



**UNIVERSIDAD MICHOACANA
DE SAN NICOLÁS DE HIDALGO**



**DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA**

**“DESARROLLO Y SIMULACIÓN DEL PROCESO DE
PRODUCCIÓN DE MEZCAL. ALTERNATIVA
TECNOLÓGICA PARA LOS PRODUCTORES
MICHOACANOS”**

TESIS presentada por:

RENÉ LEOBARDO MARTÍNEZ CORONA

**A la División de Estudios de Posgrado de la Facultad
de Ingeniería Química como requisito parcial
para obtener el grado de:**

**MAESTRO EN CIENCIAS
EN
INGENIERÍA QUÍMICA**

Asesora: Dra. Ma. del Carmen Chávez Parga

Morelia, Michoacán. Febrero de 2013.

DEDICATORIA

Esta Investigación la dedico a la familia Martínez Corona integrada por: mi padre Gaspar Martínez Macías, mi madre Guadalupe Corona García, y mis hermanos Juan Carlos Martínez Corona y Luis Enrique Martínez Corona. Así como a mi abuela Dolores García Pantoja y a mi tía Alma Rosa Corona García. A todos ellos por ser la fuerza que impulsa el motor del crecimiento profesional de mi vida y quienes son el motivo de mi ser.

GLOSARIO

Abocado: procedimiento para suavizar el sabor del Mezcal, mediante la adición de uno o más productos naturales, saborizantes o colorantes permitidos en las disposiciones legales correspondientes.

Azúcares reductores: monosacáridos, principalmente fructosa y glucosa que se obtienen de la hidrólisis de polisacáridos complejos, los cuales son transformados en alcoholes por levaduras durante la fermentación alcohólica.

Fermentación alcohólica: es el proceso bioquímico en el cual los azúcares reductores son convertidos en alcoholes, principalmente en etanol, a través de la ruta metabólica de las levaduras.

Inóculo: cantidad de levaduras crecidas en su periodo máxima de crecimiento (fase exponencial), que son utilizadas para iniciar una fermentación.

Levadura: microorganismo unicelular importante por su capacidad para realizar la fermentación de hidratos de carbono y producir distintas sustancias, entre ellas el alcohol.

Mieles amargas: conjunto de compuestos de exudados de agave y azúcares estructurales no transformados en la cocción del agave para la obtención de Mezcal.

Mosto muerto: jugo (zumo) obtenido del agave después de su fermentación, contiene los compuestos de la transformación de los azúcares reductores por las levaduras.

Nutrientes: son compuestos que causan el aumento, actividad o vigor de algún microorganismo o grupo de ellos. Principalmente fosfatos, nitratos, silicatos, cobre, magnesio, cobalto y hierro.

Sui generis: es la denominación que se le da a un género o especie muy singular, única y excepcional.

SPD®: Simulador SuperPro Designer®.

Vinaza: Subproducto líquido de la destilación del mosto muerto en la producción de Mezcal.

RESUMEN

“DESARROLLO Y SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE MEZCAL. ALTERNATIVA TECNOLÓGICA PARA LOS PRODUCTORES MICHOACANOS”

Por: René Leobardo Martínez Corona
Asesora: Dra. Ma. del Carmen Chávez Parga
Febrero de 2013

Michoacán es un estado con vasta producción de agave mezcalero y mezcal, su obtención se efectúa de manera artesanal, produciéndose 300,000 L/año. Después de 10 años de gestión se incluirán a 29 municipios del estado en la declaratoria “Denominación de Origen Mezcal” beneficiándose de ésta. Para lograr el escalamiento de la fabricación artesanal a la producción industrial esta investigación toma como base los simuladores SuperPro Designer® y Aspen Plus®, así como el conocimiento de las operaciones unitarias, equipos de procesamiento, tipos de materia prima, experiencia ancestral e información científica realizada por los estados que conforman la denominación antes mencionada. La metodología consistió en establecer cada una de las etapas del proceso de producción: cocción, molienda, fermentación y destilación; utilizando agave mezcalero como materia prima en el simulador SPD®, que por su naturaleza modular permitió el empleo de equipos para la representación de las operaciones unitarias que no están incluidas dentro del software, mientras que la destilación se realizó en Aspen Plus® v.7.2 debido a que SPD® v.8.0 no cuenta con los parámetros de interacción de los compuestos presentes en el mosto muerto necesarios para el modelo termodinámico NRTL en el cálculo del ELV. Se determinó la temperatura, tiempo de lote y configuración de las etapas del proceso mediante estudios de sensibilidad realizados en los simuladores, variables con las que se obtuvieron 1,890 L de mezcal 50.5 %V a partir de 10,000 kg de agave mezcalero con 22% m/m de azúcares reductores. La presente investigación es una herramienta de gran importancia para que los productores michoacanos, conozcan sus procesos, implementen tecnologías de procesamiento, tecnifiquen su fabricación artesanal, cumplan con los requerimientos de la NON-070, mejoren los rendimientos y obtengan un producto con características organolépticas constantes que les permita competir con el mercado nacional e internacional.

ABSTRACT

“DEVELOPMENT AND PROCESS SIMULATION OF MEZCAL PRODUCTION. ALTERNATIVE TECHNOLOGY FOR MICHOACAN PRODUCERS”

Presenting: Rene Leobardo Martinez Corona

Adviser: PhD. Ma. del Carmen Chavez Parga

February 2013

Michoacan is a Mexican state with an extensive production of mezcal and mezcal agave, their preparation is made in a traditional way, with an average production of 300,000 L/year. After 10 years of political efforts to include 29 Michoacan municipalities within the declaration "Denominación de Origen de Mezcal" (Mezcal Protected Designation of Origin), finally this goal was achieved recently; thereby producing municipalities will benefit greatly. In order to achieve the scaling of the process from a crafted level to an industrial scale, this work takes advantage of SuperPro Designer® and Aspen Plus® simulators. The knowledge about unit operations, process equipment, and material types, the ancestral experience and the scientific research previously developed by the states within the Mezcal PDO are also considered. The methodology consisted in the establishment of each stage from the production process: cooking, crushing, fermentation and distillation using mezcal agave as raw material in the SPD® simulator, which, by its modular nature, allows the use of equipment for the representation of the unitary operations that are not included within the software. On the other hand, the distillation was performed on Aspen Plus® v.7.2, because SPD® v.8.0 has no interaction parameters for the compounds present in the "Mosto Muerto" (which is the name the producers give to fermented juice from agave), that are necessary in the NRTL thermodynamic model for calculating the VLE. Temperature, time batch and configuration of the process steps were determined by sensitivity studies performed on simulators. Using these variables, it was possible to obtain 1.890 L of mezcal 50.5%V from 10,000 kg of mezcal agave with 22% m/m of reducing sugars. The present investigation is a very important tool for Michoacan producers, which will enable them to know their processes, to implement processing technologies, to technify the crafted production, to observe the NOM-070 requirements, to improve their yields and to obtain a product with constant organoleptic characteristics. Certainly, all those things will allow them to compete in the national and international market.

ÍNDICE DE CONTENIDO

| | |
|---|-----|
| DEDICATORIA | ii |
| GLOSARIO | iii |
| RESUMEN | iv |
| ABSTRACT | v |
| ÍNDICE DE CONTENIDO | vi |
| LISTA DE TABLAS | ix |
| LISTA DE FIGURAS | x |
| NOMENCLATURA | xii |
| AGRADECIMIENTOS | xv |
| CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN | 16 |
| 1.1 Planteamiento del problema..... | 17 |
| 1.2 Justificación | 17 |
| 1.3 Hipótesis | 18 |
| 1.4 Objetivo general..... | 18 |
| 1.5 Objetivos específicos | 18 |
| 1.6 Antecedentes | 18 |
| CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO | 21 |
| 2.1 El mezcal..... | 21 |
| 2.2 Organismos reguladores de la calidad del mezcal | 21 |
| 2.2.1 Consejo Mexicano Regulador de la Calidad del Mezcal | 22 |
| 2.3 Denominación de Origen Mezcal en México | 23 |
| 2.4 Tipos de agaves utilizados en la producción de mezcal | 24 |
| 2.5 Michoacán..... | 25 |
| 2.5.1 Regiones productoras de mezcal en Michoacán | 25 |
| 2.5.2 Agaves utilizados en la producción de mezcal en Michoacán | 26 |
| 2.5.3 Volumen de producción de mezcal en Michoacán..... | 27 |
| 2.6 El Proceso de producción del mezcal | 28 |
| 2.6.1 La cocción | 29 |
| 2.6.1.2 Cambios fisicoquímicos durante el cocimiento del agave | 29 |
| 2.6.1.3 Hidrólisis de la inulina | 29 |

| | |
|--|-----------|
| 2.6.1.4 Enolización, deshidratación y oxidación..... | 30 |
| 2.6.1.5 Reacciones de oscurecimiento no enzimático..... | 31 |
| 2.6.1.6 Caramelización..... | 31 |
| 2.6.1.7 Reacciones de Maillard..... | 31 |
| 2.6.1.8 Formación de metanol..... | 31 |
| 2.6.1.9 Otros compuestos en el cocimiento..... | 31 |
| 2.6.2 La molienda..... | 32 |
| 2.6.2.1 La formulación..... | 32 |
| 2.6.3 La fermentación..... | 32 |
| 2.6.3.1 Importancia del inóculo..... | 33 |
| 2.6.3.2 Balances atómicos y moleculares en fermentadores..... | 34 |
| 2.6.4 La destilación..... | 37 |
| 2.7 Simulación de procesos químicos..... | 38 |
| 2.8 Simulación de procesos en Ingeniería Química..... | 39 |
| 2.9 El simulador SuperPro Designer (SPD®) y Aspen Plus®..... | 40 |
| 2.9.1 Componentes principales de SPD®..... | 40 |
| 2.9.2 Información requerida por SPD®..... | 41 |
| CAPÍTULO III. METODOLOGÍA..... | 42 |
| 3.1 La cocción..... | 42 |
| 3.1.2 Caracterización de la materia prima..... | 42 |
| 3.1.3 Especificación de las variables de diseño para la cocción..... | 44 |
| 3.1.4 Análisis de sensibilidad para la cocción..... | 45 |
| 3.1.5 Simulación de la cocción..... | 47 |
| 3.2 La molienda..... | 50 |
| 3.2.1 Caracterización de la corriente de entrada a la molienda..... | 50 |
| 3.2.2 Especificación de las variables de diseño para la molienda..... | 51 |
| 3.2.3 Simulación de la molienda..... | 51 |
| 3.2.4 Formulación del jugo de agave..... | 51 |
| 3.3 La fermentación..... | 52 |
| 3.3.1 Caracterización de la corriente de entrada: tina de crecimiento y fermentador... | 53 |
| 3.3.2 Cálculo de los rendimientos a partir de sustrato..... | 53 |

| | |
|--|-----------|
| 3.3.3 Especificación de las variables de diseño para el crecimiento de inóculo y fermentación..... | 54 |
| 3.3.4 Análisis de sensibilidad para la tina de crecimiento y fermentador..... | 55 |
| 3.3.5 Simulación de la fermentación..... | 55 |
| 3.4 La destilación..... | 57 |
| 3.4.1 Caracterización de la corriente de entrada a la columna de destilación..... | 58 |
| 3.4.2 Especificación de las variables de diseño en la destilación..... | 59 |
| 3.4.3 Análisis de sensibilidad para la destilación..... | 61 |
| 3.4.4 Simulación de la destilación..... | 63 |
| CAPÍTULO IV. ANÁLISIS DE RESULTADOS..... | 64 |
| 5.1 La cocción..... | 64 |
| 5.2 La molienda..... | 67 |
| 5.3 La formulación..... | 69 |
| 5.4 La fermentación..... | 70 |
| 5.5 La destilación..... | 75 |
| CAPÍTULO V. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES..... | 83 |
| 5.1 Conclusiones..... | 83 |
| 5.2 Recomendaciones..... | 83 |
| BIBLIOGRAFÍA..... | 84 |
| APÉNDICES..... | 89 |
| A. ALTA Y REGISTRO DE COMPONENTES EN LA BASE DE DATOS DE SPD® | 89 |
| B. BALANCES ATÓMICOS, MOLECULARES Y MÉTODO DE GAUSS PARA EL CÁLCULO DE LOS RENDIMIENTOS..... | 92 |
| C. INGRESO DE INFORMACIÓN CINÉTICA PARA LAS REACCIONES DE HIDRÓLISIS Y DEGRADACIÓN..... | 95 |
| D. TABLAS DE ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PARA LA COCCIÓN, FERMENTACIÓN Y DESTILACIÓN..... | 97 |
| E. DIAGRAMA COMPLETO DEL PROCESO..... | 104 |

LISTA DE TABLAS

| Tabla | Título | Página |
|-------|---|--------|
| 1 | Especificaciones físicas y químicas del mezcal | 22 |
| 2 | Ciclos y Perenes 2011; Riego + Temporal: Agave. Estado de Michoacán | 27 |
| 3 | Volumen de producción de mezcal en Michoacán | 28 |
| 4 | Composición general de las piñas de agave | 43 |
| 5 | Composición del agave y compuestos volátiles mayoritarios | 43 |
| 6 | Componentes registrados en SPD® | 46 |
| 7 | Composición general, volátiles y otros compuestos del mezcal | 47 |
| 8 | Cantidad de compuestos que conforman la entrada a la molienda | 51 |
| 9 | Cantidad de compuestos del 10% del jugo formulado | 53 |
| 10 | Cantidad de compuestos del 90% de jugo formulado | 53 |
| 11 | Cantidad de compuestos en la alimentación al destilador | 58 |
| 12 | Grados de libertad para los equipos | 60 |
| 13 | Especificación de las variables | 61 |
| 14 | Balance de masa en el reactor para la cocción de las piñas de agave | 65 |
| 15 | Tiempo y volumen total de lote para la cocción | 67 |
| 16 | Balance de masa para el conjunto de equipos en la molienda | 67 |
| 17 | Tiempo de operación para la molienda | 68 |
| 18 | Balance de masa para la formulación | 69 |
| 19 | Balance de masa para la tina de crecimiento | 71 |
| 20 | Tiempo y volumen de lote para la tina de crecimiento de inóculo | 72 |
| 21 | Balance de masa para el fermentador principal | 73 |
| 22 | Tiempo y volumen de lote para el fermentador | 74 |
| 23 | Componentes que conforman el mezcal “Mosto filtrado” | 75 |
| 24 | Temperatura de ebullición de los compuestos del mezcal | 75 |
| 25 | Análisis con el modelo termodinámico Wilson | 76 |
| 26 | Análisis con el modelo termodinámico NRTL | 76 |
| 27 | Análisis con el modelo termodinámico UNIQUAQ | 77 |
| 28 | Balance de masa en la columna de destilación | 78 |
| 29 | Mezcal simulado vs NOM-070 | 81 |
| 30 | Tiempo estimado del proceso | 81 |
| 31 | Análisis de sensibilidad para la cocción a 96° C | 97 |
| 32 | Análisis de sensibilidad para la cocción a 100° C | 97 |
| 33 | Análisis de sensibilidad para la cocción a 106° C | 98 |
| 34 | Análisis de sensibilidad para la cocción a 110° C | 98 |
| 35 | Análisis de sensibilidad para latina de crecimiento, 8 kg de levadura, 2 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y 30 °C | 99 |

| Tabla | Título | Página |
|--------------|---|---------------|
| 36 | Análisis de sensibilidad para la tina de crecimiento, 10 kg de levadura, 3.5 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y $30 \text{ }^\circ\text{C}$ | 99 |
| 37 | Análisis de sensibilidad para el fermentador, 32 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y $30 \text{ }^\circ\text{C}$ | 100 |
| 38 | Análisis de sensibilidad para un destilado de 80 kg/h, variando N, (L/D) y localización de la alimentación. | 101 |
| 39 | Análisis de sensibilidad para un destilado de 90 kg/h, variando N, (L/D) y localización de la alimentación. | 101 |
| 40 | Análisis de sensibilidad para un destilado de 100 kg/h, variando N, (L/D) y localización de la alimentación. | 101 |
| 41 | Análisis de sensibilidad para 10 etapas de equilibrio, variando la localización de la alimentación, obteniéndose el %V de etanol | 102 |
| 42 | Análisis de sensibilidad para 10 etapas de equilibrio, variando el reflujo (L/D), obteniéndose el %V de etanol | 102 |
| 43 | Comportamiento del %V de etanol a lo largo de las 10 etapas | 102 |
| 44 | Comportamiento de la temperatura a lo largo de las 10 etapas | 103 |

LISTA DE FIGURAS

| Figura | Título | Página |
|------------------|--|---------------|
| 1 | Denominación de origen mezcal en México | 23 |
| 2, 3, 4, 5, 6, 7 | Maguey espadín, Maguey weberi mezcalero, Maguey patotorum mezcalero, Maguey verde, Maguey tequilero, Maguey cupreata mezcalero | 24 |
| 8 | Municipios de Michoacán que se pidió que se incluyeran a la “Denominación de Origen Mezcal” | 26 |
| 9 | Proceso de producción de mezcal | 28 |
| 10 | La inulina | 30 |
| 11 | Crecimiento de levadura en cultivo por lote | 33 |
| 12 | Diagrama esquemático de un fermentador | 34 |
| 13 | Autoclave | 42 |
| 14 | Autoclave piloto | 44 |
| 15 | Reactor cinético por lote | 47 |
| 16 | Parámetros cinéticos para la inulina | 48 |
| 17 | Parámetros cinéticos para la fructosa | 49 |
| 18 | Parámetros cinéticos para la glucosa | 49 |
| 19 | Equipos que representan la molienda | 50 |
| 20 | Formulación del jugo de agave | 52 |

| Figura | Título | Página |
|---------------|--|---------------|
| 21 | Diagrama del crecimiento de inóculo | 52 |
| 22 | Diagrama de la fermentación y filtración | 52 |
| 23 | Parámetros cinéticos para fructosa y glucosa en la tina de crecimiento y fermentador | 57 |
| 24 | Torres de destilación en Aspen Plus® | 58 |
| 25 | Esquema de una torre de destilación | 59 |
| 26 | 20 horas de cocimiento a 100° C | 64 |
| 27 | 10 horas de cocimiento a 100° C | 65 |
| 28 | Análisis de sensibilidad para la tina de crecimiento de inóculo | 70 |
| 29 | Análisis de sensibilidad para el fermentador | 72 |
| 30 | Perfil de temperatura en cada etapa | 79 |
| 31 | Perfil de % V de etanol en cada etapa | 79 |
| 32 | Perfil de % V de etanol variando el reflujo | 80 |
| 33 | Perfil de % V de etanol variando la alimentación | 80 |
| 34 | Registro de un nuevo componente | 90 |
| 35 | Definición del compuesto | 91 |
| 36 | Propiedades del compuesto | 91 |
| 37 | Reacciones cinéticas por lote | 95 |
| 38 | Balace estequiométrico para las reacciones | 96 |
| 39 | Cinéticas de reacción | 96 |
| 40 | Diagrama completo del proceso | 104 |

NOMENCLATURA

| SÍMBOLO | DEFINICIÓN | UNIDADES |
|----------------------------|---|--------------|
| A | Inulina | $g * L^{-1}$ |
| B* | Azúcares reductores | $g * L^{-1}$ |
| C* | Compuestos de degradación | $g * L^{-1}$ |
| S | Sustrato | $g * L^{-1}$ |
| N | Fuente de nitrógeno | $g * L^{-1}$ |
| B, X | Biomasa producida | $g * L^{-1}$ |
| P | Producto | $g * L^{-1}$ |
| C | Dióxido de carbono | $g * L^{-1}$ |
| W | Agua | $g * L^{-1}$ |
| N ₂ | Nitrógeno | - |
| O ₂ | Oxígeno | - |
| C _S | Moles de carbono por C mol de sustrato | mol |
| C _N | Moles de carbono por C mol de fuente de nitrógeno | mol |
| C _B | Moles de carbono por C mol de biomasa | mol |
| C _P | Moles de carbono por C mol de producto | mol |
| C _C | Moles de carbono por C mol de dióxido de carbono | mol |
| N _S | Moles de átomos de nitrógeno por C mol de sustrato | |
| N _N | Moles de átomos de nitrógeno por C mol de fuente de nitrógeno | mol |
| N _B | Moles de átomos de nitrógeno por C moles de biomasa | mol |
| N _P | Moles de átomos de nitrógeno por C moles de producto | mol |
| N _{N₂} | Moles de átomos de nitrógeno por mol de nitrógeno molecular | mol |
| H _S | Moles de átomos de hidrógeno por C moles de sustrato | |
| H _N | Moles de átomos de hidrógeno por C moles de fuente de nitrógeno | mol |
| H _B | Moles de átomos de hidrógeno por C moles de biomasa | mol |
| H _P | Moles de átomos de hidrógeno por C moles de producto | mol |
| H _W | Moles de átomos de nitrógeno por mol de agua | mol |
| O _S | Moles de átomos de oxígeno por C moles de sustrato | mol |
| O _N | Moles de átomos de oxígeno por C moles de fuente de nitrógeno | mol |
| O _B | Moles de átomos de nitrógeno por C moles de biomasa | mol |
| O _P | Moles de átomos de oxígeno por C moles de producto | mol |
| O _W | Moles de átomos de hidrógeno por mol de agua | mol |

| SÍMBOLO | DEFINICIÓN | UNIDADES |
|-----------------|--|--------------------------|
| O_{O_2} | Moles de átomos de oxígeno por mol de oxígeno molecular | mol |
| $(\dot{N}_I)_i$ | Flujo molar de la especie I en la corriente i | mol |
| $Y_{B/S}$ | Rendimiento de biomasa producida a partir de sustrato consumido | - |
| $Y_{P/S}$ | Rendimiento de etanol producido a partir de sustrato consumido | - |
| $Y_{N/S}$ | Rendimiento de nitrógeno consumido a partir de sustrato consumido | - |
| $Y_{O_2/S}$ | Rendimiento de oxígeno consumido a partir de sustrato consumido | - |
| $Y_{W/S}$ | Rendimiento de agua consumida a partir de sustrato consumido | - |
| $Y_{C/S}$ | Rendimiento de dióxido de carbono producido a partir de sustrato consumido | - |
| C_A | Concentración de inulina | $g * L^{-1}$ |
| C_{B^*} | Concentración de azúcares reductores | $g * L^{-1}$ |
| C_{C^*} | Concentración de compuestos de degradación | $g * L^{-1}$ |
| V | Volumen del reactor | L |
| k_h | Constante de rapidez de hidrólisis | s^{-1} |
| k_d | Constante de rapidez de degradación | s^{-1} |
| C_p | Capacidad calorífica | $J * gmol^{-1} * K^{-1}$ |
| ΔH_i | Calores de reacción exotérmico | $J * gmol^{-1}$ |
| T_M | Temperatura de las paredes del reactor | $^{\circ}C$ |
| T | Temperatura | $^{\circ}C$ |
| PM | Peso molecular | $g * mol^{-1}$ |
| ρ | Densidad | $g * L^{-1}$ |
| T_b | Temperatura de ebullición | $^{\circ}C$ |
| T_c | Temperatura crítica | $^{\circ}C$ |
| P_c | Presión crítica | Bar |
| V_c | Volumen crítico | $cm^3 * mol^{-1}$ |
| Z_c | Factor de compresibilidad crítico | - |
| Ω | Omega | - |
| E_h | Energía de activación para la hidrólisis | $KJ * Kmol^{-1}$ |
| E_d | Energía de activación para la degradación | $KJ * Kmol^{-1}$ |
| A_h | Factor preexponencial de Arrhenius | - |
| dS | Variación de la concentración de sustrato | g de sustrato |
| dX | Variación de la concentración de biomasa | g de biomasa |

| SÍMBOLO | DEFINICIÓN | UNIDADES |
|--------------------|--|-----------------------------|
| dP | Variación de la concentración de producto | g de producto |
| K_S | Constante de saturación de Monod | $\text{mg} * \text{L}^{-1}$ |
| μ | Velocidad específica de crecimiento | h^{-1} |
| μ_{max} | Velocidad máxima de crecimiento | h^{-1} |
| N | Número de etapas de equilibrio | - |
| Q_N | Flujo de calor en la etapa N | $\text{KJ} * \text{h}^{-1}$ |
| Q_C | Flujo de calor en el enfriador | $\text{KJ} * \text{h}^{-1}$ |
| Q_R | Flujo de calor en el ebullidor | $\text{KJ} * \text{h}^{-1}$ |
| Q_F | Flujo de calor en la etapa F | $\text{KJ} * \text{h}^{-1}$ |
| Q_{F+1} | Flujo de calor en la etapa F+1 | $\text{KJ} * \text{h}^{-1}$ |
| Q_{F-1} | Flujo de calor en la etapa F-1 | $\text{KJ} * \text{h}^{-1}$ |
| F | Flujo de alimentación | $\text{kg} * \text{h}^{-1}$ |
| D | Flujo de destilado | $\text{kg} * \text{h}^{-1}$ |
| B | Flujo de fondos | $\text{kg} * \text{h}^{-1}$ |
| L | Flujo de líquido hacia el ebullidor | $\text{kg} * \text{h}^{-1}$ |
| V_1 | Flujo de vapor a la salida del ebullidor | $\text{kg} * \text{h}^{-1}$ |
| V_N | Flujo de vapor a la salida de la etapa N | $\text{kg} * \text{h}^{-1}$ |
| L_R | Relación de reflujo (L/D) | $\text{kg} * \text{h}^{-1}$ |
| $\sum (N_V)_e$ | Sumatoria de las variables de los equipos | - |
| $\sum (N_E)_e$ | Sumatoria de las ecuaciones de los equipos | - |
| N_R | Corrientes interconectadas | - |
| N_A | Equipos que se repiten | - |
| $\sum (N_V)_U$ | Número de ecuaciones de la unidad | - |
| $\sum (N_E)_U$ | Número de ecuaciones de la unidad | - |
| N_A | Número de grados de libertad | - |

AGRADECIMIENTOS

A **Dios** por darme salud, tranquilidad, fortaleza y paciencia para concluir esta etapa de mi formación profesional, también por darme cuenta de que la ciencia no está desligada de la fe, especialmente cuando se trabaja con la vida ya que en cada ocasión en la que se terminan las respuestas a las preguntas esta él.

A la **Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo**, en específico a la **División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química** por permitirme formar parte de los alumnos en formación.

Al **Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología** por el apoyo económico proporcionado durante la formación como Maestro en Ciencias en Ingeniería Química.

A mis padres **Gaspar Martínez Macías** y **Guadalupe Corona García** porque me enseñaron a superar las adversidades incluso en la distancia, por los valores inculcados, por enseñarme a luchar por mis objetivos, por el amor y confianza incondicional dada para culminar esta etapa de mi vida.

En especial a la **M.C. María de Jesús Anguiano Galicia** por su compañía y apoyo en situaciones personales importantes, así como por haber despertado en mí el profundo interés por las Matemáticas y la Física que sirven como base para el análisis y entendimiento de este trabajo de investigación.

En especial al **M.C. Daniel Álvarez Barrera** por el valioso tiempo que me proporcionó para el entendimiento de conceptos y conocimiento en los diferentes software utilizados en esta investigación.

En especial a la **Dra. Ma. del Carmen Chávez Parga** por permitirme ser parte de su grupo de trabajo y por el apoyo e interés en el seguimiento de este proyecto de investigación.

Con especial respecto y aprecio a los doctores: **Elizabeth León Becerril**, **Rafael Maya Yescas**, **Agustín Jaime Castro Montoya** y **Juan Carlos González Hernández**, por el tiempo dedicado a la revisión de este escrito y a las valiosas aportaciones a esta investigación.

