	7,1
Hemicelulosa	16,3
Cenizas	1,8
lignina	1,52

Finalmente, para la humedad, es necesario recordar que las flores de Ylang Ylang son previamente secadas; por ende, esta tiene menor porcentaje de humedad que las flores recién cosechadas. Para ello se tiene diferentes referencias de contenido de humedad de plantas que ingresan a procesos de extracción de aceites como los descritos en (Sebiha y Seemin, 2020; Tonguino, 2011; Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, 2010).

**Tabla 1.4 Rango de humedad de flores en extracción de aceites [Sebiha y Seemin, 2020; Tonguino, 2011; Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, 2010]**

<b>Especie</b>	<b>Rango de humedad (%)</b>
Mentha spicata L	6.05 - 10.72
Menta (Mentha piperita L) y orégano (Origanum vulgare L)	5,57 - 5,8
Plantas aromáticas y medicinales (PAM): romero, hierba luisa, toronjil, lavanda, manzanilla, etc	6 - 12

#### **1.4.3.6 Setup del BatchSep**

Dentro de la operación unitaria BatchSep existen ciertos parámetros críticos que deben ser especificados para su buen funcionamiento, entre ellos se puede mencionar el holdup, el cual habla sobre la retención del líquido y que se encuentra directamente relacionado con la eficiencia de la destilación, teniendo un rango definido de 2-28% de la carga inicial en moles (Guo et al, 2016).

Así mismo, la relación de reflujo también es un parámetro operativo importante, puesto que afecta al rendimiento de la separación; en este caso a la cantidad de aceite esencial obtenido sobre la materia vegetal ingresada y al consumo energético. Como es muy bien conocido, al aumentarse la relación de reflujo se logra mejorar la eficacia de la separación (Agudelo y Barrera Zapata, 2016).

**Tabla 1.5 Setup del BatchSep [Agudelo y Barrera Zapata, 2016]**

Reflujo 1 (aceite)	0,266
Reflujo 2 (hidrolato)	2,7

#### **1.4.3.7 Data para validación**

La validación es uno de los pasos claves para la determinación del éxito de los resultados obtenidos de la simulación. Una vez se establecen todos los parámetros necesarios del proceso, esto se comparan. Para realizar dicha comparación son necesarios el uso de datos experimentales para lograr reconocer si la simulación realizada se asemeja o aproxima a los datos reales.

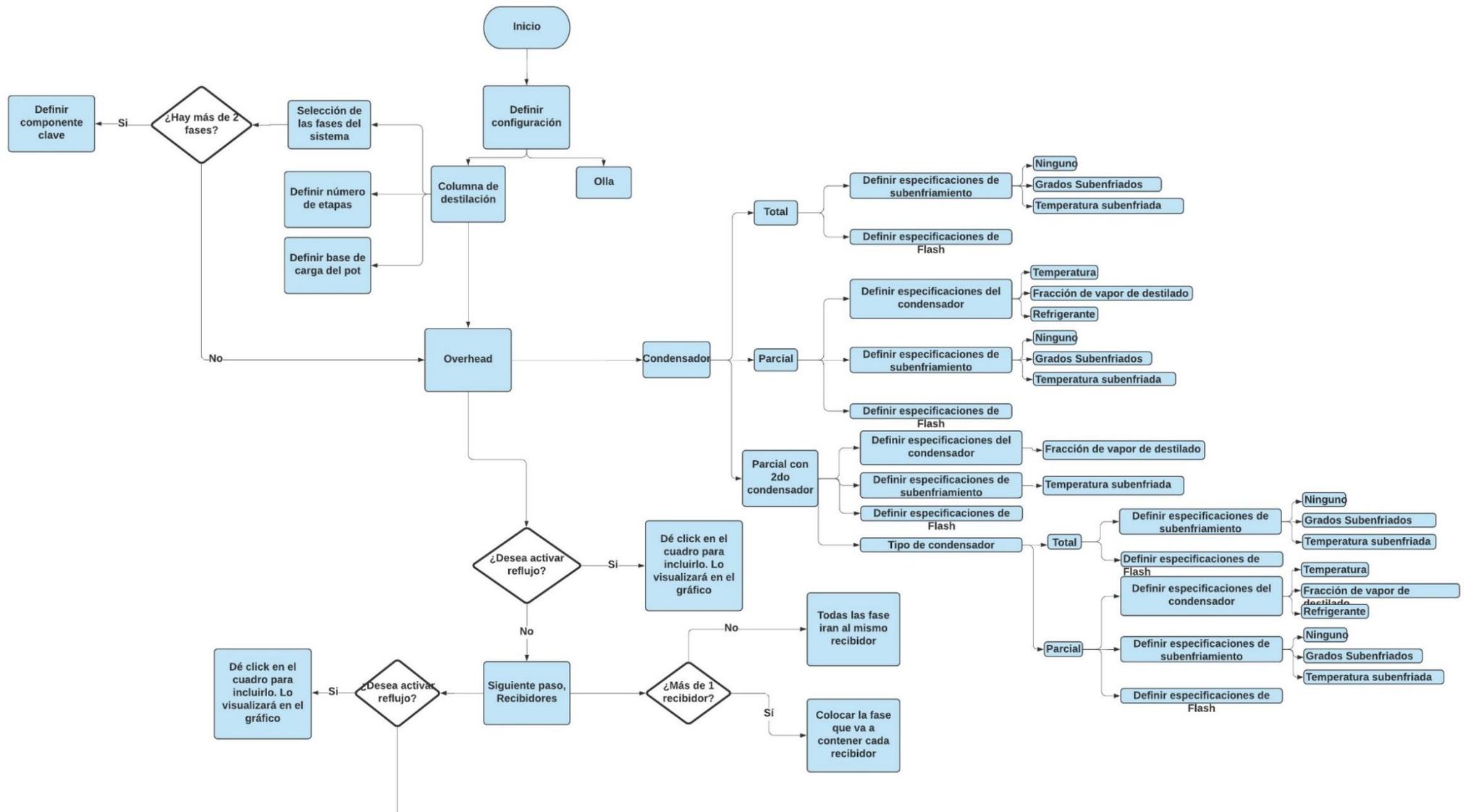
Se cuenta con dichos datos experimentales, en donde se obtienen rendimientos de la extracción del aceite esencial Ylang Ylang por cada variación de flujo de vapor y porcentaje de aceite.

**Tabla 1.6 Rendimientos experimentales de la tecnología 1. [Cabezas & Álava, 2019]**

Caso	% Aceite	Tecnología	Flujo de Vapor (Kg/h)	Rendimiento Experimental [ml/Kg]
1	1,100	1	20,94	11,33
2	0,950		12,67	9,83
3	1,000		12,67	10,33
4	1,033		31,62	10,50
5	1,100		27,02	11,33

**Tabla 1.7 Rendimientos experimentales de la tecnología 0. [Cabezas & Álava, 2019]**

<b>Caso</b>	<b>% Aceite</b>	<b>Tecnología</b>	<b>Flujo de Vapor (Kg/h)</b>	<b>Rendimiento Experimental [ml/Kg]</b>
1	1,150	0	29,20	11,67
2	1,117		31,62	11,33
3	1,050		20,94	10,83
4	1,083		12,67	11,17
5	1,100		12,67	11,33





# CAPÍTULO 2

## 2. METODOLOGÍA

Para la resolución de este trabajo de investigación es necesario la comprensión del proceso industrial de extracción de aceites esenciales, debido a que uno de los objetivos es la representación del proceso más cercano a la realidad, desde su operación por lotes hasta la materia vegetal de donde se extrae el aceite.

Es por esto por lo que se diseñó un diagrama de pasos que se muestra en la Figura 2.1. El mismo se levantó a partir de las necesidades de información acerca de la operación unitaria en Aspen Plus y los componentes del aceite esencial Ylang Ylang, logrando así la simulación de arrastre de vapor.

### 2.1 Operación característica en Aspen Plus

Para la selección de la operación unitaria que cumpla con las características del proceso real, fue necesaria investigación de literatura previa. Los requisitos que dicha operación debe contemplar son:

- Proceso en estado transitorio (Batch).
- Permitir sólidos en el proceso.
- Representar el proceso de hidroddestilación.

Una vez revisada todas las opciones, se concluye que la mejor opción para realizar la simulación del proceso de extracción del aceite Ylang Ylang es la operación unitaria BatchSep, puesto que, de esta se tiene mayor información proporcionada dentro del mismo simulador y obtenida de papers, su grado de complejidad es media y puede representar las funcionalidades de un hidroddestilador.

