



**UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLÁS DE HIDALGO**
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA
DIVISIÓN DE ESTUDIOS DE POSGRADO



**ESCALAMIENTO DEL PROCESO DE HIDRODESTILACIÓN PARA
LA OBTENCIÓN DE ACEITE ESENCIAL DE *Tagetes lucida Cav.***

**TESIS presentada por:
ANA KAREN ROMERO PINEDA**

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

**MAESTRA EN CIENCIAS
EN
INGENIERÍA QUÍMICA**



Asunto: Impresión de Tesis.

Lic. Ulises Gutiérrez Vázquez
Jefe del Departamento de Titulación de la
U.M.S.N.H.

Por este medio nos dirigimos a usted de la manera más atenta para notificarle, que después de haberle dado seguimiento al desarrollo de la tesis: "ESCALAMIENTO DEL PROCESO DE HIDRODESTILACIÓN PARA LA OBTENCIÓN DE ACEITE ESENCIAL DE *TARGETES LUCIDA CAV*", después de haber revisado el manuscrito que presentó la alumna **Ana Karen Romero Pineda** con matrícula **0833312C** concluimos que cumple con los requisitos académicos y con lo establecido en el Reglamento General de Estudios de Posgrado para el desarrollo de su Tesis.

Por lo anterior este Comité Tutoral da el aval para su impresión final.

Director: Dra. Ma del Carmen Chávez Parga 07001002 

Codirector: Dr. Mauro Manuel Martínez Pacheco 94002061 


Vocales:


Dr. José Apolinar Cortés 82033374


Dra. Rosa María Espinoza Madrigal 951315


Dr. Jaime Espino Valencia 04001940

Atentamente.
Morelia, Michoacán a 04 de agosto de 2022.


Dr. Luis Fernando Lira Barragán
Coordinador de la Maestría en Ciencias en Ingeniería Química.

LFLB/mcpa.



DEPARTAMENTO DE POSGRADO

Facultad de Ingeniería Química / Universidad San Nicolás de Hidalgo
Francisco J. Mújica S/N / Col. Felicitas del Río / C.P. 58060 / Morelia, Michoacán / Tel. y Fax: 443. 327 3584
<http://posgrado.fiq.umich.mx/>

RESUMEN

Escalamiento del proceso de hidrodestilación para la obtención de aceite esencial de
Tagetes lucida Cav.

Presentado por: Ana Karen Romero Pineda
Dirigida por: D.C. María del Carmen Chávez Parga
Co-Dirigida por: D.C. Mauro Manuel Martínez Pacheco
Entidad: Posgrado de la Facultad de Ingeniería Química

Ante la necesidad que presenta la sociedad de reemplazar los productos químicos por productos orgánicos o naturales en la agricultura, es de importancia el estudio de los diferentes extractos vegetales, así como su obtención y producción a gran escala.

La extracción de aceite esencial de *T. lucida* se llevó a cabo por el método de hidrodestilación. El presente proyecto se desarrolló en las instalaciones de la Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.

En este trabajo se analizaron los métodos, técnicas y factores para el escalamiento de nivel laboratorio a planta piloto del proceso de hidrodestilación de aceite esencial de *T. lucida*. Para el estudio de los efectos de las variables de operación de extracción de aceite de *T. lucida* se siguió un diseño experimental de 2^3 con el rendimiento como variable respuesta y la biomasa, el tiempo y el solvente como variables de operación. Las características fisicoquímicas (índice de refracción, densidad y componentes mayoritarios) del aceite esencial de *T. lucida* se analizaron por redes neuronales.

El establecimiento del modelo fenomenológico de escalamiento permitió la obtención de rendimientos de 0.2761% a 1.2460% para biomasa seca y 0.5629% a 1.6024% para biomasa húmeda, a escala laboratorio se obtuvieron rendimientos de 0.0010% a 0.0017% para biomasa seca y 0.1707% a 1.0377% para biomasa húmeda. Por lo que se llegó a la conclusión de que el modelo fenomenológico es viable para el escalamiento a mayor escala.

PALABRAS CLAVE

Biomasa, Solvente, Tiempo, Modelo matemático, Balances de materia y energía

ABSTRACT

Given the need that society presents to replace chemical products with organic or natural products in agriculture, it is important to study the different plant extracts, as well as their obtaining and large-scale production.

The extraction of essential oil from *T. lucida* was carried out by the hydrodistillation method. This project was developed in the facilities of the Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.

In this work, the methods, techniques, and factors for scaling up from the laboratory level to the pilot plant of the hydrodistillation process of essential oil of *T. lucida* were analyzed. To study the effects of the *T. lucida* oil extraction operation variables, an experimental design of 2^3 was followed with yield as the response variable and biomass, time, and solvent as operation variables. The physicochemical characteristics (refractive index, density, and major components) of the essential oil of *T. lucida* were analyzed by neural networks.

The establishment of the phenomenological scaling model allowed obtaining yields of 0.2761% to 1.2460% for dry biomass and 0.5629% to 1.6024% for wet biomass, at laboratory scale yields of 0.0010% to 0.0017% were obtained for dry biomass and 0.1707% to 1.0377% for wet biomass. Therefore, it was concluded that the phenomenological model is viable for scaling to a larger scale.

ÍNDICE

RESUMEN	iii
PALABRAS CLAVE	iii
ABSTRACT	iv
LISTA DE TABLAS	vi
LISTA DE FIGURAS.....	vii
NOMENCLATURA.....	viii
Capítulo 1 INTRODUCCIÓN	1
1.1. Generalidades	1
1.2. Antecedentes	1
Capítulo 2 MARCO TEÓRICO	2
2.1. Familia Asteraceae	2
2.2. <i>Tagetes lucida</i> Cav.....	2
2.3. Aceite esencial de <i>T. lucida</i>	4
2.4. Métodos de extracción de aceites esenciales.....	6
2.5. Modelado de la hidrodestilación	9
2.6. Escalamiento.....	14
2.7. Métodos de escalamiento	16
2.8. Machine learning.....	18
Capítulo 3 JUSTIFICACIÓN	20
Capítulo 4 ALCANCE	21
Capítulo 5 HIPÓTESIS.....	22
Capítulo 6 OBJETIVOS	23
6.1. Objetivo General	23

6.2. Objetivos Específicos.....	23
Capítulo 7 METODOLOGÍA.....	24
7.1. Colecta de <i>Tagetes lucida</i> Cav.	25
7.2. Obtención de aceite esencial de <i>T. lucida</i>	26
7.3. Caracterizaciones fisicoquímicas del aceite esencial de <i>T. lucida</i>	27
7.4. Algoritmos de aprendizaje para Machine Learning para los rendimientos del del aceite esencial de <i>T. lucida</i>	28
7.5. Esquema de trabajo para la simulación de la hidrodestilación del aceite esencial de <i>T. lucida</i>	29
7.6. Análisis estadístico	66
Capítulo 8 RESULTADOS Y DISCUSIÓN	67
8.1. Obtención de aceite esencial de <i>Tagetes lucida</i> Cav. a escala laboratorio para biomasa seca por hidrodestilación.....	67
8.3. Obtención de aceite esencial de <i>T. lucida</i> por escalamiento fenomenológico a planta piloto para biomasa seca por hidrodestilación	68
CONCLUSIÓN	69
PERSPECTIVAS Y/O TRABAJOS A FUTURO	69
REFERENCIAS	70
APÉNDICE I.....	75

LISTA DE TABLAS

Tabla 2.1.- Compuestos mayoritarios presentes en aceite esencial de <i>T. lucida</i> obtenido por hidrodestilación	5
Tabla 2.2.- Compuestos mayoritarios presentes en aceite esencial de <i>T. lucida</i>	6
Tabla 2.3.- Modelos matemáticos desarrollados para la destilación de aceites esenciales	11
Tabla 7.1.- Modelos de secado.....	57

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1.- Planta de <i>T. lucida</i> en floración 19°41'27.7"N 101°16'47.1"W (Romero-Pineda, 14-08-2021).....	3
Figura 2.2.- Métodos principales para la obtención de aceites esenciales a escala laboratorio, a y b .- Arrastre de vapor y c .- Hidrodestilación	8
Figura 2.3.- Similitud geométrica	15
Figura 7.1.- Estrategia experimental para el escalamiento del proceso de hidrodestilación para la obtención de aceite esencial de <i>T. lucida</i>	24
Figura 7.2.- Localidades de colecta del material vegetal. 1.- Tacícuaró (19°40'39.6"N 101°21'30.1"W), 2.- Morelia (19°41'14.9"N 101°18'12.6"W), 3.- Morelia (19°41'27.7"N 101°16'47.1"W), 4.- Coíntzio (19°38'23.4"N 101°16'02.6"W) y 5.- Morelos (19°38'42.8"N 101°13'07.0"W).	25
Figura 7.3.- Equipos para hidrodestilación del aceite esencial de <i>T. lucida</i> a .- Esquema del hidrodestilador a escala laboratorio y b .- Alambique.....	26
Figura 7.4.- Diagrama de flujo para la simulación del proceso de hidrodestilación del aceite esencial de <i>T. lucida</i>	29
Figura 7.5.- Diagrama de flujo de materia y energía para la obtención del aceite esencial de <i>T. lucida</i>	30
Figura 7.6.- Factores biológicos para la descripción del proceso de hidrodestilación. a .- Exudación térmica, b .- Película acuosa y c .- Aceite esencial libre.	33
Figura 7.7.- Mecanismo de transporte modelo cinético	46
Figura 7.8.- Mecanismo de transporte modelo de secado.....	57

NOMENCLATURA

C	Concentración de aceite esencial en la corriente de vapor	[% g/g]
C^*	Concentración del aceite esencial en el vapor, junto a la interfase	[% g/cm ³]
d_p	Diámetro promedio de partícula	[cm]
D_{ef}	Coefficiente de difusividad del aceite esencial en el vapor	[cm ² /min]
G	Masa del componente retenido en los tricomas por masa del lecho	[g/g]
G_0	Masa del componente "i" retenido en los tricomas por masa del lecho sin procesar	[g/g]
h	Espesor promedio de la capa de aceite en la película superficial	[cm]
K_g	Coefficiente de transferencia de masa desde la interfase del aceite "libre" con la fase vapor	[cm/min]
K_{tr}	Constante de velocidad de exudación	[min ⁻¹]
\dot{m}	Flujo másico	[g/min]
M	Masa	[g]
MW	Peso molecular	[g/mol]
P	Presión	[kPa]
P_e	Número de Peclet	[-]
P^0	Presión de vapor del compuesto puro	[kPa]
Q	Caudal de vapor	[cm ³ /min]

Q_{fw}	Caudal de hidrolato	$[cm^3/min]$
R	Constante universal de los gases	$\left[\frac{kPa \cdot cm^3}{gmol \cdot K}\right]$
Re_p	Número de Reynolds de partícula	$[-]$
S	Área de la transferencia de masa	$[cm^2]$
Sh	Número de Sherwood	$[-]$
t	Tiempo	$[min]$
T	Temperatura	$[°C]$
U^0	Velocidad superficial del fluido	$[cm/min]$
V_{fw}	Volumen del hidrolato	$[cm^3]$
w	Fracción en peso del componente en el aceite	$[-]$
W	Masa del lecho	$[g]$
x	Fracción molar del componente en el aceite esencial líquido	$[-]$
y	Fracción molar del componente en la fase vapor	$[-]$
y_w	Fracción molar del agua en la fase vapor	$[-]$
Y	Rendimiento	$[% g/g]$
ε	Porosidad del lecho	$[-]$
ρ	Densidad	$[g/cm^3]$
ν	Viscosidad cinemática	$[cm^2/min]$
τ	Tiempo de residencia	$[min]$

ω	Fracción inicial de aceite libre en la película acuosa superficial	[–]
----------	--	-----

Superíndices-subíndices

<i>fill</i>	Tiempo de llenado, desde que se genera el vapor hasta que se desaloja la primera gota de hidrolato
<i>i</i>	Componente i-ésimo del aceite
<i>in</i>	Corriente de vapor afluyente
<i>o</i>	Valor inicial cuando $t = 0$
<i>os</i>	Aceite esencial líquido en la película acuosa superficial
<i>sd</i>	Aceite esencial obtenido, desde la primera gota de hidrolato desalojada
<i>prog</i>	Valor generado por el modelo
<i>tr</i>	Tricomas glandulares
<i>vp</i>	Aceite esencial evaporado en la corriente de vapor saturado
<i>w</i>	Agua
∞	Tiempo infinito o total

Capítulo 1 INTRODUCCIÓN

1.1. Generalidades

Las técnicas de extracción convencionales de aceites esenciales carecen de estudios sobre los fenómenos controlantes de dicho proceso y el efecto que tienen las variables en el rendimiento. La determinación de los fenómenos dominantes es fundamental en el escalamiento de los procesos de extracción, dado que permitirán describir el proceso de forma técnica y modificar las variables que influyen directamente en el rendimiento del aceite esencial.

1.2. Antecedentes

El metil eugenol se reportó como componente mayoritario en el aceite esencial de *T. lucida* por arrastre de vapor, con un rendimiento del 0.04% de hojas y 0.06% de flores (Espinoza-Madrigal *et al.*, 2019). En el aceite esencial de *T. lucida* por hidrodestilación, se registraron 40 compuestos, siendo el estragol el mayoritario (96%) y un rendimiento del 0.079% (Regalado *et al.*, 2011), también por hidrodestilación, se reportaron como compuestos mayoritarios al estragol (48%) y el anetol (35%), con un rendimiento del 0.028% (López López *et al.*, 2018).

La hidrodestilación de aceites esenciales se evaluó a partir de un modelo con células rotas e intactas, en el que el soluto ubicado en las células con paredes rotas se extrae rápidamente y el soluto de las células intactas se difunde lentamente a la superficie del material botánico, el aceite esencial se consideró como pseudocomponente (Sovová, 2006). Un modelo físico basado en el lavado y la difusión del aceite esencial de bayas de enebro se evaluó con la finalidad de describir la cinética de la hidrodestilación mediante un modelo de pseudo primer orden (Milojević *et al.*, 2013).

Capítulo 2 MARCO TEÓRICO

2.1. Familia Asteraceae

México destaca como uno de los países que son el centro de origen de algunas de las plantas cultivadas más importantes para la humanidad. En términos generales, se sabe que al menos 158 especies vegetales de importancia económica (ya sea para el mundo o al interior del país) fueron domesticadas en nuestro territorio, entre las cuales destacan por el número de especies las familias: Agavaceae (30 especies de 3 géneros), Fabaceae (22 especies de 10 géneros), Cactaceae (14 especies de 5 géneros), Solanaceae (11 especies de 6 géneros) y Asteraceae (9 especies de 5 géneros) (SEMARNAT, 2015).

La familia Asteraceae (también conocida como Compositae) es una parte importante de la biodiversidad en México, ya que constituye la mayor parte de la flora mexicana, conteniendo entre 2 000 a 3 000 especies y 371 géneros nativos (Villaseñor, 2016). El género *Tagetes* forma parte de la familia Asteraceae, está constituido por aproximadamente 50 especies, distribuidas en regiones subtropicales y tropicales desde el suroeste de Estados Unidos hasta Argentina (Armas Kaylin, Rojas Janne, 2013). En el caso de México, este género se distribuye en los lugares más diversos de la geografía del país, por lo que se estima que ocurre un importante fenómeno de variabilidad en el perfil de aceites esenciales. Las especies de *Tagetes* presentan variabilidad química.

2.2. *Tagetes lucida* Cav.

Aproximadamente 22 especies del género *Tagetes* se distribuyen en México (Kurpis *et al.*, 2019), entre las cuales *T. lucida* destaca como especie aromática. También conocida como hierbanís, pericón y Santa María, es una hierba perenne, que crece entre 46 y 76 cm de altura y florece entre agosto y diciembre, con un fuerte olor a anís al estrujarse (Regalado *et al.*, 2011).

La Figura 2.1 muestra a la planta *T. lucida* en etapa fenomenológica de floración. Es una planta con muchos tallos partiendo de la base, más o menos ramificados, glabros; hojas indivisas, sésiles, lineares a oblongas, elípticas u oblanceoladas, de 2 a 10 cm de largo, de 0.5 a 2 cm de ancho, agudas a redondeadas en el ápice, márgenes aserrados; cabezuelas dispuestas en corimbos, sobre pedúnculos bracteados hasta de 1 cm de largo; involucreo cilíndrico, de 4 a 12 mm de alto, sus brácteas 5 a 7, con los ápices subulados; flores liguladas 3 o 4, amarillas, sus láminas flabeladas o suborbiculares, de 3 a 6 mm de largo; flores del disco 5 a 8, sus corolas amarillas, de 4 a 6 mm de largo; aquenios linear-claviformes, de 5 a 8 mm de largo, negruzcos, glabros, vilano de 2 escamas aristiformes, de 3 a 5 mm de largo y 4 o 5 escamas romas de 1 a 2 mm de largo (Calderón y Rzedowski, 2001).



