

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DEL LITORAL

Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas

Caracterización de las materias primas *Vernonanthura Patens*, *Ilex Guayusa* y residuos de cáscara de cacao en un simulador comercial para la elaboración de una bebida con propiedades nutracéuticas

PROYECTO INTEGRADOR

Previo la obtención del Título de:

Ingeniero Químico

Presentado por:

Erick Andres Gabela Valladares

Pablo Anthony Villa Alvarez

GUAYAQUIL - ECUADOR

Año: 2021

DEDICATORIA

Este proyecto se lo dedico a todas las personas que me han brindado su apoyo durante esta etapa de mi vida, en especial a mi madre Gioconda que, aunque ya partió de este mundo sus enseñanzas y apoyo, me han servido para poder seguir adelante y llegar a donde estoy ahora. Mi padre Roberto que sin su apoyo diario no sería posible lograr esta hazaña. Así como mis hermanos que han sido mi soporte e inspiración para cada día superarme.

A mi tía Jasmina que me ha brindado lecciones de vida y me ha inculcado valores para ser una mejor persona. Y, por último, a mis primos que me han dado el ejemplo de mejorar y culminar mis metas propuestas.

ERICK ANDRES GABELA VALLADARES

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mis amigos Jhon y Pablo por sus años de amistad y compañía durante la carrera.

A mis tutores, los PhD. Yris González, Santiago Salas y Daniela Galatro, sin su guía no habría sido posible realizar este proyecto.

Por último, a Alexander su ayuda y correcciones han encaminado este proyecto al éxito.

ERICK ANDRES GABELA VALLADARES

DEDICATORIA

El presente proyecto lo dedico a Dios, por la fe y esperanza ofrecida siempre con un nuevo amanecer. A mis padres por su constante apoyo simbolizado en consejos, enseñanzas, valores y amor. Por su perseverancia, responsabilidad y denuedo transmitidos hacia mí por medio del ejemplo y la palabra. A Luna por su fiel compañía.

Finalmente, este trabajo es dedicado a mi inspiración, mis heroínas personales y hermanas mayores, Paola y Andrea.

PABLO ANTHONY VILLA ALVAREZ

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a Dios por la salud y bienestar, a mis padres y hermanas por su amor y cariño.

A Jhon, Erick y Fabian por su amistad sincera durante los años de formación profesional. A Alexander por sus oportunas observaciones durante el desarrollo del proyecto. A la PhD. María de Lourdes Mendoza por sus enseñanzas y calidez para conmigo.

Finalmente, mi más sincero agradecimiento a los PhD. Yris González, Santiago Salas y Daniela Galatro por los ánimos recibidos y el esfuerzo dedicado para el desarrollo exitoso del presente proyecto.

PABLO ANTHONY VILLA ALVAREZ

DECLARACIÓN EXPRESA

"Los derechos de titularidad y explotación, nos corresponde conforme al reglamento de propiedad intelectual de la institución; *Erick Andres Gabela Valladares* y *Pablo Anthony Villa Alvarez*, damos nuestro consentimiento para que la ESPOL realice la comunicación pública de la obra por cualquier medio con el fin de promover la consulta, difusión y uso público de la producción intelectual"



Erick Andres Gabela Valladares



Pablo Anthony Villa Alvarez

EVALUADORES

Mgtr. Nadia Flores Manrique

PROFESOR DE LA MATERIA

PhD. Yris González Triana

PROFESOR TUTOR

PhD. Santiago Salas Ortiz

PROFESOR COTUTOR

RESUMEN

El desarrollo en biotecnología ha derivado en los productos nutraceuticos, como una alternativa de origen natural con efectos benéficos en salud y prevención de enfermedades. El presente proyecto se enfoca en la descripción detallada de las materias primas *Vernonanthura Patens*, *Ilex Guayusa* y *Theobroma Cacao*. La introducción de estos datos en un simulador comercial sirve como paso previo al escalamiento a nivel piloto del proceso de elaboración de una bebida con propiedades nutraceuticas. Para ello se identificaron y cuantificaron los compuestos activos que constituyen las materias primas a través de sus perfiles cromatográficos referenciados en investigaciones previas. Un total de 24 componentes fueron identificados, de los cuales 11 se ingresaron en el simulador incorporando sus estructuras moleculares y propiedades experimentales disponibles. Se simuló el proceso de elaboración de la bebida y los resultados se compararon con un proyecto integrador previo. Se obtuvo que la caracterización influye mayoritariamente en procesos de transferencia de masa como el secado y la extracción sólido – líquido, prediciendo un incremento de la concentración de compuestos antioxidantes en el producto final del 0.06% al 0.33%. Complementando los resultados con un análisis de sensibilidad de los equipos mencionados, que permitió evaluar parámetros de entrada como la velocidad del aire de secado y la proporción sólido/líquido durante la extracción. Finalmente, se estimaron los costos por medio del simulador, se determinó el CAPEX y OPEX para definir el TIR y contrastar con los costos expresados en el trabajo previo, evaluando el uso del simulador en proyectos de este tipo.

Palabras claves: nutraceutico, caracterización, cromatografía, simulador de procesos.

ABSTRACT

The development of biotechnology has led to nutraceutical products as a natural alternative with beneficial effects on health and disease prevention. The present project focuses on the detailed description of the raw materials Vernonia patens, Ilex guayana and Theobroma cacao. The introduction of these data in a commercial simulator serves as a preliminary step to the pilot scale-up of the process of elaboration of a beverage with nutraceutical properties. For this purpose, the active compounds that constitute the raw materials were identified and quantified through their chromatographic profiles referenced in previous research. A total of 24 compounds were identified, of which 11 were entered into the simulator incorporating their molecular structures and available experimental properties. The beverage manufacturing process was simulated, and the results were compared with a previous project. It was found that the characterization mostly influences mass transfer processes such as drying and solid-liquid extraction, predicting an increase in the concentration of antioxidant compounds in the final product from 0.06% to 0.33%. Complementing the results with a sensitivity analysis of the mentioned equipment, which allowed to evaluate input parameters such as the speed of the drying air and the solid/liquid ratio during extraction. Finally, the costs were estimated by means of the simulator, the CAPEX and OPEX were determined to define the TIR and contrast with the costs expressed in the previous work, evaluating the use of the simulator in projects of this type.

Keywords: *nutraceutical, characterization, chromatography, process simulator.*

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN.....	I
ABSTRACT	II
ÍNDICE GENERAL	III
ABREVIATURAS.....	V
SIMBOLOGÍA.....	VI
ÍNDICE DE FIGURAS	VII
ÍNDICE DE TABLAS.....	VIII
CAPÍTULO 1.....	1
1. Introducción	1
1.1 Descripción del problema	1
1.2 Justificación del problema	2
1.3 Objetivos	4
1.3.1 Objetivo General.....	4
1.3.2 Objetivos Específicos.....	4
1.4 Marco teórico.....	4
1.4.1 Productos Nutraceuticos.....	4
1.4.2 Ilex Guayusa.....	6
1.4.3 Vernonanthura Patens	9
1.4.4 Cáscara de granos de cacao	11
1.4.5 Cromatografía.....	12
1.4.6 Simuladores de procesos para ingeniería química	13
CAPÍTULO 2.....	16
2. Metodología	16
2.1 Definición del caso de estudio.....	17
2.2 Descripción de la alimentación.....	17
2.3 Ingreso de compuestos no presentes en la base de datos del simulador	20

2.4	Simulación del proceso	22
2.5	Análisis comparativo y validación	24
CAPÍTULO 3.....		26
3.	Resultados y análisis	26
3.1	Descripción del proceso de elaboración de la bebida nutracéutica	26
3.2	Resultados y análisis de la alimentación	28
3.2.1	Registro de componentes en el software simulador	28
3.2.2	Composición de la alimentación	29
3.3	Resultados y análisis de la validación	32
3.4	Análisis y resultados de la simulación	35
3.5	Resultados del análisis de sensibilidad	40
3.5.1	Análisis de sensibilidad del Secador.....	40
3.5.2	Análisis de sensibilidad del Digestor.....	41
3.6	Análisis Económico	44
CAPÍTULO 4.....		46
4.	Conclusiones Y Recomendaciones	46
4.1	Conclusiones.....	46
4.2	Recomendaciones.....	48
BIBLIOGRAFÍA.....		49
APÉNDICES.....		52

ABREVIATURAS

CIBE	Centro de Investigaciones Biotecnológicas del Ecuador
HPLC	Cromatografía Líquida de Alta Eficacia
GCMS	Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas
NIST	National Institute of Standards and Technology
PFD	Diagrama de flujo de procesos
NTU	Número de Unidades de Transferencia
PSD	Distribución del Tamaño de Partícula

SIMBOLOGÍA

g	Gramo
mg	Miligramo
Kg	Kilogramo
m	Metro
mm	Milímetro
s	Segundo
h	Hora
°C	Grados Celsius
KW	Kilowatts
atm	Atmósfera

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1 Especie vegetal Ilex Guayusa	7
Figura 1.2 Especie vegetal Vernonanthura Patens	9
Figura 1.3 Cáscaras de cacao.....	11
Figura 2.1 Diagrama de flujo de la metodología propuesta	16
Figura 2.2 Estructura molecular del ácido clorogénico	21
Figura 3.1 Diagrama PFD del proceso de elaboración de la bebida	27
Figura 3.2 Estructuras moleculares de cafeína (A), ácido cafeico (B) y ácido hexacosanoico (C).....	33
Figura 3.3 Simulación de unidades de mezcla para ácido cafeico	34
Figura 3.4 Simulación del proceso de elaboración de la bebida nutracéutica en Aspen Plus V12.	39
Figura 3.5 Análisis de sensibilidad del secador convectivo continuo.....	40
Figura 3.6 Calor requerido para el extractor a diferentes flujos de agua	41
Figura 3.7 Análisis de sensibilidad del digester modelado como SWash	42
Figura 3.8 Porcentaje de extracción a distintas cantidades de agua.....	43
Figura 3.9 Cantidad de bebida producida a distintas cantidades de agua	43

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1 Composición de interés de la materia vegetal de acuerdo con estudios del CIBE [Abad & Palacios, 2020]	6
Tabla 1.2 Clasificación Taxonómica de la Ilex Guayusa [Camacho & Martínez, 2014] ...	7
Tabla 1.3 Compuestos en extracto acuoso de Ilex Guayusa. [García et al., 2017]	8
Tabla 1.4 Pérdida de peso en método de secado en horno convectivo – Ilex Guayusa [Camacho & Martínez, 2015]	8
Tabla 1.5 Propiedades físicas y químicas de hojas de Ilex Guayusa secadas por distintos métodos [Manzano et al, 2018]	9
Tabla 1.6 Clasificación Taxonómica de la V. Patens [Universidad Nacional de Colombia, 2016]	10
Tabla 1.7 Compuestos en extracto acuoso de V. Patens. [Chóez et al, 2018].....	10
Tabla 1.8 Propiedades físicas y químicas de Vernonthura Patens [Manzano et al., 2013]	11
Tabla 1.9 Compuestos en extracto acuoso de residuos de cacao [Hernández et al., 2017]	12
Tabla 3.1 Resumen de componentes presentes en el proceso de elaboración de la bebida nutracéutica.	29
Tabla 3.2 Composición de interés de la materia vegetal.	30
Tabla 3.3 Composición de alimentación de Ilex Guayusa.	30
Tabla 3.4 Composición de alimentación de Vernonthura Patens.	31
Tabla 3.5 Composición de alimentación de Cáscara de Cacao.	31
Tabla 3.6 Comparación de propiedades estimadas.	32
Tabla 3.7 Costo de los equipos empleados en la simulación.	44
Tabla 3.8 Costo de utilidades.	44
Tabla 3.9 Costos totales y análisis económico.	45
Tabla A1. Resumen de los mezcladores (validación).	53
Tabla A2. Balances obtenidos de la simulación.	54
Tabla A3. Resumen de la distribución del tamaño de partículas.	60

CAPÍTULO 1

1. INTRODUCCIÓN

De acuerdo con hallazgos arqueológicos, se ha evidenciado el uso de plantas con fines medicinales desde hace más de 6000 años. Diversas culturas a lo largo de la historia han llevado registro de su uso. Este es el caso de la civilización Sumeria, por lo que el empleo de materias naturales con fines terapéuticos se remonta hasta el origen de la humanidad (Tenea et al, 2019). Ecuador, al ser un país pluriétnico, cuenta con el conocimiento ancestral de distintas culturas. Entre estos conocimientos destaca el uso de plantas endémicas para tratar diversas dolencias.

Actualmente, el uso de especies vegetales con fines terapéuticos está involucrado a la industria alimenticia. Productos que comúnmente se encontraban compuestos de ingredientes sintéticos, ahora son reemplazados con ingredientes de origen biológico y aportan propiedades nutricionales a los alimentos procesados. De este tipo de productos surge el término nutraceutico, definiéndose como productos elaborados a partir de ingredientes naturales, y que brindan aportes a la salud y nutrición.

El presente proyecto se enfocará en la descripción adecuada de la materia prima *Vernonanthura Patens*, *Ilex Guayusa* y residuos de cáscara de cacao. La introducción de estos datos en un simulador comercial de procesos servirá como paso previo al escalamiento a nivel piloto del proceso de elaboración de una bebida nutraceutica.

1.1 Descripción del problema

Ecuador participa activamente en la exportación de productos nutraceuticos. El 5% de las ganancias a nivel nacional corresponden al sector de alimentos, bebidas y desarrollo farmacéutico (al que pertenecen los nutraceuticos). En el año 2017, este último subsector tuvo ingresos de alrededor de un millón de dólares. A pesar de sus modestas cifras, este mercado presenta un potencial crecimiento que requiere de investigación e innovación tecnológica, necesaria para asentar una industria secundaria en el país. (Jarrín, 2019)

El Centro de Investigaciones Biotecnológicas del Ecuador (CIBE) ha realizado estudios y pruebas de laboratorio para escalar a nivel piloto el proceso de producción de una bebida nutracéutica. El producto emplea como materia prima sólida tres especies vegetales: *Ilex guayusa*, *Vernonanthura Patens* y residuos de cáscara de cacao. (Abab & Palacios, 2020)

La fabricación de la bebida implica varios pasos de transformación que ocurren en diferentes equipos (secado, molienda, extracción, etc.). Como una aproximación inicial para el posterior escalado, diseño y optimización del sistema, los ingenieros emplean herramientas de simulación capaces de predecir el comportamiento de los procesos. Los resultados de una simulación son balances de materia y energía, estimación de costos, rendimientos, entre otros. (Gil et al, 2019)

La simulación de la bebida presenta ciertas dificultades a considerar. Primero, las materias primas están formadas por complejas mezclas orgánicas que requieren el uso de técnicas analíticas especializadas para su identificación. Segundo, las bases de datos de los simuladores son limitadas. Para los componentes que no están disponibles, los datos de sus propiedades deben ser proporcionados por el usuario. Tercero, los sólidos que participan durante el proceso se describen a partir de propiedades distribuidas tales como la distribución del tamaño de partícula (PSD) (Dosta et al, 2019). Finalmente, estas limitaciones agregan un nivel adicional de complejidad a la descripción del material alimentado. En este sentido, las simulaciones de este tipo suelen ser simplíficas en exceso, resultando en diseños ineficientes y posibles pérdidas económicas.

En consecuencia, las propiedades termofísicas precisas de los componentes químicos y sus mezclas son esenciales para el desarrollo de modelos de simulación de procesos de alta calidad. (Watanasiri, 2011)

1.2 Justificación del problema

En las últimas décadas, la evidencia científica sobre el efecto positivo de los alimentos naturales en la salud humana ha impactado en la mentalidad del consumidor. Especialistas en nutrición recomiendan llevar una dieta variada y

equilibrada de ingredientes naturales para satisfacer las necesidades nutricionales básicas y prevenir enfermedades ocasionadas por una incorrecta alimentación como la obesidad y la diabetes (Fernández, 2007). La búsqueda de alternativas saludables por parte de la industria alimentaria ha derivado en los nutraceuticos. Estos se definen como productos alimenticios elaborados a partir de ingredientes naturales, que contienen propiedades medicinales capaces de prevenir dolencias y enfermedades.