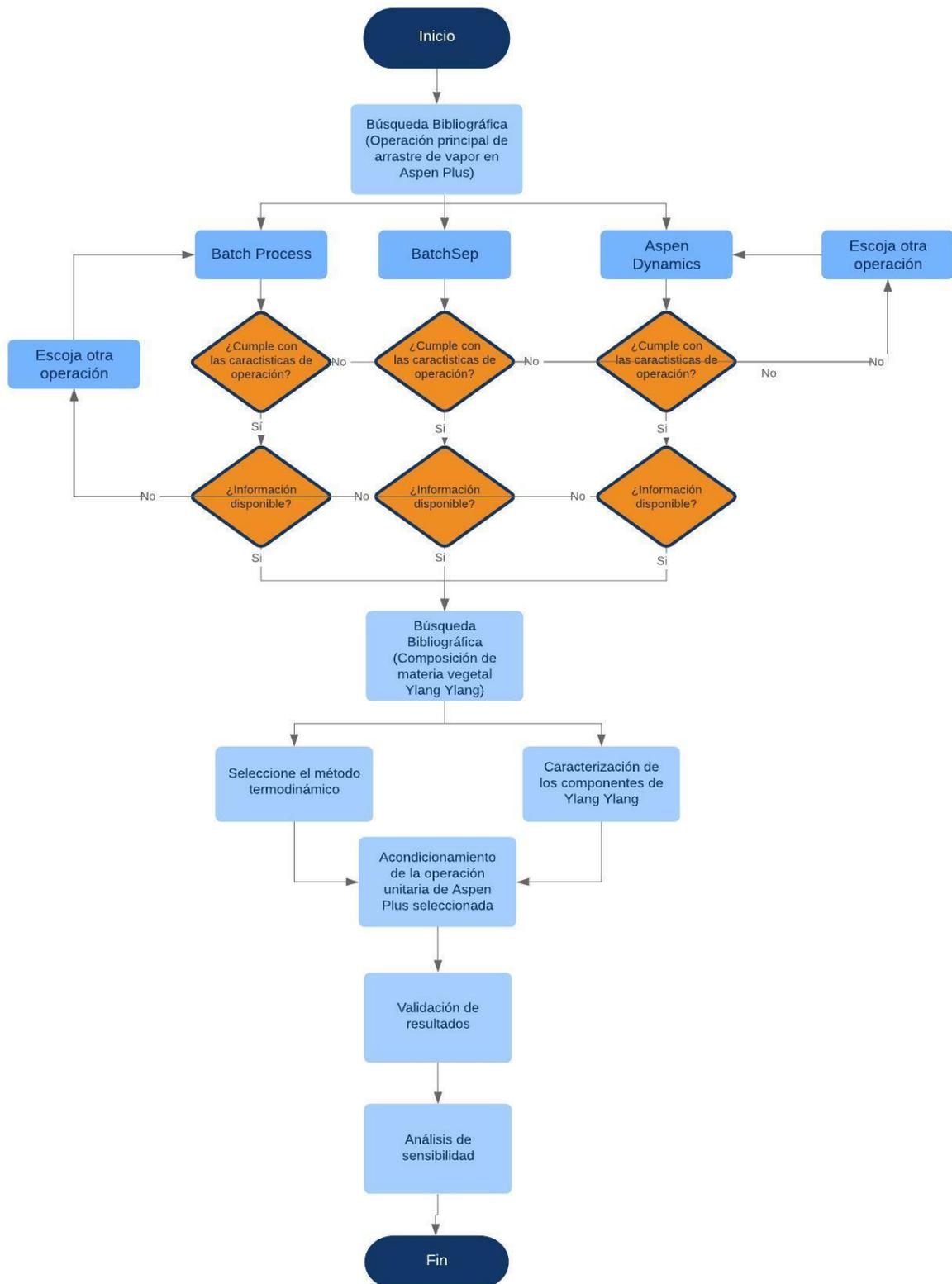


Figura 2.1 Esquema del proceso [Elaboración propia]

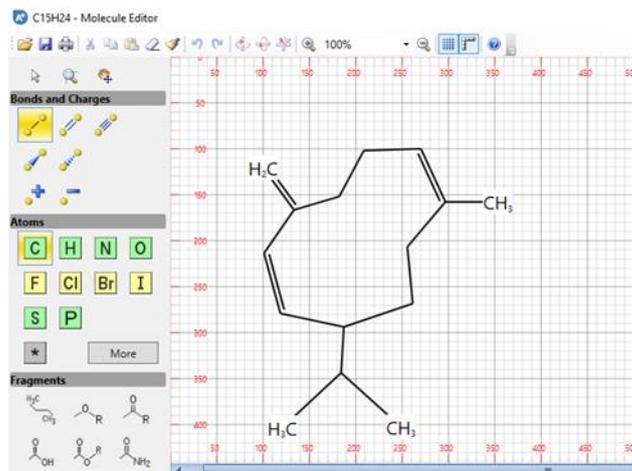
## **2.2 Composición del Ylang Ylang**

El aceite Ylang Ylang es variado, debido a esto, sus componentes fueron basados en los resultados de la cromatografía realizada del aceite obtenido como producto de la empresa Young Living, ubicados en la tabla 1.2; en la cual se identificaron 8 compuestos.

A partir de este análisis, se conoce cuáles son los aceites que se encuentran en la alimentación al destilador. Es importante mencionar que las composiciones resultantes de la cromatografía se encuentran en base de 80%, por lo que fue necesario convertirlas en base 100%.

## **2.3 Caracterización de componentes del aceite Ylang Ylang**

Debido a que algunos de los componentes no se encuentran en la base de datos de Aspen Plus, es necesaria la caracterización, la cual se realiza en la sección "Properties". Una vez identificados los componentes ausentes en la base de datos, estos se definen con un nombre dado por el usuario y de tipo convencional, dentro de la pestaña estructura molecular se selecciona el componente deseado y se dibuja su estructura, como se muestra en la figura 2.2, generándose así cada una de las moléculas y enlaces que lo compone.



**Figura 2.2 Estructura y grupo funcional [Aspen Plus V12]**

Luego con ayuda de material bibliográfico se ingresan propiedades como densidad, temperatura de ebullición y temperatura de inflamación con el fin de mejorar la caracterización del componente, también es importante revisar que las entalpías de formación se encuentren, caso contrario también deben ser ingresadas.

Parameters	Units	Data set	Component GERMA-D	Component
RHOM	gm/cc	1	0,85	
TB	C	1	279,7	
TFP	C	1	111,9	
*				

**Figura 2.3 Ingreso de propiedades [Aspen Plus V12]**

## 2.4 Selección del método termodinámico

Para el proceso de extracción de aceite esencial Ylang Ylang, se recurrió al árbol de decisión propuesto por Carlson presentado en la Figura 1.4. En donde se analizan los componentes que intervienen en el proceso, los cuales son considerados polares no electrolíticos con presiones de operación menores a 10 bar. Sin embargo, para este caso

en específico existen interacciones Líquido-Líquido-Vapor; por tanto, el método termodinámico seleccionado fue NRTL.

## **2.5 Desarrollo del bloque de simulación BatchSep**

### **2.5.1 Definir corrientes**

Se definió una humedad representativa para la materia vegetal alimentada, como dicho valor es desconocido para las flores de Ylang Ylang, se han tomado en cuenta estudios como (Sebiha y Seemin, 2020; Tonguino, 2011; Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación, 2010) que presentan la humedad final de especies que van a ser empleadas en la extracción de aceites esenciales en un rango del 6% al 12%.

De la misma manera la cantidad de aceite esencial de Ylang Ylang se estableció como el rango dado por las extracciones realizadas en (Kristiawan et al., 2020) como límite inferior 0,5% y superior 1,9% de aceite a la entrada; no obstante, en la validación se emplearán los valores usados en (Cabezas y Álava, 2019), que se encuentran en dicho intervalo.

Por otro lado, también se realizó la caracterización de la materia vegetal. Dichos componentes están basados en la investigación realizada por (Tutt y Olt, 2011). Sin embargo, uno de los elementos que estructura la materia vegetal como lo es la lignina no se encontró dentro de la base de datos de Aspen Plus; por ende, se decidió tomar al resto de elementos celulosa, hemicelulosa y cenizas como el 100%.

Todo lo mencionado anteriormente (humedad, biomasa y aceite) fue necesario para definir la corriente de alimentación de materia vegetal de Ylang Ylang; es decir, representando las flores de donde se extraerá el aceite.

