

# **ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL**

## **Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas**

Modelo de un extractor como una unidad añadida en un simulador comercial para la elaboración de una bebida nutracéutica

### **PROYECTO INTEGRADOR**

Previo la obtención del Título de:

**Ingeniero Químico**

Presentado por:

Karla Melissa Lucas Pincay  
Sofía Edelmira Tenorio Fabara

**GUAYAQUIL - ECUADOR**

Año: 2022

## **DEDICATORIA**

El presente proyecto se lo dedico a mi mamá Esday, quien es mi ejemplo e inspiración, gracias a su apoyo y motivación constante estoy logrando conquistar mis metas. A mi papá, J. Carlos, por siempre impulsarme a ser mejor y darme ánimos diciéndome lo orgulloso que se siente de sus hijos.

A mi hermano Alejandro quien me inspira a ser mejor cada día, por su paciencia y capacidad de sacarme una sonrisa en el momento indicado. A mis abuelitos que con sus palabras de amor me motivaban a no rendirme. A mi Padrino Rubén por su complicidad y comprensión.

Finalmente, este trabajo se lo dedico a mi perrito Docky que estuvo presente gran parte de mi vida universitaria acompañándome en las noches de desvelo y estudio; y a Max por siempre contar con su fiel compañía y ser un estudiante más en mis clases virtuales.

**KARLA MELISSA LUCAS PINCAY**

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a Dios por haberme acompañado y guiado a lo largo de mi carrera, por ser mi fortaleza en momentos de debilidad y por haberme brindado grandes aprendizajes y experiencias en este camino, a mi familia por su amor y cariño infinito. A mi amiga y compañera de tesis Sofía por su paciencia y apoyo incondicional.

Finalmente, un agradecimiento especial a los PhD. Wilfredo Angulo, Yris Gonzáles, Danny De Cecchi, Daniela Galatro e Ing. Alexander Espinoza por su aliento, esfuerzo y guía brindada semana a semana, con su ayuda y observaciones permitieron el desarrollo de este proyecto.

**KARLA MELISSA LUCAS PINCAY**

## **DEDICATORIA**

El presente proyecto lo dedico a toda mi familia, especialmente a mis padres por su constante amor, esfuerzo, enseñanzas, palabras de aliento que siempre me acompañan y me llenan de fortaleza e inspiración.

A mis hermanos Karla y Carlos por su cariño incondicional que me demuestran día tras día reflejados en acciones, palabras, alegrías y tristezas.

**SOFÍA      EDELMIRA      TENORIO  
FABARA**

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a Dios por bendecirme, acompañarme y permitirme culminar esta etapa de mi vida. A mi familia por su amor y apoyo incondicional. A mi consejera Irina León por brindarme su ayuda en el momento indicado.

A mi amiga Karla Lucas por su paciencia y dedicación para alcanzar nuestras metas de formación profesional.

Finalmente, a mi tutor PhD. Wilfredo Ángulo quien me ha permitido formar parte de un equipo de grandes profesionales, como los PhD. Yris González, Daniela Galatro, Danny De Cecchis e Ing. Alexander Espinoza, quiénes, con sus conocimientos, consejos han hecho que sea una etapa muy enriquecedora. También, a la Mgtr. Nadia Flores por sus oportunas correcciones durante este proyecto.

**SOFÍA      EDELMIRA      TENORIO  
FABARA**

## DECLARACIÓN EXPRESA

"Los derechos de titularidad y explotación, nos corresponde conforme al reglamento de propiedad intelectual de la institución; *Karla Melissa Lucas Pincay* y *Sofía Edelmira Tenorio Fabara*, damos nuestro consentimiento para que la ESPOI 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"



Karla Melissa Lucas  
Pincay



Sofía Edelmira Tenorio  
Fabara

## **EVALUADORES**

**Mgtr. Nadia Flores Manrique**

PROFESOR DE LA MATERIA

**PhD. Wilfredo Angulo Sánchez**

PROFESOR TUTOR

**PhD. Yris González Triana**

PROFESOR TUTOR

## RESUMEN

Los productos nutracéuticos son considerados parte de la nueva tendencia en la industria alimenticia alrededor del mundo. En los centros de investigación del Ecuador, se ha trabajado en el proceso de la elaboración de la bebida nutraceútica, el cual desde sus inicios hasta la actualidad ha presentado distintas dificultades en la simulación, debido a que existen operaciones unitarias que no pueden ser representadas apropiadamente como la extracción sólido -líquido.

El presente proyecto se enfoca en un modelo mecanicista que considera la variable “tiempo”, para la representación realista del sistema de extracción sólido-líquido en el simulador comercial. Se realizó la simulación, en Python y Aspen Custom Modeler, empleando la solución analítica del balance dinámico de la segunda ley de Fick. En base a los perfiles de concentración en función del tiempo obtenido, se determinó el tiempo de equilibrio de extracción, dando aproximadamente 2 horas y 13 minutos con una concentración de  $251.90 \text{ [g} \cdot \text{L}^{-1}\text{]}$ . Asimismo, se realizó un análisis de sensibilidad donde se evaluó la influencia del diámetro de la partícula en la respuesta del modelo, favoreciendo a la velocidad de difusión a un menor diámetro. En conclusión, el modelo mecanicista seleccionado puede ser aplicado a la extracción de otros compuestos bioactivos con pequeñas modificaciones del modelo en cuanto a parámetros.

**Palabras claves:** productos nutraceúuticos, extracción, modelo matemático, simuladores



## **ABSTRACT**

*Nutraceutical products are considered part of the new trend in the food industry around the world. In the research centers of Ecuador, work has been carried out on the process of making the nutraceutical beverage, which from its beginnings to the present has presented different difficulties in the simulation, due to the fact that there are unitary operations that cannot be represented appropriately such as solid-liquid extraction.*

*This project focuses on a mechanistic model that considers the variable "time", for the realistic representation of the solid-liquid extraction system in the commercial simulator. The simulation was carried out, in Python and Aspen Custom Modeler, using the analytical solution of the dynamic balance of Fick's second law. Based on the concentration profiles as a function of time obtained, the extraction equilibrium time was determined, giving approximately 2 hours and 13 minutes with a concentration of 251.90 [g\*L<sup>-1</sup>]. Likewise, a sensitivity analysis was carried out where the influence of the particle diameter on the model response was evaluated, favoring the diffusion rate at a smaller diameter. In conclusion, the selected mechanistic model can be applied to the extraction of other bioactive compounds with minor modifications of the model in terms of parameters.*

**Keywords:** *nutraceutical products, extraction, mathematical model, simulators*

# ÍNDICE GENERAL

|  |     |
|--|-----|
| RESUMEN.....                             | I   |
| <i>ABSTRACT</i> .....                    | II  |
| ÍNDICE GENERAL.....                      | III |
| ABREVIATURAS .....                       | VI  |
| SIMBOLOGÍA .....                         | VII |
| ÍNDICE DE FIGURAS.....                   | IX  |
| ÍNDICE DE TABLAS .....                   | XI  |
| CAPÍTULO 1 .....                         | 1   |
| 1.    Introducción .....                 | 1   |
| 1.1    Descripción del problema .....    | 2   |
| 1.2    Justificación del problema.....   | 4   |
| 1.3    Objetivos.....                    | 5   |
| 1.3.1    Objetivo General .....          | 5   |
| 1.3.2    Objetivos Específicos .....     | 5   |
| 1.4    Marco teórico .....               | 5   |
| 1.4.1    Productos Nutraceuticos .....   | 5   |
| 1.4.2    Bebida Nutraceutica .....       | 7   |
| 1.4.3    Extracción Sólido-Líquido.....  | 8   |
| 1.4.4    Difusión Sólidos.....           | 10  |
| 1.4.5    Modelo matemático .....         | 11  |
| 1.4.6    Simuladores Comerciales .....   | 16  |
| 1.4.7    Aplicación en la industria..... | 18  |
| CAPÍTULO 2 .....                         | 19  |
| 2.    Metodología .....                  | 19  |

|                   |  |    |
|-------------------|--|----|
| 2.1               | Definición del caso de estudio .....   | 20 |
| 2.2               | Selección del Modelo Matemático (Mecanicista) .....  | 21 |
| 2.3               | Implementación del Modelo Matemático seleccionado (Mecanicista) .....                                      | 22 |
| 2.3.1             | Implementación del Modelo Matemático en Python .....   | 23 |
| 2.3.2             | Implementación del Modelo Matemático en ACM .....  | 23 |
| 2.4               | Validación del Modelo Matemático seleccionado (Mecanicista) .....  | 24 |
| 2.5               | Adecuación del modelo al caso del proceso de extracción en la elaboración de una bebida nutraceútica ..... | 24 |
| 2.5.1             | Lista de componentes en Aspen Custom Modeler .....   | 25 |
| 2.5.2             | Configuración del modelo e implementación del equipo .....   | 28 |
| 2.5.3             | Definición de PORTS .....  | 29 |
| 2.5.4             | Análisis de sensibilidad .....   | 30 |
| CAPÍTULO 3.....   |  | 31 |
| 3.                | Resultados Y ANÁLISIS.....   | 31 |
| 3.1               | Descripción del modelo matemático seleccionado para el digestor.....                                       | 31 |
| 3.2               | Resultado y análisis de la implementación del modelo.....  | 33 |
| 3.2.1             | En lenguaje de programación de PYTHON.....   | 33 |
| 3.2.2             | En Software ACM.....   | 34 |
| 3.2.3             | En Caso Base .....   | 35 |
| 3.3               | Resultado y análisis del Modelo con propiedades de la bebida nutraceútica.....                             | 38 |
| 3.4               | Resultados de análisis de sensibilidad .....   | 43 |
| CAPÍTULO 4.....   |  | 46 |
| 4.                | Conclusiones Y Recomendaciones.....  | 46 |
| 4.1               | Conclusiones .....   | 46 |
| 4.2               | Recomendaciones .....  | 48 |
| BIBLIOGRAFÍA..... |  | 49 |

APÉNDICE..... 53

## **ABREVIATURAS**

ESPOL Escuela Superior Politécnica del Litoral

CIBE Centro de Investigaciones Biotecnológicas del Ecuador

ACM Aspen Custom Modeler

AP Aspen Plus

## SIMBOLOGÍA

|                 |  |
|-----------------|--|
| m               | Metro  |
| s               | Segundo  |
| kg              | Kilogramo  |
| g               | Gramo  |
| Kgmol           | Kilogramo mol  |
| L               | Litro  |
| cP              | Centipoise   |
| D <sub>p</sub>  | Diámetro de la partícula   |
| V               | Velocidad  |
| ρ               | Densidad de la mezcla de extracción  |
| μ               | Viscosidad de la mezcla de extracción  |
| PMy             | Peso molecular del solvente  |
| a               | Superficie específica para transferencia de masa de las partículas esféricas |
| Φ               | Factor de disociación  |
| C <sub>β0</sub> | Concentración inicial de sólidos   |
| C <sub>β</sub>  | Concentración de la fase sólida  |
| C <sub>γ</sub>  | Concentración de la fase líquida   |
| ε               | Fracción volumétrica de solvente   |
| L               | Longitud característica por transferencia de masa difusiva                   |
| V <sub>m</sub>  | Volumen molar de soluto  |
| K <sub>β</sub>  | Coeficiente de transferencia de masa de fase sólida                          |
| K <sub>γ</sub>  | Coeficiente de transferencia de masa de fase líquida                         |
| K               | Constante de distribución/ Coeficiente de reparto                            |
| D <sub>γ</sub>  | Difusividad de la fase líquida   |
| D <sub>β</sub>  | Difusividad de la fase sólida  |
| Re              | Número de Reynolds   |
| Jd              | Factor de Chilton-Colburn  |
| Sc              | Número de Schmidt  |

|   |             |
|---|-------------|
| T | Temperatura |
| P | Presión     |
| t | Tiempo      |

## ÍNDICE DE FIGURAS

|   |    |
|---|----|
| Figura 2.1 Diagrama de flujo de la metodología propuesta .....                              | 19 |
| Figura 2.2 Explorador de simulación.....  | 26 |
| Figura 2.3 Contenido de la lista de componentes .....                                       | 26 |
| Figura 2.4 Configuración de las propiedades físicas de los componentes .....                | 27 |
| Figura 2.5 Explorador de archivos .....   | 27 |
| Figura 2.6 Lista de componentes.....  | 28 |
| Figura 3.1 Concentración en fase líquida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en Python ..... | 34 |
| Figura 3.2 Concentración en fase sólida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en Python .....  | 34 |
| Figura 3.3 Concentración en fase líquida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en ACM .....    | 35 |
| Figura 3.4 Concentración en fase sólida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en ACM .....     | 35 |
| Figura 3.5 Concentración en fase líquida de malvidin-3- glucósido vs tiempo.....            | 36 |
| Figura 3.6 Concentración en fase sólida de malvidin-3- glucósido vs tiempo.....             | 36 |
| Figura 3.7 Concentración del sólido vs tiempo (Bebida nutraceútica) en Python .....         | 41 |
| Figura 3.8 Concentración del solvente vs tiempo (Bebida nutraceútica) en Python ..          | 41 |
| Figura 3.9 Concentración del soluto vs tiempo en ACM (Bebida nutraceútica) .....            | 42 |
| Figura 3.10 Concentración del solvente vs tiempo en ACM (Bebida nutraceútica)....           | 42 |
| Figura 3.11 Concentración del solvente vs tiempo con diámetro de partícula mayor            | 43 |
| Figura 3.12 Concentración del soluto vs tiempo con diámetro de partícula mayor....          | 44 |
| Figura 3.13 Concentración del solvente vs tiempo con diámetro de partícula menor            | 45 |
| Figura 3.14 Concentración del soluto vs tiempo con diámetro de partícula menor....          | 45 |
| <br>  |    |
| Figura A1 Algoritmo de resolución del caso base en Python (spyder).....                     | 55 |
| Figura A2 Algoritmo de resolución implementando datos de la bebida en Python (spyder).....  | 57 |
| Figura A3 Algoritmo de resolución del caso base en ACM .....                                | 58 |
| Figura A4 Algoritmo de resolución implementando datos de la bebida en ACM .....             | 61 |



|  |    |
|--|----|
| Figura A5 Datos de la gráfica de C vs t en la fase líquida del caso base en Python .             | 61 |
| Figura A6 Tablas de datos de la gráfica de C vs t en la fase líquida del caso base en ACM.....   | 62 |
| Figura A7 Tablas de datos de la gráfica de C vs t en la fase sólida del caso base en Python..... | 62 |
| Figura A 8 Tablas de datos de la gráfica de C vs t en la fase sólida del caso base en ACM.....   | 63 |

## ÍNDICE DE TABLAS

|   |    |
|---|----|
| Tabla 2.1 Parámetros precisados en literatura (Caso Base) .....   | 22 |
| Tabla 2.2 Parámetros especificados en literatura en el caso de la Bebida Nutraceutica .....   | 24 |
| Tabla 2.3 Parámetros para el modelamiento del digestor (tomado de Aspen) .....  | 25 |
| Tabla 2.4 Valores de diámetro y superficie específica de transferencia de masa.....   | 30 |
| Tabla 3.1 Resultados de los parámetros en el caso de la Bebida Nutraceutica .....   | 39 |
| <br>  |    |
| Tabla A1 Tablas de los parámetros de la solución analítica implementando datos de la bebida .....   | 64 |
| Tabla A2 Datos faltantes considerando el estudio “Mathematical modeling of caffeine kinetic during solid–liquid extraction of coffee beans” [Vargas.,2007]..... | 65 |

# CAPÍTULO 1

## 1. INTRODUCCIÓN

A principios de la década de 1980 comenzó la revolución nutraceútica, su apogeo llevó a una nueva era de la medicina y la salud, en la que la industria alimentaria fue desarrollándose como una industria orientada a la investigación análogo a la industria farmacéutica. Por tanto, existen estudios que demuestran los beneficios potenciales en una gama de especies vegetales, por lo que el desarrollo de productos procesados provenientes de ingredientes naturales ha tomado fuerza en los últimos años. (DeFelice, 1995)

En la actualidad, las empresas alimentarias buscan ampliar y fortalecer sus conocimientos técnicos, para la integración de los nutraceúticos en los productos procesados. No obstante, la implementación de procesos a escala industrial requiere de distintos factores a considerar. El uso de simuladores comerciales, hoy en día, es una de las técnicas aplicadas con mayor impacto para observar cómo se ven afectados las condiciones de procesamiento en las diversas etapas del proceso. (Chen et al., 2019)

Por consiguiente, los simuladores comerciales son importantes, ya que sirven como proyección del proceso previo al escalamiento de planta piloto, por lo que es necesario que los equipos modelen con la mayor aproximación posible los fenómenos que involucran las etapas de este.

En el proceso de elaboración de productos nutraceúticos, no siempre se cuenta con equipos que especifiquen las características necesarias para una descripción adecuada, por lo que el uso de modelos mecanicistas que implementen los fenómenos de calor, masa y momentum; son indispensables para la aplicación de nuevos equipos en simuladores comerciales. (Rengel & Osmond, 1993)

En Ecuador, a pesar de contar con gran variedad de plantas endémicas con propiedades nutraceúticas, la comercialización de estos productos con elaboración nacional es escaso, por ende, la simulación de los procesos también es limitada, por lo que el presente proyecto se enfocará en proponer un modelo mecanicista que

permita modelar un digestor que forma parte del proceso de elaboración de una bebida nutraceútica.

## **1.1 Descripción del problema**

En la actualidad, el uso de simuladores tiene un gran impacto en diferentes sectores industriales, pues esta herramienta permite realizar un estudio de los fenómenos y variables que intervienen en el proceso. Esto evita los altos costos que ocasiona la experimentación a escala piloto e industrial brindando ventajas al momento de esquematizar o diseñar un sistema. Otra de las ventajas es la optimización del modelo que permite evaluar distintos escenarios para mejorar la calidad y viabilidad de la producción de la planta. (Mourtzis et al., 2014)

No obstante, los simuladores comerciales disponibles poseen ciertas limitaciones que impiden el modelamiento válido de ciertos procesos u operaciones, por lo que no siempre se puede asegurar que los resultados obtenidos correspondan al sistema de estudio. Uno de los ejemplos donde se evidencia este tipo de desventajas es el proceso de elaboración de la bebida nutraceútica, que desde sus inicios hasta la actualidad ha presentado distintas dificultades en la simulación. Estas limitaciones incrementan la posibilidad de errores en el diseño y pérdidas económicas futuras, impidiendo paso a la escala piloto. (Gabela & Villa, 2021)

Por otro lado, estudios anteriores del caso de estudio evidencia que existen operaciones unitarias en la elaboración de la bebida nutraceútica que no pueden ser representadas apropiadamente como la extracción sólido -líquido, ya que el equipo no cuenta con todos los requerimientos especificados y evaluados experimentalmente a escala de laboratorio, lo cual es importante considerar para un acercamiento más real de los resultados. En los respectivos estudios, se consideró el digestor como la operación SWash equipo que a partir de una corriente de sólidos recupera componentes disueltos mediante un líquido de lavado sin considerar la disolución de los componentes de interés ni el tiempo de residencia de las especies vegetales junto con el agua, por tanto, requiere un mayor estudio, el cual considere las dificultades ignoradas de la simulación. (Abad & Palacios, 2021)

Cabe destacar, que en el proceso de elaboración de la bebida nutraceútica se tiene diferentes equipos que involucran su fabricación, el digestor es un equipo que está involucrado directamente en el proceso y su función es la operación de extracción sólido-líquido donde se requiere un dato de la operación que no puede ser representado por los equipos que se encuentran en la base de datos del simulador comercial. Se requiere que el digestor pueda presentar entre sus variables el tiempo de retención en el proceso, por lo cual se busca el robustecimiento de la simulación, donde se propone un modelo matemático que permita plantear la unidad con los requerimientos necesarios para ingresar el equipo como una unidad añadida al simulador.