Figura 2.1.- Planta de *T. lucida* en floración 19°41'27.7"N 101°16'47.1"W (Romero-Pineda, 14-08-2021)

La planta *T. lucida* dado su aprovechamiento en la medicina tradicional (Gutiérrez Gaitén *et al.*, 2018) destaca por su uso para atenuar la fiebre, resolver problemas menstruales, combatir la diarrea, la disentería por amibas, giardiasis y ascariasis, regular ansiedad y depresión y estimular el sistema inmune (Linares y Bye, 1987). En la agricultura ecológica, se reporta para el biocontrol de insectos (Vallejo-González y Nájera-Rincón, 2016), nematodos (Omer *et al.*, 2017) y hongos fitopatógenos (López López *et al.*, 2018; Vasudevan *et al.*, 1997). Sus flores y hojas se usan como condimento en alimentos, por ejemplo, para la cocción de elotes y chayotes (Perdomo-Roldán, Francisco, Mondragón-Pichardo, Juana, 2009) o en bebidas y licores (por su sabor a “anís”). Por lo que el aceite esencial de *Tagetes* tiene un gran potencial como materia prima industrial (Zarate-Escobedo *et al.*, 2018).

2.3. Aceite esencial de *T. lucida*

Los aceites esenciales, se definen como cuerpos olorosos de naturaleza oleosa obtenidos casi exclusivamente de fuentes vegetales, generalmente son líquidos volátiles. Los aceites esenciales son mezclas complejas de hasta más de 100 compuestos químicos orgánicos, provenientes de una misma familia química y la propiedad de generar diversos aromas agradables al ser humano (Guenther, 1972).

Los factores ambientales como el clima y la composición del suelo influyen en la presencia de los compuestos en la planta, incluso entre individuos de la misma especie (Kurpis *et al.*, 2019). La composición química del género *Tagetes* varía entre especies y está determinada genéticamente y modulada ambientalmente. Además, cada tipo de compuesto se acumula predominantemente en órganos específicos de la planta (Marotti *et al.*, 2004).

La Tabla 2.1 muestra sobre los compuestos químicos mayoritarios del aceite esencial de *T. lucida* obtenido por hidrodestilación, en los cuales se observa que el origen geográfico de las poblaciones de *T. lucida* está relacionado con la variabilidad del aceite y el rendimiento.

Tabla 2.1.- Compuestos mayoritarios presentes en aceite esencial de *T. lucida* obtenido por hidrodestilación

Origen	CM	P (%)	Y (%)	Referencia
Guatemala	Estragol	33.90	Nd	Bicchi <i>et al.</i> , 1997
	Metil eugenol	24.30		
	Anetol	23.80		
Cuba	Estragol	96.80	0.0790	Regalado <i>et al.</i> , 2011
Egipto	Metil chavicol	90.00	0.0500	Omer <i>et al.</i> , 2017
México	Estragol	48.00	0.0280	Zarate-Escobedo <i>et al.</i> , 2018
	Anetol	35.00		

CM.- Compuestos químicos mayoritarios, P.- Porcentaje de abundancia de los CM, Y.- Rendimiento del aceite esencial de *T. lucida*, Nd.- Información no disponible.

La Tabla 2.2 muestra reportes de la obtención de aceite esencial de *T. lucida* por métodos de extracción como arrastre de vapor e hidrodestilación asistida por microondas en los cuales se puede observar que los compuestos químicos mayoritarios son los mismos para las muestras de las poblaciones reportadas por Marotti *et al.*, (2004) y por Caballero-Gallardo *et al.*, (2011), aunque el método de extracción es diferente lo cual podría justificar que el porcentaje del Metil chavicol sea diferente en ambos reportes.

Sin embargo, los reportes hechos por Miller *et al.* (2015) y Vallejo-González y Nájera-Rincón (2016) sugieren un menor rendimiento del aceite esencial obtenido por arrastre de vapor en comparación con los rendimientos del aceite esencial obtenido por hidrodestilación según Omer *et al.* (2017) y Regalado *et al.* (2011).

Tabla 2.2.- Compuestos mayoritarios presentes en aceite esencial de *T. lucida*

Origen	CM	P (%)	Y (%)	Método de extracción	Referencia
Italia	Metil chavicol	93.80	Nd	Arrastre de Vapor	Marotti <i>et al.</i> , 2004
Colombia	Metil chavicol	92.10	Nd	Hidrodestilación asistida por microondas	Caballero-Gallardo <i>et al.</i> , 2011
Guatemala	Nd	Nd	0.0240	Arrastre de vapor	Miller <i>et al.</i> , 2015
México	Nd	Nd	0.0400	Arrastre de vapor	Vallejo-González y Nájera-Rincón, 2016

CM.- Compuestos químicos mayoritarios, P.- Porcentaje de abundancia de los CM, Y.- Rendimiento del aceite esencial de *T. lucida*, Nd. - Información no disponible.

Las tablas Tabla 2.1 y Tabla 2.2, permiten dilucidar que un problema común en la producción de los aceites esenciales radica en la diversidad de los rendimientos obtenidos para una misma planta aromática. Esto se debe al origen geográfico de las poblaciones vegetales, al tipo de extracción, entre otros factores bióticos y abióticos.

2.4. Métodos de extracción de aceites esenciales

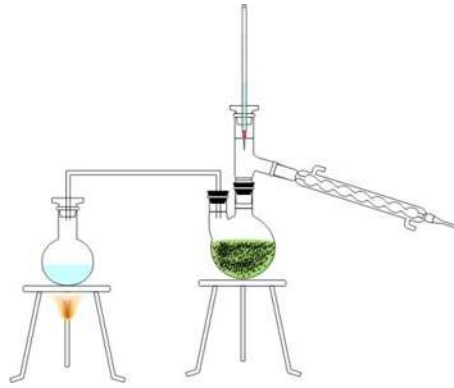
Los principales métodos empleados para la obtención de aceites esenciales se basan en el arrastre del aceite esencial contenido en las plantas con vapor de agua. La destilación con vapor es una modificación del proceso de destilación usado para recuperar compuestos de punto de ebullición altos de una matriz inerte y compleja, mediante vapor de agua como agente de separación y energía. Sin embargo, carece de un nombre claro

y conciso para definirlo, debido a que se desconoce exactamente lo que sucede en el interior del equipo principal y por qué se usan diferentes condiciones del vapor de agua para el proceso (Guenther *et al.*, 1948; Casado, 2018).

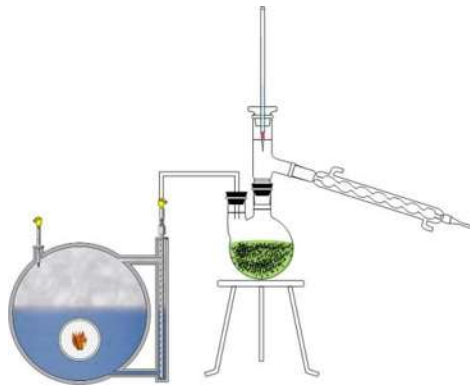
Las principales diferencias entre los tres tipos de destilación con vapor son la disposición del material vegetal y el sitio donde ocurre la producción del vapor de agua:

1. **Arrastre de vapor:** En la Figura 2.2a se observa que la materia prima no se encuentra en contacto con el agua. El vapor de agua se genera de forma externa en un matraz y se inyecta por la parte superior del matraz que contiene al material vegetal.
2. **Arrastre con vapor seco:** En la Figura 2.2b se observa que la materia prima no se encuentra en contacto con el agua. El vapor seco se genera de forma externa en una caldera y se inyecta por la parte superior del matraz que contiene al material vegetal.
3. **Hidrodestilación:** En la Figura 2.2c se muestra un esquema básico del proceso, donde el hidrodestilador es cargado por lotes y trabaja en modo semi-continuo. El condensador, comúnmente funciona en modo continuo, con el flujo del agua de refrigeración a contracorriente. La generación de vapor se produce dentro del propio recipiente de destilación y el material vegetal se encuentra en contacto directo con el agua.

a



b



c

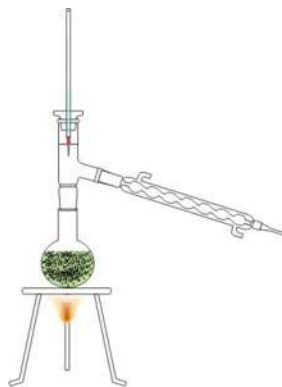


Figura 2.2.- Métodos principales para la obtención de aceites esenciales a escala laboratorio, **a** y **b**.- Arrastre de vapor y **c**.- Hidrodestilación

La premisa es que la hidrodestilación está regida por la vaporización del aceite esencial “libre” o disponible en la superficie de las hojas o flores, cuando una corriente de vapor saturado atraviesa un lecho conformado por este material vegetal (Ernest Guenther *et al.*, 1948). Al ser la vaporización, el fenómeno físico que controla el proceso, se asume un equilibrio termodinámico, entre el aceite esencial y el agua. Por ello, la denominación de “hidrodestilación” ha sido acuñada para describir este hecho (Cerpa *et al.*, 2007).

En el trabajo presentado por Roth *et al.*, (2020), se deduce que existen, por lo menos, tres fenómenos controlantes del proceso. El primero, una vaporización instantánea del aceite esencial, en la interfase de la película formada en la superficie del material vegetal y el vapor circundante. El segundo, la difusión del aceite vaporizado al seno de la corriente del vapor circundante, debido a la convección que ejerce el vapor en el lecho, y su inmediato transporte al exterior del equipo. El tercero, una exudación del aceite esencial desde el interior de los tricomas glandulares, a través de su cutícula, a la película superficial del material vegetal (Cerpa *et al.*, 2007).

2.5. Modelado de la hidrodestilación

El modelo simula la hidrodestilación en un equipo a escala laboratorio como el mostrado en la Figura 2.2c. El matraz contiene partículas vegetales sumergidas en agua hirviendo. La fase de vapor por encima del nivel del agua, compuesta de vapor de agua y vapor de aceite esencial, sube al condensador, donde forman dos fases. Los líquidos fluyen hacia el separador. El agua regresa desde el fondo del separador al alambique, y una parte del aceite esencial puede regresar al alambique con el agua, ya sea disuelto o arrastrado como pequeñas gotas (Sovová, 2006).

La Tabla 2.3 muestra una recopilación general de los modelos publicados, en ella se compara: el material vegetal, la forma de partículas, el aceite esencial y los efectos de transferencia de masa en el vapor y la fase líquida. Los modelos existentes, utilizan tres enfoques para la parte de extracción del aceite esencial contenido en el material vegetal.



1. **Difusión:** cuando la extracción del aceite esencial se modela con difusión, la primera ley de Fick se resuelve para una geometría dada. Debido a las diferentes velocidades de extracción durante la destilación al vapor, la extracción se divide en lavado y difusión. El lavado se realiza mediante un coeficiente de difusión grande y se realiza cuando hay células vegetales rotas. La difusión ocurre con las células vegetales y es más lenta debido a la membrana que poseen las células de la planta.
2. **Cinética de primer orden:** se supone que la extracción del aceite esencial de las partículas de la planta sigue una cinética de primer orden. La composición del aceite esencial en la partícula vegetal permanece constante.
3. **Secado:** se basa en los fenómenos de transporte de calor y humedad en medios porosos, a partir de las ecuaciones de Fourier para la conducción del calor y de Fick para la transferencia de masa.

Al comparar los modelos, se puede ver que los parámetros generalmente se ajustan a los resultados experimentales de las destilaciones. La mayoría de los modelos asumen que la evaporación de los componentes del aceite esencial es rápida en comparación con la difusión en la partícula y no se tiene en cuenta los fenómenos de transporte.

Tabla 2.3.- Modelos matemáticos desarrollados para la destilación de aceites esenciales

Material vegetal	Partícula	Aceite esencial	Modelo	Transferencia de masa		Referencia
				Líquido	Vapor	
Hierba de limón, ramas y hojas	Unidimensional geometría rectangular	Componente pseudo-único	Modelo difusional basado en la segunda ley de Fick	Difusión en estado inestable (Segunda ley de Fick)	No considerado	Cassel <i>et al.</i> , 2006
Hojas de tomillo rastrero	Esférico	Componente pseudo-único	Células rotas e intactas	Cinética de primer orden	No considerado	Sovová, 2006
Lavandin	Tricomas glandulares	Componentes del aceite individuales	Modelo fenomenológico	Cinética de primer orden	La presión de vapor es limitada	Cerpa <i>et al.</i> , 2007
Mentol	Unidimensional geometría rectangular	Componente pseudo-único	Modelo de difusión basado en la segunda ley de Fick	Difusión en estado inestable (segunda ley de Fick)	No considerado	Kassing <i>et al.</i> , 2010



Bayas de enebro	Isotrópica	Componente pseudo-único	Lavado y difusión	Cinética de primer orden	No considerado	(Ndocko Ndocko <i>et al.</i> , 2011)
Follaje de eucalipto	Capa fina cerosa	Componente pseudo-único	Los rendimientos son iguales a la ecuación de Langmuir	No considerado	No considerado	(Ndocko Ndocko <i>et al.</i> , 2011)
Comino	Semillas	Componente pseudo-único	Cinética de primer orden	Cinética de primer orden	No considerado	(M. Kassing <i>et al.</i> , 2012)
Hierba	Esférica	Componente pseudo-único	Modelo de difusión	Difusión	No considerado	(M. Kassing <i>et al.</i> , 2012)
Hierba de limón	Picada o sin picar	Componente pseudo-único	Cinética de primer orden	Cinética de primer orden	No considerado	Both <i>et al.</i> , 2014
Semillas de hinojo	Isotrópica	Componente pseudo-único	Lavado y difusión	Difusión en estado inestable (segunda ley de Fick)	No considerado	Both <i>et al.</i> , 2014



Lavandin	Tricomas glandulares	Componente pseudo-único	Modelo crudo	No considerado	El suministro de energía es limitado	Koudous <i>et al.</i> , 2014
Romero, albahaca, lavanda	Unidimensional geometría rectangular	Componente pseudo-único	Modelo de difusión basado en la segunda ley de Fick	Difusión en estado inestable (segunda ley de Fick)	No considerado	Koudous <i>et al.</i> , 2014
Madera de agar	Isotrópica	Componente pseudo-único	Lavado y difusión	Difusión en estado inestable (segunda ley de Fick)	No considerado	Sartor <i>et al.</i> , 2011
Frutos de cilantro	Isotrópica	Componente pseudo-único	Modelo difusional y modelo basado en cinética de primer orden	Difusión o difusión con cinética de primer orden	No considerado	Schmidt y Strube, 2018



Los modelos desarrollados carecen de un modelo físico-químico predictivo para la hidrodestilación de aceites esenciales. Por lo tanto, la necesidad aún existe para formular nuevos modelos fenomenológicos, capaces de representar matemáticamente los tres fenómenos enunciados previamente por Cerpa *et al.*, (2007) que sean consistentes físicamente con las observaciones por micro-histología de la planta *T. lucida*, la termodinámica de fases, los fenómenos de transporte. Sin la alteración de los conocimientos históricos acumulados de este proceso. Con el modelo se simula destilaciones de escala de tamaño industrial.

2.6. Escalamiento

El escalamiento de un proceso o equipo es convertirlo de su escala de investigación (laboratorio o piloto) a escala industrial (producción). El paso fundamental en el escalamiento consiste en migrar los datos obtenidos en la escala laboratorio a un modelo que pueda ser:

- **Fenomenológico:** No involucra consideraciones moleculares y permite hacer predicciones en rangos o intervalos de operación no estudiados experimentalmente.
- **Empírico:** Se postula sin bases teóricas y se espera solamente que ajuste la interacción entre los datos en el intervalo de experimentación.
- **De similitud:** Se obtiene a partir de un análisis de similitud con respecto a analogías físicas de tipo térmico, mecánico, geométrico, químico, entre otras.

Las reglas de similitud y el análisis dimensional permiten la simplificación de los cálculos en la aplicación del método de escalamiento y una mayor efectividad en el dimensionamiento y diseño de equipos a partir de datos de laboratorio (Anaya-Durand y Pedroza-Flores, 2008)



2.6.1. Principio de Similitud

El principio de similitud hace referencia a la relación que existe entre los sistemas físicos y el tamaño de estos, siendo básico en el escalamiento de procesos físicos y químicos. En el proceso de hidrodestilación son de interés tres tipos de similitud (Anaya-Durand y Pedroza-Flores, 2008):

1. **Similitud geométrica:** se define en términos de correspondencia; esta existe cuando entre dos sistemas, la relación de sus dimensiones significantes son las mismas para cada sistema. Si se consideran dos cuerpos sólidos en un plano X, Y, Z; un punto en el primer cuerpo está dado por las coordenadas x, y, z, mientras que en el segundo cuerpo un punto correspondiente está dado por las coordenadas X, Y, Z, ver Figura 2.3.

