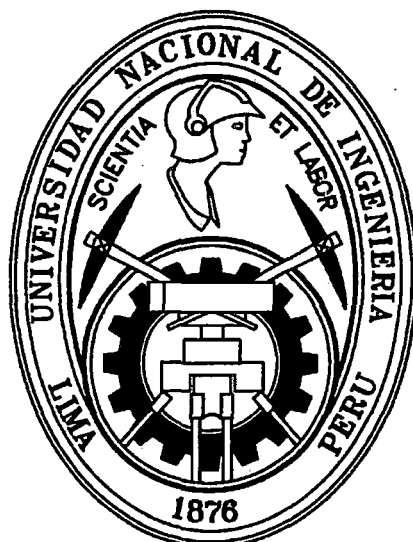


UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y TEXTIL

Sección de Posgrado



“ESTUDIO EXPERIMENTAL Y MODELAMIENTO MATEMÁTICO
PARA EL PROCESO DE EXTRACCIÓN POR LOTES POR
ARRASTRE CON VAPOR DE AGUA DEL ACEITE ESENCIAL
LIBRE DEL *Schinus molle Linneo*”

TESIS

PARA OPTAR EL GRADO ACADÉMICO DE MAESTRO EN
CIENCIAS CON MENCIÓN EN INGENIERÍA QUÍMICA

PRESENTADO POR

FREDDY CIRO TINEO CORDOVA

LIMA-PERU

Digitalizado por:

2012

Consortio Digital del
Conocimiento MebLatam,
Hemisferio y Dalse

Dedico esta tesis a mi familia,
por su paciencia y tolerancia.

**“ESTUDIO EXPERIMENTAL Y MODELAMIENTO MATEMÁTICO PARA EL
PROCESO DE EXTRACCIÓN POR LOTES POR ARRASTRE CON VAPOR
DE AGUA DEL ACEITE ESENCIAL LIBRE DEL *Schinus Molle Linneo*”**

INDICE

INTRODUCCIÓN

CAPITULO I

Página

PLANTA SCHINUS MOLLE LINNEO

1

1.1. El molle como planta.....	1
1.1.1. Descripción y características como planta	1
1.1.2. Clasificación sistemática.....	3
1.1.3. Usos del fruto del molle	3
1.1.4. Aplicaciones del aceite esencial del molle.....	4
1.1.5. Forma de encontrar el aceite en las plantas	4

CAPITULO II

ACEITES ESENCIALES

5

2.1 Definición	5
2.1.1 Composición química del aceite del Schinus molle L.....	5
2.1.2 Propiedades fisicoquímicas de los componentes del aceite de molle.....	7
2.1.3 Características fisicoquímicas del aceite esencial de molle	11
2.1.4 Propiedades termodinámicas.....	11
2.1.4.1 Schinus molle L.....	12
2.2 Métodos de extracción de aceites esenciales.....	14
2.2.1 Destilación por arrastre con vapor.....	15
2.3 Fundamentos de la destilación con arrastre de vapor	17
2.4 Principios termodinámicos.....	19
2.4.1 Equilibrio Líquido-Vapor (E.L.V).....	19
2.4.2 Ley de Raoult y la ley de Dalton.....	20
2.4.3 Diagramas de equilibrio líquido – vapor.....	22
2.4.4 Cálculo del punto de rocío y del punto de burbuja.....	23
2.4.5 Equilibrio Líquido-Vapor mediante la ley de Raoult modificada.....	25
2.4.6 Equilibrio Líquido-Vapor a partir de las correlaciones del valor de la constante de partición k	25

CAPITULO III

MODELAMIENTO	28
3.1. Teoría del modelamiento.....	28
3.2. Mecanismos en la extracción del aceite esencial.....	32
3.2.1. Análisis del proceso en la extracción del aceite esencial.....	36
3.2.1.1. En el equipo (sistema).....	36
3.2.1.2. Durante el proceso.....	36
3.2.1.3. Transferencia de masa del aceite desde la partícula hacia la capa superficial	38
3.2.1.4. Transferencia de masa del aceite desde la capa superficial del fruto hacia la corriente de vapor.....	39

CAPITULO IV

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL	40
4.1. Equipo destilador de aceite esencial.....	40
4.2. Descripción del proceso y requerimiento del equipo extractor.....	42
4.3. Tratamiento de la materia prima molle.....	42
4.4. Principales variables y parámetros de operación	45
4.5. Diseño experimental.....	45
4.6. Resultados experimentales.....	47
4.6.1. Localización del aceite esencial en el fruto del molle.....	47
4.6.2. Principales componentes del aceite esencial.....	48
4.6.3. Efecto de la densidad aparente en el rendimiento.....	49
4.6.4. Efecto del flujo de vapor en el rendimiento.....	49
4.6.5. Tiempo óptimo de operación.....	50

CAPITULO V

ANALISIS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES	51
5.1. Análisis de los resultados.....	51
5.2. Tendencias de las curvas experimentales.....	52
5.3. Mecanismos de la extracción experimental.....	54
5.4. Discusión de los resultados.....	58
5.4.1. Discusión de los resultados experimentales.....	58

CAPITULO VI

MODELAMIENTO MATEMÁTICO DEL PROCESO DE EXTRACCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DEL SCHINUS MOLLE LINNEO.	59
6.1. Modelamiento del proceso de extracción del aceite esencial Schinus molle Linneo.....	59
6.2. Modelamiento del proceso de destilación de una etapa de una mezcla de agua y aceite esencial del molle (re-destilación del aceite).....	65
6.3. Discusión de los resultados considerando el modelo matemático.....	75
CONCLUSIONES	76
RECOMENDACIONES.....	78
BIBLIOGRAFIAS.....	79
ANEXOS	
Anexo I : Análisis histológico del fruto del molle	83
Anexo II : Análisis cromatográfico del aceite de molle	90
Anexo III : Análisis fisicoquímico de aceite esencial de molle	107
Anexo IV : Tablas y gráficas de propiedades termodinámicas.....	108
Anexo V : Pseudocódigo del Algoritmo solución.....	113
Anexo VI : Programa principal: Modelamiento de la extracción del aceite esencial del molle.....	116
Anexo VII : Funciones del programa principal.....	118
Anexo VIII : Resultados del programa principal (que resuelve el modelo)...	122
Anexo IX : Tablas y gráficas de comparación de resultados entre el proceso experimental y el modelamiento matemático de la extracción con vapor del aceite libre del molle.....	128
Anexo X : Tablas de las pruebas experimentales	137
Anexo XI : Gráficas de las pruebas experimentales.....	147
Anexo XII : Tablas y gráficas de las pruebas de repetitividad.....	152

“ESTUDIO EXPERIMENTAL Y MODELAMIENTO MATEMÁTICO PARA EL PROCESO DE EXTRACCIÓN POR LOTES POR ARRASTRE CON VAPOR DE AGUA DEL ACEITE ESENCIAL LIBRE DEL *Schinus Molle Linneo*”.

RESUMEN

El presente trabajo tiene como objetivo realizar un estudio experimental del proceso de extracción del aceite esencial, para ello se realizan pruebas experimentales, luego se analizan los datos obtenidos y se plantean un conjunto de ecuaciones matemáticas usando los conceptos de la termodinámica, de la transferencia de masa y la transferencia de calor, que permite determinar un modelo matemático que describe el proceso de extracción del aceite esencial del molle por arrastre con vapor de agua.

Mediante el análisis histológico realizado al fruto del molle se determinó que el aceite esencial se encuentra almacenado en las cavidades secretoras del mesocarpio, confirmando que existe una fracción de aceite esencial en *estado libre* situado entre el mesocarpio y el endocarpio, que al ser descascarado el mesocarpio sin romper la semilla, el aceite queda liberado y es arrastrado por el vapor de agua obteniéndose un rendimiento de 55 ml de aceite/kg de molle la cual se extrae en un intervalo de tiempo relativamente pequeño comprendido entre 6 a 10 minutos, esta fracción representa aproximadamente el 84% del peso total del aceite contenido en el fruto; esta etapa está gobernada por la evaporación instantánea. En el interior de la semilla (*estado intrapartícula*) existe otra fracción menor de aceite con un rendimiento de 10,5 ml de aceite / kg de molle (16% del peso total de aceite) que se extrae en un tiempo de operación muy prolongado comprendido entre 80 a 100 minutos; esta etapa está gobernado por el modelo de difusión del aceite, debiendo atravesar la pared celular de la semilla.

El otro objetivo de este trabajo es realizar el modelamiento matemático de la extracción del *aceite libre* (primera etapa) por arrastre con vapor de agua, porque ésta etapa contiene la mayor cantidad de aceite y se obtiene en un periodo de tiempo muy pequeño, además desde el punto de vista industrial ésta etapa es la más productiva. La segunda etapa (aceite intrapartícula) es menos importante por su bajo rendimiento y por requerir mayor tiempo de operación en comparación con la primera etapa.

La variable principal del proceso es el volumen de aceite extraído, los parámetros del proceso de extracción considerados en este estudio fueron: El flujo de vapor que varía entre 1,93 a 3,4 kg/h.; el peso del fruto de molle que varía entre 1,0 a 4,0 kg; la densidad del lecho que varía entre 0,38 a 0,48 g. de fruto de molle / ml de alambique.

Para plantear el modelamiento matemático es necesario saber la composición química del aceite esencial de molle, ésta se determina mediante el análisis por cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas (GC/MS). En las graficas de las pruebas experimentales la *primera etapa de la curva* (tiempo-volumen de aceite extraído) tiene una tendencia lineal (aceite libre), que corresponde a una tasa de extracción constante.

“EXPERIMENTAL STUDY AND MATHEMATICAL MODELLING FOR EXTRACTION PROCESS BY BATCH STEAM DISTILLATION OF FREE ESSENTIAL OIL FROM *Schinus molle* Linneo.”

SUMMARY

The present work aims to perform an experimental study of the essential oil extraction, for this reason experimental tests are performed, then the data is analyzed and present a set of mathematical equations using thermodynamics, mass transfer and heat transfer, allowing us to determine a mathematical model describing the extraction process molle essential oil by steam distillation of water.

By histological analysis performed at the fruit of the pepper tree was determined that the oil is stored in secretory cavities of the shell, confirming our hypothesis that there is an essential oil fraction in **free state** located between the mesocarp and endocarp and to be hulled without breaking seed, oil is released and is entrained by the water vapor obtained in a yield of 55 ml of oil / kg molle which is extracted in a relatively small time interval between 6 to 10 minutes, this fraction represents about 84% of the total weight of the oil contained in the fruit, this stage is controlled by flash evaporation. In the interior of the seed (intraparticle state) there is another smaller fraction of oil in a yield of 10.5 ml of oil / kg molle (16% total weight of oil) is removed in a very long operating time comprised 80 to 100 minutes, this stage is governed possibly by diffusion model oil and must penetrate the cell wall of the seed.

The other objective of this work is to perform the mathematical modeling of free oil extraction (first stage) by stripping with steam, because this stage has the largest amount of oil and is obtained in a very small time period, also from the industrial point of view this is the most productive stage. The second stage (intraparticle oil) is less important because of its low yield and requires longer operating time compared to the first stage.

The primary endpoint process is the volume of oil extracted, the extraction process parameters considered in this study were: steam flow ranges from 1.93 to 4.0 kg / h., The weight of the molle fruit ranges from 1.0 to 4.0 kg, the bed density ranges from 0.38 to 0.48 grams of fruit molle / ml still.

To raise the mathematical modeling is necessary to know the chemical composition of essential oil molle, it is determined by analysis by gas chromatography coupled to mass spectrometry (GC / MS). In the graphs of experimental tests the first stage of the curve (volume of extracted oil-time) has a linear trend (free oil), which corresponds to a constant extraction rate.

INTRODUCCIÓN

Una de las materias primas con mayor contenido de aceite esencial es el fruto del *Schinus molle*, ésta característica motiva el presente estudio, además el molle es una planta oriunda del Perú, que tiene muchas propiedades para uso farmacéutico, para perfumería, alimento, etc. Se podría pensar que por la gran biodiversidad que tiene el Perú, deberíamos ser un país exportador de aceites esenciales, pero en realidad eso no ocurre, sólo se exporta el aceite esencial de limón desde los años 1970 hasta la actualidad; otro aceite esencial que tendría un gran potencial comercial sería el que se extrae del fruto del Molle.

Para la producción de los aceites esenciales, el método más utilizado en la actualidad es la extracción por arrastre con vapor, este método sigue siendo el más económico y fácil de implementar. Existen nuevas tecnologías que podrían mejorar el proceso de extracción: la extracción con fluidos en estado supercrítico, extracción por microondas, uso de ultrasonidos en el proceso extractivo de hidrodestilación; estas tecnologías no son implementados en nuestro país por ser muy costoso.

El presente trabajo tiene como objetivo determinar la localización exacta del aceite esencial en el fruto mediante una prueba histológica, determinar experimentalmente los mecanismos que controlan el proceso y formular un modelo matemático que permita describir el proceso de extracción del aceite libre del molle por arrastre con vapor.

Con respecto a la investigación experimental no hay referencias de estudios que hayan determinado experimentalmente los mecanismos fenomenológicos que controlen este proceso y menos aún no hay referencias de estudios anteriores sobre el modelamiento matemático de extracción por arrastre con vapor del aceite esencial de Molle.

Nuestro interés por este tema nace de la gran cantidad de aceite esencial que contiene el fruto del molle (aproximadamente 6.5%), generalmente el aceite esencial en estas materias primas varían entre 1 a 3%, para frutos y hojas.

CAPÍTULO I

PLANTA SCHINUS MOLLE LINNEO

1.1 . El molle como planta

1.1.1. Descripción y Características de la Planta.

Schulte A. [1] y Reynel [2] dan la siguiente descripción científica.

Nombre científico : Schinus molle linneo.

Nombre común : Molle, Mulli, Cullash, o Pimiento falso.

Sinónimos botánicos: Schinus areira linneo.

DESCRIPCIÓN

Dendrología: Árbol de tamaño mediano, alcanzando alturas desde 6 hasta 10 metros en promedio, el diámetro a la altura del pecho varía desde 25 hasta 45 cm de diámetro, fuste irregular con presencia de nudos, ramificación desde el primer o segundo tercio, la copa es globosa.

Corteza externa: Agrietada, color marrón claro, hay ritidoma cartáceo que se desprende en placas rígidas rectangulares.

Corteza interna: homogénea, de color rosado blanquecino, marrón claro al oxidarse; hay una escasa secreción de látex blanquecino, con tenue olor resinoso.