Por último, la corriente de entrada de vapor de agua es conocida por el estudio de (Cabezas y Álava, 2019); sin embargo, esta se definió en estado líquido ya que la

configuración del BatchSep permite el calentamiento hasta vapor dentro del bloque de simulación.

### **2.5.2 Setup del BatchSep**

El bloque de simulación BatchSep necesita 6 especificaciones para ser completado. Empezando por “Configurations” donde se emplea la configuración de columna de destilación con las mismas etapas calculadas en (Cabezas y Álava, 2019) incrementando 2 más ya que tanto la olla como el condensador son considerados como etapas. Al tener aceite, agua y vapor las fases fueron especificadas como Vapor-Líquido-Líquido y se configuraron los recibidores tanto para el hidrolato como aceite esencial. En “Streams” se definió la corriente que alimenta a la olla, y se especificó las corrientes que corresponden al hidrolato y aceite esencial acorde al esquema realizado en Main Flowsheet.

En el apartado “Reflux” se configuró la relación de reflujo tanto para el aceite y el hidrolato, acorde al proceso, por lo tanto, se debe variar con el fin de que regrese el agua a la olla, pero no el aceite. Por lo cual se basó en la investigación realizada por (Agudelo y Barrera Zapata, 2016); en donde se especifica el rango de reflujo para una destilación por lotes.

La sección “3-Phases” se encuentra activada, debido a que existen más de dos fases y se utiliza para especificar los componentes claves necesarios para determinar la segunda fase líquida, en este caso el agua se seleccionó como el componente clave.

Para “Pressures & Holdup” se necesita la selección del cálculo de holdup, el cual fue calculado de manera especificada, empleando el rango según I. M. Mujtaba and S. Macchiettot (1998); en donde se ingresan las presiones y atracos que se asumen como fijos en toda la columna. Por otro lado, también son requeridas presiones del condensador y presiones de caída en la columna.

Finalmente, la opción del “Condenser” se ingresa el tipo de condensador a emplear, para ello se empleó un condensador tipo total, de esta manera todo el vapor a la salida de la unidad de operación BatchSep será condensado y una parte del líquido regresará a la torre como reflujo para luego separarse, obteniendo el producto deseado. Una vez escogida la opción se ingresan sus especificaciones, las de subenfriamiento, y las del flash.

### **2.5.3 Operating Steps, Heat Transfer e Initial Conditions del BatchSep**

Dentro del bloque BatchSep se necesita establecer “Heat Transfer”, que es el calor (Duty) necesario para llevar a cabo la evaporación del agua alimentada hasta la condición de vapor sobrecalentado a la temperatura establecida en (Cabezas y Álava, 2019), acorde a la operación real; el cual fue calculado mediante un horno dentro del simulador. En el caso de “Initial Conditions” se especificó la carga total de la olla, la cual fue considerada como la suma de las corrientes de entrada luego del mezclador.

Además, se detalló el “Operating Steps”, donde se establece la condición a la que el bloque de simulación debe correr a través del tiempo, por lo cual, para conseguir similitud con el proceso real se lo definió con el reflujo del hidrolato, con dicho ajuste se consiga que el agua abandone la olla al final del proceso. En este punto, también se colocó la información correspondiente al tiempo de operación que dura el proceso de destilación por arrastre de vapor como criterio de paro de la simulación.

## **2.6 Unidades Auxiliares**

Se desarrollaron 2 equipos auxiliares dentro del bloque de simulación con el fin de conocer el Duty que se genera al cambiar la alimentación del Pot.

### **2.6.1 Horno**

Debido a que el BatchSep necesita una especificación del calor dentro de la olla, definido en la pestaña "Heat Transfer", se procedió a calcular dicho Duty medido en Kcal/h por medio de un horno. Este equipo, llamado "FURNACE", es alimentado con la misma corriente de vapor de agua que entra al Pot tanto en flujo, presión y temperatura denominada "WATERAUX". Posteriormente es calentado hacia la condición real del vapor en planta, es decir, 177°C lo cual se define dentro del equipo. Posteriormente se genera el reporte de dicha unidad y se toma el valor de Duty que ha sido calculado el cual se coloca en "Heat Transfer" como se indicó previamente.

### **2.6.2 Condensador**

El empleo de este equipo surge por el motivo de que el condensador del "BatchSep" no indica el calor que se está transfiriendo entre el agua de enfriamiento y el producto de tope en la columna. Conocer este calor permite que se pueda llevar a cabo análisis con respecto a la energía que se necesita para condensar la mezcla aceite-hidrolato al variar las condiciones. Para establecer el condensador se requirió en primer lugar de un mezclador "MIXERAUX" donde se unieron las 3 corrientes líquidas que entran al Pot: la humedad, vapor de agua y aceite esencial. Las corrientes mencionadas son iguales únicamente en flujos y fracciones másicas que "YLANYLAN", "WATER" Y "HUM".

Dado que se busca emular el condensador del "BatchSep", las 3 corrientes se definieron a la presión y temperatura de la olla, la cual fue aproximada a las condiciones obtenidas en la corriente "MATVEGET". Luego, el condensador "CONDENS" se configuró para que las corrientes mezcladas sean enfriadas a la misma temperatura promedio entre la corriente "DIST" y "HYDROLAT", no obstante, cabe recalcar que los valores son muy similares. Al generar el reporte del bloque se obtiene el valor del Duty que se está dando en el intercambio de calor.

## 2.7 Operaciones Especiales

Una vez que se establecen todos los parámetros necesarios del proceso, esto se comparan. La comparación se realizó con los datos experimentales, los valores a comparar fueron los rendimientos de la extracción del aceite esencial de Ylang Ylang que son calculados como la relación entre la cantidad de aceite (en ml) destilados y la cantidad de materia vegetal (en Kg) ingresada.

Para lo cual se instaló un calculator dentro de las especificaciones de Aspen Plus, en la sección “Flowsheeting Options” que calcula el rendimiento para cada caso. Los pasos por seguir son los siguientes:

1. Crear un nuevo calculator y definir las variables requeridas con su respectiva unidad de medida de la corriente deseada e importarlas o exportarlas del simulador según sea el caso.

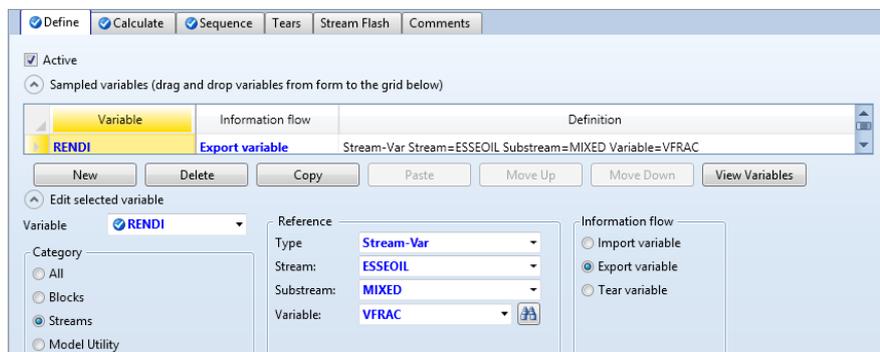


Figura 2.4 Ingreso de variables [Aspen Plus V12]

2. Seleccionar el método de cálculo, entre Fortran o Excel; en este caso se seleccionó como entrada Fortran y se ingresa la operación correspondiente.



**Figura 2.5 Ingreso del Cálculo [Aspen Plus V12]**

3. Verificar que los datos se hallan ingresado correctamente y correr la simulación. Revisar los resultados en la pestaña “Results”

## **2.8 Análisis de sensibilidad**

Aspen Plus al ser un software de simulación de procesos permite generar análisis de sensibilidad, donde se aprecia el desempeño del proceso de destilación del bloque BatchSep. Para realizar dicho análisis se definieron las variables manipuladas y las variables calculadas, una de las variables a calcular fue el rendimiento, esto es debido a que uno de los objetivos principales en el proceso es la obtención de la mayor cantidad de aceite esencial por cada lote. La segunda variable para calcular son los calores tanto del condensador como de la columna BatchSep, ya que estos se encuentran directamente relacionados con el consumo energético y por ende con los costos.