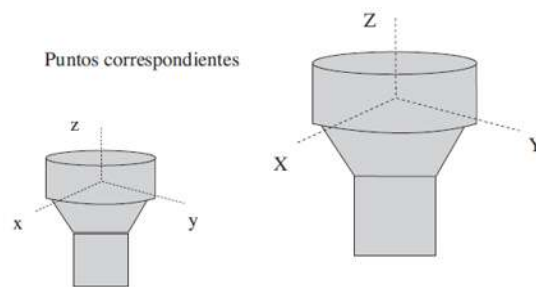


Figura 2.3.- Similitud geométrica

2. **Similitud térmica:** este tipo de similitud involucra a los sistemas en los cuales se presenta flujo de calor por lo que se introduce la dimensión de temperatura además de la longitud, fuerza y tiempo. El calor fluye por convección, conducción y radiación y la diferencia de temperaturas a tiempo correspondientes entre un par de puntos de un sistema y entre el par de puntos de otro se definen como temperaturas correspondientes. Los sistemas que presentan similitud geométrica son térmicamente similares cuando la diferencia de temperatura conserva una relación constante entre ellos.
3. **Similitud mecánica:** comprende en su área a las similitud estática, cinemática y dinámica.

Las similitudes mecánica, térmica y geométrica pueden especificarse en términos de criterios que son relaciones intrínsecas de medidas, fuerzas o velocidades de transferencia dentro del proceso de hidrodestilación. Dado que estos criterios son relaciones de cantidades similares éstas son adimensionales y existen dos métodos para obtenerlos cuando las ecuaciones diferenciales del modelo no se conocen, pero si se tienen identificadas todas las variables que intervienen en el fenómeno es posible obtener el criterio de similitud por medio del análisis dimensional. En el caso de conocer las ecuaciones diferenciales del sistema, pero no se tienen métodos para integrarlas, el criterio de similitud se obtiene de la misma forma diferencial.

El método de escalamiento depende tanto del proceso en cuestión como de la geometría de los equipos involucrados. La hidrodestilación es una operación de separación empírica, particular para cada material vegetal, y depende de diversos parámetros físico-químicos.

2.7. Métodos de escalamiento

Los métodos más utilizados de escalamiento para operaciones unitarias de acuerdo con Harsen (2013) son:

1. **Fuerza bruta.** - Este método está basado en el principio de que la planta piloto es una versión a una escala menor de la escala comercial; por lo que los factores críticos de escalamiento son mantenidos en ambas escalas. Este tipo de escalamiento es usualmente aplicado en industrias donde los modelos de todos los componentes cinéticos no están disponibles.
2. **Basado en modelos.** - En este método el efecto del escalamiento en el comportamiento de las operaciones unitarias es predicho por modelos. Estos modelos contienen los efectos de los parámetros físicos, químicos e hidrodinámicos. Los modelos se analizan en dos aspectos: la interacción entre la hidrodinámica (transferencia de masa, transferencia de calor, transferencia de

impulso) y la reacción química del modelo. Los experimentos llevados a cabo en planta piloto se realizan con más de un punto de validación, en los que los efectos críticos a escalar sean variados.

3. **Empírico.** - El método empírico no es muy fiable, ya que como el efecto de escalamiento en el parámetro es desconocido, también los parámetros críticos de escalamiento son desconocidos. Sin embargo, si el método de fuerza bruta no puede ser aplicado y una aproximación del método basado en modelos no puede ser empleado por las complejas relaciones entre la hidrodinámica y la reacción química; entonces este es el único método aplicable. Otra opción es probar otro diseño de escala comercial en el cual se pueda aplicar otro método de escalamiento.
4. **Modelo empírico-híbrido.** - Existe una versión híbrida del método de escalamiento empírico en el que se lleva a cabo el modelado y la simulación para interpretar los resultados empíricos y simular y optimizar el siguiente nivel de escalamiento. En el siguiente paso, los resultados empíricos se utilizan para validar o ajustar el modelo. Nuevamente, el modelo mejorado se utiliza para diseñar el siguiente paso. De esta forma se incrementan las posibilidades de éxito.

El escalamiento del proceso de hidrodestilación para la obtención del aceite esencial de *T. lucida* se genera mediante el principio de similitud (geométrica, térmica y mecánica), el análisis dimensional y el modelo empírico-híbrido, como en todo proceso de ampliación influyen uno o más factores críticos.

El escalamiento de procesos genera conocimiento para convertir ideas a implementaciones exitosas. La generación de conocimiento implica lectura de literatura, experimentos, diseño y modelado. El propósito de esta generación de conocimiento es la predicción de los riesgos y su reducción a niveles aceptables para la implementación exitosa de una escala superior. Esto significa que el proceso a escala comercial cumple con los objetivos de diseño planificados.

2.8. Machine learning

En ingeniería química, las redes neuronales artificiales son de uso ilimitadas, se aplican en todas las especialidades:

- Polimerización: En la predicción de la longitud de la cadena polimérica, la polidispersidad y la temperatura adiabática de una reacción de polimerización catalizada por zirconoceno, se entrenó una red neuronal artificial (ANN) con un conjunto de datos de 2000 combinaciones, 70% de los datos se utilizaron para entrenamiento, 15% para validación y 15% para pruebas. Los datos generados por ANN muestran un buen acuerdo con los resultados teóricos, con un R^2 general de 0.9987 (Rizkin y Hartman, 2019).
- Producción de petróleo: En la implementación del control automático de proceso, desarrollaron un modelo de red de Back Programming con datos experimentales para cuatro capas ocultas y 20 neuronas en la primera capa oculta, 15 neuronas en la segunda capa oculta, 10 neuronas en la tercera capa oculta y 5 neuronas en la cuarta capa oculta encontraron que los valores R y RMSE para el modelo desarrollado eran 0.8177 y 0.1094, respectivamente (Mohammadpoor y Torabi, 2018).
- Catálisis: Los datos experimentales de la síntesis de materiales mesoporosos se analizaron mediante el modelo cuadrático convencional y una técnica de ML llamada máquina de vector soporte (SVM), SVM interpretó los efectos de los parámetros de síntesis en los grupos, 31 datos se utilizaron para entrenar a la red neuronal con un paso de 1 y 2 por 32 veces, con validación cruzada (Wang *et al.*, 2019).
- Termodinámica: Un modelo predictivo para los datos de equilibrio líquido vapor de un refrigerante binario se desarrolló con programación hacia atrás (BP) de 242 datos entrenados y 69 para validación (Jirasek *et al.*, 2020).

Sin embargo, en el campo de la hidrodestilación de aceites esenciales carece de la aplicación de redes neuronales, para el modelaje de los fenómenos representativos del proceso, clasificación y predicción de las características físicas y químicas de estos.

Capítulo 3 JUSTIFICACIÓN

Los estudios sistemáticos de los fenómenos dominantes del proceso de hidrodestilación con el propósito de controlarlos, simularlos y escalarlos son singulares, de los cuales existe información escasa. Por lo que, obtener un modelo matemático que prediga su comportamiento para escalarlo a planta piloto favorecerá el aprovechamiento de *Tagetes lucida Cav.*



Capítulo 4 ALCANCE

El alcance de esta investigación es mixto. En relación con el método científico se utilizó para esta investigación los alcances de escrutinio, descripción, correlación y explicación.



Capítulo 5 HIPÓTESIS

La selección de los fenómenos dominantes del proceso de hidrodestilación en la obtención de aceite esencial de *Tagetes lucida* Cav., se establecerá mediante el modelo matemático para su escalamiento.



Capítulo 6 OBJETIVOS

6.1. Objetivo General

Escalar el proceso de hidrodestilación de laboratorio a planta piloto para la obtención de aceite esencial de *Tagetes lucida Cav.*

6.2. Objetivos Específicos

- Determinar el efecto de las variables operacionales para la obtención del aceite esencial de *Tagetes lucida Cav.*
- Simular el proceso de hidrodestilación para la obtención del aceite esencial de *Tagetes lucida Cav.*

Capítulo 7 METODOLOGÍA

La Figura 7.1 muestra la metodología propuesta para el escalamiento del proceso de hidrodestilación para la obtención de aceite esencial de *Tagetes lucida* Cav., y se describe en los subcapítulos siguientes.

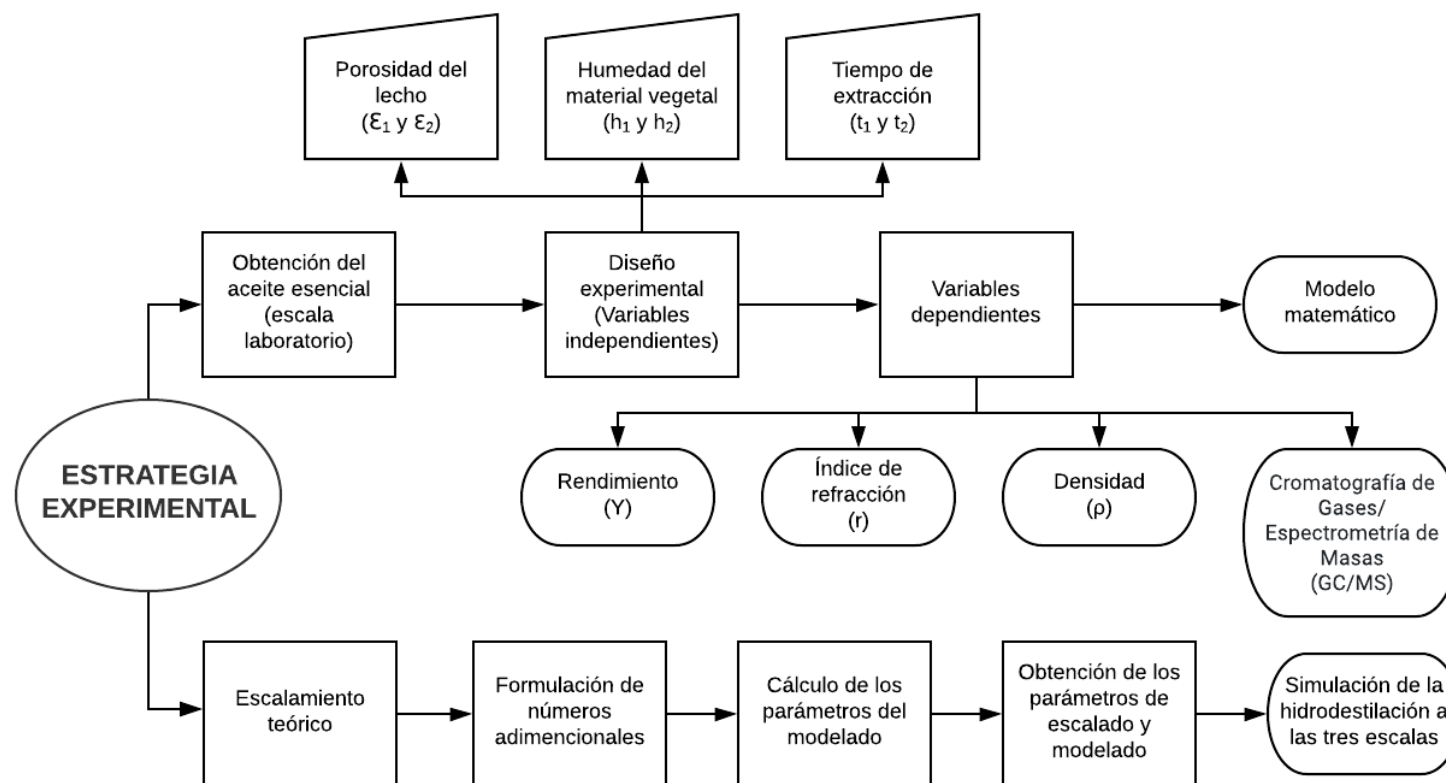


Figura 7.1.- Estrategia experimental para el escalamiento del proceso de hidrodestilación para la obtención de aceite esencial de *T. lucida*



7.1. Colecta de *Tagetes lucida* Cav.

Los especímenes de *T. lucida* se recolectaron en 2021 en estadio de floración en las localidades: 1.- Tacícuaro ($19^{\circ}40'39.6''\text{N}$ $101^{\circ}21'30.1''\text{W}$), 2.- Morelia ($19^{\circ}41'14.9''\text{N}$ $101^{\circ}18'12.6''\text{W}$), 3.- Morelia ($19^{\circ}41'27.7''\text{N}$ $101^{\circ}16'47.1''\text{W}$), 4.- Coíntzio ($19^{\circ}38'23.4''\text{N}$ $101^{\circ}16'02.6''\text{W}$) y 5.- Morelos ($19^{\circ}38'42.8''\text{N}$ $101^{\circ}13'07.0''\text{W}$), ver Figura 7.2. Un espécimen se almacenó en el herbario de la UMSNH. *T. lucida* es una planta estacional que se encuentra en abundancia entre los meses de agosto a diciembre. Es una especie vegetal que no está en la relación/lista de plantas en riesgo de extinción con respecto a la (NOM-059-SEMARNAT-2010). La recolección se realizó de acuerdo con la norma de colecta (NOM-126-ECOL-2000). Desde la colecta de la biomasa hasta la destilación transcurrieron alrededor de 2 h. La parte aérea de la planta se fraccionó manualmente en tamaños heterogéneos.

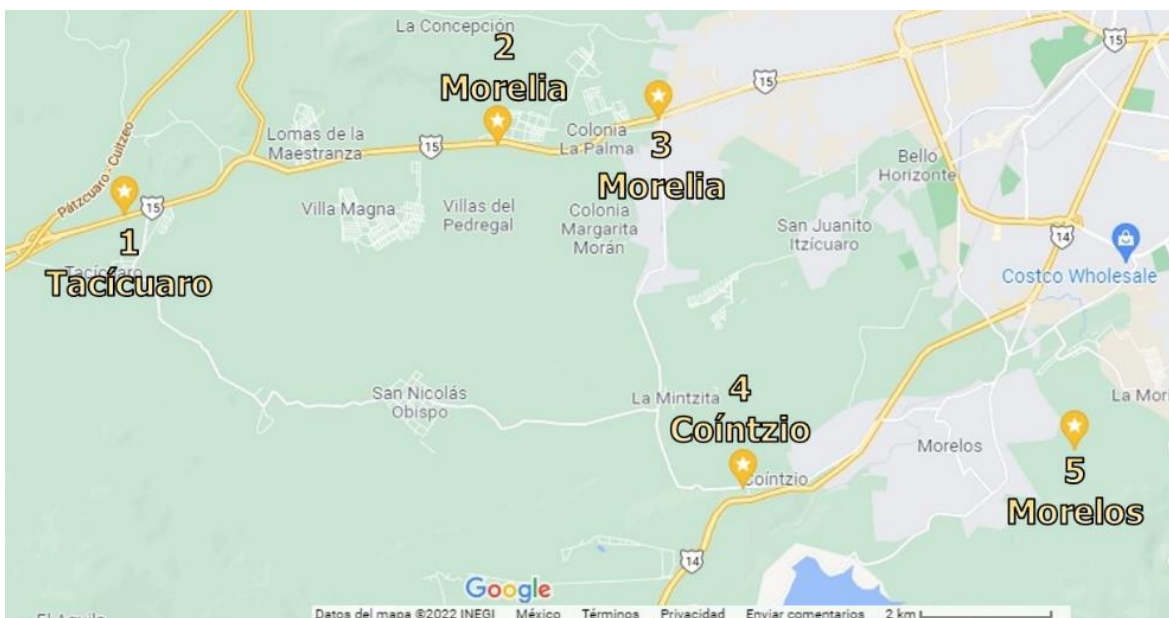
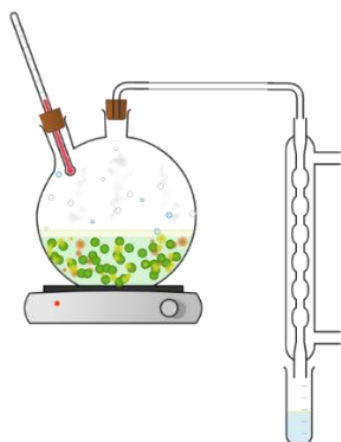


Figura 7.2.- Localidades de colecta del material vegetal. 1.- Tacícuaro ($19^{\circ}40'39.6''\text{N}$ $101^{\circ}21'30.1''\text{W}$), 2.- Morelia ($19^{\circ}41'14.9''\text{N}$ $101^{\circ}18'12.6''\text{W}$), 3.- Morelia ($19^{\circ}41'27.7''\text{N}$ $101^{\circ}16'47.1''\text{W}$), 4.- Coíntzio ($19^{\circ}38'23.4''\text{N}$ $101^{\circ}16'02.6''\text{W}$) y 5.- Morelos ($19^{\circ}38'42.8''\text{N}$ $101^{\circ}13'07.0''\text{W}$).