En respuesta a las tendencias actuales, los nutraceuticos han ganado relevancia en el contexto internacional. La tasa de crecimiento anual de este mercado ha alcanzado el 7.5% desde 2016, estimando ganancias de 285 billones de dólares para el año 2021 (Jain et al, 2018). Por otro lado, Ecuador cuenta con alrededor de 17000 especies vegetales y una población cuya cultura reconoce los conocimientos tradicionales de plantas para aliviar distintas enfermedades (De la Torre et al, 2008). Sin embargo, en el país no se ha logrado establecer una industria biotecnológica capaz de aprovechar la disponibilidad de recursos para fabricar productos de origen natural con suficiente valor agregado.

Al existir la materia prima y el contar con este mercado poco explorado es que surge la necesidad de crear productos nutraceuticos en Ecuador. El establecimiento de estas industrias acarrea inconvenientes como la dificultad al escalar los procesos experimentales a niveles industriales. Este problema puede ser resuelto a través de un software de simulación que prediga el comportamiento de los equipos que componen el proceso. No obstante, la simulación puede dar valores errados debido a la limitación de la base de datos de los simuladores comerciales en compuestos orgánicos complejos. Implementar una metodología que integre nuevas especies químicas en el simulador producirá resultados acertados, facilitando así el diseño y aproximándolo más a la realidad.

La metodología propuesta tiene un gran potencial en el sector agroindustrial, que es el segundo motor económico del país luego de la industria petrolera, y representa un 6.4 % del PIB (Pino et al, 2018). La caracterización como paso previo a la simulación puede realizarse con otras materias primas (cacao, maíz, banano, y más).

La información generada por el simulador facilita la predicción de la dinámica de los procesos. Además, estos resultados servirán para desarrollar soluciones a problemas de producción y optimizar procesos existentes.

1.3 Objetivos

1.3.1 Objetivo General

Desarrollar una metodología para la caracterización de las moléculas y sólidos que conforman la materia prima *Vernonanthura Patens*, *Ilex Guayusa* y cáscara de cacao en un simulador comercial, aproximando el proceso de elaboración de una bebida nutracéutica.

1.3.2 Objetivos Específicos

1. Identificar los compuestos activos que componen las materias primas a través del perfil cromatográfico correspondiente, referenciados en trabajos previos.
2. Estimar las óptimas condiciones de operación de los equipos a través de un análisis de sensibilidad, obteniendo las variables de entrada que hacen al proceso más eficiente.
3. Determinar el costo de implementación de la planta piloto a través de los costos estimados por el simulador, comparando con los resultados obtenidos en la investigación previa.

1.4 Marco teórico

1.4.1 Productos Nutracéuticos

La preferencia del consumidor por una alimentación más saludable y libre de los riesgos por conservantes ha incentivado la búsqueda de alternativas naturales por parte de la industria alimentaria (Tenea, 2019). La constante investigación y desarrollo en biotecnología finalmente ha cerrado la brecha entre la nutrición y la medicina mediante los productos nutracéuticos (Azzollini, 2021).

El término "nutracéutico" fue acuñado de los vocablos "nutrición" y "farmacéutico" en 1989 por el Dr. Stephen DeFelice, fundador y director de la Fundación de Medicina Innovativa. Según su autor, el término se refiere a un

alimento o parte de éste que proporciona beneficios médicos o de salud, incluida la prevención y/o el tratamiento de una enfermedad (Kalra, 2003). No obstante, desde su creación su definición formal se ha ido perfeccionando hasta llegar a lo siguiente:

Los Nutracéuticos son sustancias químicas o biológicas activas que pueden encontrarse como componentes naturales de los alimentos o adicionarse a los mismos. Se presenta en una matriz no alimenticia (píldoras, cápsulas, polvo, bebidas, etc.), y que, administrada en dosis superiores a la existente en esos alimentos, presume un efecto favorable sobre la salud, mayor al que posee el alimento normal. Por ende, los productos nutracéuticos tienen la capacidad de fortalecer las condiciones saludables, sirviendo como auxiliar en el cuidado y mantenimiento de la salud, así como en la prevención de enfermedades y en la mejora de las funciones fisiológicas del organismo. (Pérez, 2006, p. 22)

Entre los principales productos nutracéuticos en Ecuador se encuentran: suplementos alimenticios, alimentos multivitamínicos, y bebidas energizantes. Sus componentes incluyen comúnmente extractos botánicos, vitaminas, minerales, sangre de drago, equinácea, semillas de chia, sábila, linaza, fibras vegetales, etc. (ProEcuador, 2014)

1.4.1.1 Bebida Nutracéutica

La determinación de parámetros fisicoquímicos, actividad antioxidante, perfil de metabolitos y niveles de toxicidad de las especies vegetales mencionadas (materia prima); así como de sus infusiones herbales llevaron a la identificación de más de 36 estructuras químicas en la bebida nutracéutica. Los compuestos identificados proporcionan una elevada actividad antioxidante a la bebida ofreciendo diferentes beneficios como: combatir el estrés, evitar el envejecimiento celular, estimular el sistema nervioso central y reducir el riesgo de padecer enfermedades transmitidas por virus y bacterias. (Abad & Palacios, 2020; Choez et al, 2018; Choez et al, 2021; Quijano et al, 2021; Manzano et al; 2013; Manzano et al; 2018)

Abad & Palacios (2020) como proyecto integrador previo realizaron la simulación del proceso de elaboración de la bebida nutracéutica a partir de estudios realizados por el CIBE. Las operaciones unitarias empleadas fueron: secado, molienda, tamizado y secado spray.

A pesar de la variedad de componentes identificados, se consideraron únicamente tres compuestos de interés para la simulación: ácido clorogénico, ácido cafeico y quercetina. La composición de la alimentación (tabla 1.1) fue simplificada considerablemente, representando al resto de sustancias como biomasa y agua.

Tabla 1.1 Composición de interés de la materia vegetal de acuerdo con estudios del CIBE [Abad & Palacios, 2020]

Ácido Cafeico	0.003%
Ácido Clorogénico	0.9%
Quercetina	1.5%
Agua	60%
Biomasa	37.597%

Se evidencia la ausencia de cafeína y teobromina en la composición, especies que según Quijano *et al* (2021) y Manzano *et al* (2018) proveen de actividad antioxidante y estimulante a las infusiones herbales.

1.4.2 Ilex Guayusa

Se trata de una planta perenne nativa de la región amazónica del Ecuador, cuya altura puede alcanzar los 10 metros y cuyas hojas se caracterizan por ser simples, dentadas, oblongo – elípticas y de textura coriácea. Los pobladores locales la emplean como bebida estimulante por su alto contenido en cafeína y teobromina. También, se le atribuyen propiedades antioxidantes y antiinflamatorias gracias a la presencia de flavonoides, carotenoides, polifenoles y xantinas en su composición. (Quijano et al., 2021)



Figura 1.1 Especie vegetal Ilex Guayusa

Fuente: [www.ikiam.edu.ec]

Tabla 1.2 Clasificación Taxonómica de la Ilex Guayusa.

[Camacho & Martínez, 2015]

Reino:	Plantae
División:	Magnoliophyta (presencia de flores)
Clase:	Equisetopsida
Orden:	Aquifoliales Senft
Familia	Aquifoleaceae
Género:	Ilex
Especie:	Guayusa
Nombre científico:	Ilex Guayusa Loess

Datos referenciales indican que la especie *Ilex Guayusa* posee una composición rica en Ácido clorogénico, Cafeína y Quercetina-3-O-hexosa. Un estudio previo logró identificar y cuantificar un total de 11 compuestos en el extracto acuoso de las hojas, empleando como método analítico una Cromatografía Líquida de Alta Eficacia acoplada con un Detector de Matriz de Diodos (HPLC-DAD). (García et al, 2017)

Investigaciones adicionales demostraron la influencia de distintos tipos de secado en las propiedades de las hojas, mostrando que el tipo secado no afecta significativamente sus propiedades físicas. Además, el porcentaje de cafeína es ligeramente superior en las hojas secadas mediante horno convectivo (Manzano et al, 2018). Los resultados de los estudios mencionados se resumen en las tablas 1.3, 1.4 y 1.5.

Tabla 1.3 Compuestos en extracto acuoso de Ilex Guayusa. [García et al., 2017]

Compuesto	mg/ g muestra seca
3-O-CQA (Ácido neoclorogénico)	7.93 ± 0.34
Cafeoil-hexosa	4.98 ± 0.73
5-O-CQA (Ácido clorogénico)	24.10 ± 1.59
Ácido 3-feruloilquínico	0.60 ± 0.05
Quercetina-3-O-rutinósido	0.88 ± 0.02
Quercetina-3-O-hexosa	2.64 ± 0.19
Ácido 3,5-dicafeoilquínico (Ácido isoclorogénico)	16.61 ± 0.20
Kaempferol-3-O-glucósido	1.02 ± 0.12
3,4- Ácido dicafeoilquínico	3.28 ± 0.05
Cafeína	19.08 ± 0.31

Tabla 1.4 Pérdida de peso en método de secado en horno convectivo – Ilex Guayusa [Camacho & Martínez, 2015]

Día	Hora	Temp [°C]	Peso Prom [g]	% Pérdida
1	0	46.11	50.6	
1	1	46.11	45.01	11.05
1	2	46.11	33.77	33.26
1	3	46.11	28.35	43.97
1	4	46.11	24.64	51.30
1	5	46.11	21.63	57.25
1	6	46.11	18.94	62.57
1	7	46.11	17.41	65.59
1	8	46.11	15.32	69.72
1	9	46.11	13.79	72.75
1	10	46.11	12.19	75.91
1	11	46.11	11.63	77.02
1	12	46.11	11.3	77.67
1	13	46.11	10.57	79.11

Tabla 1.5 Propiedades físicas y químicas de hojas de Ilex Guayusa secadas por distintos métodos [Manzano et al, 2018]

Parámetro	Método de secado		
	Aire	Horno	Secado solar
Cenizas totales (%)	6.87 ± 0.12	6.85 ± 0.11	6.86 ± 0.11
Cenizas insolubles en ácido (%)	0.87 ± 0.07	0.86 ± 0.03	0.87 ± 0.06
Cenizas solubles en agua (%)	3.10 ± 2.12	3.11 ± 2.12	3.09 ± 2.10
Humedad residual (%)	7.82 ± 0.41	7.33 ± 0.44	7.65 ± 0.08
Cafeína (%)	3.02 ± 0.07	3.71 ± 0.11	2.98 ± 0.15

1.4.3 Vernonthura Patens

Es un arbusto silvestre de origen sudamericano con presencia en el sur de México hasta el Río de la Plata. En Ecuador, la *Vernonthura patens* (Kunth) H. Rob crece en las provincias de Esmeraldas, Guayas, El Oro y Loja. Los arbustos suelen ser rectos, poco ramificados con hojas lanceoladas y alcanzan alturas de hasta 6 metros (Chóez et al, 2018).



Figura 1.2 Especie vegetal Vernonthura Patens

Fuente: [www.naturalista.mx]

Esta especie se emplea como medicina tradicional para tratar diferentes afecciones como paludismo, dolor de cabeza, dolor estomacal, erupciones de la piel, inflamaciones y ciertos tipos de cáncer. En su composición se han identificado componentes tales como triterpenoides, polifenoles, taninos y flavonoides. (Quijano et al, 2021; Manzano et al, 2013)

Tabla 1.6 Clasificación Taxonómica de la V. Patens.

[Universidad Nacional de Colombia, 2016]

Reino:	Plantae
División:	Magnoliophyta (presencia de flores)
Clase:	Magnoliopsida
Orden:	Asterales
Familia	Asteraceae
Género:	Vernonanthura
Especie:	Patens
Nombre científico:	<i>Vernonanthura patens</i> (Kunth) H. Rob

Estudios previos reportan que los extractos de hojas de V. Patens poseen actividad antioxidante y un alto contenido de compuestos fenólicos. La presencia de ácido málico, ácido cafeico y B-amirina atribuyen las propiedades antioxidantes del extracto, mientras que las propiedades anticancerígenas y antiinflamatorias se relacionan con los últimos dos componentes mencionados. (Choez et al, 2018)

En la tabla 1.8 se presentan las propiedades físicas y químicas de distintos órganos vegetales de la especie V. Patens. Además, se observa que en las hojas se acumula el mayor porcentaje de humedad residual y un porcentaje intermedio en la cantidad de sustancias solubles en agua.

Tabla 1.7 Compuestos en extracto acuoso de V. Patens. [Chóez et al, 2018]

Compuesto	Fórmula molecular	Área pico (%)
L-treonina	C ₄ H ₉ NO ₃	0.11 ± 0.02
Ácido málico	C ₄ H ₆ O ₅	0.70 ± 0.22
Ácido L-threónico	C ₄ H ₈ O ₅	0.69 ± 0.27
L-asparagina	C ₄ H ₉ NO ₃	0.79 ± 0.39
Ácido cafeico	C ₉ H ₈ O ₄	0.41 ± 0.12
Ácido heptadecanoico	C ₁₇ H ₃₄ O ₂	0.61 ± 0.26
Ácido cis-11-octadecanoico	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	1.03 ± 0.60
2-α Manobiosa	C ₁₂ H ₂₂ O ₁₁	0.29 ± 0.17
Ácido hexacosanoico	C ₂₆ H ₅₂ O ₂	0.15 ± 0.03
B-amirina	C ₃₀ H ₅₀ O	0.14 ± 0.05

Tabla 1.8 Propiedades físicas y químicas de *Vernonanthura Patens*.

[Manzano et al, 2013]

Parámetros	Flores	Hojas	Tallos
Humedad residual (%)	8.60 ± 0.06	10.00 ± 0.03	8.50 ± 0.06
Cenizas totales (%)	7.10 ± 0.11	11.00 ± 0.25	6.40 ± 0.19
Cenizas insolubles en HCl (%)	0.03 ± 0.01	4.30 ± 0.03	0.20 ± 0.02
Cenizas solubles en agua (%)	2.80 ± 0.13	1.10 ± 0.09	2.60 ± 0.15
Sustancias solubles agua (%)	6.10 ± 0.03	3.70 ± 0.08	3.10 ± 0.01
Sustancias solubles alcohol (%)	2.10 ± 0.01	0.80 ± 0.00	1.20 ± 0.00

1.4.4 Cáscara de granos de cacao

Es un subproducto valioso obtenido de la industria del cacao cuya generación se estima en unas 700 mil toneladas al año. Debido a su valor nutricional y riqueza en proteínas, fibra dietética y cenizas, así como en algunos otros compuestos bioactivos de alto valor (como metilxantinas y compuestos fenólicos) muchos autores se han centrado en el uso de este material para crear productos de valor añadido. (Balentić et al, 2018; Hernández et al., 2018)



Figura 1.3 Cáscaras de cacao

Fuente: [www.upb.edu.co]

Estudios realizados determinaron que el extracto acuoso de las cáscaras de cacao presenta una composición fenólica considerable (expresada en gramos de equivalentes de *ácido gálico*), además de teobromina y epicatequina como sus principales componentes. (Hernández et al., 2018)

Tabla 1.9 Compuestos en extracto acuoso de residuos de cacao.

[Hernández et al., 2018]

Compuesto	mg/g de muestra seca
Fenoles (Ác. Gálico)	5.77 ± 0.98
Teobromina	8.47 ± 0.01
Cafeína	Trazas
Catequina	1.65 ± 0.03
Epicatequina	6.93 ± 0.09

1.4.5 Cromatografía

La cromatografía es una técnica analítica utilizada habitualmente para separar una mezcla de sustancias químicas en sus componentes individuales. La mezcla que se va a separar se disuelve en un fluido llamado fase móvil. Esta fase móvil ayuda a transportar la mezcla a través de un material diferente, siendo la fase estacionaria. El principio fundamental de esta técnica se basa en el desplazamiento de los diferentes analistas a través de la fase estacionaria a diferentes velocidades, lo que provoca su separación. Los factores que influyen en este proceso de separación son las características moleculares relacionadas con la adsorción (líquido-sólido), la partición (líquido-sólido) y la afinidad o las diferencias entre sus pesos moleculares. (Coskun, 2016)

1.4.5.1 Cromatografía de gases acoplada con espectrometría de masas

Es una potente técnica analítica que combina la cromatografía como técnica de separación, y la espectrometría de masas como técnica de identificación. La espectrometría proporciona una detección y cuantificación altamente sensible de sustancias volátiles y semivolátiles, tales como los compuestos orgánicos presentes en la bebida nutracéutica.