CAPÍTULO I. INTRODUCCIÓN

El mezcal es una bebida espirituosa que se fabrica de manera similar al tequila, obteniéndose de forma artesanal, semi-industrial e industrial. En la fabricación artesanal, el mezcal se elabora con trabajo familiar dirigido al autoconsumo y muy poco al mercado local. La fabricación semi-industrial también es de manera artesanal, pero por medio de una asociación de campesinos. Mientras tanto la fabricación industrial se encuentra en desarrollo (Cedeño y *col*, 2000). Antecedentes históricos y científicos mencionan que el proceso de producción está conformado por cuatro etapas principales: cocción del agave, molienda, fermentación y destilación (Colunga y *col*, 2004). A partir de la década de 1990 se inició una política de reconocimiento del sector mezcalero, comenzando con el otorgamiento de la Denominación de Origen Mezcal a los estados de Oaxaca, Guerrero, Durango, San Luis Potosí y Zacatecas, enlistándose en ésta una amplia variedad de agaves utilizados como materia prima para la elaboración del mismo (NOM-070-SCFI-1994), desde entonces se han incorporado nuevas tecnologías para el mejoramiento del proceso. Siendo Michoacán un estado con una vasta producción de agave mezcalero, tradición artesanal por la fabricación de sus mezcales y caracterizado por la utilización de técnicas desarrolladas conforme la experiencia, no contaba con la “Denominación de Origen Mezcal” hasta febrero de 2012 por motivos meramente políticos. Después de 10 años de gestión se incluirán a 29 municipios en esta declaratoria, permitiéndoles gozar de la protección, beneficios y obligaciones de la NOM-070 (Gallardo y *col*, 2008). Para esto es necesario realizar el desarrollo y simulación del análisis tecnológico del proceso industrial que servirá para que los productores michoacanos, quienes en gran medida desconocen de los procesos fisicoquímicos y biotecnológicos que gobiernan el proceso, implementen tecnología que les permitirá realizar el escalamiento de la fabricación artesanal a la industrial asegurándose del cumplimiento de los lineamientos de calidad organoléptica de la NOM-070. El empleo de las herramientas actuales: investigaciones específicas sobre cada etapa, técnicas experimentales y software que predigan el comportamiento del proceso de producción mediante los datos de entrada, serán necesarios para poder evaluar, interpretar y validar los rendimientos obtenidos mediante la simulación de la producción del mezcal.

1.1 Planteamiento del problema

Con la inclusión a la “Denominación de Origen Mezcal”, después de 10 años de gestión, el gobierno y los productores michoacanos se ven en la necesidad de cumplir con las especificaciones y retos que exige la NOM-070, para ofrecer al consumidor un mezcal con características organolépticas constantes, implementando tecnología de proceso que les permita determinar los rendimientos de mezcal a partir de sus agaves mezcaleros, ya que por sus técnicas tradicionales de fabricación, desconocen las condiciones de operación adecuadas para sus procesos.

1.2 Justificación

La tradición y la experiencia transmitida de manera oral entre pobladores de los municipios michoacanos que producen mezcal indican que la elaboración de esta bebida en el Estado se ha venido realizando desde hace más de 400 años. Registros realizados en 1,803 por Alexander Von Humbolt ya hablan sobre un aguardiente de alto contenido alcohólico llamado mezcal, bebida que era fabricaba clandestinamente en varios de los distritos de la antigua Valladolid, hoy Morelia (Cházaro y *col.*, 2004; Gallardo y *col.*, 2008).

Michoacán cuenta con un promedio de 6 mil 298 hectáreas de agave mezcalero que producen anualmente 300 mil litros de mezcal, sosteniendo 10 mil fuentes de empleo en 29 municipios del estado, caracterizándose esta producción por la forma artesanal y la utilización de equipos rústicos de manufactura (SIAP, 2011).

Luego de más de 10 años de gestiones, el Instituto Nacional de Propiedad Industrial dio autorización de la incorporación de Michoacán a la ampliación de la denominación de origen mezcal, una vez que entre en vigor esta disposición se publicará en el Diario Oficial de la Federación, y esta bebida dejará de ser nombrada simplemente como doble destilado de agave para ser reconocida como mezcal y proteger legalmente al destilado.

Este proyecto de investigación tiene la finalidad de dar a conocer a los productores michoacanos la conformación tecnológica del proceso de producción de mezcal, que les permitirá tecnificar, controlar, estandarizar y acelerar sus procesos para obtener un producto con características organolépticas de calidad, maximizando la producción,

competitivo con las marcas de otros estados y suficiente para satisfacer las necesidades del mercado local, nacional e internacional.

1.3 Hipótesis

Al desarrollar y simular el proceso de producción de mezcal utilizando los simuladores SuperPro Designer® y Aspen Plus®, éstos permitirán determinar las mejores condiciones de operación de cada una de las etapas que lo conforman, dando como resultado el conocimiento de los rendimientos de producto a partir de agave mezcalero, cumpliéndose con los estándares de calidad organoléptica de la NOM-070, para así escalar la fabricación artesanal a la industrial.

1.4 Objetivo general

Desarrollar y simular las etapas del proceso de producción de mezcal: cocción, molienda, fermentación y destilación mediante la utilización de los simuladores SuperPro Designer® y Aspen Plus® para determinar las mejores condiciones de operación de cada una, que permitan conocer el rendimiento de mezcal y su calidad organoléptica a partir de agave mezcalero.

1.5 Objetivos específicos

1. Especificar las variables de diseño de las etapas que conforman el proceso.
2. Realizar la simulación de la etapa de cocción, molienda, fermentación y destilación.
3. Proponer las mejores condiciones de operación para cada etapa.

1.6 Antecedentes

A partir del año de 1990 se inició una política de reconocimiento del sector mezcalero, comenzando con el otorgamiento de la “Denominación de Origen Mezcal” a los estados de Oaxaca, Guerrero, Durango, San Luis Potosí y Zacatecas. Estados que compartían en ese tiempo la manera artesanal de la fabricación de sus mezcales. Con el surgimiento de una normatividad reguladora: NOM-070-SCFI-1994, se especifican los lineamientos de la producción de mezcal, los tipos de agave para la fabricación, los máximos y mínimos físicos y químicos, los tipos de mezcales, por lo que comienzan los estudios de nuevas

tecnologías para el mejoramiento del proceso y cumplir con la calidad organoléptica requerida.

Estudios iniciados por Mancilla-Margalli y *col* (2002), en la primer etapa del proceso de producción, analizan los compuestos volátiles provenientes de las reacciones de Maillard en exudados de Agave tequilana Weber var. Azul durante el cocimiento. Recolectan jugos de agave de industrias tequileras a los cuales determinan color, concentración total de azúcares (°Brix), y fructosa, encontrando furanos, piranos, aldehídos entre otros; encontrando que el compuesto de Maillard más abundante fue el 5-(hidroximetil) furfural o (HMF). Por otra parte, pero también en el cocimiento, Michel-Cuello y *col* (2008), realizan una caracterización cualitativa y cuantitativa de los carbohidratos no estructurales que contiene el jugo de Agave *Salmiana* crudo e hidrolizado. Utilizan Cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), determinan la presencia de fructosa, glucosa, sacarosa, xilosa y maltosa, siendo fructosa el carbohidrato principal en jugos hidrolizados. Posteriormente, Vera-Guzmán y *col* (2009), evalúan los principales compuestos volátiles aromáticos mayoritariamente generados durante el cocimiento, la fermentación de mostos y su permanencia en el producto final (mezcal) de la especie de Agave *Augustifolia* Haw y Agave *Patotorum* Zucc, destilados con sistemas tradicionales de producción en los estados de Oaxaca. Identificaron y cuantificaron los compuestos volátiles mediante cromatografía de gases (CG), columnas capilares y estándares puros, encontrando que los volátiles mayoritarios en agaves cocidos así como en productos finales fueron etanol, metanol, ácido acético, 2-metil-1-butanol y 3-metil-1-butanol.

También en la cocción, García-Soto y *col* (2011), estudiaron la hidrólisis térmica del Agave *Salmiana*, proponiendo una cinética consecutiva que involucra la transformación de los fructanos a azúcares reductores y luego a furanos en un intervalo de temperaturas de 96° C a 116° C, completándose la hidrólisis a las 14 horas, tiempo en el cual las piñas han alcanzado la conversión máxima de azúcar y sean transferidas a la segunda etapa del proceso, donde son molidas para la extracción de azúcares mediante molinos automatizados y ser fermentadas.

En la tercer etapa del proceso, Escalante y *col* (2008); Lappe y *col* (2008), identifican levaduras *Saccharomyces cerevisiae* nativas que predominan en los mostos fermentados de

agave *Salmiana* y mezcal duranguense provenientes de la fermentación. En el mismo contexto, De León-Rodríguez y col (2007) optimizan las condiciones de fermentación utilizando la metodología de superficies de respuesta encontrando que a temperatura de 28° C se obtiene un crecimiento de levaduras de 2.06 g/L y una producción de etanol de 36.63 g/L. Por otro lado CIATEJ (2004) reporta que el tiempo de fermentación es de 24 a 72 horas, tiempo en el cual se han transformado todos los azúcares reductores.

Por último, en la etapa final, Íñiguez-Ledezma (2010) presenta los conceptos básicos de la destilación, utiliza la ecuación de Rayleigh comúnmente usada, y sigue vía esta ecuación la evolución de un mosto fermentado en la primera y segunda destilación. CIATEJ (2004), también Ibarra y col (2010) realizan publicaciones sobre el proceso obtención del tequila, donde explican las bases de la destilación y los tipos de destilación que se utilizan en las fábricas, técnicas que varían de una a otra, pero que coinciden y mantienen las características de la bebida. Por otro lado De León-Rodríguez y col (2008), caracterizan los compuestos volátiles en bebidas alcohólicas de agave: raicilla, sisal, tequila, mezcal, bacanora, sotol y pulque, utilizando Cromatografía de gases (GC). Encuentran la presencia de 105 compuestos diferentes, 11 fueron clasificados como compuestos mayoritarios y los otros como compuestos minoritarios.

Cada uno de los autores mencionados particulariza en cada una de las etapas del proceso de producción, proponen condiciones de operación sin considerar la fabricación en su conjunto, lo que provoca que haya muy poca información sobre los rendimientos a partir de materias primas utilizadas, sobre las mejores condiciones de procesado y así obtenerse un mezcal con características organolépticas constantes.

CAPÍTULO II. MARCO TEÓRICO

2.1 El mezcal

El mezcal es un líquido de olor y sabor *sui generis* de acuerdo a su tipo. Es incoloro o ligeramente amarillento cuando es reposado o añejado en recipientes de madera de roble blanco o encino, o cuando se aboque sin reposarlo o añejarlo. La norma NOM-070-SCFI reconoce dos tipos de mezcal de acuerdo al porcentaje de carbohidratos provenientes del agave que se utilice en su elaboración:

Tipo I. Mezcal 100% agave.- Es aquel que proviene de los mostos que única y exclusivamente contienen azúcares provenientes de un solo agave.

Tipo II. Mezcal. -Es aquel que proviene de los mostos a los que se les ha adicionado hasta un 20% de otros azúcares.

De acuerdo a las características adquiridas en etapas posteriores a la destilación y rectificación, el mezcal se clasifica en tres categorías:

- Mezcal joven
- Mezcal reposado
- Mezcal añejo o añejado

2.2 Organismos reguladores de la calidad del mezcal

La Norma Oficial Mexicana (NOM-070-SCFI-1994), publicada el 28 de noviembre de 1994, es el principal órgano regulador para la calidad del mezcal, aunque existen otras normas que también deben ser cumplidas. Estas normas tratan lo referente a:

- NOM-120-SSA1-1994. Prácticas de higiene y sanidad para el procesado de alimentos, bebidas no alcohólicas y alcohólicas.
- NOM-142-SSA1-1995. Especificaciones sanitarias de bebidas alcohólicas, etiquetado sanitario y comercial.
- NOM-030-SCFI-2006. Declaración de cantidad en la etiqueta, especificaciones, información comercial.

- NOM-106-SCFI-200. Características de diseño y condiciones de uso de la contraseña oficial.

La norma NOM-070-SCFI-1994, establece que el estado mexicano es propietario de la denominación Mezcal bajo los términos contenidos en la ley del Instituto Mexicano de Propiedad Industrial (IMPI) e incluye:

- La “Denominación de Origen Mezcal”, que es la protección territorial que se le da a un producto originario de la misma y cuyas características se deben exclusivamente al medio geográfico donde ésta se otorga.
- Las especificaciones químicas y físicas, donde se establecen los niveles máximos y mínimos de los compuestos regulados por la norma, tabla 1.
- Los tipos de agave para la fabricación, figuras 2, 3, 4, 5, 6, 7.
- Los tipos de mezcal.

Tabla 1. Especificaciones físicas y químicas del mezcal.

| Especificaciones físicas y químicas | | |
|---|---------------|---------------|
| | Mínimo | Máximo |
| % de alcohol en volumen a 20° C | 36 | 55 |
| Extracto seco (g/L) | 0.2 | 10 |
| Acidez total como ácido acético (mg/100 mL) | 0 | 170 |
| Alcoholes superiores (mg/100 mL) | 100 | 400 |
| Metanol (mg/100 mL) | 30 | 300 |

(NOM-070-SCFI-1994, 2011). Norma oficial mexicana 070.

Esta norma también condiciona la formación de un organismo para la evaluación de la conformidad que certifique el cumplimiento de la misma (COMERCAM).

2.2.1 Consejo Mexicano Regulador de la Calidad del Mezcal

El Consejo Mexicano Regulador de la Calidad del Mezcal (COMERCAM) es un organismo del sector privado con fines no lucrativos con personalidad jurídica propia, de alcance nacional que proporciona servicios de evaluación, que garantiza la calidad y originalidad del producto, realizando auditorías internas para constatar periódicamente el

cumplimiento de la norma NOM-070 y de las otras normas mencionadas (Cárdenas y col, 2011).

2.3 Denominación de Origen Mezcal en México

En 1997 se firmó el acuerdo de reconocimiento mutuo para la protección de las denominaciones de origen en el sector de bebidas espirituosas entre México y la Unión Europea, a través del cual se contemplan 193 distintas denominaciones de origen de bebidas destiladas; otorgándose las denominaciones relativas al tequila y mezcal a México.

En México, el Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial (IMPI) es el organismo que entre sus facultades, puede emitir declaratorias de protección a denominaciones de origen y autorizar el uso de las mismas. Dada la diversidad de orígenes en el mezcal, la iniciativa de gobiernos estatales y productores llevó a que en 1994 la Secretaría de Comercio y Fomento Industrial (SECOFI) emitiera la resolución mediante la cual se da la “Denominación de Origen Mezcal” a los estados de Oaxaca, Guerrero, San Luis Potosí, Durango, Zacatecas, Tamaulipas y Guanajuato, figura 1.



Figura 1. Denominación de origen mezcal en México. Oaxaca (1), Guerrero (2), Guanajuato (3), San Luis Potosí (4), Zacatecas (5), Durango (6) y Tamaulipas (7). Elaboración propia. Fuente: Valenzuela-Zapata, 2007.

2.4 Tipos de agaves utilizados en la producción de mezcal

Los agaves son plantas herbáceas, en algunos casos arborescentes. Sus hojas están dispuestas en forma de roseta, generalmente con espinas marginales o dientes y una espina terminal. En algunas excepciones con tallo muy corto y grueso que pareciera que carecen de él (CIATEJ, 2004; Gallardo y col 2008).

Según el listado de la NOM-070-SCFI y dependiendo de la región en la que obtenga esta bebida, se emplean diferentes variedades de agave en la producción, los más comunes son: *agave Augustifolia Haw*, maguey espadín (figura 2), *agave Esperrima Jacobi*, maguey de cerro, bruto o cenizo, *agave Weberi Celsa* (figura 3), *agave Patotorum Zucc* (figura 4), *agave Salmiana*, maguey verde o mezcalero (figura 5) y otras especies de agave como lo son el *agave Tequilana Weber* (figura 6) y el *agave Cupreata* (figura 7), siempre y cuando no sean utilizadas como materia prima para otras bebidas con denominaciones de origen dentro del mismo estado (Gallardo y col, 2008; Pérez y col, 2012).



Figura 2. Maguey espadín.
Fuente: infojardin.com.



Figura 3. Maguey *Weberi*.
Fuente: yuccado.com.



Figura 4. Maguey *Patotorum*.
Fuente: wellgroth.com.



Figura 5. Maguey verde.
Fuente: smgrowers.com.



Figura 6. Maguey tequilero.
Fuente: davesgarden.com.



Figura 7. Maguey *Cupreata*.
Fuente: cactusi.com.

2.5 Michoacán

La diversidad climática asociada a las características geográficas y morfológicas del territorio michoacano han favorecido a la formación de diferentes ecosistemas en los que se desarrollan diversos tipos de vegetación; en algunos de ellos, la manifestación de condiciones particulares propician la proliferación de algunas especies silvestres del género agave que han sido utilizados para la producción de mezcal.

Investigaciones y evidencias realizadas por Colunga y *col*, (2004) al recorrer gran parte de la región centro occidente de México para demostrar el origen de algunas bebidas destiladas, entre ellas el mezcal, confirman que la elaboración de esta bebida en Michoacán se realiza mediante un proceso artesanal aprendido por las comunidades indígenas desde la época colonial.

2.5.1 Regiones productoras de mezcal en Michoacán

Las regiones productoras de Michoacán se definen según su proximidad geográfica y por sus similitudes en las técnicas, elementos y especies de agave utilizadas para la elaboración de mezcales tradicionales. Las cuatro regiones michoacanas que contienen a parte de los 29 municipios que se pidió se incluyeran a la “Denominación de Origen Mezcal” comparten el modo tradicional de elaboración de mezcal: el aprovechamiento de agaves maduros, la fermentación natural y el proceso de doble destilación; aunque cada enclave mezcalero se distingue por los elementos, métodos y materiales utilizados, que le otorgan a los destilados cualidades únicas (Gallardo y *col* 2008; Mezcalpedia, 2012).

Las regiones Morelia, Queréndaro, Sudeste y Jalmich incluyen a algunos de los siguientes municipios: Acuitzio, Aguililla, Ario, Buenavista, Charo, Chinicuila, Coalcomán de Vázquez Pallares, Cotija, Cojumatlán de Régules, Erongarícuaro, La Huacana, Tacámbaro, Turicato, Tzitzio, Ciudad Hidalgo, Salvador Escalante, Morelia, Madero, Queréndaro, Indaparapeo, Tarímbaro, Tancítaro, Los Reyes, Tepalcatepec, Sahuayo, Marcos Castellanos, Jiquilpan, Venustiano Carranza y Vista Hermosa, como se ilustra en la figura 8.

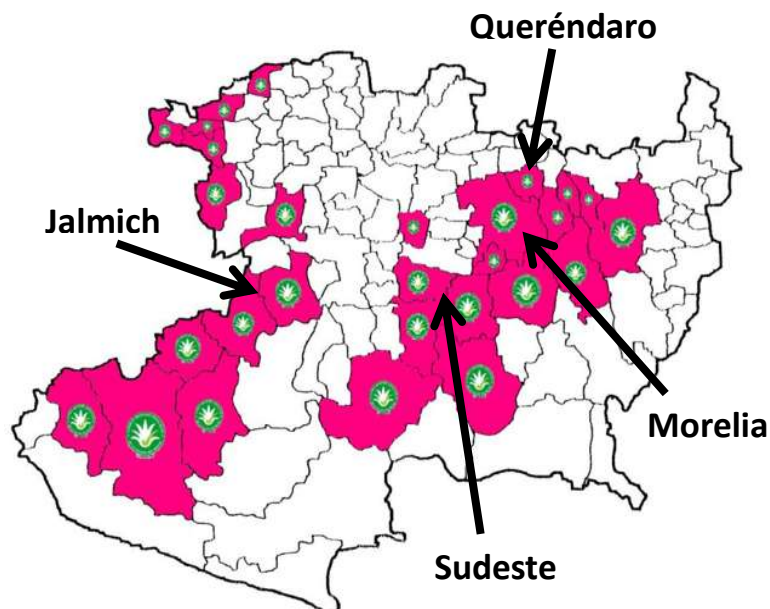


Figura 8. Municipios de Michoacán que se pidió se incluyeran a la “Denominación de Origen Mezcal”. Elaboración propia. Fuente: mezclopedia.com.

2.5.2 Agaves utilizados en la producción de mezcal en Michoacán

No todos los agaves son apropiados para la elaboración de mezcal. De las 14 especies existentes en el territorio estatal, solo 3 son utilizadas para la elaboración de la bebida, el *Cupreata*, *Inaequidens* y *Americana*, existiendo dos especies más que potencialmente pueden ser susceptibles de aprovechamiento en virtud de sus características, reuniendo un total de 5 especies. Cabe notar que el agave *tequilana* Weber var. *Azul* queda excluido, a pesar de que en algunas ocasiones también ha sido empleado para ello. Esta exclusión se debe a que tiene exclusividad para la elaboración del Tequila, y a que el uso por parte de algunos productores se debe al bajo costo, que adquiere principalmente cuando existe sobreproducción, considerando (Gallardo y col, 2008).

En la tabla 2 se muestra la producción de agave en Michoacán, la cual incluye en sus números las distintas especies que se cultivan y cosechan en el estado; Morelia, La Piedad y Zamora son los municipios con mayor producción (SIAP, 2011).

Tabla 2. Ciclos y Perenes 2011; Riego + Temporal: Agave. Estado de Michoacán.

| Distrito | Sup. Sembrada (Ha) | Sup. Cosechada (Ha) | Producción (Ton) | Rendimiento (Ton/Ha) | PMR (\$/Ton) | Valor Producción (Miles de Pesos) |
|-----------------|---------------------------|----------------------------|-------------------------|-----------------------------|---------------------|--|
| MORELIA | 1,661.06 | 537 | 61,610.00 | 114.73 | 926.8 | 57,100.00 |
| LA PIEDAD | 1,247.00 | 56 | 5,600.00 | 100 | 567.86 | 3,179.99 |
| AGUILILLA | 54 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| LAZARO CARDENAS | 25 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| APATZINGAN | 463 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| URUAPAN | 420 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| ZAMORA | 1,038.33 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| SAHUAYO | 1,003.74 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| HUETAMO | 80 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| ZITACUARO | 306 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Total | 6,298.13 | 593 | 67,210.00 | 113.34 | 896.89 | 60,279.99 |

(SIAP, 2011). Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera.

2.5.3 Volumen de producción de mezcal en Michoacán

El volumen total de la producción de mezcal en el estado de Michoacán no se tiene cuantificado de manera confiable, debido a que no se cuenta con un padrón exacto del número de productores.

Algunos productores estiman que la actual producción de mezcal en el estado es de 300,000 L/año y que existen alrededor de 700 productores de agave mezcalero. Sin embargo, los datos con que cuenta la Subdirección de Comercialización de la Secretaría de Desarrollo Rural, indican que la producción formal de mezcal en la entidad, se aproxima a los 130,000 L/año, cifra que considera únicamente la producción que se comercializa a través de algunas marcas y el que se produce por algunos maestros vinateros con fama de buena calidad, que generalmente lo elaboran sobre pedido y lo comercializan a granel.

La tabla 3 muestra la cantidad en litros/año de mezcal que se produce en Michoacán, producción obtenida a partir de agave *Cupreata* e *Inaequidens* como materia prima. Los productores o dueños de la vinata pertenecen a las 4 regiones mencionadas en párrafos anteriores, calculándose que se obtienen de 1,000 a 60,000 L/año con algunas marcas ya registradas.

Tabla 3. Volumen de producción de mezcal en Michoacán.

| Grupo de productores o dueño de la "Vinata" | Localidad | Municipio | Materia prima utilizada | Vol. aprox de Producción | Marca |
|---|--------------------------|---------------|------------------------------------|--------------------------|---------------------------------|
| Grupo de Vinateros Piedras de Lumbre | Jesús del Monte | Morelia | Agave Cupreata | 25,000 L/año | Don Mateo de la Sierra |
| Asociación Agrícola Productores de Agave Mezcalero de Etúcuaro A.A. | Etúcuaro | Madero | Agave Cupreata y Agave Inaequidens | 60,000 L/año | El Etucuaño |
| Miguel Pérez Reséndiz (Productor Independiente) | Oponguio | Erongarícuaro | Agave Inaequidens | Dato no disponible | Palomas Mensajeras |
| Mezcal Real de Oztumatlán | Río de Parras | Queréndaro | Agave Inaequidens | 14,000 L/año | Real de Oztumatlán |
| Eladio y Santos Pedraza (Productores Independientes) | Barranca La Laja | La Huacana | Agave Inaequidens | 1,000 L/año | Granel |
| Asociación de Productores e Industrializadores de Maguey S.R.L MI. | Comunidad de Torrecillas | Coalcomán | Agave Inaequidens | 20,000 L/año | Destilado de Maguey Torrecillas |
| Sierra Salvador Virrueta Jiménez (Productor Independiente) | Los Parejos | Chinicuila | Agave Inaequidens | 1,500 L/año | Mezcal Tradicional de la Sierra |
| Vinata Agua de Gallo (Productor Independiente) | Rancho El Pinar | Cotija | Agave Inaequidens | 5,000 L/año | Granel |

(Gallardo y col, 2008). La producción de Mezcal en el estado de Michoacán.

2.6 El Proceso de producción del mezcal

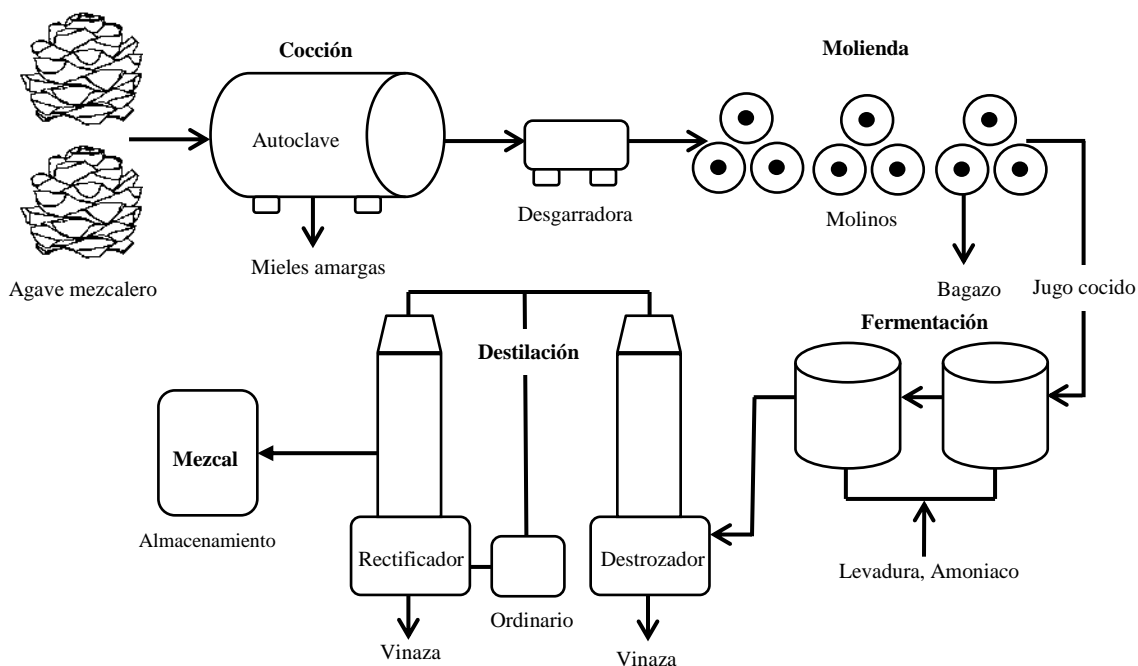


Figura 9. Proceso de producción de mezcal. Elaboración propia.

En la figura 9 se muestra el proceso típico de fabricación del mezcal, el cual comienza con la cosecha del agave después de 6-8 años de cultivo de donde se obtienen las piñas de agave, las cuales son cocidas en autoclaves iniciándose el proceso de producción, una vez cocidas se muelen en molinos automatizados donde es separado el bagazo del jugo de agave, posteriormente se fermenta el jugo con levaduras y finalmente se destila para obtener el mezcal, a continuación se detalla cada etapa

2.6.1 La cocción

Como se mencionó anteriormente la cocción se realiza en autoclaves, con capacidad de 10-30 toneladas/lote, inyectándose vapor de agua para llevar a cabo el cocimiento, esta etapa es particularmente importante, ya que además de la generación de azúcares fermentables por la hidrólisis de la inulina, se llevan a cabo las reacciones químicas de deshidratación, enolización, de Maillard, y caramelización que generan muchos de los compuestos responsables de las características organolépticas del mezcal. Adicionalmente el cocimiento suaviza la consistencia del agave, lo cual facilita su molienda (Ignacio y col, 2005; Gutiérrez y col, 2007).

2.6.1.2 Cambios fisicoquímicos durante el cocimiento del agave

El cocimiento provoca en las piñas de agave:

1. Pérdida de turgencia.
2. Pérdida de aire vascular y extracelular.
3. Desnaturalización y degradación de la membrana celular y de otros polisacáridos.

En las tres primeras horas se generan las mieles amargas, que son desechadas por su bajo contenido de azúcares reductores y por contener agentes que propician la formación de metanol, ceras de la cutícula del agave y otras impurezas que pueden dar sabores indeseables al jugo.

2.6.1.3 Hidrólisis de la inulina

La inulina es un polisacárido de reserva para la protección contra la sequía y el frío; conformada por una molécula de sacarosa que une a las moléculas de fructosa y glucosa, carbohidratos no estructurales que sirven como fuente de energía para los agaves, figura 10.