El planteamiento de un modelo mecanicista para la simulación del proceso de elaboración de una bebida con propiedades nutraceúticas, empleando un simulador comercial comprende una gran responsabilidad, lo cual es importante considerar que, para lograr los resultados esperados, se deben realizar ciertas consideraciones y asunciones que permitan el desarrollo del estudio de la cinética de extracción sólido- líquido. Además, los recursos tecnológicos, como, por ejemplo, los análisis para validación de resultados. Estos tienen fuertes repercusiones en la elaboración de un modelo, el robustecimiento de la simulación y su posterior escalamiento.

Otra de las restricciones es el factor económico que es un pilar fundamental para el éxito del proceso y su posterior escalamiento; los equipos, condiciones de operación, materia prima, entre otros, son factores que se necesitan analizar con rigurosidad, pues estos deben estar planteados de forma adecuada para evitar pérdidas significativas que debiliten la calidad y productividad de la bebida nutraceútica. El escalamiento piloto es un proceso que conlleva una alta inversión económica, por esta razón plantear un sistema que simule el proceso con las propiedades y características que debe poseer la elaboración de la bebida nutraceútica, es de gran relevancia.

## 1.2 Justificación del problema

Los productos nutracéuticos son considerados parte de la nueva tendencia en la industria alimenticia alrededor del mundo, caracterizándose por su procedencia de origen natural. Estos presentan diversas propiedades debido al alto nivel de nutrientes y en especial, brindan grandes ventajas a la salud.

Uno de los procesos de interés que se ha trabajado en los centros de investigación del Ecuador es la producción de una bebida con propiedades nutraceútics, cuyo estudio se ha basado en pruebas de laboratorio y actualmente se desea escalar a nivel planta piloto este proceso. (Perez Leonard, 2006)

En el escalamiento, se requiere herramientas de simulación para llevar a cabo el proceso de elaboración de un producto con propiedades nutraceútics. El uso de un simulador comercial es fundamental, debido a las ventajas del software, ya que permite el diseño del equipo. En sí, el paso del laboratorio a la industria es posible a través de un software de simulación, debido a que se puede simular diferentes escenarios del proceso sin la necesidad de realizar una gran cantidad de experimentos e inversión referente a la experimentación, a su vez es posible la obtención de la factibilidad técnica y económica del proyecto disminuyendo el riesgo de error en el sistema real. (Rakicka-Pustułka et al., 2020)

Sin embargo, los resultados de la simulación pueden ser erróneos, debido a las simplificaciones en exceso para la representación del equipo utilizado en la elaboración de la bebida con propiedades nutraceútics. Por esta razón, existe la necesidad de modelos matemáticos rigurosos, detallados y precisos a los mecanismos involucrados en el sistema, considerando el principio de conservación de las propiedades extensivas y las relaciones constitutivas que permitan la evaluación del proceso en puntos críticos de operación.

Por tanto, el planteamiento de un modelo mecanicista ayuda a la obtención de mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial, es decir, los datos de proceso requeridos del diseño del digestor permiten el paso a la

industria, ya que incluye la variación de los parámetros en función del tiempo de extracción, lográndose una representación más real para la elaboración de estos productos. Además, el modelo como una unidad añadida del equipo representa la mejora del proceso de extracción, dado que, se obtienen los resultados esperados por el cliente, debido a la adaptación de los equipos establecidos por los simuladores comerciales; evidenciándose una innovación que beneficie al proceso con la optimización de los recursos económicos y materiales.

### **1.3 Objetivos**

#### **1.3.1 Objetivo General**

Desarrollar un digestor mediante un modelo mecanicista para la representación de la extracción sólido- líquido en la simulación del proceso de elaboración de una bebida nutraceútica.

#### **1.3.2 Objetivos Específicos**

1. Establecer el modelo mecanicista mediante un balance dinámico de materia sobre el proceso de extracción sólido-líquido para la determinación del tiempo de extracción.
2. Codificar el modelo matemático a través de un software de programación para la validación y posterior aplicación en el proceso de extracción de compuestos bioactivos.
3. Simular el proceso de extracción sólido-liquido en la elaboración de una bebida con propiedades nutraceúticas para la identificación del tiempo de retención.

### **1.4 Marco teórico**

#### **1.4.1 Productos Nutraceúticos**

En el año 1989, el Dr. Stephen L. Defelice fue el pionero en introducir el término “nutraceútico”, que proviene de las palabras “nutrición” y “farmacéutico”. Se define como nutraceútico a un producto aislado o purificado de alimentos que

aporta beneficios médicos y para la salud, así como también logra prevenir y/o tratar enfermedades.(Kumar et al., 2013)

Los productos nutracéuticos están en una atención creciente y significativa, debido a su gran aporte de beneficios nutricionales y terapéuticos. Aunque, el uso de los recursos vegetales para cuidar nuestra salud se remonta a los orígenes de nuestra especie. El continuo descubrimiento y desarrollo de los productos nutracéuticos implica que los productos de miles de especies se transforman en factores que favorecen la salud y bienestar humanos. (Jarrín, 2020)

Existe un interés en la mayoría de los países por elaborar y consumir alimentos nutritivos dado los impactos positivos de estos alimentos en la salud. La preferencia del consumidor por los aditivos alimentarios naturales incentivó a la industria alimentaria a buscar alternativas naturales.

En la actualidad, los productos nutracéuticos representan una oportunidad para que las industrias de alimentos y farmacéuticas diversifiquen su producción, y que sus productos estén orientados a las necesidades del consumidor para que los productores de alimentos innoven marcas con una imagen asociada a la salud y bienestar. Han contribuido a concebir a la alimentación no solo como la vía esencial de nutrición, sino también como un instrumento eficaz para un estilo de vida óptimo y saludable.

Ecuador es un país donde se consumen y comercializan gran variedad de productos de origen vegetal y animal que poseen propiedades nutraceuticas, estas costumbres han sido heredadas desde sus antepasados. Sin embargo, pese a que su riqueza tiene como principal fuente este tipo de productos primarios, la falta de procesos tecnológicos junto al bajo nivel de información de estos productos en la sociedad genera que la comercialización de los productos sea limitada, siendo imprescindible fortalecer este sector productivo en el país. (Jarrín, 2020)



#### **1.4.2 Bebida Nutraceutica**

Las sustancias bioactivas son reconocidas por sus efectos positivos en la salud, prevención de enfermedades y la reducción de los costos de la atención médica. Debido a sus propiedades funcionales únicas, estos compuestos son ampliamente utilizados en industrias alimenticias, preparaciones farmacéuticas y productos cosméticos. (Jarrín, 2020)

En el Ecuador, existe una mayor biodiversidad por unidad de área, evidenciándose 40 000 especies de plantas que representan un componente valioso para lograr la seguridad nutricional con el medio ambiente como la especie *Vernonanthura patens*, *Ilex Guayusa*, residuos de cacao, entre otras. *Vernonanthura patens* crece específicamente cantón Marcabelí, provincia del Oro donde las decocciones de sus hojas son empleadas como medicina para combatir el paludismo, los dolores estomacales y de parto; las erupciones en la piel, las diarreas; en otras localidades se emplea para aliviar el dolor de cabeza; como antiinflamatorio, antitusivo y para tratar ciertos tipos de cáncer. (Manzano Santana et al., 2013)

La *Ilex Guayusa* es otra de las especies vegetales principales que forma parte del estudio del Centro de Investigaciones biotecnológicas del Ecuador (CIBE), la cual brinda propiedades estimulantes, reduce el estrés y la fatiga física. Asimismo, los residuos de cacao contienen macronutrientes y micronutrientes contribuyendo a ser una fuente de energía y mantenimiento del sistema inmune. (Abad & Palacios, 2021)

La bebida nutraceutica constituida principalmente por los compuestos previamente mencionados ofrece una variedad de beneficios a la salud, tales como, disminuir los niveles de estrés, previene el envejecimiento celular, mejora el sistema inmunológico y estimula el sistema nervioso central, debido a su elevada actividad antioxidante. (Abad & Palacios, 2021)

La elaboración de la bebida con propiedades nutraceuticas fue objeto de estudio en proyectos integradores previos (Abad & Gabela), donde se realizó la simulación del proceso y la caracterización de sus compuestos respectivamente. Las operaciones unitarias usadas en la fabricación de la bebida nutraceutica se encuentran: secado, molienda, tamizado, extracción y secado spray, la simulación de estas operaciones permite obtener una predicción de su comportamiento a escala industrial. (Gabela & Villa, 2021)

### **1.4.3 Extracción Sólido-Líquido**

La extracción sólido-líquido es una operación unitaria de transferencia de masa conocida como lixiviación; que consiste en la disolución de uno o más componente de una mezcla sólida utilizando un disolvente líquido selectivo. (Treybal, 2008)

Aquella operación aparece en muchos procesos industriales, siendo de mucho interés para la industria alimentaria. Los materiales vegetales contienen generalmente solo una pequeña cantidad de soluto activo, pero la mayor parte del tiempo con un alto valor añadido que justifica el desarrollo de procesos de separación de alto rendimiento. A nivel industrial, se aplican extractores frecuentemente para producir azúcar, aceite vegetal derivados de la soja y el girasol, etc.

La materia prima es un medio poroso que contiene la especie a extraer y entra en un borde del extractor. En el otro entra el solvente que interactúa con el crudo material que absorbe la especie. (Thomas et al., 2007)

La estructura del sólido y su interacción con la sustancia en difusión influyen en la forma en que ocurre la difusión y en la rapidez de transporte. Normalmente, el sólido está totalmente rodeado por un cuerpo insoluble, por tanto, la preparación del sólido como trituración y molienda acelera la acción de lixiviación, ya que las porciones solubles son más accesibles al disolvente.

Mientras los productos farmacéuticos obtenidos a partir de raíces, tallos y hojas vegetales; el material vegetal se seca como preparación del sólido, debido a que favorece la separación de las paredes celulares, mediante la acción directa del disolvente, puesto que el producto de interés natural que se va a lixiviar se encuentra generalmente dentro de las células.

Existen factores que afectan a la velocidad de extracción como:

- **Tamaño de las partículas:** si el tamaño del sólido es pequeño, la cantidad de masa transferida es más alta, debido a que el área interfacial sólido-líquido es más grande y la distancia de difusión del soluto en el interior del sólido es más pequeña. Aunque, dicha cantidad de masa transferida depende de la cantidad de masa utilizada en relación con el volumen de solvente.
- **Tipo de Solvente:** el líquido debe ser selectivo con baja viscosidad y económico.
- **Temperatura:** guarda una relación directamente proporcional a la solubilidad, es decir que, a mayor temperatura, mayor solubilidad del soluto en el disolvente, lo cual implica que la viscosidad del líquido sea menor, mayor las difusividades y, en efecto, concentraciones finales mayores en el licor de lixiviación; resultando el incremento de la velocidad de extracción. Sin embargo, elevadas temperaturas pueden producir la extracción de cantidades excesivas de solutos no deseados o deterioro químico del sólido.
- **Agitación del fluido:** La agitación del solvente incrementa la difusión de la masa en el líquido, aumentando la transferencia de masa, evitando sedimentaciones.

Hasta alcanzar el equilibrio entre el sólido y el líquido ocurre un cambio de fase del soluto por el contacto inmediato del sólido-solvente, posterior la difusión del soluto en el solvente dentro de los poros del sólido por difusión cinética o

molecular sin convección, dando paso del soluto de la superficie del sólido a la masa de la solución, dada por la difusión y convección de la masa líquida. Finalmente, se obtiene el equilibrio cuando todo el soluto o la cantidad que de él se precisa para saturar la solución han pasado a disolución.

#### 1.4.4 Difusión Sólidos

Parte de la difusión sucede en la fase sólida, y puede ser descrita, mediante la ley de Fick.

$$N_A = -D_{AB} \frac{dC_A}{dz}$$

Donde:

- $N_A$  es el flujo molar en la dirección de  $z$ , su unidad dimensional es moles de A por unidad de tiempo por unidad de sección transversal de sólido
- $D_{AB}$  es el coeficiente de difusión del componente A (soluto) que se difunde a través del componente B (solvente).
- $dC_A/dz$  es el gradiente de la concentración en la dirección de la difusión  $Z$ .

(Treybal, 2008)

##### 1.4.4.1 Difusión en estado no estacionario

En los equipos, los sólidos no se transportan tan fácilmente como los fluidos, en efecto, las condiciones de difusión en estado no estacionario se presentan con mayor frecuencia.

En el caso en que no existe convección, la velocidad es igual a cero y no hay reacción química, puede utilizarse la segunda Ley de Fick, para resolver problemas de difusión en estado no estacionario mediante integración (métodos numéricos) con las condiciones a la frontera apropiadas.

$$\frac{\partial C_A}{\partial \theta} = D_{AB} \left( \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right)$$

Las operaciones de extracción sólido-líquido se llevan a cabo por lotes o semilotes (estado no estacionario) y también en condiciones continuas (estado estacionario).

Las operaciones en estado estacionario (continuo) puede clasificarse en operado por etapas o en contacto continuo. (Treybal, 2008)

#### **1.4.5 Modelo matemático**

Los modelos mecanicistas basado en la transferencia de masa conceptualizan la difusión de solutos en un medio que entra en contacto con una solución bien agitada de finito volumen donde la extracción sólido- líquido ocurre con la entrada del solvente a la matriz sólida (difusión desde el interior de la partícula hacia la superficie, que se estudia aplicando la segunda ley de Fick), lo que permite una separación de los componentes originales del sólido. Este proceso se llama lixiviación. (Castillo-Santos et al., 2017)

Un modelo replica una o más características de interés de un proceso mediante la relación entre los diferentes términos. (Alvarez et al., 2009)

Los términos están formados por las constantes, los parámetros y las variables.

- Las constantes son valores fijos.
- Los parámetros pueden ser funcionales (asociados directamente a la función de cálculo) o estructurales (asociados a la estructura del modelo).
- Las variables son características del proceso real, que puede o no ser conocida.

Los modelos pueden ser de tres tipos:

- Fenomenológicos o de Caja Blanca: explica el comportamiento del proceso mediante fundamentos teóricos.
- Empíricos o de Caja Negra, construidos mediante datos experimentales.

- Caja Gris, combinaciones de los dos tipos de modelos mencionados, donde se conoce como semifísicos (por la estructura fenomenológica) o semiempíricos (por la estructura empírica).

(Alvarez et al., 2009)

El modelado matemático es una herramienta poderosa para la optimización, simulación, diseño y control de equipos que permite la descripción teórica del proceso y la evaluación de los coeficientes de transferencia de masa.

En la literatura científica, los procesos de extracción sólido líquido de sustancias biológicamente activas de diversos materiales vegetales, se describen y simulan mediante varios modelos matemáticos derivados de la segunda ley de difusión de Fick. (Simeonov et al., 2017)

Es bien conocido que la extracción sólido-líquido es una operación heterogénea y multicomponente que implica una transferencia de masa inestable de sólido a líquido donde los solutos se pueden extraer a diferentes velocidades según su ubicación (superficie externa, poros, etc.) y en su solubilidad. (Bucić-Kojić et al., 2013)

El modelado matemático es de gran importancia en la ingeniería moderna de procesos y alimentos, ya que proporciona una determinación rápida y económica de los efectos de diferentes parámetros del sistema sobre el resultado del proceso; minimizando el número de experimentos necesarios. (Bucić-Kojić et al., 2013)

El descafeinado del café es un proceso de extracción sólido-líquido, en el que la cafeína es transferida de la matriz sólida de los granos de café a la masa solvente. (Jokić et al., 2010).