7.2. Obtención de aceite esencial de *T. lucida*

La extracción de aceite esencial de *T. lucida* se realizó por el método de hidrodestilación (Figura 7.3). La Figura 7.3a muestra el esquema del equipo a nivel laboratorio, un destilador de vidrio marca Boro™ 3.3, con bocas esmeriladas 24/40 de 2 L de capacidad, con una trampa clewenger (vidrio clase A) para aceites esenciales. En la Figura 7.3b se muestra el alambique para la hidrodestilación a nivel planta piloto, de acero inoxidable con capacidad de 10 L. El rendimiento del aceite esencial se expresa con relación al peso húmedo. El aceite esencial de *T. lucida* se protegió de la luz y se almacenó en frascos ámbar en refrigeración a temperatura de 6 ± 2 °C, hasta su uso. La hidrodestilación se analizó por muestreos de hidrolato cada cinco minutos y se determinó la cantidad de aceite esencial de *T. lucida*, por decantación.

a



b



Figura 7.3.- Equipos para hidrodestilación del aceite esencial de *T. lucida* **a.-** Esquema del hidrodestilador a escala laboratorio y **b.-** Alambique

7.3. Caracterizaciones fisicoquímicas del aceite esencial de *T. lucida*

La calidad de los aceites esenciales puede afectarse por diferentes variables bioquímicas como las condiciones de cultivo, época de recolección, manejo del material vegetal (seco o húmedo) y variables de proceso como el método de extracción, temperatura, presión y solvente, entre otros. Todos estos factores desempeñan un papel significativo en el resultado final.

Para definir la calidad del aceite esencial de *T. lucida*, se determinaron las siguientes características: densidad, índice de refracción, además del uso de Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC/MS) y la determinación del poder calorífico específico.

7.3.1. Densidad relativa e índice de refracción

Los aceites esenciales se caracterizaron fisicoquímicamente según las especificaciones de las normas de control de la calidad mexicanas. La determinación del índice de refracción se realizó con respecto a la NOM-F-74-S-1981. La determinación de la densidad relativa del aceite esencial se siguió el lineamiento como lo marca la NMX-F-075-SCFI-2012.

7.3.2. Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC/MS)

Los espectros de masas fueron obtenidos en un espectrómetro de masas Hewlett Packard modelo 5989B, con un detector de iones (multiplicador de electrones), la temperatura de la fuente de iones fue de 200 °C, un filtro de masas a una temperatura de 100 °C, energía de ionización de 70 eV. Los cromatogramas de gases se obtuvieron con un cromatógrafo de gases de la marca Hewlett Packard modelo 5890 Serie II plus. Las condiciones para obtener los cromatogramas fueron las siguientes: una temperatura inicial del horno cromatográfico de 50 °C durante cinco minutos, posteriormente, se incrementó la temperatura hasta 200 °C con una velocidad de calentamiento de 20 °C/min, hasta llegar a los 200 °C donde permaneció por cinco minutos, posteriormente se incrementó a 250 C con velocidad de 20 °C/min, a la cual permaneció durante 10

minutos, el tiempo total de análisis por corrida fue de 30 minutos. La temperatura del inyector y de la interfase fue de 240 °C y 260 °C, respectivamente. El Helio fue la fase móvil y una columna no polar Hp-5 MS, como fase estacionaria se utilizó el (5-fenil)-metilpolisiloxano, con 30 m de longitud, diámetro interno de 0.25 mm, la capa de la fase estacionaria de 0.25 µm. La base de datos para la comparación de las señales espectrales fue NIST MS Search 2.0 (“Chem Station”, Hewlett Packard).

7.4. Algoritmos de aprendizaje para Machine Learning para los rendimientos del aceite esencial de *T. lucida*

La clasificación de 60 aceites esenciales de *T. lucida* con los rendimientos experimentales obtenidos del proceso de hidrodestilación del aceite esencial de *T. lucida* y su caracterización (GC/MS, densidad, índice de refracción, estadio y humedad de la planta) se analizaron mediante los algoritmos de aprendizaje automático: *K-Nearest Neighbor*, *Scikit-Learn*, *Random Forest*, *Gradient Boosting Trees* y *Super Learner*.

El 70% de los datos se utilizó para el entrenamiento de los algoritmos, la validación cruzada repetida paralelizada se realizó con el 20% de los datos, en 10 pasos y 5 al dividir todo el conjunto de muestras en subconjuntos de entrenamiento y validación, el 10% de los datos restantes se utilizaron para la comprobación del aprendizaje de los algoritmos, el desarrollo de estos se llevó a cabo en el software de programación PYTHON™. La base de datos experimentales se generó en MICROSOFT EXCEL™.

7.5. Esquema de trabajo para la simulación de la hidrodestilación del aceite esencial de *T. lucida*

La simulación del proceso de hidrodestilación del aceite esencial de *T. lucida* se desarrolla de acuerdo con el diagrama de flujo mostrado en la Figura 7.4.

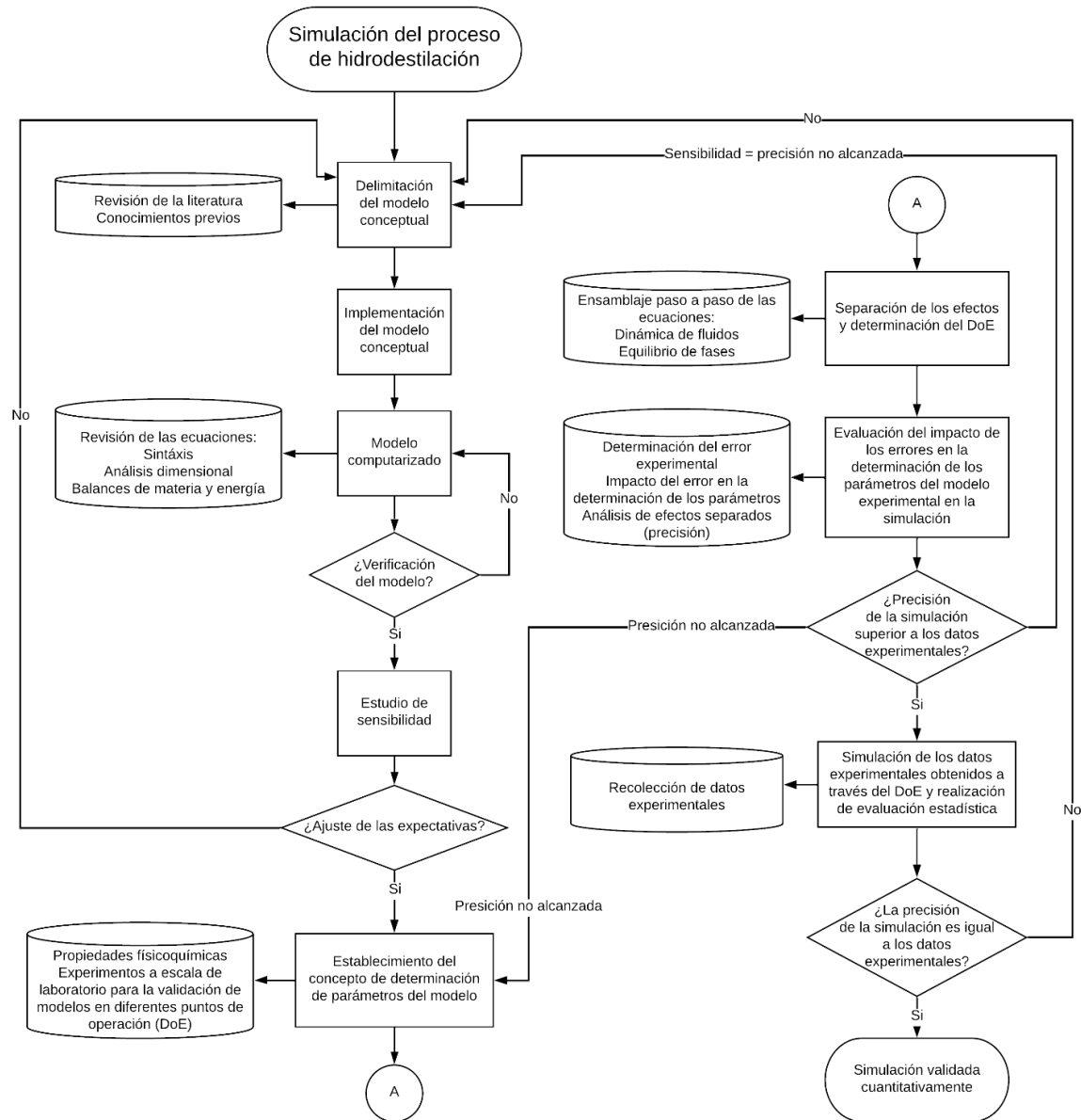


Figura 7.4.- Diagrama de flujo para la simulación del proceso de hidrodestilación del aceite esencial de *T. lucida*

7.5.1. Balances macroscópicos

Los balances macroscópicos fueron la pauta para el análisis matemático del proceso de hidrodestilación, en ellos se describen los balances de materia y de energía propios del proceso.

7.5.1.1. Balance de materia

Los balances de materia se emplearon para determinar rendimientos del proceso de hidrodestilación, con esta herramienta se cuantifica la porción de producto obtenido por cantidad de materia prima suministrada en el proceso, esto permitió reducir al máximo las mermas de materias primas y optimizar los recursos a cada una de las escalas (Figura 7.5).

Convención de las corrientes:

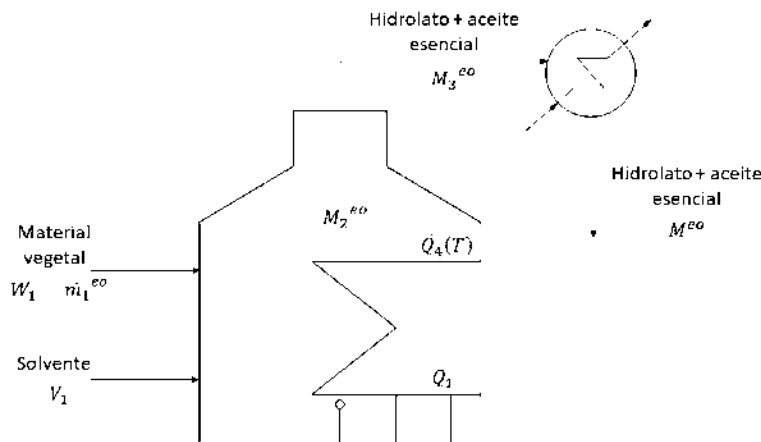


Figura 7.5.- Diagrama de flujo de materia y energía para la obtención del aceite esencial de *T. lucida*

- 1.- Entrada al hidroddestilador
- 2.- Salida del hidroddestilador
- 3.- Fase vapor

$$[Acumulación] = [Entradas] - [Salidas] \pm [Generación]$$

Dado que es un proceso unitario [*Generación*] = 0

Dado que es un proceso por lotes (*batch*)

$$\dot{m}_1^{eo} = 0 \quad (7.1)$$

Para $0 < t < t_{fill}$

$$\dot{m}_1^{eo} - \frac{dM_3^{eo}}{dt} = \frac{dM^{eo}}{dt} \quad (7.2)$$

Cuando $t_{fill} < t < t_{ns} + t_{fill}$

$$\dot{m}_1^{eo} - \frac{dM_2^{eo}}{dt} - \frac{dM_3^{eo}}{dt} = \frac{dM^{eo}}{dt} \quad (7.3)$$

En $t_{ns} < t < t_{sd}$

$$\dot{m}_1^{eo} - \dot{m}_2^{eo} - \dot{m}_3^{eo} = \frac{dM^{eo}}{dt} \quad (7.4)$$

Dada la suposición de que la operación es en equilibrio y sin acumulación de aceite en el vapor:

$$-\frac{dM^{eo}}{dt} = FC^* \quad (7.5)$$

7.5.1.2. Balance de energía

Los balances de energía proporcionan información acerca de la cantidad de calor que se absorbe o libera durante el proceso de hidrodestilación.

Para $0 < t < t_{\infty}$

$$Q_1 = M^{mh} C_p^{mh} (T_{\infty} - T_0) \quad (7.6)$$

$$Q_2 = M^{agua} C_p^{agua} (T_{\infty} - T_0) \quad (7.7)$$

El C_p^{mh} , se determinó mediante la bomba calorimétrica Anton Parr (Modelo, especificaciones). La transferencia de calor del vapor al sólido es igual al total del calor latente de evaporación, de tal manera que:

$$Q_3 = (\lambda) \cdot (M_{hidrolato+eo} \cdot A_{hd}) \quad (7.8)$$

Para la pérdida de calor al exterior

$$\dot{Q}_4(T) = hA_{hd}(T - T_0) \quad (7.9)$$

$$k_{tr} = \frac{h}{\rho C_p} \quad (7.10)$$

Por lo tanto

$$\dot{Q}_{need} = \left(\frac{Q_1 + Q_2 + Q_3}{\Delta t} \right) + \dot{Q}_4(T) \quad (7.11)$$

7.5.2. Modelos conceptuales

Los procesos de la industria química, generalmente, representan un reto al simularlos, dado que, no se manejan uno o dos componentes, sino un gran número de ellos, se requiere especificar información para cada componente a trabajar y del propio fenómeno a estudiar.

7.5.2.1. Modelo difusivo

En el modelo difusivo se propone que hay tres formas posibles de describir los mecanismos de extracción (Figura 7.6) donde se muestran diferentes ubicaciones de almacenamiento de aceite. El aceite esencial de *T. lucida* se encuentra en los tricomas glandulares y necesita difundirse a través de la superficie dura de la planta. Estos tricomas están en contacto directo con el vapor y liberan el aceite esencial a medida que se rompen.

7.5.2.1.1. Mecanismos de transporte del modelo difusivo

Para el planteamiento del modelo fenomenológico difusivo se consideraron tres grupos de factores biológicos para describir matemáticamente el proceso de hidrodestilación del aceite esencial de *T. lucida*, ver la Figura 7.6:

- Las células son una barrera permeable para el aceite esencial. Por la cual, el aceite esencial se arrastra a la película acuosa debido a una exudación térmica. La difusión del aceite esencial en la cutícula es despreciable. La composición del aceite esencial en el interior de la célula es constante con respecto al tiempo.
- La película acuosa en la superficie de la biomasa recubre completamente a las células y es atravesada por las gotas del aceite que fluyen de la célula.
- El aceite libre, exudado por la célula, se acumula formando una capa, inmiscible con el agua y de espesor constante.

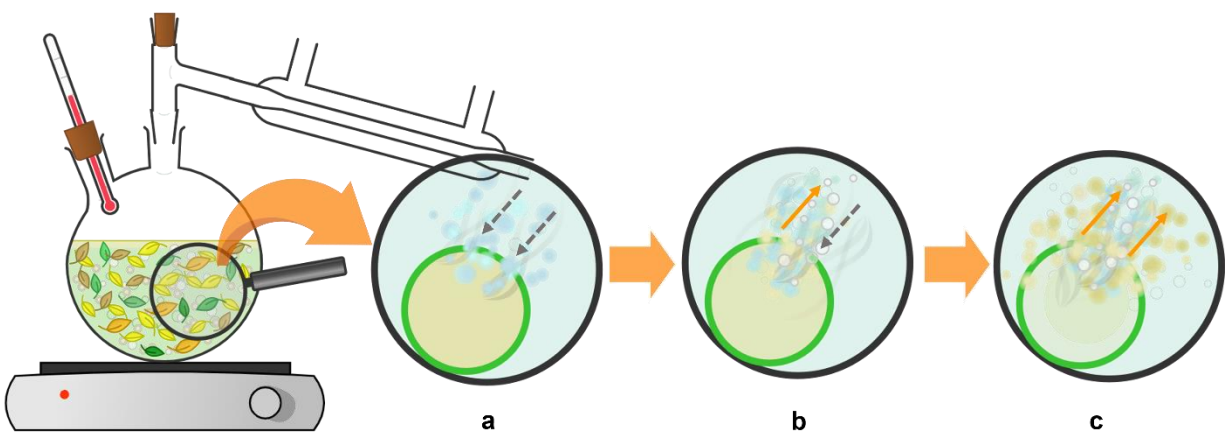


Figura 7.6.- Factores biológicos para la descripción del proceso de hidrodestilación.

a.- Exudación térmica, **b.-** Película acuosa y **c.-** Aceite esencial libre.