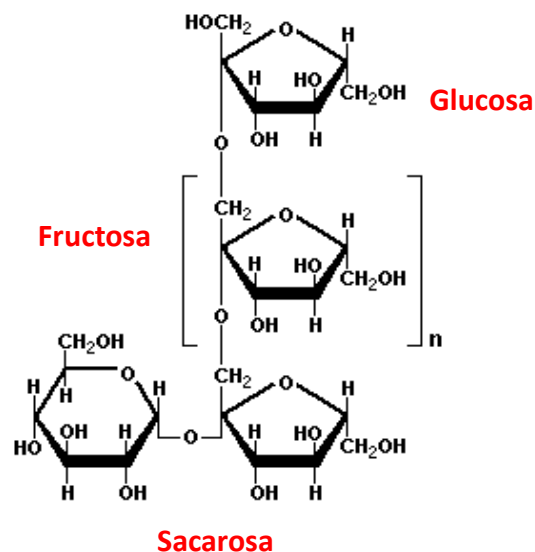


Figura 10. Inulina.

El grado de polimerización (n) de la fructosa presente en la inulina varía de 30-35 unidades dependiendo del tipo de agave y del tiempo de maduración del mismo, aquí que se coseche en el periodo de los 6-8 años de crecimiento. La inulina es hidrolizada para dar fructosa y glucosa, azúcares destinados a la formación de etanol y otros compuestos mayoritarios y minoritarios que conforman al Mezcal (Chacón-Villalobos, 2006, Madrigal y col, 2007).

2.6.1.4 Enolización, deshidratación y oxidación

Por efecto de la temperatura y los tiempos prolongados, parte de los azúcares se deshidratan, generando principalmente 5-(hidroximetil) furfural (HMF), el cual es parcialmente responsable del aroma característico del agave cocido.

El Primer paso en el cocimiento es la enolización al que posteriormente le siguen una serie de deshidrataciones sucesivas y la ciclación que conducen a la formación de 5-(hidroximetil) furfural (HMF) y derivados furfúricos. La fragmentación de los productos de deshidratación puede dar lugar a la formación de ácido levulónico, fórmico, pirúvico, láctico o acético.

2.6.1.5 Reacciones de oscurecimiento no enzimático

Los azúcares reductores están sujetos a un conjunto complejo de reacciones con dirección a la síntesis de compuestos coloreados que van desde el amarillo ligero hasta el café oscuro. Estas reacciones conllevan mecanismos complejos que varían con el pH, la temperatura y los componentes. Los productos de estas reacciones contribuyen al sabor y aroma del mezcal.

2.6.1.6 Caramelización

La caramelización ocurre cuando los azúcares se calientan por encima de su punto de fusión. Los mecanismos incluyen la isomerización, deshidratación y dimerización, sin embargo son complejos y no se conocen en su totalidad.

2.6.1.7 Reacciones de Maillard

Se realizan entre los grupos amino y el grupo funcional de los azúcares (aldehído o cetona) en presencia de calor y un poco de agua. Estas reacciones son muy importantes ya que generan múltiples compuestos, principalmente: 1-Butanol, 1,2-Butanodiol, 2-Metil-1-Butanol, 3-Metil-1-Butanol, 1-Hexanol y 1-Pentanol, denominados alcoholes superiores regulados por la NOM-070 que dependen de las condiciones y tiempo de cocimiento (Mancilla-Margalli, 2002).

2.6.1.8 Formación de metanol

Debido a las condiciones de cocimiento, el metanol se forma por desmetoxilación de las pectinas contenidas en el agave.

El metanol formado será proporcional al grado de desmetoxilación de las pectinas, se sabe empíricamente que si se almacena mucho tiempo el agave jimado antes de cocerse, la planta aumentará el grado de metoxilación y por lo tanto hay más metanol. Igualmente si se jima dejando trozos de hoja de agave se tendrá más pectina y por lo tanto más metanol.

2.6.1.9 Otros compuestos en el cocimiento

En el exudado del cocimiento se encuentran ácidos grasos con cadenas químicas de 2 a 18 carbonos, conjuntamente con aldehídos, alcoholes bicíclicos, terpenos y vainillina.

2.6.2 La molienda

En la molienda se extrae el jugo de los agaves cocidos conteniendo los azúcares que serán transformados a etanol durante la fermentación. La molienda se realiza con equipos automatizados adaptados de la industria de la caña de azúcar. La desintegración del agave en fibras expuestas se realiza en una “desgarradora”, que es un molino de martillos o cuchillas de acero que giran y proyectan las fibras a un transportador de banda que alimenta a las prensas que realizan la extracción de jugo (Durán y col, 2007).

2.6.2.1 La formulación

Antes de llevar el jugo a fermentación es necesario fijar sus parámetros de entrada, tales como tipo y procedencia de los azúcares, concentración de los azúcares reductores, °Brix, temperatura, pH y nutrientes. En esta parte del proceso se define si el Mezcal que se va a producir será Mezcal 100% de agave o Mezcal. En una formulación típica se tiene una concentración de 12 °Brix que corresponde a 90 g/L de azúcares reductores (CIATEJ, 2004; Ibarra y col, 2010).

2.6.3 La fermentación

La fermentación es sin duda una etapa clave en el proceso de elaboración del mezcal. Su característica principal es la intervención de levaduras nativas o cepas seleccionadas del género *Saccharomyces cerevisiae*, las cuales son crecidas e inoculadas en los fermentadores para iniciar la transformación de los azúcares ricos en fructosa y glucosa en una serie de compuestos, dentro de los cuales está presente el etanol.

Se han hecho simplificaciones en la reacción estequiométrica que involucra la transformación de azúcares reductores en etanol y dióxido de carbono como se muestra en la ecuación 1.



Este mecanismo fue propuesto, considerando que los únicos productos de degradación son el etanol y el dióxido de carbono, sabiendo que en la fermentación, aparte del crecimiento de las levaduras, que no se toma en cuenta en esta reacción, hay adición de fuentes de energía y formación de subproductos como los alcoholes superiores y otros

compuestos que dan las características organolépticas de las bebidas fermentadas (Suárez-Lepe, 1997). Por su parte, Sandler, 2006, propone un mecanismo que involucra el crecimiento de las levaduras y la adición de una fuente extra de energía, no considera la formación de alcoholes superiores, pero ahora es considerado por la representación más cercana a la realidad y se muestra en el apartado de balances atómicos y moleculares.

2.6.3.1 Importancia del inóculo

La levadura utilizada en la elaboración del mezcal es la *Saccharomyces cerevisiae*. Estas levaduras son células eucariotas, con necesidades nutricionales para su metabolismo, sensibles a variables externas que les han conferido ciclos metabólicos que no representan una marcada variación con respecto a su ubicación geográfica, a menos que sean manipuladas genéticamente. *Saccharomyces cerevisiae* antes de ser utilizada en la fermentación es necesario que se adapte (por propagación) al jugo de agave. Esta etapa se realiza a las mismas condiciones a las que la levadura va a fermentar. Torija y col, 2002, indican que si no son crecidas y adaptadas a los jugos de agave se tienen eficiencias de fermentación menores, debido a que existe un periodo de reconocimiento del medio y utilización de fuentes de sustrato que no son empleadas para la producción de alcohol si no para la duplicación y crecimiento. En la figura 11 se muestra el crecimiento típico en un cultivo por lote.

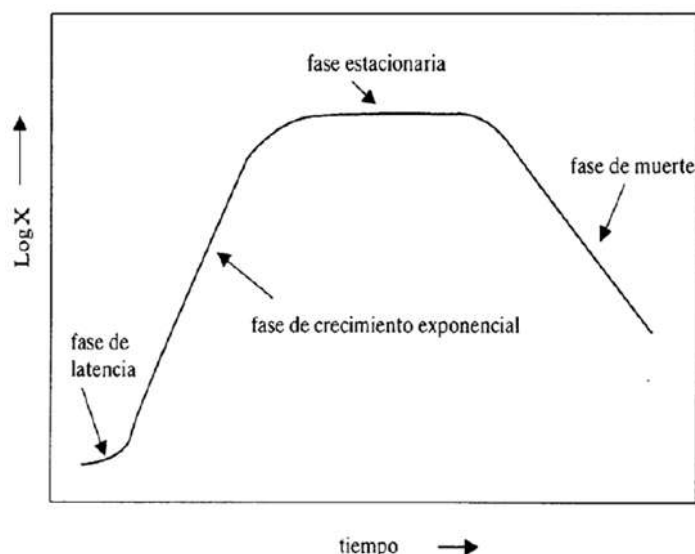


Figura 11. Crecimiento en cultivo por lote.

En el crecimiento de inóculo son necesarias altas concentraciones de células, lo que permite estandarizar un tiempo de fermentación. Aproximadamente se tienen 3×10^6 células por mililitro, con lo que se logran tiempos de fermentación de 22 a 26 horas (CIATEJ, 2004; Ignacio y col, 2005; Gutiérrez y col, 2007).

2.6.3.2 Balances atómicos y moleculares en fermentadores

Los balances de masa en fermentadores son más complicados de establecer a diferencia de los reactores, debido a que uno de los productos es la biomasa. Asimismo, otros productos de un fermentador pueden ser compuestos que no estén bien definidos y de peso molecular desconocido. El procedimiento para definir estos balances consiste en el análisis atómico y molecular para reactivos y productos, que se expresa como el número de átomos de hidrógeno, oxígeno, y nitrógeno para cada átomo de carbono. El diagrama esquemático un fermentador se muestra en la figura 12 (Sandler, 2006).

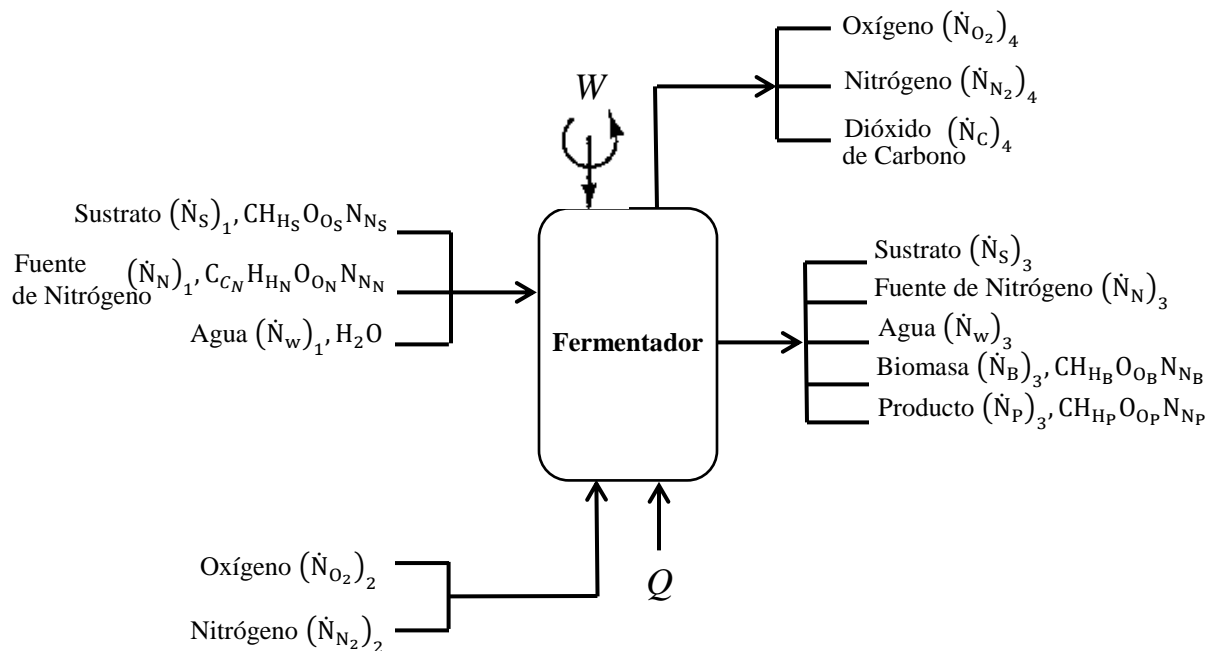


Figura 12. Diagrama esquemático de un fermentador.

Primero se definen los parámetros que conforman los balances atómicos para cada especie química:

$(\dot{N}_I)_i$ = Flujo molar de la especie I en la corriente i

S = Sustrato

N = Fuente de nitrógeno

B = Biomasa producida

P = Producto

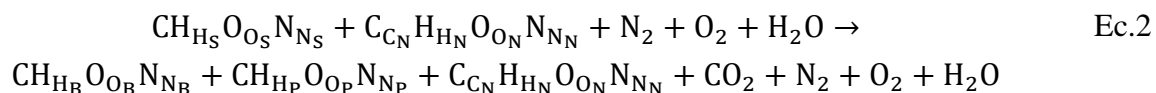
C = Dióxido de carbono

W = Agua

N₂ = Nitrógeno

O₂ = Oxígeno

Se define ahora la ecuación estequiométrica 2 y las relaciones estequiométricas atómicas, considerando que la fuente de nitrógeno es el NH₃ y la fórmula mínima de la levadura es CH_{1.8}O_{0.5}N_{0.2}, ejemplos tomados en las definiciones.



C_S = Moles de carbono por C moles de sustrato = 1

C_N = Moles de carbono por C moles de fuente de nitrógeno (ej. 0 en amoniac)

C_B = Moles de carbono por C moles de biomasa = 1

C_P = Moles de carbono por C moles de producto = 1

C_C = Moles de carbono por C moles de dióxido de carbono = 1

N_S = Moles de átomos de nitrógeno por C moles de sustrato = 1

N_N = Moles de átomos de nitrógeno por C moles de fuente de nitrógeno (ej. 1 en amoniac)

N_B = Moles de átomos de nitrógeno por C moles de biomasa (ej. 0.2 en biomasa)

N_P = Moles de átomos de nitrógeno por C moles de producto

N_{N₂} = Moles de átomos de nitrógeno por mol de nitrógeno molecular = 2

H_S = Moles de átomos de hidrógeno por C moles de sustrato

H_N = Moles de átomos de hidrógeno por C moles de fuente de nitrógeno (ej. 3 en amoniac)

H_B = Moles de átomos de hidrógeno por C moles de biomasa (ej. 1.8 en biomasa)

H_P = Moles de átomos de hidrógeno por C moles de producto

H_W = Moles de átomos de hidrógeno por mol de agua = 2

O_S = Moles de átomos de oxígeno por C moles de sustrato

O_N = Moles de átomos de oxígeno por C moles de fuente de nitrógeno (ej. 0 en amoniac)

O_B = Moles de átomos de oxígeno por C moles de biomasa (ej. 1.8 en biomasa)

O_P = Moles de átomos de oxígeno por C moles de producto

O_W = Moles de átomos de hidrógeno por mol de agua

O_{O₂} = Moles de átomos de oxígeno por mol de oxígeno molecular = 2

En el análisis de los fermentadores es común reportar los resultados en términos de los rendimientos, que relacionan la producción o el consumo de alguna de las especies presentes en relación a otra.

$$Y_{B/S} = \frac{\text{Número de C moles de biomasa producida}}{\text{Número de C moles de sustrato consumido}}$$

$$Y_{i/S} = \frac{\text{Número de C moles de producto i producido}}{\text{Número de C moles de sustrato consumido}}$$

$$Y_{N/S} = \frac{\text{Número de C moles fuente de nitrógeno consumido}}{\text{Número de C moles de sustrato consumido}}$$

$$Y_{O_2/S} = \frac{\text{Número de moles de } O_2 \text{ consumido}}{\text{Número de C moles de sustrato consumido}}$$

$$Y_{W/S} = \frac{\text{Número de moles de agua consumida}}{\text{Número de C moles de sustrato consumido}}$$

$$Y_{C/S} = \frac{\text{Número de moles de } CO_2 \text{ producido}}{\text{Número de C moles de sustrato consumido}}$$

Definición de los rendimientos en términos de entradas-salidas para el fermentador:

$$Y_{N/S} = \frac{(\dot{N}_N)_1 - (\dot{N}_N)_3}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} \quad \text{Ec.3}$$

$$Y_{B/S} = \frac{(\dot{N}_B)_3}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} \quad \text{Ec.4}$$

$$Y_{P/S} = \frac{(\dot{N}_P)_3}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} \quad \text{Ec.5}$$

$$Y_{C/S} = \frac{(\dot{N}_C)_4}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} \quad \text{Ec.6}$$

$$Y_{W/S} = \frac{(\dot{N}_W)_1 - (\dot{N}_W)_3 - (\dot{N}_W)_4}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} \quad \text{Ec.7}$$

$$Y_{O_2/S} = \frac{(\dot{N}_{O_2})_2 - (\dot{N}_{O_2})_4}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} \quad \text{Ec.8}$$

Se realiza un balance entrada-salida, en estado estacionario con los parámetros definidos para las especies químicas anteriores:

Balance de carbono:

$$(\dot{N}_S)_1 + (\dot{N}_N)_1 C_N = (\dot{N}_S)_3 + (\dot{N}_N)_3 C_N + (\dot{N}_B)_3 + (\dot{N}_P)_3 + (\dot{N}_C)_4 C_C \quad \text{Ec.9}$$

Reordenando:

$$\left[(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3 \right] + \left[(\dot{N}_N)_1 - (\dot{N}_N)_3 \right] C_N - (\dot{N}_B)_3 - (\dot{N}_P)_3 - (\dot{N}_C)_4 C_C = 0 \quad \text{Ec. 10}$$

Dividiendo todo entre: $(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3$, lo cual define los balances en términos de los rendimientos:

$$1 + \frac{(\dot{N}_N)_1 - (\dot{N}_N)_3}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} C_N - \frac{(\dot{N}_B)_3}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} - \frac{(\dot{N}_P)_3}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} - \frac{(\dot{N}_C)_4}{(\dot{N}_S)_1 - (\dot{N}_S)_3} C_C = 0 \quad \text{Ec. 11}$$

Resultando el siguiente balance de carbono con los rendimientos respectivos:

$$1 + Y_{N/S} C_S = Y_{B/S} + Y_{P/S} + Y_{C/S} \quad \text{Ec.12}$$

Con las definiciones anteriores y el método utilizado se obtienen los balances que incluyen los rendimientos para cada elemento restante:

Balance de hidrógeno:

$$H_S + Y_{N/S} H_N + Y_{W/S} H_W = Y_{B/S} H_B + Y_{P/S} H_P \quad \text{Ec.13}$$

Balance de nitrógeno:

$$N_S + Y_{N/S} N_N + Y_{W/S} H_W = Y_{B/S} N_B + Y_{P/S} N_P \quad \text{Ec.14}$$

Balance de oxígeno:

$$O_S + Y_{N/S} O_N + Y_{O_2/S} O_{O_2} + Y_{W/S} = Y_{B/S} O_B + Y_{P/S} O_P + Y_{C/S} O_{O_2} \quad \text{Ec.15}$$

2.6.4 La destilación

La destilación es la operación utilizada para separar, mediante evaporización y condensación, los diferentes componentes líquidos de una mezcla, aprovechando los diferentes puntos de ebullición de cada una de las sustancias. Existen diferentes tipos de

destilación, las cuales aportan diferentes ventajas unas sobre otras, ejemplos de estas son la destilación simple, intermitente, extractiva, reactiva, diferencial, continua entre otras (Seader y col, 2011, Felder y col, 2004, Geankoplis y col, 2004)

En el 90% de las empresas mezcaleras se emplea la destilación por lote y se realiza en dos etapas.

1. Destrozamiento: Se obtiene un destilado denominado ordinario con una cantidad de etanol que oscila entre un 20-30% en volumen, lo que depende de la empresa. En esta etapa se obtiene la primera fracción destilada llamada cabezas que se separa y recicla hacia el mosto fermentado.
2. Rectificación: Se aumenta la concentración alcohólica del ordinario y se obtiene un destilado o *corazón* con contenido alcohólico que oscila de un 36-55% en volumen. En esta etapa se separa una fracción inicial del destilado o *cabezas* que posee un alto grado alcohólico, del orden del 50% en volumen de etanol. La corriente que continúa destilando corresponde a la fracción de corazón o producto y se considera que es la parte de mayor interés (Íñiguez, 2010).

Ahondado ya en cada una de las etapas, ahora es necesaria la definición de los siguientes conceptos que ayudarán al momento de realizar el desarrollo y la simulación del proceso de producción de mezcal.

2.7 Simulación de procesos químicos

Un proceso químico es el conjunto de operaciones químicas y/o físicas ordenadas que transforman unas sustancias en otras, su simulación consiste en la evaluación numérica de un modelo matemático propuesto para condiciones específicas, resolviendo las variables desconocidas a partir de las conocidas o parámetros de diseño deseados, utilizando algoritmos secuenciales programados matemáticamente o dentro de un módulo que representa el proceso (Scenna y col, 1999).

2.8 Simulación de procesos en Ingeniería Química

Hoy en día la aplicación de herramientas computacionales en los procesos industriales es cada vez más frecuente, ya que permiten disminuir el tiempo involucrado en la solución de sistemas de ecuaciones que antiguamente se realizaba en forma manual. Los simuladores de procesos son programas computacionales, que cuentan con un modelo que representa a un proceso determinado, y que es capaz de ejecutarlo sistemáticamente, dadas ciertas condiciones de operación (Cortez y col, 2003).

La simulación de los procesos dependientes del tiempo se lleva a cabo de dos maneras:

- **Estado estacionario:** Cuando las características del mismo no varían con el tiempo.
- **Estado no estacionario:** Las características del mismo varían con el tiempo.

Los programas de simulación de procesos conforman su modelo matemático de dos formas: mediante el método de solución de ecuaciones completas, o mediante interfaces o módulos. Entre los tipos de simuladores para procesos industriales se encuentran los siguientes:

- **Matemáticos:** MATLAB®, MATHEMATICA®, MAPPLE®, MATHCAD®, etc.
- **Modulares:** SPD®, ASPEN Plus®, CHEMCAD®, SIMULINK®, etc.
- **Fenomenológicos:** FLUENT®, MULTIFLOW®, PHOENICS®, OLI®, etc.

Los simulares matemáticos resuelven las ecuaciones que conforman el modelo del proceso en estudio. Requieren definir el algoritmo de cálculo, los métodos numéricos o técnicas avanzadas de ordenamiento y descomposición de ecuaciones para encontrar la solución del problema planteado.

Los simuladores modulares asocian una operación unitaria o unidad de proceso a un “módulo” con sus respectivas ecuaciones asociadas, resolviéndolas de manera independiente y secuencial según la estructura del diagrama de flujos con el cual se ha representado el proceso.

Los simuladores fenomenológicos representan los fenómenos de transporte que ocurren en la naturaleza, resolviéndose mediante la inclusión de simuladores modulares y/o simuladores matemáticos. Este software permite hacer análisis integral de los procesos ya que representa la parte teórica en acción con la parte experimental permitiendo hacer modelos predictivos de los procesos (Sáenz, 2001; Ramírez, 2007).

Entre las ventajas que representa el uso de simulares en procesos industriales se pueden considerar: ahorro de tiempo del encargado del diseño del proceso, evaluación con facilidad de los costos asociados a distintas alternativas de procesos, optimización de la operación, simulación, evaluación y modificaciones en los procesos productivos y en la instrumentación asociada (Scenna y col, 1999).

De los simuladores mencionados, esta investigación toma como base el simulador SPD® y el simulador Aspen Plus®, el primero porque cuenta con módulos especiales para el análisis de bioprocesos y el segundo dado que SPD® para la destilación no cuenta con parámetros de interacción para el modelo termodinámico NRTL.

2.9 El simulador SuperPro Designer (SPD®) y Aspen Plus®

SPD® es un programa modular secuencial enfocado al análisis de procesos biotecnológicos que incluye también equipos para la industria química, Aspen Plus® de igual manera es un programa modular secuencial enfocado a la industria química, pero más robusto, estos simuladores realizan la simulación de procesos en estado estacionario y no estacionario. Esto facilita el estudio de sensibilidad de los sistemas frente a cambios en los distintos parámetros y variables de operación analizados, según sea el caso de estudio (Álvarez, 2011).

2.9.1 Componentes principales de SPD®

Consta de:

- Un programa de ejecución principal, que controla todas las partes de la simulación.
- Un conjunto de subrutinas que resuelven los sistemas de ecuaciones lineales y no lineales que modelan las operaciones unitarias.

- Una base de propiedades físico-químicas, que utiliza para resolver los respectivos balances de masa-energía y con ello el dimensionamiento de los equipos.
- Subprogramas que calculan y generan propiedades físico-químicas.
- Subprogramas y bases de datos para estimar los costos de inversión y operación del proceso.
- Subprogramas que permiten realizar evaluación de impacto ambiental y calcular propiedades termodinámicas.

2.9.2 Información requerida por SPD®

Es necesario:

1. *Especificar la modalidad de operación, lote o continuo.*
2. *Diseñar el diagrama de flujo que representa el proceso a analizar.*
3. *Registrar los componentes.*
4. *Inicializar los procesos y corrientes de entrada.*
5. *Aplicar criterios de convergencia si es necesario.*
6. *Resolver los balances de masa y energía.*
7. *Generar los reportes correspondientes.*

CAPÍTULO III. METODOLOGÍA

Una vez sentadas las bases teóricas y conociendo cada una de las partes que conforman la fabricación del mezcal, se analiza la configuración por lote y continua de los equipos de proceso que serán utilizados durante la simulación. El proceso en conjunto consta principalmente de las unidades de tratamiento mencionadas en el capítulo II, en las que se efectúan las transformaciones fisicoquímicas y bioquímicas de los azúcares hasta obtener el mezcal.

3.1 La cocción

En el cocimiento de las piñas de agave, el interés principal consiste en desdoblamiento de las moléculas de inulina mediante la inyección de vapor de agua a altas temperaturas para obtener los monosacáridos fructosa y glucosa como se muestra en la figura 13. El simulador SPD® no cuenta con unidades específicas llamadas autoclaves, por lo tanto no contiene módulos programados previamente para este uso, para esto es necesario realizar algunas consideraciones importantes que se mencionan en líneas subsiguientes.

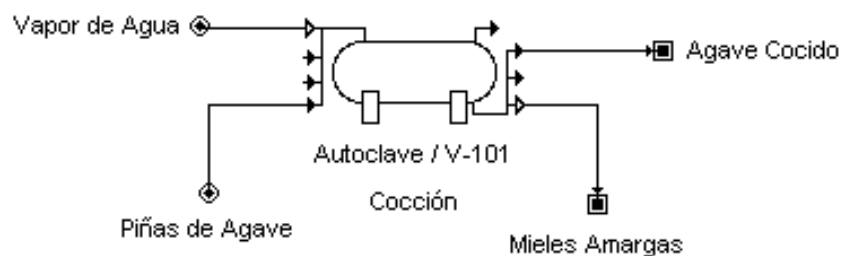


Figura 13. Autoclave.

3.1.2 Caracterización de la materia prima

En la tabla 4 se muestra la composición general para cualquier tipo de agave, donde se puede observar que el contenido de agua predomina sobre las composiciones de carbohidratos, fibra y otros compuestos que forman parte de las mieles amargas.

Tabla 4. Composición general de las piñas de agave
(Sánchez-Marroquín y *col*, 2000).

| Composición | % masa |
|-----------------------------------|---------------|
| Humedad | 61 |
| Carbohidratos | 22 |
| Fibra y médula | 12 |
| Sales minerales | 2.5 |
| Otros (Proteínas, saponinas, etc) | 2.5 |

Estudios realizados por Michell-Cuello y *col* (2008), determinan que la proporción de fructosa y glucosa contenidas en inulina corresponden al 90%p y 10%p respectivamente, señalando que la sacarosa que une a estos carbohidratos no estructurales se transforma a fructosa y glucosa, sin conocer en qué cantidades.

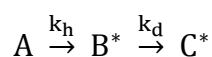
Debido a la gran cantidad de compuestos que se forman durante todo el proceso de producción, provenientes de las reacciones de Maillard y de la ruta metabólica de las levaduras, es necesario considerar que los compuestos volátiles mayoritarios y otros compuestos presentes en el producto final provienen directamente del 5% de la tabla 4 (Sales minerales y otros). Una vez considerado esto se obtiene la tabla 5 que representa el porcentaje correspondiente del 5% de cada componente definido como parte del mezcal.