El método analítico consiste en una mezcla gaseosa, los componentes se distribuyen entre las fases móvil y estacionaria del sistema cromatográfico. Durante la ionización de los compuestos gaseosos, la técnica separa los iones en el vacío en función de sus relaciones de masa/carga (m/z) para finalmente medir la intensidad de cada ion. Estas intensidades se registran para producir

una serie de espectros de masas, permitiendo una identificación y cuantificación casi inequívoca de los componentes. (Gutiérrez, 2002)

1.4.5.2 Cromatografía líquida de alta resolución (HPLC)

Es una técnica útil para separar e identificar aminoácidos, carbohidratos, lípidos, ácidos nucleicos, proteínas, esteroides y otras moléculas biológicamente activas. Su principal característica es el estado de la fase móvil (líquida), mientras que la fase estacionaria, puede ser sólida o una película líquida soportada en un sólido inerte. La separación se fundamenta en las fuerzas intermoleculares, no requiere de llevar a estado gaseoso la mezcla y se emplea por su alta precisión en los resultados. (Suarez & Morales, 2018)

1.4.6 Simuladores de procesos para ingeniería química

Los programas de simulación pretenden representar un proceso de transformación química o física a través de un modelo matemático, implicando el cálculo de balances de masa y energía acoplados con el equilibrio de fases y con ecuaciones de transporte y cinética química. Todo ello se realiza buscando la predicción del comportamiento de un proceso, en el que se conocen algunos datos preliminares de los equipos y los flujos. (Gil et al, 2019)

En los datos de entrada de la simulación se requiere como mínimo el ingreso de presiones, temperaturas, flujos, composiciones de alimentación y la selección del modelo termodinámico adecuado. Los simuladores de procesos comerciales y académicos más divulgados actualmente son: ASPEN PLUS®, ASPEN HYSYS®, HYSYM®, CHEMSEP®, CHEMCAD® y PRO II®.

Aspen Plus® se sitúa entre el grupo de simuladores modulares. Está compuesto por un conjunto de unidades de simulación, representadas a través de bloques e íconos, a los que se debe proporcionar la información pertinente para resolver los balances de masa y energía. (Gil et al, 2019)

Este simulador cuenta con una herramienta de caracterización para introducir nuevos compuestos definidos por el usuario, cuyos requerimientos son la estructura molecular y ciertas propiedades fisicoquímicas de los mismos. Además, permite describir detalladamente los sólidos granulares y ofrece una completa biblioteca de modelos para los equipos asociados a las etapas de procesamiento de sólidos (Al-Malah, 2016). Finalmente, la base de datos del simulador y los algoritmos de propiedades físicas de los componentes han sido desarrollados en colaboración con el prestigioso Instituto Nacional de Estándares y Tecnología (NIST). Estas bondades son de interés para la simulación del proceso de elaboración de la bebida nutracéutica.

1.4.6.1 Definición de componentes

Para el ingreso de componentes en el simulador se debe especificar el tipo apropiado. Los tipos más comunes son: convencional, sólidos y no convencional (Aspen Technology, Inc., 2021).

- Convencional: componentes típicos empleados para operaciones donde existen equilibrios líquido – vapor.
- Sólido: empleado para sólidos convencionales cuyas propiedades se calculan a partir de “modelos sólidos” propios del simulador. Los sólidos convencionales son materiales puros presentes en mezclas o equilibrios químicos, incluidas las sales de electrolitos. Se caracterizan a partir de propiedades como: peso molecular, presión de vapor y propiedades críticas. Si el componente sólido no participa en los cálculos de equilibrio de fase, se considera como un sólido convencional inerte.
- No convencional: se emplea para sólidos no convencionales que se caracterizan por los atributos de sus componentes y no participan en equilibrios de fase (ideal para carbón, pulpa de madera y biomasa).

Los modelos termodinámicos del simulador incluyen modelos de propiedades termodinámicas clásicas (modelos de coeficientes de actividad y ecuaciones de estado) así como modelos de sólidos y electrolitos. Los modelos se agrupan según el tipo de propiedad que describen. Las

propiedades de los sólidos y las fases fluidas no se pueden calcular con el mismo tipo de modelos. Durante el procesamiento mecánico de materias primas (mineral, carbón, madera, biomasa), el modelo termodinámico de sólidos maneja las propiedades físicas como componentes no convencionales con una densidad general y una capacidad calorífica general. (Aspen Technology, Inc., 2021)

Para definir un componente que no está incluido en la base de datos del simulador se emplea la herramienta “User-Defined Component”. Esta herramienta funciona para compuestos sólidos, convencionales y no convencionales. Las propiedades físicas de estos compuestos pueden ser estimadas a partir de su fórmula general, grupo funcional de interés o su estructura molecular. La última opción es la de preferencia para complejas moléculas orgánicas, dado que el simulador puede calcular energías y longitudes de enlace a partir de la estructura. (Al-Malah, 2016)

El ingreso manual de datos experimentales comúnmente disponibles (peso molecular, punto de ebullición normal, presión de vapor, datos de capacidad calorífica y otras propiedades termodinámicas) mejora la precisión de las propiedades estimadas por el simulador.

Finalmente, como herramienta adicional el simulador cuenta con “ThermoData Engine”. Es un software elaborado en colaboración con NIST que permite la correlación, evaluación y predicción de datos termodinámicos y de propiedades de transporte de cualquier componente (Aspen Technology, Inc., 2021). La estimación de propiedades se basa en:

- Datos experimentales publicados y almacenados en una base de datos del programa.
- Valores predichos basados en la estructura molecular y métodos de estados correspondientes.
- Datos proporcionados por el usuario.

CAPÍTULO 2

2. METODOLOGÍA

En la Figura 2.1 se presenta un flujograma de las etapas a seguir para cumplir con el proyecto propuesto. Se inició con la información experimental disponible, descripción detallada de la alimentación, identificación e introducción de compuestos, posterior simulación y obtención de resultados.

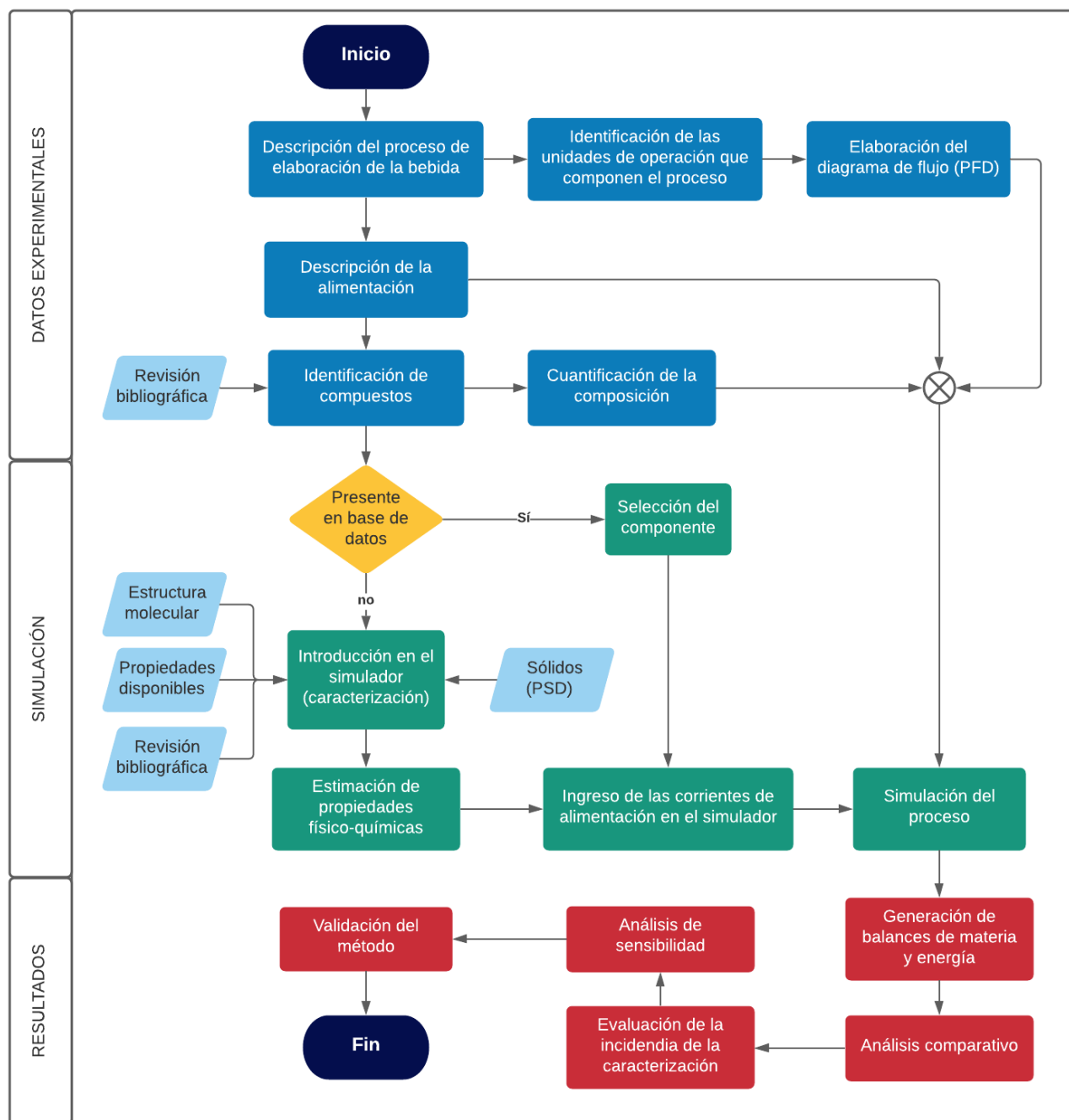


Figura 2.1 Diagrama de flujo de la metodología propuesta

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

2.1 Definición del caso de estudio

Como paso inicial para el desarrollo del proyecto se recopiló información bibliográfica sobre el proceso de elaboración de la bebida nutracéutica. Se tomó como caso de estudio el proyecto previo de Abad & Palacios (2020) dónde se describe la elaboración del producto a escala de laboratorio a partir de datos proporcionados por el CIBE.

Posteriormente, se elaboró un diagrama de flujo del proceso (PFD) a escala piloto y se describió el proceso desde la alimentación. Se identificaron las materias primas a emplear, la cantidad total de materia vegetal requerida para la producción de un día, los equipos y/o unidades empleadas junto con su respectiva finalidad y sus condiciones de operación (temperatura y presión). También, se detallaron especificaciones como los tiempos de secado y de extracción, tamaño de partícula deseada para la molienda y el tamizado, y la relación solvente/sólido a emplear en el equipo extractor.

La descripción del proceso permitió clasificar a los equipos como “etapas para el procesamiento de sólidos”. Posteriormente, se definió la mejor estrategia de simulación y caracterización tanto de la biomasa como de los componentes de la bebida.

2.2 Descripción de la alimentación

En esta etapa se reunieron resultados experimentales disponibles en bibliografía para la identificación y cuantificación de los compuestos presentes en los extractos acuosos de las tres materias primas.

- **Ilex Guayusa:** Un estudio realizado en 2017 por García A, et al. determinó la composición fenólica de la I. Guayusa. Un total de 11 compuestos fenólicos fueron identificados y cuantificados como mg de componente por g de muestra seca. El método analítico empleado por García et al. (2017) para la identificación fue Cromatografía Líquida de Alta Eficacia (HPLC). Mientras que para la cuantificación se empleó un sistema de Cromatografía Líquida de Alta

Eficacia acoplada con un Detector de Matriz de Diodos (HPLC-DAD). Los compuestos fenólicos individuales en el estudio mencionado se identificaron empleando tiempos de retención (Rt), espectros UV característicos, y la comparación con los estándares disponibles.

Debido a que la alimentación al proceso requiere de composiciones en base húmeda se complementó el estudio anterior con investigaciones adicionales realizadas por Camacho & Martínez (2015) y Manzano *et al.* (2018). En conjunto, estos dos últimos trabajos discuten la influencia del secado al aire (AD), en horno de convección (CO) y secado solar (SOD) en las propiedades físicas y químicas de las hojas de *Ilex Guayusa*.

Como resultados se proporcionan tablas con tiempos de secado a 46.11 °C y porcentajes de pérdidas de humedad, así como propiedades físicas y químicas de las hojas donde destaca el porcentaje de humedad residual (tablas 1.4 y 1.5 del capítulo 1). La humedad residual es el porcentaje de humedad que no puede ser retirado de la materia vegetal a temperaturas convencionales por lo que dicho valor está expresado en términos de muestra seca.

Con las tablas de secado se estimó la curva característica de secado y el porcentaje de humedad no ligada, es decir la cantidad de humedad que puede ser fácilmente retirada de las hojas. Finalmente, se cuantificó el porcentaje másico de humedad no ligada y del sólido seco, a partir del cual se ajustó la composición másica en base húmeda de los compuestos previamente identificados en la tabla 1.3 del capítulo 1.

- **Vernonanthura Patens:** mediante Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas (GC-MS), Chóez I. et al (2018) identificó el perfil de componentes presentes en el extracto acuoso de hojas de *Vernonanthura Patens*. El estudio se realizó para hojas de *V. Patens* secadas por horno de convección, temperatura ambiente y secado en frío. Se escogieron los

resultados experimentales de las hojas secas a partir de horno de convección, cuantificándose 10 componentes en mg/g de muestra de seca.

El estudio anterior fue complementado con una investigación realizada en 2013 por Manzano et al. dónde se rescata el porcentaje de humedad residual de las hojas de *V. Patens*, así como las propiedades físicas y químicas de distintos órganos (flores, hojas y tallos) de esta especie vegetal (tabla 1.8 del capítulo 1). La humedad no ligada fue estimada a partir de la humedad promedio de las hojas de distintas especies vegetales (70 % p/p).

Se cuantificó el porcentaje másico de humedad no ligada y del sólido seco, a partir del cual se ajustó la composición másica en base húmeda de los compuestos previamente identificados en la tabla 1.7 del capítulo 1.

- **Residuos de cáscara de cacao:** Una caracterización realizada en 2017 por Hernández et al. determinó el perfil fenólico de residuos de cáscara de cacao a partir de 25 muestras. En el estudio revisado se extrajeron muestras de cáscara de cacao secas con agua destilada, agitación y temperatura.

Hernández et al. (2017) determinó el contenido fenólico total mediante el método espectrofotométrico de Folin-Ciocalteu y lo expresó en gramos de equivalentes de *ácido gálico*. En adición, identificó los compuestos fenólicos presentes en el extracto mediante datos de masa de impacto de electrones recopilados en un analizador de masas, empleando Cromatografía Líquida de Alta Eficacia acoplada con un Espectrómetro de Masas (HPLC-MS). Finalmente, un total de 4 compuestos se cuantificaron (mg/g de muestra seca) empleando un sistema de Cromatografía Líquida de Alta Eficacia acoplada con un Detector de Matriz de Diodos (HPLC-DAD) y estos resultados se resumieron en tabla 1.9 del capítulo 1.

Como las cáscaras de cacao son un residuo de esta industria, éstas son previamente secadas durante la fermentación de los granos para reducir el contenido de humedad y la actividad microbiana. El proceso de secado

interfiere con las reacciones bioquímicas iniciadas durante la fermentación, lo que lleva a una reducción del amargor, la astringencia y la acidez de los granos de cacao. En consecuencia, se asume que esta materia prima sólo presenta humedad ligada, la cual se estima en 7% según Baizura *et al.* (2018).