7.5.2.1.2. Suposiciones del modelo difusivo

- a) El proceso se lleva a cabo en estado transitorio.
- b) El agua hirviendo con partículas vegetales y burbujas de vapor se simula como una columna de burbujeo perfectamente mezclado.
- c) El aceite esencial fue definido como una mezcla ideal de cinco compuestos determinados por el análisis de Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC/MS). La composición del aceite, durante la operación, fue calculada por el equilibrio de las tres fases fluidas (*Agua líquida – vapor de agua y vapor de aceite esencial*). La composición inicial del aceite fue la misma del obtenido al finalizar $\{w_i^{sd}\}_\infty$.
- d) Las partículas se consideran esféricas y todos los poros están distribuidos en dirección radial.
- e) Las resistencias a la transferencia de masa en las células (tricomas glandulares), el agua hirviendo y la fase de vapor son insignificantes y, por lo tanto, el equilibrio se establece instantáneamente entre las fases.
- f) El momento en que las primeras gotas del condensador llegan al separador se le denomina $t = 0$.

7.5.2.1.3. Análisis de grados de libertad del modelo difusivo

$$n_{corr} = 1$$

$$n_{comp} = 5$$

$$n_r = 0$$

Variables

$$n_v^m = 1(5 + 1) + 0 = 6$$

Ecuaciones

$$\text{Balances de materia ind.} = 5$$

Restricciones

$$\sum_{i=1}^5 w^{tr}_i = 1$$

$$n_E^m = 6$$

$$\therefore n_D = n_v^m - n_c^m = 0$$

7.5.2.1.4. Determinación de los parámetros del modelo difusivo

a) Interior de los tricomas glandulares

$$\dot{m}_i^{tr \rightarrow os} = K_{tr} \cdot G_i \cdot W = -W \cdot \left(\frac{dG_i}{dt} \right) \quad (7.12)$$

$$\sum_{i=1}^5 w^{tr}_i = 1 \quad (7.13)$$

Con las siguientes condiciones iniciales

$$t = 0 \text{ para } G_i = w_i^{tr} \cdot G_0$$

$$t = fill \text{ para } G_i = w_i^{tr} \cdot G_0$$

Al integrar (7.12) con las condiciones frontera

$$G_i|_{fill} = G_0 \cdot w_i^{tr} \cdot \exp(-K_{tr} \cdot t_{fill}) \quad (7.14)$$

Se deriva (7.14) para el periodo de obtención ($t \geq t_{fill}$ o $t_{sd} \geq 0$), asumiendo que el caudal de hidrolato es constante, se obtiene la siguiente expresión:

$$\frac{dG_i}{dV_{fw}} = -\frac{K_{tr}}{Q_{fw}} \cdot G_i \quad (7.15)$$

Con la condición inicial siguiente:

$$t_{sd} = 0 \text{ para } G_i = G_i|_{fill}$$

b) Capa de aceite esencial libre

El balance de masa comprende a los flujos másicos de cada componente del aceite esencial desde el tricoma a la película (exudación) y desde la película a la corriente de vapor (difusión convectiva), en el periodo de obtención es:

$$\dot{m}^{tr \rightarrow os} - \dot{m}^{os \rightarrow vp} = \frac{dM_i^{os}}{dt_{sd}} \quad (7.16)$$

El flujo másico de cada componente del aceite esencial, desde la película acuosa superficial al seno de la corriente del vapor, está relacionado con la diferencia de la concentración en la capa límite, mediante la siguiente expresión:

$$\dot{m}^{os \rightarrow vp} = K_g \cdot S^{os} \cdot w_i^{vp} \cdot (C^* - C) \quad (7.17)$$

Donde: C^* se calcula en la predicción del equilibrio de fases, $\{w_i^{vp}\}$ se calcula por el balance de materia entre las fases, K_g depende de la corriente del vapor y S^{os} depende directamente de la masa de aceite en la película acuosa (M^{os}), mediante la relación:

$$M^{os} = S^{os} \cdot h \cdot \rho_{eo} \quad (7.18)$$

$$M^{os} = \sum_{i=1}^5 M_i^{os} \quad (7.19)$$

Donde: h es el espesor promedio de la capa de aceite acumulado en la película. Es constante, porque al disminuir la masa del aceite, decrece el área de transferencia.

Del balance de masa en las 3 fases, al inicio de la operación y el rendimiento total de aceite (Y_∞) al final de la hidrodestilación, se deduce:

$$Y_\infty = \frac{M_0^{os}}{W} + G_0 \quad (7.20)$$

La relación entre el aceite esencial libre y el rendimiento total del aceite se define:

$$\omega = \left(\frac{M_0^{os}/W}{Y_\infty} \right)_{t=0} \quad (7.21)$$

Sustituyendo (7.21) en (7.20) y despejando G_0

$$G_0 = (1 - \omega) \cdot Y_\infty \quad (7.22)$$

Donde ω puede ser estimada ópticamente y refleja el estado físico de la materia prima, cuando $\omega \rightarrow 0$, los tricomas están intactos y la mayor parte del aceite está en su interior, cuando $\omega \rightarrow 1$, la matriz ha sufrido un tratamiento de reducción, para liberar el aceite.

Reemplazando (7.12), (7.17), (7.18) y (7.20) en (7.16) y asumiendo el caudal de hidrolato constante, se obtienen la siguiente ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{dM_i^{os}}{dV_{fw}} = \frac{K_{tr}W}{Q_{fw}} \cdot G_i - \left(\frac{K_g M^{os}}{Q_{fw} h \rho_{eo}} \right) \cdot w_i^{vp} \cdot (C^* - C) \quad (7.23)$$

Con las siguientes condiciones frontera:

$$t_{sd} = 0 \text{ para } M_i^{os} = M_i^{os}|_{fill} \text{ cuando } \{w_i^{os}\} = \{w_i^{sd}\}_\infty$$

Integrando (7.23)

$$M_i^{os}|_{fill} = w_i^{os} \cdot Y_\infty \cdot W \cdot [1 - (1 - \omega) \exp(-K_{tr} t_{fill})] \quad (7.24)$$

c) Fase vapor

El balance de cada componente del aceite esencial en la fase vapor, en el periodo de obtención, despreciando la acumulación de aceite es:

$$Q \cdot C_i^{in} + \dot{m}_i^{os \rightarrow vp} - Q \cdot w_i^{vp} \cdot C = 0 \quad (7.25)$$

Sustituyendo (7.17) en (7.25) y dado que $C^{in} = 0$, se obtiene:

$$K_g \cdot S^{os} \cdot w_i^{vp} \cdot (C^* - C) = Q \cdot w_i^{vp} \cdot C \quad (7.26)$$

Despejando C de (7.26)

$$\left(\frac{K_g S^{os}}{K_g S^{os} + Q} \right) \cdot (C^*) = C \quad (7.27)$$

Reemplazando (7.18) en (7.27)

$$\left(\frac{K_g M^{os}}{K_g M^{os} + Q(h\rho_{eo})} \right) \cdot (C^*) = C \quad (7.28)$$

El aceite recogido (M^{sd}) es calculado, asumiendo un caudal de hidrolato constante, mediante la siguiente ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{dM_i^{sd}}{dV_{fw}} = \left(\frac{Q w_i^{vp}}{Q_{fw}} \right) \cdot \left(\frac{K_g M^{os}}{K_g M^{os} + Q(h\rho_{eo})} \right) (C^*) \quad (7.29)$$

$$M^{sd} = \sum_{i=1}^5 M_i^{sd} \quad (7.30)$$

Con la siguiente condición inicial

$$t_{sd} = 0 \text{ para } \{M_i^{sd}\} = 0$$

Donde K_g se obtiene según la ecuación expresada por (Valderrama y Ruiz, 2018)

$$K_g = (4.7 \times 10^4) \cdot (Q - 74400) + 31.4 \quad (7.31)$$

7.5.2.1.5. Equilibrio de fases.

Tres fases en equilibrio, con dos componentes inmiscibles entre sí en la fase líquida: el agua como una sustancia pura y el aceite esencial, exento de agua, como una mezcla ideal, formada por cinco compuestos puros elegidos por su mayor contenido en el aceite, según el análisis químico por GC/MS.

Aplicando la ley de Dalton para la fase vapor:

$$P = P_w^0 + P_{vp} \quad (7.32)$$

Para el aceite esencial se aplicó en método de Ambrose-Walton

$$\ln P_{vp} = f^{(0)}(T_r) + \vartheta f^{(1)}(T_r) \quad (7.33)$$

$$f^{(0)}(T_r) = (-5.97616\varphi + 1.29874\varphi^{1.5} - 0.60394\varphi^{2.5} - 1.06841\varphi^5) \frac{1}{T_r} \quad (7.34)$$

$$f^{(1)}(T_r) = (-5.03365\varphi + 1.11505\varphi^{1.5} - 5.41217\varphi^{2.5} - 7.46628\varphi^5) \frac{1}{T_r} \quad (7.35)$$

$$\vartheta = \frac{-\ln(P_c) - f^{(0)}(T_b/T_c)}{f^{(1)}(T_b/T_c)} \quad (7.36)$$

$$\varphi = 1 - T_r \quad (7.37)$$

$$P_{vp} = \sum_{i=1}^5 x_i P_i^0 \quad (7.38)$$

La composición de la fase vapor es:

$$y_i = \frac{P_{vp}}{P} \quad (7.39)$$

$$y_w = \frac{P_w^0}{P} \quad (7.40)$$

A la temperatura de burbuja, se cumple:

$$y_w + \sum_{i=1}^5 y_i = 1 \quad (7.41)$$

La concentración del aceite esencial en el equilibrio, como:

$$C^* = \frac{P_{vp} MW_{vp}}{RT} \quad (7.42)$$

$$MW_{vp} = \sum_{i=1}^5 y_i MW_i \quad (7.43)$$

Estimación del coeficiente de transferencia de masa en la película:

Para una placa plana

$$Sh = 2 + 1.45 Re_p^{1/2} Sc^{2/3} \quad (7.44)$$

$$Sh = \frac{K_{tr} d_p}{D_{AB}} \quad (7.45)$$

$$Re_p = \frac{d_p \cdot V_b \cdot \rho_{vap}}{\mu_{vap}} \quad (7.46)$$

$$Sc = \frac{\mu_{vap}}{\rho_{vap} \cdot D_{ef}} \quad (7.47)$$

Para el cálculo de las difusividades, se utiliza la siguiente expresión:

$$D_{ef_i} = (9.4 \times 10^{-15}) \cdot \left(\frac{T_\infty}{\mu_{vap} \cdot (PM_i)^{1/3}} \right) \quad (7.48)$$

7.5.2.1.6. Análisis dimensional aplicado al modelo difusivo (Teorema de Buckingham)

Los siguientes parámetros son los requeridos por el modelado para la simulación del proceso:

Parámetros objetivo. - $K_{tr}, K_g \cdot a_s$

Parámetros geométricos. - V_b

Parámetros de los materiales. - ρ_s

Parámetros relacionados con el proceso. - Q

El coeficiente de transferencia de masa se une al área específica del lecho (a_s), para el área de transferencia de masa y el volumen del lecho conjuntamente. Como un hidroddestilador puede ser cilíndrico, se prefiere tomar el volumen del lecho (V_b) como un parámetro. El caudal del vapor (Q) se consideró como uno de los parámetros del proceso, desde el diseño experimental de las pruebas. El espesor de la capa de aceite en la película superficial (h) es constante e independiente de la escala de obtención.

$$f(\rho_s, V_b, Q, K_{tr}, K_g \cdot a_s) \quad (7.49)$$

$$\rho_s = ML^{-3}$$

$$V_b = L^3$$

$$Q = L^3T^{-1}$$

$$K_{tr} = T^{-1}$$

$$K_g \cdot a_s = T^{-1}$$

$$\text{Grados de libertad} = (5 - 3) = 2$$

$$\Pi_1 = (\rho_s)^a(Q)^b(V_b)^c(K_{tr}) \quad (7.50)$$

$$\Pi_2 = (\rho_s)^a(Q)^b(V_b)^c(K_g \cdot a_s) \quad (7.51)$$

Para que (7.50) sea adimensional:

$$(ML^{-3})^a (L^3T^{-1})^b (L^3)^c (T^{-1}) = M^0L^0T^0$$

Sistema de ecuaciones:

$$a = 0$$

$$-3a + 3b + 3c = 0$$

$$-b - 1 = 0$$

$$a = 0$$

$$b = -1$$

$$c = 1$$

Para que (7.51) sea adimensional:

$$(ML^{-3})^a (L^3T^{-1})^b (L^3)^c (T^{-1}) = M^0L^0T^0$$

Sistema de ecuaciones:

$$a = 0$$

$$-3a + 3b + 3c = 0$$

$$-b - 1 = 0$$

$$a = 0$$

$$b = -1$$

$$c = 1$$

Por lo tanto:

$$\Pi_1 = (Q)^{-1} (V_b)^1 (Ktr) \quad (7.52)$$

$$\Pi_2 = (Q)^{-1} (V_b)^1 (K_g \cdot a_s) \quad (7.53)$$

Dado que:

$$\tau = (V_b)^1 (Q)^{-1}$$

$$a_s = \frac{S^{os}}{V_b}$$

Sustituyendo en (7.52) y (7.53)

$$\Pi_1 = (\tau) \cdot (Ktr) = (\tau) \cdot (t_{rx})^{-1} \quad (7.54)$$

$$\Pi_2 = \left(\frac{K_g \cdot S^{os}}{Q} \right) \quad (7.55)$$

El número adimensional de Damköhler representa un tiempo de reacción adimensional, la definición general se define como:

$$\frac{V_b}{Q} = \tau$$

$$D_a = \frac{\text{Tiempo de residencia en el hidrodestilador}}{\text{Tiempo de destilación}} = \frac{\tau}{t_{rx}}$$

El número de Sherwood es un número adimensional utilizado en transferencia de masa:

$$Sh = \frac{\text{Velocidad de transferencia de masa en la interfase por unidad de volumen}}{\text{Velocidad de transferencia de masa por convección por unidad de volumen}}$$

$$Sh = \frac{\frac{\dot{m}_i^{tr}}{V_b}}{\frac{\dot{m}_i^{os}}{V_b}} = \frac{K_g \cdot S^{os} \cdot C \cdot w_i^{vap}}{Q \cdot C \cdot w_i^{vap}} = \frac{K_g \cdot S^{os}}{Q}$$

Por tanto:

$$\Pi_1 = D_a$$

$$\Pi_2 = S_h$$

7.5.2.1.7. Parámetros para el escalamiento del modelo difusivo a mayor escala (Criterio de similitud)

$$D_{a_1} = D_{a_2}$$

$$\tau_1 = \tau_2$$

Donde el subíndice 1 hace referencia a la escala laboratorio y el subíndice 2 a la escala planta piloto.

El volumen del lecho es calculado con la ecuación (7.57), si la masa y la porosidad del lecho son especificadas:

$$V_{b2} = \frac{W_2}{\rho_{mh} \cdot (1 - \varepsilon)} \quad (7.56)$$

- La porosidad (ε) especificada debe estar en el mismo intervalo que la usada para las experiencias a la escala banco o piloto; porque no es recomendable extrapolar datos en el modelado desarrollado, ya que se ignora sus efectos en la simulación.
- Dado que es el mismo material vegetal que el procesado a escala laboratorio, el diámetro de partícula (d_p) y la fracción de aceite esencial libre son las mismas.
- El coeficiente de transferencia de masa global (K_g) es calculado usando la ecuación (7.31) pero asegurándose que $Pe < 10$; puesto que las velocidades intersticiales no son iguales entre las dos escalas.
- La composición del aceite esencial es un dato especificado (aunque deberá ser corroborado con el GC/MS).
- La densidad del aceite (ρ_{eo}) es una propiedad también especificada, como un promedio de las halladas a escala planta piloto.
- El coeficiente de difusividad del aceite en el vapor es calculado por la ecuación (7.48).
- El rendimiento de aceite esencial total (Y) es un dato especificado y puede ser asumido como el mayor de los obtenidos a escala planta piloto.