Tabla 5. Composición del agave y compuestos volátiles mayoritarios.
(Mancilla-Margalli y *col*, 2002).

| Otros | % masa |
|-------------------|---------------|
| 1-Butanol | 0.0937 |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.3418 |
| 1-Hexanol | 0.2228 |
| Metanol | 0.1899 |
| 1,2-Butanodiol | 0.2988 |
| 1-Pentanol | 0.2355 |
| 2-Metil-1-Butanol | 0.7241 |
| Vainillina | 16.508 |
| Ácido acético | 1.5521 |
| Ácido propiónico | 7.6977 |
| Ácido butanóico | 43.207 |
| Ácido hexanóico | 28.929 |

3.1.3 Especificación de las variables de diseño para la cocción

Estudios realizados por Saeman en 1945 referentes a la sacarificación de la madera y posteriormente analogías realizadas por García-Soto en el 2011 para la hidrólisis térmica y degradación del agave, proponen una reacción consecutiva de pseudo primer orden ejemplificada con el mecanismo siguiente:



Donde A es la inulina, B* son los azúcares reductores fructosa y glucosa, C* los compuestos de degradación, HMF y furfural principalmente, k_h es la constante de rapidez de hidrólisis, k_d la constante de rapidez de degradación, obtenidas utilizando la secuencia piloto de la figura 14, definiciones necesarias para la especificación de las variables.

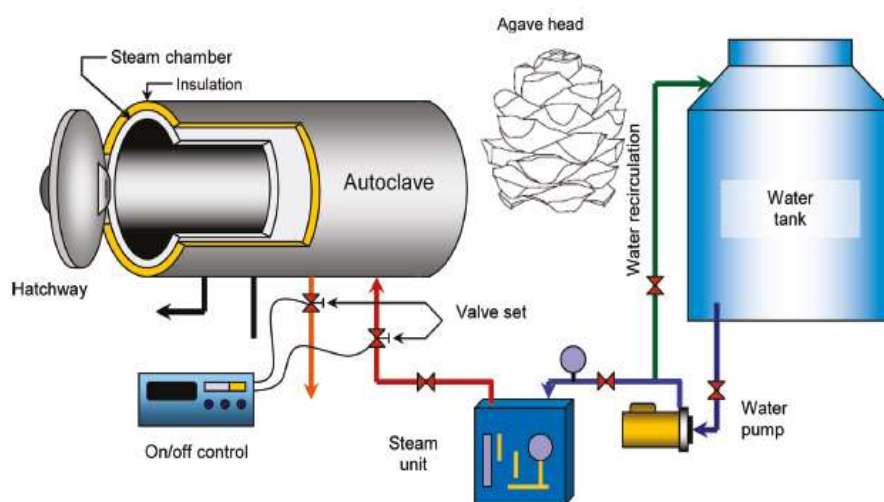


Figura 14. Autoclave piloto (García-Soto y col, 2011).

Estos estudios permiten simplificar la cocción en autoclaves utilizando un reactor por lotes para llevar a cabo esta operación, permitiendo establecer las siguientes consideraciones:

Consideraciones:

- Densidad constante
- Volumen constante
- Reacción consecutiva de pseudo primer orden
- Isotérmico

- Se desprecian las pérdidas de energía hacia el medio

Ecuaciones:

Balance de masa por componente:

$$V \frac{dC_A}{dt} = -Vk_h C_A \quad \text{Ec.16}$$

$$V \frac{dC_{B^*}}{dt} = Vk_h C_A - Vk_d C_{B^*} \quad \text{Ec.17}$$

$$V \frac{dC_{C^*}}{dt} = Vk_d C_{C^*} \quad \text{Ec.18}$$

Balance de energía global:

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = -\Delta H_1 V k_h C_A - \Delta H_2 V k_d C_{B^*} - \Delta H_3 V k_d C_{C^*} - h_i A_i (T - T_M) \quad \text{Ec.19}$$

Aquí ρ es la densidad, C_p la capacidad calorífica, V es volumen del reactor, C_A , C_{B^*} , C_{C^*} son las concentraciones de inulina, azúcares reductores y compuestos de degradación, $-\Delta H_1$, $-\Delta H_2$, $-\Delta H_3$ son los calores de reacción (exotérmicos) para la reacción, h_i el coeficiente global de transferencia de calor, A_i el área global de transferencia de calor, T es la temperatura y T_M la temperatura de las paredes del reactor.

Verificando los grados de libertad, se tienen cuatro variables (C_A , C_{B^*} , C_{C^*} , T) y cuatro ecuaciones (16, 17, 18 y 19), lo que resulta en 0 grados de libertad, ya que se tiene el mismo número de ecuaciones que de incógnitas, por lo tanto el sistema está completamente especificado.

3.1.4 Análisis de sensibilidad para la cocción

Previo a comenzar la simulación, una vez especificadas las variables de diseño se realizan las simulaciones donde se lleva a cabo el análisis de sensibilidad. El primer paso es dar de alta los componentes que formarán parte del análisis, varios de estos no están incluidos en SPD®, por lo que es necesario registrarlos, apéndice A, en la tabla 6 se muestran las propiedades fisicoquímicas de la inulina, furfural, HMF, 2-Metil-1-butanol y 3-Metil-1-butanol (Yaws y *col*, 1999). La fibra también fue registrada, a la cual solo se le estableció la densidad 1,450 g/L.

Tabla 6. Componentes registrados en SPD®.

| Propiedades | Compuestos | | | | |
|---|-------------|----------|----------|-------------------|-------------------|
| | Inulina | Furfural | HMF | 2-Metil-1-butanol | 3-Metil-1-butanol |
| PM (g/mol) | 1,000 | 96.086 | 126.11 | 88.15 | 88.15 |
| ρ (g/L) | 1,097 | 1,155 | 1,290 | 814 | 812 |
| Cp (25° C) (J * gmol ⁻¹ * K ⁻¹) | 9,999 | 169.03 | 169.03 | 226.68 | 164.9 |
| Entalpía de formación (J/mol) | -39,151,800 | -151,040 | -151,040 | -302,090 | -302,090 |
| Tb (°C) | 343.85 | 161.7 | 116 | 128.7 | 131.2 |
| Tf (°C) | 199 | -36.5 | 34 | -117.2 | -117.2 |
| Tc (°C) | 481.5 | 383.85 | 383.15 | 291.85 | 306.3 |
| Pc (bar) | 48.2 | 55.12 | 55.12 | 38.8 | 38.8 |
| Vc (cm ³ /mol) | - | 252 | 256 | 327 | 327 |
| ρ crítica (g/cm ³) | - | 0.3813 | 0.3915 | 0.2696 | 0.2696 |
| Zc | - | 0.254 | 0.254 | 0.27 | 0.263 |
| Omega | - | 0.444 | 0.444 | 0.678 | 0.556 |

El análisis de sensibilidad comienza seleccionándose el agente de calentamiento, que en este caso es el vapor, se introducen los mecanismos de reacción para los productos de hidrólisis y degradación siguientes (Mancilla-Margalli y *col*, 2002; Michel-Cuello y *col*, 2008):



Para cada mecanismo de reacción se selecciona el compuesto de referencia, se coloca el orden de reacción (pseudo primer orden), ya que es una simplificación de los fenómenos simultáneos de transferencia de masa y energía en el cocimiento, la energía de activación y el factor de frecuencia correspondiente: $E_h = 139,080$ KJ/Kmol, $A_h = 2.3599 \times 10^{16}$ para la hidrólisis térmica; $E_d = 118,430$ KJ/Kmol, $A_d = 2.6686 \times 10^{11}$ para la degradación de los compuestos hidrolizados (García-Soto y *col*, 2011), como se muestra en el apéndice C.

3.1.5 Simulación de la cocción

La simulación comienza con la selección del menú de tareas, la opción “Operaciones unitarias” (**Unit Procedures**), **Batch Vessel Procedure**, **In a Reactor** plasmándose el modulo que representa al reactor. Una vez hecho esto se dibuja la corrientes de entrada de piñas de agave crudas, salida de piñas cocidas y mieles amargas, figura 15.

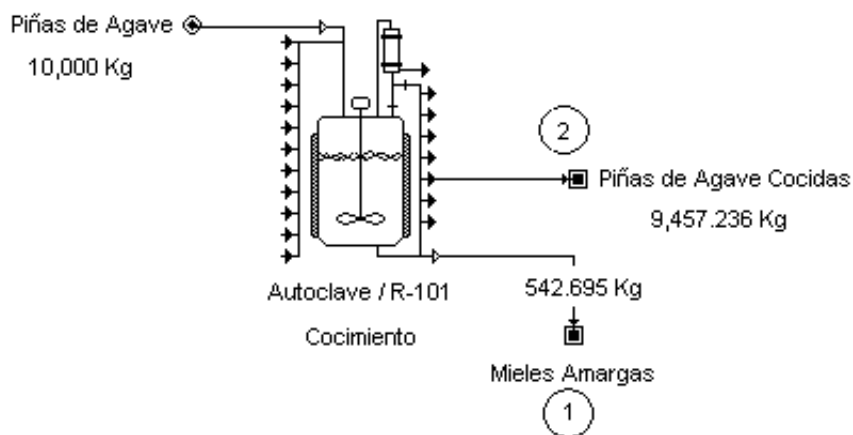


Figura 15. Reactor cinético por lote.

Con el diagrama del reactor establecido, ahora se seleccionan los compuestos que constituyen a las piñas de agave (**Agave Pineapple**), dando de alta a éstas en el submenú de “Tareas” (**Tasks**), **Stock Mixtures**, **Register**, donde se introduce la tabla 7, que muestra la composición general, los compuestos volátiles mayoritarios característicos y otros componentes del mezcal.

Tabla 7. Composición general, volátiles y otros compuestos del mezcal.

| Compuesto | % masa | Compuesto | % masa |
|-------------------|---------|------------------|---------|
| 2-Metil-1-Butanol | 0.0362 | 1-Hexanol | 0.0111 |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.0171 | Inulina | 22.0000 |
| Ácido acético | 0.0776 | Metanol | 0.0095 |
| 1,2-Butanodiol | 0.0149 | 1-Pentanol | 0.0118 |
| 1-Butanol | 0.0047 | Ácido propiónico | 0.3848 |
| Ácido butanóico | 2.1603 | Vainillina | 0.8254 |
| Fibra | 12.0000 | Agua | 61.0000 |
| Ácido hexanóico | 1.4464 | | |

La siguiente parte de la simulación consiste en el establecimiento de la secuencia de operación, esta es establecida conforme a CIATEJ, 2004 y la experiencia, como se muestra a continuación:

1. *Carga de las piñas de agave.* Se especifica una base de cálculo de 10,000 kg de piñas de agave, presión de 1 atm, y tiempo de carga de 2 horas.
2. *Calentamiento hasta 100° C.* Para el calentamiento se especifica el vapor como agente de calentamiento, la temperatura de trabajo es 100° C y tiempo de calentamiento de 1 hora.
3. *Reacciones cinéticas.* Inicialmente se especifica nuevamente la temperatura de 100° C, el vapor como agente de calentamiento y tiempo de reacción de 10 horas, resultado del análisis de sensibilidad que consistió en la variación de la temperatura y el tiempo de cocimiento, apéndice D. Se escriben las reacciones estequiométricas y parámetros cinéticos para cada participante, figura 16, 17 y 18:

Inulina: $1.00\text{Inulina} \rightarrow 0.90\text{Fructosa} + 0.10\text{Glucosa}$ (Michel-Cuello y col, 2008).

C. Referencia.

Factor de frecuencia
Energía de activación.

Orden de rxn.

| Component | Exponent |
|-----------|----------|
| Hexanol | 0.000 |
| HMF | 0.000 |
| Inulin | 1.000 |
| Methanol | 0.000 |

Figura 16. Parámetros cinéticos para la inulina (García-Soto y col, 2011).

Fructosa: $1.00\text{Fructosa} \rightarrow 0.01\text{Furfural} + 0.99\text{HMF}$ (Mancilla-Margalli *et al.*, 2002).

Glucosa: $1.00\text{Glucosa} \rightarrow 0.01\text{Furfural} + 0.99\text{HMF}$ (Mancilla-Margalli *et al.*, 2002).

Kinetics for Reaction #2

Rate (in kmol/m³·s) = $\frac{k \prod (C_i)^{\alpha_i}}{K1 + C_m + C_n / K2}$

Rate Ref. Comp: Fructose

| Component | Exponent |
|---------------|----------|
| Ethyl-Lactate | 0.000 |
| Fiber | 0.000 |
| Fructose | 1.000 |
| Furfural | 0.000 |

Rate constant (k) specification

User Specified: 0.000007052

Calculated from Arrhenius Eq. ($k = A \cdot \exp(-E/RT)$)

Frequency Factor (A): 266862665074

Activation Energy (E): 118430.00 kJ/kmol

C. Referencia.

Orden de rxn.

Factor de frecuencia
Energía de activación.

Kinetics for Reaction #3

Rate (in kmol/m³·s) = $\frac{k \prod (C_i)^{\alpha_i}}{K1 + C_m + C_n / K2}$

Rate Ref. Comp: Glucose

| Component | Exponent |
|---------------|----------|
| Furfural | 0.000 |
| Glucose | 1.000 |
| Hexanoic Acid | 0.000 |
| Hexanol | 0.000 |

Rate constant (k) specification

User Specified: 0.000007052

Calculated from Arrhenius Eq. ($k = A \cdot \exp(-E/RT)$)

Frequency Factor (A): 266862665074

Activation Energy (E): 118430.00 kJ/kmol

C. Referencia.

Orden de rxn.

Factor de frecuencia
Energía de activación.

Figura 17 y 18. Parámetros cinéticos para la fructosa y glucosa (García-Soto *et al.*, 2011).

4. *Enfriamiento a 30° C.* Para el enfriamiento se especifica agua de enfriamiento como agente para enfriar, la temperatura de trabajo es 30° C y tiempo de enfriado de 2 horas.
5. *Descarga de las mieles amargas.* Se especifica la separación del 100% de ácido butanóico, hexanóico, propiónico, la vainillina y un 1% del agua de la piña de agave, correspondiente a la mezcla de compuestos no fermentables y un tiempo de 1 hora.
6. *Descarga de las piñas de agave.* Para la salida de las piñas de agave cocidas se especifica únicamente tiempo de descarga de 2 horas.

3.2 La molienda

La desintegración y molienda del agave cocido se lleva a cabo en molinos mecanizados “tándem”, el simulador no cuenta con equipos de este tipo, se proponen una serie de operaciones que en conjunto proporcionan una analogía de este. Esta etapa se representa mediante una desgarradora, un molino y una centrífuga, figura 19.

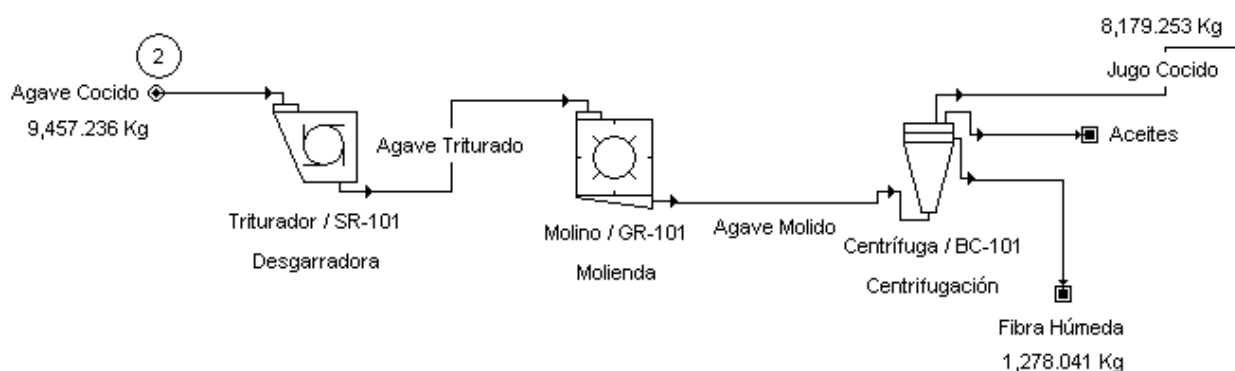


Figura 19. Equipos que representan la molienda.

3.2.1 Caracterización de la corriente de entrada a la molienda

En la tabla 8 se muestra la composición de las piñas de agave una vez sometidas a hidrólisis térmica durante 10 horas. Separados 542.695 kg de mieles amargas, se cargan a la desgarradora, una cantidad de 9,427.236 kg de materia prima cocida.

Tabla 8. Cantidades de compuestos que conforman la entrada a la molienda.

| Compuesto | kg/lote | Compuesto | kg/lote |
|-------------------|-----------|------------|-----------|
| 2-Metil-1-Butanol | 3.6206 | Furfural | 4.7916 |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.7090 | Glucosa | 172.0818 |
| Ácido acético | 7.7604 | 1-Hexanol | 1.1140 |
| 1,2-Butanodiol | 1.4938 | HMF | 474.3749 |
| 1-Butanol | 0.4684 | Metanol | 0.9494 |
| Fibra | 1199.9917 | 1-Pentanol | 1.1773 |
| Fructosa | 1548.7364 | Agua | 6038.9583 |

3.2.2 Especificación de las variables de diseño para la molienda

Los equipos representados en la figura 19, son operaciones unitarias mecánicas entrada-salida que requieren únicamente de condiciones de potencia y tiempos de operación, por lo que el análisis de las variables de diseño se omite, especificándose la operación para su simulación.

3.2.3 Simulación de la molienda

La “desgarradora” y molino se representa mediante un triturador y un molino que se encuentra en “Operaciones Unitarias” (**Unit Procedures**), **Size Reduction, Grinding** y **Shredding**, se dibujan las corrientes de entrada y salida, se especifican los tiempos por lote para cada operación de 2 h, 8.5 h. Se incluye también del apartado de “Operaciones Unitarias”, **Centrifugation**, una centrífuga tipo canasta que tiene la finalidad de separar el jugo rico en azúcares de la fibra de las piñas de agave. Se especifica la separación de la fibra del 100% con humedad del 1%, el tamaño de la partícula de 1 mm y tiempo de separación de 4 horas.

3.2.4 Formulación del jugo de agave

La formulación se realiza en un tanque con agitación, obtenido de la barra de tareas “Operaciones Unitarias” (**Unit Procedures**), **Storage/Blending**, se conectan las corrientes de entrada y salida, diluyéndose el jugo de agave de una concentración de 204.24 g/L (Fructosa + Glucosa) a 94.05 g/L con una cantidad de 11,000 kg de agua, para evitar efectos represores del metabolismo de las levaduras, figura 20.

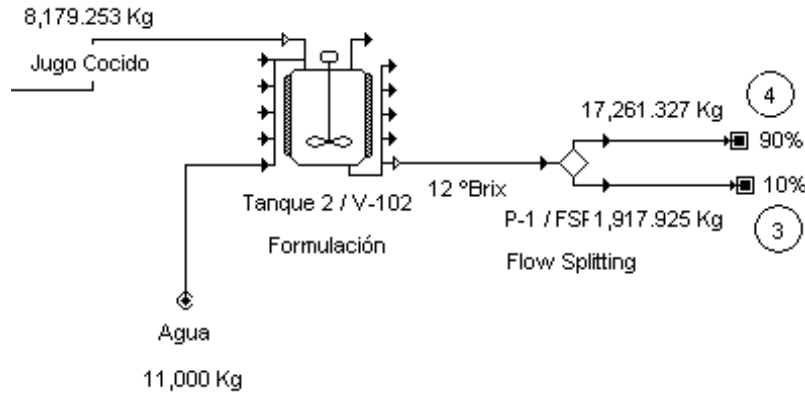


Figura 20. Formulación del jugo de agave.

3.3 La fermentación

La etapa de fermentación comienza con el crecimiento del inóculo. Crecido con el 10% del volumen total del jugo total reformulado de un lote anterior de proceso. Seguida de la fermentación principal con el 90% restante, con las levaduras en su fase exponencial de crecimiento y un filtro para separar las levaduras como se muestra en la figura 21 y 22.

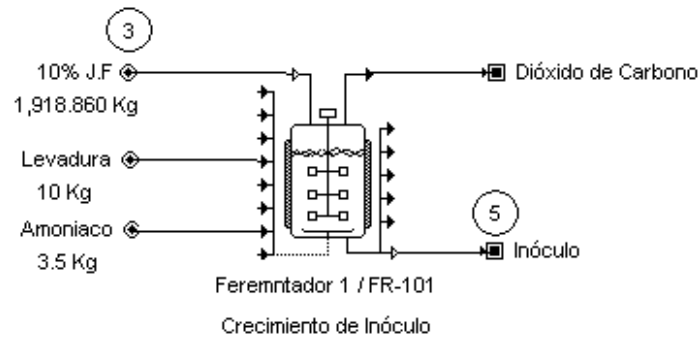


Figura 21. Diagrama del crecimiento de inóculo.

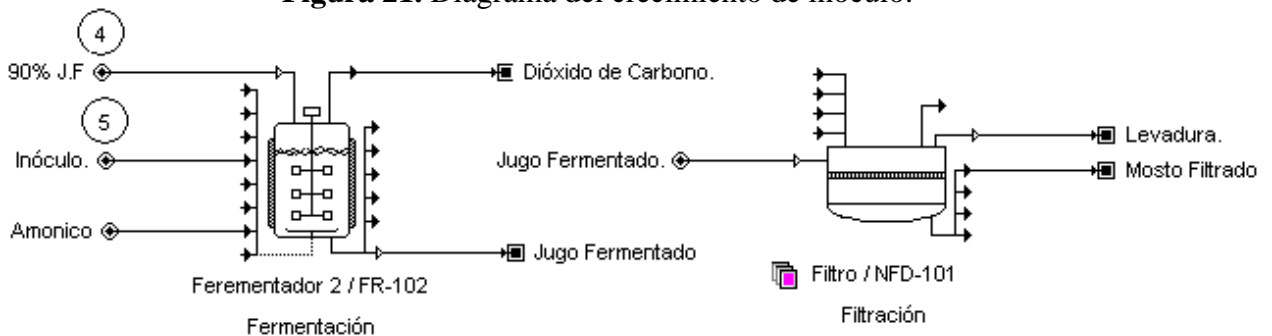


Figura 22. Diagrama de la fermentación y filtración.

3.3.1 Caracterización de la corriente de entrada: tina de crecimiento y fermentador

Las tablas 9 y 10 muestran las cantidades de los compuestos que conforman el jugo de las piñas de agave cocidas, correspondiente al 10% y 90% de la mezcla formulada respectivamente.

Tabla 9. Cantidades de compuestos del 10% de jugo formulado.

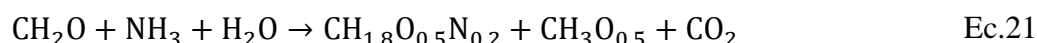
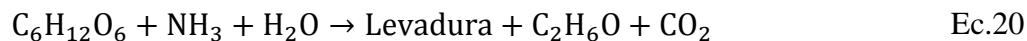
| Compuesto | kg/lote | Compuesto | kg/lote |
|-------------------|-----------|------------|------------|
| 2-Metil-1-Butanol | 0.36207 | Furfural | 0.86983 |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.17091 | Glucosa | 17.47434 |
| Ácido acético | 0.77605 | 1-Hexanol | 0.11141 |
| 1,2-Butanodiol | 0.14939 | HMF | 42.62168 |
| 1-Butanol | 0.04684 | Metanol | 0.09495 |
| Fibra | - | 1-Pentanol | 0.11774 |
| Fructosa | 157.26906 | Agua | 1697.86100 |

Tabla 10. Cantidades de compuestos del 90% de jugo formulado.

| Compuesto | kg/lote | Compuesto | kg/lote |
|-------------------|------------|------------|-------------|
| 2-Metil-1-Butanol | 3.25864 | Furfural | 7.82847 |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.53817 | Glucosa | 157.26906 |
| Ácido acético | 6.98443 | 1-Hexanol | 1.00266 |
| 1,2-Butanodiol | 1.34447 | HMF | 383.59515 |
| 1-Butanol | 0.42157 | Metanol | 0.85454 |
| Fibra | - | 1-Pentanol | 1.05962 |
| Fructosa | 1415.42155 | Agua | 15280.74900 |

3.3.2 Cálculo de los rendimientos a partir de sustrato

Para el cálculo de los rendimientos se utilizan las ecuaciones estequiométricas 20 y 21 en las cuales no se conocen las relaciones elementales debido a la fórmula empírica de la levadura así como las ecuaciones 10-13 considerando que la fermentación es ahora anaerobia.



Los balances resultantes para cada una de las especies son:

Balance de carbono:

$$1 = Y_{B/S} + Y_{P/S} + Y_{C/S} \quad \text{Ec.22}$$

Balance de hidrógeno:

$$2 + 3Y_{N/S} + 2Y_{W/S} = 1.8Y_{B/S} + 3Y_{P/S} \quad \text{Ec.23}$$

Balance de nitrógeno:

$$Y_{N/S} = 0.2Y_{B/S} \quad \text{Ec.24}$$

Balance de oxígeno:

$$1 + Y_{W/S} = 0.5Y_{B/S} + 0.5Y_{P/S} + 2Y_{C/S} \quad \text{Ec.25}$$

Resultando cuatro ecuaciones (22-25), con cinco incógnitas, las cuales fueron resueltas con el método de eliminación de Gauss, apéndice B.

3.3.3 Especificación de las variables de diseño para el crecimiento de inóculo y fermentación

Consideraciones:

- Densidad constante
- Volumen constante
- Reacciones de primer orden con cinéticas de Monod
- Isotérmico
- Se desprecian las pérdidas de energía con el medio
- Se utiliza levadura *Saccharomyces cerevisiae*

Ecuaciones:

Balance de masa para el crecimiento de levadura:

$$V \frac{dS}{dt} = V \frac{\mu}{Y_{B/S}} \frac{dX}{dt} \quad \text{Ec.26}$$

$$V \frac{dX}{dt} = V \frac{\mu_{\max} [S]}{S + K_S} X \quad \text{Ec.27}$$

$$V \frac{dP}{dt} = V \frac{\mu}{Y_{P/S}} \frac{dX}{dt} \quad \text{Ec.28}$$

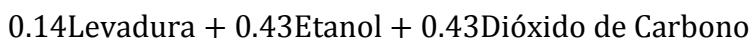
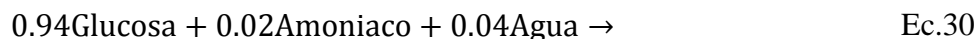
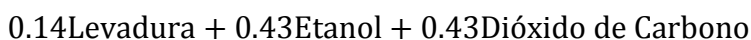
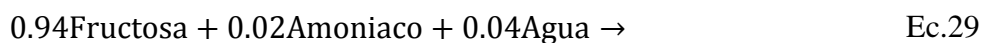
Aquí V es volumen del reactor S representa al sustrato (fructosa y glucosa), X a la biomasa (levaduras), P al producto (etanol), μ y μ_{\max} a la velocidad específica y velocidad máxima de crecimiento de las levaduras, $Y_{B/S}$ al rendimiento de biomasa a partir de

sustrato, $Y_{P/S}$ al rendimiento de producto a partir de sustrato y K_S a la constante de saturación de Monod para el sustrato.

Verificando los grados de libertad, se tienen tres variables (S, X y P) y tres ecuaciones (26, 27, 28,), lo que resulta en 0 grados de libertad, ya que se tiene el mismo número de ecuaciones que de incógnitas, por lo tanto el sistema está completamente especificado.

3.3.4 Análisis de sensibilidad para la tina de crecimiento y fermentador

El análisis de sensibilidad comienza con el ingreso de las ecuaciones estequiométricas 29 y 30 que representan los rendimientos de reactivos y productos.



Incluidas las ecuaciones anteriores en el simulador, para cada mecanismo de reacción se selecciona el compuesto de referencia, se especifican en el apartado de parámetros cinéticos el valor de μ_{\max} de 0.5 h^{-1} y K_S de 25 mg/L obtenidos de Doran (1995) para fructosa y glucosa.

Cabe señalar que debido a la naturaleza del sistema de ecuaciones diferenciales acoplado 26-28, es necesario la variación única de la cantidad de levaduras y de amoniac en las corrientes de entrada, ya que los algoritmos de solución que tiene programado SPD® pueden fallar o dar resultados que no tienen ningún sentido físico, debido a los intervalos de convergencia que maneja y la secuencia de solución, estos análisis se muestran en el apartado de resultados para el análisis de sensibilidad de la tina de crecimiento y fermentador.

3.3.5 Simulación de la fermentación

Se selecciona el fermentador que representará la tina de crecimiento de inóculo y el fermentador principal del apartado “Operaciones Unitarias” (**Unit Procedures**), **In a**

fermentor. Se dibujan las corrientes de entrada y salida, se especifican los tiempos por lote para cada operación de 14 h y 22 h respectivamente como resultado del análisis de sensibilidad, apéndice D.