Con la información recolectada se ajustó la composición másica de los compuestos previamente identificados en la tabla 1.9, adicionándole la humedad.

El último paso, es definir la proporción de alimentación (porcentaje másico) de cada una de las especies vegetales. Se requiere de un total de 60 Kg de materia prima. Para definir la proporción ideal se revisó el estudio de Quijano *et al.* (2021) dónde se demostró el efecto de la adición de cáscara de cacao sobre el perfil de metabolitos y sobre la actividad antioxidante de infusiones elaboradas con *Ilex Guayusa*, *Vernonanthura Patens* y sus mezclas. Como resultado se obtuvo que la adición de cáscara de cacao a las infusiones podría incrementar la variedad de polifenoles que se encuentran inicialmente en estas materias primas. Sin embargo, la adición de este subproducto disminuye la actividad antioxidante de las infusiones.

La proporción de 0.33% de cacao, 0.33% de *I. Guayusa* y 0.33% de *V. Patens* fue la escogida porque exhibe un elevado contenido de polifenoles y flavonoides totales en combinación. Estos compuestos proporcionan una actividad antioxidante relevante, lo que es una de las principales características de la bebida nutracéutica.

A partir de los estudios revisados se logró cuantificar la alimentación al proceso de las tres materias primas basándose en: humedad, compuestos identificados y biomasa.

2.3 Ingreso de compuestos no presentes en la base de datos del simulador

Por medio del buscador de la base de datos del simulador, se identificó la presencia de los compuestos que conforman la materia prima. Si los componentes se encuentran presentes en la base de datos, son seleccionados y se añaden a la

simulación, caso contrario tienen que ser ingresados de forma manual. De los 24 compuestos identificados, 11 no forman parte de la biblioteca del simulador.

Para el ingreso de los nuevos compuestos se especificó el tipo apropiado. Los tipos más comunes son: convencional, sólidos y no convencional. Los compuestos ingresados fueron definidos como convencionales (compuestos/sólidos con una definición rigurosa de su estructura molecular que participan en equilibrios de fase). La biomasa se definió como un compuesto no convencional debido a su compleja y desconocida estructura. Se consideró que la biomasa no influye en los equilibrios de fase.

Los compuestos fueron ingresados siguiendo el procedimiento mostrado a continuación y verificando la existencia de errores:

1. Ingreso del nombre del componente en la sección **Components | Specifications**.
2. Ingreso de la estructura molecular del compuesto y cálculo de sus enlaces mediante la opción **User-Defined Component Wizard**. El ingreso de esta información también se puede realizar en la sección **Components | Molecular Structure**.

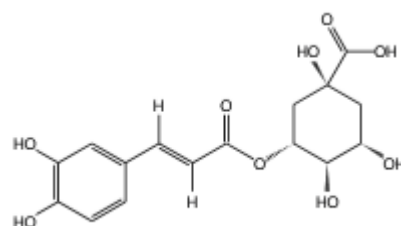


Figura 2.2 Estructura molecular del ácido clorogénico

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

3. El ingreso manual de datos experimentales comúnmente disponibles (peso molecular, punto de ebullición normal, gravedad específica) mejora la precisión de las propiedades estimadas por el simulador.

Las estructuras moleculares y propiedades experimentales de todos los compuestos se obtuvieron de bases de datos como: Pubchem, ChemSRC y Chemspider.

4. Se selecciona la opción ***Evaluating using NIST TDE*** para la estimación de propiedades basado en: datos experimentales publicados y almacenados en el simulador, predicciones acordes a la estructura molecular y datos bibliográficos proporcionados por el usuario.
5. Finalmente, se determina las interacciones moleculares de los nuevos compuestos y se ejecuta la simulación con el método termodinámico UNIFAC. Este método es usado para líquidos que conforman equilibrios con sólidos.

Para la integración de la biomasa se necesitaron parámetros de densidad no convencional y parámetros de capacidad calorífica no convencional estimados en el proyecto previo de Abad & Palacios (2020). También, se agregó la distribución de tamaño de partícula (PSD) basado en el tamaño promedio de las distintas materias vegetales que ingresan como materia prima. La distribución del tamaño de partícula de un material es un parámetro de análisis importante en los procesos de control de calidad y aplicaciones de investigación, porque muchas otras propiedades del producto están directamente relacionadas con él. La PSD influye en las propiedades del material, como el flujo y el comportamiento de transporte, la reactividad, la solubilidad, el comportamiento de extracción y reacción, entre otros.

2.4 Simulación del proceso

La simulación se realizó con la nueva alimentación obtenida, los compuestos identificados y las propiedades estimadas. Se seleccionó el método termodinámico global para la simulación, el cual fue "SOLIDS" puesto que funciona para trabajar con sólidos en general. Durante el procesamiento mecánico de las materias primas (biomasa), el modelo termodinámico de sólidos maneja las propiedades físicas de componentes no convencionales con una densidad general y una capacidad calorífica general.

Se definió también la clase de corriente (Stream Class) a emplear durante la simulación. Este es un parámetro útil cuando se modelan sólidos porque puede utilizarse para diferenciar entre las propiedades de cada subcorriente y facilitan la integración de sólidos y fluidos. La clase de corriente global seleccionada para la simulación fue “MCINCPD” empleada cuando se manejan sólidos convencionales y no convencionales con una PSD.

A continuación, se detallan los requerimientos para la simulación de los equipos.

- **Secador:** se seleccionó un secador continuo con flujo convectivo, siendo aire el medio gaseoso empleado para retirar la humedad del sólido. Para su funcionamiento se ingresaron 2 corrientes:
 1. Flujo de sólido a secar.
 2. Flujo de gas caliente que realizará la operación de secado.

Luego se determinó el funcionamiento del equipo, y se ingresa una de las siguientes características: volumen, velocidad de alimentación del sólido, área transversal/ longitud del secador o tiempo de residencia. Como se conoce el tiempo de secado experimental, se ingresó el parámetro de tiempo de residencia de los sólidos. Además, se especificó la longitud del secador y ciertos parámetros cinéticos de secado como NTU (Número de Unidades de Transferencia), humedad crítica, humedad de equilibrio y factor de la curva de secado.

- **Molienda:** la simulación del molino se puede realizar por tres métodos.
 1. Selección de equipo: se requiere de especificar un tipo de equipo (molino giratorio, simple, cónico, de martillo) y una función de selección y rotura.
 2. Determinación de la PSD a partir de la potencia de trituración, se requiere además de la función matemática de distribución que describa en general la media y el grado de dispersión alrededor de esa media para la PSD.

3. Especificar la PSD de salida: se especifica la PSD para cada subflujo por separado o en general. También, se puede especificar la PSD utilizando una función de distribución.

La simulación se realizó empleando la tercera opción porque la distribución granulométrica es una variable conocida en la elaboración de bebidas, indicando el tamaño máximo permitido para homogeneizar la muestra y facilitar la extracción de los componentes claves. Se utilizó la función de distribución normal para estimar el tamaño de PSD de salida.

- **Tamiz:** requirió únicamente de especificar el tamaño de partícula requerido, siendo un dato experimental conocido.
- **Extractor:** puede ser simulado por medio de un reactor batch con agitación a temperatura constante. Sin embargo, deben detallarse reacciones de equilibrio que por el momento no han sido estudiadas.

En consecuencia, se empleó la operación SWash, equipo que recupera componentes disueltos mediante un líquido de lavado a partir de una corriente de sólidos. El equipo calcula los caudales y las composiciones de los flujos de sólidos y líquidos de salida a partir de una relación de masa líquido-sólido, especificada por el usuario y de la eficacia de mezcla. Se añadió el calor necesario para que la operación sea a la temperatura requerida y el equilibrio de los componentes disueltos favorezca al líquido enriqueciendo la bebida.

El objetivo de la simulación es evaluar el efecto de la caracterización, analizando los resultados obtenidos en el proyecto previo con el actual. Además, se determinó el efecto de integrar nuevos compuestos químicos como herramienta de diseño.

2.5 Análisis comparativo y validación

La metodología implementada para ingresar compuestos nuevos en el simulador se validó comparando las propiedades estimadas por el mismo con aquellas preestablecidas en la base de datos. Para ello se ingresaron manualmente tres

compuestos que conforman la bebida y que a su vez están incluidos en el banco de datos del software de simulación. Se añadieron sus estructuras y pesos moleculares, entalpías de formación y puntos ebullición experimentales obtenidos de: Pubchem, ChemSRC y Chemspider. Se compararon propiedades como el factor acéntrico de Pitzer, factor de compresibilidad y propiedades críticas importantes para los equilibrios de fase.

Los compuestos se seleccionaron en dependencia de sus estructuras moleculares, para evaluar la incidencia del tamaño, forma de la molécula, y la presencia/ausencia de grupos funcionales en la exactitud de las propiedades estimadas.

Una vez culminada la simulación, se realizó un análisis comparativo entre resultados obtenidos en el proyecto integrador previo y los resultados del presente trabajo. Los equilibrios formados por las interacciones químicas de los compuestos caracterizados afectan los resultados obtenidos en cada operación, especialmente en aquellas donde existe transferencia de masa. Por este motivo, se realizó un análisis de sensibilidad de las condiciones de operación del secador y del biodigestor. Se ajustaron parámetros como la velocidad del aire, calor suministrado y la relación sólido/líquido durante la extracción para verificar cómo estas variables influyen en el secado y en la concentración del producto final. Los resultados se resumieron en gráficos comparativos para facilitar su análisis.

CAPÍTULO 3

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

3.1 Descripción del proceso de elaboración de la bebida nutracéutica

A continuación, se detalla el proceso de elaboración de la bebida nutracéutica, para el cual se ha realizado el diagrama PFD representado en la figura 3.1. Se parte de una masa total de alimentación equivalente a 60 kg/día, la cual está compuesta por las especies vegetales anteriormente descritas.

El proceso de elaboración a escala piloto inicia con la remoción del contenido de humedad de la materia prima (hojas de *I. Guayusa* y *V. Patens*, y *cascarillas de granos de cacao*) en el secador de bandejas D-101. Muchas sustancias crudas y/o naturales, así como prácticamente todos los sólidos fabricados industrialmente, se secan durante su procesamiento. En la mayoría de los casos esto ocurre de forma convectiva, lo que significa que la energía necesaria para el proceso de secado es suministrada por un medio gaseoso, utilizando aire caliente en el presente caso.

El secado se realiza durante 24 horas manteniendo una temperatura de 45 °C con el objetivo de eliminar alrededor del 60% del contenido másico de la materia vegetal presente en forma de humedad, lo que permite obtener hojas deshidratadas frágiles que facilitan los pasos de trituración y homogenización en el proceso de extracción. Un flujo constante de 700 kg/h de aire calentado a 45°C ingresa en la cámara de secado para mantener las condiciones de temperatura.

A continuación, la masa seca se transporta al equipo de molienda M-101 con el objetivo de disminuir el tamaño de partícula de los sólidos y se aumenta el área de transferencia de masa de los compuestos activos durante la extracción. En esta etapa se utiliza un molino de martillos debido a que es el tipo más utilizado en operaciones con especies vegetales. El molino opera de forma que el tamaño de partícula máxima sea de aproximadamente de 5 mm. La corriente de salida del molino ingresa al tamiz S-101 para homogenizar el flujo de sólidos, garantizando que se mantenga el tamaño máximo de partícula.

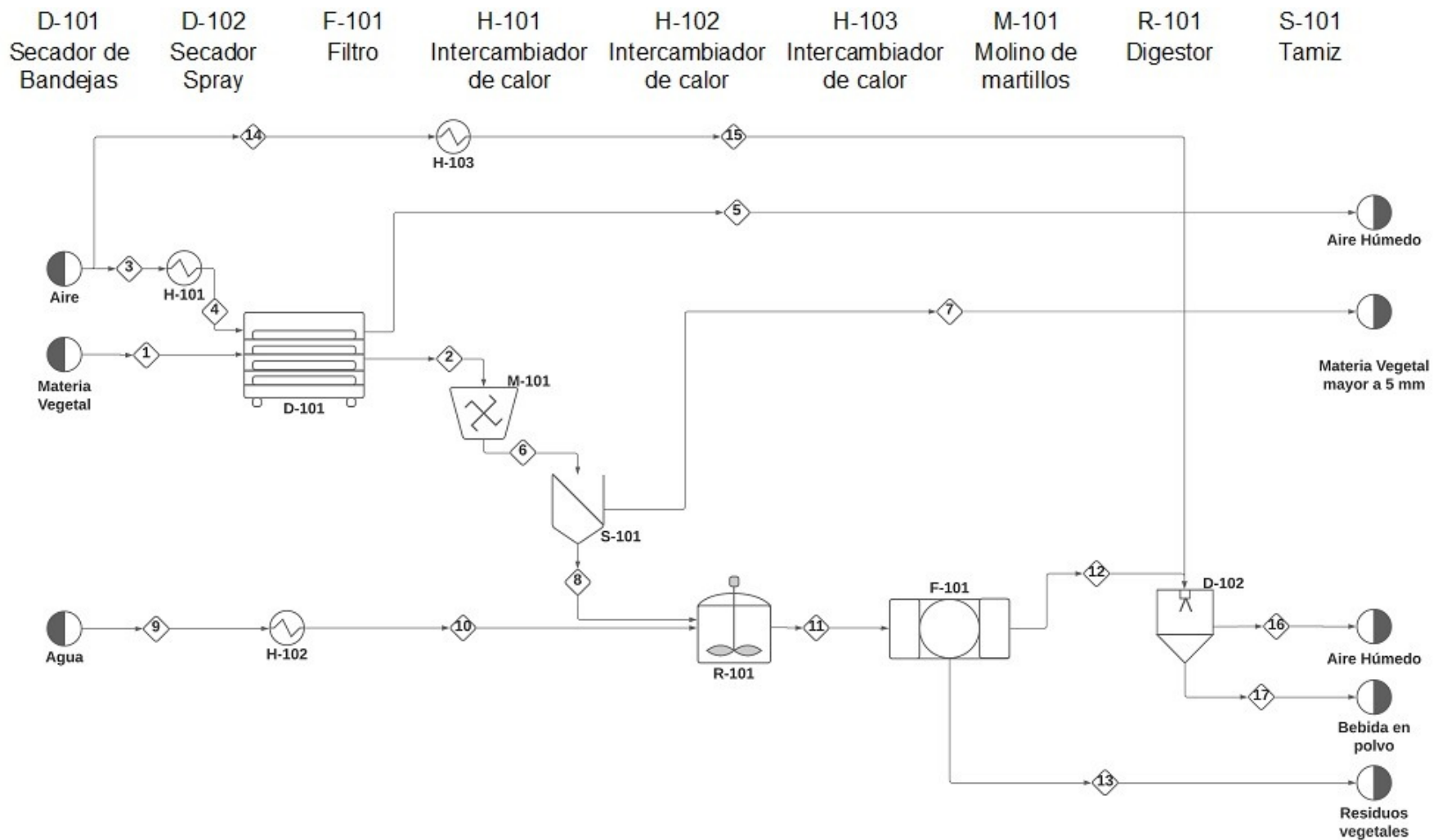


Figura 3.1 Diagrama PFD del proceso de elaboración de la bebida

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

Con el tamaño de partícula estandarizado los compuestos bioactivos de la materia prima son extraídos a través del digestor R-101, donde se usa agua como solvente en una relación líquido/sólido de 1:10. El equipo opera a 60°C durante 2 horas con una agitación constante de 650 rev/min. Al finalizar la operación se obtiene un líquido acuoso y residuos sólidos (mayoritariamente fibras vegetales). A través de la operación de filtrado F-101 se separan los sólidos de la corriente líquida.

Los residuos son desechados y el producto es la corriente líquida, comercializado en presentación líquida o pasa a un nuevo proceso de secado en spray. Durante la última etapa el líquido es atomizado y secado obteniéndose un polvo que contendrá todos los compuestos que componen la bebida nutracéutica. Esta acción se la realiza con la finalidad de almacenar el producto final.