Ramas terminales: pendulares, con sección circular, de 3 a 5 mm de diámetro, color verde o cenizo, muy regulares, lisos y resinosos.

Hojas: compuestas imparipinnadas, alternas y dispuestas helicoidalmente, de 20 a 30 cm de longitud, con 16 a 20 pares de folios, lanceolados de aproximadamente de 2,5 a 4,0 cm de longitud por 0,4 a 0,8 cm de ancho, el ápice agudo acuminado, base asimétrica, el borde irregularmente dentado, la nervación pinnada, con 22 a 26 pares de nervios secundarios; el nervio central impreso en haz y envés, al estrujar desprende olor a resina.

Inflorescencias: en panículas axilares laxas de 10 a 15 cm de longitud, multifloras.

Flores: La especie es dioica, flores pequeñas, actinomorfas, unisexuales de aproximadamente 3 mm de longitud incluyendo el pedicelo, el cáliz de color verde de 1,0 mm de longitud, con 5 pétalos libres de 1 a 2 mm de longitud; las flores masculinas están conformados por 8 a 10 estambres con filamentos libres insertados en un disco nectarífero;

las flores femeninas están conformados por 8 a 10 estaminodios y un pistilo de 1,0 mm de longitud, con ovario súpero y tres estilos de 0,3 mm de longitud.

Frutos: son drupas esféricas, del tamaño de una alverja de 4 a 5 mm de diámetro, con el epicarpio de color rojo brillante (ver Figura 1), los frutos secos se estrujan con la mano para liberarse del epicarpio (cáscara); el mesocarpio poco desarrollado contiene una pulpa de sabor dulce por su alto contenido de azúcares, es aromático y ligeramente picante debido a los aceites esenciales que afloran. El endocarpio es leñoso y contiene una semilla. El peso promedio de los frutos es de 0,034 g.



Figura 1. Fruto del Schinus Molle Linneo

Semilla: es única y está rodeada por el endocarpio, es similar al tamaño de un grano de pimienta, de forma redonda aplanada de unos 3 mm de diámetro, la superficie es lisa y es de color marrón oscuro, tiene un embrión muy desarrollado. Existe una gran variabilidad en el tamaño y peso de la semilla, por esta razón el número de semillas por kilogramo oscila entre 25 000 a 65 000 unidades.

Fenología: La floración se registra mayormente entre los meses de enero y marzo; la fructificación se produce entre los meses de abril y junio.

Distribución ecológica: Es un árbol silvestre muy difundido en Sudamérica especialmente en el Perú, Bolivia y Argentina. En nuestro país el molle crece en los valles de la costa y en los valles de la vertiente occidental de los Andes, hasta los 2750 m.s.n.m.

Lo encontramos en todos los departamentos de la Costa, Sierra y con menor frecuencia en la ceja de Selva. Para su crecimiento y desarrollo se requiere de un clima cálido y seco.

1.1.2. Clasificación Sistemática

Según Gilg Engler [3] la clasificación sistemática del molle es la siguiente:

- División : Fanerógamas
- Sub-División : Angiospermas
- Clase : Dicotiledóneas
- Sub-Clase : Arquiclamídeas
- Orden : Sapindales
- Familia : Anacardiáceas
- Género : Schinus
- Especie : Molle

El molle es un árbol cuyo fruto recién se comienza a estudiar y a explotar, hay pocos datos estadísticos sobre la producción de su semilla a nivel nacional.

1.1.3. Usos del Fruto de Molle

Reynel [2], manifiesta que nuestros antepasados atribuyeron a las hojas, corteza y semilla del Molle varias propiedades medicinales, lo utilizaron para curar una serie de enfermedades.

Torres [4], indica que el fruto del molle fue utilizado durante el Imperio Incaico para la preparación de chicha, tradición que hasta la actualidad usan los pobladores de la sierra central del país. El fruto del molle se puede utilizar para la elaboración de alcohol etílico y vinagre por su contenido de azúcares.

Martínez [5], del fruto se obtiene el aceite esencial de Molle, cuyo constituyente principal es el Mirceno (2-6 dimetil 1:5:7 octadieno), un 22% de sustancias terpénicas y aproximadamente 8% de fenoles. El rendimiento en la extracción del aceite esencial fluctúa entre 2.3 a 3.5 % (g de aceite/ g de fruto), según Cuya [6] esta fluctuación depende de una serie de factores tales como: las condiciones geobotánicas (calidad del suelo, luz, humedad y la altitud), época de siembra, el método de cultivo (uso de fertilizantes y productos agroquímicos), periodicidad en el riego, las épocas de recolección de los frutos, el almacenamiento del material vegetal (fresco, seco, etc.), edad de la planta y finalmente

el método utilizado en la extracción del aceite (hidrodestilación, arrastre con vapor, extracción con solventes, prensado, etc.).

1.1.4. Aplicaciones del Aceite Esencial de Molle.

Según Torres [4], Martínez [5] y Cuya [6] se tienen diversas aplicaciones:

- a) En Cosmetología: En la elaboración de cremas faciales, talcos, jabones, desodorantes líquidos o de barra.
- b) En Perfumería: En la elaboración de agua de colonia, agua de lavanda, lociones, astringentes, etc.
- c) En Farmacia: En el perfumado de pastas dentífrica, en el perfumado de desinfectante bucal.
- d) En la Industria: En la preparación de barnices, antipolillas, como repelentes de insectos.
- e) En Alimentos: En la tecnología de alimentos como saborizantes en reemplazo de la pimienta, en producción de vinagre.
- f) En Bebidas Alcohólicas: En la elaboración de licores macerados, tipo cremas.

1.1.5. Forma de encontrar el aceite en las plantas.

Austin [7],[K. Hüsnü ,G. Buchbauer] [8] y Muñoz [9] manifiestan que los aceites esenciales se encuentran muy difundidos en el reino vegetal, especialmente en las Fanerógamas, en las cuales se hallan repartidas en unas 60 familias (Compuestas, Labiadas, Lauráceas, Mirtáceas, Rosáceas, Rutáceas, Umbelíferas, etc.).

Los aceites esenciales pueden encontrarse localizados en diferentes partes de las plantas, por ejemplo en:

- a) Las hojas: Ajenjo, albahaca, cedrón, eucalipto, menta, hierbabuena, limoncillo, laurel, mejorana, pachulí, romero, salvia, toronjil.
- b) Las raíces: Angélica, azaro, azafrán, cálamo, cúrcuma, galanga, jengibre, sándalo, sasafrás, valeriana, vetiver.
- c) El pericarpio de frutos: Limón, mandarina, naranja.
- d) El tallo: Palo santo, canela, palo de rosa, caparrapí.
- e) Las flores: Arnica, lavanda, manzanilla, piretro, tomillo, clavo de olor, rosa.
- f) Los frutos: Alcaravea, cilantro, nuez moscada, perejil, pimienta, molle, eneldo, anís, cardamomo, hinojo, comino.

CAPÍTULO II

ACEITES ESENCIALES

2.1 Definición

Los aceites esenciales son mezclas líquidas homogéneas de compuestos orgánicos volátiles que contienen las sustancias responsables de generar diversos aromas agradables perceptibles al ser humano. Estas sustancias son producto del metabolismo secundario de las plantas, son insolubles en agua pero son solubles en solventes no polares. Químicamente la mayor parte de casi todos los aceites esenciales contienen hidrocarburos de la serie polimetilénica (Isopreno metil-butadieno), del grupo de los terpenos que responden a la fórmula $(C_5H_8)_n$ ($n=2$, monoterpenos; $n=3$, sesquiterpenos; $n=4$, diterpenos) los cuales actúan principalmente como vehículos para formar los grupos más importantes de compuestos oxigenados (alcoholes, éteres, esterres, aldehídos, cetonas y fenoles), los cuales están presentes en cantidades menores y son los que generalmente transmiten el aroma característico a los aceites esenciales.[K. Hüsni, G. Buchbauer][8].

2.1.1 Composición química del *Schinus Molle L.*

La composición del aceite esencial del *Schinus molle Linneo* es básicamente de terpenos, siendo los monoterpenos los de mayor abundancia. Pero existen muchos compuestos en este aceite, variando tanto en su composición como en el contenido de los mismos. La composición química de los aceites esenciales extraídos de plantas aromáticas dependen de varios factores: los factores geográficos (ubicación), los factores ecológicos (hábitat), siendo el clima y la calidad de suelo muy importantes en estos dos últimos, la variabilidad genética (genotipo), la extracción específica de la parte de la planta (raíz, fruto, hoja, etc.), el pre-tratamiento que se realice al material herbáceo (lavado, secado, molienda) y finalmente el proceso de extracción, [Milojević et al., 2008][10]. Esto es establecido en el trabajo de [Barroso et al., 2011][11] y por otro lado por [Sefidkon et al., 2007][12], quienes trabajando con el *Schinus molle* y el aroma del geranio de rosa, respectivamente, encontraron variación de la composición del aceite obtenido dependiendo del método de extracción usado.

En la Tabla 2.1 se presentan los resultados la composición del aceite del *Schinus molle L.* procedentes de diversos países de Sudamérica [Moran, 2009][13], se confirma la variabilidad de la naturaleza de los aceites esenciales debido a su localización geográfica y probablemente a la calidad del suelo.

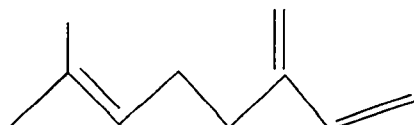
Tabla 2.1. Composición del aceite esencial *Schinus molle* L. de diversas fuentes.

Referencias Constituyentes	[Hayouni, 2008][14]	[Zahed, 2011] [15]	[Bendaoud, 2010][16]	[Barroso, 2011][11]	[Moran, 2009][13]		
					Santa Fé, Argentina	Cochabamba, Bolivia	Uruguay
<i>α-felandreno</i>	35,86%	21 – 41,1%	46,52 %		0,14 y 0,27%	30,77 y 26,06%	
<i>α-pineno</i>	5,22%	19 – 6,5%	4,34 %	2,70%	10,8 y 15,36%	4,30 y 1,87%	
<i>mirceno</i>		8,4 – 12,8%		0,83%	1,49 y 1,80%	25,13 y 18,88%	5,46%
<i>β-pineno</i>	15,68%		4,96 %		9,95 y 10,15%	1,91 y 1,75%	13,95%
<i>limoneno</i>				41,37%	9,26 y 4,95%	20,33 y 21,80%	0,88%
<i>biciclo germacreno</i>				11,59%	0,65 y 1,00%	1,00 y 0,00%	29,20%
<i>β-felandreno</i>	29,30%	30,8 – 61,8%	20,81 %				
<i>germacreno D</i>				8,86%	1,08 y 0,00%	0,03 y 0,66%	12,08%
<i>sabineno</i>				5,85%	43,88 y 41,68%	1,44 y 0,57%	12,92%
<i>p-cimeno</i>	5,43%		2,49 %				
<i>β-cariofileno</i>					1,39 y 1,26%	1,31 y 3,35%	7,68%
<i>γ-terpineno</i>					2,65 y 3,94%	0,05 y 0,11%	1,13%
<i>terpinen-4-ol</i>					2,00 y 4,56%	0,12 y 0,08%	10,57%
<i>α-terpineol</i>			8,38 %				
<i>E-(cariofileno)</i>				15,60%			
<i>spatulenol</i>				4,03%			
<i>cariofileno oxido</i>				2,24%			
<i>α-humuleno</i>				1,04%			
<i>carvacrol</i>				0,85%			
<i>Octanoato de metilo</i>							
<i>δ-cadineno</i>							
<i>cis α-bergamoteno</i>							

2.1.2 Propiedades Fisicoquímicas de los componentes del aceite de molle.

A continuación se presentan las propiedades fisicoquímicas de los diversos componentes del aceite esencial del Schinus molle linneo. [Batiu et al.2003][17],[Lange][18],[Haynes, Lide][19].

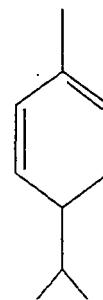
MIRCENO



Fórmula molecular	: C ₁₀ H ₁₆
Peso molecular	: 136,23 g/mol
Aspecto	: Líquido transparente e incoloro.
Densidad	: 0,794 g/cm ³
Punto de ebullición	: 166 – 168 °C a 760 mm Hg.
Punto de fusión	: -10 °C
Presión de Vapor	: 2.29 mm Hg a 25 °C.
Índice de Refracción	: 1,466 - 1,471 a 20 °C.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Etanol, dipropelinglicol, benceno, tolueno.
Carbono Sat. : Insat.	: 4:6

α-FELANDRENO

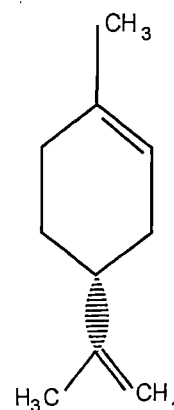
Fórmula molecular	: C ₁₀ H ₁₆
Peso molecular	: 136,24 g/mol.
Apariencia	: Líquido incoloro.
Densidad	: 0,846 g/cm ³
Punto de ebullición	: 171 – 172 °C a 760 mm Hg.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Etanol, benceno, tolueno.
Carbono Sat.: Insat.	: 6:4



LIMONENO

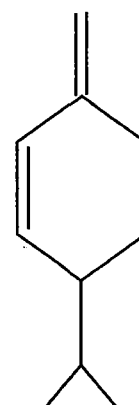
Es un terpeno que posee un fuerte olor a limón

Fórmula molecular	: C ₁₀ H ₁₆
Peso molecular	: 136,24 g/mol.
Apariencia	: Líquido incoloro.
Punto de ebullición	: 176 °C
Densidad	: 0,843 g/cm ³
Presión de vapor	: 1,40 mm Hg (20 °C).
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Etanol, éter, benceno.
Carbono Sat.: Insat.	: 6:4



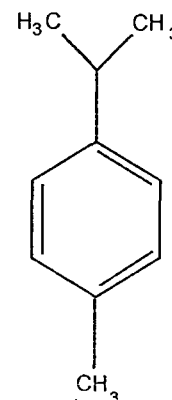
β-FELANDRENO

Fórmula molecular	: C ₁₀ H ₁₆
Peso molecular	: 136,24 g/mol.
Apariencia	: Líquido incoloro.
Densidad	: 0,839 – 0,845 g/cm ³ (25 °C)
Punto de ebullición	: 171 – 174 °C a 760 mm Hg.
Presión de Vapor	: 1,57 mm Hg a 25 °C.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Etanol, benceno, tolueno.
Carbono Sat.: Insat.	: 6:4