La siguiente parte de la simulación consiste en el establecimiento de la secuencia de operación, como se muestra a continuación:

Tina de crecimiento:

1. *Carga del 10% de jugo formulado.* Se especifica la entrada con 1,917.925 kg, una presión de 1 atm y temperatura de 30° C.
2. *Carga de levadura.* Se especifica la carga de 10 kg de levadura a una presión de 1 atm y temperatura de 30° C.
3. *Carga de fuente de nitrógeno.* Se especifica una carga de 3.5 kg de amoníaco a una presión de 1 atm y temperatura de 30° C.
4. *Reacciones cinéticas de la fermentación.* Inicialmente se especifica nuevamente la temperatura de 30° C, un tiempo de 14 horas de fermentación. Se escriben las reacciones estequiométricas y parámetros cinéticos para la fructosa y glucosa, figura 23.
5. *Descarga de inóculo en su crecimiento exponencial.* Para la salida del mosto crecido se especifica únicamente un tiempo de descarga de 1 hora.

Fermentador principal:

1. *Carga del 90% de jugo formulado.* Se especifica la entrada con 17,261.325 kg, presión de 1 atm y temperatura de 30° C.
2. *Carga de inóculo en su crecimiento exponencial.* Se especifica la carga de 1,852 kg de inóculo a presión de 1 atm y temperatura de 30° C.
3. *Carga de fuente de nitrógeno.* Se especifica una carga de 32 kg de amoníaco a presión de 1 atm y temperatura de 30° C.
4. *Reacciones cinéticas de la fermentación.* Inicialmente se especifica nuevamente la temperatura de 30° C, y tiempo de 22 horas de fermentación. Se escriben las reacciones estequiométricas y parámetros cinéticos para la fructosa y glucosa, figura 23.
5. *Descarga de mosto muerto.* Para la salida del mosto muerto se especifica únicamente tiempo de descarga de 1 hora.

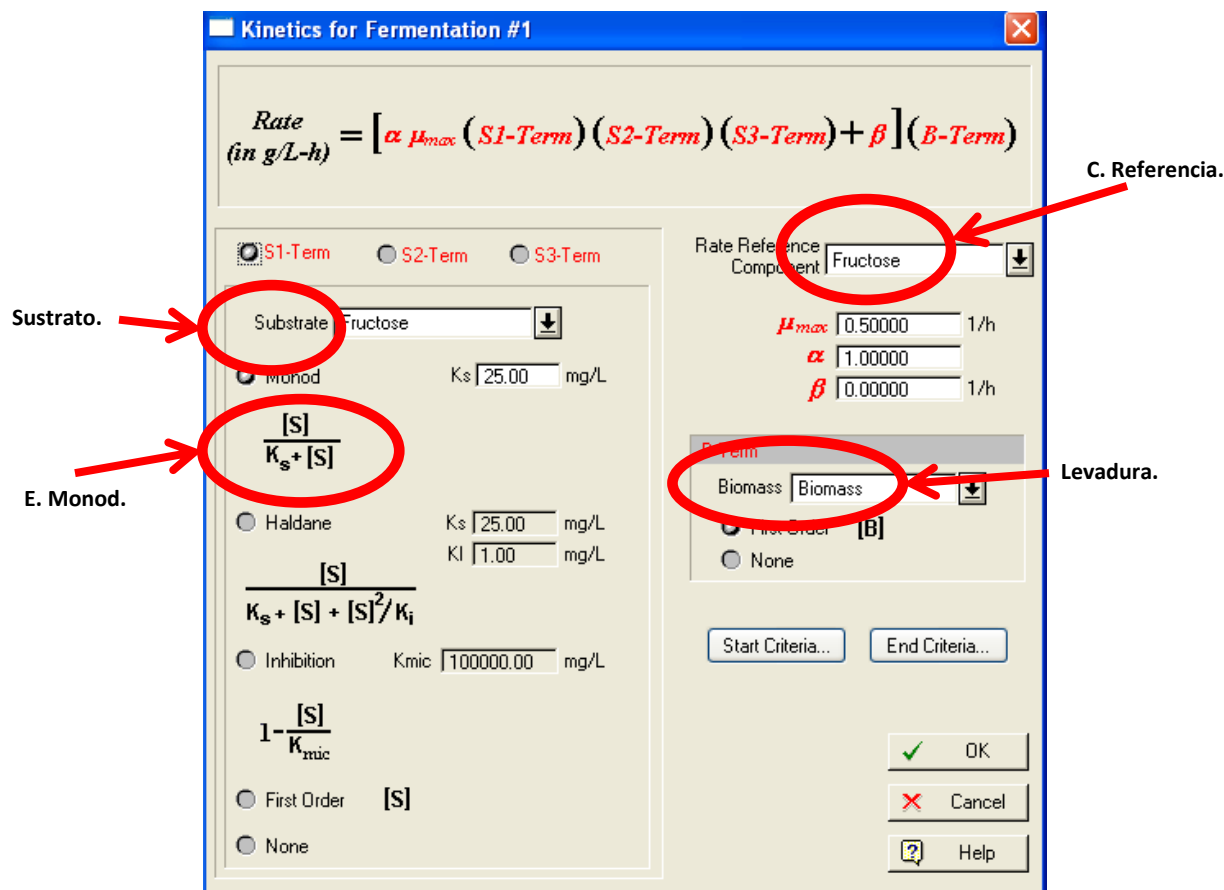


Figura 23. Parámetros cinéticos para fructosa y glucosa en la tina de crecimiento y fermentador (Doran y *col*, 1995).

Una vez terminado el tiempo de fermentación, se tiene el mosto muerto, conformado por las levaduras, etanol y demás congéneres, se utiliza un filtro el cual permita que se forme una torta de filtración constituida por las levaduras utilizadas y sean retiradas para que no haya dificultades en la columna de destilación continua que se propone como operación de separación.

3.4 La destilación

La destilación como etapa última del proceso de producción del Mezcal, debido a las características de SPD® v.8.5 se simula en Aspen Plus®, porque éste simulador cuenta con los parámetros de interacción que utiliza el modelo termodinámico NRTL, para el cálculo del equilibrio, a diferencia de SPD® v.8.5 que no cuenta con estos. La figura 24 muestra la columna de separación utilizada para obtener el Mezcal. También se elige una

destilación convencional a diferencia de una destilación por lote como es acostumbrada en las empresas mezcaleras.

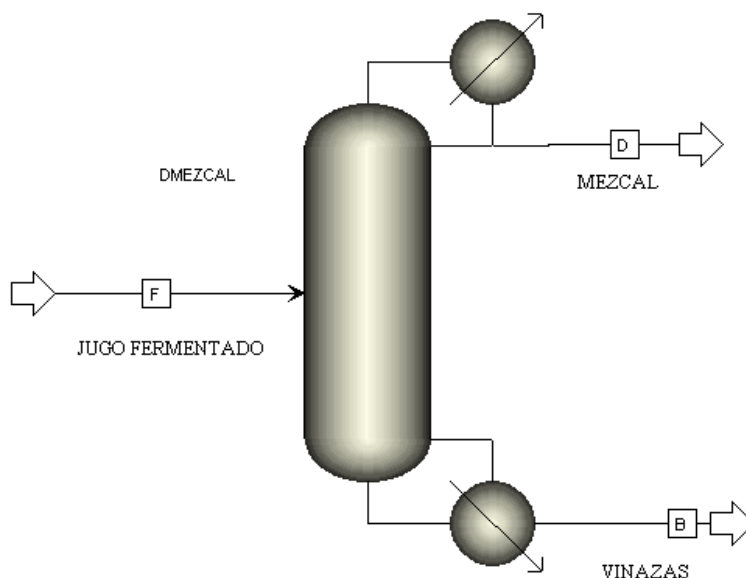


Figura 24. Torre de destilación en Aspen Plus®.

3.4.1 Caracterización de la corriente de entrada a la columna de destilación

La tabla 11 muestra las cantidades de los compuestos que conforman la corriente de entrada a la columna de destilación una vez separada la levadura utilizada en la fermentación.

Tabla 11. Cantidades de compuestos en la alimentación al destilador.

| Compuesto | kg/lote | kg/h | Frac. Masa |
|--------------------------|--------------------|-----------------|------------|
| 2-Metil-1-Butanol | 3.6207 | 0.1645 | 0.0001994 |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.7090 | 0.0776 | 9.411E-05 |
| Ácido acético | 7.7604 | 0.3527 | 0.0004273 |
| 1, 2-Butanodiol | 1.4938 | 0.0679 | 8.226E-05 |
| Butanol | 0.4684 | 0.0212 | 2.579E-05 |
| Etanol | 808.9420 | 36.7700 | 0.044544 |
| Furfural | 8.6983 | 0.3953 | 0.000479 |
| Hexanol | 1.1140 | 0.0506 | 6.135E-05 |
| HMF | 426.2168 | 19.3734 | 0.0234694 |
| Metanol | 0.9494 | 0.0431 | 5.228E-05 |
| Pentanol | 1.1773 | 0.0535 | 6.483E-05 |
| Agua | 16898.3860 | 768.1084 | 0.9305004 |
| | 18,160.5300 | 826.6592 | |

Tabla 12. Grados de libertad para los equipos.

| Elemento o Unidad | $(N_V)_e$ | $(N_E)_e$ |
|------------------------|--------------------------------------|------------------------------------|
| Condensador total | $2C+7$ | $C+3$ |
| Divisor de reflujo | $3C+10$ | $2C+5$ |
| Etapas N-(F+1) | $[7(N-F-1)+2(N-F-1)C+2C+7]$ | $[5(N-F-1)+2(N-F-1)C+2]$ |
| Etapas de alimentación | $5C+16$ | $2C+8$ |
| Etapas (F-1)-1 | $[7(F-2)+2(F-2)C+2C+7]$ | $[5(F-2)+2(F-2)C+2]$ |
| Ebullidor parcial | $3C+10$ | $2C+6$ |
| | $\sum (N_V)_e = 7N + 2NC + 11C + 38$ | $\sum (N_E)_e = 5N + 2NC + C + 11$ |

Donde $\sum(N_V)_e$ es la sumatoria de las variables de los equipos, $\sum(N_E)_e$ es la sumatoria de las ecuaciones de los equipos, N_R son las corrientes interconectadas para calcular las variables redundantes, N_A es la cantidad de equipos que se repiten, $(N_V)_U$ es el número de variables de la unidad, $(N_E)_U$ es el número de ecuaciones de la unidad y N_D el número de grados de libertad, los cuales se calculan con las ecuaciones 31-33 como a continuación se muestra:

$$N_R = 9$$

$$N_A = 0$$

$$(N_V)_U = \sum (N_V)_e - N_R(C + 3) + N_A = 7N + 2NC + 2C + 11 \quad \text{Ec.31}$$

$$(N_E)_U = \sum (N_E)_e - N_R = 5N + 2NC + C + 2 \quad \text{Ec.32}$$

$$N_D = (N_V)_U - (N_E)_U = 2N + C + 9 \quad \text{Ec.33}$$

De todas las variables que describen el funcionamiento de la columna de destilación, un posible arreglo de variables para definir los grados de libertad N_D resultantes y se pueda especificar el sistema para su simulación se muestra en la tabla 13.

Tabla 13. Especificación de las variables.

| Especificación de las variables | Número de variables |
|---|---------------------|
| P en la alimentación | 1 |
| Etapas adiabáticas (sin el ebullidor) | N-1 |
| P de las etapas (incluyendo el ebullidor) | N |
| Localización de la alimentación | 1 |
| Relación de reflujo L_R | 1 |
| T del reflujo | 1 |
| Condensador total | 1 |
| P en el condensador total | 1 |
| P en el divisor de reflujo | 1 |
| Fracciones másicas en la alimentación | C-1 |
| T en la alimentación | 1 |
| Número total de etapas | 1 |
| Flujo del destilado D | 1 |
| Flujo de alimentación F | 1 |
| | $N_D = 2N + C + 9$ |

3.4.3 Análisis de sensibilidad para la destilación

De la barra de menú en la ventana de trabajo principal se selecciona **Data, Setup**, apareciendo una barra al lado izquierdo de la ventana principal, de donde se selecciona la carpeta **Model Analysis Tools, Sensitivity** donde se dan de alta las siguientes variables a analizar:

Variable de corriente:

CNCET: es la variable de respuesta de interés, definida como la fracción en volumen de etanol en la corriente de destilado. Se da click en el botón New y se define la misma.

Variable de bloque:

NSTAGE: es el número de etapas de equilibrio en la torre de destilación.

1. Se selecciona la pestaña **Vary**, el tipo de variable de bloque a analizar, en este caso sería NSTAGE.
2. Se ingresa en el apartado **Values for varied** el intervalo de 2-10 etapas.
3. Se selecciona la pestaña **Tabule** donde se adiciona la variable CNCET, para que se adicione a la tabla del análisis.

FEED-STAGE: es la localización de la etapa de alimentación.

1. Se selecciona la pestaña **Vary**, el tipo de variable de bloque a analizar, en este caso sería FEED-STAGE.
2. Se ingresa en el apartado **Values for varied** el intervalo de 2-10 etapas.
3. Se selecciona la pestaña **Tabule** donde se adiciona la variable CNCET, para que se adicione a la tabla del análisis.

MASS-RR: es la relación de reflujo (L/D) en la corriente de destilado.

1. Se selecciona la pestaña **Vary**, el tipo de variable de bloque a analizar, en este caso sería MASS-RR.
2. Se ingresa en el apartado **Values for varied** el intervalo de 1.25-1.8 como reflujo, intervalo normal de relaciones de reflujo (Seader y *col*, 2011).
3. Se selecciona la pestaña **Tabule** donde se adiciona la variable CNCET, para que se adicione a la tabla del análisis.

3.4.4 Simulación de la destilación

Una vez abierto Aspen Plus®, situados en el área de trabajo principal se selecciona de la pestaña inferior “Columnas” (**Columns**), **Radfrac**, la primera columna del submenú que se despliega. Se dibujan las corrientes de entada y salida, completándose los siguientes pasos:

1. Se dan de alta los 12 compuestos mayoritarios que conforman el mezcal, tabla 11, en la pestaña **Data, Componentes**, o simplemente presionando en el botón **Next** para posteriormente buscarse en la base de datos e incluirse.
2. Pulsando el botón **Next** se llega a la ventana de la selección del modelo termodinámico, escogiéndose el modelo NRTL, que es utilizado para separar mezclas de compuestos orgánicos polares en presencia de agua, discutiéndose más a fondo en el apartado de resultados, la selección y comparación con otros modelos.
3. Pulsando el botón **Next** nuevamente se abre la ventana de especificación de la corriente de alimentación F, donde se ingresa una T de 30°C, P de 1 atm, flujo total de 826.6592 kg/h y se ingresan las fracciones masa de los compuestos, tabla 11.
4. El siguiente apartado, una vez pulsado **Next** se especifican las variables de la columna, número de etapas 10, condensador total, flujo de destilado de 80 kg/h, un reflujo de 1.61 mol, la etapa de alimentación en la etapa 5, con una presión de tope y de fondo de 1 atm, condiciones obtenidas del análisis de sensibilidad, apéndice D, que consistió en la variación de la cantidad de etapas de la columna, localización de la etapa de alimentación, variación del reflujo, y cantidad de destilado.
5. Se corre la simulación.

CAPÍTULO IV. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En el presente capítulo se realiza el análisis de la implementación tecnológica de la planta de producción de mezcal especificada en la sección anterior, estudiándose con detalle cada uno de los resultados para cada una de las operaciones unitarias participantes.

5.1 La cocción

La figura 26 muestra el estudio de sensibilidad realizado para la temperatura de 100° C, donde se monitorea este efecto sobre el consumo de inulina, formación de fructosa y HMF principalmente. En el apéndice D se encuentran los estudios de sensibilidad para las diferentes temperaturas estudiadas, que permitió realizar la selección de la temperatura de trabajo mencionada.

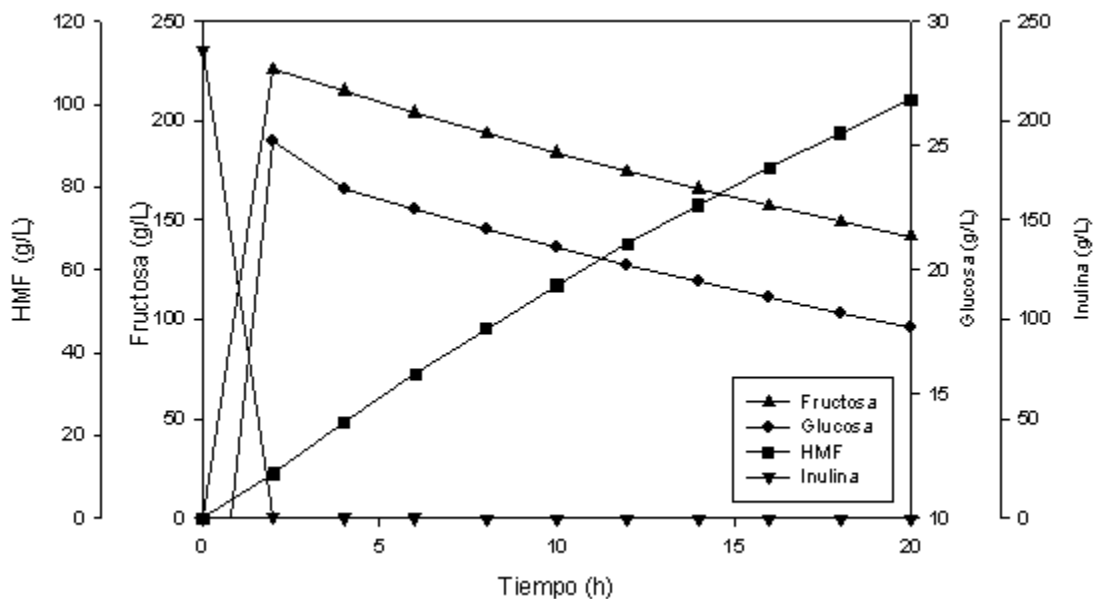


Figura 26. 20 horas de cocimiento a 100°C.

La figura 27 muestra un extracto de la figura 26, donde se utilizó también la temperatura de trabajo de 100° C para realizar la simulación. Éste último gráfico se utiliza para determinar que el tiempo de cocción adecuado para las piñas de agave es de 10 horas. Esto debido a que una vez que se consume la inulina por completo, en 6 horas aproximadamente, es necesario prolongar el tiempo de cocimiento para que se formen los compuestos volátiles mayoritarios o congéneres que acompañarán al etanol y se obtenga el

mezcal, esto también es considerado de acuerdo a reportes de la literatura (CIATEJ, 2004; Mancilla-Margalli y col, 2002; Michel-Cuello y col, 2008; García-Soto y col, 2011).

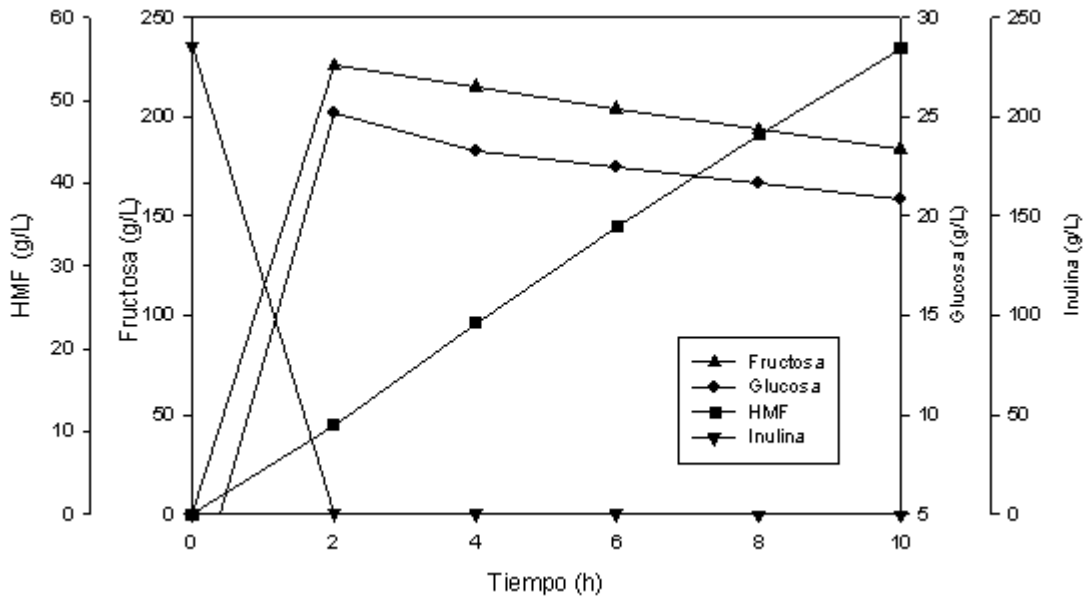


Figura 27. 10 horas de cocimiento a 100° C.

Para una T de 100°C, tiempo de cocimiento de 10 horas, variables determinadas en el análisis de sensibilidad y una carga de 10,000 kg/lote de agave se obtiene la tabla 14 que muestra el balance de masa para la cocción.

Tabla 14. Balance de masa el reactor para la cocción de las piñas de agave.

| Reactor cinético por lote | | | |
|---------------------------------------|----------------|------------------------|----------------|
| Nombre | Pinas de Agave | Piñas de Agave Cocidas | Mieles Amargas |
| Origen | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (atm) | 1 | 4.68 | 6.14 |
| Temperatura (° C) | 30 | 30 | 30 |
| Flujo de componentes (kg/lote) | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 3.62 | 3.62 | - |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.71 | 1.71 | - |
| Ácido acético | 7.76 | 7.76 | - |
| 1,2-Butanodiol | 1.49 | 1.49 | - |
| 1-Butanol | 0.47 | 0.47 | - |
| Ácido butanóico | 216.03 | - | 216.03 |
| Fibra | 1,200 | 1,200 | - |

| | | | |
|---|---------------|-----------------|---------------|
| Fructosa | - | 1,548.73 | - |
| Furfural | - | 4.79 | - |
| Glucosa | - | 172.08 | - |
| Ácido hexanóico | 144.64 | - | 144.64 |
| HMF | - | 474.37 | - |
| 1-Hexanol | 1.11 | 1.11 | - |
| Inulina | 2,200 | - | - |
| Metanol | 0.95 | 0.95 | - |
| 1-Pentanol | 1.18 | 1.18 | - |
| Ácido propiónico | 38.48 | - | 38.48 |
| Vainillina | 82.54 | - | 82.54 |
| Agua | 6,100 | 6,038.95 | 60.99 |
| Flujo másico total (kg/lote) | 10,000 | 9,457.21 | 542.68 |
| Flujo volumétrico total (L/lote) | 9,491.45 | 8,424.84 | 556.02 |

Como se puede observar en la tabla 14, los compuestos volátiles mayoritarios definidos inicialmente, tabla 5, no cambian sus cantidades debido a que no se tienen mecanismos de reacción que especifique su formación, solo se sabe que provienen de las reacciones de Maillard principalmente, de tal manera que permanecerán constantes durante todo el proceso hasta el momento de la destilación. Obteniéndose 9,457.21 kg en la corriente “Piñas de Agave Cocidas”, que forma los compuestos característicos que serán procesados a los largo de la fabricación. Fructosa y glucosa como fuente rica de carbono obtenida de la hidrólisis de la inulina y precursor del etanol, se logran 1,548.73 kg y 172.08 kg con una concentración de 203.74 g/L y 22.63 g/L respectivamente, así como los compuestos de degradación HMF y furfural de 474.37 kg y 4.79 kg con una concentración de 63.03 g/L y 0.63 g/L respectivamente. Por otro lado, en la corriente denominada “Mieles Amargas”, son separadas al finalizar la cocción los ácidos orgánicos: ácido propiónico 38.48 kg, ácido butanóico 216.03 kg, ácido hexanóico 144.64 kg, vainillina 82.54 kg y 60.99 kg de agua, con contenido total de 542.68 kg que completan el balance entrada-salida.

Como la cocción es una operación unitaria por lote, en la tabla 15 se muestra el modo de operación, los tiempos y los volúmenes de operación. Los tiempos especificados para cada operación fueron propuestos conforme a datos obtenidos de la fábrica mezcalera “Escorpión la Estanzulea” en el estado de Zacatecas y conforme a la experiencia.

Tabla 15. Tiempo y volumen total de lote para la cocción.

| Autoclave | | |
|--------------------------------|------------|-----------------|
| Operación | Tiempo (h) | Volumen (L) |
| Carga de las Piñas de Agave | 2 | 9,491.45 |
| Calentamiento a 100° C | 1 | 9,684.80 |
| Reacciones | 10 | 9,180.89 |
| Enfriamiento a 30° C | 1 | 8,980.84 |
| Descarga de las Mieles Amargas | 1 | 8,424.82 |
| Salida de las Mieles Amargas | 15 | 8,424.82 |

De la tabla 15 se observa que el volumen total de piñas cocidas es de 8,424.82 L, con un tiempo de operación de 15 horas para el lote, marcando una gran diferencia con respecto a tiempos prolongados que van desde 24-48 horas en hornos de mampostería o pozos perforados en el piso que superan las 72 horas de cocimiento.

5.2 La molienda

La tabla 16 muestra el balance de materia para la entrada al triturador y la salida de la centrífuga, recordando que esta operación es análoga a la molienda como se realiza normalmente en las industrias mezcaldas.

Tabla 16. Balance de masa para el conjunto de equipos en la molienda.

| Molienda | | | |
|---------------------------------------|------------------------|-----------------|--------------|
| Nombre | Piñas de Agave Cocidas | Jugo Cocido | Fibra Húmeda |
| Origen | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (atm) | 4.68 | 1 | 1 |
| Temperatura (° C) | 30 | 30 | 30 |
| Flujo de componentes (kg/lote) | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 3.62 | 3.62 | - |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.71 | 1.71 | - |
| Ácido acético | 7.76 | 7.76 | - |
| 1,2-Butanodiol | 1.49 | 1.49 | - |
| 1-Butanol | 0.47 | 0.47 | - |
| Ácido butanóico | 0 | - | - |
| Fibra | 1,200 | - | 1,200 |
| Fructosa | 1,548.73 | 1,533.24 | 15.48 |
| Furfural | 4.79 | 4.79 | - |
| Glucosa | 172.08 | 170.35 | 1.72 |

| | | | |
|---|-----------------|-----------------|-----------------|
| Ácido hexanóico | 0 | - | - |
| HMF | 474.37 | 474.37 | - |
| 1-Hexanol | 1.11 | 1.11 | - |
| Inulina | - | - | - |
| Metanol | 0.95 | 0.95 | - |
| 1-Pentanol | 1.18 | 1.18 | - |
| Ácido propiónico | - | - | - |
| Vainillina | - | - | - |
| Agua | 6,038.95 | 5,978.56 | 60.38 |
| Flujo másico total (kg/lote) | 9,457.21 | 8,179.61 | 1,277.59 |
| Flujo volumétrico total (L/lote) | 8,424.84 | 7,525.27 | 899.63 |

De la tabla 16 se observa que al especificar en la centrífuga que el remanente correspondiente al 1% del contenido de fructosa, glucosa y agua se separa con la fibra de agave, esto eficiencias entre el 96-99% de los molinos automatizados. Se obtienen 8,179.61 kg de la corriente “Jugo Cocido”, de los cuales 1,533.24 kg corresponde a la fructosa y 170.35 kg a la glucosa que serán transformados a etanol en la fermentación. En esta etapa se obtienen también 1,277.59 kg en la corriente “Fibra Húmeda”, de los cuales 1,200 kg son de fibra, el residuo restante en la fibra es propio del procesado, en conjunto el producto se almacena en un espacio destinado al aire libre, como lo llevan a cabo las fábricas de mezcal.

La tabla 17 muestra el tiempo de tratamiento para los equipos que conforman la molienda, estos equipos operan en forma continua, para la desgarradora, molino y centrifugación es necesario colocar los tiempos de operación, a diferencia del tanque de formulación que no necesita un tiempo de operación por que entra y sale el material, obteniéndose un tiempo de 14.5 horas.

Tabla 17. Tiempo de operación para la molienda.

| Molienda | |
|-----------------|-------------|
| Operación | Tiempo (h) |
| Desgarradora | 2 |
| Molienda | 8.5 |
| Centrifugación | 4 |
| Formulación | - |
| Total | 14.5 |

5.3 La formulación

La tabla 18 muestra el balance de materia entrada- salida para el tanque de formulación con el divisor, el cual separa en dos corrientes al jugo formulado, el 10% para ser utilizado en la tina de crecimiento y el 90% para llevarlo al fermentador principal.