Así mismo, otro ejemplo donde se evidencia la transferencia de masa es la extracción de uva fresca en condiciones similares a las del vino. Este es un estudio bastante amplio y analiza la extracción de antocianinas de sólidos de uva durante la maceración fermentativa para condiciones de convección natural y forzada;

mencionando qué sucede durante la extracción sólido-líquido. (Setford et al., 2019)

Las ecuaciones del modelo para aquel proceso de extracción. Se puede resumir de la siguiente manera:

*Transferencia de masa macroscópica en la fase de sólido:*

$$(1 - \varepsilon) \frac{dC_{\beta(t)}}{dt} = K_{\beta} a (C_{\beta i} - C_{\beta}) \quad (1.1)$$

*Transferencia de masa macroscópica en la fase de disolvente:*

$$\varepsilon \frac{dC_{\gamma(t)}}{dt} = K_{\gamma} a (C_{\gamma i} - C_{\gamma}) \quad (1.2)$$

*Fracción volumétrica de solvente:*

$$\varepsilon = \frac{V_{\gamma}}{V_{\gamma} + V_{\beta}} \quad (1.3)$$

*Superficie específica para la transferencia de masa de las partículas esféricas:*

$$a = \frac{6}{D_p} \quad (1.4)$$

*Constante de transferencia de masa de la fase sólida*

$$K_{\beta} = \frac{\pi^2 D_{\beta}}{4L} \quad (1.5)$$

*Relación de equilibrio:*

$$C_{\gamma i} = K C_{\beta i} \quad (1.6)$$

(Setford et al., 2019)

Además, se determina que el coeficiente de difusión interna ( $D_{s\beta}$ ) con una correlación desarrollada por Setford, Jeffery, Grbin y Muhlack (Setford et al., 2018); para la transferencia de masa interna en una dimensión. (Setford et al., 2018)

$$D_{s\beta} = \frac{4K_{\beta}L}{(1 - \varepsilon)\pi^2} \quad (1.7)$$

Mediante correlaciones de valores adimensionales; se define el cálculo de la transferencia de masa externa.

$$J_D = \frac{0.25Re^{-0.31}}{\varepsilon} \quad (1.8)$$

Mientras, la constante de transferencia de masa en el ( $K_\gamma$ ), se encuentra utilizando las siguientes correlaciones:

$$K_\gamma = \frac{J_D v}{Sc^{2/3}} \quad (1.9)$$

$$Re = \frac{D_p \rho_\gamma v}{\mu_\gamma} \quad (1.10)$$

$$Sc = \frac{\mu_\gamma}{D_{S\gamma} \rho_\gamma} \quad (1.11)$$

$$D_p = \frac{6(1 - \varepsilon)}{a} \quad (1.12)$$

El coeficiente de difusión de la fase líquida se determina a través de la correlación de Wilke-Chang, lo que permite calcular los números adimensionales de Sherwood (Sh) y Schmidt (Sc).

$$D_{S\gamma} = \frac{1.173 * 10^{-16} (\varphi M_\gamma)^{1/2} T}{n V_A^{0.6}} \quad (1.13)$$

(Vargas, 2007)

A partir del sistema de ecuaciones diferenciales se puede obtener una solución analítica al modelo macroscópico. Esta solución es planteada por Espinoza-Pérez, Vargas, Robles-Olvera, Rodríguez-Jimenes y García-Alvarado (Vargas, 2007), y el sistema de ecuaciones es:

Ecuaciones Algebraicas Simultáneas

$$\begin{cases} C_\beta = C_{\beta 0} (c_1 e^{r_1 t} + c_2 e^{r_2 t}) & (1.14) \\ C_\gamma = C_{\beta 0} (c_3 e^{r_1 t} + c_4 e^{r_2 t}) & (1.15) \end{cases}$$



Donde:

$$r_{1,2} = -\frac{b_1 + b_2}{2} \pm \frac{\sqrt{(b_1 + b_2)^2 - 4(b_1 b_2 - b_3 b_4)}}{2} \quad (1.16)$$

$$c_1 = \frac{r_1 + b_1}{r_1 - r_2} \quad (1.17)$$

$$c_2 = \frac{r_2 + b_1}{r_2 - r_1} \quad (1.18)$$

$$c_3 = \frac{b_3}{r_1 - r_2} \quad (1.19)$$

$$c_4 = \frac{b_3}{r_2 - r_1} \quad (1.20)$$

$$b_1 = \frac{k_{c\gamma} a (1 - \varphi_1)}{\epsilon} \quad (1.21)$$

$$b_2 = \frac{k_{c\beta} a \left(1 - \frac{\varphi_2}{K}\right)}{1 - \epsilon} \quad (1.22)$$

$$b_3 = \frac{k_{c\gamma} a \varphi_2}{\epsilon} \quad (1.23)$$

$$b_4 = \frac{k_{c\beta} a \frac{\varphi_1}{K}}{1 - \epsilon} \quad (1.24)$$

$$\varphi_1 = \frac{1}{1 + \frac{k_{c\beta}}{K k_{c\gamma}}} \quad (1.25)$$

$$\varphi_2 = \frac{\frac{k_{C\beta}}{k_{C\gamma}}}{1 + \frac{k_{C\beta}}{Kk_{C\gamma}}} \quad (1.26)$$

(Vargas, 2007)

#### 1.4.6 Simuladores Comerciales

La informática digital dio paso a desarrollos y avances en distintas áreas del conocimiento humano, y con ello la evolución de la ingeniería química, especialmente en la simulación de procesos. Por la década de 1950, surgió los primeros intentos de modelado matemático en el lenguaje FORTRAN (FORMula TRANslates), para luego, en 1970, aparecer el primer simulador de procesos FLOWTRAN, marcando un inicio en la optimización y rentabilidad de operaciones. (Chaves et al., 2015)

Hoy en día, la simulación de procesos juega un papel importante en los distintos problemas relacionados con la ingeniería. Existen gran variedad de paquetes de software comerciales disponibles, estos pueden ser gratuitos como DWSIM, HYDROFLO, o se pueden adquirir en el mercado como ASPEN Plus, ASPEN HYSYS, PROII, ProSim, entre otros. (Tangsrivong et al., 2020)

Por consiguiente, es factible indagar el comportamiento de las plantas pilotos, a través del uso de una simulación por computadora sin tener que acudir a realizar experimentos reduciendo significativamente el costo de estos. La inclusión de software de procesos tiene un gran impacto en los planes de estudio de la ingeniería química, siendo una herramienta poderosa en el diseño y operación de plantas químicas. (Borreguero et al., 2019)

Este tipo de softwares ofrecen grandes ventajas, ya que permiten realizar cálculos rápidos y complejos. Entre ellas tenemos:

- Predecir el comportamiento de un proceso
- Analizar al mismo tiempo diferentes casos, modificando los valores de las variables operativas principales.

- Optimizar las condiciones operativas de plantas existentes o nuevas.
- Seguimiento de una planta durante toda su vida útil, con la finalidad de prever ampliaciones o mejoras de procesos. (Chaves et al., 2015)

No obstante, para su aplicación muchas veces se requiere de suposiciones para llevarse a cabo, pues los simuladores tienen restricciones y, eventualmente, no pueden reemplazar de manera satisfactoria el fenómeno a representar. Por lo cual es importante conocer sus limitantes, el proceso al que se aplicará y como extraer la información de estos. (Borreguero et al., 2019)

Las simulaciones buscan la representación de la transformación física o química de un proceso mediante el uso de un modelo matemático que involucran ecuaciones de fenómenos de transporte de masa, calor y momentum, cálculo balances de masa y energía, equilibrios de fase, etc. Y con ello predecir el comportamiento de un proceso conocido, a partir de datos preliminares. (Chaves et al., 2015)

Los modelos matemáticos empleados en estos softwares contienen ecuaciones algebraicas, diferenciales, lineales y no lineales, las cuales representan las operaciones que realiza el equipo o proceso representado, las propiedades fisicoquímicas, las conexiones entre equipos y sus especificaciones. Su representación, se ilustra mediante un diagrama de flujo de procesos. Posteriormente, el análisis del proceso planteado se fundamenta en el modelo matemático, integrado por ecuaciones que asocian variables del proceso como composición, flujo, temperatura, presión, entre otros. (Chaves et al., 2015)

Aspen Plus es un simulador modular de procesos en estado estacionario. Este permite predecir el comportamiento de las operaciones unitarias que incluyen los procesos, mediante relaciones y conexiones que involucran balances de masa y energía, tasas de transformación química y equilibrios de fase y químicos. Este simulador cuenta con diferentes funciones, entre ellas se encuentran:

- Realización de gráficos y tablas
- Análisis de sensibilidad.

- Dimensionamiento de equipos
- Optimización de procesos
- Estimación de propiedades fisicoquímicas
- Análisis dinámico de procesos, entre otras. (Chaves et al., 2015)

A pesar de las múltiples ventajas con las que cuenta Aspen Plus, este software al igual que muchos tienen ciertas limitaciones, ya que, al existir una gran variedad de operaciones y necesidades en la industria, no siempre se tendrán la representación exacta del sistema. (Evans et al., 2014)

Por tanto, la creación de modelos únicos para simular procesos y operaciones con una mayor precisión es una de las propuestas de este trabajo investigativo. Aspen Custom Modeler permite realizar estos modelos y exportarlos de forma personalizada a Aspen Plus o Aspen HYSYS, permitiendo optimizar los equipos o en su defecto crearlos con alto nivel de confiabilidad. (Aspen, n.d.)

#### **1.4.7 Aplicación en la industria**

En diferentes sectores industriales, se evidencia la operación de extracción sólido-líquido donde las industrias metalúrgicas son las que más utilizan debido a que la mayoría de los minerales se encuentran en forma de mezclas, con grandes cantidades de componentes indeseables; por eso, se aplica con frecuencia. Por ejemplo, el procesamiento metalúrgico de algunos elementos aluminio, cobalto, manganeso, níquel y zinc.

Mientras, en la industria de alimentos, se realiza lixiviación de la remolacha para la separación del azúcar; también, los aceites vegetales se obtienen a partir de la extracción de semillas, como las de algodón, soya, entre otras con solventes orgánicos. A su vez, el té y el café se preparan doméstica e industrialmente por operaciones de extracción

# CAPÍTULO 2

## 2. METODOLOGÍA

La metodología inició con la revisión de la información disponible, la posterior selección del modelo, la validación y simulación con los datos de la bebida nutracéutica. En la Figura 2.1, se evidencian estas etapas dentro del diagrama de flujo.

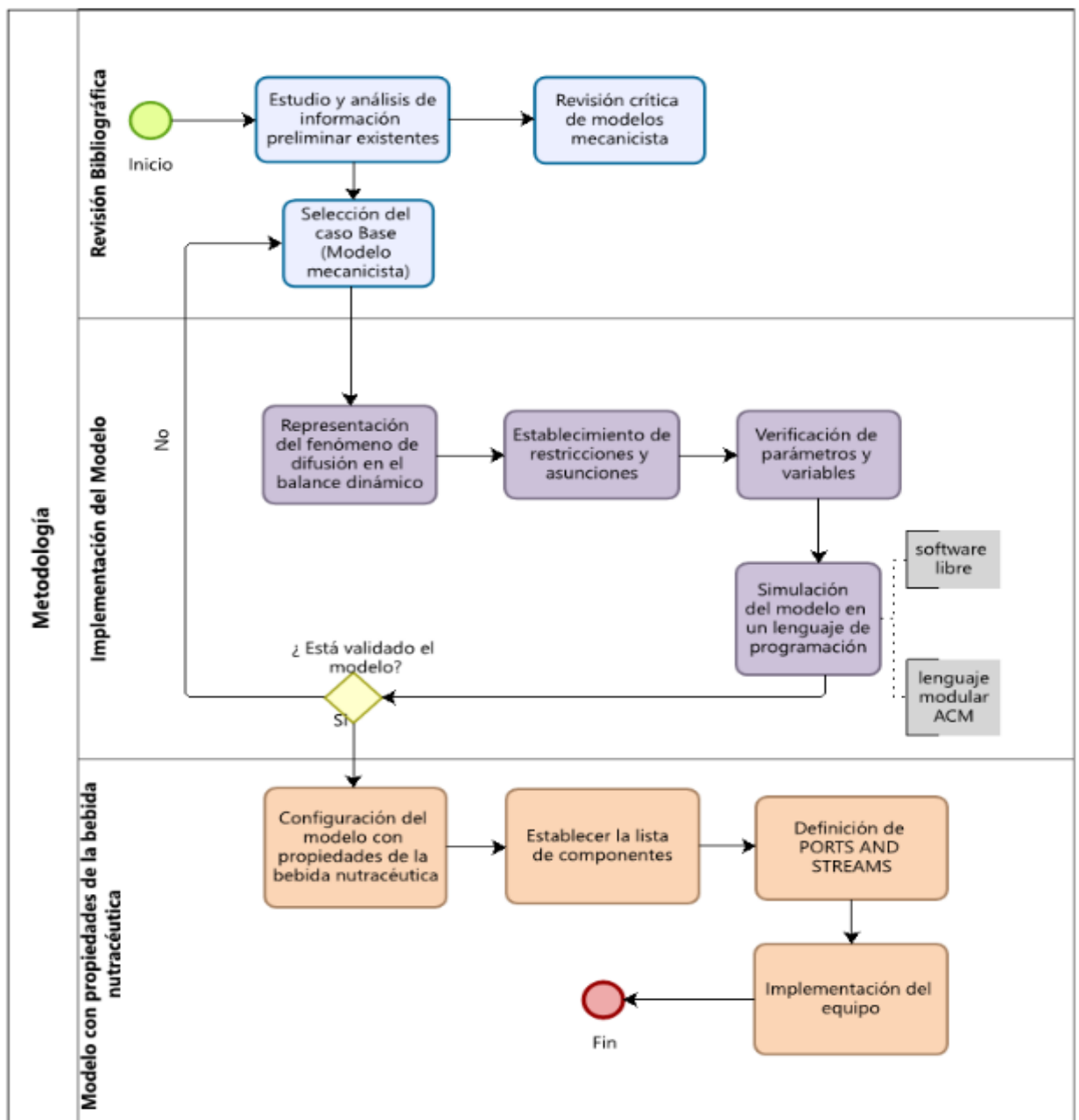


Figura 2.1 Diagrama de flujo de la metodología propuesta

## 2.1 Definición del caso de estudio

Inicialmente para llevar a cabo este proyecto se recopiló la información disponible acerca de la elaboración de la bebida nutracéutica. El caso de estudio se fundamenta en un proyecto integrador previo de Gabela & Villa, enfocado en la identificación y cuantificación de los compuestos que constituyen las materias primas de *Vernonanthura Patens*, *Ilex Guayusa* y residuo de cáscaras de cacao; específicamente ingresaron 11 componentes en el simulador e incorporaron sus estructuras moleculares y propiedades. El objetivo del proyecto fue complementar la base de datos del simulador comercial con los compuestos faltantes, paso previo al escalamiento a nivel piloto del proceso. (Gabela & Villa, 2021)

Luego, se indagó sobre la operación unitaria de interés (extracción sólido-líquido), se reconoció con ayuda de estudios previos las necesidades y limitantes presentadas en la etapa de extracción de la elaboración de la bebida nutracéutica. Se estableció que entre las variables más importantes a considerar en el proceso de extracción sólido líquido se encuentra el tiempo y la concentración de los compuestos.

Asimismo, se identificaron los fenómenos de transporte que rigen la operación unitaria, las variables y parámetros que se deben considerar. Se verificó que el equipo no se encuentra disponible en la base de datos del simulador comercial, y con la información recolectada, se plantearon las especificaciones requeridas, para que el equipo represente lo realizado a escala de laboratorio, robusteciendo la simulación.

Para la extracción sólido-líquido se revisaron varios modelos rigurosos y simplificados, cuya característica común es que su materia de estudio posee compuestos bioactivos. Entre los casos de estudio analizados, se encontraron la extracción de granos de café, vainilla pods y finalmente, el caso base de sólidos de uva.

En esta etapa, la investigación permitió definir los requerimientos que aborda la operación unitaria, y así dar un enfoque hacia la selección del modelo matemático

que incluya las variables más importantes, para que posteriormente puedan ser planteadas en un equipo como unidad añadida.

## **2.2 Selección del Modelo Matemático (Mecanicista)**

A partir de la etapa anterior, se seleccionó un modelo que mejor se ajuste a los parámetros requeridos del caso base. (Setford et al., 2019)

- a) Se confirmó que el modelo debe hacer referencia a la operación unitaria Extracción sólido-líquido.
- b) Se verificó que el modelo represente el fenómeno de difusión a través de un balance dinámico.
- c) Se analizó que las ecuaciones diferenciales del sistema descritas en la sección 1.4.5 del marco teórico, describen la difusión dentro de la fase sólida.
- d) Se revisó que las asunciones y restricciones del modelo permitan delimitar resultados razonables para su posterior aplicación. Entre las cuales se tuvieron en cuenta:
  - El fenómeno de la difusión del soluto puede ser estudiado mediante la segunda Ley de Fick simplificada.
  - Se considera que la geometría de las partículas del sólido es esférica y que estas mantienen su estructura durante todo el proceso de extracción.
  - La mezcla es homogénea (perfecta)
  - La concentración del soluto de estudio en el extracto es homogénea.

(Bonfigli et al., 2017)

- e) Se estudiaron los parámetros y variables que utiliza el modelo, considerando que incluyan el tiempo de retención entre las mismas.
- f) Se comprobó que los datos de las variables y parámetros del modelo se encuentren disponibles, para su utilización en la bebida

- g) Se revisó la solución analítica del modelo que describas en la sección 1.4.5 del marco teórico.
- h) Se definió que las características del modelo “Transferencia de Masa de Antocianinas en la extracción pre-fermentativa de sólidos de uva” descrito en la sección 1.4.5 del marco teórico, se ajustaban a los requerimientos del caso de estudio, permitiendo su aplicación.

### 2.3 Implementación del Modelo Matemático seleccionado (Mecanicista)

En el desarrollo de esta etapa se utilizó un lenguaje de programación (Python) y un software comercial (ACM), donde se procedió a codificar las ecuaciones del modelo e ingresar los valores de las variables/parámetros correspondientes, las cuales se detallan en la Tabla 2.1.

**Tabla 2.1 Parámetros precisados en literatura (Caso Base)**

[Setford et al.,2019]

| Parámetro  | Símbolo       | Valor                  | Unidad           |
|--|---------------|------------------------|------------------|
| Superficie específica para transferencia de masa de las partículas esféricas | $a$           | 5747                   | $[m^{-1}]$       |
| Fracción volumétrica del solvente  | $\epsilon$    | 0.9163                 | -                |
| Longitud característica por transferencia de masa difusiva                   | $L$           | $1.74 \times 10^{-4}$  | $[m]$            |
| Volumen molar de soluto  | $V_{\beta}$   | 0.5259                 | $[L * mol^{-1}]$ |
| Concentración inicial de sólido  | $C_{\beta o}$ | 1.032                  | $[kg * m^{-3}]$  |
| Constante de equilibrio  | $K$           | $3.3 \times 10^{-2}$   | -                |
| Constante de transferencia de masa de la fase sólida                         | $K_{\beta}$   | $2.45 \times 10^{-10}$ | $[m^{-1}]$       |
| Constante de transferencia de masa de la fase líquida                        | $K_{\gamma}$  | $1.7 \times 10^{-4}$   | $[m^{-1}]$       |
| Difusividad de la fase líquida   | $D_{\gamma}$  | $4.22 \times 10^{-12}$ | $[m^2 * s^{-1}]$ |
| Difusividad de la fase sólida  | $D_{\beta}$   | $2.09 \times 10^{-13}$ | $[m^2 * s^{-1}]$ |



### **2.3.1 Implementación del Modelo Matemático en Python**

En primer lugar, se procedió a realizar la codificación en Python (Spyder), por lo que se importaron las librerías que se utilizaron para la resolución del modelo. Estas permitieron codificar las variables como implementos funcionales. También, se colocaron las ecuaciones de las correlaciones en el orden respectivo a ser calculadas. Finalmente, se planteó el modelo con sus respectivas ecuaciones.

Para su resolución, se ingresó un vector de tiempo, variable independiente, que permitió calcular la concentración de soluto y solvente, en función de las ecuaciones principales del modelo. Se ploteó ambas gráficas para la obtención de una respuesta más visual y práctica.

### **2.3.2 Implementación del Modelo Matemático en ACM**

Inicialmente, se realizó la codificación del modelo en este software, por lo que se abrió un documento nuevo, en la sección derecha del archivo se encuentra el explorador de variables, se da clic en la sección “Custom modeling” y seguidamente en “Models”. Una vez abierta esta sección, se seleccionó añadir modelo y se lo denominó “VINO”.

Una vez creado el modelo, se empezó a codificar; se colocaron los parámetros y variables conocidos, se ingresaron las correlaciones del modelo, se creó un dominio de tiempo y se plantearon las ecuaciones que rigen el sistema de estudio. Luego, se verificó que no existieran errores de sintaxis en el código utilizando el comando “compile”.

Finalmente se verificó las gráficas de respuestas del modelo, es decir las concentraciones de soluto y solvente en función del tiempo. Estas se encontraban en el explorador de variables, la sección de “flowsheet”, “blocks”, “B1” y se podía verificar dando clic a la variable que se deseaba observar seleccionando la opción en “value profile”.