7.5.2.1.8. Diseño del hidroddestilador a partir del modelo difusivo

Geometría esférica

$$V_{b2} = \left(\frac{\alpha^2 \cdot \pi}{3} \right) \cdot \left(\left(3 * \frac{\Phi_{hd}}{2} \right) - \alpha \right) \quad (7.57)$$

$$H_{hd} = \pi \cdot \left(\alpha^2 + \left(\frac{\phi_{hd}}{2} \right)^2 \right)$$

Geometría cilíndrica

$$V_{b2} = \left(\frac{\pi}{4} \right) \cdot \alpha \cdot \phi_{hd}^3 \quad (7.58)$$

$$H_{hd} = \alpha \cdot \phi_{hd}$$

7.5.2.1.8.1. Reglas heurísticas de diseño

- La relación de diámetro de la columna con el tamaño del relleno debe ser de al menos 15 (Kister, 1990), por tanto, $\frac{\phi_{hd}}{\varepsilon} \geq 15$.
- La eficiencia del proceso $60\% < \varepsilon \leq 80\%$, para la presente investigación $\varepsilon \cong 60\%$
- La relación entre la altura y el diámetro del hidroddestilador debe ser menor o igual a 30, $\alpha = \frac{H_{hd}}{\phi_{hd}} \leq 30$.
- El hidroddestilador se considera como un mezclador perfecto, cuando $\alpha \rightarrow 1$, debido a que la geometría simétrica favorece la dispersión axial del aceite vaporizado y el vapor se distribuye más lentamente en el seno del lecho, generando que el vapor, lo envuelva y penetre, logrando un mezclado ideal (Cerpa *et al.*, 2007).

7.5.3.1. Modelo cinético

En el modelo cinético, la matriz vegetal de extracción se modelará como si fuera un catalizador poroso con zonas activas que se desactivan rápidamente de manera irreversible (Figura 7.7).

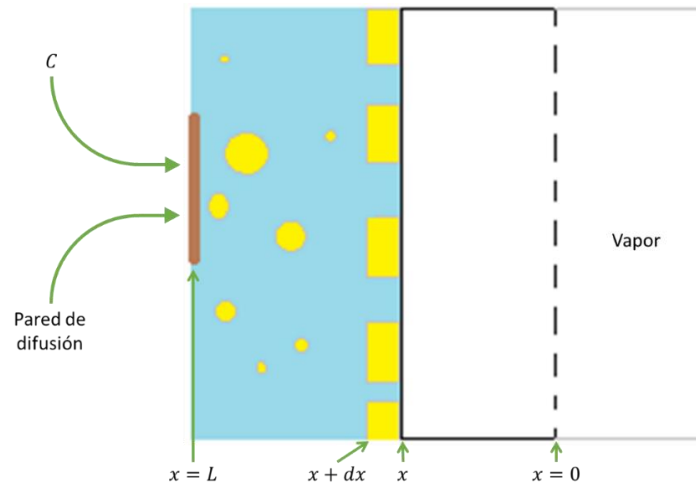


Figura 7.7.- Mecanismo de transporte modelo cinético

7.5.3.1.1. Suposiciones del modelo cinético

1. El agua hirviendo con partículas vegetales y burbujas de vapor se modela como un lecho fluidizado perfectamente mezclado.
2. En el sistema se consideran las siguientes fases: Líquido (agua), vapor (aceite esencial y agua).
3. La masa de vapor de agua en el condensador, el separador y en la tubería de conexión es mucho menor que la masa de vapor en el destilador y, por lo tanto, se desprecia en el balance de masa.
4. Las resistencias a la transferencia de masa en los tricomas, el agua hirviendo y la fase de vapor (agua-aceite) son insignificantes y, por lo tanto, el equilibrio se establece instantáneamente entre las fases.

7.5.3.1.2. Análisis de grados de libertad

$$n_{corr} = 1$$

$$n_{comp} = 5$$

$$n_r = 0$$

Variables

$$n_v^m = 1(5 + 1) + 0 = 6$$

Ecuaciones

$$\text{Balances de materia ind.} = 5$$

Restricciones

$$\sum_{i=1}^5 w^{tr}_i = 1$$

$$n_E^m = 6$$

$$\therefore n_D = n_v^m - n_C^m = 0$$

7.5.3.1.3. Determinación de los parámetros del modelo cinético

El balance de materia en estado estacionario en el elemento infinitesimal del modelo cinético, suponiendo constante el coeficiente de difusividad del aceite esencial en el vapor y al aplicar la ley de Fick para el flujo se obtiene:

$$N^{os} = D_{ef} \frac{dC}{dx}$$

Tomando la coordenada axial x desde el centro del tricoma y perpendicular a ésta, el balance de masa se puede escribir como:

$$D_{ef} \frac{d^2C}{dx^2} + u^{os \rightarrow sd} = 0 \quad (7.59)$$

Las condiciones en la frontera son:

En la superficie

$$x = h \quad C = C^*$$

En el centro de la tableta

$$x = 0 \quad \frac{dC^{tr}}{dx} = 0$$

De modo que el flujo neto de vapor a través del plano $x = 0$, es cero.

La solución de la ecuación (7.59), que describe el perfil de concentración dentro de la pastilla, está dada por:

$$\frac{C^{tr}(x)}{C^*} = \frac{\cosh(\sqrt{K_g/D_{ef}} \cdot x)}{\cosh(\sqrt{K_g/D_{ef}} \cdot h)} \quad (7.60)$$

El módulo de extracción se define como el ratio de la tendencia de la velocidad de extracción del aceite esencial sobre la tendencia a la velocidad de transporte difusivo:

$$\xi = L \sqrt{\frac{K_g}{D}} \quad (7.61)$$

La velocidad de evaporación del aceite esencial estará dada por:

$$u^{sd} = K_{tr} \cdot C^* \quad (7.62)$$

La velocidad de extracción observada por unidad de área se considera que está dada por el flujo neto de aceite esencial que es liberado a la superficie del material (flores, hojas y tallos), es decir, $u^{os \rightarrow sd}|_{x=L}$.

$$u^{os \rightarrow sd}|_{x=L} = D_{ef} \cdot \left(\frac{dC^{tr}}{dx} \Big|_{x=L} \right) = \left(\frac{D_{ef} \cdot C^* \cdot \xi}{L^2} \right) \cdot (\tanh \xi) \quad (7.63)$$

El factor de efectividad de extracción (ζ), se define como el ratio entre la velocidad de extracción observada (incluyendo el efecto difusional) sobre la velocidad de evaporación del aceite esencial

$$\zeta = \frac{u^{os \rightarrow sd}|_{x=L}}{u^{sd}} \quad (7.64)$$

Al sustituir la solución del balance de masa para el perfil de concentración en la expresión (7.64), se llega a la siguiente expresión

$$\zeta = \frac{\left(\frac{D_{ef} \cdot C^* \cdot \xi}{L^2} \right) \cdot (\tanh \xi)}{K_{tr} \cdot C^*} = \frac{\xi \cdot (\tanh \xi)}{\xi^2}$$

$$\zeta = \frac{1}{\xi} \cdot \tanh \xi \quad (7.65)$$

El factor de efectividad de extracción resulta ser únicamente función del módulo de extracción. Usando la analogía con el módulo de Thiele (G. F. Froment, 2011), de la teoría de difusión con reacción en catálisis heterogénea, se puede argumentar lo siguiente:

- El módulo de extracción es generalizable para diferentes geometrías de partículas.
- El módulo de extracción indica cuál es el proceso controlante dentro de los tricomas.
- Un valor pequeño del módulo de extracción indica que $D \gg K_{tr}$. Por el contrario, conforme ξ aumenta se nota que la velocidad de extracción empieza a crecer relativamente a la difusión intra-partícula, por lo que ésta última será el paso controlante.

7.5.3.1.4. Balance global del Modelo cinético

El modelo de primer orden (Koul *et al.*, 2004) basado en el fenómeno de difusión en sólidos está representado por la siguiente ecuación general:

$$-\frac{dV}{dt} = K_{tr} \cdot V \quad (7.66)$$

La concentración de aceite del material vegetal se redujo a medida que avanzaba la hidrodestilación:

$$-\frac{dV}{V} = K_{tr} \cdot dt \quad (7.67)$$

$$\ln(V) = K_{tr} \cdot t \quad (7.68)$$

Dado que:

$$Y = \frac{\text{volumen de aceite destilado en el tiempo } t}{\text{volumen de aceite acumulado}} = \frac{V_t}{V_0} \quad (7.69)$$

Sustituyendo (7.69) en (7.68)

$$\ln\left(\frac{1}{1-y}\right) = K_{tr} \cdot t \quad (7.70)$$

7.5.3.1.5. Modelo cinético de Monod

La cinética del proceso se determinó por el rendimiento final (Babu, 2007). La cinética de la extracción de aceite indicó una función similar a la ecuación de Monod (cinética enzimática). El modelo propuesto se define mediante la siguiente ecuación:

$$Y(t) = Y_{max} \cdot \frac{t}{K_{tr} + t} \quad (7.71)$$

Los parámetros de la ecuación de Monod explican la relación con la enzima-sustrato y el comportamiento de la reacción enzimática. Estos parámetros del modelo se pueden utilizar para investigar la cinética de producción de aceites esenciales. Los parámetros de la ecuación (7.71) se pueden determinar a partir de la ecuación (7.73):

$$\frac{1}{Y(t)} = \frac{K_{tr}}{Y_{max}} \cdot \frac{1}{t} + \frac{1}{Y_{max}} \quad (7.72)$$

7.5.3.1.6. Análisis dimensional aplicado al modelo cinético (Teorema de Buckingham)

Los siguientes parámetros son los requeridos por el modelado para la simulación del proceso:

Parámetros objetivo. - $K_{tr}, K_g \cdot a_s$

Parámetros geométricos. - V_b

Parámetros de los materiales. - M

Parámetros relacionados con el proceso. - Q

El coeficiente de transferencia de masa se une al área específica del lecho (a_s) para englobar el área de transferencia de masa y el volumen del lecho conjuntamente.

Dada la geometría cilíndrica del hidroddestilador, el volumen del lecho (V_b) es un parámetro de modelado. El caudal del vapor (Q) se consideró como uno de los parámetros del proceso, desde el diseño experimental de las pruebas.

El espesor de la capa de aceite en la película superficial (h) es constante e independiente de la escala de obtención.

$$f(M, V_b, Q, K_{tr}, K_g \cdot a_s) \quad (7.73)$$

$$\rho_s = M$$

$$V_b = L^3$$

$$Q = L^3 T^{-1}$$

$$K_{tr} = T^{-1}$$

$$K_g \cdot a_s = T^{-1}$$

$$\text{Grados de libertad} = (5 - 3) = 2$$

$$\Pi_1 = (M)^a (Q)^b (V_b)^c (K_{tr}) \quad (7.74)$$

$$\Pi_2 = (M)^a (Q)^b (V_b)^c (K_g \cdot a_s) \quad (7.75)$$

Para que (7.74) sea adimensional:

$$(M)^a (L^3 T^{-1})^b (L^3)^c (T^{-1}) = M^0 L^0 T^0$$

Sistema de ecuaciones:

$$a = 0$$

$$3b + 3c = 0$$

$$-b - 1 = 0$$

$$a = 0$$

$$b = -1$$

$$c = 1$$

Para que (7.75) sea adimensional:

$$(M)^a (L^3 T^{-1})^b (L^3)^c (T^{-1}) = M^0 L^0 T^0$$

Sistema de ecuaciones:

$$a = 0$$

$$3b + 3c = 0$$

$$-b - 1 = 0$$

$$a = 0$$

$$b = -1$$

$$c = 1$$

Por lo tanto:

$$\Pi_1 = (Q)^{-1} (V_b)^1 (Ktr) \quad (7.76)$$

$$\Pi_2 = (Q)^{-1} (V_b)^1 (K_g \cdot a_s) \quad (7.77)$$

Dado que:

$$\tau = (V_b)^1 (Q)^{-1}$$

$$a_s = \frac{S^{os}}{V_b}$$

Sustituyendo en (7.18) y (7.19)

$$\Pi_1 = (\tau) \cdot (Ktr) = (\tau) \cdot (t_{rx})^{-1} \quad (7.78)$$

$$\Pi_2 = \left(\frac{K_g \cdot S^{os}}{Q} \right) \quad (7.79)$$

El número adimensional de Damköhler representa un tiempo de reacción adimensional, la definición general se representa como:

$$\frac{V_b}{Q} = \tau$$

$$D_a = \frac{\text{Tiempo de residencia en el reactor}}{\text{Tiempo de reacción}} = \frac{\tau}{t_{rx}}$$

El número de Sherwood es un número adimensional utilizado en transferencia de masa:

$$Sh = \frac{\text{Velocidad de transferencia de masa en la interfase por unidad de volumen}}{\text{Velocidad de transferencia de masa por convección por unidad de volumen}}$$

$$Sh = \frac{\frac{\dot{m}_i^{tr}}{V_b}}{\frac{\dot{m}_i^{os}}{V_b}} = \frac{K_g \cdot S^{os} \cdot C \cdot w_i^{vap}}{Q \cdot C \cdot w_i^{vap}} = \frac{K_g \cdot S^{os}}{Q}$$

Por tanto:

$$\Pi_1 = D_a$$

$$\Pi_2 = Sh$$

7.5.3.1.7. Parámetros para el escalamiento del modelo difusivo a mayor escala (Criterio de similitud)

$$D_{a_1} = D_{a_2}$$

$$\tau_1 = \tau_2$$

Donde el subíndice 1 hace referencia a la escala laboratorio y el subíndice 2 a la escala planta piloto.

El volumen del lecho es calculado con la ecuación (7.80) si la masa y la porosidad del lecho son especificadas:

$$V_{b_2} = \frac{W_2}{\rho_{mh} \cdot (1 - \varepsilon)} \quad (7.80)$$

- La porosidad (ε) especificada debe estar en el mismo intervalo que la usada para las experiencias a la escala banco o piloto; porque no es recomendable extrapolar datos en el modelado desarrollado, ya que se ignora sus efectos en la simulación.
- Dado que es el mismo material vegetal que el procesado a escala laboratorio, el diámetro de partícula (d_p) y la fracción de aceite esencial libre son las mismas.
- El coeficiente de transferencia de masa global (K_g) es calculado usando la ecuación (7.31) pero asegurándose que $Pe < 10$; puesto que las velocidades intersticiales no son iguales entre las dos escalas.
- La composición del aceite esencial es un dato especificado (aunque deberá ser corroborado con el GC/MS).
- La densidad del aceite (ρ_{eo}) es una propiedad especificada, como un promedio de las halladas a escala banco o piloto.
- El coeficiente de difusividad del aceite en el vapor es calculado por la ecuación (7.59)
- El rendimiento de aceite esencial total (Y) es un dato especificado y puede ser asumido como el mayor de los obtenidos a escala piloto o banco.

7.5.3.1.8. Diseño del hidroddestilador a partir del modelo cinético

Geometría esférica

$$V_{b_2} = \left(\frac{\alpha^2 \cdot \pi}{3}\right) \cdot \left(\left(3 \cdot \frac{\phi_{hd}}{2}\right) - \alpha\right) \quad (7.81)$$
$$H_{hd} = \pi \cdot \left(\alpha^2 + \left(\frac{\phi_{hd}}{2}\right)^2\right)$$

Geometría cilíndrica

$$V_{b_2} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot \alpha \cdot \phi_{hd}^3 \quad (7.82)$$

$$H_{hd} = \alpha \cdot \phi_{hd}$$

7.5.3.1.8.1. Reglas heurísticas de diseño para el hidroddestilador a partir de las ecuaciones del modelo cinético

- La relación de diámetro de la columna con el tamaño del relleno debe ser de al menos 15 (Kister, 1990), por tanto, $\frac{\phi_{hd}}{\varepsilon} \geq 15$.
- La relación entre la altura y el diámetro del hidroddestilador debe ser menor o igual a 30, $\alpha = \frac{H_{hd}}{\phi_{hd}} \leq 30$.
- El hidroddestilador se considera como un mezclador perfecto, cuando $\alpha \rightarrow 1$, porque la geometría simétrica favorece la dispersión axial del aceite vaporizado y el vapor se distribuye más lentamente en el seno del lecho, generando que el vapor, lo envuelva y penetre, logrando un mezclado ideal (Cerpa, 2007).

7.5.4.1. Modelo de secado

Las ecuaciones del modelo de secado se basan en la teoría del proceso de secado desarrollada por el ruso Chine-Polito (2016) y Sokhansanj y Bruce (1987). Por las características del proceso, se puede realizar una analogía para la determinación de la velocidad de extracción de aceite esencial de *T. lucida*, mediante la hidrodestilación (Figura 7.8).