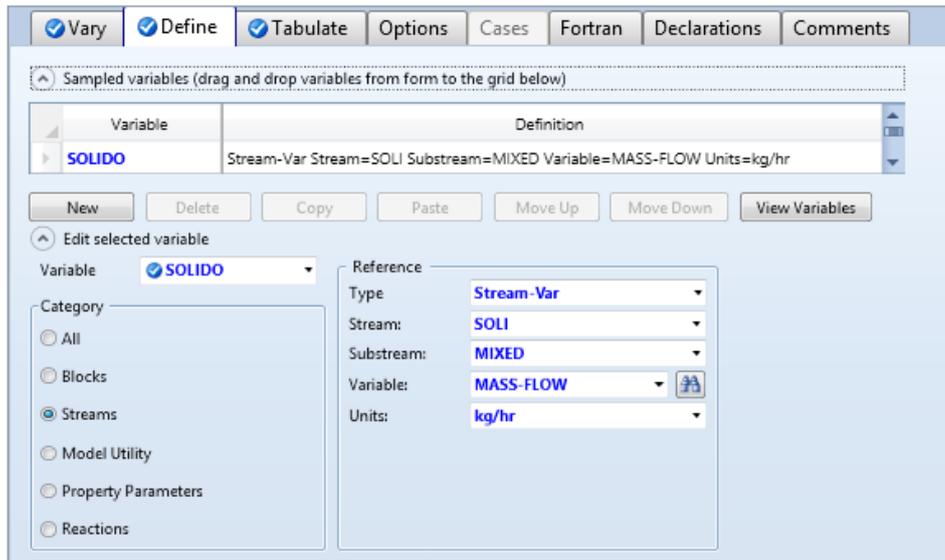


figura 2.6 ingreso de la variable calculada [Aspen Plus V12]

Por otro lado, para las variables manipuladas se procedió a seleccionar los parámetros operativos con mayor relevancia durante la simulación, los cuales fueron holdup, número de etapas, flujo de vapor, humedad y reflujo tanto del hidrolato como del destilado y como estos afectan directamente sobre el rendimiento del aceite esencial y los calores.

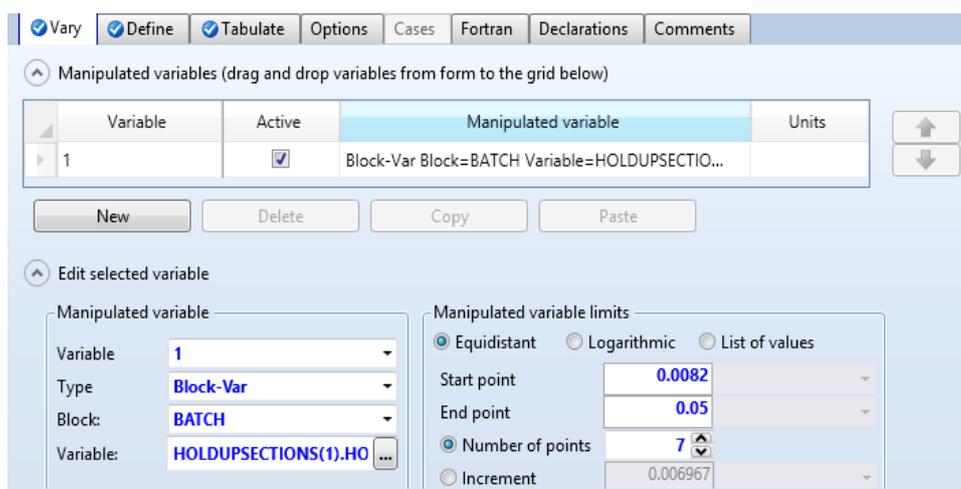


Figura 2.7 Ingreso de la variable manipulada y sus límites [Aspen Plus V12]

Después de realizarse la validación sobre cada uno de los casos y realizarse la definición de las variables manipuladas y calculadas, se seleccionó la tecnología y el caso que presentaba menor variación en sus errores. Este fue el caso 3 de la tecnología 1, el cual es alimentado por 12,67 Kg/h, entrando en el rango de flujo bajo con un error de 0.88%.

### **2.8.1 Holdup**

El rango perteneciente a holdup es del 2% al 28% de la carga inicial en moles; sin embargo, debido a que es dependiente del flujo de entrada se tuvo que reducir este rango. Teniendo entonces como rango final de holdup del 2% al 20,32%, con un paso de 0,006967 para tener la mayor cantidad de puntos posibles.

### **2.8.2 Número de etapas**

El número de etapas es una de las características que puede interferir en el grado de separación. Inicialmente se trabajó con 4 etapas; no obstante, esta se varió desde 3 a 8 etapas con un paso de 1 etapa, con el fin de conocer si el aumento o la disminución de etapas mejoran la eficiencia del proceso.

### **2.8.3 Humedad**

El rango de humedad presente en la materia vegetal se encuentra entre el 5,57% al 12% con un paso de 1,5; este rango indica el porcentaje de las flores previamente secadas antes de ingresar a la torre BatchSep.

### **2.8.4 Reflujo**

El rango de la relación del radio de reflujo para ambos líquidos, hidrolato y destilado es de 0,266 a 2,7 con un paso de 0,405667. El análisis de sensibilidad se realizó de manera simultánea; es decir el reflujo para el hidrolato en combinación con el reflujo para el destilado, debido a que la relación de reflujo de estos líquidos es lo que consigue la mejoras en el rendimiento del aceite esencial obtenido como producto de la destilación.

### 2.8.5 Flujo de vapor

Puesto que, como en la validación se pudo observar que la cantidad de vapor que ingresa responde de forma directa en la eficiencia del proceso de extracción. Se consideraron los flujos de vapor previamente estudiados para la tecnología 1 que indican un rango de 12,67Kg/h al 31,62 Kg/h con un paso de 6,3271.

**Tabla 2.1 Información del análisis de sensibilidad [Elaboración propia]**

Variable manipulada	Variable calculada	Rango	Paso
Holdup	Q de BatchSep y condensador	2% al 20,32% de la carga inicial líquida en el Pot	0,01
	Rendimiento de aceite esencial Ylang Ylang		
Relación de Reflujo de hidrolato y destilado	Q de BatchSep y condensador	0,266 a 2,7	0,50
	Rendimiento de aceite esencial Ylang Ylang		
Número de etapas	Q de BatchSep y condensador	3-8 etapas	1,00
	Rendimiento de aceite esencial Ylang Ylang		
Flujo de vapor	Q de BatchSep y condensador	12,67Kg/h al 31,62 Kg/h	6,50
	Rendimiento de aceite esencial Ylang Ylang		
Humedad	Q de BatchSep y condensador	5,57-12 % de la materia vegetal	1,50
	Rendimiento de aceite esencial Ylang Ylang		

Holdup, flujo de vapor, humedad, etapas y reflujo fueron manipulados para observar su influencia en el rendimiento del aceite esencial, el calor del condensador y del BatchSep, para la posterior optimización del sistema, que requerirá soluciones para maximizar el rendimiento y minimizar el consumo energético.

# CAPÍTULO 3

## 3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

### 3.1 Definición del caso de diseño

El proceso de extracción de aceites esenciales comprende del sistema mostrado en la Figura 1.2, que consta de un sistema: caldera, torre de destilación, condensador y decantador; en el cual se evaluaron parámetros operativos como holdup y reflujo. Así como la verificación de características claves como flujo de vapor que pueden influenciar en la mejora del rendimiento.

También es preciso mencionar que dicho proceso es operado en dos tipos de tecnologías a las que se definió como tecnología 0 y tecnología 1, la principal característica que las diferencia son sus configuraciones, es decir, las especificaciones mecánicas en la construcción de los equipos.

Pese a la existencia de dos diferentes tecnologías, los equipos y condiciones de operación no cambian, por lo cual el diagrama realizado en el simulador Aspen Plus que representa el proceso mencionado anteriormente es válido para ambos casos. Esto se debe a que el simulador está centrado en balances de materia y energía.