## 2.4 Validación del Modelo Matemático seleccionado (Mecanicista)

En esta etapa, se verificó los resultados de las simulaciones del modelo matemático en un lenguaje de programación (Python) y en el software comercial (ACM).

Se comparó las gráficas de respuestas del modelo con las del caso base, con la finalidad de comprobar que el perfil obtenido presente el mismo comportamiento.

## 2.5 Adecuación del modelo al caso del proceso de extracción en la elaboración de una bebida nutraceútica

Una vez validado el modelo, se procedió a realizar un ingreso parcial con las propiedades de la bebida nutraceútica.

Estas propiedades se clasifican en:

- a) Parámetros estimados por la literatura.
- b) Parámetros basados en el estudio integrador previo de Gabela & Villa.

A continuación, se presentan las tablas de los valores utilizados en la adecuación del modelo.

**Tabla 2.2 Parámetros especificados en literatura en el caso de la Bebida Nutraceútica**

[Vargas, 2007]

| Parámetro                               | Var.        | Valor                   | Unidad           |
|---|-------------|-------------------------|------------------|
| Constante de equilibrio                 | $K$         | 0.98                    | -                |
| Difusividad de la fase sólida           | $D_{\beta}$ | $3.209 \times 10^{-12}$ | $[m^2 * s^{-1}]$ |
| Coefficiente de disociación del líquido | $\emptyset$ | 2.6                     | -                |

**Tabla 2.3 Parámetros para el modelamiento del digestor (tomado de Aspen)**

[Gabela &amp; Villa,2021]

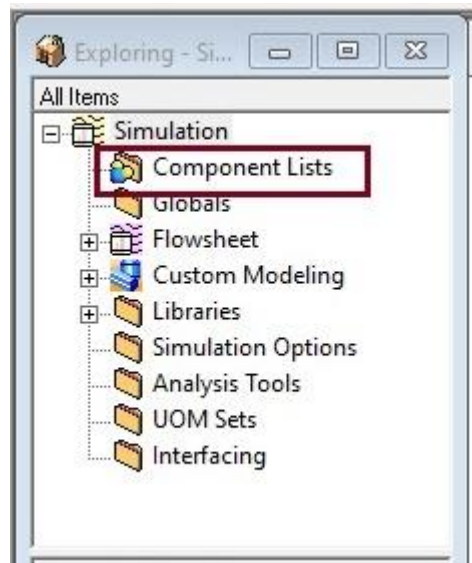
| Parámetro                          | Var.          | Valor     | Unidad                     |
|------------------------------------|---------------|-----------|----------------------------|
| Diámetro de la partícula           | $D_p$         | 0.000710  | [m]                        |
| Velocidad tangencial de agitación  | $V_t$         | 1.53153   | [m * s <sup>-1</sup> ]     |
| Fracción volumétrica               | $\epsilon$    | 0.9173    | -                          |
| Viscosidad del solvente            | $\mu_\gamma$  | 0.07117   | [cP]                       |
| Densidad en el solvente            | $\rho_\gamma$ | 628.04    | [kg * s <sup>-1</sup> ]    |
| Volumen molar/ Densidad molar      | $V_\beta$     | 0.0288152 | -                          |
| Masa molecular promedio $H_2O$     | $M_\gamma$    | 18        | [kg * kmol <sup>-1</sup> ] |
| Concentración inicial en el soluto | $C_{\beta 0}$ | 251.90    | [g * L <sup>-1</sup> ]     |

Luego, se adaptó seleccionando en la ventana del explorador de modelos, la sección del modelado personalizado y en "Add Model". Luego, se utilizó el código generado previamente en "ACM" modificando según las propiedades de la bebida nutraceútica.

### 2.5.1 Lista de componentes en Aspen Custom Modeler

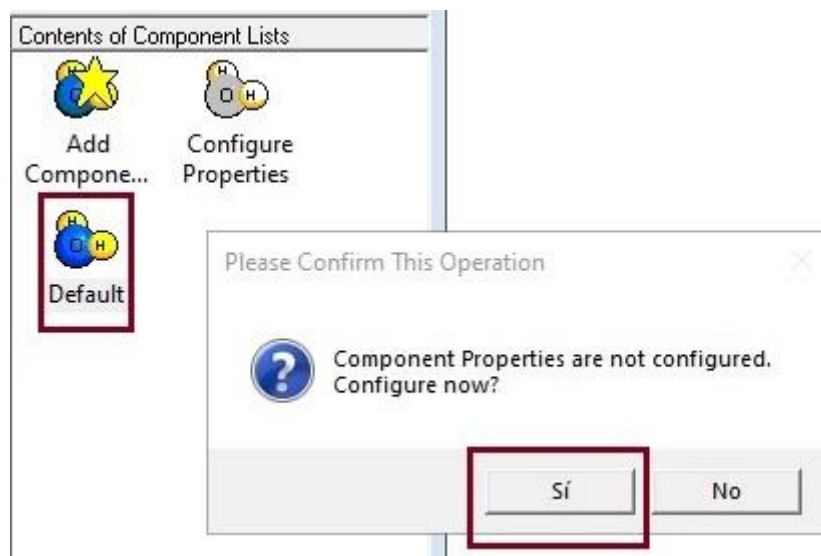
Se configuró la lista de componentes en el explorador de ACM aplicando lo siguiente:

- En la ventana del explorador de simulación, referente a la sección simulación, se hizo clic en "Component List".



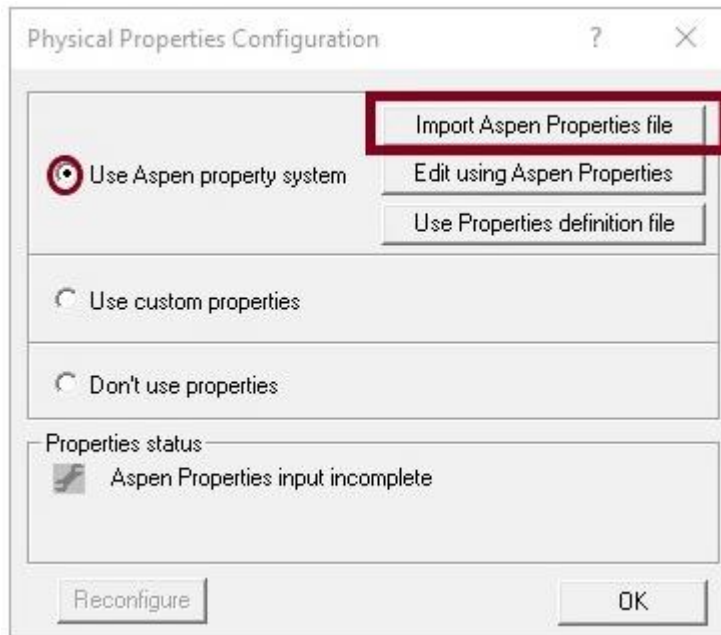
**Figura 2.2 Explorador de simulación**

- b) Doble clic en "Default", el cual se encuentra en la parte inferior del explorador de simulación.

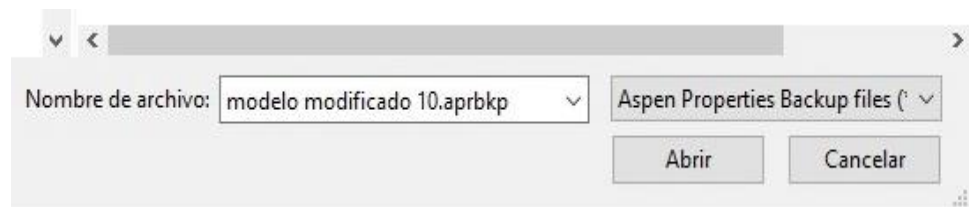


**Figura 2.3 Contenido de la lista de componentes**

- c) Se seleccionó la opción "Importar archivo de propiedades de Aspen", esto abrió el explorador de archivos donde se utilizó el archivo con la extensión ". aprbkp" que contiene los compuestos con las propiedades físicas y químicas.



**Figura 2.4 Configuración de las propiedades físicas de los componentes**



**Figura 2.5 Explorador de archivos**

- d) Por consiguiente, se utilizó el botón ">>" y se pudo observar que la lista de componentes fue añadida en la lista llamada "Default".

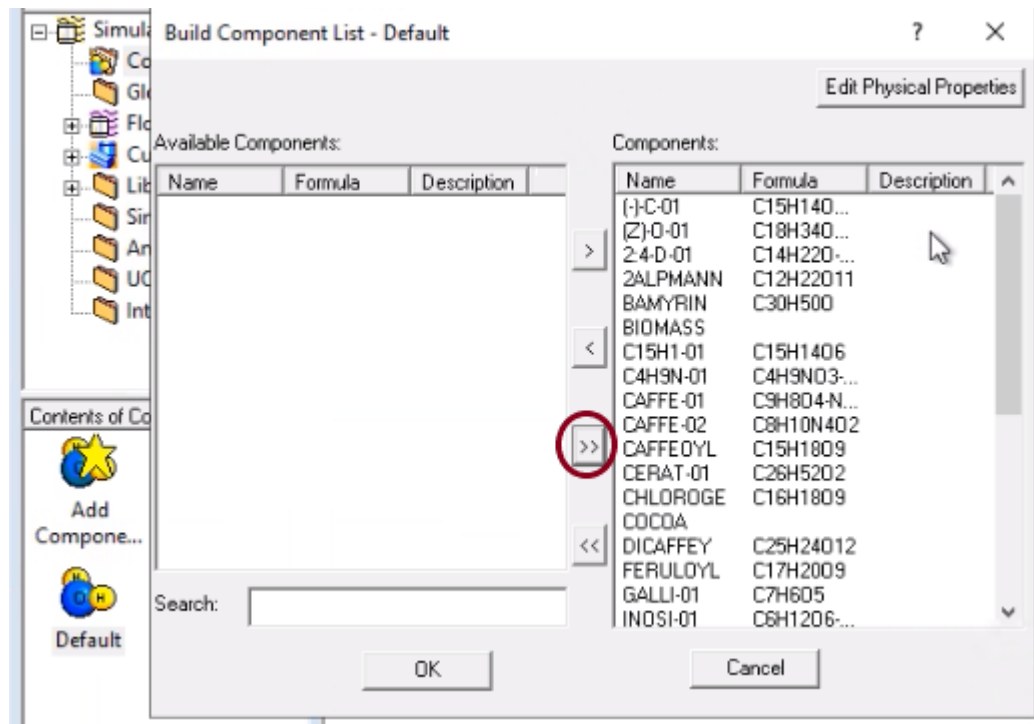


Figura 2.6 Lista de componentes

## 2.5.2 Configuración del modelo e implementación del equipo

Una vez creado el modelo, se empezó a acoplar el código con los datos de la bebida nutraceútica, reestructurándose ciertas especificaciones del modelo como las constantes, variables, parámetros, ecuaciones y correlaciones.

- Se clasificó las constantes, variables y parámetros indicando el tipo que pertenecen; es decir como fijas a las constantes y como libres a las variables/ parámetros calculados por el modelo.
- Se creó el dominio de tiempo y se plantearon las ecuaciones que rigen al modelo de la solución analítica.
- Se hizo clic derecho en la ventana de codificación y se seleccionó en compilar donde se verificó si el modelo tiene errores de sintaxis.

- d) No obstante, se seleccionó Mensajes en Ver en la barra de herramientas donde se visualizó la ventana de mensajes de la simulación con advertencias o errores.
- e) En la ventana del explorador de modelos, en la sección del modelado personalizado, se hizo clic en el modelo y se arrastró el equipo a la ventana del espacio de trabajo de ACM, y se evidenció que se representa con un recipiente flash, el cual es el ícono predeterminado para todos los modelos generados en ACM.  
(Tremblay et al., 2015)

### **2.5.3 Definición de PORTS**

Dado que el equipo necesario en la elaboración de la bebida con propiedades nutraceuticas tiene dos corrientes de entrada y dos corrientes salida en las que se involucra el soluto y el solvente, se establecieron las corrientes descritas con ayuda de los "Ports".

- a) En este caso, se utilizó "Ports" heredados, específicamente Solid Port y sus tipos de variables de propiedades predefinidas, lo cual permitió que el modelo funcione dentro del equipo, es decir que se puedan conectar gráficamente las corrientes en el equipo.
- b) Después que se definieron los puertos, se vinculó las corrientes de entrada y salida al equipo.
- c) Se compiló el código, haciendo clic derecho sobre él en el explorador de ACM y seleccionando compilar (o presionando la tecla F8), a su vez se corrió dando los resultados presentados en el siguiente capítulo.  
(Tremblay et al., 2015)

#### 2.5.4 Análisis de sensibilidad

Con el fin de comprender las limitaciones, incertidumbres y alcances del modelo, se realizó un análisis de sensibilidad.

- a) Se determinó entre las variables de mayor relevancia que pudieran afectar al tiempo en los perfiles de concentración de ambas fases; identificando al tamaño de partícula como la variable de interés.
- b) Se analizó los siguientes escenarios con respecto al tamaño de la partícula (Véase Tabla 2.4), mientras que el resto de las variables del modelo se mantuvieron con los datos de la bebida nutracéutica.

**Tabla 2.4 Valores de diámetro y superficie específica de transferencia de masa**

| Escenarios del diámetro de la partícula | $a$ [ $m^2/m^3$ ] | $D_p$ [ $m$ ]           |
|---|-------------------|-------------------------|
| Menor                                   | 23076.92          | $2.60 \times 10^{-4}$   |
| Igual                                   | 8450.7            | $7.1 \times 10^{-4}$    |
| Mayor                                   | 403.1             | $148.85 \times 10^{-4}$ |

- c) Se estudió el comportamiento de los perfiles obtenido



# CAPÍTULO 3

## 3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

### 3.1 Descripción del modelo matemático seleccionado para el digestor

A continuación, se detalla brevemente que sucede durante la operación unitaria en los siguientes pasos.

- a) Ingreso de un solvente y una corriente sólida.
- b) El solvente ingresa al sólido y existe la difusión dentro del mismo
- c) Solubilización del soluto.
- d) Mediante difusión el soluto migra hacia la parte exterior del sólido para posteriormente transportarse a la solución.

(Bonfigli et al., 2017)

El modelo mecanicista seleccionado para el desarrollo del proyecto fue “Transferencia de Masa de Antocianinas en la extracción pre-fermentativa de sólidos de uva” descrito por (Setford et al., 2019). Este es un estudio bastante amplio y analiza la extracción de antocianinas de sólidos de uva durante la maceración fermentativa para condiciones de convección natural y forzada.

Para el modelo seleccionado, la corriente sólida son los sólidos de uva y el solvente (fase líquida), el vino que tiene tres componentes principales en la etapa de fermentación (azúcar, etanol, jugo). El soluto se disuelve en el jugo y por difusión se lo transporta para la obtención del extracto. El caso es análogo al fenómeno que ocurre en la bebida nutracéutica, considerando como soluto a la materia prima y como solvente, al agua.

En el modelo se establecieron restricciones que delimitan resultados razonables y se asumieron condiciones que ayudan a plantear ecuaciones con definiciones preestablecidas. El caso base seleccionado, bajo condiciones de convección forzada, empleó una mezcla con agitación constante en su experimentación, para de esta manera considerar a la fase líquida como homogénea, sin gradiente de concentración de antocianinas. También se supuso que la difusión dentro del sólido se producía

principalmente, a lo largo del eje perpendicular a la cara principal del sólido, en una sola dirección y que su geometría esférica era constante durante todo el proceso.

Se aplicó la segunda ley de Fick para la descripción de la difusión dentro de la fase sólida, empleando el caso más común presentado en los problemas ingenieriles, la difusión no estacionaria; ya que la concentración del soluto en cualquier punto del material varía con el tiempo. (Universidad Tecnológica Nacional (UTN), 2012). Estudios previos han demostrado que, para partículas de geometría fija, la transferencia de masa por difusión efectiva promedio dentro de ambas fases se puede representar como un sistema macroscópico de transferencia de masa de ecuaciones diferenciales ordinarias. (Setford et al., 2018)

Es por ello, que se planteó una simplificación típica utilizada en operaciones de transferencia de masa, también utilizada para modelar la extracción fenólica sólido-líquido de otros materiales como vainilla pods y granos de café. El modelo mecanicista para este proceso se encuentra descrito en la sección (1.4.5) del marco teórico, que tiene en cuenta la difusión de solutos dentro del sólido, la transferencia de masa de solutos desde la interfase al líquido y una relación de equilibrio entre las concentraciones de sólidos y líquidos.

La ecuación (1.1) representó la transferencia de masa macroscópica en la fase de sólido; esta ecuación involucra las concentraciones de la fase sólida y la concentración en la interfase sólido-líquido, la superficie específica para la transferencia de masa de partículas esféricas y la fracción volumétrica del soluto. La ecuación (1.2) representó la transferencia de masa macroscópica en la fase de disolvente, aquí se involucran los parámetros mencionados anteriormente, pero respecto al disolvente; mientras que la ecuación (1.6) muestra la relación de equilibrio de las concentraciones de ambas fases, mediante una constante de distribución.

Por otro lado, se propuso una solución analítica al modelo macroscópico a partir del sistema de ecuaciones diferenciales, esta solución está detallada en la sección (1.4.5) del capítulo 1, y corresponde a las ecuaciones (1.14) y (1.15), estas fueron obtenidas aplicando el operador de Laplace; el sistema de ecuaciones simultáneas describe la concentración promedio dentro de ambas fases. (Vargas, 2007)

La solución analítica implica relaciones algebraicas presentadas en la sección (1.4.5) del capítulo 1, las variables que intervienen son las mismas que se presentan en el conjunto de ecuaciones diferenciales macroscópicas; los datos usados en el caso base de estudio se presentan en la Tabla 2.1.