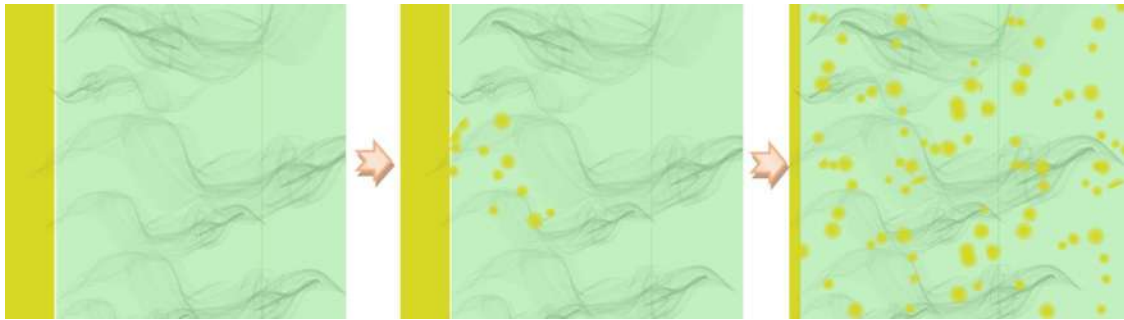


Figura 7.8.- Mecanismo de transporte modelo de secado

7.5.4.2. Modelos para curvas de secado

Los modelos matemáticos que se analizarán para la determinación de las curvas de secado se describen en la Tabla 7.1.

Tabla 7.1.- Modelos de secado

No.	Nombre del modelo	Ecuación
1	Newton	$Y = \exp(-kt)$
2	Page	$Y = \exp(-kt^n)$
3	Henderson and Pabis	$Y = a \cdot \exp(-kt)$
4	Ajuste de datos experimentales	$Y = -4x10^{-07}t^2 + 8x10^{-05}t - 0.0022$

7.5.4.3. Suposiciones del modelo de secado

- El vapor de agua llena completamente los tricomas glandulares y permite el “arrastre del aceite esencial”.
- El sistema es isotrópico de propiedades (modelo pseudo-homogéneo).
- El proceso se lleva a cabo en estado estacionario y no existen reacciones químicas.
- Las variaciones de volumen y porosidad de los tricomas provocadas por la extracción o difusión del aceite esencial son despreciables.

7.5.4.3.1. Análisis de grados de libertad del modelo de secado

$$n_{corr} = 1$$

$$n_{comp} = 5$$

$$n_r = 0$$

Variables

$$n_v^m = 1(5 + 1) + 0 = 6$$

Ecuaciones

$$\text{Balances de materia ind.} = 5$$

Restricciones

$$\sum_{i=1}^5 w^{tr}_i = 1$$

$$n_E^m = 6$$

$$\therefore n_D = n_v^m - n_C^m = 0$$

7.5.4.1.2. Determinación de los parámetros del modelo de secado

a) Secado en la región de velocidad creciente

Se asume que la transferencia de calor del vapor de agua al sólido es igual al total del calor latente de evaporación, de tal manera que:

$$q = (\lambda) \cdot W \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (7.83)$$

Dado que:

$$q = (K_g \cdot a_s) \cdot (T_0 - T_{\infty}) \quad (7.84)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{(K_g \cdot a_s)}{(\lambda) \cdot W} \cdot (T_0 - T_{fill}) \quad (7.85)$$

Con las siguientes condiciones frontera:

$$t = 0$$

$$C = C$$

$$t = t$$

$$C = C^*$$

Obteniendo

$$t = \frac{(\lambda) \cdot W}{(K_g \cdot a_s) \cdot (T_0 - T_{fill})} \cdot (C - C^*) \quad (7.86)$$

Donde K_g se obtiene a partir de la (7.87)

$$K_g = 4.7 \times 10^4 (Q - 74400) + 31.4 \quad (7.87)$$

b) Secado constante (Modelo de cinética de secado)

Cuando se supone un mecanismo unidireccional de transporte en la dirección axial, con una difusividad efectiva constante D_{ef} ; la difusión del aceite esencial a través de la matriz sólida porosa sujeta al proceso de secado, puede ser descrita por la segunda Ley de Fick de la difusión. En términos de la humedad del sólido se expresa como:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{ef} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (7.88)$$

La solución analítica de esta ecuación para el proceso de secado (Crank, 1975):

$$Y = 1 - \sum_{i=0}^{\infty} \frac{4}{(2i+1)^2} \cdot \exp \left[-\frac{(2i+1)^2 \pi^2}{L^2} \cdot K_{tr} \cdot D_{ef} \cdot t \right] \quad (7.89)$$

Para periodos largos de tiempo de extracción, el primer término de la serie anterior es una buena aproximación de la solución, entonces:

$$Y = \frac{C - C^*}{C^{tr} - C} = -\exp \left[-\frac{\pi^2}{4 \cdot L^2} \cdot K_{tr} \cdot D_{ef} \cdot t \right] \quad (7.90)$$

Linealizando (7.90):

$$\ln Y = - \left[\frac{\pi^2}{4 \cdot L^2} \cdot K_{tr} \cdot D_{ef} \cdot t \right] \quad (7.91)$$

Despejando el tiempo:

$$t = \left[-K_{tr} \cdot \frac{\pi^2}{4 \cdot L^2} \cdot D_{ef} \right]^{-1} \cdot \ln(Y) \quad (7.92)$$

Donde:

$$D_{efi} = (9.4 \times 10^{-15}) \cdot \left(\frac{T_{\infty}}{\mu^{vap} \cdot (PM_i)^{1/3}} \right) \quad (7.93)$$

7.5.4.1.4. Análisis del modelo de secado

Para obtener una representación en el espacio de estados del proceso para la formulación del problema de control óptimo, el vector de estado (x) y la entrada manipulada (u) se definen de la siguiente manera:

$$x = [x_1, x_2]^n = [C, Y], u = \lambda$$

Las ecuaciones resultantes son:

$$x_1 = \frac{(K_g \cdot a_s)}{(u) \cdot W} \cdot (T_0 - T_{fill}) \quad (7.94)$$

$$x_2 = \exp^{-[V_b \cdot D_{ef} \cdot t]} \quad (7.95)$$

7.5.4.1.5. Tiempo total de secado

El tiempo total de la hidrodestilación análoga al modelo de secado, es expresado por la siguiente ecuación:

$$t = \frac{(\lambda) \cdot W}{(K_g \cdot S) \cdot (T_0 - T_{fill})} \cdot (C - C^*) + \left[K_{tr} \cdot \frac{\pi^2}{4 \cdot L^2} \cdot D_{ef} \right]^{-1} \cdot \ln(Y) \quad (7.96)$$

7.5.4.1.6. Análisis dimensional aplicado al modelo de secado (Teorema de Buckingham)

Los siguientes parámetros son los requeridos por el modelado para la simulación del proceso:

Parámetros objetivo: K_g, K_{tr}

Parámetros geométricos: a_s

Parámetros de los materiales: ρ_s, D_{ef}

$$f(K_g, K_{tr}, a_s, \rho_s, D_{ef}) \quad (7.97)$$

$$K_g = LT^{-1}$$

$$K_{tr} = T^{-1}$$

$$a_s = L$$

$$\rho_s = ML^{-3}$$

$$D_{ef} = L^2T^{-1}$$

$$\text{Grados de libertad} = (5 - 3) = 2$$

$$\Pi_1 = (\rho_s)^a (D_{ef})^b (a_s)^c (K_g) \quad (7.98)$$

$$\Pi_2 = (\rho_s)^a (D_{ef})^b (a_s)^c (K_{tr}) \quad (7.99)$$

Para que (7.98) sea adimensional:

$$(ML^{-3})^a (L^2T^{-1})^b (L)^c (LT^{-1}) = M^0L^0T^0$$

Sistema de ecuaciones:

$$a = 0$$

$$-3a + 2b + c + 1 = 0$$

$$-b - 1 = 0$$

$$a = 0$$

$$b = -1$$

$$c = 1$$

Para que (7.99) sea adimensional:

$$(ML^{-3})^a (L^2T^{-1})^b (L)^c (T^{-1}) = M^0L^0T^0$$

Sistema de ecuaciones:

$$a = 0$$

$$-3a + 2b + c = 0$$

$$-b - 1 = 0$$

$$a = 0$$

$$b = -1$$

$$c = 2$$

Por lo tanto:

$$\Pi_1 = (a_s)^1 (D_{ef})^{-1} (K_g) \quad (7.100)$$

$$\Pi_2 = (a_s)^2 (D_{ef})^{-1} (K_{tr}) \quad (7.101)$$

Dado que:

$$a_s^2 = S$$

Sustituyendo en (7.100) y (7.101)

$$\Pi_1 = \left(\frac{a_s \cdot K_g}{D_{ef}} \right) = \frac{S^{os} \cdot K_g}{V_b \cdot D_{ef}} = \frac{M^{os} \cdot K_g}{h \cdot \rho_{eo} \cdot V_b \cdot D_{ef}} = \frac{M^{os} \cdot K_g \cdot \rho_{mh} \cdot (1 - \varepsilon)}{h \cdot \rho_{eo} \cdot W \cdot D_{ef}} \quad (7.102)$$

$$\Pi_2 = S \cdot \left(\frac{K_{tr}}{D_{ef}} \right) \quad (7.103)$$

El número de Sherwood es un número adimensional utilizado en transferencia de masa:

$$S_h = \frac{a_s \cdot K_g}{D_{ef}}$$

El número de Peclet relaciona la velocidad de advección de un flujo y la velocidad de difusión:

$$P_e = S \cdot \left(\frac{K_{tr}}{D_{ef}} \right)$$

Por tanto:

$$\Pi_1 = S_h$$

$$\Pi_2 = P_e$$

7.5.4.1.7. Parámetros para el escalamiento del modelo de secado a mayor escala (Criterio de similitud)

$$S_{h_1} = S_{h_2}$$

$$\tau_1 = \tau_2$$

Donde el subíndice 1 hace referencia a la escala laboratorio y el subíndice a la 2 escala planta piloto

Si la masa y la porosidad del lecho son especificadas, el volumen del lecho es:

$$V_{b_2} = \frac{W_2}{\rho_{mh} \cdot (1 - \varepsilon)}$$

La porosidad (ε) especificada debe estar en el mismo intervalo que la usada para las experiencias a la escala banco o piloto; porque no es recomendable extrapolar datos en el modelado desarrollado, ya que se ignora sus efectos en la simulación.

Dado que es el mismo material vegetal que el procesado a escala laboratorio, el diámetro de partícula (d_p) y la fracción de aceite esencial libre son las mismas.

El coeficiente de transferencia de masa global (K_g) es calculado usando la ecuación (7.87) pero asegurándose que $Pe < 10$; puesto que las velocidades intersticiales no son iguales entre las dos escalas.

La composición del aceite esencial es un dato especificado (aunque deberá ser corroborado con el GC/MS).

La densidad del aceite (ρ_{eo}) es una propiedad también especificada, como un promedio de las halladas a escala banco o piloto.

El rendimiento de aceite esencial total (Y) es un dato especificado y puede ser asumido como el mayor de los obtenidos a escala piloto o banco.

7.5.4.1.8. Diseño del hidroddestilador a partir de las ecuaciones del modelo de secado

Geometría esférica

$$V_{b_2} = \left(\frac{32 \cdot \pi}{3}\right) \cdot \alpha \cdot \Phi_{hd}^4$$

$$H_{hd} = \alpha \cdot \Phi_{hd}$$

Geometría cilíndrica

$$V_{b_2} = \left(\frac{\pi}{4}\right) \cdot \alpha \cdot \Phi_{hd}^3$$

$$H_{hd} = \alpha \cdot \Phi_{hd}$$

7.5.4.1.8.1. Reglas heurísticas de diseño para el hidroddestilador a partir de las ecuaciones del modelo de secado

La relación de diámetro de la columna con el tamaño del relleno debe ser de al menos 15 (Kister, 1990), por tanto, $\frac{\phi_{hd}}{\varepsilon} \geq 15$.

La relación entre la altura y el diámetro del hidroddestilador debe ser menor o igual a 30, $\alpha = \frac{H_{hd}}{\phi_{hd}} \leq 30$.

El hidroddestilador se considera como un mezclador perfecto, cuando $\alpha \rightarrow 1$, porque la geometría simétrica favorece la dispersión axial del aceite vaporizado y el vapor se distribuye más lentamente en el seno del lecho, generando que el vapor, lo envuelva y penetre, logrando un mezclado ideal (Cerpa, 2007).

7.6. Análisis estadístico

El proceso de hidroddestilación a las diferentes escalas se analizó mediante un diseño factorial 2^k , con una réplica, dada la estacionalidad del material vegetal. La variable respuesta fue el rendimiento. El análisis de varianza (ANOVA) mediante el lenguaje de programación R, se usó un nivel de significancia de 0.05 para todas las pruebas.

Capítulo 8 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

8.1. Obtención de aceite esencial de *Tagetes lucida* Cav. a escala laboratorio para biomasa seca por hidrodestilación

El efecto de los fenómenos en el proceso de hidrodestilación para biomasa seca se determinó a través del análisis estadístico de los datos experimentales. La influencia principal en los experimentos a escala laboratorio para biomasa seca, está dada por la cantidad de biomasa. La interacción entre las variables carece de significancia estadística, es decir las líneas correspondientes a los factores bajos y altos de Biomasa y Tiempo no se cruzan. Existe una relación directamente proporcional entre la cantidad de biomasa, tiempo y el rendimiento de aceite esencial. La ausencia de un patrón lineal en los puntos indica que el modelo estadístico ajustado es deficiente al predecir los datos y exhibe que existen diferencias entre los valores ajustados y los valores reales.

Las variables significativas del proceso de hidrodestilación para Biomasa seca se determinaron mediante el ANOVA, donde se observa que la variable o fenómeno representativo del proceso de hidrodestilación para biomasa seca a escala laboratorio es la cantidad de biomasa. Para ello se consideró que el rendimiento promedio de aceite esencial de *T. lucida* a escala laboratorio para Biomasa seca por hidrodestilación fue de 0.001%, Zarate-Escobedo et al., 2018 reportaron un rendimiento de 0.005% del aceite esencial de material vegetal seco proveniente de poblaciones de clima templado, mientras que para material vegetal proveniente de poblaciones de clima semi cálido reportaron un rendimiento de aceite esencial de 0.0001%.



8.3. Obtención de aceite esencial de *T. lucida* por escalamiento fenomenológico a planta piloto para biomasa seca por hidrodestilación

Los resultados mostrados inducen a la aplicación de un diseño de experimentos para dilucidar el fenómeno dominante en la hidrodestilación del aceite esencial de *T. lucida* por biomasa seca a escala planta piloto. Este diseño requiere la modificación de las variables independientes como el tiempo de operación, la cantidad de biomasa y solvente. La interacción entre los efectos principales carece de significancia estadística, a menor cantidad de Solvente, mayor Tiempo y cantidad de Biomasa, se obtiene un mayor rendimiento de aceite esencial de *T. lucida*. La cantidad de solvente es la variable o fenómeno dominante en el proceso de hidrodestilación a escala planta piloto.

Al proceso de hidrodestilación a escala planta piloto alambique se le ajustaron las variables y parámetros previamente obtenidos con el modelo fenomenológico. Este ajuste permitió la obtención de los rendimientos en el intervalo de 0.2% y 1.2% superiores a los de escala laboratorio.

Los rendimientos obtenidos, demuestran que la cantidad de solvente en el proceso de hidrodestilación a escala planta piloto es el fenómeno o variable representativa del proceso, lo cual, es atribuido a la fase de la generación de vapor para que permita el arrastre de la mayor cantidad posible de aceite esencial.

CONCLUSIÓN

El escalamiento del proceso de hidrodestilación de aceites esenciales de *Tagetes lucida* Cav. por el modelo fenomenológico permitió la obtención de rendimientos superiores a los de la literatura y el establecimiento de los intervalos de predicción de calidad mediante técnicas de Aprendizaje Automático Supervisado

PERSPECTIVAS Y/O TRABAJOS A FUTURO

El desarrollo del presente proyecto de investigación permitió dilucidar que, en el proceso de extracción de aceite esencial de *T. lucida*, existen entre otros los siguientes campos de oportunidad:

ECONOMÍA CIRCULAR. - En el proceso de extracción del aceite esencial por hidrodestilación, se recomienda, que el hidrolato se “reincorpore” al proceso, de forma que se disminuya el uso de agua y que se propongan usos de los residuos sólidos del proceso, como por ejemplo para la obtención de colorantes naturales.

OPTIMIZACIÓN. - En el proceso de hidrodestilación utilizar técnicas de optimización (Programación Mixta Entera Lineal o Programación No lineal, según sea el caso) con la intención de encontrar la respuesta óptima del rendimiento, encontrar el punto máximo del rendimiento del aceite esencial con el mínimo gasto de energía y solvente.

ETNOBOTÁNICA. - Dada la variabilidad biológica de las plantas de *T. lucida*, se recomienda el estudio de los factores bióticos y abióticos que influyen directamente en la producción de metabolitos secundarios con la intención de obtener un mayor rendimiento del aceite esencial de *T. lucida*.