3.2 Resultados y análisis de la alimentación

3.2.1 Registro de componentes en el software simulador

Para definir la corriente de alimentación se clasificaron los componentes identificados entre aquellos presentes en la base de datos del simulador y aquellos que requerían una definición por parte del usuario. Un total de 11 compuestos se ingresaron de forma manual, el detalle de la clasificación se puede observar en la tabla 3.1. Adicionalmente, se ingresaron aire y agua como componentes debido a su participación durante las etapas de secado y extracción respectivamente.

Tabla 3.1 Resumen de componentes presentes en el proceso de elaboración de la bebida nutracéutica.

Compuesto	Materia Prima			Presente en Aspen Databanks
	I. Guayusa	V. Patens	C. Cacao	
3-O-CQA Ácido neoclorogénico	✓			X
Cafeoil-hexosa	✓			X
5-O-CQA Ácido clorogénico	✓			X
Ácido 3-feruloilquínico	✓			X
Quercetina-3-O-rutinósido	✓			✓
Quercetina-3-O-hexosa	✓			X
Ácido 3,5-dicafeoilquínico (Ácido isoclorogénico)	✓			X
Kaempferol-3-O-glucósido	✓			X
3,4- Ácido dicafeoilquínico	✓			X
L-treonina		✓		✓
Ácido málico		✓		✓
Ácido L-threónico		✓		X
L-asparagina		✓		✓
Ácido cafeico		✓		✓
Ácido heptadecanoico		✓		✓
Ácido cis-11- octadecanoico		✓		✓
2- α Manobiosa		✓		X
Ácido hexacosanoico		✓		✓
B-amirina		✓		X
Fenoles (Ác. Gálico)			✓	✓
Teobromina			✓	✓
Cafeína	✓		✓	✓
Catequina			✓	✓
Epicatequina			✓	✓

3.2.2 Composición de la alimentación

Obteniéndose la identificación, cuantificación e ingreso de nuevos compuestos en el simulador, se ingresó el respectivo flujo másico de cada componente en la corriente de alimentación global de la simulación. Los flujos másicos en base húmeda para la Ilex Guayusa, V. Patens y Cáscara de cacao, se presentan en la tabla 3.3, 3.4 y 3.5 respectivamente.

Tabla 3.2 Composición de interés de la materia vegetal.

Materia Prima	% Másico	Masa [Kg/día]
Ilex Guayusa	33.33 %	20
V. Patens	33.33 %	20
Cáscara de Cacao	33.33 %	20
TOTAL	100.0%	60

Tabla 3.3 Composición de alimentación de Ilex Guayusa.

Componente	% Másico	Alimentación [Kg/día]
3-O-CQA (Ácido neoclorogénico)	0.1657	0.0331
Cafeoil-hexosa	0.1040	0.0208
5-O-CQA (Ácido clorogénico)	0.5034	0.1007
Ácido 3-feruloilquínico	0.0125	0.0025
Quercetina-3-O-rutinósido	0.0184	0.0037
Quercetina-3-O-hexosa	0.0551	0.0110
Ácido 3,5-dicafeoilquínico (Ácido isoclorogénico)	0.3470	0.0694
Kaempferol-3-O-glucósido	0.0213	0.0043
3,4- Ácido dicafeoilquínico	0.0685	0.0137
Cafeína	0.3986	0.0797
Humedad	79.1107	16.1283
Biomasa	17.6636	3.5327
TOTAL	100	20

Tabla 3.4 Composición de alimentación de Vernonanthura Patens.

Componente	% Másico	Alimentación [Kg/día]
L-treonina	0.033	0.0066
Ácido málico	0.21	0.042
Ácido L-threónico	0.207	0.0414
L-asparagina	0.237	0.0474
Ácido cafeico	0.123	0.0246
Ácido heptadecanoico	0.183	0.0366
Ácido cis-11- octadecanoico	0.309	0.0618
2- α Manobiosa	0.087	0.0174
Ácido hexacosanoico	0.045	0.009
B-amirina	0.042	0.0084
Humedad	70	14.6
Biomasa	25.524	5.1048
TOTAL	100	20

Tabla 3.5 Composición de alimentación de Cáscara de Cacao.

Componente	% Másico	Alimentación [Kg/día]
Fenoles (Ác. Gálico)	0.577	0.1154
Teobromina	0.847	0.1694
Cafeína	-	-
Catequina	0.165	0.033
Epicatequina	0.693	0.1386
Humedad	7	1.4
Biomasa	90.718	18.1436
TOTAL	100	20

De los flujos obtenidos se observan valores que distan del proyecto anterior. Esto se debe a que en el presente trabajo se toman en consideración 24 componentes, mientras que en el anterior se estudiaron únicamente 3. Se incluyen componentes con un gran poder antioxidante como es el caso del ácido gálico, cafeína, ácido clorogénico y teobromina. Además, se asume como biomasa a todo

porcentaje de sólido seco (materia vegetal) que no fue identificado como un compuesto químico.

3.3 Resultados y análisis de la validación

En el diseño de procesos, es importante desarrollar nuevas técnicas para la determinación de las propiedades físicas de los distintos constituyentes de una mezcla. Sin embargo, la determinación de dichas propiedades puede resultar difícil y también costosa. Esta limitación conduce a la aplicación de técnicas de predicción para proporcionar estas propiedades en ausencia de datos experimentales, como lo fue en este caso el empleo de herramientas de simulación.

Con el fin de probar la validez de los compuestos definidos por el usuario, se aplicó la metodología descrita para ingresar tres compuestos que conforman la bebida y que están presentes en la base de datos del software de simulación. Los compuestos fueron: cafeína, ácido cafeico y ácido hexacosanoico. Se estimaron las propiedades de los tres compuestos ingresados y se compararon con aquellas preestablecidas en la base de datos. La tabla 3.6 contiene el resumen de las propiedades más significativas y la figura 3.2 muestra las estructuras moleculares.

Tabla 3.6 Comparación de propiedades estimadas.

Parámetros	Unidades	Cafeína-DB	Cafeína UD-1	Ácido H. - DB	Ácido H. UD-2	Cafeico - DB	Cafeico UD-3
DHFORM	CAL/MOL	-55606	-55606	-221620	-221620	-	-136266
MW		194.193	194.193	396.698	396.698	180.16	180.16
OMEGA		0.15986	0.11839	0.711352	1.5692	1.85614	1.27037
PC	ATM	28.9143	43.2289	7.5104	7.5105	34.1937	57.3345
RKTZRA		0.306915	0.212347	0.222875	0.14285	0.118881	0.0786308
SG		0.846864	0.83	0.990679	0.99	1.46233	1.5
TB	C	382.367	380	414.02	418.7	426.332	426.3
TC	C	888.83	919.85	524.85	524.85	588.85	661.806
VB	CC/MOL	398.643	109.936	827.202	417.273	65.5528	70.6686
VC	CC/MOL	510	501.3	1484.78	1484.9	471.624	472.5
VCRKT	CC/MOL	510	501.3	1484.78	1484.9	471.624	472.5
ZC		0.154658	0.231	0.166365	0.17	0.212774	0.274645

DB: Base de datos; UD: Definido por el usuario.

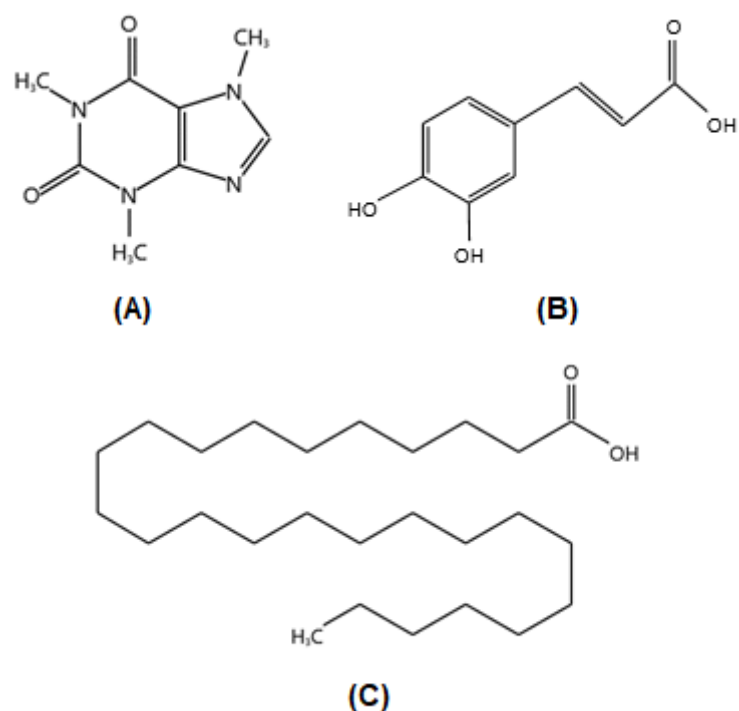


Figura 3.2 Estructuras moleculares de cafeína (A), ácido cafeico (B) y ácido hexacosanoico (C)

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

Se compararon propiedades comunes como peso molecular (MW), temperatura de ebullición (TB), gravedad específica (SG) y entalpía de formación (DHFORM). Para estas propiedades se obtuvieron valores casi exactos, lo que indica la validez de los datos experimentales ingresados. También se revisaron propiedades como el factor acéntrico de Pitzer (OMEGA), factor de compresibilidad (Z_c) y ciertas propiedades críticas.

A pesar del enorme costo y tiempo requerido durante los experimentos, el modelo termodinámico ha encontrado un uso cada vez mayor para modelar mezclas y / o compuestos complejos. Uno de los parámetros clave de los diversos modelos termodinámicos es el factor acéntrico, que dicta el nivel de esfericidad de una molécula.

Se trata de un número adimensional que es función de parámetros termofísicos como temperatura crítica (TC), presión crítica (PC), punto de ebullición, gravedad específica y peso molecular. Fue propuesto por Pitzer como una medida de la

cantidad en que las propiedades termodinámicas de una sustancia en particular difieren de las predichas por el principio de estados correspondientes (Olayiwola, 2020). El factor acéntrico es muy cercano a cero para fluidos simples (moléculas esféricas), pero se desvía de cero para otras sustancias debido a una variedad de efectos moleculares que influyen en su volatilidad.

Como resultado se obtuvo un factor acéntrico próximo para la cafeína, mientras que para el ácido hexacosanoico se registró la mayor diferencia entre los tres compuestos. Lo anterior se puede atribuir a la estructura molecular, ya que la cafeína es la molécula más pequeña y por ende su factor acéntrico se aproxima a cero. Mientras que el ácido hexacosanoico es una molécula lineal sin ramificaciones y por ende la estimación le otorgó el factor acéntrico más alto (1.5692). Cabe destacar que la diferencia con el valor teórico apenas es de 0.85.

Por otro lado, para las propiedades críticas se obtuvieron valores de volumen crítico (VC) y factor de compresibilidad críticos casi exactos respecto a los valores teóricos. Para las temperaturas críticas (TC) y presiones críticas (PC) existió una diferencia mediana para la cafeína y el ácido cafeico, lo que se presume se debe a la complejidad de la estructura molecular y sus grupos funcionales. Para el ácido hexacosanoico los valores teóricos y estimados para estas propiedades difieren en apenas 0.001 unidades.

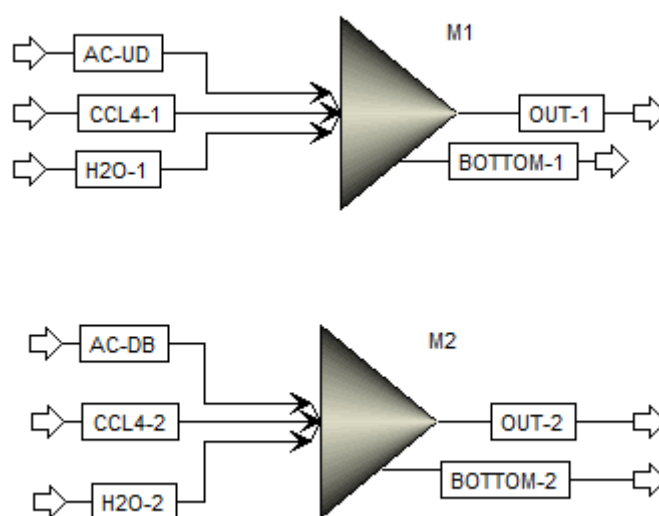


Figura 3.3 Simulación de unidades de mezcla para ácido cafeico

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

Finalmente, para evaluar la influencia de estos parámetros en una simulación se utilizaron dos unidades de mezcla idénticas. En los mezcladores ingresa un flujo de 1 Kg/h de ácido cafeico, y 10 Kg/h de tetracloruro de carbono (CCl_4) y de agua (H_2O) como solventes a 60 °C. La teoría predice que la solubilidad del ácido cafeico en agua incrementa con la temperatura y que es escasamente soluble en el CCl_4 .

Se obtuvo la composición de las corrientes de salida de cada unidad, donde la primera (M1) contiene el compuesto definido por el usuario y la segunda (M2) el compuesto del banco de datos. Se puede observar en la tabla A1 de apéndices que las condiciones de salida y las propiedades en términos de presión, temperatura, flujo másico y fracción másica de cada especie son próximas para las corrientes acuosas “BOTTOM-1” y “BOTTOM-2” de los mezcladores.

La corriente acuosa de M1 arrastra 0.968 Kg/h de ácido cafeico mientras que en la M2 se recuperan 0.893 kg/h, siendo valores cercanos. El compuesto ingresado manualmente se comporta según la predicción de solubilidad. Por lo tanto se concluye que la metodología implementada fue exitosa para estimar el comportamiento de los compuestos no presentes en la base de datos del simulador. Siendo más exacto el resultado para moléculas con estructuras moleculares sencillas y pocos grupos funcionales.

3.4 Análisis y resultados de la simulación

Una vez realizada la simulación siguiendo la metodología descrita en el capítulo 2, se obtuvo el balance de masa resumido en la tabla A2 de la sección de apéndices y el diagrama de flujo realizado en el simulador representado en la figura 3.4. Para analizar la simulación actual se compararon los resultados obtenidos con los reportados por Abad & Palacios 2020, determinando el efecto de implementar la metodología propuesta.

A continuación, se detallan los resultados y análisis de cada equipo ingresado en la simulación:

Secador: en la simulación se empleó un secador continuo y flujo de aire convectivo a co-corriente debido a su similitud con un secador de bandejas. Fue necesario especificar el tiempo de residencia de los sólidos igual a 24 horas. Adicionalmente se ingresó la longitud de bandeja equivalente a 0.85 m, dato que fue tomado de la materia integradora previa.

Para el cálculo del coeficiente de transferencia de masa se ingresó el valor de los NTU. Perry (1997) determinó el rango de 1.5 a 2.5 NTU para la operación económica de secadores, dato que se usó como heurística para la simulación del secador convectivo. Finalmente, fue necesario ingresar datos para la curva de secado, un valor de 0 a 1 para definir la forma de la curva. La forma de la curva de secado normalizada describe la tasa de secado después de que el contenido de humedad de los sólidos haya caído por debajo de la humedad crítica. Se selecciona un valor de 0.5, siguiendo la recomendación del manual de Al-Malah (2017).

La cantidad de aire para el secador ingresa por la corriente 4 con un flujo de 700 kg/h, a 45 grados Celsius. La masa inicial que ingresa al secador es de 60 kg, y la masa de salida resultante fue de 27.97 kg, representando una pérdida del contenido másico alimentado del 53.4% en forma de humedad.

En el trabajo anterior se expresó la cantidad inicial de humedad equivalente al 60%, no obstante, con la caracterización realizada se detalló que la humedad inicial es del 54%. El cambio se debe a que en el trabajo de caracterización se expresa la humedad de una forma más exacta, empleando la humedad de cada especie vegetal a partir de investigaciones pertinentes.