No obstante, los parámetros del modelo no solo se pueden determinar de forma experimental; también se pueden estimar a partir correlaciones empíricas junto con sistemas de números adimensionales, los cuales describen la transferencia de masa por convección forzada alrededor de las esferas. (Setford et al., 2018)

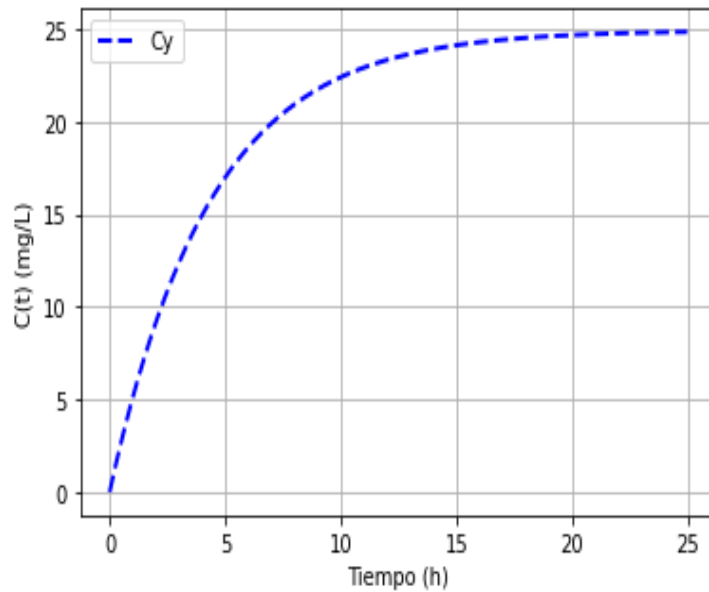
Por lo tanto, la constante de transferencia de masa del solvente ( $K_\gamma$ ) se calculó mediante la correlación sugerida por (Geankoplis, 1998) para lecho fijo; para ello se usó el factor de Chilton Colburn ( $J_D$ ), donde se estimó el número de Reynolds ( $Re$ ), a partir de la velocidad de agitación, la densidad y viscosidad de la mezcla extractora (solvente). Finalmente, se calculó los números de Schmidt ( $Sc$ ), Sherwood ( $Sh$ ) y así se resolvió el sistema adimensional, además, se utilizó la correlación de Wilke-Chang, para encontrar el valor del coeficiente de difusión del solvente ( $D_\gamma$ ). Este sistema de ecuaciones adimensionales se encuentra descrito en la sección (1.4.5) del capítulo 1. (Setford et al., 2018)

## **3.2 Resultado y análisis de la implementación del modelo**

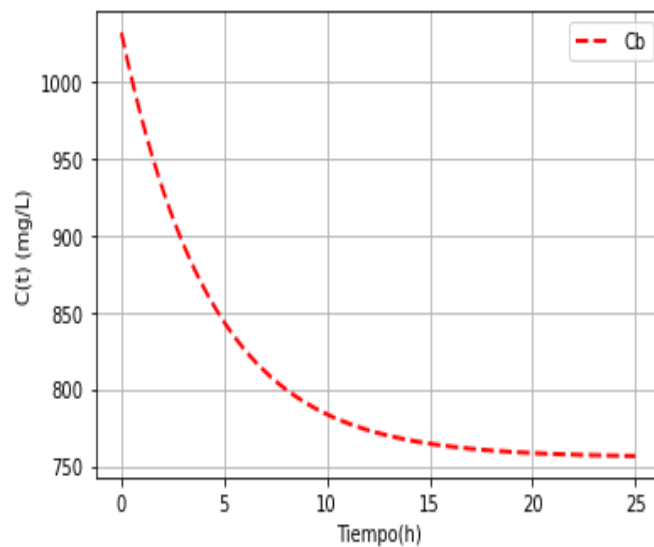
Se obtuvieron dos gráficas en cada uno de los lenguajes de programación aplicados, y se verificó que las respuestas del modelo seleccionado correspondan a la literatura del caso base.

### **3.2.1 En lenguaje de programación de PYTHON**

En el desarrollo del modelo se utilizaron las librerías de Python Numpy y SciPy para los cálculos matemáticos complejos y resolución de las ecuaciones del modelo, y Matplotlib para generar las gráficas. Las figuras 3.1 y 3.2 corresponden a las respuestas del caso base implementado en Python, y el código aplicado en la resolución se observa en el apéndice A1.



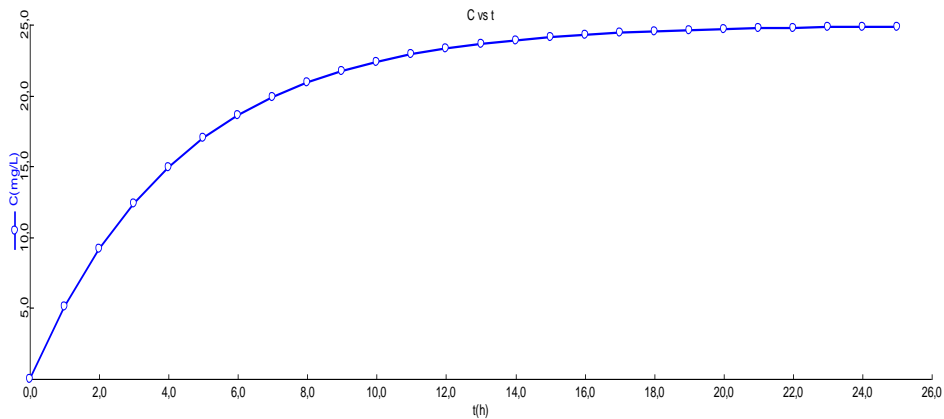
**Figura 3.1** Concentración en fase líquida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en Python



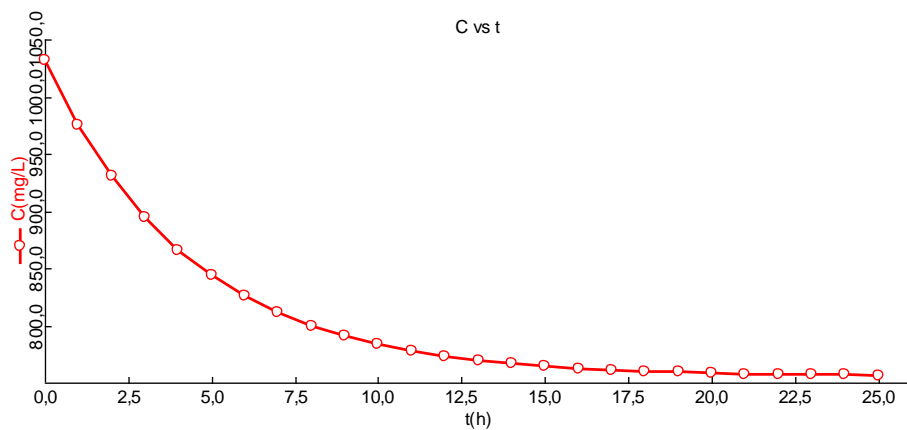
**Figura 3.2** Concentración en fase sólida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en Python

### 3.2.2 En Software ACM

En este software, se aplicó un lenguaje distinto de codificación, y se generaron las respuestas gráficas de forma directa; estas se muestran en la figura 3.3 y 3.4.



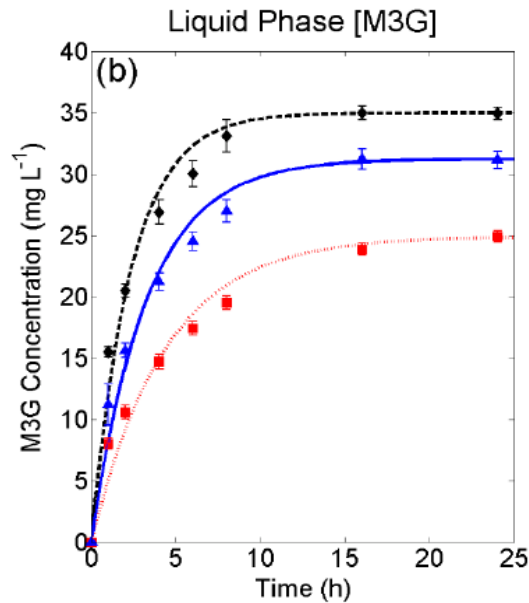
**Figura 3.3 Concentración en fase líquida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en ACM**



**Figura 3.4 Concentración en fase sólida de malvidin-3- glucósido vs tiempo en ACM**

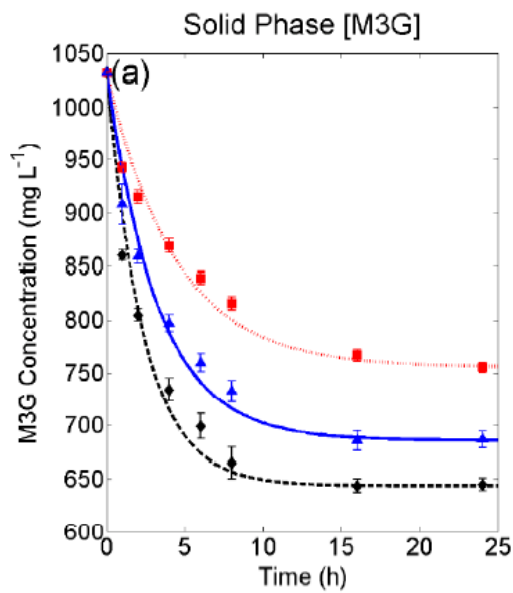
### 3.2.3 En Caso Base

Con el fin de verificar que los resultados gráficos y numéricos sean acordes a la literatura del caso base, representados en las figuras 3.5 y 3.6. Se evidenciaron los perfiles de concentración de la fase líquida y sólida conforme al modelo propuesto, el cual cuenta con tres curvas de diferentes colores que indican la extracción en jugo (color rojo), durante fermentación (color negro), y en vino (color azul). Se compararon los resultados contra la curva roja que proviene de (Setford et al., 2019).



**Figura 3.5 Concentración en fase líquida de malvidin-3- glucósido vs tiempo**

**Fuente:** [Setford et al.,2019]



**Figura 3.6 Concentración en fase sólida de malvidin-3- glucósido vs tiempo**

**Fuente:** [Setford et al.,2019]

En el perfil de la concentración de la fase líquida como se muestra en las Figuras. 3.1 y 3.3 obtenidas en Python y ACM, respectivamente. Se observó una tendencia creciente en la curva, es decir que aumenta la concentración, a lo largo del tiempo hasta que alcanza el tiempo límite, y se mantiene prácticamente constante. Esto es producto del fenómeno de difusión que ocurre en el sistema

respecto al material de estudio. Estos perfiles son exactamente los descritos en la literatura y se muestra en la Figura 3.5, curva de color rojo, evidenciando que la extracción de M3G que se produciría en condiciones constantes de fase líquida para el jugo.

En el perfil de la concentración de la fase sólida, Figuras. 3.2 y 3.4. obtenidas en Python y ACM respectivamente, se observó que, al inicio, el gradiente de concentración es grande, por ende, la velocidad de difusión también. Esto se fundamenta con la segunda ley de Fick y se comprueba a través de su análisis gráfico, puesto que el gradiente de difusión y el flujo de difusión varían con el tiempo. A medida que pasa el tiempo, el gradiente de concentración disminuye y con ello, la velocidad de difusión; esto se debe a que se han difundido los átomos del sólido.

Las figuras descritas corresponden a los datos de las tablas del Apéndice A5 -A6 y A7-A8; donde se observó que los resultados difieren entre la simulación de Python y ACM respectivamente. Esto se explica por la diferencia en la cantidad de decimales empleados en los cálculos por parte del simulador; sin embargo, la diferencia es mínima.

En el caso base, se observaron que los perfiles experimentales de extracción de M3G de los sólidos de uva en la fase líquida (Figura 3.5 (b)) y fase sólida (Figura 3.6(a)) en convección forzada, mejoran cuando se produce más etanol. Esto es aplicable a la tasa de extracción general (el cual, se puede aproximar por la tasa de transferencia de masa interna) y a la capacidad de extracción máxima de M3G. (Setford et al., 2018)

Finalmente, se verificó el modelo matemático seleccionado y se evidenció que se ajusta al comportamiento real del sistema, ya que los resultados de la simulación del modelo (perfiles de concentración en función del tiempo) presentan la misma tendencia acorde el caso base. Así se evidencia la importancia de la autenticación del modelo como etapa previa a la aplicación en el caso de la bebida nutracéutica.

### **3.3 Resultado y análisis del Modelo con propiedades de la bebida nutraceútica**

Una vez formulado e implementado el modelo, se ajustó al caso del extractor de la bebida con propiedades nutraceúticas. Sin embargo, los datos requeridos para la resolución del modelo fueron una limitante en su desarrollo; ya que se necesitan datos de equilibrio y la constante de transferencia de masa de la fase sólida, que son obtenidos mediante experimentación y métodos matemáticos que relacionen las variables como la regresión lineal.

Por lo que, al no contar con estos datos para el caso de la bebida nutraceútica, se estimaron mediante literatura y se basó en la premisa que estos parámetros correspondan a compuestos con propiedades bioactivas, y a su vez que trabajan a la temperatura definida por trabajos previos en el extractor. Los datos mencionados se encuentran en la Tabla 2.2.

Por consiguiente, se utilizaron las correlaciones empíricas del modelo para el cálculo de los parámetros faltantes, los datos que se utilizaron fueron tomados de la simulación del proyecto integrador previo (Gabela & Villa, 2021) junto al trabajo de la extracción de *Vernonanthura patens* (Manzano Santana et al., 2013). Los valores de las variables del modelo respecto a los datos de la bebida nutraceútica se encuentran en la Tabla 2.3.

Se encontraron los valores de los parámetros adimensionales que permitió la resolución de las ecuaciones que rigen el sistema. Como se mencionó anteriormente, el extractor para el proceso de la bebida trabaja bajo condiciones de convección forzada y las correlaciones deben regirse a estas condiciones. En la Tabla 3.1, se presenta un resumen de los parámetros de transferencia de masa para las condiciones de la bebida calculados, según el método utilizado en el caso base que está descrito en la sección (3.1) de este capítulo.

Es importante mencionar, que se verificaron las correlaciones con la literatura para el caso de convección forzada alrededor de una esfera sólida. También se evidenció que el valor del número de Reynolds se encuentra en el intervalo de 10-4000, caso



contrario se debe modificar las correlaciones para que cumplan las condiciones establecidas en la literatura (Geankoplis, 1998). La estimación inapropiada de los parámetros puede causar un error considerable en los resultados.

En los resultados, se observó que la constante de transferencia de masa del solvente ( $K_\gamma$ ) es alta, lo cual indica que el sistema sólido-líquido estudiado está bien mezclado. Esto se confirmó con el cálculo del número de Biot, ya que generalmente los valores superiores a 10 de este número adimensional, indican que la tasa de extracción general está controlada por la difusión interna, es decir, que el solvente y las partículas de soluto se mezclan bien y la resistencia externa se puede despreciar; cumpliendo una de las asunciones planteadas en el modelo. (Setford et al., 2019) (Bonfigli et al., 2017)

**Tabla 3.1 Resultados de los parámetros en el caso de la Bebida Nutraceutica**

| Parámetro  | Var.       | Valor                  | Unidad           |
|--|------------|------------------------|------------------|
| Superficie específica para transferencia de masa de las partículas esféricas | $a$        | $8.45 \times 10^3$     | $[m^{-1}]$       |
| Constante de transferencia de masa de la fase sólida                         | $K_\beta$  | $2.230 \times 10^{-8}$ | $[m^{-1}]$       |
| Constante de transferencia de masa de la fase líquida                        | $K_\gamma$ | 0.03                   | $[m^{-1}]$       |
| Difusividad de la fase líquida   | $D_\gamma$ | $22 \times 10^{-12}$   | $[m^2 * s^{-1}]$ |
| Número de Reynolds   | $Re$       | $3.51 \times 10^3$     | -                |
| Factor de Chilton Colburn  | $J_D$      | 0.031                  | -                |
| Número de Schmidt  | $Sc$       | 1.99                   | -                |
| Número de Biot   | $Bi$       | $3.29 \times 10^6$     | -                |

La solución del modelo en los lenguajes de programación utilizados se analizó mediante su representación gráfica, donde las variables de repuestas fueron la concentración del sólido y del solvente en función del tiempo. El perfil de tiempo se encuentra en segundos y la concentración en g/L, donde el valor de la concentración

inicial fue estimado de la data del proyecto integrador previo (Gabela & Villa, 2021). Sin embargo, dicho valor conlleva un error, debido a que se calculó el promedio de la concentración considerando únicamente a la *Vernonanthura patens* como materia prima de la bebida nutracéutica.

La Figura 3.7, muestra la concentración del soluto en función del tiempo donde se observó que inicialmente la concentración es de  $251.90 [g * L^{-1}]$ , y al transcurrir el tiempo, es decir entre más prolongado sea el tiempo de extracción, el gradiente de concentración no presenta cambios significativos.

Por otro lado, la Figura 3.8 muestra la concentración de solvente en g/L. El solvente inicialmente tiene una concentración nula, pues es el encargado de extraer las propiedades de la materia prima (sólido). En condiciones de convección forzada, donde la transferencia de masa interna es el paso que controla la tasa de extracción, se puede observar una extracción inicial rápida dentro de los primeros 67 minutos de extracción (4000 segundos). Sin embargo, en la extracción la transferencia de masa cesa cuando la concentración alcanza un valor eventualmente máximo, es decir que ya no existe fuerza impulsora entre las fases. A estos valores se los conocen como concentración y tiempo de equilibrio, y para el caso planteado se observan que empieza aproximadamente a las 2 horas 13 minutos (8000 segundos) de extracción. Es importante resaltar que este tiempo es prolongado y no siempre puede ser rentable para el proceso, por ello se deben tomar consideraciones para la extracción de una buena cantidad, pero en un tiempo menor que tenga una mejor relación costo-beneficio. (Valencia-Pérez et al., 2020)

Una de las diferencias de colocar los datos de la bebida nutracéutica en el modelo base, es el cambio de unidades de los ejes de tiempo y concentración. Al no contar con data experimental, se estimaron parámetros utilizando la literatura, los cuales influyen en las unidades del tiempo. Por tal motivo, en este caso de estudio de la bebida, el tiempo se encuentra representado en segundos, mientras que el de la variable dependiente (concentración), se ajusta al valor de la concentración inicial del sólido. Esto último se

verificó a través de un análisis dimensional que como resultado demostró la intrascendencia de la unidad.