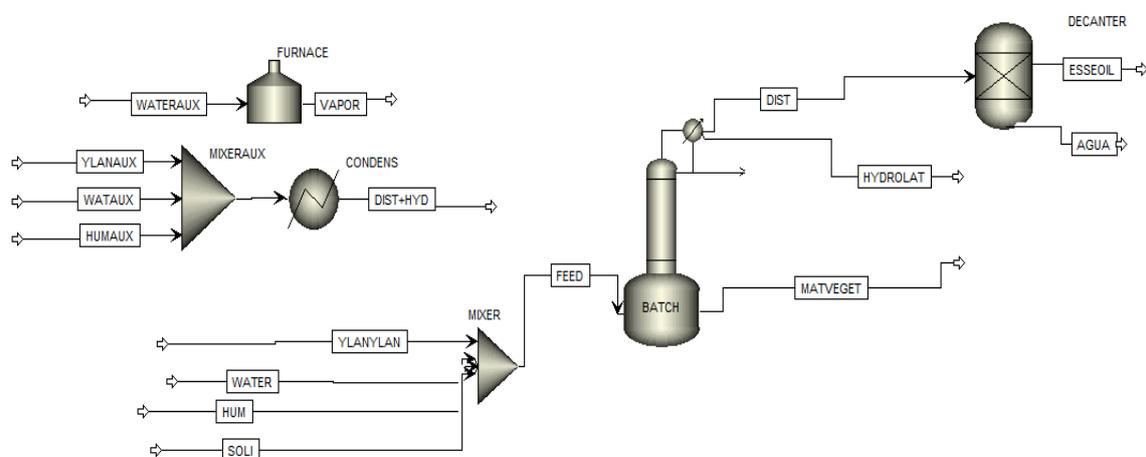


Figura 3.1 Diagrama de simulación propuesto en Aspen Plus [Elaboración propia]

El diagrama propuesto integra un horno en el cual se calcula el calor necesario para convertir el agua en vapor de agua, esto se realiza debido a que es un valor necesario requerido por el BatchSep. Así mismo, se empleó una unidad auxiliar; en este caso un intercambiador de calor para conocer el calor que genera el condensador que incorpora la unidad BatchSep.

Para efectos de simplicidad se optó por graficar la corriente de alimentación de forma separada; es decir Ylang Ylang; representado como el aceite dentro de la materia vegetal, Humedad; como la cantidad de agua contenida dentro de la materia vegetal después ser secada, Sólido; como la biomasa y Water; agua líquida. Este conjunto de componentes se mezcla en el mixer y posterior a ello ingresan a la unidad de operación BatchSep; la diferencia con el proceso real es que dentro de la misma operación ocurre la transferencia de calor, que convierte el agua líquida en vapor, generando de esta manera el arrastre de las partículas de aceite, además también dentro del BatchSep se encuentra un reciclo interno de hidrolato. El proceso continuo alrededor de 2,59 horas, en donde se obtiene el agua con trazas de aceite esencial por el fondo y el aceite esencial con trazas de vapor de agua por el tope que con ayuda del condensador se obtiene esta mezcla en estado líquido para su ingreso al decantador en donde el aceite esencial es finalmente obtenido.

Las condiciones de presión y temperatura que son operadas por ambas tecnologías fueron fijadas en base a información experimental bibliográfica de la operación real, las cuales son definidas a continuación:

**Tabla 3.1 Condiciones de operación de los equipos [Elaboración Propia]**

	<b>Mezclador</b>	<b>BatchSep</b>	<b>Condensador</b>	<b>Decantador</b>
<b>Etapas</b>	-	6	-	-
<b>Presión [atm]</b>	-	-	1	1
<b>Caída de presión [atm]</b>	-	1,03	-	-
<b>Temperatura de alimentación [°C]</b>	30	30	-	-

Temperatura vapor entrada [°C]	-	177	-	-
--------------------------------	---	-----	---	---

### 3.1.1 Caracterización de la alimentación

La composición del aceite esencial Ylang Ylang se conforma de los siguientes compuestos, los cuales ya han sido llevados al 100%:

**Tabla 3.2 Composición del Ylang Ylang [Elaboración propia]**

Compuestos	Composición (%)
Benzyl Benzoate	0,226489
Benzyl Acetate	0,219382
Delta Germacrene	0,192756
Linalool	0,121186
E.E, Alpha Farnesene	0,085426
Methyl Benzoate	0,059789
P. M. Anisole	0,054734
Trans Caryphyllen	0,040234

En el caso de la materia vegetal que conformaría la corriente de alimentación se realizó algo análogo y se ajustaron como material sólido.

**Tabla 3.3 Composición de la materia vegetal [Elaboración propia]**

Compuestos	Composición (%)
Cellulose	28,1746
Hemicelulosa	64,6825
Cenizas	7,14285

Una vez conocida la composición del aceite y materia vegetal, se dirigió al simulador para conocer cuáles de ellas se encuentran dentro de la base de datos y cuales serían requerirían de especificaciones por el usuario, teniendo de esta forma lo siguiente.

**Tabla 3.4 Compuestos definidos y no definidos en Aspen Plus [Elaboración Propia]**

Compuestos	Base de datos de Aspen	Caracterizados por el usuario
Benzyl Benzoate		✓
Benzyl Acetate	✓	
Delta Germacrene		✓
Linalool		✓
E.E, Alpha Farnesene		✓
Methyl Benzoate	✓	
P. M. Anisole	✓	
Trans Caryphyllen		✓
Water	✓	
Celulosa	✓	
Hemicelulosa	✓	
Ash	✓	

### 3.2 Datos experimentales para validación

De análisis experimentales previos se conoce el rango del porcentaje de aceite presente al inicio de la alimentación; es decir el conjunto humedad, materia vegetal y aceite. De la misma manera existen variaciones de flujo de vapor de agua para cada tecnología, de las cuales se obtiene su rendimiento, con estos valores que se encuentran previamente en la tabla 1.1 se procedió a validar la simulación realizada bajo las condiciones previamente propuestas. Sin olvidar que el aceite Ylang Ylang al final del proceso debe cumplir con los parámetros correspondientes al análisis cromatográfico, que se encuentran en la Tabla 3.2; por lo cual estas composiciones también forman parte de la validación de la simulación.

### 3.3 Ajuste del modelo

Se comenzó ajustando el rendimiento variando los parámetros del caso 5 de la tecnología 1 hasta obtener un rendimiento similar al reportado experimentalmente. Dicho

caso se empleó de partida ya que es el que presentaba tanto mayor rendimiento, así como mayor flujo de vapor para dicho rendimiento, por lo tanto, iba a representar el tope máximo de aceite esencial a la salida del BatchSep y el resto de los casos seguirían la tendencia decreciente con respecto al rendimiento cuando el flujo de vapor disminuya. En el caso del Reflux se mantiene al Liquid 1 con el mínimo posible y al Liquid 2 como el máximo posible a fin de que retorne la menor cantidad de aceite y la mayor cantidad de agua hacia la olla, los valores fueron 0,266 y 2,7 respectivamente.

Fijado en valor anterior se procedió a modificar el “Stage Holdup” hasta mejorar el valor obtenido de aceite esencial a la salida y que se aproxime al valor experimental, se varió en el rango de 2% a 28% de la carga inicial líquida de la olla, definida como la suma de las corrientes “YlanYlan”, “Vapor” y “Humedad” o de manera alterna como la diferencia entre la corriente “Feed” y “Solido”, dado que esta última corriente no es un líquido que recorre la columna. Finalmente se definió el Holdup como 8.6% de carga inicial y se mantuvo esta cantidad en todos los 5 casos.

El “Heat Transfer” se definió como el calor necesario para llevar a la corriente “Vapor” hasta la condición de vapor sobrecalentado a 177 °C dentro de la olla. Para conocer este valor de “Duty” se recurrió al empleo de un equipo auxiliar, el cual fue un horno. La alimentación del horno fue configurado exactamente igual a la corriente “Vapor” del BatchSep, y dentro del equipo se definió la condición de salida de esta corriente, es decir, 177 °C. El valor del “Duty” que reportó el horno fue luego colocado en el “Heat Transfer” del BatchSep para cada uno de los 10 casos.

La variación de todos los parámetros tenía como principal propósito aproximar tanto el rendimiento como la cromatografía simulada, por lo que se varió hasta alcanzar una similitud satisfactoria. Luego del ajuste del caso 5 que pertenece a flujo de vapor alto, se obtuvo lo siguiente:

**Tabla 3.5 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 5-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
27,02	8,4	1,100	8,6	17478	343,789	11,33	11,46	1,14

Mientras que las fracciones másicas de los compuestos que conforman el aceite son:

**Tabla 3.6 Comparación de cromatografías para Caso 5-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,2261	0,22648
BENZY-02	0,2193	0,21938
METHY-01	0,0586	0,05978
METHY-02	0,0537	0,05473
GERMA-D	0,1943	0,19275
LINALOOL	0,1213	0,12118
ALFAFARS	0,0861	0,08542
BCARIOFI	0,0406	0,04023

El procedimiento para la tecnología 0 fue igual que con la anterior. En este caso se partió del caso 1 por la misma razón que la enunciada para la tecnología 1, es decir, debido a que este caso posee el mayor rendimiento, permitiendo definir el límite máximo de aceite esencial que se va a tener a la salida del BachSep. Se utilizaron los mismos valores en los parámetros que se usaron para la tecnología 1. El único valor que se diferenció fue el Holdup que se estableció en 6.6% de carga inicial líquida. Los resultados para el caso 1, el cual fue ajustado en primera instancia:

**Tabla 3.7 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 1-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
29,20	8,35	1,150	6,6	18888	359,52	11,67	11,99	2,69

**Tabla 3.8 Comparación de cromatografías para Caso 1-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22584	0,22648
BENZY-02	0,21936	0,21938
METHY-01	0,05858	0,05978
METHY-02	0,05376	0,05473
GERMA-D	0,19445	0,19275
LINALOOL	0,12128	0,12118
ALFAFARS	0,08612	0,08542
BCARIOFI	0,04056	0,04023

### 3.4 Validación del modelo

Para el desarrollo de la validación de los resultados se debe resaltar la existencia de dos tecnologías: 0 y 1. Ambas poseen 5 casos de los cuales se tiene el rendimiento experimental a corroborar, 3 corresponden a flujos de vapor altos y 2 a flujos de vapor bajos.