Tabla 18. Balance de masa para la formulación.

| Formulación | | | | |
|---|-----------------|------------------|-------------------|-----------------|
| Nombre | Jugo Cocido | Agua | 90% | 10% |
| Origen | Entrada | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (atm) | 1 | 1 | 1 | 1 |
| Temperatura (° C) | 30 | 30 | 30 | 30 |
| Flujo de componentes (kg/lote) | | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 3.62 | - | 3.25 | 0.36 |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.71 | - | 1.53 | 0.17 |
| Ácido acético | 7.76 | - | 6.98 | 0.77 |
| 1,2-Butanodiol | 1.49 | - | 1.34 | 0.14 |
| 1-Butanol | 0.47 | - | 0.423 | 0.04 |
| Ácido butanóico | - | - | - | - |
| Fibra | - | - | - | - |
| Fructosa | 1,533.24 | - | 1379.91 | 153.32 |
| Furfural | 4.79 | - | 4.311 | 0.47 |
| Glucosa | 170.35 | - | 153.32 | 17.03 |
| Ácido hexanóico | - | - | - | - |
| HMF | 474.37 | - | 426.93 | 47.43 |
| 1-Hexanol | 1.11 | - | 1.02 | 0.11 |
| Inulina | - | - | - | - |
| Metanol | 0.95 | - | 0.85 | 0.09 |
| 1-Pentanol | 1.18 | - | 1.05 | 0.11 |
| Ácido propiónico | - | - | - | - |
| Vainillina | - | - | - | - |
| Agua | 5,978.56 | 11,000 | 15,280.70 | 1,697.85 |
| Flujo másico total (kg/lote) | 8,179.6 | 11,000 | 17,261.657 | 1,917.96 |
| Flujo volumétrico total (L/lote) | 7,525.27 | 11,078.86 | 16,743.72 | 1,860.41 |

De la tabla 18 se observa que para obtener un jugo de agave con 12°Brix correspondiente a aproximadamente 90 g/L es necesaria la adición de 11,000 kg de agua para disminuir la concentración de fructosa y glucosa a 82.41 g/L y 9.15 g/L respectivamente para así evitar problemas de fermentación por efectos de represión catabólica.

5.4 La fermentación

La figura 28 muestra el análisis de sensibilidad realizado para la tina de crecimiento del inóculo a 30° C, donde se monitorea el efecto que tiene la adición de levadura y amoníaco sobre la producción de etanol. En el apéndice D, se encuentran los estudios de sensibilidad para las diferentes variaciones de levadura y amoníaco, que permitió realizar la selección del tiempo de fermentación adecuado. Como se puede observar en la figura 28 conforme transcurre el tiempo, ocurre el decremento de la concentración de fructosa y glucosa, que son utilizadas por la levadura en sus ciclos metabólicos y secreta en su fase exponencial como metabolito primario el etanol. El tiempo de fermentación adecuado en el cual ya no hay cambio significativo de concentración corresponde a 15 horas, tiempo en el cual se alcanzan valores de 18.60 g/L de levadura y 41.44 g/L de etanol respectivamente.

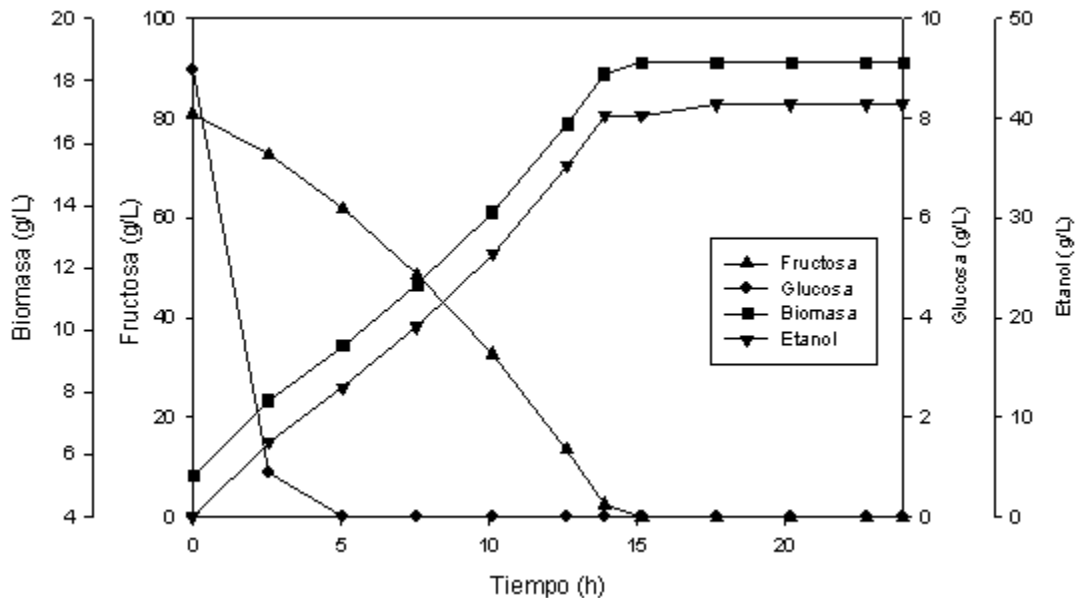


Figura 28. Análisis de sensibilidad para la tina de crecimiento de inóculo.

Después de un tiempo de fermentación de 15 horas, 10 kg de levadura y 3.5 kg de amoníaco como fuente adicional de energía, se obtienen los resultados de la tabla 19, que representa los balances de masa en la tina de crecimiento.

Tabla 19. Balance de masa para la tina de crecimiento.

| Tina de Crecimiento | | | | | |
|---|-----------------|-----------|------------|-----------------|-----------------|
| Nombre | 10% J.F | Levadura | Amoniaco | Inóculo | CO ₂ |
| Origen | Entrada | Entrada | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (atm) | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| Temperatura (° C) | 30 | 30 | 30 | 30 | 30 |
| Flujo de componentes (kg/lote) | | | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 0.36 | - | - | 0.36 | - |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.17 | - | - | 0.17 | - |
| Ácido acético | 0.77 | - | - | 0.77 | - |
| 1,2-Butanodiol | 0.14 | - | - | 0.14 | - |
| 1-Butanol | 0.04 | - | - | 0.04 | - |
| Fructosa | 153.32 | - | - | - | - |
| Furfural | 0.47 | - | - | 0.479 | - |
| Glucosa | 17.03 | - | - | - | - |
| HMF | 47.43 | - | - | 47.43 | - |
| 1-Hexanol | 0.11 | - | - | 0.11 | - |
| Metanol | 0.09 | - | - | 0.09 | - |
| 1-Pentanol | 0.11 | - | - | 0.11 | - |
| Agua | 1,697.85 | - | - | 1,690.04 | - |
| Amoniaco | - | - | 3.5 | 0 | 0.21 |
| Levadura | - | 10 | - | 35.29 | - |
| Etanol | - | - | - | 78.86 | - |
| Dióxido de Carbono | - | - | - | 0 | 76.53 |
| Flujo másico total (kg/lote) | 1,917.96 | 10 | 3.5 | 1,853.94 | 76.75 |
| Flujo volumétrico total (L/lote) | 1,860.41 | 9.52 | - | 1,879.58 | - |

De la tabla 19 se observa que de 170.35 kg de azúcares reductores, 3.5 kg de amoníaco y 10 kg de levadura se obtienen 35.29 kg de levadura, 78.86 kg de etanol y 76.53 kg de dióxido de carbono, de acuerdo a los rendimientos teóricos obtenidos en el apéndice B.

El crecimiento de inóculo al igual que la cocción es una operación unitaria por lote, en la tabla 20 se muestra el modo de operación, los tiempos y los volúmenes de operación.

Tabla 20. Tiempo y volumen total de lote para la tina de crecimiento de inóculo.

| Tina de crecimiento de inóculo | | |
|--------------------------------|------------|-------------|
| Operación | Tiempo (h) | Volumen (L) |
| Carga del 10% J.F | 1 | 1,864.40 |
| Carga de levadura | 0.5 | 1,869.93 |
| Carga de amoniaco | 0.5 | 1,869.93 |
| Fermentación | 15 | 1,875.18 |
| Descarga de inóculo | 17 | 1,875.18 |

De la tabla 20 se observa que el volumen total de inóculo es de 1, 875.18 L, con tiempo de operación de 17 horas para el lote. Los tiempos especificados para cada operación fueron propuestos conforme a datos obtenidos de la fábrica productora de mezcal “Escorpión la Estanzulea” en el estado de Zacatecas y conforme a la experiencia.

La figura 29 muestra el análisis de sensibilidad realizado a 30° C para el fermentador, al cual se le adiciona el inóculo crecido en su fase exponencial. Esto beneficiando la fermentación y no el crecimiento de las levaduras, que es lo que se busca.

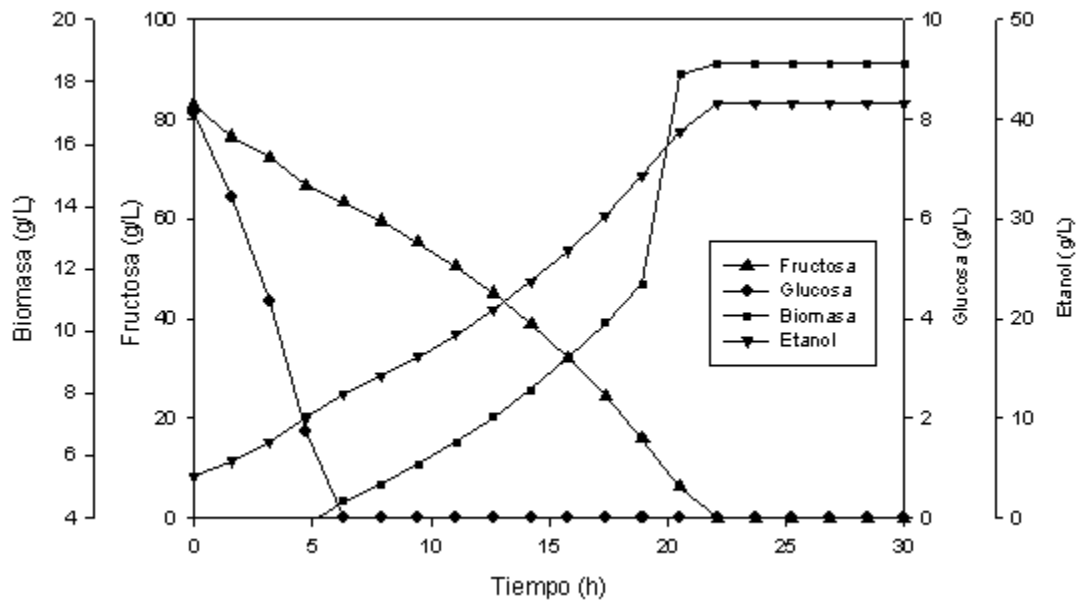


Figura 29. Análisis de sensibilidad para el fermentador.

De la figura 29 se observa al igual que en la tina de crecimiento, que conforme transcurre el tiempo ocurre el decremento de la concentración de fructosa y se beneficia la formación de etanol. El tiempo de fermentación adecuado en el cual ya no hay cambio significativo de concentración corresponde a 22 horas, tiempo en el cual se alcanzan valores de 18.61 g/L de levadura y 41.63 g/L de etanol respectivamente, resultados muy similares a los obtenidos en el crecimiento del inóculo.

Después de 22 horas de fermentación con 1,853.94 kg de inóculo y 32 kg de amoniaco como fuente adicional de energía, se obtienen los resultados de la tabla 21, que representa los balances de materia en el fermentador principal.

Tabla 21. Balance de masa para el fermentador principal.

| Fermentador principal | | | | | |
|---|------------------|-----------------|-----------|------------------|-----------------|
| Nombre | 90% J.F | Inóculo | Amoniaco | Jugo Fermentado | CO ₂ |
| Origen | Entrada | Entrada | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (atm) | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| Temperatura (° C) | 30 | 30 | 30 | 30 | 30 |
| Flujo de componentes (kg/lote) | | | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 3.25 | 0.36 | - | 3.62 | - |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.53 | 0.17 | - | 1.70 | - |
| Ácido acético | 6.98 | 0.77 | - | 7.76 | - |
| 1,2-Butanodiol | 1.34 | 0.14 | - | 1.49 | - |
| 1-Butanol | 0.42 | 0.04 | - | 0.46 | - |
| Fructosa | 1,379.91 | - | - | - | - |
| Furfural | 4.311 | 0.47 | - | 4.79 | - |
| Glucosa | 153.32 | - | - | 0 | - |
| HMF | 426.93 | 47.43 | - | 474.37 | - |
| 1-Hexanol | 1.00 | 0.11 | - | 1.11 | - |
| Metanol | 0.85 | 0.09 | - | 0.94 | - |
| 1-Pentanol | 1.05 | 0.11 | - | 1.17 | - |
| Agua | 15,280.70 | 1,690.03 | - | 16,900.39 | - |
| Amoniaco | - | - | 32 | - | 2.41 |
| Levadura | - | 35.29 | - | 262.96 | - |
| Etanol | - | 78.86 | - | 788.65 | - |
| Dióxido de Carbono | - | - | - | - | 695.72 |
| Flujo másico total (kg/lote) | 17261.657 | 1,853.94 | 32 | 18,449.46 | 698.13 |
| Flujo volumétrico total (L/lote) | 16,743.72 | 1,875.76 | - | 18,666.14 | - |

De la tabla 21 se observa que a partir de 1,533.23 kg de azúcares reductores, 32 kg de amónico y 35.29 kg de levadura, se obtienen 262.96 kg de levadura, 7788.65 kg de etanol y 695.72 kg de dióxido de carbono, de acuerdo a los rendimientos teóricos obtenidos en el apéndice B, que fueron utilizados para establecer los balances de los compuestos participantes.

De igual manera que el cocimiento y el crecimiento de inóculo, la fermentación es una operación unitaria por lote, en la tabla 22 se muestra el modo de operación, los tiempos y los volúmenes de operación.

Tabla 22. Tiempo y volumen total de lote para el fermentador.

| Fermentador Principal | | |
|------------------------------|-------------|-------------|
| Operación | Tiempo (h) | Volumen (L) |
| Carga del 90% J.F | 1 | 16,743.68 |
| Carga de Inóculo | 1 | 18,618.87 |
| Carga de Amoniaco | 0.5 | 18,618.81 |
| Fermentación | 22 | 18,618.87 |
| Descarga de Jugo Fermentado | 24.5 | 18,618.87 |

De la tabla 22 se observa que el volumen total de inóculo es de 18,618.87 L, con tiempo de operación de 24.5 horas para el lote. Los tiempos especificados para cada operación fueron propuestos conforme a datos obtenidos de la fábrica productora de mezcal “Escorpión la Estanzulea” en el estado de Zacatecas y conforme a la experiencia.

Para finalizar con los resultados de la fermentación, la corriente “Jugo Fermentado”, se hace pasar por un filtro para separar la levadura y esta no cause problemas en la torre de destilación al momento de comenzar la separación, en el apéndice E, se encuentra este equipo, junto con los tanques de almacenamiento de mieles amargas y el 10% de jugo formulado para el siguiente lote en el diagrama del proceso completo. La tabla 23 muestra en balance de masa en el filtro, donde se encuentran las cantidades de etanol, agua y congéneres que conforman al mezcal.

Tabla 23. Componentes que conforman el mezcal “Mosto filtrado”.

| Filtro | | | |
|----------------------------------|------------------|------------------|------------------|
| Nombre | Jugo Fermentado | Levadura | Mosto Filtrado |
| Origen | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (atm) | 1 | 1 | 1 |
| Temperatura (° C) | 30 | 30 | 30 |
| flujo de componentes (kg/lote) | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 3.62 | - | 3.62 |
| 3-Metil-1-Butanol | 1.70 | - | 1.70 |
| Ácido acético | 7.76 | - | 7.76 |
| 1,2-Butanodiol | 1.49 | - | 1.49 |
| 1-Butanol | 0.46 | - | 0.46 |
| Furfural | 4.79 | - | 4.79 |
| HMF | 474.37 | - | 474.37 |
| 1-Hexanol | 1.11 | - | 1.11 |
| Metanol | 0.94 | - | 0.94 |
| 1-Pentanol | 1.17 | - | 1.17 |
| Agua | 16,900.39 | - | 16,900.39 |
| Levadura | 262.96 | 262.96 | - |
| Etanol | 788.65 | - | 788.65 |
| Flujo másico total (kg/lote) | 18,449.46 | 262.96347 | 18,186.50 |
| Flujo volumétrico total (L/lote) | 18,666.14 | 250.44 | 18,415.69 |

5.5 La destilación

Sin duda alguna, la parte medular de la destilación consiste en la selección del modelo termodinámico, en las tablas 25-27, se muestra el análisis de la separación utilizando el modelo Wilson, NRTL, y UNIQUAQ para representar el ELV. Por otro lado, la tabla 24 muestra las temperaturas de ebullición de los componentes de la mezcla.

Tabla 24. Temperaturas de ebullición de los compuestos del mezcal.

| Compuesto | Tb (°C) | Compuesto | Tb (°C) |
|-------------------|---------|------------|---------|
| 2-Metil-1-Butanol | 128.7 | Furfural | 161.7 |
| 3-Metil-1-Butanol | 131 | 1-Hexanol | 156.75 |
| Ácido acético | 117.9 | HMF | 170 |
| 1,2-Butanodiol | 196.42 | Metanol | 64.7 |
| 1-Butanol | 118.75 | 1-Pentanol | 137.75 |
| Etanol | 78.29 | Agua | 100 |

Tabla 25. Análisis con el modelo termodinámico Wilson.

| Nombre | Alimentación | Destilado | Fondos |
|--------------------------------------|--------------|----------------|----------|
| Origen | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (bar) | 1.0132 | 1.0132 | 1.0132 |
| Temperatura (° C) | 30 | 82.7726 | 99.8418 |
| Flujo de componentes (kg/h) | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 0.1645 | 0.1643 | 2.71E-04 |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.0776 | 0.0776 | 4.24E-08 |
| Ácido acético | 0.3527 | 0.0281 | 0.3246 |
| 1,2-Butanodiol | 0.0679 | 3.52E-07 | 0.0679 |
| 1-Butanol | 0.0212 | 0.0212 | 4.83E-07 |
| Etanol | 35.8477 | 35.7859 | 0.0623 |
| Furfural | 0.2177 | 0.0085 | 0.2091 |
| 1-Hexanol | 0.0506 | 0.0506 | 1.38E-05 |
| HMF | 21.5622 | 3.5366 | 18.0257 |
| Metanol | 0.0431 | 0.0417 | 0.0013 |
| 1-Pentanol | 0.0535 | 0.0535 | 4.65E-06 |
| Agua | 768.1999 | 40.0311 | 728.1685 |
| Flujo másico total (kg/h) | 826.6600 | 80.0000 | 746.6600 |
| Flujo volumétrico total (L/h) | 840.4888 | 95.4758 | 810.0058 |

Tabla 26. Análisis con el modelo termodinámico NRTL.

| Nombre | Alimentación | Destilado | Fondos |
|------------------------------------|--------------|-----------|----------|
| Origen | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (bar) | 1.0132 | 1.0132 | 1.0132 |
| Temperatura (° C) | 30 | 82.3153 | 100.0443 |
| Flujo de componentes (kg/h) | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 0.1645 | 0.1645 | 1.11E-08 |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.0776 | 0.0776 | 1.64E-07 |
| Ácido acético | 0.3527 | 0.0480 | 0.3046 |
| 1,2-Butanodiol | 0.0679 | 1.43E-06 | 0.0679 |
| 1-Butanol | 0.0212 | 0.0212 | 1.83E-07 |
| Etanol | 35.8477 | 35.8010 | 0.0467 |
| Furfural | 0.2177 | 0.0055 | 0.2121 |
| 1-Hexanol | 0.0506 | 0.0505 | 4.47E-05 |
| HMF | 21.5622 | 0.3946 | 21.1675 |
| Metanol | 0.0431 | 0.0425 | 0.0006 |
| 1-Pentanol | 0.0535 | 0.0535 | 4.83E-07 |

| | | | |
|--------------------------------------|----------|----------------|----------|
| Agua | 768.1999 | 43.1339 | 725.0659 |
| Flujo másico total (kg/h) | 826.6600 | 80.0000 | 746.6600 |
| Flujo volumétrico total (L/h) | 840.4888 | 96.0003 | 809.6651 |

Tabla 27. Análisis con el modelo termodinámico UNIQUAQ.

| Nombre | Alimentación | Destilado | Fondos |
|--------------------------------------|--------------|----------------|----------|
| Origen | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (bar) | 1.0132 | 1.0132 | 1.0132 |
| Temperatura (° C) | 30 | 82.6072 | 99.9619 |
| Flujo de componentes (kg/h) | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 0.1645 | 0.1645 | 6.96E-08 |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.0776 | 0.0776 | 6.25E-09 |
| Ácido acético | 0.3527 | 0.0005 | 0.3521 |
| 1,2-Butanodiol | 0.0679 | 2.53E-06 | 0.0679 |
| 1-Butanol | 0.0212 | 0.0212 | 4.65E-07 |
| Etanol | 35.8477 | 35.7822 | 0.0657 |
| Furfural | 0.2177 | 0.0030 | 0.2146 |
| 1-Hexanol | 0.0506 | 0.0502 | 3.75E-04 |
| HMF | 21.5622 | 1.4189 | 20.1433 |
| Metanol | 0.0431 | 0.0422 | 0.0009 |
| 1-Pentanol | 0.0535 | 0.0535 | 5.84E-07 |
| Agua | 768.1999 | 42.1742 | 726.0255 |
| Flujo másico total (kg/h) | 826.6600 | 80.0000 | 746.6600 |
| Flujo volumétrico total (L/h) | 840.4888 | 95.8430 | 809.7703 |

De las tablas 25-27, al realizar las simulaciones con los modelos termodinámicos mencionados en éstas, se observa un comportamiento singular de analizarse, ya que los compuestos: 2-Metil-1-Butanol, 3-Metil-1-Butanol, 1-Butanol y 1-Pentanol con temperaturas por encima de la temperatura de ebullición del agua, tabla 24, se separan junto con el etanol por la corriente de destilado, efecto inesperado por el marco conceptual de la destilación, basado en las menores temperaturas de ebullición.

Por otro lado, el modelo termodinámico Wilson y UNIQUAQ dan resultados muy similares en cuanto a las temperaturas del destilado y fondos, así como en los flujos molares y la cantidad de etanol por hora. En cambio NRTL es seleccionado ya que es específico para la representación del equilibrio líquido-vapor para mezclas orgánicas polares en presencia de agua.

Estas comparaciones de modelos termodinámicos permiten demostrar el efecto y ruta de separación a través de la corriente de destilado de los compuestos con puntos de ebullición altos, tabla 24.

Con la alimentación de la tabla 23, “Mosto filtrado”, correspondiente a 826.6592 kg/h y habiéndose seleccionado un destilado de 80 kg/h, 10 etapas de equilibrio, localización de la alimentación en la etapa 5 y un reflujo de 1.61 mol respectivamente del análisis de sensibilidad, apéndice D, se obtienen los resultados de la tabla 28, que muestra el balance masa en la columna de destilación.

Tabla 28. Balance de masa en la columna de destilación.

| Nombre | Alimentación | Destilado | Fondos |
|--------------------------------------|--------------|----------------|----------|
| Origen | Entrada | Salida | Salida |
| Presión (bar) | 1.0132 | 1.0132 | 1.0132 |
| Temperatura (° C) | 30 | 82.3153 | 100.0443 |
| Flujo de componentes (kg/h) | | | |
| 2-Metil-1-Butanol | 0.1645 | 0.1645 | 1.11E-08 |
| 3-Metil-1-Butanol | 0.0776 | 0.0776 | 1.64E-07 |
| Ácido acético | 0.3527 | 0.0480 | 0.3046 |
| 1,2-Butanodiol | 0.0679 | 1.43E-06 | 0.0679 |
| 1-Butanol | 0.0212 | 0.0212 | 1.83E-07 |
| Etanol | 35.8477 | 35.8010 | 0.0467 |
| Furfural | 0.2177 | 0.0055 | 0.2121 |
| 1-Hexanol | 0.0506 | 0.0505 | 4.47E-05 |
| HMF | 21.5622 | 0.3946 | 21.1675 |
| Metanol | 0.0431 | 0.0425 | 0.0006 |
| 1-Pentanol | 0.0535 | 0.0535 | 4.83E-07 |
| Agua | 768.1999 | 43.1339 | 725.0659 |
| Flujo másico total (kg/h) | 826.6600 | 80.0000 | 746.6600 |
| Flujo volumétrico total (L/h) | 840.4888 | 96.0003 | 809.6651 |

De la tabla 28 se puede observar que se obtuvieron 96 L/h o 2,112 L/lote de mezcal, con temperaturas de 82.31°C y 100°C en la corriente de destilado y fondos respectivamente.

La figura 30 y 31 muestran el perfil de temperatura y %V de etanol respectivamente a lo largo de las 10 etapas necesarias para obtener un mezcal con 50.5%V de etanol, las tablas de estos resultados se muestran en el apéndice D.

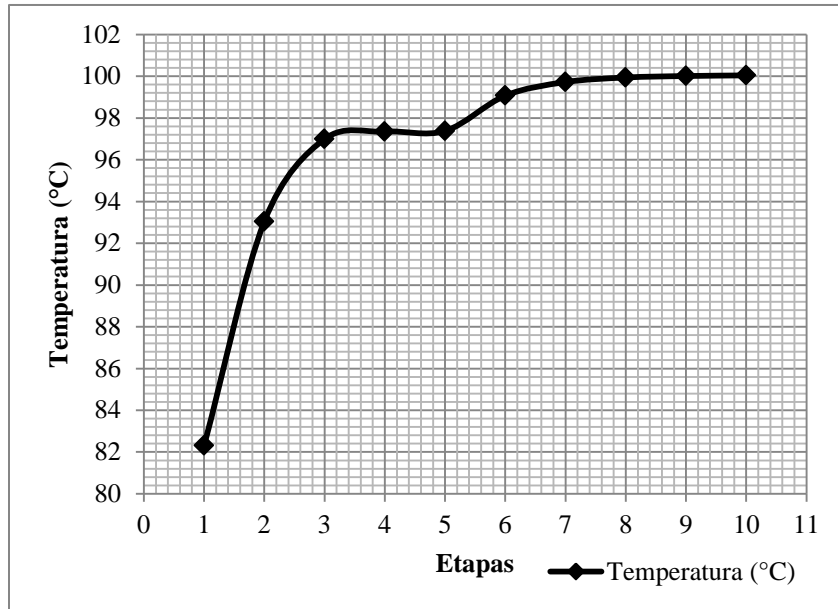


Figura 30. Perfil de temperatura en cada etapa.

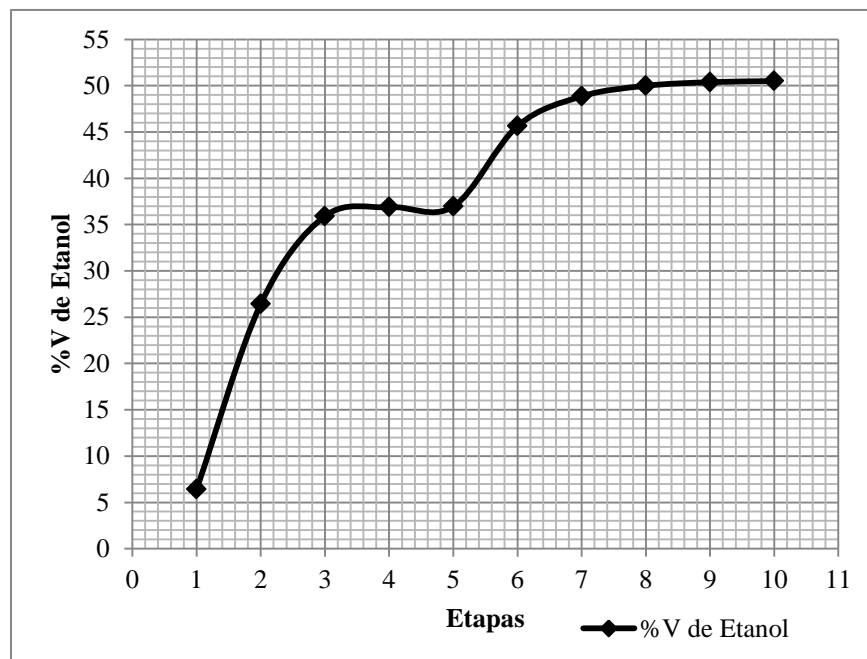


Figura 31. Perfil de %V de etanol en cada etapa.

La figura 32 y 33 muestran el perfil de %V de etanol a lo largo de las 10 etapas de equilibrio variando el reflujo molar y la etapa de alimentación.