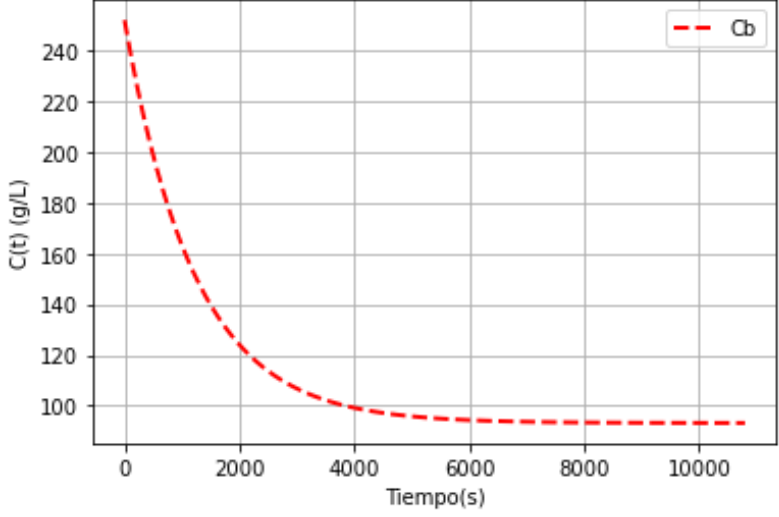


Figura 3.7 Concentración del sólido vs tiempo (Bebida nutraceútica) en Python

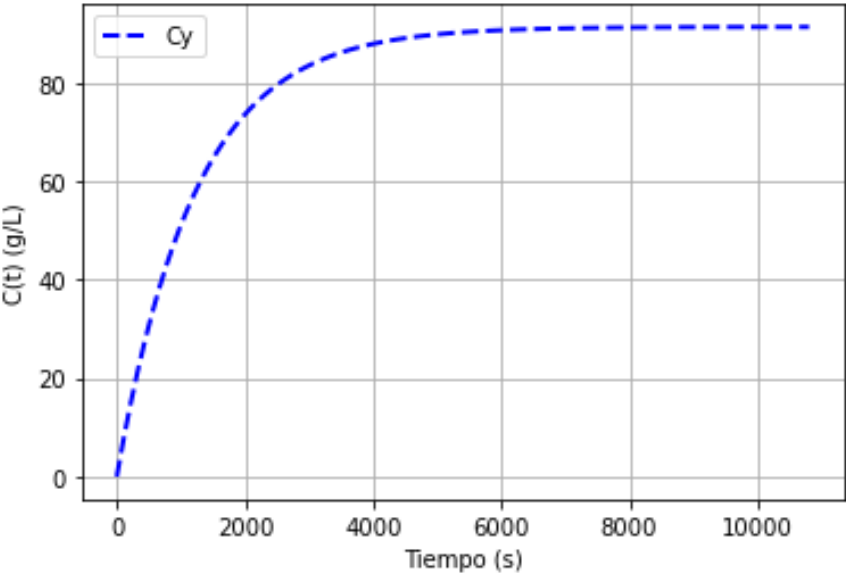
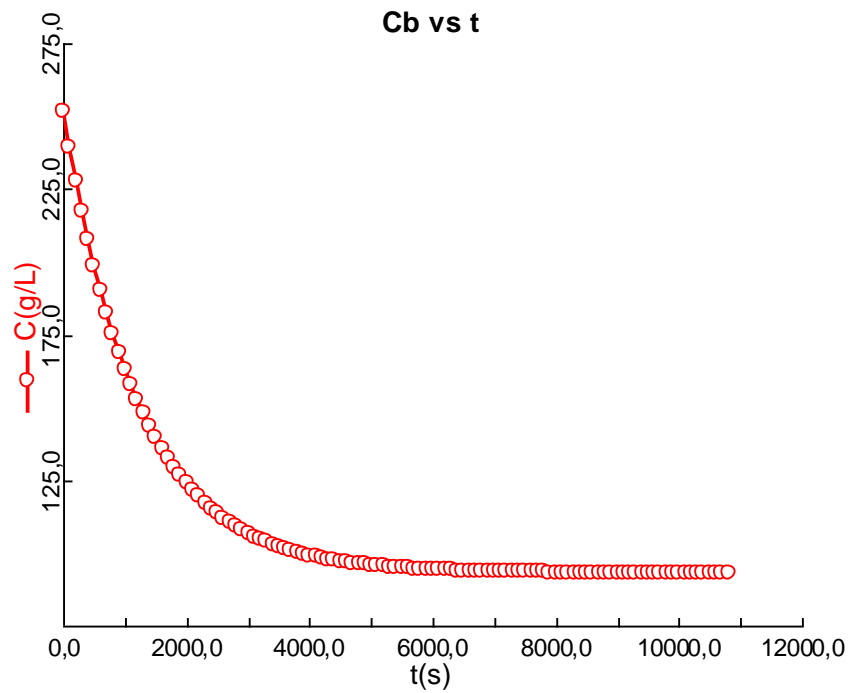
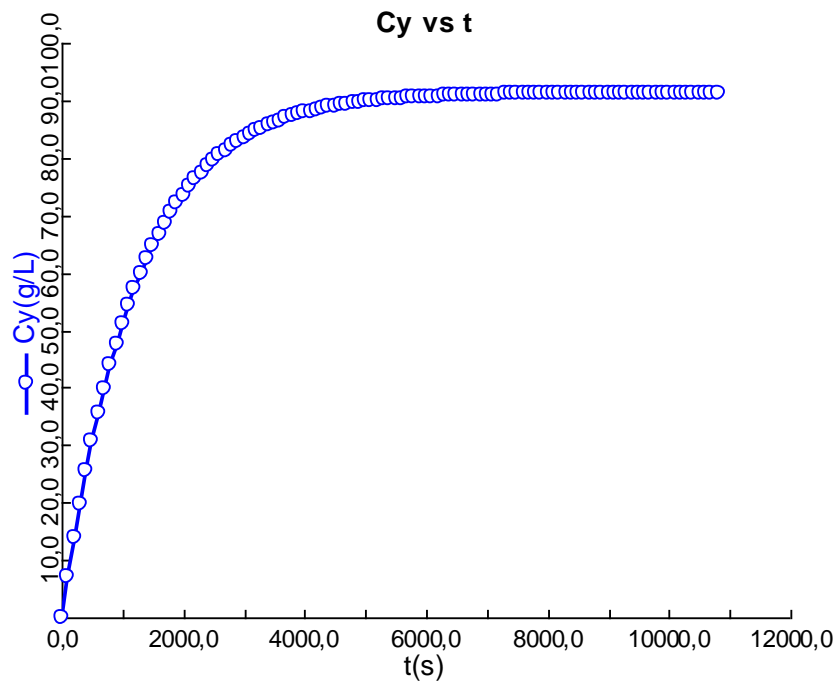


Figura 3.8 Concentración del solvente vs tiempo (Bebida nutraceútica) en Python



**Figura 3.99 Concentración del soluto vs tiempo en ACM (Bebida nutracéutica)**

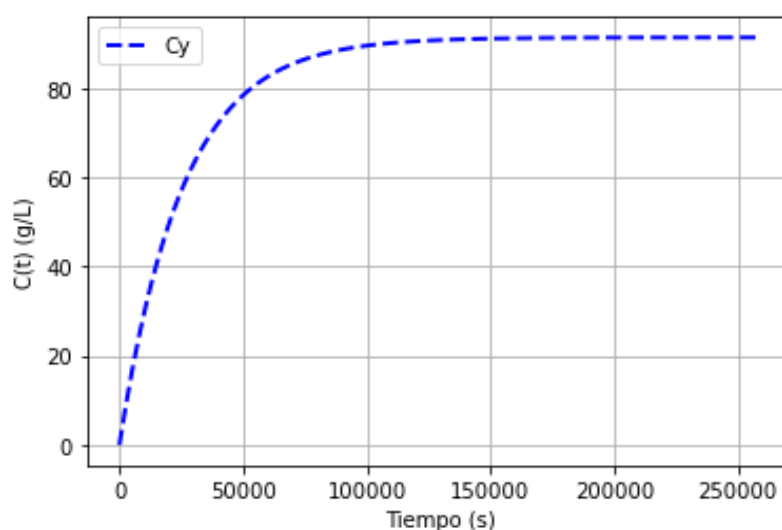


**Figura 3.10 Concentración del solvente vs tiempo en ACM (Bebida nutracéutica)**

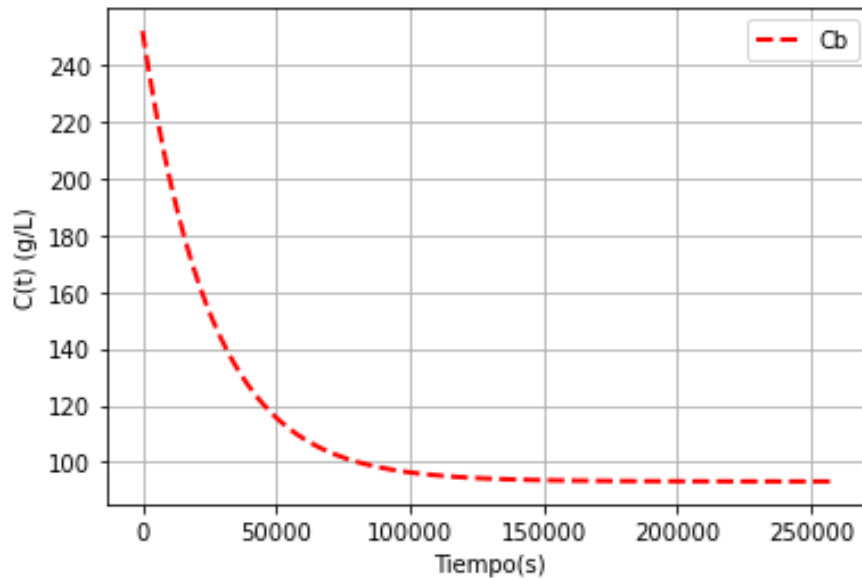
### 3.4 Resultados de análisis de sensibilidad

Al variar el diámetro de partícula en el modelo, se obtuvieron 4 gráficas que corresponden a las concentraciones de soluto y solvente respecto al tiempo. Las Figuras 3.9 y 3.10, presentan el comportamiento de las curvas al tener un diámetro de partícula mayor; mientras que las Figuras 3.11 y 3.12 un diámetro menor. A partir de las gráficas se evidenció que la superficie específica para transferencia de masa de las partículas esféricas ( $a$ ) tiene un efecto positivo en la velocidad de extracción en general, es decir, que mientras más pequeño sea el tamaño y se eliminen barreras, se aumenta la superficie disponible para la extracción, esto se debe a que el diámetro de la partícula se relaciona inversamente con la superficie específica para transferencia de masa de las partículas esféricas, mediante la ecuación (1.4) planteada en el capítulo 1. Por ende, la transferencia de masa es más rápida, influyendo en que el tiempo de extracción disminuya.

En las Figuras 3.9 y 3.10 se estima que el tiempo de equilibrio en la extracción es aproximadamente 41 horas con 36 minutos (150000 segundos), un tiempo bastante largo ya que el diámetro de la partícula se incrementa aproximadamente 20 veces más al tamaño aplicado en la elaboración de la bebida nutracéutica.



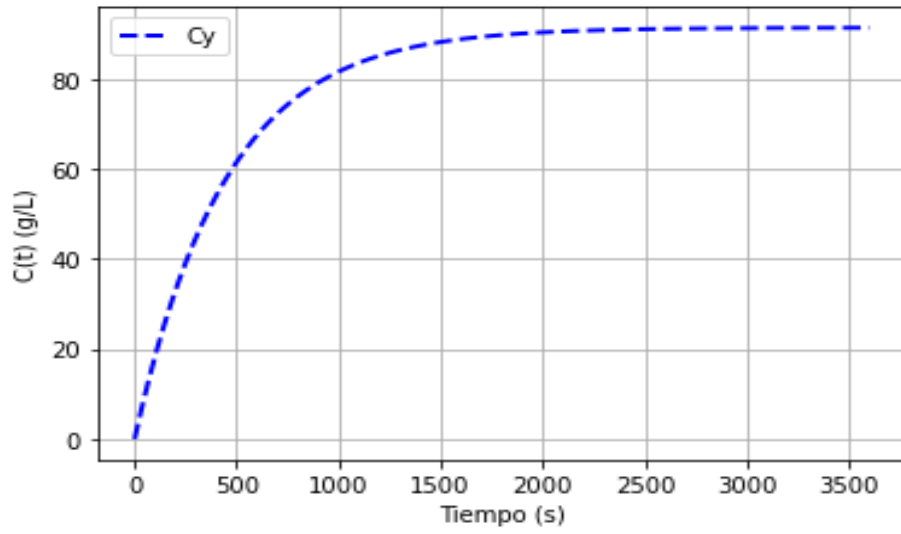
**Figura 3.11 Concentración del solvente vs tiempo con diámetro de partícula mayor**



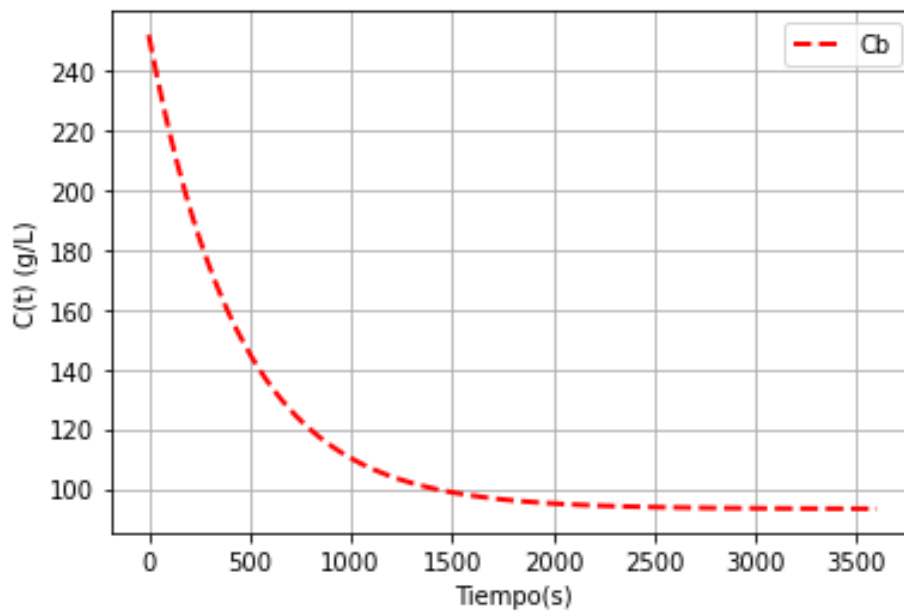
**Figura 3.12 Concentración del soluto vs tiempo con diámetro de partícula mayor.**

Por otro lado, en las Figuras 3.11 y 3.12 el tiempo de equilibrio en la extracción es aproximadamente 42 minutos (2500 segundos), un tiempo bastante menor puesto que el diámetro de la partícula es aproximadamente 3 veces menor al tamaño aplicado en la elaboración de la bebida nutracéutica. Es importante recalcar, que estos valores de diámetro de partícula han sido utilizados para otros casos de estudio de otras materias primas.

Por eso, se requiere una operación preparativa en la extracción sólido líquido, es decir que el material vegetal sea seccionado en cortes, tamizados o pulverizados.



**Figura 3.13 Concentración del solvente vs tiempo con diámetro de partícula menor**



**Figura 3.14 Concentración del soluto vs tiempo con diámetro de partícula menor**

# CAPÍTULO 4

## 4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

### 4.1 Conclusiones

- Se representó el proceso de extracción sólido-líquido en la elaboración de la bebida con propiedades nutraceuticas, empleando un modelo mecanicista que está basado en la extracción de sólidos de uva pre-fermentativos en condiciones de fermentación simuladas, considerando que este modelo ya ha sido aplicado para otros materiales que contienen compuestos con propiedades bioactivas como la bebida.
- Se seleccionó un modelo mecanicista, representado por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias que son la simplificación del balance dinámico de la Segunda Ley de Fick. Sin embargo, el modelo propuesto tiene una solución analítica que describe la concentración promedio de las fases, la cual se utilizó para simplicidad del caso. Este modelo se aplicó, ya que el principio de separación presente, el cual rige la operación unitaria es la transferencia de masa.
- Se utilizaron herramientas de programación para la codificación del modelo seleccionado, las cuales permitieron visualizar las gráficas correspondientes a la concentración de soluto y solvente en el digestor. Los resultados presentados en estas herramientas computacionales permiten estimar los valores del modelo de forma didáctica y práctica, pues facilitan la identificación de las variables de estudio y la comprensión del fenómeno ocurrido.
- Se validó el caso base, a través de la implementación e interpretación de los datos en Python y ACM, obteniendo las tendencias y variables de respuestas correspondientes y planteadas en la literatura. Esto permitió corroborar el funcionamiento del modelo para su posterior aplicación en el caso de la bebida nutraceutica.
- Se aplicaron correlaciones empíricas de números adimensionales, para la estimación de las constantes de transferencia de masa de la fase sólida y líquida, y



la difusividad de la fase líquida. Estos parámetros mencionados eran necesarios para la resolución del modelo; no obstante, se estimó mediante literatura la difusividad de la fase líquida y la constante de equilibrio a partir de la literatura, que emplea compuestos bioactivos a un rango de temperatura dado.

- Se logró obtener el tiempo de equilibrio en la extracción de la bebida con propiedades nutraceútica, alcanzando un valor de 2 horas y 13 minutos aproximadamente, a partir de este tiempo la concentración alcanza eventualmente un valor máximo que se mantiene en función del tiempo, el cual no siempre es rentable y debe ser analizado.
- Se verificó a través de los resultados obtenidos que la fuerza impulsora que rige la operación unitaria es la diferencia de solubilidad, ya que gráficamente se puede determinar la concentración máxima que puede alcanzar el sólido en el solvente en función del tiempo.
- Se analizó la influencia del diámetro de la partícula en el modelo con los datos de la bebida nutraceútica, donde se evidenció que a menor diámetro de partícula el tiempo de extracción también disminuía, siendo una variable directamente proporcional, ya que se favorece la velocidad de difusión de los átomos.
- En sí, la aplicación del modelado matemático junto al uso de softwares computacionales, para este tipo de industrias es de gran utilidad, esto ayudará a minimizar el uso de las experimentaciones, lo cual beneficia en la productividad, y el factor económico. En conclusión, la metodología planteada permitirá optimizar y/o diseñar procesos industriales adecuándose a la operación que se necesite formular.

## 4.2 Recomendaciones

- Se recomienda análisis experimentales para la determinación de los parámetros estimados como la constante de equilibrio y la difusividad en el sólido, obteniendo un modelo más preciso que permitirá que al implementar el equipo, su simulación sea más consecuente con la realidad.
- Se sugiere que en el código al momento de plantear las conexiones de “Solid Ports” con el modelo, se verifique la compatibilidad de los archivos y las convenciones del modelado para este tipo de Port, como el cumplimiento de que los nombres de las subtransmisiones sea el estándar, para el posterior planteamiento de balances de materia y energía.
- Implementar la exportación del modelo construido al software Aspen Plus, para su posterior conexión con los demás equipos del proceso de la elaboración de la bebida nutracéutica. Sin embargo, es importante que se pueda realizar la validación del modelo con datos experimentales de la extracción de la bebida nutracéutica, ya que la configuración del modelo como una unidad añadida debe ser un compromiso entre el trabajo experimental y computacional (programación) para no solo solucionar problemas sino también mejorar los resultados.
- Se aconseja la optimización económica mediante un análisis económico con la herramienta Process Economic Analyzer (APEA) del software Aspen Plus con la finalidad de evaluar la viabilidad de la extracción sólido- líquido.
- Al escribir ecuaciones en Aspen Custom Modeler, (ACM), se recomienda que evite la división innecesaria e incluya un rótulo de ecuación ("Eqn\_:") con la finalidad de diagnosticar problemas/errores si el modelo no converge.