En la materia integradora previa se reporta una remoción del 99.8% de la humedad. En este proyecto se manejó de forma idealizada de la operación, los compuestos ingresados fueron tratados como componentes no convencionales. Además, se ignoraron las interacciones termoquímicas y los equilibrios que se forman entre la materia prima y el agua. Al ser compuestos no convencionales, el simulador asume que no existen interacciones ni equilibrios de fase, tratando al sólido como un compuesto inerte a lo largo de todo el proceso.

Por otro lado, la presente simulación incorporó las propiedades termodinámicas de los distintos componentes, ingresándolos como compuestos convencionales. Se obtuvo una remoción de humedad máxima del 97%, quedando el 3% de agua como humedad ligada.

Molino: esta etapa simula la rotura de partículas sólidas, crea fragmentos con la misma composición que la alimentación y calcula la distribución del tamaño de partícula (PSD) de la corriente de salida del equipo. La simulación se realizó empleando un tamaño máximo de partícula de 5 mm. Se utilizó la función de distribución normal para estimar el tamaño de PSD de salida. La distribución normal requirió de dos parámetros: uno para la media o la mediana (fracción de masa acumulada $Q(d)=0.5$) y otro para describir el perfil de la propia distribución (es decir, estrecha o amplia). El valor de $Q(d)=0.5$ o D50 (tamaño en el que el 50% de las partículas son mayores) ingresado fue menor a 5 mm con una distribución estándar de 1 mm. La tabla A3 en apéndices muestra como resultado la distribución de los tamaños de partículas obtenidas por la corriente saliente del molino.

Los resultados obtenidos en la operación fueron similares al trabajo anterior, para el funcionamiento del molino solo es necesario especificar las dimensiones del sólido que ingresa y las dimensiones del sólido de salida. En consecuencia, el efecto de añadir la caracterización no alteraría significativamente los resultados, debido a que es un proceso mecánico en donde solo se altera el tamaño de la partícula.

No obstante, si se apreciaron cambios en el PSD debido a que en la simulación anterior tanto los nuevos compuestos ingresados (ácido clorogénico, quercetina y ácido cafeico) como la biomasa se asumen como sólidos inertes, a los cuales se les proporcionó un tamaño de partícula (5 mm). Esto implica que los compuestos ingresados sean interpretados por el simulador como sólidos de tamaños próximos a 5 mm, perdiendo una parte importante de componentes claves durante el tamizado.

Tamiz: simula la separación mediante tamices de una mezcla de partículas sólidas, agrupando las partículas con tamaños similares para obtener una distribución uniforme. El tamizado en el simulador requirió únicamente de colocar el

tamaño de partícula requerido, de 5 mm. La corriente 7 es el rechazo del tamiz y posee un flujo de 0.29 kg/día, mientras que la corriente 8 pertenece a la cantidad de materia vegetal que continua en el proceso, a una razón de 27.68 kg/día.

Se observan cambios significativos con la simulación anterior, en ésta el 6.3 % del sólido (biomasa + componentes clave) sobrepasa el tamaño requerido, teniendo que ser desechado y en el actual solo un 1% del sólido (biomasa + componentes clave) sobrepasa el tamaño establecido de 5 mm.

Extractor: el equipo calculó los caudales y las composiciones de los flujos de sólidos y líquidos de salida a partir de una relación de masa líquido-sólido, especificada por el usuario y de la eficacia de mezcla. La mezcla se asumió como ideal (valor de 1) y la relación líquida/sólido se obtuvo del proceso experimental (10:1). Mediante la corriente 11 y 12 se representa el extracto acuoso total obtenido en el proceso de extracción y el residuo a desechar respectivamente.

Esta operación considera las interacciones químicas obteniendo dos corrientes en la salida. Una corriente conformada por residuos sólidos y otra por una corriente líquida (bebida), manteniendo un flujo de 275.34 kg/día. Aunque no es como tal la operación de digestión, SWash ofrece un acercamiento a la realidad y modela de mejor el proceso de extracción.

En el trabajo previo, los compuestos se definieron como sólidos inertes y no se representó una operación que emplee interacciones fisicoquímicas para realizar la extracción. Por este motivo, se utilizó un separador dónde se ingresaron manualmente los flujos deseados del producto y el desecho. En la simulación actual se obtiene un flujo de bebida de 275.34 Kg/día con una concentración de compuestos antioxidantes del 0.33%, mientras que en el proyecto previo se obtuvo un flujo de 225.75 Kg/día con una concentración del 0.06% de compuestos antioxidantes. Las diferencias observadas se deben a que la caracterización permite estimar propiedades físico-químicas que evitan la idealización, tomando en consideración los equilibrios formados por las condiciones de operación.

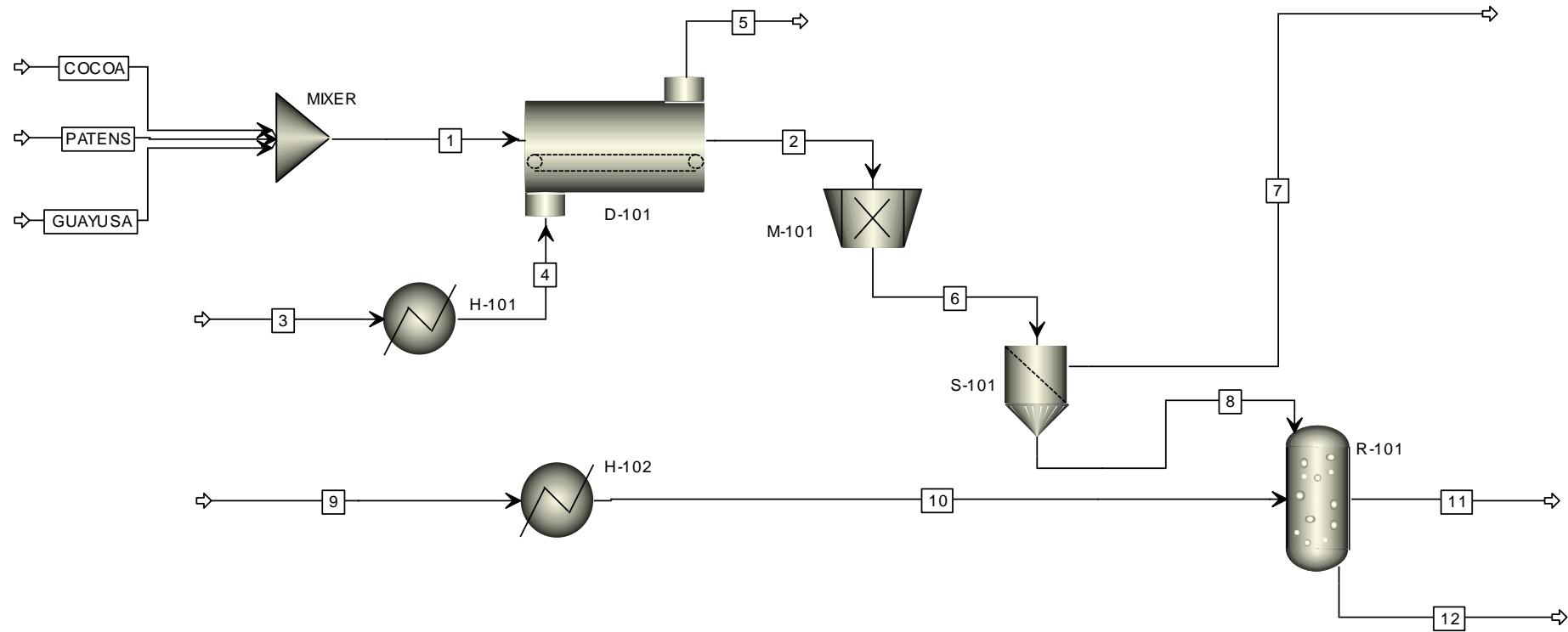


Figura 3.4 Simulación del proceso de elaboración de la bebida nutracéutica en Aspen Plus V12.

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

3.5 Resultados del análisis de sensibilidad

Después de la simulación, se determinó las variables más influyentes en los equipos más importantes que componen el proceso. Se identificó que los equipos predominantes son el secador y el biodigestor; puesto que de ellos depende la cantidad y concentración del producto final.

3.5.1 Análisis de sensibilidad del Secador

Se analizó las variables de entrada en el secador y se encontró que el mecanismo predominante en la transferencia de masa. La velocidad de circulación del gas a emplearse tiene un gran impacto en la remoción de humedad del sólido.

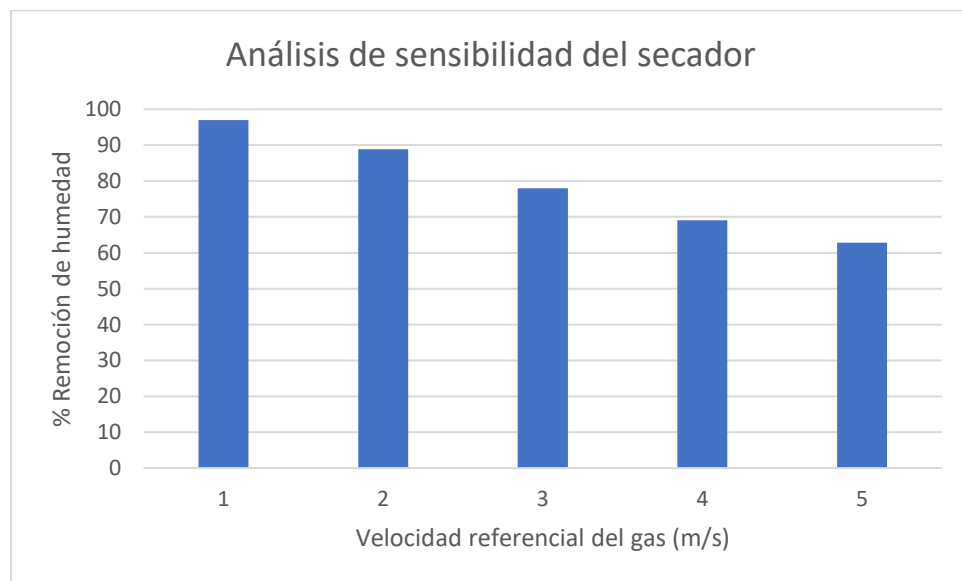


Figura 3.5 Análisis de sensibilidad del secador convectivo continuo

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

En consecuencia, se realizaron distintas simulaciones variando la velocidad del aire según heurísticas, diseño en un rango entre 1 a 10 m/s (Perry, 2008). La velocidad del aire tiene un efecto importante que determina el tiempo de contacto entre el sólido y el gas. La remoción de agua en menores velocidades es mucho mayor, indicando que el equipo debe operar en estas condiciones. Por consiguiente, el equipo debe operar a una velocidad de 1 m/s garantizando una remoción del 97% de humedad en la materia prima.

3.5.2 Análisis de sensibilidad del Digestor

Como las condiciones de operación (temperatura) ya fueron fijadas experimentalmente, se estudia el efecto de la adición de agua. El aumento o disminución afecta la calidad del producto, así como las pérdidas que se producen debido a los sobrenadantes, que son posteriormente desechados. Dado los equilibrios de fase que se forman por la cantidad de agua, se espera que una pequeña parte de los compuestos analizados no sea extraída y se pierda.

Para el siguiente análisis se varió la cantidad de agua en la corriente de entrada del equipo. A partir de balances de masa y energía se obtuvieron: el calor requerido (Heat Duty), concentración de la bebida, pérdidas de compuestos en el sólido desechado, porcentaje de extracción a las condiciones de operación y la cantidad de bebida producida.

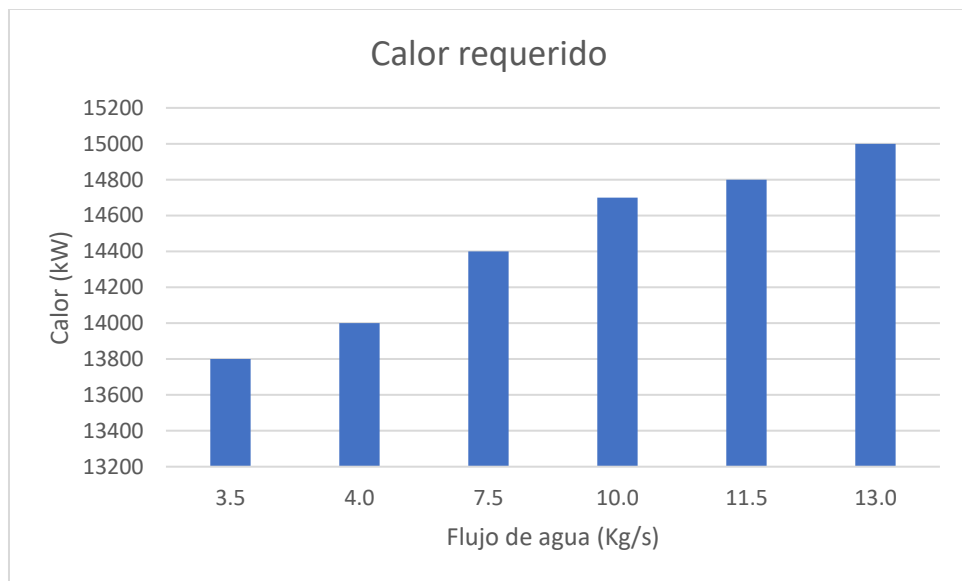


Figura 3.6 Calor requerido para el extractor a diferentes flujos de agua

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

Del balance de energía se obtuvo el requerimiento de calor como Heat Duty, el cual es el calor necesario para mantener la condición de temperatura constantes a lo largo de la extracción. Si se opera a un flujo de agua de 13 kg/s se obtiene un calor requerido de 15000 Kw, mientras que al operar con un flujo de 3.5 kg/s se obtiene un calor de 13800 kw. Estos resultados establecen que, a mayor cantidad

de agua, se necesita un mayor consumo de calor y aumentan los costos energéticos. Esto se puede observar en la Figura 3.6.

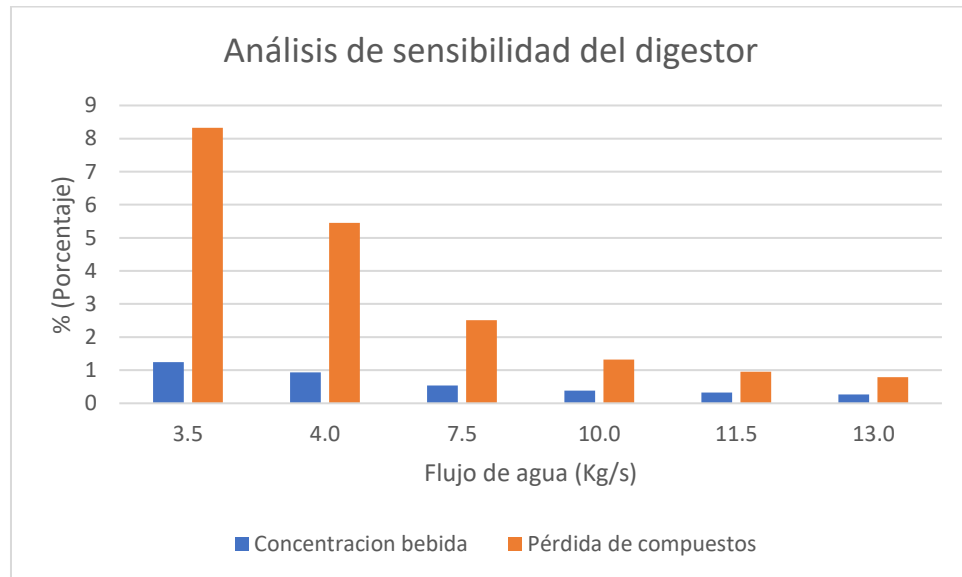


Figura 3.7 Análisis de sensibilidad del digestor modelado como SWash

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

A la par se obtuvieron balances de masa, que permitieron determinar la cantidad de compuestos que se pierden en el sólido, la concentración de la bebida, el porcentaje de extracción y el flujo de bebida producida, resultados expuestos en la figura 3.7. Se observa que al tener menor cantidad de agua se obtiene una bebida con mayor actividad antioxidante, pero se pierden muchos compuestos debido al equilibrio de fase. Por lo tanto, la mejor forma de operar el equipo es a través de la cantidad de agua propuesta experimentalmente, siendo 10 veces la cantidad de sólido, y se obtiene que el mejor flujo es de 11.5 Kg/s.