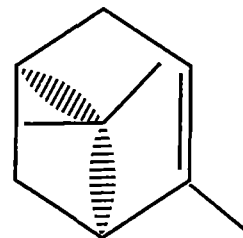
p - CIMENO

Fórmula molecular	: C ₁₀ H ₁₄
Peso molecular	: 134,21 g/mol
Apariencia	: Líquido incoloro.
Densidad	: 0,857 g/cm ³
Punto de ebullición	: 177 °C
Presión de vapor	: 1,475 mm Hg a 20 °C.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Benceno, cloroformo, n-hexano.
Carbono Sat.: Insat.	: 4:6

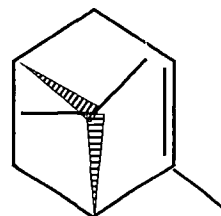


α -PINENO

Fórmula molecular	: $C_{10} H_{16}$
Peso molecular	: 136,26 g/mol.
Apariencia	: Líquido incoloro.
Densidad	: 0,858 g/cm ³ (20°C).
Punto de ebullición	: 155 °C
Índice de refracción	: 1,4657 a 20°C.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Solubilidad en	: Etanol, cloroformo, éter.
Carbono Sat.: Insat.	: 8:2



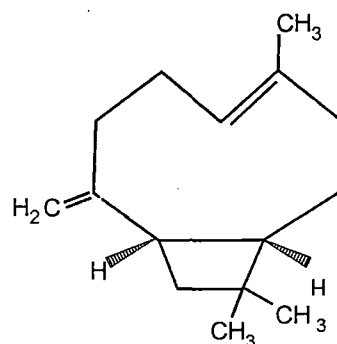
(+)- α -PINENO



(-)- α -PINENO

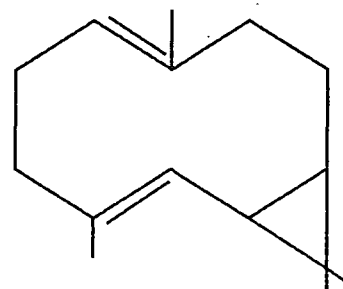
CIS β - CARIOFILENO

Fórmula molecular	: $C_{15} H_{24}$
Peso molecular	: 204,3511 g/mol.
Densidad	: 0,9052 g/cm ³ (20°C).
Punto de ebullición	: 262 – 264 °C a 760 mm Hg.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Benceno, tolueno, n-hexano.
Carbono Sat.: Insat.	: 11:4



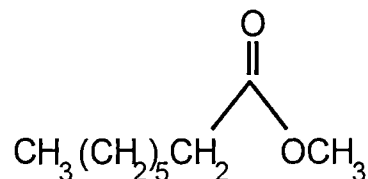
BICICLO GERMACRENO

Fórmula molecular	: $C_{15} H_{24}$
Peso molecular	: 204,35 g/mol.
Aspecto	: Líquido incoloro.
Punto de ebullición	: 267 – 268 °C a 760 mm Hg.
Presión de vapor	: 0,0132 mm Hg a 25 °C.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Solubilidad en	: Benceno, tolueno, n- hexano, cloroformo.
Carbono Sat.: Insat.	: 11:4



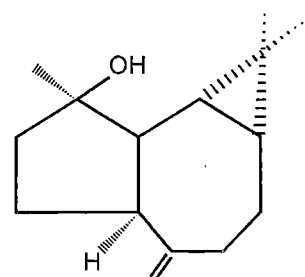
OCTANOATO DE METILO

Fórmula molecular	: C ₉ H ₁₈ O ₂
Peso molecular	: 158,241 g /mol.
Aspecto	: Líquido aceitoso claro.
Densidad	: 0,875 – 0,881 g/cm ³ a 25 °C.
Punto de ebullición	: 194 – 195 °C a 760 mm Hg.
Presión de vapor	: 0,523 mm Hg a 25 °C.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Solubilidad en	: Acetona, benceno, tolueno, n-hexano.
Carbono Sat.: Insat.	: 8:1



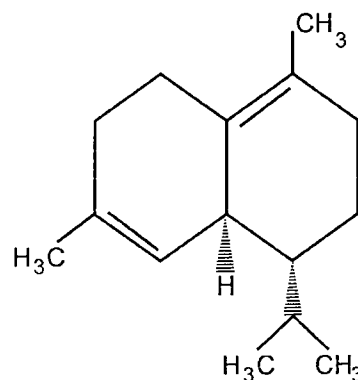
SPATULENOL

Fórmula molecular	: C ₁₅ H ₂₄ O
Peso Molecular	: 220,35 g/mol.
Aspecto	: Líquido incoloro.
Punto de ebullición	: 296 – 298 °C (760 mm Hg).
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Etanol, benceno, tolueno.
Carbono Sat.: Insat.	: 13:2



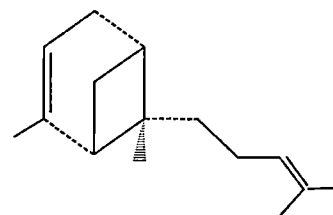
δ – CADINENO

Fórmula molecular	: C ₁₅ H ₂₄
Peso molecular	: 204,351 g/mol.
Densidad	: 0,918 g /cm ³ a 15°C.
Punto de ebullición	: 279 – 280 °C a 760 mm.
Presión de vapor	: 0,00669 mm Hg a 25 °C
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Benceno, tolueno, n-hexano.
Carbono Sat.: Insat.	: 11:4



CIS α - BERGAMOTENO

Fórmula molecular	: C ₁₅ H ₂₄
Peso Molecular	: 204,3511 g/mol.
Solubilidad en agua	: Insoluble.
Soluble en	: Benceno, tolueno, n-hexano.
Carbono Sat.: Insat.	: 11:4



2.1.3 Características Fisicoquímicas del Aceite Esencial de Molle.[3]

- Densidad relativa a 20°C : 0,8338 g/cm³
- Poder rotatorio : 4,9245
- Índice de refracción : 1,4729
- Solubilidad en etanol de 90% : 1 ml AEM / 1.5 ml de etanol.
- Punto de ebullición : 175°C
- Sabor : Poco astringente.
- Color : Amarillo pálido.
- Olor : Aromático picante.
- Índice de acidez (%) : 1,104.
- Índice de éster : 13,04

2.1.4 Propiedades Termodinámicas

Los aceites esenciales presentan diversas propiedades tanto físicas y químicas, las cuales son de importancia según sea el procesamiento para su extracción y su aplicabilidad. Si se trata del proceso de extracción, se tienen las siguientes clases de propiedades: físicas, de transporte y termodinámicas. Una propiedad física importante es la densidad, puesto que los aceites esenciales son una mezcla multicomponente, es importante conocer esta propiedad para estimar la masa que se extrae. Una propiedad de transporte importante es el coeficiente de difusión, que depende del sistema involucrado (componentes, estructura del medio, los parámetros operativos), para manejar el proceso de extracción. Finalmente, propiedades termodinámicas como la presión de vapor y las entalpías, juegan un rol importante tanto en los requerimientos energéticos como los de separación de los componentes del aceite esencial.

2.1.4.1 Schinus Molle L.

Las propiedades de los componentes principales del aceite esencial del *Schinus molle L.* se presentan en la Tablas 2.2, 2.3, 2.4 y 2.5 con sus respectivas dependencias respecto a la temperatura, los datos fueron extraídos de [Yaws, 2008][20] y de la base de datos del simulador PRO II [21]. Se verificaron los valores dados por estas correlaciones comparándolas con otras referencias y datos experimentales.

Se puede observar en la Tabla 2.2 que las densidades de la mayoría de los componentes del *Schinus molle L.* son bastantes similares a 25° C debido a que tienen similar estructura molecular orgánica.

Tabla 2.2. Densidad de componentes importantes del aceite esencial del *Schinus molle*

Nombre	Fórmula	A	B	C	n	T _{MIN} (K)	T _{MAX} (K)	Densidad a (25°C) g/ml
<i>δ-limoneno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,26000	0,25166	660,00	0,27210	199,00	660,00	0,8390
<i>Limoneno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,26000	0,24949	660,00	0,28571	178,15	660,00	0,8371
<i>L-limoneno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,26000	0,24878	660,00	0,28571	188,58	660,00	0,8391
<i>α-felandreno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,27250	0,26020	649,00	0,28570	220,00	649,00	0,8430
<i>β-felandreno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,27970	0,26421	648,00	0,31500	220,00	648,00	0,8370
<i>α-pineno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,27030	0,25601	632,00	0,26040	209,15	632,00	0,8570
<i>β-pineno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,26920	0,26436	643,00	0,20685	211,61	643,00	0,8670
<i>α-terpineno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,26920	0,26164	652,00	0,28571	214,12	652,00	0,8300
<i>γ-terpineno</i>	C ₁₀ H ₁₆	0,26980	0,25794	661,00	0,28570	214,12	661,00	0,8450
<i>Cimeno</i>	C ₁₀ H ₁₄	0,27564	0,25799	664,65	0,28571	205,25	664,65	0,8644
<i>m-cimeno</i>	C ₁₀ H ₁₄	0,27670	0,25907	657,00	0,29420	209,44	657,00	0,8570
<i>o-cimeno</i>	C ₁₀ H ₁₄	0,27450	0,25293	662,00	0,28800	201,64	662,00	0,8730
<i>p-cimeno</i>	C ₁₀ H ₁₄	0,27280	0,25742	653,15	0,28750	205,25	653,15	0,8520

$$\text{Densidad} = A \times B^{-(1-T/C)^n} \quad (\text{densidad: g/ml, } T: \text{K}) \quad [\text{Yaws}][20], [\text{Pro II}]$$

Tabla 2.3 Presión de Vapor de los componentes importantes del aceite esencial del *Schinus molle L* y del agua . [Yaws][20],[Pro II][21]

Nombre	A	B	C	D	E	P_{vap} a 95°C (Pa)
<i>β-felandreno</i>	65,173	-7667,6	-5,9859	$3,49 \times 10^{-18}$	6	7995,88
<i>δ-limoneno</i>	75,574	-8079,7	-7,5596	$8,39 \times 10^{-18}$	6	7960,90
<i>α-felandreno</i>	61,293	-7486,9	-5,4199	$2,64 \times 10^{-18}$	6	7628,70
<i>α-pineno</i>	97,752	-8491,6	-11,124	$5,33 \times 10^{-6}$	2	16038,58
<i>β-pineno</i>						
<i>p-cimeno</i>	107,71	-9402,7	-12,545	$6,67 \times 10^{-6}$	2	7716,13
<i>Agua</i>	73,649	-7258,2	-7,3037	$4,17 \times 10^{-6}$	2	84488,13

$$\text{Presión de vapor } (P_{\text{vap}}) = \exp\left(A + \frac{B}{T} + C \cdot \ln(T) + D \cdot T^E\right) \quad (\text{P de vapor: Pa, } T: \text{K})$$

No se dispone de información relevante del mirceno, solo se obtuvo la dependencia de su presión de vapor respecto a la temperatura en la página web de NIST [22].

Mirceno	$C_{10}H_{16}$	A: 4,56112	B: 1849,102	C: -38,899
---------	----------------	------------	-------------	------------

$$\text{Presión de vapor } (P_{\text{vap}}) = 10^{\left(A - \frac{B}{T+C}\right)} \quad (\text{Presión de vapor: bar, } T: \text{K})$$

Tabla 2.4 Entalpía líquida de los componentes importantes del aceite esencial del *Schinus molle L* y del agua.[Yaws][20] [Pro II][21].

Nombre	$A \times 10^{-7}$	$B \times 10^{-4}$	C	ΔH a 95°C (J/kmol)
<i>β-felandreno</i>	-4,45897	8,2800	294,500	$3,99 \times 10^7$
<i>δ-limoneno</i>	-4,43340	8,3432	288,770	$4,05 \times 10^7$
<i>α-felandreno</i>	-4,36707	7,8380	298,605	$4,54 \times 10^7$
<i>α-pineno</i>	-3,13029	2,3092	335,010	$4,68 \times 10^7$
<i>β-pineno</i>	-3,00475	1,5708	345,245	$3,39 \times 10^7$
<i>m-cimeno</i>	-4,27980	8,8300	250,350	$3,32 \times 10^7$
<i>o-cimeno</i>	-4,35748	9,2660	244,800	$1,69 \times 10^7$
<i>p-cimeno</i>	-5,03186	14,5600	124,350	$3,91 \times 10^7$

$$\text{Entalpía líquida } (\Delta H) = A + BT + CT^2 \quad \Delta H: \text{J/kmol}; \quad T: \text{K}$$

Agua	A	B	C	D	E	F	ΔH a 95°C (J/kmol)
	$-3,59 \times 10^7$	$2,76 \times 10^5$	-1045,05	2,70833	-0,00353	$1,87 \times 10^{-6}$	$7,15 \times 10^6$

$$\text{Entalpía líquida del agua } (\Delta H) = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5$$

$\Delta H: \text{J/kmol}; \quad T: \text{K}$

Tabla 2.5 Entalpía de Vaporización de componentes importantes del aceite esencial del *Schinus molle* L. y del agua.[Yaws][20][Pro II][21].

Nombre	A	T _c	n	T _{MIN} (°k)	T _{MAX} (°k)	H _{VAP} a 100°C (kJ/mol)
<i>α-felandreno</i>	61,8090	649,00	0,3730	348,15	649,00	44,922
<i>δ-limoneno</i>	60,4424	660,00	0,3800	199,00	660,00	44,038
<i>limoneno</i>	59,2765	660,00	0,3800	178,15	660,00	43,188
<i>L-limoneno</i>	59,2765	660,00	0,3800	351,15	660,00	43,188
<i>β-felandreno</i>	62,9621	648,00	0,3980	347,15	648,00	44,754
<i>α-pineno</i>	55,4400	632,00	0,3860	209,15	632,00	39,281
<i>α-pineno, (-)</i>	50,6248	647,00	0,3800	209,15	647,00	36,515
<i>β-pineno</i>	60,0345	643,00	0,4020	211,61	643,00	42,346
<i>β-pineno, (1 R)</i>	55,7324	647,00	0,3800	223,15	647,00	40,199
<i>α-terpineno</i>	62,1650	652,00	0,3850	350,35	652,00	44,826
<i>γ-terpineno</i>	63,8650	661,00	0,3930	356,15	661,00	46,066
<i>cimeno</i>	58,1612	664,65	0,3800	205,25	664,65	42,522
<i>m-cimeno</i>	61,4941	657,00	0,3950	209,44	657,00	44,143
<i>o-cimeno</i>	62,1799	662,00	0,3990	201,64	662,00	44,662
<i>p-cimeno</i>	64,2701	653,15	0,4110	205,25	653,15	45,375
<i>agua</i>	54,0000	647,13	0,3400	273,15	647,13	40,316

$$\text{Entalpía de vaporización}(H_{vap}) = A(1 - T/T_c)^n \quad (H_{vap} : \text{kJ/mol}, T: \text{K})$$

2.2 . Métodos de Extracción de los Aceites Esenciales.