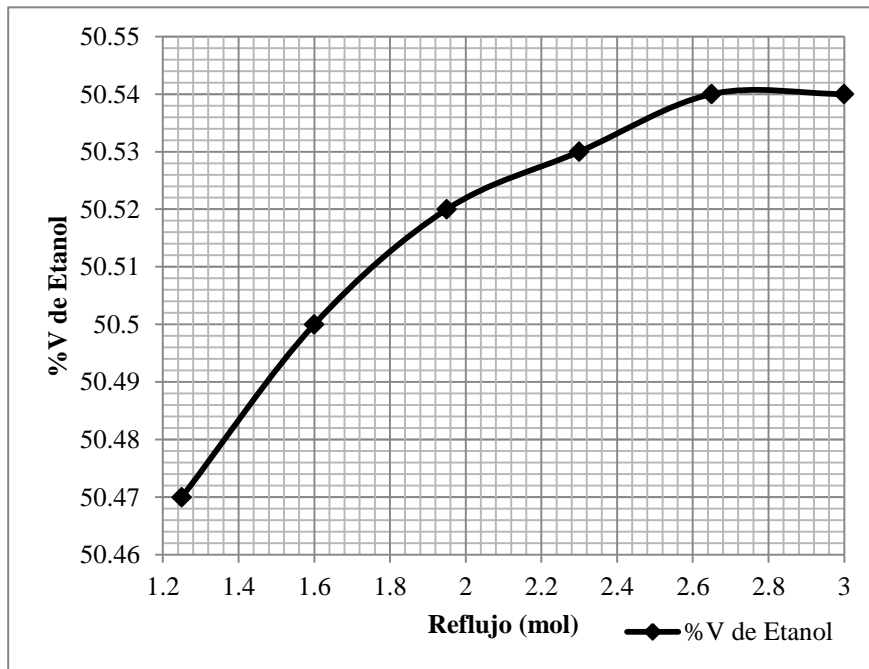


Figura 32. Perfil de % V de etanol variando el reflujo.

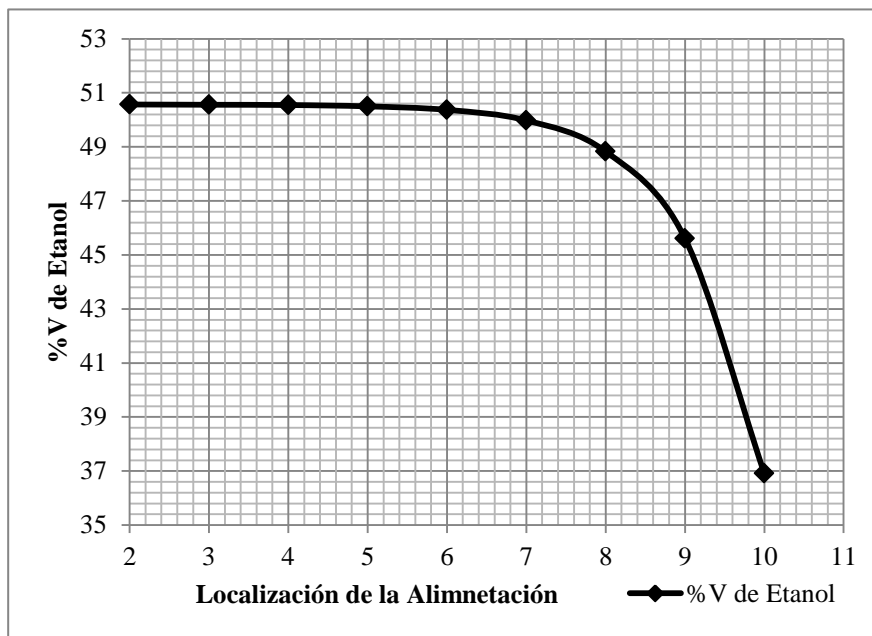


Figura 33. Perfil de % V de etanol variando la alimentación.

La tabla 29 muestra la comparación de mezcal obtenido de la simulación, con los requerimientos para los compuestos que especifica la NOM-070.

Tabla 29. Mezcal simulado vs NOM-070.

| Componente | Simulado mg/100 ml | NOM-070 mg/100 ml |
|-----------------------------|-------------------------------|------------------------------|
| 2-Metil-1-Butanol | 182.28 | |
| 3-Metil-1-Butanol | 86.04 | |
| Ácido acético | 55.35 | 0-170 |
| 1,2-Butanodiol | 0.0014 | |
| 1-Butanol | 23.25 | |
| Etanol | 50.5 %V | 36-55 %V |
| Furfural | 4.98 | |
| 1-Hexanol | 50.04 | |
| HMF | 92.37 | |
| Metanol | 47.22 | 30-300 |
| 1-Pentanol | 59.27 | |
| Alcoholes Superiores | 350.84 | 100-400 |

De la tabla 29 se observa que se obtuvo un mezcal con los compuestos mayoritarios dentro de los intervalos que marca la NOM-070.

El tiempo aproximado de proceso se muestra en la tabla 30, calculado en 76 h, según las consideraciones de cada una de las operaciones por lote y continuas. En el apéndice E se muestra el diagrama completo del proceso.

Tabla 30. Tiempo estimado de proceso.

| Etapas del Proceso | |
|---------------------------|-------------------|
| Operación | Tiempo (h) |
| Cocimiento | 15 |
| Molienda | 14.5 |
| Fermentación | 24.5 |
| Destilación | 22 |
| Total | 76 |

Finalmente, las mejores condiciones obtenidas a lo largo del proceso de producción son: en la cocción se obtuvo un tiempo de cocimiento de 10 horas a temperatura de 100°C, permitiendo obtenerse 1,553.52 kg de azúcares reductores, en la molienda se perdieron 17.2 kg de fructosa y glucosa correspondiente al 1% m/m, efecto de los equipos mecánicos utilizados, aunado a esto, en la formulación se adicionaron 11,000 kg de agua para disminuir la concentración de los azúcares a 12°Brix para evitar efectos represores del catabolismo de las levaduras, hecha la dilución se separó la corriente formulada en dos corrientes, una con 10% m/m y 90% m/m, la primera con 1,917.96 kg y 17,261.657 kg respectivamente. Al jugo con 10% m/m se llevó a fermentar con 10 kg de levaduras y 3.5 kg de amoníaco para obtener el inóculo, se determinó que el tiempo de crecimiento es de 15 horas, tiempo en el cual al 90% m/m de jugo le fue agregado este cultivo iniciador, adicionándose también 32 kg de amoníaco, el tiempo de fermentación fue calculado en 22 horas, donde se obtuvieron 788.65 kg de etanol con una concentración de 42.05 g/L. Después de ser filtrado el mosto muerto, se alimentó a la columna de destilación 826.6592 kg/h de jugo fermentado, se llevó a cabo la destilación utilizando el modelo termodinámico NRTL para predecir el ELV, ecuación propia para mezclas orgánicas polares en presencia de agua. Determinándose mediante análisis de sensibilidad que la columna sería diseñada con un flujo de destilado de 80 kg/h, una cantidad de 10 etapas de equilibrio, localización de la alimentación en la etapa 5 y un reflujo molar de 1.61, para obtenerse 90 L/h de mezcal equivalente a 2,112 L/lote con un 50.50%V de etanol, cumpliéndose con las características organolépticas de calidad que rige la NOM-070. Para esto fue necesario emplear 4.73 kg de agave crudo para producir 1 L de mezcal. El tiempo total de lote, que incluye las secuencias de operación para cada etapa, se estimó en 76 horas, tiempo muy por debajo de los tiempos que utilizan las destiladoras que conocen poco sus procesos, semanas de proceso. Por lo que es de gran importancia que los productores michoacanos tecnifiquen los procesos artesanales para cumplir con la NOM-070, mejoren los rendimientos y obtengan un producto con características organolépticas constantes que les permita competir con el mercado nacional e internacional.

CAPÍTULO V. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1 Conclusiones

- Los simuladores SPD® y Aspen Plus® permitieron realizar el análisis de sensibilidad y simulación de la cocción, molienda, fermentación y destilación, estableciéndose los requerimientos de materia prima, la configuración y la propuesta tecnológica para los productores michoacanos.
- Los modelos termodinámicos Wilson, NRTL y UNIQUAC demostraron el comportamiento de la separación hacia el flujo de destilado de los compuestos 2-Metil-1-Butanol, 3-Metil-1-Butanol, 1-Butanol, 1-Pentanol y 1-Hexanol con temperaturas de ebullición por encima del agua. Efecto provocado por la alta no idealidad de la mezcla y la posible formación de azeótropos con temperatura mínimas de ebullición.
- Se obtuvieron 2,112 L de mezcal con un contenido alcohólico de 50.5 %V teóricamente a partir de 10,000 kg de agave mezcalero con un 22% de azúcares reductores. Utilizándose 4.73 kg de agave crudo por litro de mezcal.
- El tiempo estimado de proceso se estimó de 76 horas equivalente a 3.16 días, iniciando con la llegada de la materia prima hasta la obtención de 2,112 litros de mezcal.
- Se cumplieron los requerimientos de la NOM-070 con contenidos de ácido acético de 55.35 mg/100 ml, metanol de 47.22 mg/100 ml, alcoholes superiores de 350.84 mg/100 ml y etanol de 50.5 %V.

5.2 Recomendaciones

- Caracterizar el agave *Cupreata*, *Inaequidens* y *Americana*, materia prima utilizada en Michoacán, así como el cálculo de los rendimientos experimentales a partir de azúcares propios de estos agaves en la fermentación para llevar a cabo simulaciones con el proceso propuesto en esta investigación.
- Colectar información de campo en las fábricas mezcaleras para realizar simulaciones con casos de estudio específicos.
- Realizar simulaciones para la destilación por lote utilizada en la mayoría de las fábricas mezcaleras, así como el análisis económico y ambiental para tener un conocimiento integral del proceso de producción y poder optimización del proceso.

BIBLIOGRAFÍA

- Álvarez D, (2011). “Simulación del Proceso de Producción de Biodiesel a partir de aceites de *Jatropha* e *Higuerilla*”. Tesis de Maestría en Ciencias en Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán, México.
- Cárdenas M, (2011). “Inventario de fuentes de contaminación en el sector mezcalero de Zacatecas, mediante el uso de la Técnica ERFCA”. Tesis de Licenciatura, Unidad Académica de Ciencias Médicas. Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas, Zacatecas. México.
- Cedeño M., Álvarez J. (2000). Production of tequila from agave: historical influences and contemporary processes. Tequila Herradura, S.A. de C.V. Ex-Hda San José del Refugio, Amatitán, Jalisco, México.
- Cortez E, (2003). “Fundamentos de Ingeniería para el Tratamiento de los Biosólidos generados por la depuración de aguas servidas de la Región Metropolitana”. Tesis de licenciatura.
- CIATEJ (2004). Ciencia y Tecnología del Tequila: Avances y Perspectivas. Guadalajara Jalisco. México.
- Chacón-Villalobos A (2006). Perspectivas Agroindustriales Actuales de los Oligofructosacáridos (fos). Estación Experimental Alfredo Volio Mata. Facultad de Ciencias Agroalimentarias. Universidad de Costa Rica.
- Cházaro, M. y M. P. Hernández (2004). Avances en el estudio de los Agaves del centro de México. Boletín Nakari 15(1): 8-15.
- Colunga-García M. P., Zizumbo-Villareal D. Marín P (2004). Origen, domesticación y diversidad del tequila (*Agave Tequilana Weber*) y otros mezcales del occidente de México. Centro de Investigación Científica de Yucatán-Academia Mexicana de Ciencia. México.

- De León-Rodríguez A., Escalante-Minakata P., Barba de la Rosa A.P., Blaseck H.P (2007). Optimization of fermentation conditions for the production of the mezcal from *Agave salmiana* using response surface methodology. División de Biología Molecular. Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnología. San Luis Potosí, México.
- De León-Rodríguez A., Escalante-Minakata P., Jiménez-García I., Ordóñez-Acevedo L. G., Flores-Flores J .L., Barba de la Rosa A.P., (2007). Characterization of Volatile Compounds from Ethnic Agave Alcoholic Beverages by Gas Chromatography-Mass Spectrometry. División de Biología Molecular. Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnología, San Luis Potosí, México.
- Durán H., Pulido J (2007). Análisis de la Molienda en el Proceso de Elaboración del Mezcal. Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ingeniería. Información Tecnológica- Vol 18 N° 1.
- Escalante-Minakata P., Blaschek H.P., Barba de la Rosa A.P., Santos L., De León-Rodríguez A (2008). Identification of yeast and bacteria involved in the mezcal fermentation of *Agave Salmiana*. División de Biología Molecular, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnología, San Luis Potosí, México.
- Felder, R.M. Rousseau, R.W. (2004). "Principios Elementales de los Procesos Químicos", pág 237-238 y 294, 3ª ed. Addison-Wesley Iberoamericana, México.
- Gallardo, V. J., Gschaedler, M. A. C., Cházaro, B. M., Tapia, C. E., Villanueva, R. S., Salado, P. J. H., Villegas, G. E., Medina, N. R., Aguirre, O. M. & Vallejo, P. M. (2008). La producción de mezcal en el estado de Michoacán, México. Págs. 11, 30-32, 63, 112.
- García M., Jiménez H., Navarrete J.L., Rico R., Miranda R., Botello A (2011). Kinetic Study of Thermal Hydrolysis of *Agave salmiana* for Mezcal Production. Departamento de Ingeniería Química-Bioquímica. Instituto Tecnológico de Celaya, Celaya Guanajuato, México.

- García-Soto M. J., Chávez-Mireles H. E., Morales Aguilar J. J., Botello-Álvarez E., Jiménez-Islas H., Rico-Martínez R., Navarrete-Bolaños J. L (2011). Bioingeniería, Departamento de Ingeniería Química-Bioquímica, Instituto Tecnológico de Celaya. Celaya Gto. México.
- Geankoplis C. J (1998). Procesos de transporte y Operaciones Unitarias. Universidad de Minesota. 3ª ed. Edit. Continental. México. Págs. 712-753.
- Gutiérrez M, Coronado, E. Acedo Félix, Valenzuela Quintanar A. I. (2007). Industria del Bacanora y su proceso de elaboración. Ciencia y Tecnología Alimentaria. Sociedad Mexicana de Nutrición y Tecnología de alimentos. Reynosa, México.
- Ibarra E, Botero J, Cortés C (2010). Ingeniería de Tequilas. Universidad Nacional de Colombia. Facultad de Ingeniería. Colombia. Págs. 31-37. ISBN 979-958-719-541-5.
- Ignacio F., Flores J., López Jyl (2005). Evaluación Ambiental de una Fábrica de Mezcal del estado de Oaxaca y Desarrollo sustentable. Centro Interdisciplinario de Investigación para el Desarrollo Integral Regional, Unidad Oaxaca del Instituto Politécnico Nacional. Xicotlán, Oaxaca. México.
- Íñiguez-Ledezma J (2010). Algunas Consideraciones Teórico-Prácticas sobre la Destilación Intermitente en Alambique Simple de mostos Fermentados, y Ordinarios. Revista Ingeniería Primero. N° 17, págs. 31-51.
- Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial (2007). Extracto de la solicitud para modificar la Declaración de Protección de la Denominación de Origen Mezcal. Diario Oficial de la Federación.
- Lappe-Oliveras P., Moreno-Terrazas R., Arrizón-Gaviñón J., Herrera-Suárez T., García-Mendoza A. and Gschaedler-Mathis A. (2008). Yeasts associated with the production of Mexican alcoholic nondistilled and distilled Agave beverages. *FEMS Yeast Res* 8. 1037-1052.

- Madrigal L., Sangronis E (2007). La inulina y derivados como ingredientes claves en alimentos funcionales. Universidad Simón Bolívar. Departamento de Procesos Biológicos y Bioquímicos. Caracas, Venezuela.
- Mancilla-Margalli A., López M (2002). Generation of Maillard Compounds from Inulin during the Thermal Processing of *Agave tequilana* Weber Var. azul. Unidad de Biotecnología e Ingeniería Genética de Plantas, Centro de Investigación y Estudios Avanzados del IPN, Irapuato, Gto., México.
- Michel-Cuello C., Juárez Flores B.I., Aguirre Rivera J. R., Pinos-Rodríguez J. M (2008). Quantitative Characterization of Nonstructural Carbohydrates of Mezcal Agave (*Agave Salmiana* Otto ex Salm-Dick). Programa Multidisciplinario de Posgrado en Ciencias Ambientales; Instituto de Investigación de Zonas Desérticas y Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, SLP México and Ohio Agricultural Research and Development Center, The Ohio State University, Wooster, Ohio.
- Norma Oficial Mexicana NOM-070-SCFI (1994). Bebidas alcohólicas. Mezcal. Especificaciones.
- Pérez Elia, (2012). “Caracterización fermentativa de levaduras productoras de etanol a partir de *Agave cupreata* en la elaboración de mezcal. Tesis de Maestría. Instituto Tecnológico de Morelia, Michoacán. México.
- Ramírez A, (2007). “Modelado de un gasificador estratificado de lecho móvil de biomasa, utilizando CFD”. FES Zaragoza–UNAM, Cd. de México.
- Sáenz C, (2001). “Modelación Dinámica Fenomenológica de un Biorreactor Continuo de Reducción de sulfato”. Tesis Doctoral en Ciencias de la Medición Química. Santiago de Chile.
- Sandler I, (2006). Chemical, Biochemical and Engineering Thermodynamics. University of Delaware. Jhon Wiley & Sons, Inc. Págs 885-892.
- Seader J. D., Henley E. J., Keith Roper D (2011). Separation Process Principles. Chemical and Biochemical Operations. Third Edition. Jhon Wiley & Sons, Inc. Págs 206-500.

Secretaría de Comercio y Fomento Industrial, SCFI (1994). NORMA Oficial Mexicana NOM-070-SCFI-1994, Bebidas alcohólicas-Mezcal-Especificaciones.

Scenna N, J., y colaboradores (1999). Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos. Universidad del Rosario. Colombia. Págs. 741-744.

Torija J., Mas A., y colaboradores (2002). Selección de Levaduras. Tecnología de los Alimentos. Facultad de Enología de Tarragona, Universidad Rovira i Virgili, España.

Vera-Guzmán A. M., Santiago-García P. A., López G (2009). Compuestos Volátiles Aromáticos Generados durante la elaboración de Mezcal de agave *Angustifolia* y agave *Potatorum*. Centro Interdisciplinario de Investigación para el Desarrollo Integral Regional, Unidad Oaxaca, Instituto Politécnico Nacional (CIIDIR-IPN-Oaxaca). Sta. Cruz Xoxocotlán, Oaxaca. Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, CINVESTAV-Unidad Irapuato, Irapuato, Guanajuato, México.

www.siap.gob.mx/index.php?option=com_wrapper&view=wrapper&Itemid=351. Cierre de la Producción Agrícola por Estado: Michoacán, Agave, 2011.

www.comercam.org. Consejo Mexicano Regulador de la Calidad del Mezcal.

www.mezcalpedia.com/index.php?option=com_content&view=section&id=9&Itemid=59. Rutas mezcaleras de Michoacán.

APÉNDICES

A. ALTA Y REGISTRO DE COMPONENTES EN LA BASE DE DATOS DE SPD®

Previo a la creación del diagrama de flujo de proceso se deben de especificar inicialmente todos los compuestos que estarán presentes en la simulación, ya que SPD® al momento de especificar las corrientes requerirá de las composiciones que llevan cada una, así como sus condiciones principales (P y T). Esto es posible situándose en el menú de “Tareas” (**Tasks**), seleccionándose la opción “Componentes puros” (**Pure Components**) o “Mezcla de componentes” (**Stock Mixture**), según sea el caso.

Existen dos maneras de las cuales se puede obtener la información de los componentes participantes en la simulación, estas son:

- La base de datos de SPD®, opción ya configurada desde el momento en el que se accede a la ventana.
- La base de datos personal del usuario: esta es una base de datos especial donde el usuario puede registrar los componentes que le interesan y que no se encuentran en la base de datos antes mencionada.

Los pasos para dar de alta un componente participante en la simulación son:

1. Seleccionar “Componentes puros” o “Mezcla de componentes”, enseguida se selecciona la opción Registrar (**Register**) donde se despliega la ventana de la figura 34.
2. Se escribe en el apartado de búsqueda el compuesto a utilizar, ya sea por su nombre científico, comercial o CAS, se da doble click sobre él o en la opción Registrar.

Los pasos para registrar un componente en la base de datos del usuario son los siguientes:

1. Seleccionar “Componentes puros” o “Mezcla de componentes”, enseguida se selecciona la opción Registrar (**Register**) donde se despliega la ventana de la figura 34.

- Una vez desplegada la ventana anterior, en la parte superior derecha, se encuentran tres íconos coloreados, se selecciona el primero de izquierda a derecha en cual muestra otra ventana de trabajo como se muestra en la figura 35, donde se coloca la información general del compuesto, se selecciona la opción OK y muestra la venta de la figura 36, donde es necesario completar las diferentes pestañas correspondientes principalmente a las propiedades físicas constantes y las que dependen de la temperatura, información obtenida de la bibliografía. Completándose el registro dando en la opción OK.

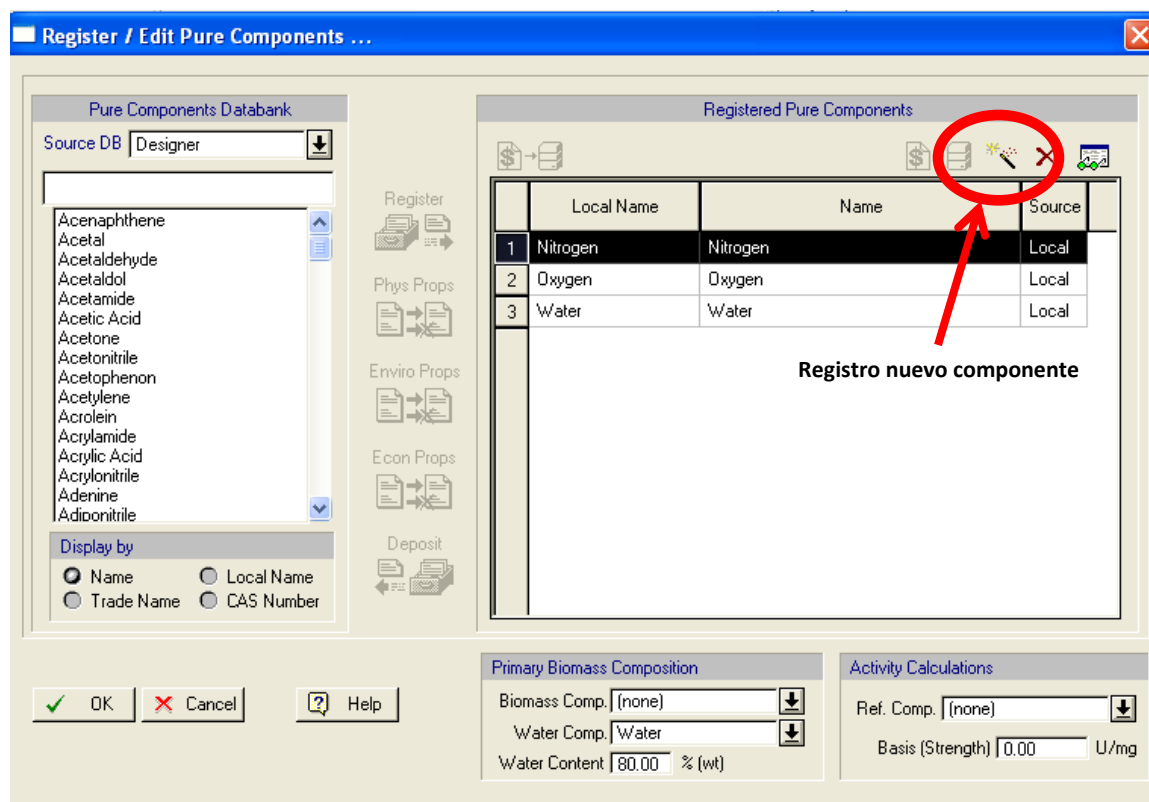
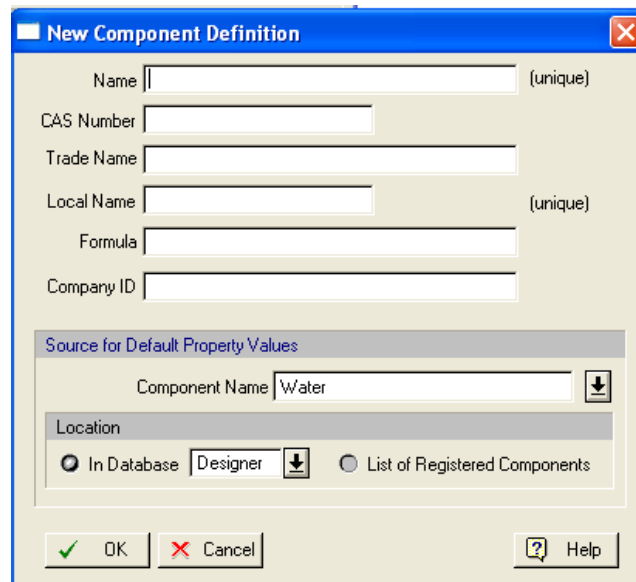
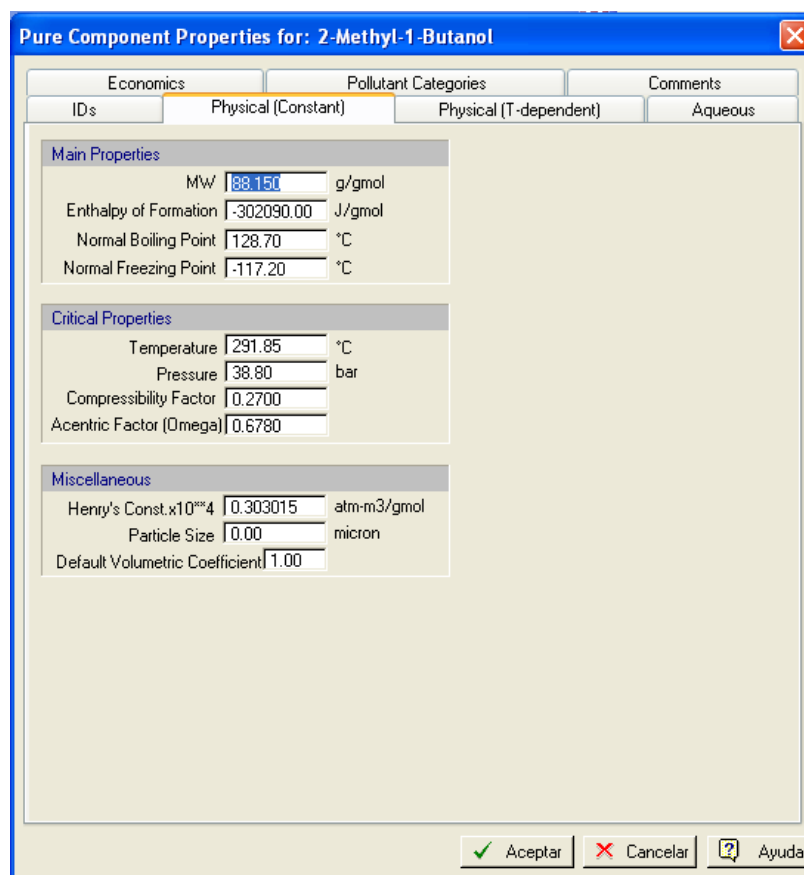


Figura 34. Registro de un nuevo componente.



The dialog box titled "New Component Definition" contains several input fields: Name (with "(unique)" label), CAS Number, Trade Name, Local Name (with "(unique)" label), Formula, and Company ID. Below these is a section for "Source for Default Property Values" with a "Component Name" dropdown set to "Water" and a "Location" section with radio buttons for "In Database" (selected) and "List of Registered Components". The "In Database" option has a "Designer" dropdown. At the bottom are "OK", "Cancel", and "Help" buttons.

Figura 35. Definición del compuesto.



The dialog box titled "Pure Component Properties for: 2-Methyl-1-Butanol" has tabs for "Economics", "Pollutant Categories", and "Comments". Under "Pollutant Categories", there are sub-tabs for "Physical (Constant)", "Physical (T-dependent)", and "Aqueous". The "Physical (Constant)" sub-tab is active, showing three sections of properties:

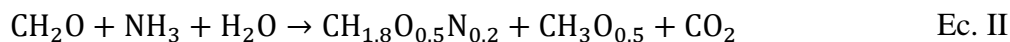
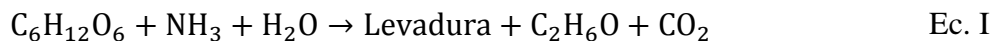
- Main Properties:**
 - Mw: 88.150 g/mol
 - Enthalpy of Formation: -302090.00 J/gmol
 - Normal Boiling Point: 128.70 °C
 - Normal Freezing Point: -117.20 °C
- Critical Properties:**
 - Temperature: 291.85 °C
 - Pressure: 38.80 bar
 - Compressibility Factor: 0.2700
 - Acentric Factor (Omega): 0.6780
- Miscellaneous:**
 - Henry's Const. x10**4: 0.303015 atm-m3/gmol
 - Particle Size: 0.00 micron
 - Default Volumetric Coefficient: 1.00

At the bottom are "Aceptar", "Cancelar", and "Ayuda" buttons.