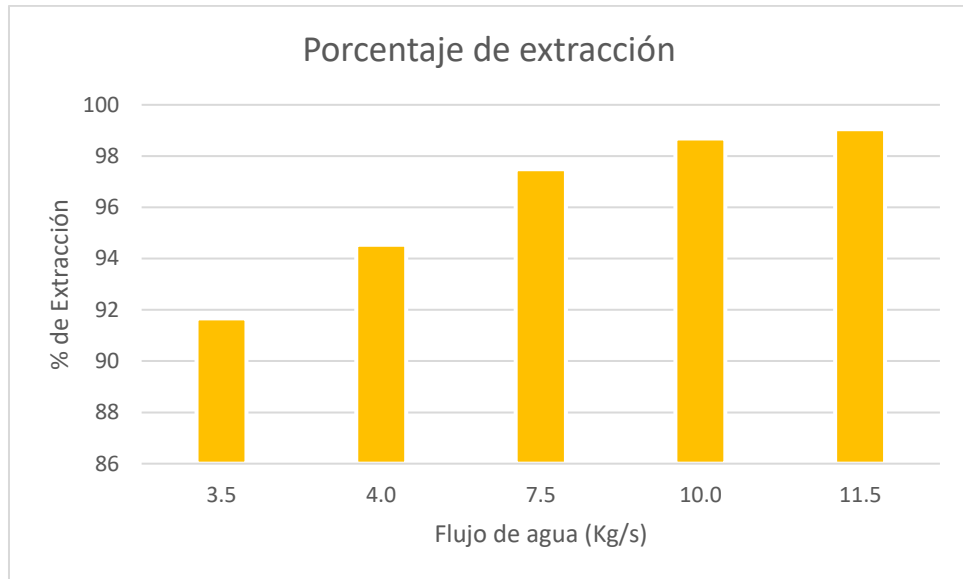


Figura 3.8 Porcentaje de extracción a distintas cantidades de agua

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

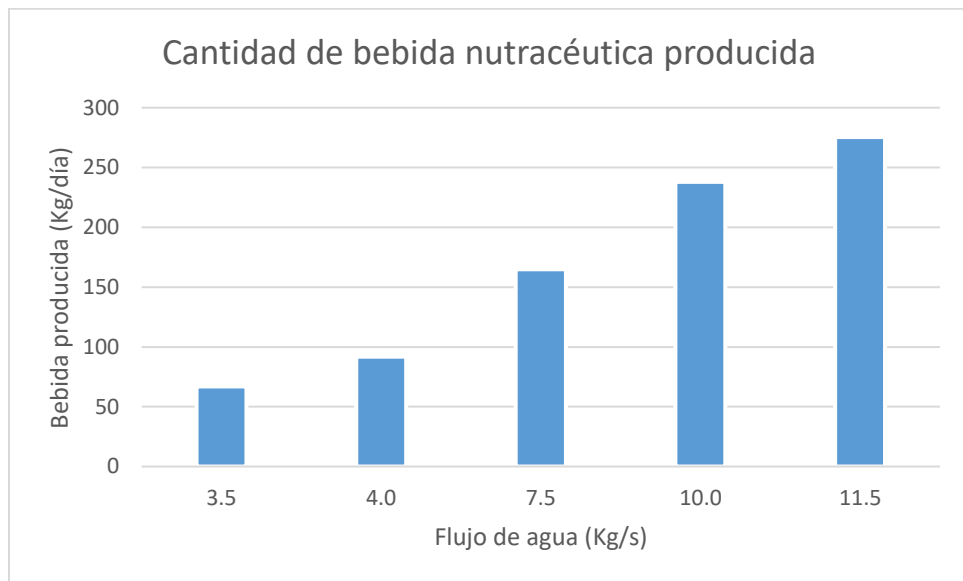


Figura 3.9 Cantidad de bebida producida a distintas cantidades de agua

Fuente: [Elaborado por Gabela & Villa, 2021]

De las figuras 3.8 y 3.9 se concluye que una mayor cantidad de agua a la propuesta experimentalmente permite obtener una mayor cantidad de bebida, pero con una concentración de compuestos menor. Puesto que el porcentaje de extracción máximo se llega con la dilución a razón de 1:10 sólido/líquido. Si se incrementa el contenido de agua, afectara negativamente la calidad del producto. Emplear la dilución usada en ensayos experimentales garantiza que se produzca

una bebida con la actividad antioxidante requerida y minimiza las pérdidas de compuestos en el sólido desechado.

3.6 Análisis Económico

Tabla 3.7 Costo de los equipos empleados en la simulación.

Operaciones Unitarias					
Nombre	Costo del equipo [USD]	Costo de instalación [USD]	Peso del equipo [LBS]	Peso instalado [LBS]	Costo utilidades [USD/HR]
R-101	30,000	48,300	2400	10786	0.1736
D-101	13,100	21,100	0	192	0
H-101	8,700	51,100	260	3691	0.0231
H-102	8,800	51,900	280	3840	0.3278
S-101	18,900	26,300	2700	4710	0.1736
M-101	15,000	27,200	320	2670	0.1736

El software Aspen Plus cuenta con la herramienta Aspen Process Economic Analyzer (APEA), permitiendo aproximar el costo de los equipos en base a las especificaciones de operación. Su base de datos ayuda a generar los precios de instalación, aproximando el precio que tendría todo el sistema. Existe una diferencia en los costos de equipos entre el trabajo actual y el previo, los valores obtenidos en ambos casos son 79.500 y 17.000 respectivamente. La diferencia se debe a que los equipos analizados cuentan con dimensiones mayores, porque son a escala industrial. Contrastando con el trabajo previo donde se consideró equipos más pequeños y solo se tomó en cuenta el costo del equipo, obviando sus costos de importación.

Tabla 3.8 Costo de utilidades.

Utilidades					
Nombre	Fluido	Flujo	Unidades de flujo	Costo por hora	Unidades de costo
Electricidad		56.796	KW	4.4016	USD/H
AP-UTIL-U-2	Vapor	175,467.3	BTU/H	0.3509	USD/H

Usando balances de energía es posible determinar los requerimientos energéticos, se ingresa el costo de la energía eléctrica de Ecuador con un valor de \$0.081/KWh para las industrias.

Tabla 3.9 Costos totales y análisis económico.

Resumen de costos	
Costo capital total [USD]	1'500,501
Costo operativo total [USD/Año]	1'347,820
Costo de la materia prima total [USD/Año]	43,699.1
Venta total del producto [USD/ Año]	8'128,040
Costos utilitarios totales [USD/ Año]	41,661.5
Utilidad total [USD/ Año]	8'086378.5
Tasa de retorno [Porcentaje/Año]	20
Periodo de operación [Año]	1.1131
Costo de equipos [USD]	79,500
Costo total de instalación [USD]	198,721

Evaluando los costos de forma anual se genera el CAPEX (Capital Expenditure) y OPEX (Operating Expenditure), el cual va ser el costo de implementación y el costo de operación respectivamente. En base a los costos se determinó un CAPEX de \$1.5 millones aproximadamente y un OPEX de \$1.3 millones por año. La ganancia por el producto es alta con respecto a la materia prima, el costo de la materia prima anual es de 43 mil y se obtienen ganancias de aproximadamente \$8 millones. La tasa de retorno es del 20% al año y es inferior al TIR del proyecto anterior (32%), indicando que la recuperación se vea en un tiempo más lejano puesto que la inversión es mucho mayor.

CAPÍTULO 4

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1 Conclusiones

- La caracterización de la materia prima permitió estimar propiedades físicas e interacciones termoquímicas que son importantes a tomar en cuenta en los procesos que involucran transferencia de masa y energía debido a los equilibrios que se forman durante las operaciones. A diferencia del proyecto integrador previo, que asumió a los componentes de la bebida como sólidos inertes no convencionales, dónde las interacciones no son tomadas en cuenta.
- Se validó la metodología implementada para ingresar componentes nuevos al simulador. La estimación de propiedades es más exacta para moléculas pequeñas, de bajo peso molecular y con menor cantidad de grupos funcionales. No obstante, se obtuvieron resultados próximos para moléculas complejas como el ácido cafeico y el ácido hexacosanoico.
- Para los equipos de procesamiento mecánico (molienda y tamizado) las diferencias en resultados no son significativas respecto al proyecto previo, pues estas operaciones se rigen por el tamaño de partícula de los sólidos alimentados al proceso. Sin embargo, en el tamizado se obtuvo una pérdida de componentes claves de la bebida menor al estimado por el proyecto previo.
- Las diferencias fueron notorias en equipos donde existe transferencia de masa (secador y extractor). Los parámetros fisicoquímicos estimados permitieron realizar análisis de sensibilidad en los equipos mencionados.
- Se logró incorporar la velocidad del aire del secado como parámetro a considerar para esta operación, parámetro que no se pudo emplear en el proyecto previo. Ajustando este parámetro se analizó la diferencia en la eficiencia del secado,

permaneciendo en 1 m/s para lograr remover un máximo de 97% de la humedad que ingresa como alimentación, permaneciendo el resto como humedad ligada. En el proyecto previo, la remoción es casi ideal al ser 99.8%.

- No se modificó la temperatura del aire de secado porque ello implica una curva de secado diferente. Como no se disponía de datos experimentales de la curva para otras temperaturas se varió la velocidad del aire de secado para así analizar su efecto.
- Para el extractor se analizó el efecto que tendría modificar la proporción de alimentación sólido líquido. Encontrándose que la proporción 1:10 es la más idónea, de esta se obtuvo un flujo de bebida de 275.34 Kg/día con una concentración de compuestos antioxidantes del 0.33%, en el trabajo previo se determinó un flujo de 225.75 Kg/día con una concentración del 0.06%.
- El análisis de sensibilidad permitió definir los parámetros de entrada para los equipos más importantes del proceso, de estos se determinó que lo más idóneo sea operar el secador a una velocidad de aire de 1 m/s para garantizar la mayor remoción de humedad, y para el digestor funcionar con una proporción de mezcla de 1:10 sólido-líquido para de esta forma extraer la mayor cantidad de compuestos antioxidantes posibles.
- Se aproximaron los costos de implementación y operación con un valor de \$1'500,501 y \$1'347,820 respectivamente, acercándose a un costo más real contrastando con el valor determinado en la materia integradora previa el cual fue de \$17,677.82 y 54,418.26 para CAPEX y OPEX respectivamente.
- El uso de simuladores para este tipo de industria será muy útil, permitirá aproximar procesos sin hacer uso de la experimentación, además de estimar costos según los requerimientos. En conclusión, el empleo de la metodología planteada y el uso de simuladores permitirá diseñar plantas industriales a partir de la materia prima.

4.2 Recomendaciones

- Se recomienda identificar las reacciones y hacer un análisis exhaustivo del digestor para realizar una simulación más acorde a la realidad.
- Contar con mayor información experimental disponible será de mucha ayuda, los análisis de sensibilidad pueden ser realizados a distintas condiciones de operación. De esta forma se podrá definir más variables de operación, para favorecer el funcionamiento de los equipos.
- En el proceso simulado se puede emplear más materia prima para simular un proceso a escala industrial, la simulación puede ahorrarse el paso de implementar una planta piloto. Ahorrándose costos de implementar este tipo de plantas, además de realizarse estudios de factibilidad de la industria planteada.
- Se puede añadir controladores a los equipos estudiados para mantener las condiciones óptimas (temperatura,) evitando que ocurra la degradación de los compuestos anteriormente analizados.

BIBLIOGRAFÍA

Abad, A., Palacios, J. (2020). *Escalamiento de un proceso para la elaboración de una bebida con propiedades nutraceuticas a escala piloto utilizando como materia prima Vernonanthur patens, Ilex guayusa y residuos de cacao* (Tesis de pregrado). Escuela Superior Politécnica del Litoral, Guayaquil.

Al-Malah, K. (2016). *Aspen Plus: Chemical Engineering Applications*. Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. 361-408.

Aspen Technology Inc. (2021). *Aspen Plus® Aspen Plus User Guide. Versión 10.2*.

Azzollini M. (2021). *What are nutraceuticals?* Veryweelfit.com. Recuperado de: <https://www.veryweelfit.com/what-are-nutraceuticals-5114425#citation-1>

Balentić J, Ačkar Đ, Jokić S, Jozinović A, Babić J, Miličević B, Šubarić D, Pavlović N. (2018). *Cocoa Shell: A By-Product with Great Potential for Wide Application*. *Molecules*. DOI: 10.3390/molecules23061404

Camacho C., Martínez D. (2015). *Determinación de Parámetros Físico-Químicos en la Deshidratación de las Hojas de Ilex Guayusa para la formulación de una Bebida Energética* (Tesis de pregrado). Escuela Superior Politécnica del Litoral, Guayaquil.

Coskun, O. (2016). *Separation techniques: Chromatography*. *Northern clinics of Istanbul*, 3(2), 156–160. <https://doi.org/10.14744/nci.2016.32757>

Chóez I., Ruíz O., Ruales J. & Manzano P. (2018): *Antioxidant activity optimization and GC-MS profile of aqueous extracts of Vernonanthur patens (Kunth) H. Rob. leaves*, *Natural Product Research*, DOI: 10.1080/14786419.2018.1539978

Chóez I., Viteri R., Barragán A., Quijano M. & Manzano P. (2021) *Effect of solvent-solvent partition on antioxidant activity and GC-MS profile of Ilex guayusa Loes. leaves extract and fractions*, *Natural Product Research*, DOI: 10.1080/14786419.2021.1882455

De la Torre, L.; Navarrete, H.; Muriel, P.; Macía, M; Balslev, H. (2008). *Enciclopedia de las Plantas Útiles del Ecuador*. ISBN: 978-9978-77-135-8

Dosta, M., Litster, and Heinrich, S. (2019) *Flowsheet simulation of solids processes: Current status and future trends*. *Advanced Powder Technology*. ISSN 0921-8831

Fernández, E. L. (2007). *Alimentos funcionales y nutraceuticos*. Sociedad Española de Cardiología. ISBN-13: 978-84-690-3758-4, 5-7.

García A., Baenas A., Benítez C., Stinco A., Meléndez D., Moreno A., & Ruales J. (2017). *Guayusa (Ilex guayusa L.) new tea: Phenolic and carotenoid composition and antioxidant capacity*. Journal of the Science of Food and Agriculture 97 (12):3929–36.

Gil, I.; López, J.; Zapata, J.; Leguizamón, A.; Niño, G. (2015). Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering. 10.1007/978-3-319-14812-0.

Gutiérrez M. Droguet M. (2002). *La cromatografía de gases y la espectrometría de masas: identificación de compuestos causantes de mal olor*. Boletín INTEXTER (U.P.C.) N° 122, 35-41.

Hemmati-Sarapardeh A, et al., Toward generalized models for estimating molecular weights and acentric factors of pure chemical compounds, International Journal of Hydrogen Energy (2017), <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.12.029>

Hernández C., Viera I., Morales A., Fernández J., & Rodríguez G. (2018). *Bioactive compounds in Mexican genotypes of cocoa cotyledon and husk*. Food Chemistry, 240, 831–839.

Jain P, Rathod M, Jain V, Vijayendraswamy S. (2018). *Current Regulatory requirements for Registration of Nutraceuticals in India and USA*. International Journal of Drug Regulatory Affairs 6(2): 22-29

Jarrín, P. (2020). Los nutracéuticos como un componente económico en Ecuador y el Mundo. Ibarra: Rayuela, 297-308.

Kalra, E. K. (2003). *Nutraceutical-definition and introduction*. AAPS PharmSci, 27-28

Manzano P., Orellana T., Miranda M., Abreu J., Ruíz O., & Peralta E. (2013). *Algunos parámetros farmacognósticos de Vernonia patens (Kunth) H. Rob. (Asteraceae) endémica de Ecuador*. Revista Cubana de Plantas Medicinales, 18(1), 131-139.