REFERENCIAS

- Anaya-Durand, A., y Pedroza-Flores, H. (2008). Scale-up: Escalamiento, el arte de la ingeniería química. *Ciencia Ed. (IMIQ)*, 23(1), 31–39.
- Armas Kaylin, Rojas Janne, P. J. (2013). Características botánicas, distribución geográfica y propiedades biológicas de varias especies del género *Tagetes L.* (Asteraceae). *Revista de La Facultad de Farmacia y Bioquímica. Universidad Nacional Mayor de San Marcos*, 26–41.
- Bicchi, C., Fresia, M., Rubiolo, P., Monti, D., Franz, C., y Goehler, I. (1997). Constituents of *Tagetes lucida* Cav. ssp. *lucida* essential oil. *Flavour and Fragrance Journal*, 12(1), 47–52. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-1026\(199701\)12:1<47:AID-FFJ610>3.0.CO;2-7](https://doi.org/10.1002/(SICI)1099-1026(199701)12:1<47:AID-FFJ610>3.0.CO;2-7)
- Both, S., Chemat, F., y Strube, J. (2014). Extraction of polyphenols from black tea - Conventional and ultrasound assisted extraction. *Ultrasonics Sonochemistry*, 21(3), 1030–1034. <https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2013.11.005>
- Caballero-Gallardo, K., Olivero-Verbel, J., y Stashenko, E. E. (2011). Repellent activity of essential oils and some of their individual constituents against *Tribolium castaneum* herbst. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 59(5), 1690–1696. <https://doi.org/10.1021/jf103937p>
- Calderón, G., y Rzedowski, J. (2001). Flora fanerogámica del Valle de México. In *Instituto de Ecología, A.C.*
- Casado, I. (2018). Optimización de la extracción de Aceites Esenciales por destilación en Corriente de Vapor. *Universidad Politécnica de Madrid*, 1, 84.
- Cassel, E., Vargas, R. M. F., y Joseph, P. (2006). Experiments and Modeling of the *Cymbopogon winterianus* Essential Oil Extraction by Steam Distillation. *Journal of the Mexican Chemical Society*, 50(3), 126–129.

- Cerpa, M. G., Mato, R. B., y Cocero, M. J. (2007). Hidrodestilación de aceites esenciales. Modelado y caracterización. *AIChE Journal*.
- Guenther, E. (1972). The Essential Oils: History, Origin in Plants, Production. *Analysis*, 1, 147–151.
- Guenther, E., Haagen-Smit, A. J., Langenau, E., y Urdang, G. (1948). The essential oils. *D. Van Nostrand Company*, 1. <http://nature-helps.com/wp-content/uploads/2019/01/Guenther-v1-1948.pdf>
- Gutiérrez Gaitén, Y., Scull Lizama, R., García Simón, G., y Montes Álvarez, A. (2018). Evaluación farmacognóstica, fitoquímica y biológica de un extracto hidroalcohólico de *Tagetes lucida* Cavanilles. *Revista Cubana de Plantas Medicinales*, 2(2018), 1–13. <http://www.revplantasmedicinales.sld.cu/index.php/pla/article/view/669/308>
- Kassing, M., Jenelten, U., Schenk, J., Hänsch, R., y Strube, J. (2012). Combination of rigorous and statistical modeling for process development of plant-based extractions based on mass balances and biological aspects. *Chemical Engineering and Technology*, 35(1), 109–132. <https://doi.org/10.1002/ceat.201100268>
- Kassing, M., Jenelten, U., Schenk, J., y Strube, J. (2010). A new approach for process development of plant-based extraction processes. *Chemical Engineering and Technology*, 33(3), 377–387. <https://doi.org/10.1002/ceat.200900480>
- Koudous, I., Both, S., Gudi, G., Schulz, H., y Strube, J. (2014). Process design based on physicochemical properties for the example of obtaining valuable products from plant-based extracts. *Comptes Rendus Chimie*, 17(3), 218–231. <https://doi.org/10.1016/j.crci.2013.11.003>
- Kurpis, J., Serrato-Cruz, M. A., y Feria Arroyo, T. P. (2019). Modeling the effects of climate change on the distribution of *Tagetes lucida* Cav. (Asteraceae). *Global Ecology and Conservation*, 20, e00747. <https://doi.org/10.1016/j.gecco.2019.e00747>

- Linares, E., y Bye, R. A. (1987). A Study of Four Medicinal Plant Complexes of Mexico. *Journal of Ethnopharmacology*, 19, 153–183.
- López López, E., Peña Ortega, M. G., Colinas León, M. T. B., Díaz Cedillo, F., y Serrato Cruz, M. Á. (2018). Fungistasis del aceite esencial extraído de una población de *Tagetes lucida* de Hidalgo, México. *Revista Mexicana de Ciencias Agrícolas*, 9(2), 329–341. <https://doi.org/10.29312/remexca.v9i2.1075>
- Marotti, M., Piccaglia, R., Biavati, B., y Marotti, I. (2004). Characterization and yield evaluation of essential oils from different *Tagetes* Species. *Journal of Essential Oil Research*, 16(5), 440–444. <https://doi.org/10.1080/10412905.2004.9698767>
- Miller, A. B., Cates, R. G., Lawrence, M., Soria, J. A. F., Espinoza, L. v., Martinez, J. V., y Arbizú, D. A. (2015). The antibacterial and antifungal activity of essential oils extracted from Guatemalan medicinal plants. *Pharmaceutical Biology*, 53(4), 548–554. <https://doi.org/10.3109/13880209.2014.932391>
- Milojević, S. Ž., Radosavljević, D. B., Pavićević, V. P., Pejanović, S., y Veljković, V. B. (2013). Modelovanje kinetike hidrodestilacije etarskog ulja iz biljnih materijala. *Hemijska Industrija*, 67(5), 843–859. <https://doi.org/10.2298/HEMIND121026009M>
- Ndocko Ndocko, E., Ditz, R., Josch, J. P., y Strube, J. (2011). New material design strategy for chromatographic separation steps in bio-recovery and downstream processing. *Chemie-Ingenieur-Technik*, 83(1–2), 113–129. <https://doi.org/10.1002/cite.201000158>
- Omer, E. A., Hendawy, S. F., Ismail, R. F., Petretto, G. L., Rourke, J. P., y Pintore, G. (2017). Acclimatization study of *Tagetes lucida* L. in Egypt and the chemical characterization of its essential oils. *Natural Product Research*, 31(13), 1509–1517. <https://doi.org/10.1080/14786419.2017.1278594>
- Perdomo-Roldán, Francisco, Mondragón-Pichardo, Juana, C. (2009). *Tagetes lucida* - ficha informativa. *Tagetes Lucida Cav.*

<http://www.conabio.gob.mx/malezasdemexico/asteraceae/tagetes-lucida/fichas/ficha.htm>

Regalado, E. L., Fernánd, M. D., Pino, J. A., Mendiola, J., y Echemendia, O. A. (2011). Chemical composition and biological properties of the leaf essential oil of *Tagetes lucida* Cav. from Cuba. *Journal of Essential Oil Research*, 23(5), 63–67. <https://doi.org/10.1080/10412905.2011.9700485>

Roth, T., Uhlenbrock, L., y Strube, J. (2020). Distinct and quantitative validation for predictive process modelling in steam distillation of caraway fruits and lavender flower following a Quality-By-Design (QbD) approach. *Processes*, 8(5). <https://doi.org/10.3390/PR8050594>

Sartor, R. B., Secchi, A. R., Soares, R. D. P., y Cassel, E. (2011). Dynamic simulation of rosemary essential oil extraction in an industrial steam distillation unit. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 50(7), 3955–3959. <https://doi.org/10.1021/ie1015848>

Schmidt, A., y Strube, J. (2018). Application and Fundamentals of Liquid-Liquid Extraction Processes: Purification of Biologicals, Botanicals, and Strategic Metals. In *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*. <https://doi.org/10.1002/0471238961.koe00041>

SEMARNAT. (2015). Capítulo 4: Biodiversidad. *Informe Del Medio Ambiente En México*, 155–190. https://apps1.semarnat.gob.mx:445/dgeia/informe_12/pdf/Cap4_biodiversidad.pdf

Sovová, H. (2006). *Modelo matemático de hidrodestilación de aceites esenciales*. 881–889.

Vallejo-González, R., y Nájera-Rincón, M. B. (2016). Actividad insecticida de los aceites esenciales de *Tagetes lucida* Cav. Y *Cosmos bipinnatus* Cav. (asterales: asteracea) sobre *sitophilus zeamais motchulsky* (coleoptera: curculionidade). 209–214.

- Vasudevan, P., Kashyap, S., y Sharma, S. (1997). *Tagetes*: A multipurpose plant. *Bioresource Technology*, 62(1–2), 29–35. [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(97\)00101-6](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(97)00101-6)
- Villaseñor, J. L. (2016). Catálogo de las plantas vasculares nativas de México. *Revista Mexicana de Biodiversidad*, 87(3), 559–902. <https://doi.org/10.1016/j.rmb.2016.06.017>
- Zarate-Escobedo, J., Castañeda-González, E. L., Cuevas-Sánchez, J. A., Carrillo-Fonseca, C. L., Ortiz-Torres, C., Ibarra-Estrada, E., y Serrato-Cruz, M. A. (2018). Essential oil of some populations of *Tagetes lucida* Cav. From the Northern and Southern regions of the State of Mexico. *Revista Fitotecnia Mexicana*, 41(2), 199–209. <https://doi.org/10.35196/rfm.2018.2.199-209>

APÉNDICE I

CONSEJO DIRECTIVO 2021-2023

Dr. Jorge Ramón Robledo Ortiz
PRESIDENTE
jorge.robledo@academicos.udg.mx

Dra. Nelly Ramírez Corona
VICE-PRESIDENTE
nelly.ramirez@udlap.mx

Dr. Fernando Israel Gómez Castro
SECRETARIO
iq_ferzo@hotmail.com

Dra. Sara Núñez Correa
TESORERA
sarnunez@uv.mx

Dra. Aida Alejandra Pérez Fonseca
VOCAL DE INVESTIGACIÓN
aida.perez@academicos.udg.mx

Dra. Adela Irmene Ortiz López
VOCAL DE DOCENCIA
irmene@cua.usm.mx



contacto@amidiq.com
WWW.AMIDIQ.COM

Canarias 704 Portales
CDMX, Benito Juárez
México, CP 03300

AMIDIQ

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C.



XLIII Encuentro Nacional de la AMIDIQ
"La Ingeniería Química,
la Sostenibilidad y la Economía Circular"

Ciudad de México a 30 de Mayo de 2022

Estimado(a) autor(a) de contacto

Agradecemos sinceramente su interés por participar en el XLIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C. (AMIDIQ). Por este conducto nos complace informarle que su trabajo:

DETERMINACIÓN DE LOS FENÓMENOS DOMINANTES DEL PROCESO DE HIDRODESTILACIÓN PARA LA OBTENCIÓN DE ACEITE ESENCIAL DE TAGETES LUCIDA CAV.

ID: 75

cuyos autores son:

Ana Karen Romero-Pineda, Mauro M. Martínez-Pacheco, Alberto Flores-García, Ma. del Carmen Chávez-Parga.

ha sido aceptado para su presentación en la sesión de Fenómenos de Transporte en la modalidad Cartel.

Para ser acreedor de la constancia de participación se requiere que al menos uno de los autores esté inscrito, y que el trabajo haya sido efectivamente presentado. Para que el trabajo sea publicado en las memorias del congreso, es necesario cumplir con los criterios anteriores y haber enviado su trabajo en extenso.

En fechas posteriores podrá consultar el programa completo en nuestra página web www.amidiq.com para conocer el día y hora precisa de su presentación. Recuerde que tiene hasta el **viernes 1 de julio** para sustituir el resumen de dos páginas por su trabajo en extenso en la plataforma OpenConf y que al menos uno de los autores del trabajo deberá estar inscrito al evento a más tardar el 24 de junio del 2022 para ser incluido en el programa final.

A nombre de la AMIDIQ le agradecemos una vez más su participación y esperamos tener la oportunidad de saludarlo durante el evento.

Atentamente

COMITÉ TÉCNICO
XLIII Encuentro Nacional de la AMIDIQ A.C.

AMIDIQ

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C.



XIII Encuentro Nacional de la AMIDIQ
"La Ingeniería Química,
la Sostenibilidad y la Economía Circular"

CONSEJO DIRECTIVO 2021-2023

Dr. Jorge Ramón Robledo Ortiz
PRESIDENTE
jorge.robledo@academicos.udg.mx

Dra. Nelly Ramírez Corona
VICE-PRESIDENTE
nelly.ramirez@udlap.mx

Dr. Fernando Israel Gómez Castro
SECRETARIO
iq_fergo@hotmail.com

Dra. Sara Nuñez Correa
TESORERA
sarnunez@uv.mx

Dra. Aida Alejandra Pérez Fonseca
VOCAL DE INVESTIGACIÓN
aida.perez@academicos.udg.mx

Dra. Adela Irmene Ortiz López
VOCAL DE DOCENCIA
irmene@cua.uam.mx



contacto@amidiq.com
WWW.AMIDIQ.COM

Canarias 704 Portales
CDMX, Benito Juárez
México, CP 03300

Ciudad de México a 30 de Mayo de 2022

Estimado(a) autor(a) de contacto

Agradecemos sinceramente su interés por participar en el XLIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C. (AMIDIQ). Por este conducto nos complace informarle que su trabajo:

Extracción de colorante natural a partir de Tagetes lúcida Cav. como alternativa ecológica para la industria textil

ID: 176

cuyos autores son:

Ana Karen Romero-Pineda, Karla Aimee Gómez-García, Lorena Acosta-García, Mauro M. Martínez-Pacheco, Ma. del Carmen Chávez-Parga.

ha sido aceptado para su presentación en la sesión de Ingeniería Ambiental en la modalidad Cartel.

Para ser acreedor de la constancia de participación se requiere que al menos uno de los autores esté inscrito, y que el trabajo haya sido efectivamente presentado. Para que el trabajo sea publicado en las memorias del congreso, es necesario cumplir con los criterios anteriores y haber enviado su trabajo en extenso.

En fechas posteriores podrá consultar el programa completo en nuestra página web www.amidiq.com para conocer el día y hora precisa de su presentación. Recuerde que tiene hasta el **viernes 1 de julio** para sustituir el resumen de dos páginas por su trabajo en extenso en la plataforma OpenConf y que al menos uno de los autores del trabajo deberá estar inscrito al evento a más tardar el 24 de junio del 2022 para ser incluido en el programa final.

A nombre de la AMIDIQ le agradecemos una vez más su participación y esperamos tener la oportunidad de saludarlo durante el evento.

Atentamente

COMITÉ TÉCNICO

XLIII Encuentro Nacional de la AMIDIQ A.C.



UNIVERSIDAD JUÁREZ
AUTÓNOMA DE TABASCO
"ESTUDIO EN LA DUDA, ACCIÓN EN LA FE"



División
Académica
de Ingeniería
y Arquitectura



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE NUEVO LEÓN

UANL



Otorgan la presente
CONSTANCIA


A:
A. K. Romero Pineda, A. Flores García,
R. M. Espinoza Madrigal, Ma. C. Chávez Parga,
M. M. Martínez Pacheco

Por su participación en la **modalidad oral** en el congreso/taller nacional con el trabajo titulado:

"Escalamiento del proceso de hidrodestilación para la obtención de aceite esencial de Tagetes Lucida Cav."

Presentado en el marco del **3er Workshop Uso de Software para Resolver Problemas en Ingeniería Química**, realizado en nuestra División Académica a través del Aula Virtual MS Teams, los días 23 y 24 de septiembre del presente.

Villahermosa Tabasco a 24 de septiembre de 2021.


Dr. Germán Pérez Hernández
Director de la DAIA



DIRECCIÓN

CDCE/2021/1702





El Gobierno del Estado de Michoacán, a través del Instituto de Ciencia, Tecnología e Innovación, en colaboración con el Tecnológico Nacional de México, campus Instituto Tecnológico de Morelia y el respaldo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología otorgan la presente:

CONSTANCIA

ANA KAREN ROMERO-PINEDA; MA. DEL CARMEN CHÁVEZ-PARGA; MAURO M. MARTÍNEZ-PACHECO; ALBERTO FLORES-GARCÍA; ROSA MARÍA ESPINOZA-MADRIGAL

A: **POR LA EXPOSICIÓN DE SU PONENCIA DETERMINACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE UN RECUBRIMIENTO SANITIZANTE NATURAL EN EL EJE 1. INVESTIGACIÓN BÁSICA DE LA MESA 2: CIENCIAS DE LA INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA**

En el marco de las actividades académicas del



y el



Morelia, Michoacán, a 22 de Octubre de 2021

Biol. María Piedad Trujillo García

Directora General del Instituto de Ciencia
Tecnología e Innovación del Estado de Michoacán

Dr. José Luis Gil Vázquez

Director del Tecnológico Nacional de México,
campus Instituto Tecnológico de Morelia