Los diferentes métodos de extracción utilizados para obtener los aceites esenciales son:

- Extracción por prensado (extrusión).
- Extracción con disolventes.
- Adsorción sólido-líquido y/o sólido-gas. (Enfleurage).
- Destilación por arrastre con vapor.

A continuación detallamos cada uno de estos métodos de extracción.

a) Extracción por prensado [7], [23], [24]

Para extraer los aceites esenciales, el material vegetal (frutos, semillas, cáscaras, etc.) es sometido a presión (exprimido o extruído), luego el aceite fluye al exterior y se separa el aceite del agua (contenido en el fruto) por medio de un centrifugado. Para este proceso se usan prensas tipo batch o en forma continua. Los equipos más usados son: el tornillo sin fin de alta o baja presión, rodillos de prensa, extractor expeller y extractor centrífugo.

b) Extracción con disolventes [7],[23],[24]

En este método, el material vegetal debe estar seco y debe ser molido, para dar mayor área de transferencia entre el sólido y el disolvente. En este proceso el sólido, ó el líquido, ó ambos deben estar en movimiento continuo mediante la agitación, para lograr mejor eficiencia en la operación. La extracción se realiza generalmente a la temperatura de ebullición del disolvente.

El proceso puede ser batch o en forma continua (percolación, lixiviación, extracción tipo soxhlet). Los disolventes más empleados son: etanol, metanol, n- hexano, tolueno, éter etílico, xileno, acetona, etc. No se usan disolventes clorados, ni benceno por su alta peligrosidad a la salud. Los disolventes se recuperan por destilación y pueden ser nuevamente utilizados.

Este método generalmente se utiliza a escala de laboratorio, pues a nivel industrial resulta ser costoso por el valor comercial de los disolventes, también por las consecuencias sanitarias y medioambientales.

c) Adsorción sólido-líquido y/o sólido-gas. (Enfleurage). [7],[23][24]

En el método de enflorado o enfleurage, el material vegetal (generalmente flores) es puesto en contacto con una grasa (normalmente manteca de cerdo refinada, blanqueada y desodorizada). La esencia se solubiliza en la grasa que actúa como vehículo extractor. Se obtiene inicialmente una mezcla (concreto) de aceite esencial y grasa, la cual se separa posteriormente por otros medios fisicoquímicos. En general se recurre al agregado de alcohol caliente a la mezcla y su posterior enfriamiento para separar la grasa (insoluble) y el extracto aromático (absoluto). Esta técnica se emplea para la obtención de esencias florales (rosa, jazmín, azahar, etc.), pero su bajo rendimiento y la difícil separación del aceite extractor la hacen muy costosa.

2.2.1. Destilación por arrastre con vapor

a) Hidrodestilación [7],[8],[24],[25]

También conocida como destilación en agua, la materia prima debe estar finamente dividida (mayor área de transferencia) y cubierto totalmente con agua. El principio de la hidrodestilación es llevar a ebullición una suspensión acuosa de un material vegetal aromático de tal manera que los vapores generados puedan ser condensados y colectados.

El aceite que es inmisible en agua, se separa posteriormente. En la hidrodestilación el material vegetal siempre debe encontrarse en contacto con el agua, si el calentamiento del equipo es con fuego directo, el agua presente en la cámara extractora debe ser suficiente y permanente para llevar a cabo toda la destilación a fin de evitar el sobrecalentamiento y carbonización del material vegetal, dado que este hecho provoca la formación de olores desagradables en el producto final. El material vegetal debe ser mantenido en constante agitación a fin de evitar aglomeraciones o sedimentación del mismo en el fondo del recipiente, lo cual puede provocar mayor degradación térmica debido al calentamiento al cual es sometido. En este método, es máxima la acción química del agua sobre el material vegetal (se producen hidrólisis y oxidaciones) lo cual es perjudicial para la calidad del aceite.

El equipo de hidrodestilación es versátil, fácil de transportar, su alambique es sencillo y es fácil de armar. Normalmente con este método se trabaja a presión atmosférica y la velocidad de destilación es baja, debiéndose tener el agua caliente en el generador de vapor para evitar retrasos de tiempo. Los aceites esenciales obtenidos mediante la hidrodestilación normalmente presentan aromas más intensos y un color más oscuro con respecto a los producidos por otros métodos.

b) Destilación por arrastre con vapor de agua [7],[8],[24],[25].

Este método de extracción consiste en colocar el material vegetal en el interior del alambique sobre un falso fondo que lo aísla del agua, haciendo hervir ésta con fuego directo, vapor en camisa o serpentín. De esta forma el agua desprende vapores saturados húmedos y el material vegetal es sometido a una corriente de vapor de agua, la mezcla de agua y aceite esencial es arrastrada, posteriormente es condensada, recolectada y separada de la fracción acuosa. En algunos casos se puede utilizar un caldero para generar vapor saturado seco.

Inicialmente en el proceso se tiene la mezcla de dos líquidos inmiscibles (aceite esencial y agua), el método de arrastre con vapor consiste en la vaporización a temperaturas inferiores a las de ebullición de cada uno de los componentes volátiles por efecto de una corriente directa de vapor de agua, el cual ejerce la doble función de calentar la mezcla hasta su punto de ebullición y adicionar presión de vapor a los componentes volátiles del aceite esencial. Los vapores que salen del alambique se enfrían en un condensador en la que

retornan a la fase líquida, los dos productos inmiscibles: agua y aceite. Finalmente se separan en un dispositivo decantador o vaso florentino. La hidrólisis es mínima por que el material vegetal no está en contacto directo con el agua líquida caliente.

El material herbáceo se carga al alambique a temperatura ambiente, esto hace que se produzcan condensaciones sobre él con mucha frecuencia, y esta humedad aglomera al material originando compactamientos; este problema se contrarresta incorporando discos perforados intercalados dentro del alambique.

Con éste método se trabaja hasta cerca de los 100° C, cuando la extracción se realiza a una atmósfera de presión y la velocidad de trabajo no es alta, requiriendo mucho tiempo para el arrastre de las esencias ricas en componentes de alto punto de ebullición. Esta técnica se utiliza a nivel industrial debido a su alto rendimiento, alta pureza del aceite esencial obtenido y porque no requiere tecnología sofisticada.

Las instalaciones para este método son más costosas, pero presentan mucha mayor capacidad de producción. El material herbáceo (frutos, cortezas y raíces) se puede cargar fácilmente al alambique, pues sólo presentan inconvenientes en este sistema cuando la materia prima está finamente dividida (polvos) por su tendencia al compactamiento.

2.3 . Fundamentos de la Destilación por Arrastre de Vapor

Se puede definir la destilación por arrastre con vapor, como la separación de dos o más sustancias, basada en las diferencias existentes entre sus presiones de vapor. Dichas sustancias pueden ser total o parcialmente miscibles. La mezcla de gases ideales sigue la ley de Dalton, según ella, cuando dos o más gases o vapores, que no reaccionan entre sí, se mezclan a temperatura constante, cada gas ejerce la misma presión como si estuviera sólo y la suma de las presiones de cada uno de ellos es igual a la presión total del sistema [26].

Si consideramos un sistema heterogéneo, formado por dos líquidos no miscibles tales como el agua y un aceite esencial, los vapores emitidos por cada uno de ellos no pueden ser modificados por la presencia del otro debido a que no existen afinidades mutuas entre sus moléculas gaseosas, y por tanto sus presiones de vapor se adicionan al ir calentando dicho sistema heterogéneo. Llegará un momento en el cual, la presión de vapor total es igual a la presión ejercida sobre la superficie libre de ambos líquidos, entonces el sistema se encuentra en ebullición. La presión parcial de cada componente es en este momento

inferior a la presión atmosférica, de forma que los líquidos se encuentran hirviendo a una temperatura inferior a sus puntos de ebullición normales. [27]

En conclusión, todo líquido no miscible con el agua puede ser arrastrado por aquella, hirviendo a una temperatura más baja que su punto de ebullición, y de todo sistema homogéneo es posible aislar sus componentes por destilación, siempre que haya suficiente diferencia entre sus presiones de vapor (al menos una diferencia de 3 a 5°C entre sus puntos de ebullición para poder separarlos mediante destilación). Cuando la diferencia es pequeña, se hace necesario volver a destilar, partiendo del líquido más rico en volátil obtenido en la primera destilación, y repetir el proceso hasta conseguir el resultado buscado [23].

Suponiendo que los vapores siguen las leyes de los gases ideales, vamos a deducir una ecuación aproximada que nos dará una idea sobre los parámetros que prevalecen en las codestilaciones.

La cantidad de cada componente que se encuentra en estado de vapor, durante una codestilación, según Gilg Engler [3] será:

$$G = \bar{M} \cdot n = \bar{M} \frac{p \cdot V}{R \cdot T}$$

Donde:

G = Peso del componente al estado de vapor (g).

n = Número de moléculas gramo presentes al estado de vapor (mol).

\bar{M} = Peso molecular (g/mol).

p = Presión parcial de vapor (atm).

V = Volumen total ocupado por la mezcla de vapores (L).

R = Constante universal de los gases perfectos.

T = Temperatura absoluta del sistema (K).

Se identifica con el subíndice W los valores del vapor de agua y con E los valores del aceite esencial, así se tendrá:

$$\frac{G_W}{G_E} = \frac{\bar{M}_W p_W \frac{V}{R \cdot T}}{\bar{M}_E p_E \frac{V}{R \cdot T}} = \frac{\bar{M}_W p_W}{\bar{M}_E p_E}$$

Esta expresión nos da una idea clara de las relaciones de los distintos parámetros presentes en el proceso de arrastre con vapor.

El peso molecular del agua es inferior al peso molecular medio de los aceites esenciales, y su presión de vapor es muy superior a la de los aceites (los aceites esenciales tienen presiones de vapor comprendidos entre 0,005 a 2,2 mm de mercurio, a 20°C) razón por la cual los vapores de la mezcla originados contienen mayor masa de vapor de agua que de aceite esencial, siendo el producto condensado (mezcla líquida de agua y aceite esencial) más rico en agua.[24]

Los aceites esenciales están constituidos por diversos compuestos orgánicos, además se debe tener en cuenta que durante el proceso de arrastre con vapor la composición del aceite esencial en fase vapor, la presión de vapor de cada componente y la densidad del aceite está variando respecto al tiempo, siendo necesario por ello recoger la totalidad de los productos arrastrados. Si las codestilaciones acuosas se realizan a una presión menor que la atmosférica, la proporción de agua en el condensado sería mayor, siendo además el aceite arrastrado más rico en componentes volátiles. Cuando se quieren aislar componentes de mayor peso molecular, es necesario trabajar a una presión superior a la atmosférica, y por esto se aplica vapor sobrecalentado.[8]

2.4. Principios Termodinámicos

2.4.1. Equilibrio Líquido-Vapor (E.L.V.)[27]

En muchos procesos industriales importantes como: la destilación, la absorción y la extracción, se ponen inicialmente en contacto dos fases de diferente composición que no están en equilibrio, ésta condición produce una fuerza impulsora responsable de una transferencia de masa. La magnitud del cambio y la rapidez de transferencia de masa de cada componente dependen de que tan distante esté la condición actual del sistema, respecto del equilibrio. El tratamiento cuantitativo de la rapidez de transferencia de masa requiere del conocimiento de los estados de equilibrio (*temperatura, presión y composición*) del sistema.

En la mayor parte de los procesos industriales, las fases que coexisten son vapor y líquido, aunque también se han encontrado sistemas líquido/ líquido, vapor/ sólido y líquido/sólido. La coexistencia de las fases se alcanza cuando la temperatura, la presión y la composición de las fases tienen valores constantes en el tiempo. Algunas moléculas cercanas a la

interfase perderán o ganarán suficiente energía para pasar de una fase a la otra, situación que no afecta el equilibrio ya que el flujo neto de moléculas en este estado, es igual a cero.

Comportamiento Ideal.

En este caso definiremos:

Gas ideal

Un gas es considerado como ideal, cuando presenta las siguientes características:

- Moléculas de volumen infinitesimal.
- Se desplazan en trayectorias rectas.
- No existen fuerzas atractivas o repulsivas entre ellas.
- El choque no altera la *energía cinética* de las mismas.
- Cada molécula constituyente del gas conserva sus propiedades sin quedar afectada por la presencia de las otras.

Solución ideal

Una solución líquida es considerada como ideal, cuando tienen las siguientes características:

- Las fuerzas intermoleculares promedio de atracción y repulsión en la solución no cambian al mezclar los componentes.
- No hay absorción ni evolución de calor al mezclar los componentes.
- La presión total del vapor de la solución varía linealmente con la composición expresada en fracción mol.
- El volumen de una solución a una presión y temperatura es igual a la suma de los volúmenes de sus constituyentes puros a las mismas condiciones.

2.4.2. Ley de Raoult y la Ley de Dalton.[27]

Estas relaciones se cumplen cuando la solución líquida es ideal y la fase vapor saturado es una mezcla de gases ideales. Así tenemos:

$$\text{Ley de Raoult (fase líquida)} \quad : \quad P_a = x_a P_a^0 \quad (2.1)$$

$$\text{Ley de Raoult (fase vapor)} \quad : \quad P_a = y_a P \quad (2.2)$$

$$\text{Combinando las dos expresiones} \quad : \quad Y_a P = x_a P_a^0$$

$$\frac{Y_a}{x_a} = \frac{P_a^0}{P} = K_a$$

$$K_a P = P_a^0$$

$$\alpha = K_a / K_b \quad (2.3)$$

α = Volatilidad relativa.

P = Presión total del sistema.

P_a = Presión parcial de componente "a" en fase vapor.

P_a^0 = Presión de vapor del componente puro "a" a una temperatura dada.

y_a = Fracción Molar del componente "a" en fase vapor.

x_a = Fracción Molar del componente "a" en fase líquida.