Todas las opciones colocadas dentro del BatchSep en las pestañas “Configurations”, “Streams”, “Condenser”, “Reflux”, “3-Phase” de la ventana Setup no

sufren ningún cambio en ninguno de los 10 casos en base a lo que se ha desarrollado para seleccionar correctamente cada opción, de la misma forma las ventanas “Initial Conditions” y “Operating Steps” no se alteran en lo absoluto. Dicho lo anterior, las ventanas que se modifican en cada caso son “Pressures & Holdups” en el apartado “Stage Holdup” de la ventana Setup, también el Duty de la ventana “Heat Transfer” al igual que las corrientes de entrada “Humedad”, “YlanYlan” y “Vapor”.

### **3.4.1 Validación Tecnología 1**

Para todos los casos, se varió el “Duty” obtenido por el equipo auxiliar (horno), ya que este valor depende del flujo másico de agua que se ingrese, el cual cambia. Exceptuando el caso 5; el cual fue empleado previamente como ajuste.

El Holdup como se indicó anteriormente se mantuvo fijo en 8,6% de carga inicial, pero dado que el flujo másico de agua, aceite y humedad cambia en cada caso, se debió calcular su respectivo valor en moles para colocarlo en el “Stage Holdup” ya que el BatchSep no permite el ingreso de porcentajes. Todo lo indicado fue válido tanto para los casos restantes de flujo de vapor alto, es decir, caso 1 y 4, no obstante, cuando se realizó las respectivas pruebas para los casos de flujo de vapor bajo, caso 2 y 3, se lograron muy buenos resultados sin tener que volver a ajustar algún parámetro o tratar a dichos casos de distinta manera.

Por lo tanto, los valores de los parámetros colocados en el BatchSep son válidos para flujos de vapor alto y flujos de vapor bajo indistintamente y logran un rendimiento muy cercano al igual que la cromatografía simulada.

**Tabla 3.9 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 1-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
20,94	8,4	1,100	8.6	13545	343,75	11,33	11,46	1,13

**Tabla 3.10 Comparación de cromatografías para Caso 1-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22627	0,22648
BENZY-02	0,21929	0,21938
METHY-01	0,05855	0,05978
METHY-02	0,05369	0,05473
GERMA-D	0,19427	0,19275
LINALOOL	0,12125	0,12118
ALFAFARS	0,08609	0,08542
BCARIOFI	0,04055	0,04023

**Tabla 3.11 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 2-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
12,67	8,55	0,950	8.6	8389,6	297,0	9,83	9,90	0,71

**Tabla 3.12 Comparación de cromatografías para Caso 2-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22611	0,22648
BENZY-02	0,21921	0,21938
METHY-01	0,05846	0,05978
METHY-02	0,05375	0,05473
GERMA-D	0,19435	0,19275
LINALOOL	0,12124	0,12118
ALFAFARS	0,08624	0,08542
BCARIOFI	0,04060	0,04023

**Tabla 3.13 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 3-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
12,67	8,5	1,000	8.6	8389,6	312,63	10,33	10,42	0,88

**Tabla 3.14 Comparación de cromatografías para Caso 3-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22599	0,22648
BENZY-02	0,21922	0,21938
METHY-01	0,05843	0,05978
METHY-02	0,05377	0,05473
GERMA-D	0,19441	0,19275
LINALOOL	0,12125	0,12118
ALFAFARS	0,08627	0,08542
BCARIOFI	0,04062	0,04023

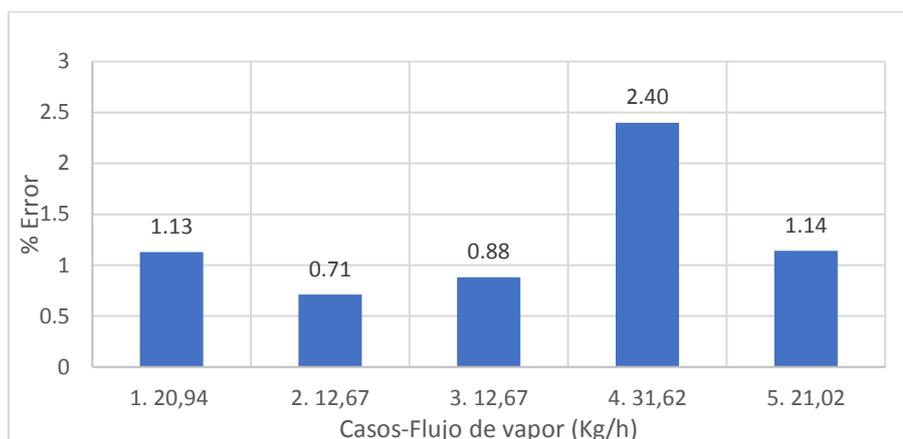
**Tabla 3.15 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 4-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
31,62	8,467	1,033	8.6	20453	322,561	10,50	10,75	2,40

**Tabla 3.16 Comparación de cromatografías para Caso 4-Tecnología 1 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22582	0,22648
BENZY-02	0,21943	0,21938
METHY-01	0,05852	0,05978
METHY-02	0,05362	0,05473
GERMA-D	0,19444	0,19275
LINALOOL	0,12130	0,12118
ALFAFARS	0,08621	0,08542
BCARIOFI	0,04060	0,04023

En la siguiente figura se realiza una comparación de los errores en cada caso, los cuales son calculados como la diferencia entre el rendimiento simulado y el rendimiento experimental. Los casos 1, 4 y 5 presentan los flujos de vapores altos, mientras que los casos 2 y 3 pertenecen a los flujos de vapor bajo. El rango de error se encuentra entre [0,71%-2,40%].



**Figura 3.2 Errores obtenidos en la tecnología 1 en base al rendimiento [Elaboración propia]**

### 3.4.2 Validación Tecnología 0

Los casos de flujo de vapor alto, caso 2 y 3, tuvieron los siguientes resultados:

**Tabla 3.17 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 2-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
31,62	8,383	1,117	6,6	20453	348,90	11,33	11,63	2,64

**Tabla 3.18 Comparación de cromatografías para Caso 2-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22573	0,22648
BENZY-02	0,21946	0,21938
METHY-01	0,05856	0,05978
METHY-02	0,05371	0,05473
GERMA-D	0,19441	0,19275
LINALOOL	0,12134	0,12118

ALFAFARS	0,08616	0,08542
BCARIOFI	0,04058	0,04023

**Tabla 3.19 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 3-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
20,94	8,45	1,050	6,6	13545	328,02	10,83	10,93	0,96

**Tabla 3.20 Comparación de cromatografías para Caso 3-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22610	0,22648
BENZY-02	0,21927	0,21938
METHY-01	0,05843	0,05978
METHY-02	0,05379	0,05473
GERMA-D	0,19438	0,19275
LINALOOL	0,12128	0,12118
ALFAFARS	0,08613	0,08542
BCARIOFI	0,04056	0,04023

Los resultados para los casos 4 y 5 con flujo de vapor bajo fueron los siguientes:

**Tabla 3.21 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 4-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
12,97	8,417	1,083	6,6	8389.6	338,705	11,17	11,29	1,08

**Tabla 3.22 Comparación de cromatografías para Caso 4-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22643	0,22648
BENZY-02	0,21908	0,21938
METHY-01	0,05841	0,05978
METHY-02	0,05389	0,05473
GERMA-D	0,19422	0,19275
LINALOOL	0,12122	0,12118
ALFAFARS	0,08613	0,08542
BCARIOFI	0,04056	0,04023