Manzano P., Quijano M., Chóez I., Barragan A., Viteri R., Martínez D., Camacho C. & Miranda M. (2018). *Effect of drying methods on physical and chemical properties of Ilex guayusa leaves*. Revista Facultad Nacional de Agronomía Medellín. 71. 8617-8622. 10.15446/rfnam.v71n3.71667.

Olayiwola, T., Ogolo, O., & Yusuf, F. (2020). *Modeling the acentric factor of binary and ternary mixtures of ionic liquids using advanced intelligent systems*. Fluid Phase Equilibria, 112587. doi:10.1016/j.fluid.2020.112587

Pérez, H. (2006). *Nutracéuticos: componente emergente para el beneficio de la salud*. ICIDCA. Sobre los Derivados de la Caña de Azúcar, vol. XL, núm. 3, 20-28.

Perry, R. H., & Green, D. W. (2008). Perry's chemical engineers' handbook. New York: McGraw-Hill.

Pino, S.; Aguilar, H.; Apolo, G.; Sisalema, L. (2018). *Aporte del sector agropecuario a la economía del Ecuador. Análisis crítico de su evolución en el período de dolarización. Años 2000 – 2016*. Revista Espacios. Vol. 39 (Nº 32).

ProEcuador (2014). *Análisis sectorial de nutraceuticos*. Instituto de Promoción de Exportaciones e Inversiones.

Quijano M., Chóez I., Viteri R., Barragán L., Sosa D., Manzano P. (2021). Effect of Cocoa Bean Shell Addition on Metabolite Profile and Antioxidant Activity of Herbal Infusions. Hindawi

Suarez, D. & Morales, Y. (2018) *Principios básicos de la cromatografía líquida de alto rendimiento para la separación y análisis de mezclas*. Semilleros: Formación Investigativa. 4(1), 7-14. Recuperado de: <http://hdl.handle.net/20.500.11839/7731>

Tenea G., Arias R., Berutti L., Chalampunte D., Galli A., Jarrín P., Manzano P., Pereira G., Pinto N., Sánchez de Céspedes I. (2019). Nutraceuticos y Nutraingredientes; el futuro de los alimentos inteligentes. Ibarra: Rayuela, 297-308.

Universidad Nacional de Colombia (2012). COL000356183 – *Vernonanthura patens* (Kunth) H. Rob – Asteraceae. Recuperado de: <http://www.biovirtual.unal.edu.co/es/colecciones/detail/598963/>

Watanasiri, S. (2011). Development of on-demand critically evaluated thermophysical properties data in process simulation. Pure and Applied Chemistry, 83(6), 1255-1281.

APÉNDICES

Tabla A1. Resumen de los mezcladores (validación).

	Unidades	AC-UD	CCL4-1	H2O-1	OUT-1	BOTTOM-1	AC-DB	CCL4-2	H2O-2	OUT-2	BOTTOM-2
Temperatura	°C	25	60	60	59.91	59.91	25	60	60	57.76	57.76
Presión	atm	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Entalpía molar	cal/mol	-156729.45	-29484.13	-67639.98	-29952.23	-68489.43	-40723.59	-29484.13	-67639.98	-29710.97	-67391.11
Densidad	gm/cc	3.76	1.52	0.98	1.52	1.01	4.83	1.52	0.98	1.53	0.98
Flujo másico	kg/h	1	10	10	10.0196	10.9804	1	10	10	10.09	10.91
Cafeico - DB	kg/h	0	0	0	0.0000	0.0000	1	0	0	0.11	0.89
Cafeico – UD3	kg/h	1	0	0	0.0320	0.9680	0	0	0	0.00	0.00
Agua	kg/h	0	0	10	0.0044	9.9956	0	0	10	0.00	10.00
CCl ₄	kg/h	0	10	0	9.9832	0.0168	0	10	0	9.98	0.02

Tabla A2. Balances obtenidos de la simulación.

	Unidades	COCOA	GUAYUSA	PATENS	1	2	3	4	5	6
Desde					-	D-101		H-101	D-101	M-101
Hacia		-	-	-	D-101	M-101	H-101	D-101		S-101
Clase de corriente		MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD
Corriente total										
Temperatura	°C	25	25	25	25.00	25.0047596	25	45	30.194	25.00
Presión	atm	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Fracción líquida		0.0850	0.8233	0.7447	0.5523	0.0426	0	0	0	0.0426
Fracción sólida		0.9149	0.1766	0.2552	0.4476	0.9573	0	0	0	0.9573
Densidad	gm/cc	0.9909	0.9682	0.9960	0.9848	0.9739	0.0011	0.0010	0.0011	0.9739
Flujo de entalpía	kcal/h	-3479.76	-2558.26	-2314.10	-8350.06	-1580.44	-37859.81	-34461.01	-41229.83	-1578.11
Flujo másico	kg/día	19.8306	19.9999	20	59.8305	27.9731	16800	16800	16831.85	27.973
AGUA	kg/día	1.4	16.1284	14.6	32.1284	0.2710	283.416	283.416	315.27	0.2710
CHLOROGE	kg/día	0	0.1007	0	0.1007	0.1007	0	0	0	0.1007
CAFFE-01	kg/día	0	0	0.0246	0.0246	0.0246	0	0	0	0.0246
RUTIN	kg/día	0	0.0036	0	0.0036	0.0036	0	0	0	0.0036
NEOCHLOR	kg/día	0	0.0331	0	0.0331	0.0331	0	0	0	0.0331
CAFFEOYL	kg/día	0	0.0208	0	0.0208	0.0208	0	0	0	0.0208
FERULOYL	kg/día	0	0.0025	0	0.0025	0.0025	0	0	0	0.0025
QUERCETI	kg/día	0	0.011	0	0.011	0.011	0	0	0	0.011
ISOCHLOR	kg/día	0	0.0694	0	0.0694	0.0694	0	0	0	0.0694
KAEMPFER	kg/día	0	0.0043	0	0.0043	0.0043	0	0	0	0.0043
DICAFFEY	kg/día	0	0.0137	0	0.0137	0.0137	0	0	0	0.0137
CAFFE-02	kg/día	0	0.0797	0	0.0797	0.0797	0	0	0	0.0797
C4H9N-01	kg/día	0	0	0.0066	0.0066	0.0066	0	0	0	0.0066
BIOMASS	kg/día	18.1436	3.5327	5.1048	26.7811	26.7811	0	0	0	26.7810871
L-THREAC	kg/día	0	0	0.0414	0.0414	0.0414	0	0	0	0.0414
MALIC-01	kg/día	0	0	0.042	0.042	0.042	0	0	0	0.042

L-ASP-01	kg/día	0	0	0.0474	0.0474	0.0474	0	0	0	0.0474
N-HEP-01	kg/día	0	0	0.0366	0.0366	0.0366	0	0	0	0.0366
(Z)-O-01	kg/día	0	0	0.0618	0.0618	0.0618	0	0	0	0.0618
2ALPMANN	kg/día	0	0	0.0174	0.0174	0.0174	0	0	0	0.0174
CERAT-01	kg/día	0	0	0.009	0.009	0.009	0	0	0	0.009
BAMYRIN	kg/día	0	0	0.0084	0.0084	0.0084	0	0	0	0.0084
GALLI-01	kg/día	0.1154	0	0	0.1154	0.1154	0	0	0	0.1154
(-)-C-01	kg/día	0.033	0	0	0.033	0.033	0	0	0	0.033
C15H1-01	kg/día	0.1386	0	0	0.1386	0.1386	0	0	0	0.1386
AIRE	kg/día	0	0	0	0	0	16516.584	16516.584	16516.584	0
PSD										
0.05 - 1.715 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0.21622678
- 3.38 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0.59434356
- 5.045 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0.18396577
- 6.71 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0.00545112
- 8.375 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	1.28E-05
- 10.04 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	2.11E-09
- 11.71 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	2.35E-14
- 13.37 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0
- 15.04 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0
- 16.7 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0
- 18.36 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0
- 20.03 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0
- 21.7 mm		5.55E-17	0	0	3.76E-17	3.76E-17	-	-	-	0
- 23.36 mm		1.58E-11	0	0	1.07E-11	1.07E-11	-	-	-	0
- 25.02 mm		3.27E-07	0	0	2.21E-07	2.21E-07	-	-	-	0
- 26.69 mm		0.00046621	0	0	0.00031585	0.00031585	-	-	-	0
- 28.36 mm		0.0495184	0	0	0.03354762	0.03354762	-	-	-	0
- 30.02 mm		0.457993	0	0	0.31028008	0.31028008	-	-	-	0
- 31.68 mm		0.446027	5.55E-17	5.55E-17	0.30217338	0.30217338	-	-	-	0

- 33.35 mm		0.0455901	1.47E-11	1.47E-11	0.03088628	0.03088628	-	-	-	0
- 35.02 mm		0.00040385	3.10E-07	3.10E-07	0.0002737	0.0002737	-	-	-	0
- 36.68 mm		2.66E-07	0.00044983	0.00044983	0.00014526	0.00014526	-	-	-	0
- 38.34 mm		1.20E-11	0.0485121	0.0485121	0.01564623	0.01564623	-	-	-	0
- 40.01 mm		0	0.455027	0.455027	0.14675632	0.14675632	-	-	-	0
- 41.67 mm		0	0.449044	0.449044	0.14482667	0.14482667	-	-	-	0
- 43.34 mm		0	0.0465481	0.0465481	0.0150128	0.0150128	-	-	-	0
- 45.01 mm		0	0.00041867	0.00041867	0.00013503	0.00013503	-	-	-	0
- 46.67 mm		0	2.80E-07	2.80E-07	9.02E-08	9.02E-08	-	-	-	0
- 48.34 mm		0	1.29E-11	1.29E-11	4.15E-12	4.15E-12	-	-	-	0
- 50 mm		0	0	0	0	0	-	-	-	0

	Unidades	7	8	9	10	11	12
Desde		S-101	S-101		H-102	R-101	R-101
Hacia			R-101	H-102	R-101		
Clase de corriente		MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD	MCINCPSD
Corriente Total							
Temperatura	°C	25.0047	25.004772	25	60	60.140	60.140
Presión	atm	1	1	1	1	1	1
Fracción líquida		0.0426	0.0426	1	1	1	0.0909
Fracción sólida		0.9573	0.9573	0	0	0	0.9091
Densidad	gm/cc	0.9739	0.9739	0.9947	0.9797	0.9790	0.9799
Flujo de entalpía	kcal/hr	-16.46	-1559.44	-43703.04	-43300.17	-46116.13	12726989.2
Flujo másico	kg/día	0.2919	27.6812	276.8112	276.8112	275.3406	29.1518
AGUA	kg/día	0.0028	0.2682	276.8112	276.8112	274.4379	2.6415
CHLORGE	kg/día	0.0011	0.0996	0	0	0.0987	0.0009
CAFFE-01	kg/día	0.0003	0.0243	0	0	0.0241	0.0002
RUTIN	kg/día	0.0000	0.0036	0	0	0.0035	0.0000
NEOCHLOR	kg/día	0.0003	0.0328	0	0	0.0324	0.0003
CAFFEOYL	kg/día	0.0002	0.0206	0	0	0.0204	0.0002
FERULOYL	kg/día	0.0000	0.0025	0	0	0.0025	0.0000
QUERCETI	kg/día	0.0001	0.0109	0	0	0.0108	0.0001
ISOCHLOR	kg/día	0.0007	0.0687	0	0	0.0680	0.0007
KAEMPFER	kg/día	0.0000	0.0043	0	0	0.0042	0.0000
DICAFFEY	kg/día	0.0001	0.0136	0	0	0.0134	0.0001
CAFFE-02	kg/día	0.0008	0.0789	0	0	0.0781	0.0008
C4H9N-01	kg/día	0.0001	0.0065	0	0	0.0065	0.0001
BIOMASS	kg/día	0.2795	26.5016	0	0	0.0000	26.5016
L-THREAC	kg/día	0.0004	0.0410	0	0	0.0406	0.0004
MALIC-01	kg/día	0.0004	0.0416	0	0	0.0412	0.0004

L-ASP-01	kg/día	0.0005	0.0469	0	0	0.0465	0.0004
N-HEP-01	kg/día	0.0004	0.0362	0	0	0.0359	0.0003
(Z)-O-01	kg/día	0.0006	0.0612	0	0	0.0606	0.0006
2ALPMANN	kg/día	0.0002	0.0172	0	0	0.0171	0.0002
CERAT-01	kg/día	0.0001	0.0089	0	0	0.0088	0.0001
BAMYRIN	kg/día	0.0001	0.0083	0	0	0.0082	0.0001
GALLI-01	kg/día	0.0012	0.1142	0	0	0.1131	0.0011
(-)-C-01	kg/día	0.0003	0.0327	0	0	0.0323	0.0003
C15H1-01	kg/día	0.0014	0.1372	0	0	0.1358	0.0013
AIRE	kg/día	0.0000	0.0000	0	0	0.0000	0.0000
PSD							
0.05 - 1.715 mm		0	0.2185	-	-	-	0.2185
- 3.38 mm		0	0.6006	-	-	-	0.6006
- 5.045 mm		0.4764	0.1809	-	-	-	0.1809
- 6.71 mm		0.5223	0	-	-	-	0
- 8.375 mm		0.00122	0	-	-	-	0
- 10.04 mm		2.03E-07	0	-	-	-	0
- 11.71 mm		2.26E-12	0	-	-	-	0
- 13.37 mm		0	0	-	-	-	0
- 15.04 mm		0	0	-	-	-	0
- 16.7 mm		0	0	-	-	-	0
- 18.36 mm		0	0	-	-	-	0
- 20.03 mm		0	0	-	-	-	0
- 21.7 mm		0	0	-	-	-	0
- 23.36 mm		0	0	-	-	-	0
- 25.02 mm		0	0	-	-	-	0
- 26.69 mm		0	0	-	-	-	0
- 28.36 mm		0	0	-	-	-	0
- 30.02 mm		0	0	-	-	-	0
- 31.68 mm		0	0	-	-	-	0

- 33.35 mm		0	0	-	-	-	0
- 35.02 mm		0	0	-	-	-	0
- 36.68 mm		0	0	-	-	-	0
- 38.34 mm		0	0	-	-	-	0
- 40.01 mm		0	0	-	-	-	0
- 41.67 mm		0	0	-	-	-	0
- 43.34 mm		0	0	-	-	-	0
- 45.01 mm		0	0	-	-	-	0
- 46.67 mm		0	0	-	-	-	0
- 48.34 mm		0	0	-	-	-	0
- 50 mm		0	0	-	-	-	0

Tabla A3. Resumen de la distribución del tamaño de partículas a lo largo del proceso.

PSD		1	2	6	7	8	12	COCOA	GUAYUSA	PATENS
D10	mm	28.7099	28.7099	0.820025	3.72947	0.811989	0.811989	28.5368	38.5318	38.5318
D20	mm	29.2465	29.2465	1.59005	4.07894	1.57398	1.57398	28.9004	38.8977	38.8977
D25	mm	29.5148	29.5148	1.80961	4.25368	1.8023	1.8023	29.0821	39.0806	39.0806
D50	mm	30.8788	30.8788	2.50997	5.12011	2.49535	2.49535	29.991	39.9954	39.9954
D63	mm	31.6061	31.6061	2.87975	5.54087	2.86127	2.86127	30.483	40.4846	40.4846
D75	mm	38.9886	38.9886	3.21032	5.91701	3.18839	3.18839	30.9235	40.9222	40.9222
D80	mm	39.5559	39.5559	3.35039	6.07639	3.327	3.327	31.1101	41.1076	41.1076
D90	mm	40.6995	40.6995	4.18939	6.39514	4.12451	4.12451	31.4834	41.4784	41.4784
D95	mm	41.2743	41.2743	4.64192	6.55452	4.58475	4.58475	31.67	41.6638	41.6638
D100	mm	43.2441	43.2441	6.40846	7.01422	5.0358	5.0358	33.3283	43.3192	43.3192
D25:D75		0.757011	0.757011	0.563686	0.71889	0.565271	0.565271	0.940456	0.954999	0.954999