K_a = Constante de equilibrio del componente "a" a (T, P, x_a , y_a).

K_b = Constante de equilibrio del componente "b" a (T, P, x_b , y_b).

Las dos principales suposiciones que se requieren para reducir los cálculos del equilibrio líquido vapor para la ley de Raoult son:

- 1) La fase vapor es un gas ideal
- 2) La fase líquida es una solución ideal.

La primera suposición significa que la Ley de Raoult se aplica solo cuando las presiones parciales son bajas o moderadas (menores a 5 bar). La segunda suposición implica que tiene una validez aproximada siempre y cuando los componentes que constituyen el sistema tengan estructuras químicamente semejantes, como lo es el aceite esencial. Así una mezcla de isómeros como: orto-, meta- y para-Xileno; mezclas de componentes adyacentes de una serie homóloga como: n-hexano/ n-heptano, etanol/ propanol y benceno/ tolueno se aproximan en gran medida al comportamiento de una solución ideal.

La expresión que revela las dos conjeturas de la Ley de Raoult es:

$$y_i P = x_i \cdot P_i^{Sat} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.4)$$

x_i : Es la fracción molar del componente i en la fase líquida.

y_i : Es la fracción molar del componente i en la fase vapor.

P_i^{Sat} : Es la presión de vapor del componente puro i a la temperatura del sistema.

$y_i \cdot P$: Se conoce como la presión parcial del componente i.

Las presiones de vapor saturado de los componentes puros se calculan con frecuencia a partir de las ecuaciones de Antoine [Smith y Van Ness][25], la cual se puede escribir para el componente i como:

$$\ln (P_i^{sat}) = A_i - \frac{B_i}{T+C_i} \quad (2.5)$$

A_i , B_i , C_i son constantes de Antoine para la componente i , T es la temperatura del compuesto en K , P_i^{sat} es la presión de vapor saturado del componente i .

La suma de las presiones parciales de cada uno de los componentes " i " presentes en la fase vapor debe ser igual a la presión total del sistema (P_t) la ley de Dalton.

Ley de Dalton :

$$P_t = \sum_i^n p_i$$

Para un sistema que no cumple las características de la idealidad, las relaciones de equilibrio como la ley de Raoult, son sólo una aproximación al comportamiento de la mezcla. Es necesario otro tratamiento para las mezclas que tienen una desviación del comportamiento ideal por medio de la definición de nuevas variables y propiedades que permitan conocer las diferencias con las condiciones reales y así corregir las primeras aproximaciones que dependen únicamente de las propiedades de los compuestos puros.

2.4.3. Diagramas de Equilibrio líquido vapor [26], [27].

Los datos de equilibrio entre fases miscibles se representan gráficamente en los llamados diagramas de equilibrio. Existen un gran número de estos diagramas, aquí estudiaremos solo los diagramas líquido-vapor para sistemas binarios, útiles para el estudio de la destilación. El equilibrio líquido-vapor puede ser representado gráficamente por medio de un diagrama denominado temperatura-composición (T - x - y), como el de la Figura 2.1.

En esta Figura se representa, a presión constante, el diagrama para las mezclas del componente A (que hierve a T_A) y el componente B (que hierve a T_B). El componente A es el más volátil. Las temperaturas se representan en las ordenadas y las composiciones (en fracción molar) en las abscisas. El diagrama consta de dos curvas cuyos extremos coinciden. Un punto cualquiera como el "N" situado sobre la curva superior, representa a una fase vapor que comienza a condensar a la temperatura T_1 . La concentración de la primera gota de líquido que se forma está representada por el punto d .

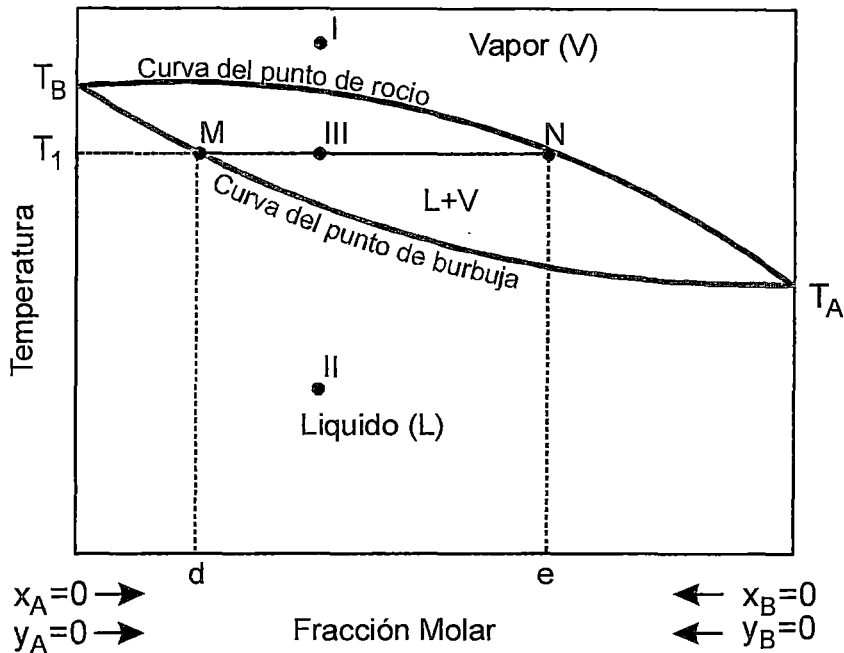


Figura 2.1. Diagrama de equilibrio líquido-vapor

La línea superior se llama *curva del punto de rocío*. Cualquier punto como el “M” de la curva inferior representa líquido que comienza a hervir a la temperatura T_1 . La composición de la primera burbuja de vapor que se forma está representada por el punto *e*. La curva inferior se llama *curva del punto de burbuja*. Dos puntos cualesquiera situados sobre la misma línea horizontal como los M y N, representan las composiciones de líquido y vapor en equilibrio a la temperatura dada por su ordenada. Todos los puntos situados por encima de la curva superior, como el I, representan mezclas formadas por vapor sobrecalentado por encima de su temperatura de saturación. Todos los puntos situados por debajo de la curva inferior, como el II, corresponden a mezclas formadas totalmente por líquido sub enfriado, es decir a una temperatura inferior a su temperatura de ebullición. Los puntos comprendidos entre las dos curvas, como el III, corresponden a sistemas parcialmente constituidos por vapor y líquido en equilibrio.

2.4.4. Cálculo del punto de rocío y del punto de burbuja. [27],[28]

Aunque sean posibles los estudios de problemas de E.L.V. con otras combinaciones de variables (P , T , x_i , y_i , etc.), las de interés para la ingeniería a menudo son los cálculos del *punto de rocío* y del *punto de burbuja*. Existen cuatro combinaciones para el análisis:

- Presión Burbuja : Calcular $\{y_i\}$ y P, dadas $\{x_i\}$ y T
- Presión Rocío : Calcular $\{x_i\}$ y P, dadas $\{y_i\}$ y T
- Temperatura Burbuja : Calcular $\{y_i\}$ y T, dadas $\{x_i\}$ y P
- Temperatura Rocío : Calcular $\{x_i\}$ y T, dadas $\{y_i\}$ y P

De este modo, se especifican ya sea T o P y la composición de la fase líquida o bien, la de la fase de vapor, fijando $1+(N-1)$ o N variables de la regla de las fases, exactamente el número de grados de libertad F para el equilibrio vapor / líquido.

En los cálculos se hacen suposiciones simplificadas, para la aplicación de la ley de Raoult.

Ya que $\sum_{i=1}^n y_i = 1$, en la ecuación (2.4) se suma para todas las componentes, y así obtener:

$$P = \sum_{i=1}^n x_i P_i^{sat} \quad (2.6)$$

Esta ecuación encuentra utilidad en los cálculos del punto de burbuja, donde se desconoce la composición de (y_i) de la fase vapor. Para un sistema de fase binario, donde se requieren los cálculos de la presión de burbuja, se tiene:

$$P = x_1 P_1^{sat} + x_2 P_2^{sat}$$

Además:

$$x_2 = 1 - x_1$$

Luego se obtiene:

$$P = P_2^{sat} + (P_1^{sat} - P_2^{sat}) \cdot x_1$$

Una gráfica de la presión P en función de x_1 a temperatura constante es una línea recta que intercepta al eje de presión en P_2^{sat} a $x_1 = 0$, P_1^{sat} a $x_1 = 1$

La ecuación (2.4) también se resuelve para x_i y sumando para todas las componentes con

$$\sum_{i=1}^n x_i = 1 \quad \text{se obtiene:} \quad P = 1 / \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i}{p_i^{sat}} \right) \quad (2.7)$$

Una ecuación aplicada en cálculos del punto de rocío, donde no se conocen las composiciones de la fase líquida (x_i).

2.4.5. Equilibrio líquido-vapor mediante la ley de Raoult modificada.[27]

Para presiones del sistema que varían de bajas a moderadas (menores a 5 bar), una ecuación más efectiva para el E.L.V. se obtiene cuando se abandona la segunda suposición de la ley de Raoult, y se toman en cuenta las desviaciones de la idealidad de las soluciones en la fase líquida. La ley de Raoult modificada se obtiene cuando el *coeficiente de actividad* (γ_i), se inserta en la ley de Raoult:

$$y_i P = x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2.8)$$

Los cálculos del punto de burbuja y del punto de rocío hechos con esta ecuación son un poco más complejos que los mismos cálculos realizados con la ley de Raoult.

Los coeficientes de actividad son funciones de la temperatura y de la composición de la fase líquida, y finalmente se calculan experimentalmente o usando modelos predictivos. Para los propósitos actuales, los valores necesarios se suponen conocidos.

Ya que $\sum_{i=1}^n y_i = 1$, la ecuación (2.8) es la suma de todos los componentes y se obtiene:

$$P = \sum_{i=1}^n x_i \gamma_i P_i^{sat} \quad (2.9)$$

De manera alternativa, la ecuación (2.8) se resuelve para x_i ; en este caso, al sumar todos los componentes se obtiene:

$$P = 1 / \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\gamma_i P_i^{sat}} \quad (2.10)$$

2.4.6. Equilibrio líquido-vapor a partir de las correlaciones del valor de la constante de partición K [27].

Una observación conveniente de la tendencia de una especie química conocida para repartirse de preferencia entre las fases vapor y líquida es la constante de partición K_i ,

definida como:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad (2.11)$$

Tal cantidad K_i es una medida del componente i de su tendencia para favorecer la fase vapor. Cuando K_i es mayor a la unidad, la especie i exhibe una mayor concentración en la fase vapor, pero cuando es menor a uno, presenta una mayor concentración en la fase líquida y se considera como un componente “pesado”. Además, los K se usan por

conveniencia computacional, lo cual permite la eliminación de un conjunto de fracciones molares $\{y_i\}$ o $\{x_i\}$ en favor del otro.

Con respecto a la ecuación (2.4), se señala que la ley de *Raoult* es:

$$K_i = \frac{P_i^{sat}}{P} \quad (2.12)$$

Y con referencia a la ecuación (2.8) se indica que la ley de *Raoult modificada* es:

$$K_i = \frac{\gamma_i P_i^{sat}}{P} \quad (2.13)$$

Conforme a la ecuación (2.11), $y_i = K_i x_i$. La suma con $\sum_{i=1}^n y_i = 1$, produce:

$$\sum_{i=1}^n K_i x_i = 1 \quad (2.14)$$

En estos términos, para los cálculos del punto de burbuja, donde se conoce la x_i , el problema es encontrar el conjunto de $\{K_i\}$ que satisfacen la ecuación (2.14).

De manera alternativa, la ecuación (2.11) se escribe $x_i = y_i / K_i$.

La suma con $\sum_{i=1}^n x_i = 1$, produce:

$$\sum_{i=1}^n \frac{y_i}{K_i} = 1 \quad (2.15)$$

De esta manera, para los cálculos del punto de rocío, donde las y_i se conocen, el problema radica en hallar el conjunto de valores de K que deben satisfacer la ecuación (2.15).

Las ecuaciones (2.12) y (2.13) junto con la (2.11) representan formas alternativas de la ley de Raoult y de la ley de Raoult modificada.

La mayor atracción de la ley de Raoult es que expresa valores de K como funciones de T y P, independientes de las composiciones de las fases líquido y vapor.

Cuando las suposiciones que sirven de fundamento a la ley de Raoult son apropiadas, esto permite que los valores de K se calculen y correlacionen como funciones de T y P.

Para mezclas de hidrocarburos ligeros y de otras moléculas simples, las correlaciones de esta clase tienen validez aproximada.

Para la predicción de los coeficientes de actividad (γ_i), se tienen los diferentes modelos:

1.- Modelo de soluciones regulares.

2.- Modelo de composición local.

- . NRTL (Non-Random Two Liquids).

- . UNIQUAC (Universal Quasi Chemical).

3.-Modelo de contribuciones de grupo.

- . ASOG.