# BIBLIOGRAFÍA

- Abad, A. G., & Palacios, J. M. (2021). *Escalamiento de un proceso para la elaboración de una bebida con Vernonanthura patens , Ilex guayusa y residuos de cacao.*
- Alvarez, H., Lamanna, R., Vega, P., & Revollar, S. (2009). Metodología para la obtención de modelos semifísicos de base fenomenológica aplicada a una sulfitoradora de jugo de caña de azúcar. *RIAI - Revista Iberoamericana de Automática e Informática Industrial*, 6(3), 10–20. [https://doi.org/10.1016/S1697-7912\(09\)70260-2](https://doi.org/10.1016/S1697-7912(09)70260-2)
- Aspen. (n.d.). *Aspen Custom Modeler | Quick and Easy | AspenTech.* <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-custom-modeler>
- Bonfigli, M., Chiandoni, F., Kraft, R., & Reinheimer, M. (2017). Modelado matemático, validación y análisis del proceso de extracción de antocianinas en harinas de orujos tintos a diferentes temperaturas. *Universidad Tecnológica Nacional*, 1, 72–80.
- Borreguero, A. M., Valverde, J. L., García-Vargas, J. M., & Sánchez-Silva, L. (2019). Simulator-based learning in the teaching of chemical engineering. *Computer Applications in Engineering Education*, 27(5), 1267–1276. <https://doi.org/10.1002/cae.22150>
- Bucić-Kojić, A., Sovová, H., Planinić, M., & Tomas, S. (2013). Temperature-dependent kinetics of grape seed phenolic compounds extraction: Experiment and model. *Food Chemistry*, 136(3–4), 1136–1140. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2012.09.087>
- Castillo-Santos, K., Ruiz-López, I. I., Rodríguez-Jimenes, G. C., Carrillo-Ahumada, J., & García-Alvarado, M. A. (2017). Analysis of mass transfer equations during solid-liquid extraction and its application for vanilla extraction kinetics modeling. *Journal of Food Engineering*, 192, 36–44. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2016.07.020>
- Chang, P., & Wilke, C. R. (1955). Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions. *AIChE Journal*, 264–270.
- Chaves, I. D. G., López, J. R. G., Zapata, J. L. G., Robayo, A. L., & Niño, G. R. (2015). Process analysis and simulation in chemical engineering. In *Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-14812-0>
- Chen, G., Huang, K., Miao, M., Feng, B., & Campanella, O. H. (2019). Molecular Dynamics Simulation for Mechanism Elucidation of Food Processing and Safety: State of the Art. *Comprehensive Reviews in Food Science and Food Safety*, 18(1), 243–263. <https://doi.org/10.1111/1541-4337.12406>

- DeFelice, S. L. (1995). The nutraceutical revolution: its impact on food industry R&D. *Trends in Food Science and Technology*, 6(2), 59–61. [https://doi.org/10.1016/S0924-2244\(00\)88944-X](https://doi.org/10.1016/S0924-2244(00)88944-X)
- Evans, H. A., Bahri, P. A., Vu, L. T. T., & Barnard, K. R. (2014). Modelling cobalt solvent extraction using Aspen Custom Modeler. In *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 33). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63456-6.50085-5>
- Gabela, E., & Villa, P. (2021). *Caracterización de las materias primas Vernonanthuria Patens , Ilex la elaboración de una bebida con propiedades nutraceuticas.*
- Geankoplis, C. J. (1998). Drying of process materials. In I. Prentice-Hall International (Ed.), *Transport processes and Unit Operations* (Third Edit, pp. 520–533).
- Jarrín, P. (2020). Los nutraceuticos como un componente económico en Ecuador y el Mundo. In *Nutraceuticos y Nutraingredientes: el futuro de los alimentos inteligentes para la salud* (Issue April).
- Jokić, S., Velić, D., Bilić, M., Bucić-kojić, A., & Planinić, M. (2010). *Modelling of the Process of Solid-Liquid Extraction of Total Polyphenols from Soybeans.* 28(3), 206–212.
- Kumar, R., Singh, G., Swami, G., Krishan, P., Kumari, P., & Gautam, Saeed Iqbal Rizwi and Gautam, S. P. (2013). Nutraceuticals: A Boom to Medical Industry. *Research Gate*. [https://www.researchgate.net/publication/269518050\\_Nutraceuticals\\_A\\_Boom\\_to\\_Medical\\_Industry](https://www.researchgate.net/publication/269518050_Nutraceuticals_A_Boom_to_Medical_Industry)
- Manzano Santana, P., Orellana León, T., Miranda Martínez, M., Abreu Payrol, J., Ruíz, O., & Peralta García, E. (2013). Algunos parámetros farmacognósticos de Vernonanthuria patens (Kunth) H. Rob. (Asteraceae) endémica de Ecuador. *Revista Cubana de Plantas Medicinales*, 18(1), 131–139. [http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1028-47962013000100015&lng=es&nrm=iso&tlng=es](http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1028-47962013000100015&lng=es&nrm=iso&tlng=es)
- Mourtzis, D., Doukas, M., & Bernidaki, D. (2014). Simulation in Manufacturing : Review and Challenges. *Procedia CIRP*, 25(Figure 1), 213–229. <https://doi.org/10.1016/j.procir.2014.10.032>
- Perez Leonard, H. (2006). Nutraceuticos: componente emergente para el beneficio de la salud. *Icidca*, XL(3).

- Rakicka-Pustułka, M., Mirończuk, A. M., Celińska, E., Białas, W., & Rymowicz, W. (2020). Scale-up of the erythritol production technology – Process simulation and techno-economic analysis. *Journal of Cleaner Production*, 257. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.120533>
- Rengel, Z., & Osmond, G. (1993). *Mechanistic simulation models of nutrient uptake : A review*. 161–173.
- Setford, P. C., Jeffery, D. W., Grbin, P. R., & Muhlack, R. A. (2018). Modelling the mass transfer process of malvidin-3-glucoside during simulated extraction from fresh grape solids under wine-like conditions. *Molecules*, 23(9), 1–16. <https://doi.org/10.3390/molecules23092159>
- Setford, P. C., Jeffery, D. W., Grbin, P. R., & Muhlack, R. A. (2019). Mass transfer of anthocyanins during extraction from pre-fermentative grape solids under simulated fermentation conditions: Effect of convective conditions. *Molecules*, 24(1). <https://doi.org/10.3390/molecules24010073>
- Simeonov, E., Yaneva, Z., & Chilev, C. (2017). *Kinetics of green solid-liquid extraction of useful compounds from plant materials: kinetics coefficients and modeling*. <https://doi.org/10.1515/gps-2016-0179>
- Tangsriwong, K., Lapchit, P., Kittijungjit, T., Klamrassamee, T., Sukjai, Y., & Laonual, Y. (2020). Modeling of chemical processes using commercial and open-source software: A comparison between Aspen plus and DWSIM. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 463(1). <https://doi.org/10.1088/1755-1315/463/1/012057>
- Thomas, G. C., Veloso, G. O., & Krioukov, V. G. (2007). Mass transfer modelling in counter-current crossed flows in an industrial extractor. *Food and Bioprocess Technology*, 85(2 C), 77–84. <https://doi.org/10.1205/fbp06015>
- Tremblay, D., Technology, A., Peers, Z., & Technology, A. (2015). *Jump Start : Aspen Custom Modeler V8*.
- Treybal, R. E. (2008). Operaciones sólido-fluido. In *Operaciones de transferencia de masa* (Segunda, pp. 792–794). McGRAW-HILL. <https://doi.org/10.1615/atoz.a.azeotropes>
- Universidad Tecnológica Nacional (UTN). (2012). *Difusión en sólidos*. 1–6. [https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/mecanica/5\\_anio/metalografia/3-Difusion\\_en\\_solidos\\_v2.pdf%0Ahttp://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/mec](https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/mecanica/5_anio/metalografia/3-Difusion_en_solidos_v2.pdf%0Ahttp://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/mec)

anica/5\_ano/metalografia/3-Difusion\_en\_solidos\_v2.pdf

Valencia-Pérez, N. ., Cerón-Montes, G. ., Garrido-Hernández, A., Carrillo-Sancen, G., Yáñez-Fernández, J., & Castro-Muñoz, R. (2020). *Simulación del tiempo de extracción en función de la temperatura de proceso y de la microestructura del material vegetal*. 8, 46–53.

Vargas, A. (2007). *Mathematical modeling of caffeine kinetic during solid – liquid extraction of coffee beans*. 81, 72–78.  
<https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2006.10.011>

# APÉNDICE

## APÉNDICE A

```
8 import numpy as np
9 import matplotlib.pyplot as plt
10 from scipy.integrate import odeint
11
12 #Datos Vino (jugo)
13 a=5747.0 #[m2 m^-3]
14 epsilon=0.9173
15 Cb0=1032 #[mg L^-1]
16 L=1.74e-4 #[m]
17 Va=0.5259 #[L mol^-1]
18 #n=varied #[Cp]
19 #ro=Varied #[kg m^-3]
20 #Mgamma=Varied #[g mol^-1]
21 #fi=Varied
22 kcb= 8.82E-7 # [ms-1]
23 kcy= 0.612 # [ms-1]
24 K=3.30E-2#
25 Dsy=4.22E-12# [m2s-1]
26 Dsb=2.09E-13# [m2s-1]
27
28
29 # Model Equations
30 fi1=1/(1+((kcb)/(K*kcy)))
31 print("fi1:", fi1)
32 fi2=(kcb/kcy)/(1+(kcb/K*kcy))
33 print("fi2:", fi2)
34 b1=(kcy*a*(1-fi1))/epsilon
35 print("b1:", b1)
36 b2=(kcb*a*(1-(fi2/K)))/(1-epsilon)
37 print("b2:", b2)
38 b3=(kcy*a*fi2)/(epsilon)
39 print("b3:", b3)
40 b4=(kcb*a*(fi1/K))/(1-epsilon)
41 print("b4:", b4)
42 #r1=(-(b1+b2)/2)+((((b1+b2)**2)-4*((b1*b2)-(b3*b4)))/2)**(0.5)
43 df((((b1+b2)**2)-4*((b1*b2)-(b3*b4))))**(0.5)
44 print("df:", df)
45 ef=df/2
46 print("ef:", ef)
47 cf=-(b1+b2)/2
48 print("cf:", cf)
49 bf=cf-ef
50 print("bf:", bf)
51 r1=(-(b1+b2)/2)+((((b1+b2)**2)-4*((b1*b2)-(b3*b4)))/(2))**(0.5)/2)
52 print("r1:", r1)
53 #r2=-(b1+b2)/2-((((b1+b2)**2)-4*((b1*b2)-(b3*b4)))/2)**(0.5)
54 r2=(-(b1+b2)/2)-((((b1+b2)**2)-4*((b1*b2)-(b3*b4)))/(2))**(0.5)/2)
55 print("r2:", r2)
56 c1=(r1+b1)/(r1-r2)
57 print("c1:", c1)
58 c2=(r2+b1)/(r2-r1)
59 print("c2:", c2)
60 c3=b3/(r1-r2)
61 print("c3:", c3)
62 c4=b3/(r2-r1)
63 print("c4:", c4)
```



```

64
65 #Solución analítica
66 t=np.linspace(0,25,1000)
67
68 #Concentración en soluto
69 Cbeta=Cb0*(c1*np.exp(r1*t)+c2*np.exp(r2*t))
70 plt.plot(t,Cbeta,'r--', linewidth=2.0, label='Cb')
71 plt.xlabel("Tiempo(h)"); plt.ylabel("C(t) (mg/L)")
72 plt.legend(loc='best')
73 plt.grid()
74 plt.show()
75
76 #Concentración en solvente
77 Cgamma=Cb0*(c3*np.exp(r1*t)+c4*np.exp(r2*t))
78 plt.plot(t,Cgamma,'b--', linewidth=2.0, label='Cy')
79 plt.xlabel("Tiempo (h)"); plt.ylabel("C(t) (mg/L)")
80 plt.legend(loc='best')
81 plt.grid()
82 plt.show()

```

Figura A1 Algoritmo de resolución del caso base en Python (spyder)

```

7 import numpy as np
8 import matplotlib.pyplot as plt
9 from scipy.integrate import odeint
10 from scipy.interpolate import lagrange
11
12 #Datos bebida
13 #a=8451 #5747.0 #[m2 m^-3] (8450.7 /710um)
14 Dp=0.000710 #[m]
15 a=6/Dp #[1/m]
16 print("a:",a)
17 epsilon=0.634724
18 Cb0=251.9 #[g L^-1]
19 L=3.55e-4 #[m]
20 Va=0.0288152 #[L mol^-1]
21 n=7.117E-5#[Pa*s] viscosidad dinámica bebida
22 ro=628.04 #[kg m^-3] #bebidaa extracto salida (corriente 11)
23 Mgamma=18 #[g mol^-1]
24 fi=2.6 #Varied
25 T=60
26 v=1.53153 #[m/s] #Velocidad de agitación
27 #Dpaleta=0.045
28 #vel=650 [rpm]
29 K=0.98
30 Dsb=3.209E-12 #[m2s-1]
31
32 #Cálculo de correlaciones
33 Dsy=((1.173*10E-16)*((fi*Mgamma)**(1/2))*T)/(n*(Va**(0.6)))
34 print("Dsy:",Dsy)
35 #Dsb=(kcb*4*L)/np.pi**2
36 #print("Dsb:",Dsb)
37 Sc=n/(ro*Dsy)
38 print("Sc:",Sc)
39 Dpi=6*(1-epsilon)/a
40 print("Dpi:",Dpi)
41 Re=(Dpi*ro*v)/n
42 print("Re:",Re)
43 Jd=(0.25*(Re**(-0.31)))/epsilon
44 print("Jd:",Jd)
45 kcy=(Jd*v)/(Sc**(2/3))
46 print("kcy:",kcy)
47 kcb=(((np.pi**2)*Dsb)/(4*L))
48 print("kcb:",kcb)
49 Bi=(kcy*L*K/Dsb)
50 print("Bi:",Bi)

```

```

52 # Model Equations
53 fi1=1/(1+((kcb)/(K*kcy)))
54 print("fi1:",fi1)
55 fi2=(kcb/kcy)/(1+(kcb/K*kcy))
56 print("fi2:",fi2)
57 b1=(kcy*a*(1-fi1))/epsilon
58 print("b1:", b1)
59 b2=(kcb*a*(1-(fi2/K)))/(1-epsilon)
60 print("b2:", b2)
61 b3=(kcy*a*fi2)/(epsilon)
62 print("b3:",b3)
63 b4=(kcb*a*(fi1/K))/(1-epsilon)
64 print("b4:",b4)
65 #r1=(-(b1+b2)/2)+((((b1+b2)*2)-4*((b1*b2)-(b3*b4)))/2)**(0.5)
66 df((((b1+b2)**(2))-4*((b1*b2)-(b3*b4))))**(0.5)
67 print("df:",df)
68 ef=df/2
69 print("ef:",ef)
70 cf=-(b1+b2)/2
71 print("cf:",cf)
72 bf=cf-ef
73 print("bf:",bf)
74 r1=(-(b1+b2)/2)+((((b1+b2)**(2))-4*((b1*b2)-(b3*b4))))**(0.5)/2)
75 print("r1:",r1)
76 #r2=-(b1+b2)/2-((((b1+b2)*2)-4*(b1*b2-b3*b4))/2)**(0.5)
77 r2=(-(b1+b2)/2)-((((b1+b2)**(2))-4*((b1*b2)-(b3*b4))))**(0.5)/2)
78 print("r2:",r2)
79 c1=(r1+b1)/(r1-r2)
80 print("c1:",c1)
81 c2=(r2+b1)/(r2-r1)
82 print("c2:",c2)
83 c3=b3/(r1-r2)
84 print("c3:",c3)
85 c4=b3/(r2-r1)
86 print("c4:",c4)

```

```

88 #Solución analítica
89 t=np.linspace(0,10800,100)
90
91 #Concentración en soluto
92 Cbeta=Cb0*(c1*np.exp(r1*t)+c2*np.exp(r2*t))
93 plt.plot(t,Cbeta,'r--', linewidth=2.0, label='Cb')
94 plt.xlabel("Tiempo(s)"); plt.ylabel("C(t) (g/L)")
95 plt.legend(loc='best')
96 plt.grid()
97 plt.show()
98
99 #Concentración en solvente
100 Cgamma=Cb0*(c3*np.exp(r1*t)+c4*np.exp(r2*t))
101 plt.plot(t,Cgamma,'b--', linewidth=2.0, label='Cy')
102 plt.xlabel("Tiempo (s)"); plt.ylabel("C(t) (g/L)")
103 plt.legend(loc='best')
104 plt.grid()
105 plt.show()
106

```

Figura A2 Algoritmo de resolución implementando datos de la bebida en Python (spyder)

```

1  = Model VINO
2
3  // Parameters and Variables
4  a As RealVariable (Description:" Specific surface area for mass transfer[m^-1]", Fixed,5747);
5  ep As RealVariable (Description:" Volume fraction of solvent[]", Fixed,0.9173);
6  cbo As RealVariable (Description:" Phenolic solid concentration [kg m^-3]", Fixed,1032);
7  L As RealVariable (Description:" Characteristic lenght by diffusive mass transfer[m]", Fixed,1.74e-4);
8  Va As RealVariable (Description:" Molar volume of solute [L mol^-1]", Fixed,0.5259);
9  kcb As RealVariable (Description:" Mass transfer coefficient of solid phase [m^-1]", Fixed, 8.82E-7);
10 kcy As RealVariable (Description:" Mass transfer coefficient of liquid phase[m^-1]", Fixed,0.612);
11 K As RealVariable (Description:" Distribution constant[]", Fixed,3.30E-2);
12 Dsy As RealVariable (Description:" Liquid phase Diffusivity[m^2*s^-1]", Fixed,4.22E-12);
13 Dsb As RealVariable (Description:" Solute phase Diffusivity[m^2*s^-1]", Fixed,2.09E-13);
14
15 fil As RealVariable;
16 fi2 As RealVariable;
17 b1 As RealVariable;
18 b2 As RealVariable;
19 b3 As RealVariable;
20 b4 As RealVariable;
21 r1 As RealVariable;
22 r2 As RealVariable;
23 c1 As RealVariable;
24 c2 As RealVariable;
25 c3 As RealVariable;
26 c4 As RealVariable;
27
28 // Correlations
29 fil=1/(1+((kcb)/(K*kcy)));
30 fi2=(kcb/kcy)/(1+(kcb/K*kcy));
31
32 b1=(kcy*a*(1-fil))/ep;
33 b2=(kcb*a*(1-(fi2/K)))/(1-ep);
34 b3=(kcy*a*fi2)/(ep);
35 b4=(kcb*a*(fil/K))/(1-ep);
36
37 r1=(-(b1+b2)/2)+((((b1+b2)^(2))-4*((b1*b2)-(b3*b4))))^(0.5)/2);
38 r2=(-(b1+b2)/2)-((((b1+b2)^(2))-4*((b1*b2)-(b3*b4))))^(0.5)/2);
39
40 c1=(r1+b1)/(r1-r2);
41 c2=(r2+b1)/(r2-r1);
42 c3=b3/(r1-r2);
43 c4=b3/(r2-r1);
44
45 // Domain
46 t As Domain (Length:25, SpacingPreference:1, NumSections:1);
47 Cbeta As Distribution1D (XDomain Is t);
48 Cgamma As Distribution1D (XDomain Is t);
49
50
51 // Boundary condition (Inlet)
52
53 Cbeta(0) = 1032;
54
55 Cgamma(0) = 0.0;
56
57 // Equations
58
59 = For i In [t.Interior + t.EndNode] DO
60 Cbeta(i)=cbo*(c1*EXP(r1*t(i))+c2*EXP(r2*t(i)));
61 Cgamma(i)=cbo*(c3*EXP(r1*t(i))+c4*EXP(r2*t(i)));
62 EndFor
63 End
64