Figura 36. Propiedades del componente.

B. BALANCES ATÓMICOS, MOLECULARES Y MÉTODO DE GAUSS PARA EL CÁLCULO DE LOS RENDIMIENTOS

Se tiene la reacción estequiométrica 2 que involucra la fórmula elemental de la levadura basada en un mol de C:



Se realizan los balances atómicos y moleculares para cada elemento participante (CHON) en la ecuación estequiométrica 2, de los cuales resultan cuatro ecuaciones con cinco incógnitas:

$$1 = Y_{B/S} + Y_{P/S} + Y_{C/S} \quad \text{Ec. III}$$

$$2 + 3Y_{N/S} + 2Y_{W/S} = 1.8Y_{B/S} + 3Y_{P/S} \quad \text{Ec. IV}$$

$$Y_{N/S} = 0.2Y_{B/S} \quad \text{Ec. V}$$

$$1 + Y_{W/S} = 0.5Y_{B/S} + 0.5Y_{P/S} + 2Y_{C/S} \quad \text{Ec. VI}$$

Se escriben en forma matricial las ecuaciones anteriores como Matriz aumentada:

$$\begin{array}{cccccc}
 Y_{N/S} & Y_{W/S} & Y_{B/S} & Y_{P/S} & Y_{C/S} & \text{Coef.} \\
 \left(\begin{array}{cccccc}
 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 3 & 2 & -1.8 & -3 & 0 & -2 \\
 1 & 0 & -0.2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & -0.5 & -0.5 & -2 & -1
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

Se reordena la matriz aumentada con la finalidad de encontrar el elemento pivote para llevar a cabo la solución de la Matriz aumentada con el método de Gauss.

$$\begin{array}{cccccc}
 Y_{N/S} & Y_{W/S} & Y_{B/S} & Y_{P/S} & Y_{C/S} & \text{Coef.} \\
 \left(\begin{array}{cccccc}
 1 & 0 & -0.2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & -0.5 & -0.5 & -2 & -1 \\
 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 3 & 2 & -1.8 & -3 & 0 & -2
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

La solución se determina formando un triángulo inferior izquierdo con la diagonal principal conformada por 1's y ceros los demás elementos, con operaciones básicas de

sumas y restas entre las filas, con la finalidad de realizar una sustitución hacia atrás y encontrar cada una de las incógnitas que corresponden a los rendimientos.

Dando como resultado la siguiente matriz equivalente y las relaciones elementales de las ecuaciones 7-10:

$$\begin{array}{cccccc}
 Y_{N/S} & Y_{W/S} & Y_{B/S} & Y_{P/S} & Y_{C/S} & \text{Coef.} \\
 \left(\begin{array}{cccccc}
 0 & 0 & -0.2 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 1 & 0 & 0 & -1.5015 & -0.5005 \\
 0 & 0 & 1 & 0 & 3.33 & 1.111 \\
 0 & 0 & 0 & 1 & -2.333 & -0.111
 \end{array} \right)
 \end{array}$$

$$Y_{N/S} - 0.2Y_{B/S} = 0 \quad \text{Ec. VII}$$

$$Y_{W/S} - 1.5015Y_{C/S} = -0.5005 \quad \text{Ec. VII}$$

$$Y_{B/S} + 3.33Y_{C/S} = 1.111 \quad \text{Ec. IX}$$

$$Y_{P/S} - 2.333Y_{C/S} = -0.111 \quad \text{Ec. X}$$

Una vez encontrada la solución al sistema de cuatro ecuaciones con cinco incógnitas, se resuelven para encontrar los rendimientos. Para esto se realiza la siguiente consideración, tomando la definición del rendimiento $Y_{B/S}$, que relaciona C moles de levadura ($\text{CH}_{1.8}\text{O}_{0.5}\text{N}_{0.2}$) a partir de C moles de molécula de sustrato en la fructosa y glucosa ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$).

$$Y_{B/S} = \frac{C_{\text{Molecular de levadura}}}{C_{\text{Molecular de sustrato}}} = \frac{1}{6} = 0.16$$

Determinado el valor de $Y_{B/S} = 0.16$, se resuelven las ecuaciones 7-10 obteniéndose los siguientes resultados para los rendimientos restantes:

$$Y_{N/S} = 0.032$$

$$Y_{W/S} = -0.072$$

$$Y_{P/S} = 0.553$$

$$Y_{C/S} = 0.285$$

Cabe señalar que el rendimiento negativo obtenido para $Y_{W/S}$ corresponde al consumo de agua, como lo marca Sandler, 2004, se obtiene su valor absoluto debido a que carece de significado físico, por lo que $Y_{W/S} = 0.072$.

Para obtener los rendimientos en masa, cada resultado obtenido del método basado en 1 mol de C elemental, se multiplica por las relaciones de C moles de las moléculas del sustrato (fructosa y glucosa), posteriormente por sus pesos moleculares y se obtienen los rendimientos máxicos como se muestra a continuación:

$$Y_{N/S} = 0.032 \frac{\text{mol NH}_3}{\text{mol CH}_2\text{O}} * 6 \text{ mol C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 * \frac{17.01 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{180.06 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}} = 0.0181$$

$$Y_{W/S} = 0.072 \frac{\text{mol H}_2\text{O}}{\text{mol CH}_2\text{O}} * 6 \text{ mol C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 * \frac{18 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{180.06 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}} = 0.0431$$

$$Y_{P/S} = 0.053 \frac{\text{mol CH}_3\text{O}_{0.5}}{\text{mol CH}_2\text{O}} * \frac{6 \text{ mol C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6}{2 \text{ mol C}_2\text{H}_6\text{O}} * \frac{46.02 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{180.06 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}} = 0.4346$$

$$Y_{C/S} = 0.235 \frac{\text{mol CO}_2}{\text{mol CH}_2\text{O}} * 6 \text{ mol C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 * \frac{44.01 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{180.06 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}} = 0.4260$$

$$Y_{B/S} = 0.16 \frac{\text{mol CO}_2}{\text{mol CH}_2\text{O}} * 6 \text{ mol C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6 * \frac{24.61 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}}{180.06 \frac{\text{kg}}{\text{mol}}} = 0.1394$$

C. INGRESO DE INFORMACIÓN CINÉTICA PARA LAS REACCIONES DE HIDRÓLISIS Y DEGRADACIÓN

Las reacciones cinéticas por lote, son reacciones dependientes del tiempo, temperatura y concentración de los participantes, por lo que es necesario disponer de parámetros que se obtienen de la relacionan de estas variables mediante las ecuaciones de rapidez de reacción y constante de rapidez de reacción (Arrhenius). La forma de introducir esta información en SPD®, se enlista a continuación:

- Una vez especificada la secuencia de operación del reactor por lote, se le da click derecho al módulo que representa al reactor, se despliega la opción “Datos de operación” (**Operation Data**), se selecciona “Reacción cinética por lote” (**Batch Kinetic Reaction**) y se despliega la ventana de la figura 37, donde se elige el agente de calentamiento, la temperatura de reacción y el tiempo de reacción.

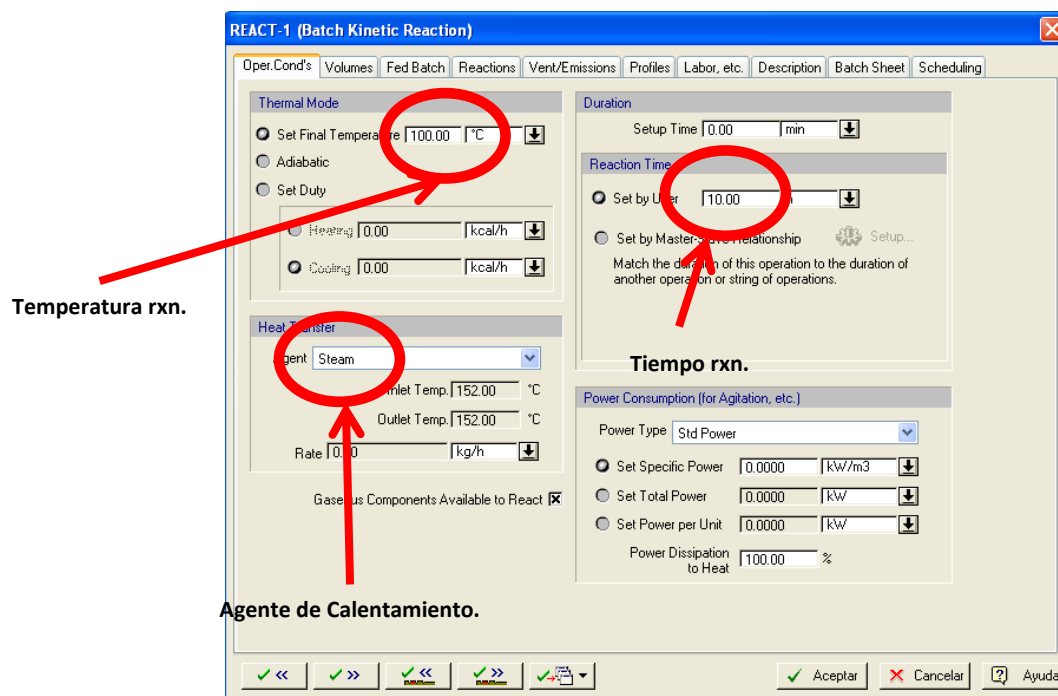


Figura 37. Reacciones cinéticas por lote.

- En la pestaña de “Reacciones” (**Reactions**) se selecciona el matraz (ícono de reacciones), donde se dan de alta las reacciones estequiométricas siguientes, figura 38:



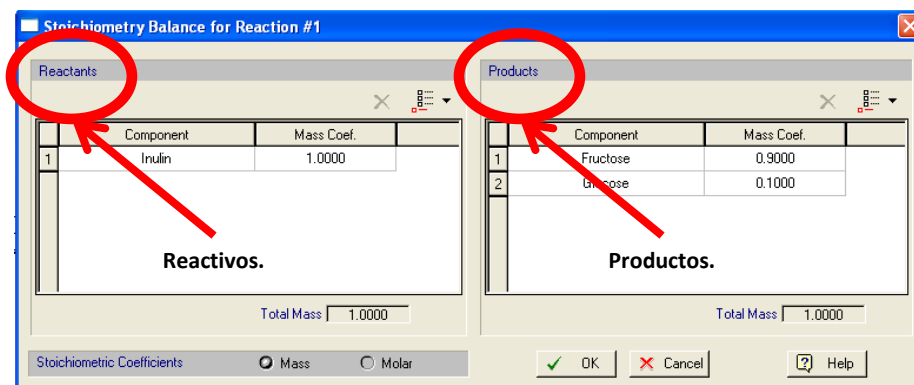


Figura 38. Balance estequiométrico para las reacciones.

- En la misma pestaña de “Reacciones” (**Reactions**), ahora se selecciona el ícono **R**, correspondiente a los términos de rapidez de reacción, donde se colocará, el compuesto de referencia, el orden de reacción, el factor de frecuencia y la energía de activación para cada reacción estequiométrica, figura 39.

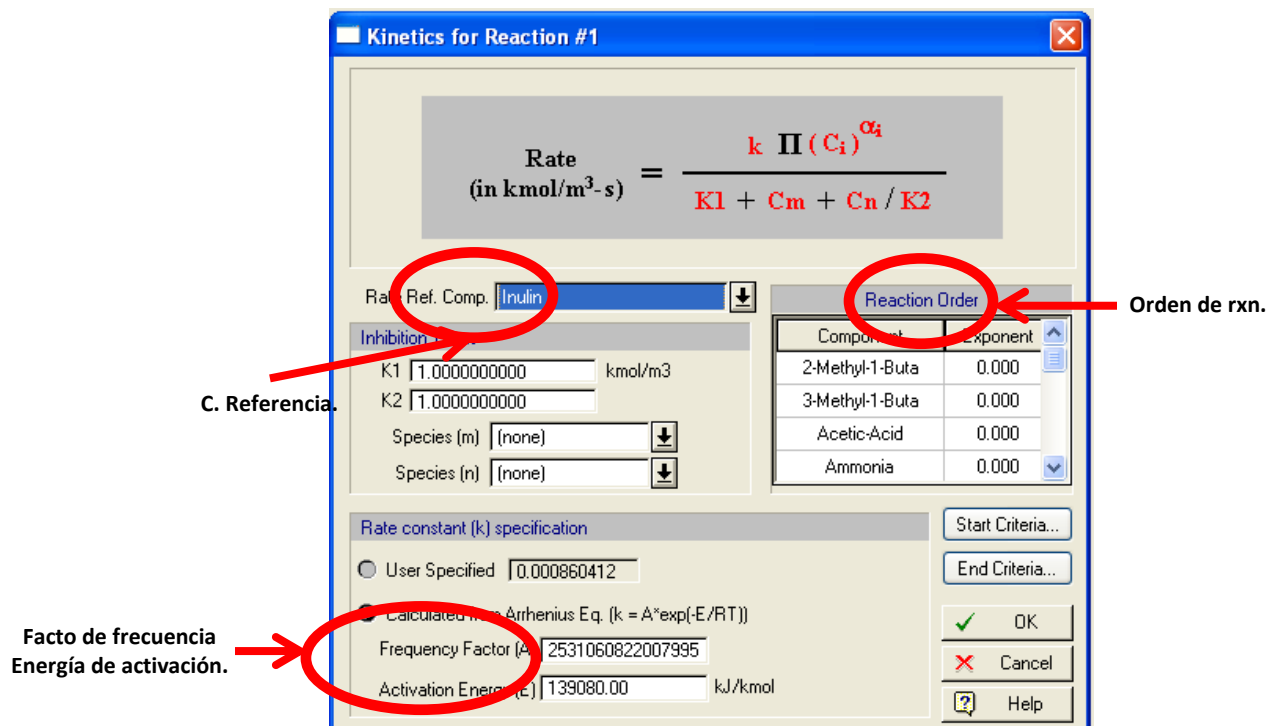


Figura 39. Cinéticas de reacción.

D. TABLAS DE ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD PARA LA COCCIÓN, FERMENTACIÓN Y DESTILACIÓN.

La Cocción:

Tabla 31. Análisis de sensibilidad para la cocción a 96° C.

| 96° C | | | | | |
|------------|----------------|---------------|-----------|----------------|---------------|
| Tiempo (h) | Fructosa (g/L) | Glucosa (g/L) | HMF (g/L) | Furfural (g/L) | Inulina (g/L) |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 235.68 |
| 2 | 225.09 | 30.28 | 6.39 | 0.06 | 5.80 |
| 4 | 222.74 | 24.12 | 14.71 | 0.14 | 0.12 |
| 6 | 215.28 | 23.30 | 22.78 | 0.23 | 0.002 |
| 8 | 207.97 | 22.74 | 30.57 | 0.30 | 0.000062 |
| 10 | 200.92 | 22.20 | 38.09 | 0.38 | 0.000001 |
| 12 | 194.11 | 21.68 | 45.35 | 0.45 | 0 |
| 14 | 187.53 | 21.18 | 52.35 | 0.52 | 0 |
| 16 | 181.19 | 20.70 | 59.11 | 0.59 | 0 |
| 18 | 175.06 | 20.23 | 65.64 | 0.66 | 0 |
| 20 | 169.14 | 19.78 | 71.95 | 0.72 | 0 |

Tabla 32. Análisis de sensibilidad para la cocción a 100° C.

| 100° C | | | | | |
|------------|----------------|---------------|-----------|----------------|---------------|
| Tiempo (h) | Fructosa (g/L) | Glucosa (g/L) | HMF (g/L) | Furfural (g/L) | Inulina (g/L) |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 235.68 |
| 2 | 225.99 | 25.20 | 10.83 | 0.10 | 0.53 |
| 4 | 214.96 | 23.27 | 23.12 | 0.23 | 0.001 |
| 6 | 204.03 | 22.43 | 34.78 | 0.35 | 0.000002 |
| 8 | 193.66 | 21.65 | 45.83 | 0.46 | 0 |
| 10 | 183.82 | 20.90 | 56.30 | 0.56 | 0 |
| 12 | 174.51 | 20.19 | 66.22 | 0.66 | 0 |
| 14 | 165.67 | 19.51 | 75.65 | 0.76 | 0 |
| 16 | 157.29 | 18.88 | 84.57 | 0.85 | 0 |
| 18 | 149.34 | 18.27 | 93.04 | 0.93 | 0 |
| 20 | 141.79 | 17.70 | 101.08 | 1.02 | 0 |

Tabla 33. Análisis de sensibilidad para la cocción a 106° C.

| 106° C | | | | | |
|------------|----------------|---------------|-----------|----------------|---------------|
| Tiempo (h) | Fructosa (g/L) | Glucosa (g/L) | HMF (g/L) | Furfural (g/L) | Inulina (g/L) |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 235.68 |
| 2 | 216.70 | 23.40 | 21.27 | 0.21 | 0.000888 |
| 4 | 196.97 | 21.90 | 42.30 | 0.42 | 0 |
| 6 | 179.07 | 20.53 | 61.37 | 0.61 | 0 |
| 8 | 162.82 | 19.30 | 78.68 | 0.79 | 0 |
| 10 | 148.07 | 18.17 | 94.39 | 0.95 | 0 |
| 12 | 134.70 | 17.16 | 108.64 | 1.09 | 0 |
| 14 | 122.55 | 16.23 | 121.58 | 1.22 | 0 |
| 16 | 111.51 | 15.39 | 133.34 | 1.34 | 0 |
| 18 | 101.49 | 14.63 | 144.02 | 1.45 | 0 |
| 20 | 92.37 | 13.93 | 153.73 | 1.55 | 0 |

Tabla 34. Análisis de sensibilidad para la cocción a 110° C.

| 110° C | | | | | |
|------------|----------------|---------------|-----------|----------------|---------------|
| Tiempo (h) | Fructosa (g/L) | Glucosa (g/L) | HMF (g/L) | Furfural (g/L) | Inulina (g/L) |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 235.68 |
| 2 | 206.88 | 22.65 | 31.74 | 0.32 | 0.000001 |
| 4 | 179.64 | 20.58 | 60.76 | 0.61 | 0 |
| 6 | 156.06 | 18.78 | 85.88 | 0.86 | 0 |
| 8 | 135.64 | 17.23 | 107.64 | 1.08 | 0 |
| 10 | 117.93 | 15.88 | 126.50 | 1.27 | 0 |
| 12 | 102.58 | 14.71 | 142.86 | 1.44 | 0 |
| 14 | 89.24 | 13.69 | 157.07 | 1.58 | 0 |
| 16 | 77.65 | 12.81 | 169.42 | 1.71 | 0 |
| 18 | 67.57 | 12.04 | 180.16 | 1.81 | 0 |
| 20 | 58.82 | 11.38 | 189.48 | 1.91 | 0 |

En las tablas 31-34 se representan los análisis de sensibilidad realizados para el reactor por lote que representa a la cocción en autoclave de las piñas de agave. Se seleccionó la tabla 32 para determinar que el tiempo operación para esta etapa es de 10 horas a una temperatura de operación de 100° C.

La fermentación

Tina de crecimiento de inóculo:

Tabla 35. Análisis de sensibilidad para la tina de crecimiento, 8 kg de levadura, 2 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y 30° C .

| Tiempo (h) | Fructosa (g/L) | Glucosa (g/L) | Biomasa (g/L) | Etanol (g/L) |
|------------|----------------|---------------|---------------|--------------|
| 0 | 80.93 | 8.99 | 4.26 | - |
| 2.52 | 74.45 | 2.49 | 6.2 | 6.03 |
| 5.05 | 65.39 | - | 7.91 | 11.38 |
| 7.57 | 54.35 | - | 8.69 | 16.45 |
| 10.10 | 41.06 | - | 11.5 | 22.57 |
| 12.63 | 34.56 | - | 12.46 | 25.57 |
| 13.89 | 34.56 | - | 12.46 | 25.57 |
| 15.15 | 34.56 | - | 12.46 | 25.57 |
| 17.68 | 34.56 | - | 12.46 | 25.57 |
| 20.21 | 34.56 | - | 12.46 | 25.57 |
| 22.73 | 34.56 | - | 12.46 | 25.57 |
| 24 | 34.56 | - | 12.46 | 25.57 |

Tabla 36. Análisis de sensibilidad para la tina de crecimiento, 10 kg de levadura, 3.5 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y 30° C .

| Tiempo (h) | Fructosa (g/L) | Glucosa (g/L) | Biomasa (g/L) | Etanol (g/L) |
|------------|----------------|---------------|---------------|--------------|
| 0 | 80.85 | 8.98 | 5.32 | - |
| 2.52 | 72.75 | 0.88 | 7.74 | 7.53 |
| 5.05 | 61.78 | - | 9.49 | 12.99 |
| 7.57 | 48.55 | - | 11.44 | 19.08 |
| 10.10 | 32.62 | - | 13.79 | 26.42 |
| 12.63 | 13.46 | - | 16.61 | 35.24 |
| 13.89 | 2.50 | - | 18.23 | 40.28 |
| 15.15 | - | - | 18.60 | 40.28 |
| 17.68 | - | - | 18.60 | 41.44 |
| 20.21 | - | - | 18.60 | 41.44 |
| 22.73 | - | - | 18.60 | 41.44 |
| 24.00 | - | - | 18.60 | 41.44 |

En las tablas 31 y 32 se representa el análisis de sensibilidad realizado para la tina de crecimiento. Se seleccionó la tabla 32 para determinar que el tiempo operación para esta etapa es de 14 horas con de 10 kg de levadura, 3.5 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y 30° C . Se realizaron también análisis de sensibilidad con otros valores de cantidad de levaduras y cantidad de amoníaco, en algunos casos los algoritmos de solución con los que cuenta SPD® no corrían o arrojaban información sin sentido físico.

Fermentador:

Tabla 37. Análisis de sensibilidad para el fermentador, 32 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y 30° C .

| Time (h) | Fructosa (g/L) | Glucosa (g/L) | Levadura (g/L) | Etanol (g/L) |
|----------|----------------|---------------|----------------|--------------|
| 0 | 82.90 | 8.11 | 1.87 | 4.17 |
| 1.57 | 76.42 | 6.45 | 2.36 | 5.71 |
| 3.15 | 72.32 | 4.36 | 2.99 | 7.66 |
| 4.73 | 66.68 | 1.72 | 3.78 | 10.12 |
| 6.31 | 63.37 | - | 4.53 | 12.45 |
| 7.89 | 59.56 | - | 5.09 | 14.21 |
| 9.47 | 55.28 | - | 5.72 | 16.18 |
| 11.05 | 50.47 | - | 6.43 | 18.39 |
| 12.63 | 45.07 | - | 7.23 | 20.88 |
| 14.21 | 38.99 | - | 8.12 | 23.67 |
| 15.78 | 32.17 | - | 9.13 | 26.81 |
| 17.36 | 24.51 | - | 10.26 | 30.34 |
| 18.94 | 15.91 | - | 11.53 | 34.30 |
| 20.52 | 6.27 | - | 18.23 | 38.74 |
| 22.10 | - | - | 18.61 | 41.63 |
| 23.68 | - | - | 18.61 | 41.63 |
| 25.26 | - | - | 18.61 | 41.63 |
| 26.84 | - | - | 18.61 | 41.63 |
| 28.42 | - | - | 18.61 | 41.63 |
| 30.00 | - | - | 18.61 | 41.63 |

En las tablas 33 se representa el análisis de sensibilidad realizado para fermentador. Se realizaron algunos análisis de sensibilidad, pero en este caso se muestra solo esta tabla que fue la que se seleccionó con la que se obtuvo un tiempo operación de 14 horas con una cantidad de 10 kg de levadura, 3.5 kg de amoníaco, μ de 0.5 h^{-1} , k_S de 35 mg/L y 30° C .

La destilación:

El análisis comienza con definir la cantidad de destilado, las etapas, el reflujo molar y la localización de la alimentación para obtener un destilado con 50.50 % V de etanol.

Tabla 38. Análisis de sensibilidad para un destilado de 80 kg/h, variando N, (L/D) y localización de la alimentación.

| D = 80 kg/h | | | |
|--------------------|---------------|--------------|--------------|
| Etapas | Reflujo (mol) | Alimentación | % V etanol |
| 8 | 1.61 | 2 | 50.50 |
| 8 | 1.61 | 3 | 50.50 |
| 8 | 1.80 | 2 | 50.51 |
| 8 | 1.80 | 3 | 50.51 |
| 10 | 1.25 | 5 | 50.48 |
| 10 | 1.43 | 5 | 50.49 |
| 10 | 1.61 | 5 | 50.50 |
| 10 | 1.80 | 5 | 50.50 |

Tabla 39. Análisis de sensibilidad para un destilado de 90 kg/h, variando N, (L/D) y localización de la alimentación.

| D = 90 kg/h | | | |
|--------------------|---------------|--------------|------------|
| Etapas | Reflujo (mol) | Alimentación | % V etanol |
| 8 | 1.61 | 2 | 41.33 |
| 8 | 1.61 | 3 | 41.31 |
| 8 | 1.80 | 2 | 41.33 |
| 8 | 1.80 | 3 | 41.32 |
| 10 | 1.25 | 5 | 41.30 |
| 10 | 1.43 | 5 | 41.30 |
| 10 | 1.61 | 5 | 41.31 |
| 10 | 1.80 | 5 | 41.31 |

Tabla 40. Análisis de sensibilidad para un destilado de 100 kg/h, variando N, (L/D) y localización de la alimentación.

| D = 100 kg/h | | | |
|---------------------|---------------|--------------|------------|
| Etapas | Reflujo (mol) | Alimentación | % V etanol |
| 8 | 1.61 | 2 | 45.46 |
| 8 | 1.61 | 3 | 45.45 |
| 8 | 1.80 | 2 | 45.47 |
| 8 | 1.80 | 3 | 45.46 |
| 10 | 1.25 | 5 | 45.43 |
| 10 | 1.43 | 5 | 45.44 |
| 10 | 1.61 | 5 | 45.45 |
| 10 | 1.80 | 5 | 45.45 |

Del análisis de sensibilidad se determinó que la columna de destilación opere con flujo de destilado de 80 kg/h, 10 etapas de equilibrio, la localización de la alimentación sea en la etapa 5 y relación de reflujo molar de 1.61 mol.

Tabla 41. Análisis de sensibilidad para 10 etapas de equilibrio, variando la localización de la alimentación, obteniéndose el %V de etanol.

| Alimentación | %V de etanol |
|--------------|--------------|
| 2 | 50.57 |
| 3 | 50.56 |
| 4 | 50.55 |
| 5 | 50.50 |
| 6 | 50.37 |
| 7 | 49.98 |
| 8 | 48.83 |
| 9 | 45.61 |
| 10 | 36.91 |

Tabla 42. Análisis de sensibilidad para 10 etapas de equilibrio, variando el reflujo (L/D), obteniéndose el %V de etanol.

| Reflujo | %V de Etanol |
|---------|--------------|
| 1.25 | 50.47 |
| 1.6 | 50.5 |
| 1.95 | 50.52 |
| 2.3 | 50.53 |
| 2.65 | 50.54 |
| 3 | 50.54 |

Las tablas 43 y 44 siguientes, muestran el comportamiento del %V de etanol y la temperatura de la columna a lo largo de las 10 etapas de equilibrio, resultado de la simulación con las condiciones determinadas en el análisis de sensibilidad.

Tabla 43. Comportamiento del %V de etanol a lo largo de las 10 etapas.

| Etapa | %V de Etanol |
|-------|--------------|
| 1 | 6.42 |
| 2 | 26.43 |
| 3 | 35.91 |
| 4 | 36.89 |

| | |
|----|-------|
| 5 | 36.96 |
| 6 | 45.64 |
| 7 | 48.85 |
| 8 | 49.99 |
| 9 | 50.38 |
| 10 | 50.5 |

Tabla 44. Comportamiento de la temperatura a lo largo de las 10 etapas.

| Etapa | T (°C) |
|--------------|---------------|
| 1 | 82.31 |
| 2 | 93.04 |
| 3 | 96.99 |
| 4 | 97.35 |
| 5 | 97.38 |
| 6 | 99.07 |
| 7 | 99.72 |
| 8 | 99.94 |
| 9 | 100.01 |
| 10 | 100.04 |

E. Figura 40. DIAGRAMA COMPLETO DEL PROCESO