- . UNIFAC

CAPÍTULO III

MODELAMIENTO

3.1. Teoría del Modelamiento

Chapra [27] Un modelo matemático se define de manera general, como una formulación o una ecuación que expresa las características esenciales de un sistema físico o de un proceso químico en términos matemáticos. En general, un modelo matemático se representa mediante una relación funcional de la siguiente forma:

$$\text{Variable dependiente} = f \left(\begin{array}{l} \text{Variables} \\ \text{independientes} \end{array}, \text{Parámetros}, \begin{array}{l} \text{Funciones} \\ \text{de fuerza} \end{array} \right) \quad 3.1$$

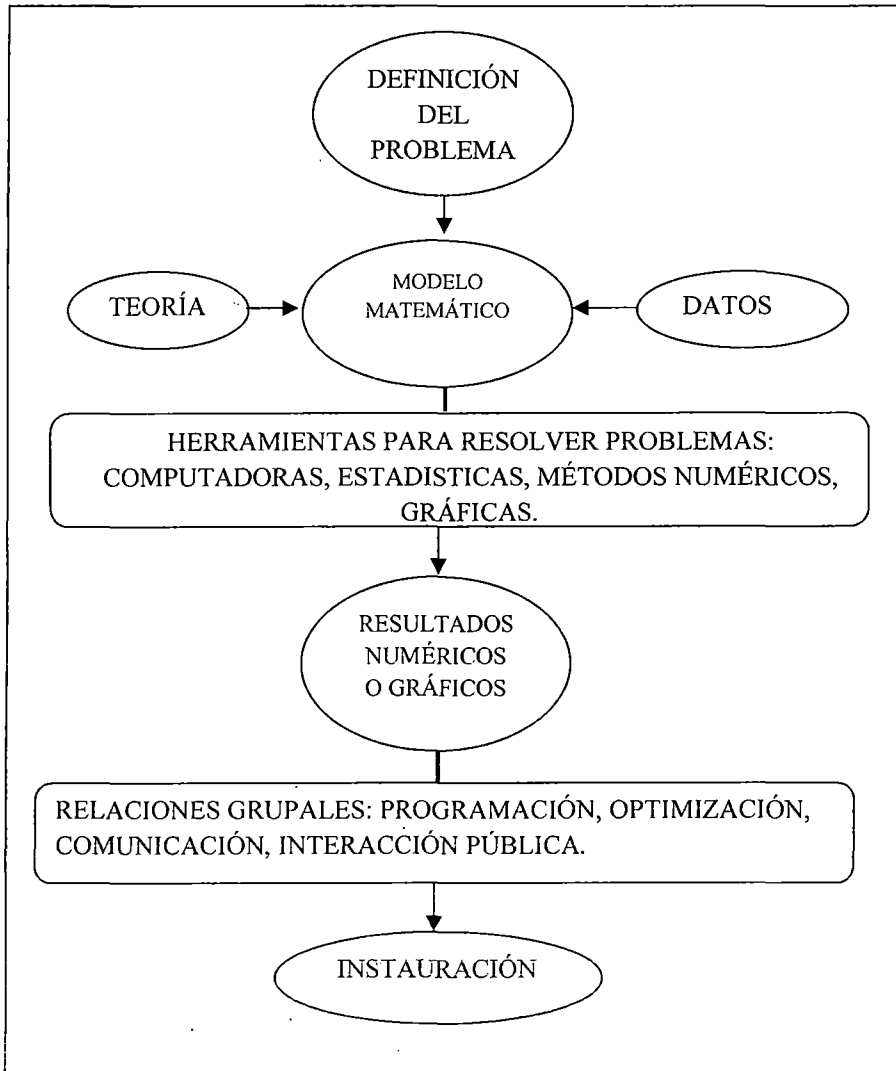


Figura 3.1. Proceso de solución de problemas en Ingeniería.

La variable dependiente es una característica que generalmente refleja el comportamiento o estado de un sistema; **las variables independientes** son, por lo común, dimensiones tales como tiempo y espacio, a través de las cuales se determina el comportamiento del sistema; **los parámetros** son el reflejo de las propiedades o la composición del sistema; y **las funciones de fuerza** son influencias externas que actúan sobre el sistema.

La expresión matemática de la ecuación (3.1) va desde una simple relación algebraica hasta un enorme y complicado grupo de ecuaciones diferenciales.

[Himmelblau & Bischoff] [29], Un modelo es una representación de una realidad física, por lo general más simple e idealizada. Los modelos pueden ser físicos o matemáticos y se crean con el objetivo de conocer mejor la realidad de acuerdo a objetivos específicos y convenientes. Un *modelo físico* puede ser una miniatura, como una versión de laboratorio de una pieza a escala industrial de los equipos. Un *modelo matemático*, en cambio, es una representación matemática de la realidad física, que describe las propiedades y características de un sistema real en términos de variables y operaciones matemáticas. El gran incremento en la potencia de las computadoras y su versatilidad en su uso ha permitido que los modelos sean más realistas y hayan impulsado un rápido crecimiento en el uso de modelos para el diseño de productos, procesos, equipos y la investigación. Las grandes ventajas que ofrecen el desarrollo de un modelo son:

- (1) La reducción del número de experimentos, lo que reduce tiempo y costos.
- (2) Suministrar un conocimiento profundo en el proceso (en el caso de un modelo basado en la física) que ni siquiera puede ser posible con la experimentación.
- (3) Optimización del proceso.
- (4) La capacidad de predicción, es decir distintas maneras de llevar a cabo posibles escenarios relacionados a un proceso.
- (5) Proporciona mejoramiento en la capacidad de automatización y control de los procesos.

[Sablani et al., 2006][30], en la Figura 3.2 muestra el proceso muy genérico en el desarrollo de un modelo y su aplicación.

Los *modelos matemáticos* se pueden clasificar dependiendo del punto de partida para la elaboración del modelo. En los modelos basados en la observación, el punto de partida son los *datos experimentales*, a partir de la cual se construye un modelo. Esta es principalmente de naturaleza empírica. Por el contrario, el punto de partida para los

modelos basado en la física, son las leyes universales de la física que deberían describir los fenómenos físicos que se presuponen.

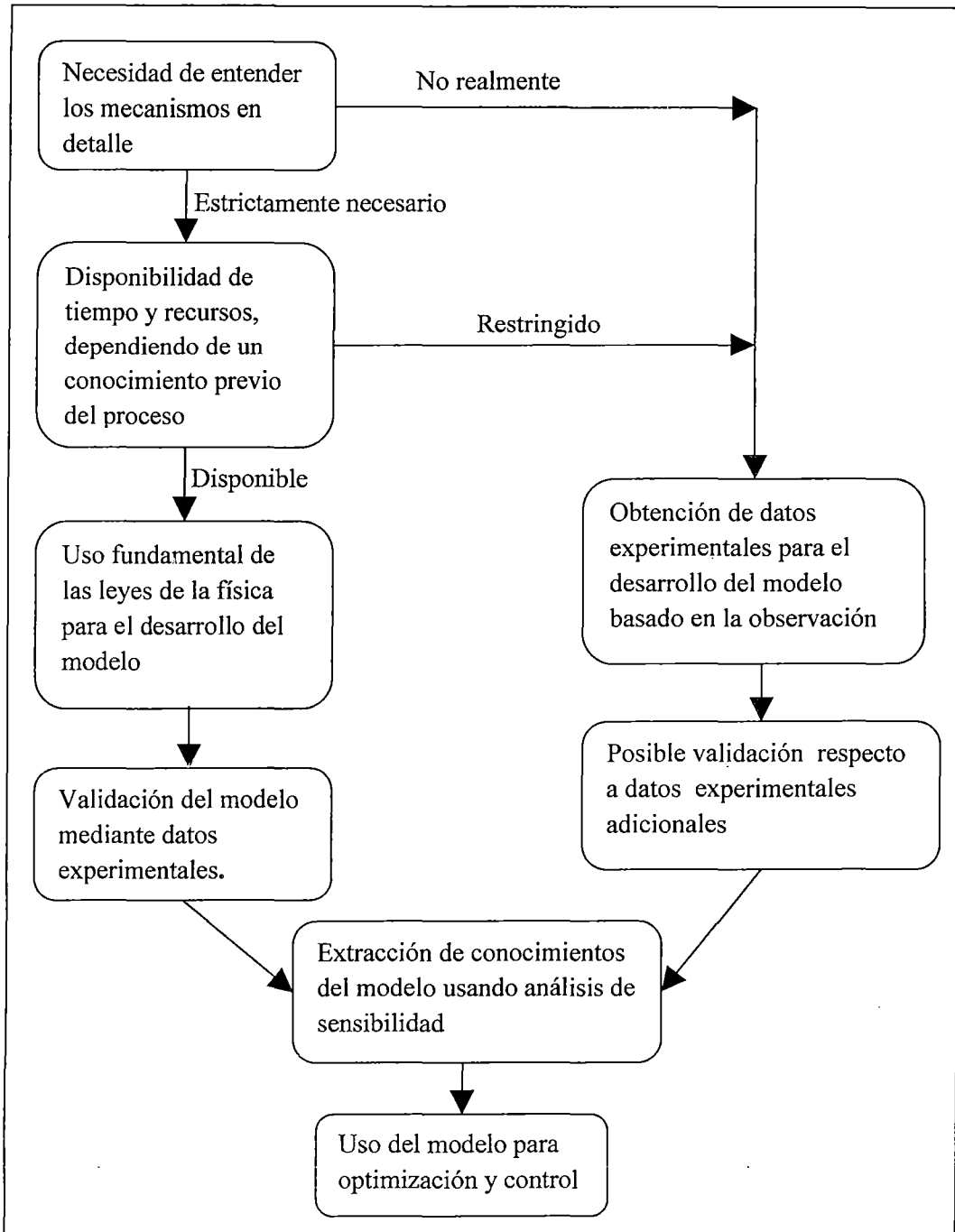


Figura 3.2. Esquema general del desarrollo de un modelo y su uso.

En la Figura 3.3 se presentan diversos enfoques para el planteamiento de un modelo, los que pueden ser considerados de categorías oposicionales. Generalmente se usarán más de un enfoque y, muchas veces también, opuestos, dado que es de primera importancia en el contexto actual conocer los mecanismos que participan en un proceso.

Los modelos basados en la física consisten de ecuaciones gobernantes que describen la física del proceso junto con las ecuaciones que describen las condiciones en el límite del sistema (cómo el sistema interactúa con el entorno). Estas condiciones son necesarias para obtener soluciones particulares de la ecuación o ecuaciones gobernantes del proceso.

La solución que se obtenga de las ecuaciones y sus condiciones límite pueden ser una representación exacta como se desee del sistema físico, mediante la inclusión de todos los detalles de los procesos físicos necesarios.

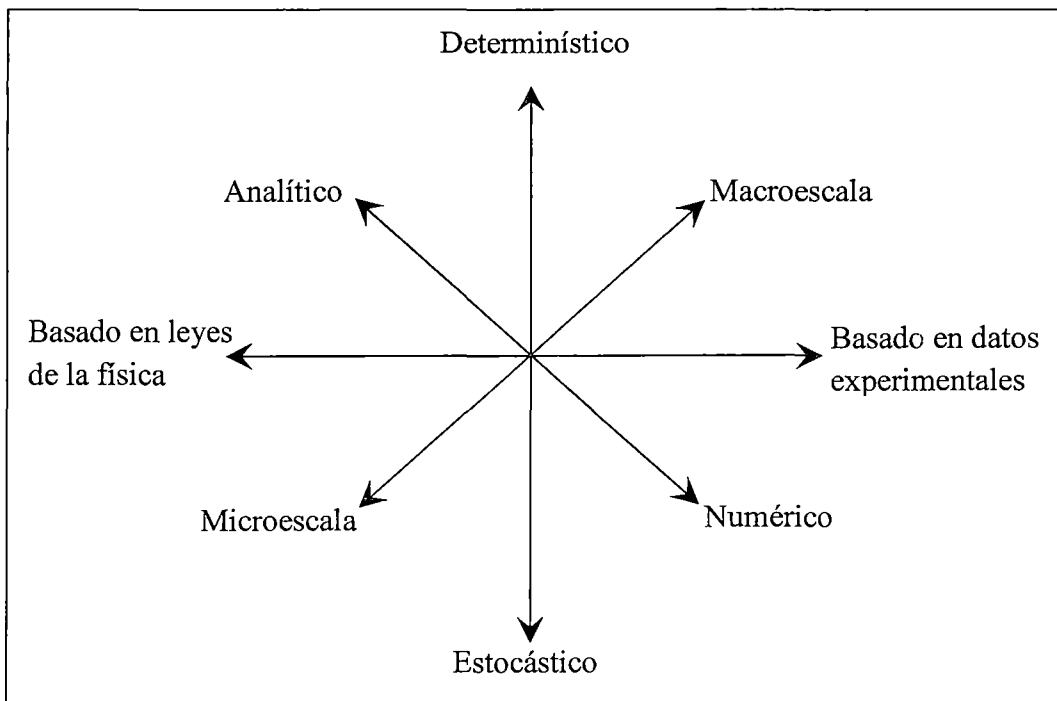


Figura 3.3. Diversos enfoques del desarrollo de un modelo.

Los modelos basados en la física tienen varias ventajas sobre los modelos basados solos en la observación:

- (1) Pueden ser representaciones exactas del proceso físico.
- (2) Permiten la comprensión a profundidad de los procesos físicos en lugar de tratarlo como una caja negra.
- (3) Posibilitan apreciar fácilmente el efecto de los cambios hechos en los parámetros del sistema o del proceso.
- (4) Modelos de dos procesos diferentes pueden compartir el mismo parámetro básico (por ejemplo, la difusividad másica y la permeabilidad medida para un proceso puede ser útil para otros procesos).

Las desventajas de un modelo basado en la física son las siguientes:

- (1) Se requiere alto nivel de conocimientos técnicos especializados.
- (2) Se requiere más trabajo para aplicarlo a problemas reales.
- (3) Se requiere más tiempo y mayores recursos económicos.

El desarrollo de los modelos basados en las leyes físicas es en ciertas circunstancias difícil de lograr cuando el proceso es complejo. No obstante que un modelo basado en la física también puede ser ajustado en base a los datos de medición (experimentales), los modelos basados en la observación se deducen principalmente de los datos medidos. Los modelos de observación son modelos de caja negra de distintos grados en relación con la física del proceso. Los modelos estadísticos clásicos pueden tener un modelo en mente (a menudo basado en una comprensión del proceso) antes de la obtención de los datos medidos.

Según **Sablani et al. 2006 [30]**, en la tecnología de productos naturales es necesario recurrir a diversos enfoques en el desarrollo de un modelo, porque durante el proceso real puede ser que se produzcan transformaciones físicas, químicas y biológicas de la materia. Muchas de estas transformaciones no se han caracterizado, sobre todo debido a lo siguiente:

- (1) La existencia de una gran variedad de materiales posibles.
- (2) Dado su origen biológico, las variabilidades son significativas, incluso en el mismo material.
- (3) Debido a que el material contiene grandes cantidades de agua, a menos que las temperaturas sean bajas, siempre hay evaporación en la matriz herbácea. Esta evaporación es difícil de manejar en los modelos basados en la física y esto incrementa complejidad del proceso.
- (4) En muchos de los procesos de productos naturales incluyen acoplamiento de diferentes mecanismos físicos, lo que agrava la complejidad del proceso.

3.2. Mecanismos en la extracción del aceite esencial.

Tzia and Liadakis, 2003 [31] manifiesta que desde un punto de vista de ingeniería, la extracción de productos naturales es una operación de transferencia de masa de multicomponentes, multifásico, en estado no estacionario del sólido a un disolvente.