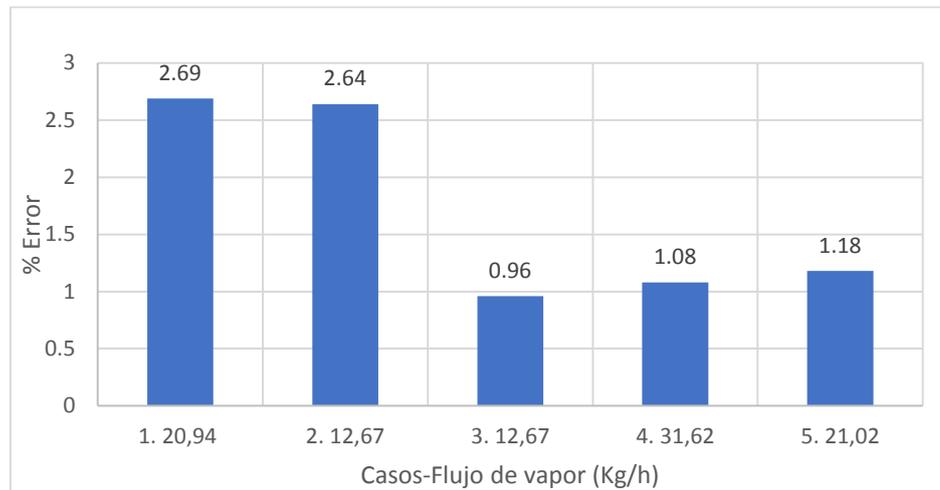
**Tabla 3.23 Parámetros empleados en el BatchSep para Caso 5-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Flujo de Vapor (Kg/h)	Humedad [%]	Aceite [%]	Holdup [% de carga inicial]	Duty [Kcal/h]	Volumen [mL]	Rendimiento Experimental [mL/Kg]	Rendimiento Simulado [mL/Kg]	Error [%]
12,67	8,4	1,100	6,6	8389,6	343,936	11,33	11,46	1,18

**Tabla 3.24 Comparación de cromatografías para Caso 5-Tecnología 0 [Elaboración Propia]**

Compuesto	Composición simulada	Composición planta
BENZ-01	0,22633	0,22648
BENZY-02	0,21911	0,21938
METHY-01	0,05841	0,05978
METHY-02	0,05391	0,05473
GERMA-D	0,19420	0,19275
LINALOOL	0,12125	0,12118
ALFAFARS	0,08616	0,08542
BCARIOFI	0,04057	0,04023

La Figura 3.3 compara los errores obtenidos en los 5 casos de la tecnología 0. Los casos 1, 2 y 3 presentan los flujos de vapores altos, mientras que los casos 4 y 5 pertenecen a los flujos de vapor bajo. El rango de error se encuentra entre [0,96%-2,69%].



**Figura 3.3 Errores obtenidos en la tecnología 0 en base al rendimiento [Elaboración propia]**

### 3.4.3 Análisis de resultados

Para el caso de la tecnología 1, tal como lo indica la Figura 3.6, los errores basados en la diferencia del rendimiento simulado con el rendimiento experimental son bastante pequeños, ubicándose entre 0,71% a 2,40%. El promedio de los errores con su respectiva desviación estándar es  $1,25 \pm 0,60\%$ , la desviación al ser pequeña indica que los rendimientos simulados no siguen tendencias atípicas, sino que están muy próximos a la media.

En la tecnología 0, al igual que con la tecnología 1, no se realizaron ajustes para los casos de flujos de vapor, ya que también pudieron ser extrapolados para los flujos de vapor bajo, por ende, no fue necesario variar parámetros, únicamente realizar los

cambios necesarios en “Duty” y Holdup, que se conocen que varían debido a la alimentación que cambia en cada caso.

Los errores obtenidos en la tecnología 0 (Ver Figura 3.9), se ubicaron entre 0,96% a 2,69%. El promedio de los errores con su respectiva desviación estándar es  $1,71 \pm 0,78\%$ , por lo que se aprecia que el ajuste fue bastante cercano a la realidad de manera experimental ya que los errores son relativamente pequeños.

Al comparar ambas tecnologías, se puede notar que la tecnología 0 tiene un error mínimo y máximo [0,96%-2,69%], mayor que la tecnología 1, y de manera general por medio de la media de los errores, claramente se distingue una mejor aproximación al caso de estudio real cuando se simula con los datos de la tecnología 1. Por último, la desviación de la media es más pequeña en dicha tecnología, lo que da un preámbulo a que la replicabilidad de los resultados va a ser más aproximada que en la tecnología 0 ya que no va a alejarse de la tendencia marcada por los experimentos.

El tener una mejor precisión en los resultados de la tecnología 1 probablemente se deba al diseño y montaje del equipo real dentro de la planta ya que ambas tecnologías al contener diferencias en su configuración interna, es decir, variaciones en la estructura mecánica y criterios de diseño usados en los equipos al momento de su construcción, dando paso a que los resultados difieran. No obstante, la validación fue satisfactoria para ambas tecnologías, y para flujos de vapor sea alto o bajo.

Dado que menor error presentó la tecnología 1, para el caso de desarrollar un análisis de sensibilidad se podría emplear los casos de flujo de vapor bajo (Caso 2 y Caso 3) ya que presentaron la mejor aproximación en el rendimiento experimental y por ende los errores más bajos.

# CAPÍTULO 4

## 4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

### Conclusiones

Durante este trabajo se ha podido desarrollar la metodología necesaria para generar una simulación del proceso de destilación por arrastre de vapor del aceite esencial Ylang Ylang con el propósito de obtener el rendimiento de este.

El estudio se ha realizado en el software de simulación de procesos químicos, Aspen Plus V12. Dentro del mismo se optó por emplear el bloque de simulación conocido como “BatchSep” el cual corresponde a un bloque que representa el proceso de destilación batch y que fue adaptado para que sea capaz de reproducir la obtención de aceites esenciales.

El BatchSep fue seleccionado ya que permite la simulación en estado transitorio y además es posible agregar materiales sólidos en la alimentación, las cuales son dos características inherentes de la destilación por arrastre de vapor. A más de lo indicado anteriormente, el BatchSep contenía la corriente de aceite de entrada, la humedad de las flores representada como una corriente de agua líquida, y el vapor que se inyecta en el proceso real, solo que en este caso el cambio de estado líquido-vapor se desarrollaba dentro del llamado “Pot” del bloque. Las condiciones del proceso fueron tomadas del proceso real, como temperatura, presión y flujos másicos de vapor.

Dado que algunos parámetros del BatchSep no se presentan dentro del proceso real de destilación fue necesario estimarlos empleando valores bibliográficos con el fin de complementar los requerimientos del software. Parámetros como Reflux, Holdup y Humedad se recopilaron de investigaciones en las cuales enunciaban rangos posibles en los que pueden variar ya que no se pueden definir con un valor fijo, por lo cual dentro de la simulación fueron variados acorde a la obtención de una cromatografía simulada cercana a la original, y también los rendimientos aproximados a la experimentación.

Al calcular los rendimientos por medio del BatchSep se obtuvieron resultados favorables tanto para la tecnología 0 y 1, específicamente para los casos cuando se tienen flujos de vapor altos. Para el caso de los flujos de vapor bajos, fue necesario un ajuste distinto de Holdup, el resto de las condiciones se mantuvieron iguales. Tal como lo muestran los gráficos de errores, la tecnología que es mejor representada por el bloque de simulación propuesto es la 1, mientras que la tecnología 0, si bien se aproximaba de manera muy cercana, tuvo mayor variabilidad entre los errores de sus casos.

Gracias a la validación satisfactoria realizada en el esquema de simulación, se podrá desarrollar el análisis de sensibilidad del proceso dentro del mismo simulador, mediante la metodología planteada para las variables: holdup, reflux, humedad, número de etapas y flujos de vapor. Con este análisis se busca conocer la influencia que tienen las variables antes mencionadas en el rendimiento final en la destilación por arrastre de vapor y también con el resto de variables calculados, dando la posibilidad de mejorar el proceso comprendiendo las variables que inciden en gran medida dentro del proceso.

### **Recomendaciones**

Es recomendable emplear el estudio realizado para un posterior análisis de sensibilidad de las 5 variables que se han identificado que se pueden modificar en el sistema. También es posible realizar la optimización del proceso con el fin de conocer las mejores condiciones a las que debe operar el equipo ya sea con un fin de incrementar el rendimiento o disminución de consumo energético.