```

Figura A3 Algoritmo de resolución del caso base en ACM

```

1  = Model BEBIDAFINAL
2
3  // DATA PARAMETERS AND VARIABLES
4
5  Dp As RealVariable
6      (Description:" Particle diameter[m]", Fixed, 0.000710);//( 180 - 710 um)
7  ep As RealVariable (Description:" Volume fraction of solvent[]", value:0.634724, spec:Fixed);
8  cbo As RealVariable (Description:" Phenolic solid concentration [kg m^-3]", Fixed,251.9);
9  L As RealVariable (Description:" Characteristic lenght by diffusive mass transfer[m]", Fixed,3.55e-4);
10 Vm As RealVariable (Description:" Molar volume of solute [L mol^-1]", Fixed,0.0288152);
11 u as viscosity (description:"Viscosity of the extractor mixture, Pa*s", value:7.117E-5, spec:Fixed);
12 rho as dens_mass (description:"Density of the extractor mix [kg/m^3]",Fixed,628.04);
13 PMY as molweight (description:"Molecular weight, kg/kmol", value:18, spec:Fixed);
14 fi As RealVariable (Description:" Dissociation Factor", Fixed,2.6);
15 T As temperature(description:"", value:60, spec:Fixed);
16 V as velocity (description:"Tangetial velocity [m/s]", value:1.53153, spec:Fixed);//( 650 rpm)
17 K As RealVariable (Description:" Distribution constant[]", Fixed,0.98);
18 Dsb As RealVariable (Description:" Solute phase Diffusivity[m^2*s^-1]", Fixed,3.209E-12);
19
20
21 Dpl As RealVariable
22     (Description:" agitator diameter [m]");
23 kcb As RealVariable (Description:" Mass transfer coefficient of solid phase [m^-1]");
24 kcy As RealVariable (Description:" Mass transfer coefficient of liquid phase[m^-1]");
25 Dsy As RealVariable (Description:" Liquid phase Diffusivity[m^2*s^-1]");
26 a As RealVariable (Description:" Specific surface area for mass transfer[m^-1]");
27 Re As RealVariable (Description:" Reynolds number[]", Free);
28 Jd As RealVariable(Description:" Chilton Colburn factor[]", Free);
29 Sc As RealVariable(Description:" Schmidt number[]", Free);
30
31 fil As RealVariable;
32 fi2 As RealVariable;
33 b1 As RealVariable;
34 b2 As RealVariable;
35 b3 As RealVariable;
36 b4 As RealVariable;
37 r1 As RealVariable;
38 r2 As RealVariable;
39
40 c1 As RealVariable;
41 c2 As RealVariable;
42 c3 As RealVariable;
43 c4 As RealVariable;
44
45 Pi AS RealVariable;
46 Pi.Spec : Fixed;
47 Pi : 3.142;
48
49 // CORRELATIONS
50 Eqn_a: a=6/Dp;//Specific surface for mass transfer
51 Eqn_Dpl: Dpl=(6*(1-ep))/a;// Agitator diameter
52
53 Eqn_Dsy: Dsy=((1.173*10^(-16)) * ((fi*PMY)^(0.5))^T)/(u*(Vm^(0.6)));// Wike-Chang correlation
54
55 Eqn_Sc: Sc=u/(Dsy*rho);//Schmidt number
56 Eqn_Re: Re=(Dpl*rho*V)/u;//Reynolds number
57 Eqn_Jd: Jd=(0.25*Re^-0.31)/ep;//Chilton and Colburn factor
58
59 Eqn_kcy: kcy=(Jd*V)/(Sc^(2/3));//Mass transfer coefficient of liquid phase
60 Eqn_kcb: kcb=(Dsb*(PI^(2)))/(4*L); //Mass transfer coefficient of solid phase
61
62 fil=1/(1+((kcb)/(K*kcy)));
63 fi2=(kcb/kcy)/(1+(kcb/K*kcy));
64
65 b1=(kcy*a*(1-fil))/ep;
66 b2=(kcb*a*(1-(fi2/K)))/(1-ep);
67 b3=(kcy*a*fi2)/(ep);
68 b4=(kcb*a*(fil/K))/(1-ep);
69
70 r1=(-(b1+b2)/2)+((((b1+b2)^(2))-4*((b1*b2)-(b3*b4))))^(0.5))/2);
71 r2=(-(b1+b2)/2)-((((b1+b2)^(2))-4*((b1*b2)-(b3*b4))))^(0.5))/2);
72
73 c1=(r1+b1)/(r1-r2);
74 c2=(r2+b1)/(r2-r1);
75 c3=b3/(r1-r2);
76 c4=b3/(r2-r1);

```

```

79 // Model
80 theta As Domain (Length:10000, SpacingPreference:100, NumSections:1);
81 Cbeta As DistributionID (XDomain Is theta);
82 Cgamma As DistributionID (XDomain Is theta);
83
84 Nodes As IntegerSet([0 + theta.Interior + theta.EndNode]);
85
86 // Boundary condition (Inlet)
87 Cbeta(0) = 251.9 ;
88 Cgamma(0) = 0.0;
89
90 = For i In [theta.Interior + theta.EndNode] DO
91   Cbeta(i)=cbo*(c1*EXP(r1*theta(i))+c2*EXP(r2*theta(i)));
92   Cgamma(i)=cbo*(c3*EXP(r1*theta(i))+c4*EXP(r2*theta(i)));
93 EndFor
94
95
96 //PORT
97 Feed as input MultiPort of SolidPort;
98 FeedName as StringParameter("IN");
99 FeedSubStreamNames as hidden stringset(Description:"Set of names of the substreams that are connected to the Feed");
100 FeedSubStreamNames: Union(Feed.Connection.SubStreamName)-"";
101
102 Outlet as output MultiPort of SolidPort;
103 OutletName as StringParameter("OUT");
104 OutletSubStreamNames as hidden stringset(Description:"Set of names of the substreams that are connected to the Outlet");
105 OutletSubStreamNames: Union(Outlet.Connection.SubStreamName)-"";
106
107 SubStreamNames as hidden stringset(Description:"Set of names of the substreams that are connected to the model");
108 // Ensure that the model equations are active only for those substreams that are connected to the Feed and Outlet multiports.
109 SubStreamNames: FeedSubStreamNames*OutletSubStreamNames;
110
111
112 = for i in SubStreamNames do
113
114   if ((FeedName+i) in Feed.ConnectionSet) and
115   = ((OutletName+i) in Outlet.ConnectionSet) then // check for matching sub streams
116
117     Outlet.connection(OutletName+i).SubStreamType: Feed.connection(FeedName+i).SubStreamType;
118     Outlet.connection(OutletName+i).h: 0.0;
119     Outlet.connection(OutletName+i).hm: 0.0;
120
121   = if (Feed.connection(FeedName+i).SubStreamType in ["MIXED", "CISOLID", "CIPSD"]) then
122     Outlet.connection(OutletName+i).F = Feed.connection(FeedName+i).F; // Equate Mole Flows
123     Outlet.connection(OutletName+i).h = Feed.connection(FeedName+i).h; // Equate Molar Enthalpy
124     Outlet.connection(OutletName+i).V = Feed.connection(FeedName+i).V; // Equate Molar Volume
125     Outlet.connection(OutletName+i).z = Feed.connection(FeedName+i).z; // Equate Mole Fractions
126   = else
127     Outlet.connection(OutletName+i).Fm = Feed.connection(FeedName+i).Fm; // Equate Mass Flows
128     Outlet.connection(OutletName+i).hm = Feed.connection(FeedName+i).hm; // Equate Mass Enthalpy
129     Outlet.connection(OutletName+i).Vm = Feed.connection(FeedName+i).Vm; // Equate Mass specific Volume
130     Outlet.connection(OutletName+i).zm = Feed.connection(FeedName+i).zm; // Equate Mass Fractions
131   endif
132
133     Outlet.connection(OutletName+i).T = Feed.connection(FeedName+i).T; // Equate Temperature
134     Outlet.connection(OutletName+i).P = Feed.connection(FeedName+i).P; // Equate Pressure
135
136     // Use same component list for output substreams as for input substreams
137     // Each substream may have a distinct component list
138     Outlet.connection(OutletName+i).componentlist: Feed.connection(FeedName+i).componentlist;
139
140     // Deal with substream attributes - PSD
141   = if (Feed.connection(FeedName+i).SubStreamType in ["CISOLID", "NC"]) then
142     = if (Feed.connection(FeedName+i).NIntervals > 0 ) then
143       Outlet.connection(OutletName+i).NIntervals: Feed.connection(FeedName+i).NIntervals;
144       Outlet.connection(OutletName+i).PSDZw = Feed.connection(FeedName+i).PSDZw;
145     endif
146   endif

```

```

148 // Deal with component attributes for conventional component substreams
149 = if (Feed.connection(FeedName+i).SubStreamType in ["MIXED","CISOLID"]) then
150     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR1:0;
151     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR2:0;
152     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR3:0;
153     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR4:0;
154     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR5:0;
155     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRA:0;
156     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRB:0;
157     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRC:0;
158     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRD:0;
159     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRE:0;
160     Outlet.connection(OutletName+i).CACLASS0:0;
161     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR1 = Feed.connection(FeedName+i).CAUSR1;
162     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR2 = Feed.connection(FeedName+i).CAUSR2;
163     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR3 = Feed.connection(FeedName+i).CAUSR3;
164     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR4 = Feed.connection(FeedName+i).CAUSR4;
165     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSR5 = Feed.connection(FeedName+i).CAUSR5;
166     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRA = Feed.connection(FeedName+i).CAUSRA;
167     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRB = Feed.connection(FeedName+i).CAUSRB;
168     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRC = Feed.connection(FeedName+i).CAUSRC;
169     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRD = Feed.connection(FeedName+i).CAUSRD;
170     Outlet.connection(OutletName+i).CAUSRE = Feed.connection(FeedName+i).CAUSRE;
171     Outlet.connection(OutletName+i).CACLASS0 = Feed.connection(FeedName+i).CACLASS0;
172 endif
173
174 // Deal with component attributes for non-conventional substreams
175 = if (Feed.connection(FeedName+i).SubStreamType in ["NC"]) then
176     Outlet.connection(OutletName+i).GENANAL:0.0;
177
178     Outlet.connection(OutletName+i).GENANAL = Feed.connection(FeedName+i).GENANAL;
179 endif
180 endif;
181 endfor;
182
183 End

```

**Figura A4 Algoritmo de resolución implementando datos de la bebida en ACM**

```

[ 0.          5.28553013  9.45050802 12.73249638 15.31869344 17.35661045
18.96248555 20.22791379 21.22507163 22.01083373 22.63001706 23.11793715
23.50242248 23.80540173 24.0441546  24.23229741 24.38055975 24.49739647
24.58946997 24.66203016 24.71921398 24.76428129 24.79980086 24.82779684
24.84986428]

```

**Figura A5 Datos de la gráfica de C vs t en la fase líquida del caso base en Python**



|                  |         |
|------------------|---------|
| Cgamma.Value(0)  | 0,0     |
| Cgamma.Value(1)  | 5,0974  |
| Cgamma.Value(2)  | 9,1526  |
| Cgamma.Value(3)  | 12,3787 |
| Cgamma.Value(4)  | 14,9452 |
| Cgamma.Value(5)  | 16,9869 |
| Cgamma.Value(6)  | 18,6112 |
| Cgamma.Value(7)  | 19,9034 |
| Cgamma.Value(8)  | 20,9314 |
| Cgamma.Value(9)  | 21,7493 |
| Cgamma.Value(10) | 22,3999 |
| Cgamma.Value(11) | 22,9175 |
| Cgamma.Value(12) | 23,3293 |
| Cgamma.Value(13) | 23,6569 |
| Cgamma.Value(14) | 23,9175 |
| Cgamma.Value(15) | 24,1248 |
| Cgamma.Value(16) | 24,2898 |
| Cgamma.Value(17) | 24,421  |
| Cgamma.Value(18) | 24,5254 |
| Cgamma.Value(19) | 24,6085 |
| Cgamma.Value(20) | 24,6746 |
| Cgamma.Value(21) | 24,7272 |
| Cgamma.Value(22) | 24,769  |
| Cgamma.Value(23) | 24,8023 |
| Cgamma.Value(24) | 24,8288 |
| Cgamma.Value(25) | 24,8499 |

**Figura A6** Tablas de datos de la gráfica de C vs t en la fase líquida del caso base en ACM

```
[1032.      973.37518325  927.17932718  890.77742956  862.0931219
  839.49023631  821.67948069  807.64489937  796.58592439  787.87171224
  781.0051614   775.59455836  771.33123487  767.97196189  765.32507616
  763.239548    761.59636678  760.30175272  759.28180783  758.47830087
  757.8453459   757.34678504   756.95412607   756.64491725   756.40146674]
```

**Figura A7** Tablas de datos de la gráfica de C vs t en la fase sólida del caso base en Python



|                 |         |
|-----------------|---------|
| Cbeta.Value(0)  | 1032,0  |
| Cbeta.Value(1)  | 975,462 |
| Cbeta.Value(2)  | 930,484 |
| Cbeta.Value(3)  | 894,702 |
| Cbeta.Value(4)  | 866,236 |
| Cbeta.Value(5)  | 843,591 |
| Cbeta.Value(6)  | 825,575 |
| Cbeta.Value(7)  | 811,244 |
| Cbeta.Value(8)  | 799,842 |
| Cbeta.Value(9)  | 790,773 |
| Cbeta.Value(10) | 783,557 |
| Cbeta.Value(11) | 777,817 |
| Cbeta.Value(12) | 773,251 |
| Cbeta.Value(13) | 769,619 |
| Cbeta.Value(14) | 766,729 |
| Cbeta.Value(15) | 764,431 |
| Cbeta.Value(16) | 762,602 |
| Cbeta.Value(17) | 761,148 |
| Cbeta.Value(18) | 759,991 |
| Cbeta.Value(19) | 759,071 |
| Cbeta.Value(20) | 758,339 |
| Cbeta.Value(21) | 757,757 |
| Cbeta.Value(22) | 757,295 |
| Cbeta.Value(23) | 756,927 |
| Cbeta.Value(24) | 756,634 |
| Cbeta.Value(25) | 756,401 |

**Figura A 8 Tablas de datos de la gráfica de C vs t en la fase sólida del caso base en ACM**

**Tabla A1 Tablas de los parámetros de la solución analítica implementando datos de la bebida**

| <b>Variable</b> | <b>Valor</b>           | <b>Unidad</b> |
|-----------------|------------------------|---------------|
| $b_1$           | $3.03 \times 10^{-4}$  | $[s^{-1}]$    |
| $b_2$           | $5.16 \times 10^{-4}$  | $[s^{-1}]$    |
| $b_3$           | $2.97 \times 10^{-4}$  | $[s^{-1}]$    |
| $b_4$           | $5.27 \times 10^{-4}$  | $[s^{-1}]$    |
| $\varphi_1$     | 0.999                  | -             |
| $\varphi_2$     | $7.36 \times 10^{-7}$  | -             |
| $r_1$           | $1.43 \times 10^{-10}$ | $[s^{-1}]$    |
| $r_2$           | $-8.19 \times 10^{-4}$ | $[s^{-1}]$    |
| $c_1$           | 0.37                   | -             |
| $c_2$           | 0.63                   | -             |
| $c_3$           | 0.36                   | -             |
| $c_4$           | -0.36                  | -             |

**Tabla A2 Datos faltantes considerando el estudio “Mathematical modeling of caffeine kinetic during solid–liquid extraction of coffee beans” [Vargas.,2007]**

| Parámetros   | Estimación de parámetros  | Método de medición  | Correlación |
|--|---|---|-------------|
| Constante de transferencia de masa en el soluto ( $K_\beta$ )    | Se obtuvo por <i>regresión no lineal de la cinética de convección forzada</i> .   | <b>Sistema:</b><br>Granos de café/ <u>soluto</u> : cafeína<br><u>solvente</u> : agua<br><br><b>Descripción:</b><br>Se colocaron cien gramos de judías verdes vaporizadas y remojadas en un matraz Erlenmeyer de 1 L con agua como disolvente. Las corridas de equilibrio se desarrollaron con 200, 400, 500 y 800 mL de agua. La cinética se desarrolló con 500 mL de agua. La extracción se desarrolló a convección natural y forzada, y con temperatura constante de 90 °C.<br>En ambos tipos de extracción, se controló la concentración de cafeína en dos fases durante el proceso. En convección natural el matraz con la muestra se mantuvo en un baño de temperatura controlada (a 90 °C) sin agitar. En convección forzada las muestras se mantuvieron en el mismo baño con agitación de 200 rpm.<br><br><b>Fuente:</b><br>doi:10.1016/j.jfoodeng.2006.10.011 | ✓           |
| Constante de transferencia de masa en el solvente ( $K_\gamma$ ) | Se calculó con la siguiente correlación, sugerida por Geankoplis (1993):<br>$J_D = \frac{0.25Re^{-0.31}}{\varepsilon}$ $K_\gamma = \frac{J_D v}{Sc^{2/3}}$ $Re = \frac{D_p \rho_\gamma v}{\mu_\gamma}$ $Sc = \frac{\mu_\gamma}{D_{s\gamma} \rho_\gamma}$ $D_p = \frac{6(1 - \varepsilon)}{a}$ |   | ✓           |
| Coefficiente de difusividad del soluto ( $D_{s\beta}$ )          | Se calculó con la siguiente correlación:<br>$K_\beta = \frac{\pi^2 D_{s\beta}}{4L}$   |   | X           |
| Coefficiente de difusividad del solvente ( $D_{s\gamma}$ )       | Se estimó a partir de la correlación de Wilke-Chang<br>$D_{s\gamma} = \frac{1.173 * 10^{-16} (\varphi M_\gamma)^{1/2} T}{n V_A^{0.6}}$  |   | ✓           |
| Constante de equilibrio (K)                                      | Se calculó la constante de distribución mediante <i>regresión lineal de la concentración de cafeína en equilibrio</i> .<br>A su vez, la literatura indica que $K \approx 1$ debido a el rango de baja concentración (hecho bien conocido para material vegetal). (Simeonov et al., 2017)      |   | X           |
| Coefficiente de disociación del líquido ( $\emptyset$ )          | Normalmente, se encuentra entre los valores de 2,6 para agua y 1,0 para disolventes no asociado. (Chang & Wilke, 1955)  | -   |             |