Durante la extracción, la concentración del soluto (aceite esencial) en el interior del sólido varía determinando la condición de estado no estacionario. Una serie de etapas ocurren durante el período de interacción entre las partículas que contienen al soluto y el solvente

que efectúa la separación, tal como se representa esquemáticamente en la Figura 3.4. Estas etapas son:

- i. Entrada del disolvente en la matriz sólida herbácea.
- ii. Los componentes se solubilizan y/o se transforman.
- iii. El transporte del soluto al exterior de la matriz sólida.
- iv. La migración del soluto extraído de la superficie externa del sólido hacia la solución.
- v. Movimiento del extracto con respecto a los sólidos (el desplazamiento del extracto), la separación y descarga del extracto, y de los sólidos.

Como resultado de estas etapas, la extracción se lleva a cabo a una velocidad expresada en términos de la masa de soluto lixiviados / unidad de tiempo o comúnmente conocido como el cambio en la concentración de soluto en el sólido / unidad de tiempo $\left(\frac{dc}{dt}\right)$.

También puede ser de interés, conocer la velocidad relativa a la que las diferentes especies químicas del aceite esencial migran a través del sólido. Dado que las etapas elementales mencionadas se producen a su propio ritmo y en algunos casos de forma secuencial, la velocidad global del proceso de extracción se determina por la etapa más lenta o la etapa controlante de la velocidad.

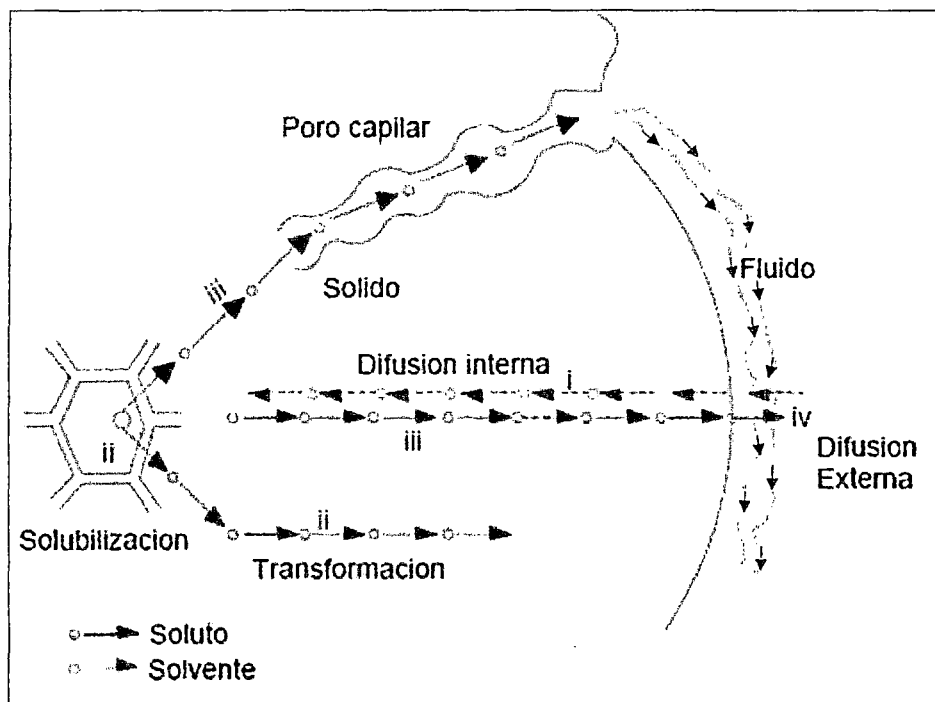


Figura 3.4. Esquema de los principales pasos en la extracción por solventes de partículas sólidas biológicas.

En los modelos basados en las leyes físicas, es fundamental la ecuación del balance de una o más propiedades de conservación. Este procedimiento comienza luego de establecer un sistema conceptual (físico) o abstracto (figurado). En el esquema presentado en la Figura 3.5 [Ozilgen 2011][32], establece el balance de alguna propiedad alrededor de un sistema, el cual se describe mediante la ecuación:

$$\begin{bmatrix} \text{velocidad de} \\ \text{entrada de la} \\ \text{propiedad} \\ \text{al sistema} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{velocidad de} \\ \text{salida de la} \\ \text{propiedad} \\ \text{del sistema} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{velocidad de} \\ \text{generación de} \\ \text{la propiedad} \\ \text{en el sistema} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{velocidad de} \\ \text{consumo de} \\ \text{la propiedad} \\ \text{en el sistema} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{velocidad de} \\ \text{acumulación} \\ \text{de la propiedad} \\ \text{en el sistema} \end{bmatrix}$$

o

$$\Psi_{in}^* - \Psi_{out}^* + \Psi_{gen}^* - \Psi_{cons}^* = \Psi_{acc}^* \quad (3.1)$$

Donde:

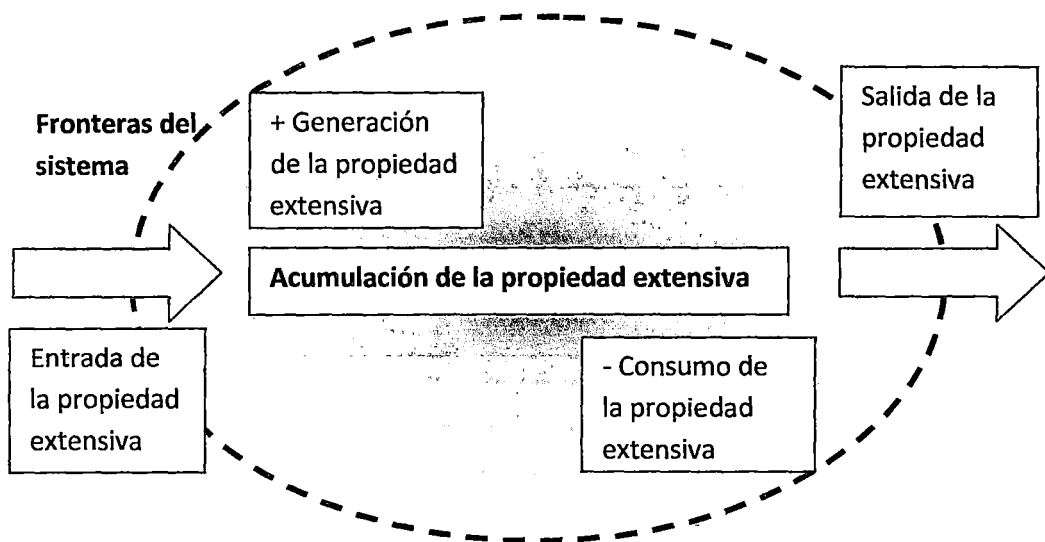


Figura 3.5. Sistema donde se aplica el balance de conservación de una propiedad.

Ψ_{in}^* = Velocidad al cual una propiedad extensiva entra al sistema.

Ψ_{out}^* = Velocidad al cual una propiedad extensiva sale del sistema.

Ψ_{gen}^* = Velocidad al cual una propiedad extensiva se genera en el sistema.

Ψ_{cons}^* = Velocidad al cual una propiedad extensiva se consume en el sistema.

Ψ_{acc}^* = Velocidad al cual una propiedad extensiva se acumula en el sistema.

Ψ^* = Puede ser cantidad de movimiento, energía o masa.

Para el caso de energía, el sistema en el cual se aplicaría el balance energético se presenta a continuación, Figura 3.6.

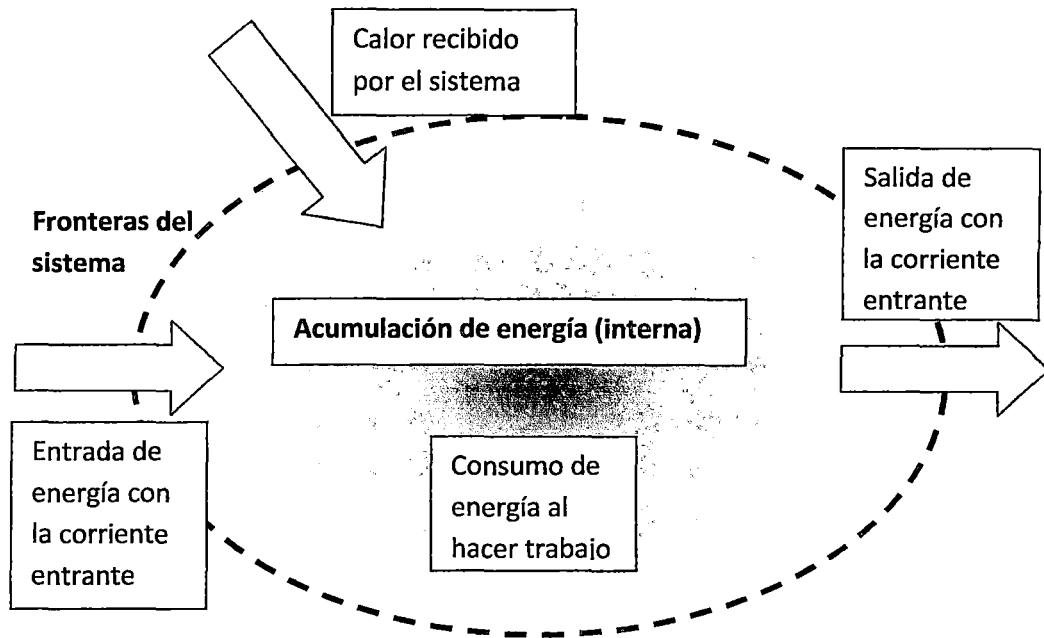


Figura 3.6. Sistema donde se aplica el balance de conservación de energía.

Romdhane1 y Tizaoui [33] ponen de manifiesto que muy pocos autores han tratado de modelar la cinética de los procesos de extracción de aceites esenciales por arrastre por vapor. Esto puede deberse a muchos factores, relacionados tanto con la dificultad de resolver el problema de la transferencia de masa debido a la naturaleza compleja del sistema (porosidad interna y externa, las dimensiones del sólido, localización del aceite en la planta, etc.) como al hecho de que la industria tiende a utilizar los métodos tradicionales de extracción por arrastre de vapor y se le da poca importancia al control y la optimización del proceso. Una comprensión fundamental de los procesos de extracción de aceite por arrastre de vapor es por tanto necesario.

El modelamiento de la extracción de aceites esenciales por arrastre con vapor no encuentra una respuesta o solución única, se presentan diversos resultados debido a los factores físicos anteriormente indicados (página 30) y también a que no se conoce a cabalidad todos los mecanismos físicos que describen el comportamiento de este proceso. Por ello es que se tienen que establecer una serie de presunciones [Milojević et al., 2008][10], [Romdhane1 and Tizaoui, 2005][33], [Benyoussef et al., 2002][34].

3.2.1. Análisis del Proceso en la Extracción del Aceite Esencial.

3.2.1.1 En el equipo (sistema).

[Milojević et al., 2008][10], [Romdhane1 and Tizaoui, 2005][33] [Benyoussef et al., 2002][34].

En este caso se hacen las siguientes presunciones:

- a) La presión y la temperatura son constantes en el aparato.
- b) La condensación del vapor se produce sólo en el condensador.
- c) El agua floral está saturada por los compuestos hidrosolubles del aceite esencial.
- d) La masa de vapor de agua en el alambique, en el tubo de conexión, en el condensador, así como en el separador son mucho menores que la masa de agua líquida que queda en el recipiente.
- e) El flujo de la corriente de vapor a través del alambique, en el tubo de conexión y en el condensador son flujos tipo pistón.
- f) La mezcla de vapor de agua y aceite esencial en el alambique es perfecta.

3.2.1.2 Durante el proceso.

[Milojević et al., 2008][10], [Romdhane1 and Tizaoui, 2005][33], [Benyoussef et al., 2002][34].

En este caso se hacen las siguientes presunciones:

- a) Las partículas de la planta son de igual tamaño y forma (con estructuras de formas geométricas simples, de distancia radial característica R), y no cambian su tamaño y forma durante el proceso.
- b) La concentración del aceite esencial sobre cada una de las partículas sólidas es considerada homogénea.
- c) El arrastre de los componentes volátiles del aceite esencial por el vapor de agua, es un proceso de transferencia de masa desde la partícula sólida (estructura porosa de la semilla y que son depósitos del aceite esencial) a la fase fluida.
- d) Los coeficientes de difusión de los componentes del aceite esencial es constante; la difusión del disolvente (vapor de agua) es insignificante en comparación con las otras etapas del proceso.
- e) La concentración del aceite esencial en la superficie externa de las partículas (frutos) de la planta en cualquier momento y durante el proceso es cero, debido a su evaporación instantánea "lavado" de las superficies.

- f) No hay resistencia al transporte de masa del aceite esencial desde la superficie externa de las partículas de la planta hacia la corriente de vapor.
- g) Se considera que durante la evaporación del aceite, éste se encuentra en equilibrio líquido-vapor casi instantánea.
- h) Una parte del aceite esencial se encuentra en la superficie externa de las partículas (soluto libre) y el resto (soluto ligado químicamente) se distribuye uniformemente dentro de la materia vegetal de la planta.

Las propiedades físicas, químicas y termodinámicas de los diferentes tipos de aceites esenciales varían poco, por lo que se considera que ellas son constantes.

La factibilidad de aplicar todos o algunas de las presunciones anteriormente establecidas en el desarrollo del *modelo matemático del proceso*, recurriremos a la Figura 3.7 para su mejor comprensión.

Usualmente el pre-tratamiento que se hace a la materia prima, fuente del aceite esencial es la molienda; mediante este proceso se fragmenta la materia prima en partículas pequeñas con un objetivo claro que es el de aumentar el proceso de extracción del aceite esencial por los siguientes aspectos:

- i. Aumento del área de transferencia superficial para incrementar la transferencia de masa.
- ii. Reducir la trayectoria de la transferencia del aceite de la partícula hacia el exterior.
- iii. Obtener una pequeña cantidad de aceite esencial libre (como consecuencia del rompimiento de las tricomas glandulares en el caso de las hojas) esparcida sobre la superficie de las partículas.

Esto hace que el aceite esencial se encuentre distribuido, antes del proceso de extracción dentro de las partículas y sobre la superficie de las partículas (formando una capa de aceite esencial con algo de agua).

En los trabajos de **Milojević et al., 2008[10]**, **Romdhane1 - Tizaoui, 2005[33]** y **Xavier et al., 2011[35]**, el soluto (aceite esencial) se considera como uno solo, que vendría a ser un pseudocomponente, se identifican dos etapas fundamentales sucesivas para la transferencia de masa del aceite esencial, desde su depósito, en la planta, hasta ser arrastrada por el flujo de vapor de agua.