Con respecto a las aproximaciones realizadas, se recomienda en la medida de lo posible, obtener una caracterización más certera de los componentes de la materia vegetal para que puedan ser agregados como sólido dentro del simulador ya que fue un dato bibliográfico el cual podría ser obtenido de la propia flor de Ylang Ylang. Así mismo, la humedad de las flores se podría obtener con ayuda de una termobalanza de manera

experimental para que pueda ser un dato fijo real y no una aproximación de otras flores que se usan en la destilación de aceites esenciales.

Se podría explorar las distintas formas que tiene el BatchSep para configurar su sistema de destilación, incluyendo dimensiones y geometría de la olla e incluso del condensador, ya que podría ser una vía alterna al diseño del bloque con otro enfoque.

# BIBLIOGRAFÍA

- Armijo, J., Vicuña, E., Romero, P., Condorhuam, C., y Hilario, B. (2012). Modelamiento Y Simulación Del Proceso De Extracción De Aceites Esenciales Mediante La Destilación Por Arrastre Con Vapor. *Revista Peruana de Química e Ingeniería Química*, 15(2), 19–27.
- AspenTech. (1999). Building and Running a Process Model. Élan Computer Group, Inc.
- AspenTech. (2018). <https://www.aspentech.com/en>.
- Cabezas, C., y Álava, J. (2019). Modelado y simulación de un proceso de extracción del aceite esencial del Ylang Ylang, mediante destilación con arrastre de vapor. Guayaquil.
- Carlson, E. (1996). Don't Gamble With Physical Properties For Simulations. CHEMICAL ENGINEERING PROGRESS.
- Cerón-Salazar, I., y Cardona-Alzate, C. (2011). Evaluación del proceso integral para la obtención de aceite esencial y pectina a partir de la cáscara de naranja. *Ingeniería y Ciencia*, 7(13), 65–86.  
<http://publicaciones.eafit.edu.co/index.php/ingciencia/article/view/401>
- Cerpa, M. G. (2015). Departamento de Ingeniería Química y por la Universidad de Valladolid Manuel Guillermo Cerpa Chávez. March 2007.  
<https://doi.org/10.13140/2.1.1994.0644>
- Couic-Marinier, F., & Laurain-Mattar, D. (2019). Huile essentielle d'Ylang-ylang. *Actualites Pharmaceutiques*, 58(589), 57–59.  
<https://doi.org/10.1016/j.actpha.2019.07.012>
- C. Ververis., K. Georghiou., D. Danielidis., D.G. Hatzinikolaou., P. Santas., R. Santas., & V. Corleti (2006). Cellulose, hemicelluloses, lignin and ash content of some organic materials and their suitability for use as paper pulp supplements. *Bioresource Technology*, 98, 296–301

- Feliu, J. (2006). Importancia de la termodinámica en la simulación de procesos. *Ingeniería Química*, 438, 111–117. <https://dialnet.unirioja.es/servlet/articulo?codigo=2112085>
- Hernández, I., y Jibaja, M. (2017). PLAN DENEGOCIOS PARA PRODUCCIÓN Y EXPORTACIÓN DE ACEITES ESENCIALES EXTRAÍDOS DE PLANTAS AROMÁTICAS DE CICLO CORTO. Guayaquil: Observatorio Economía Latinoamericana.
- Hosseinpour, F., & Hajihosseini, H. (2009). Importance of Simulation in Manufacturing. *International Journal of Economics and Management Engineering*.
- Intrado. (03 de Noviembre de 2020). Obtenido de <https://www.globenewswire.com/news-release/2020/11/03/2119245/0/en/Essential-Oils-Market-Size-Share-Will-Reach-to-US-14-1-Billion-by-2026-Facts-Factors.html>
- Kamal, I., & Malah, A.. (2017). In Chapter 13. Characterization of Drug-Like Molecules Using Aspen Properties. *Aspen Plus Chemical Engineering Textbook*.
- Kristiawan, M., Sobolik, V., Allaf, K., Kristiawan, M., Sobolik, V., Allaf, K., Cananga, I., Kristiawan, M., Sobolik, V., & Allaf, K. (2020). Isolation of Indonesian Cananga oil by instantaneous controlled pressure drop To cite this version: HAL Id : hal-02655771 Isolation of Indonesian Cananga Oil by Instantaneous Controlled Pressure Drop.
- Liang Guo a., Tiefeng Wang., Dongfeng Li., & Jinfu Wang. (2016). Liquid-holdup regions research of novel reactive distillation column for C5 Fraction Separation. doi: 10.1016/j.cjche.2016.09.010
- Mallavarapu, G.R. (2016). Ylang–Ylang (*Cananga odorata*) Oils. Academic Press, 1-4.
- Martínez, V. (2003). Simulación de procesos en ingeniería química. México: Plaza y Valdés.
- Masango, P. (2001). Towards Understanding Steam Distillation of Essential Oils by Differential Quantification of Principal Components Using Capillary Gas Chromatography. University of Surrey. Obtenido de University of Surrey.
- Milojević, S. Ž., Glišić, S. B., & Skala, D. U. (2010). Frakciona destilacija etarskog ulja *Juniperus communis* L.: Laboratorijska ispitivanja, matematička simulacija i ekonomika procesa. *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 16(2), 183–191. <https://doi.org/10.2298/CICEQ100317026M>

- Ministerio de Agricultura, Pesca y Alimentación. (2010, septiembre). EL PROCESADO DE LAS PAM. Retrieved from [https://www.mapa.gob.es/ministerio/pags/Biblioteca/Revistas/pdf\\_DT%2FDT\\_2006\\_13\\_13\\_16.pdf](https://www.mapa.gob.es/ministerio/pags/Biblioteca/Revistas/pdf_DT%2FDT_2006_13_13_16.pdf)
- Moncada, J., Tamayo, J. A., & Cardona, C. A. (2014). Techno-economic and environmental assessment of essential oil extraction from Citronella (*Cymbopogon winteriana*) and Lemongrass (*Cymbopogon citratus*): A Colombian case to evaluate different extraction technologies. *Industrial Crops and Products*, 54, 175–184. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2014.01.035>
- Naturalista. (s.f.). Obtenido de <https://colombia.inaturalist.org/taxa/154842-Cananga-odorata>
- Ríos, J. L. (2016). Essential oils: What they are and how the terms are used and defined. In *Essential Oils in Food Preservation, Flavor and Safety*. Elsevier Inc. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-416641-7.00001-8>
- Schefflan, R. (2011). *the Basics of Aspen Plus TM Teach Yourself the Basics of Aspen Plus TM*. John Wiley & Sons, Inc.
- Sebiha, R., & Seemin, R. (2020, noviembre). Effect of Solar Radiation on the Drying Parameters of Mint (*Mentha Spicata L.*) Dried in Natural Convective Solar Dryer. Research Square.
- Stashenko, E. E., Prada, N. Q., & Martínez, J. R. (1996). HRGC/FID/NPD and HRGC/MSD Study of Colombian Ylang-Ylang (*Cananga odorata*) Oils Obtained by Different Extraction Techniques. *HRC Journal of High-Resolution Chromatography*, 19(6), 353–358. <https://doi.org/10.1002/jhrc.1240190609>
- Tecnológico de Energía e Innovación. (s.f.). ¿Cómo escoger los modelos termodinámicos? Obtenido de [https://elernova.edu.co/E-books/hysys/modelos\\_termodinamicos/index.html](https://elernova.edu.co/E-books/hysys/modelos_termodinamicos/index.html)
- Tonguino, M. (2011). DETERMINACIÓN DE LAS CONDICIONES ÓPTIMAS PARA LA DESHIDRATACIÓN DE DOS PLANTAS AROMÁTICAS; MENTA (*Mentha piperita L.*) Y ORÉGANO (*Organum vulgare L.*). Retrieved from <http://repositorio.utn.edu.ec/bitstream/123456789/385/2/03%20AGI%20273%20PRESENTACION.pdf>

Romero, D. (28 de Diciembre de 2018). Exportación de aceites esenciales crece en el Ecuador. *Vistazo*. Obtenido de <https://www.vistazo.com/seccion/enfoque/exportacion-de-aceites-esenciales-crece-en-el-ecuador>

Wankat, P. C. (2012). In Chapter 9. Batch Distillation (págs. 354-356). *Separation Process Engineering*. México: Pearson Education, Inc.

Yeison Agudelo, R. B. Z. (2016). Simulación y validación de modelos de destilación por lotes usando Aspen Batch Modeler: recuperación de epóxido de limoneno. *Ingeniería y Desarrollo*, 34, 204, 224.