3.2.1.3 Transferencia de masa del aceite desde la partícula hacia la capa superficial.
 [Sharma et al.,2003][36].

Esta transferencia de masa está denotado por el número uno (1) en la Figura 3.7.

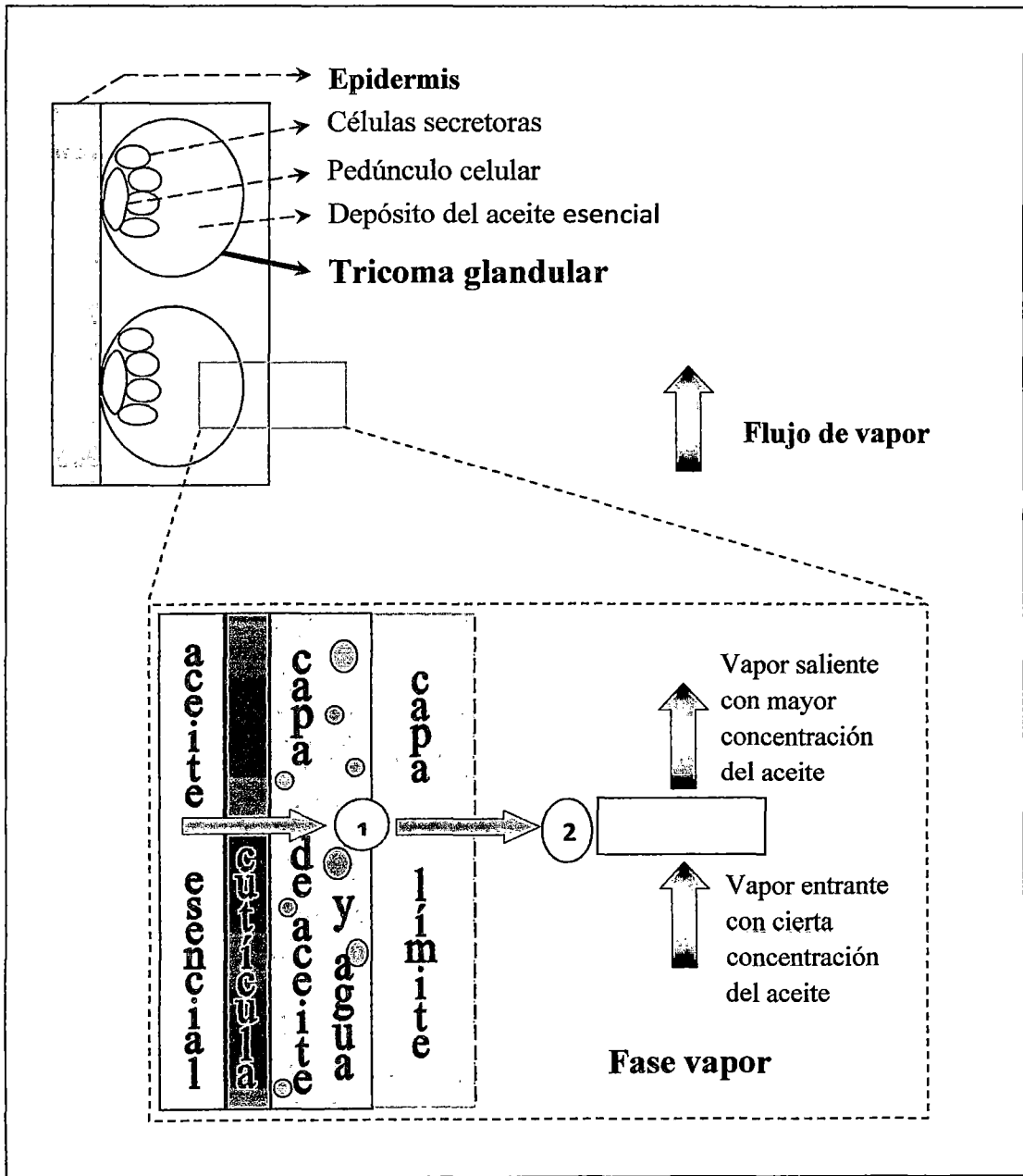


Figura 3.7. Esquema de transferencia del aceite esencial del tricoma al flujo de vapor. Los números 1 y 2 se refieren a los flujos de transferencia del aceite esencial al vapor. Esquema válido para hojas y flores [Sharma et al.,2003][36].

Sus características son:

- El mecanismo es gobernado por el proceso de difusión de masa. El coeficiente de difusión es paramétrico más que fenomenológico debido a la complejidad del sistema.
- Esta etapa es lenta y por lo tanto de menor rendimiento en la extracción del aceite esencial comparado con la etapa 2.

3.2.1.4 Transferencia de masa del aceite desde la capa superficial del fruto hacia la corriente de vapor. [Sharma et al.,2003][36].

Esta transferencia de masa está denotado por el número dos (2) en la Figura 3.7. Sus características son:

- Ocurre en un corto periodo de tiempo; que puede ser referido al tiempo total del proceso de extracción considerando la segunda etapa.
- El soluto (aceite esencial) se considera libre, esto quiere decir que no forma adsorciones ni de carácter químico y/o físico con la materia superficial de la partícula.
- La velocidad de extracción del soluto es muy rápido.
- La resistencia a la transferencia de masa es poco considerable, de modo que se puede despreciar en muchos casos.
- En el ítem anterior hace que se establezca la siguiente aproximación: que el soluto (aceite esencial) alcance el equilibrio termodinámico en la interfase entre el sólido y el vapor.

CAPÍTULO IV

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

4.1. Equipo destilador de aceite esencial.

En la Figura 4.1 se observa un equipo sistema destilador de arrastre con vapor de acero inoxidable 304 L diseñado para ser operado de la manera más práctica, sin necesidad de los complicados cierres mecánicos. Este sistema destilador de arrastre con vapor a nivel piloto consta de cuatro partes básicas: **Calderín, alambique extractor, condensador de doble tubo** (estas tres partes se encuentran unidas por medio de un cierre hidráulico) y finalmente un **separador de fases**, conocido como Florentino. La alimentación de la materia prima al alambique se hace en forma rápida, esto implica que los sellos de la unión de las partes móviles del equipo deben ser herméticos.

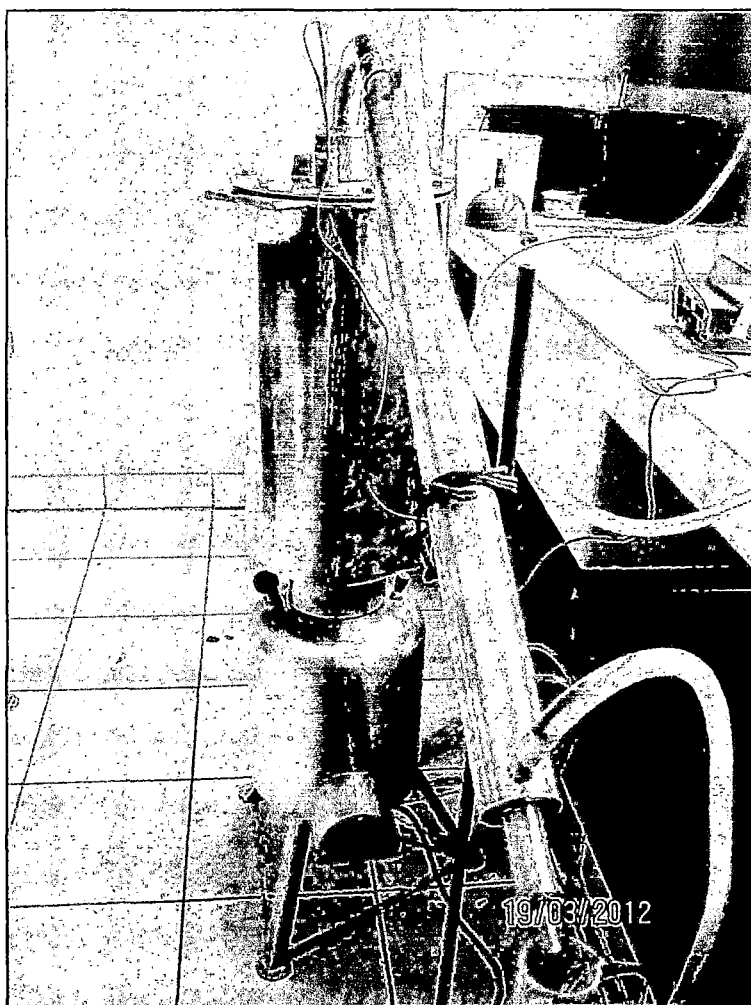


Figura 4.1. Equipo para el proceso de Extracción del Aceite Esencial del Molle.

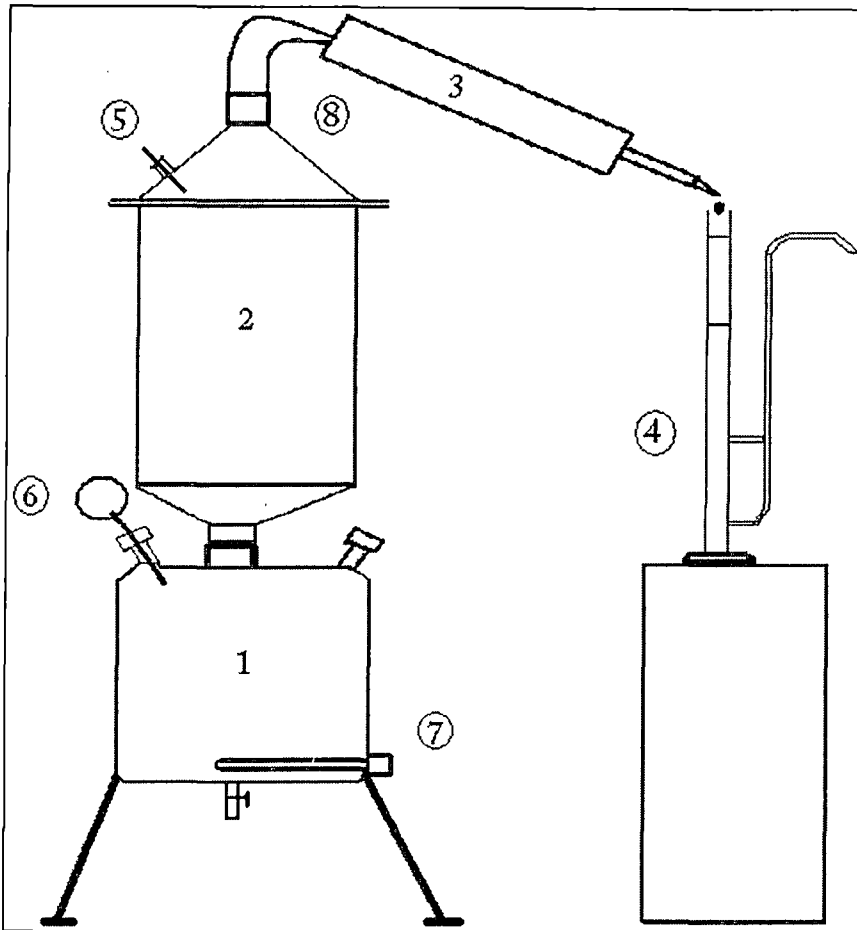


Figura 4.2. Partes del equipo destilador.

1. Calderín, con un volumen de 12 litros.
2. Alambique extractor aislado con fibra de vidrio, con 16.45 L de capacidad neta para el lecho del molle. El diámetro interno es de 21,1 cm y la altura es de 47 cm.
3. Condensador con un paso por el tubo y un paso por el casco, flujos en contracorriente.
4. Florentino en vidrio Pyrex.
5. Conector para termocupla o termómetro digital.
6. Manómetro.
7. Resistencia Eléctrica: 1420 watt.
8. Tapa Cónica Bridada y Cierre Hidráulico conectado al Condensador

Con una fuente calorífica, el hervidor (Calderín) debe generar una corriente de flujo de vapor que atravesará todo el lecho de molle arrastrando el aceite esencial.

4.2. Descripción del Proceso y Requerimientos del Equipo Extractor.

- El equipo destilador nos permite procesar cantidades del fruto de molle descascarado que varían entre 1 a 4 kg, sin romper la semilla del fruto. Si se rompe la semilla, ésta adsorbe parte del aceite, que luego no se puede extraer por arrastre con vapor, disminuyendo el rendimiento en la extracción del aceite.
- El equipo destilador permite variar los flujos de vapor entre 1,9 a 3,5 kg /h. Son márgenes de flujo de vapor que permitirán analizar el comportamiento de la velocidad de extracción del aceite esencial y comparar mediante una familia de gráficos como influye el flujo de vapor en la transferencia de masa.
- Un objetivo importante, es determinar el tiempo máximo de extracción del aceite esencial. Para lograr este objetivo es necesario hacer pruebas experimentales hasta un tiempo de operación que nos permita llegar hasta el agotamiento del aceite esencial. Con esta información se permitirá visualizar el comportamiento de la curva de extracción (volumen de aceite extraído vs tiempo de extracción) del proceso completo.
- Otro objetivo importante es evaluar la altura del lecho de semilla en el proceso. A mayor carga de semilla mayor densidad de lecho y aunque el tamaño de partícula no es tan pequeño para provocar el compactamiento del lecho, en alguna medida aumentará la resistencia al paso de vapor, disminuyendo el rendimiento en la extracción del aceite esencial.
- Una variable importante a evaluar será el volumen del aceite esencial extraído versus el tiempo de operación, esta variable será medida usando probetas que permitan tomar volúmenes de la mezclas destiladas versus tiempo. (Anexo XI, Gráficos 1,2,3,4,5,6)

4.3. Tratamiento de la Materia Prima: Molle.

El fruto del molle recolectado debe ser maduro y se debe seleccionar los frutos de buena calidad (Figura 4.3), luego se tendrán que secar a la temperatura del medio ambiente en un lugar aireado (Figura 4.4). Posteriormente después del secado ambiental, se retira del fruto la cáscara superficial en forma manual (Figura 4.5), luego se somete a un lavado con agua a temperatura del medio ambiente para quitarle la capa de azúcares que tiene en la superficie; en este lavado no se observa extracción de aceite. Luego se hace otro secado al medio ambiente (Figura 4.6), quedando listo para el descascarado (molienda: ruptura de la capa fina del mesocarpio) para ello se usa un molino de discos, que es el apropiado para

que solo descascare el fruto y no triture la semilla (Figura 4.7). El descascarado se hace minutos antes del proceso de extracción, para evitar la evaporación del aceite esencial.

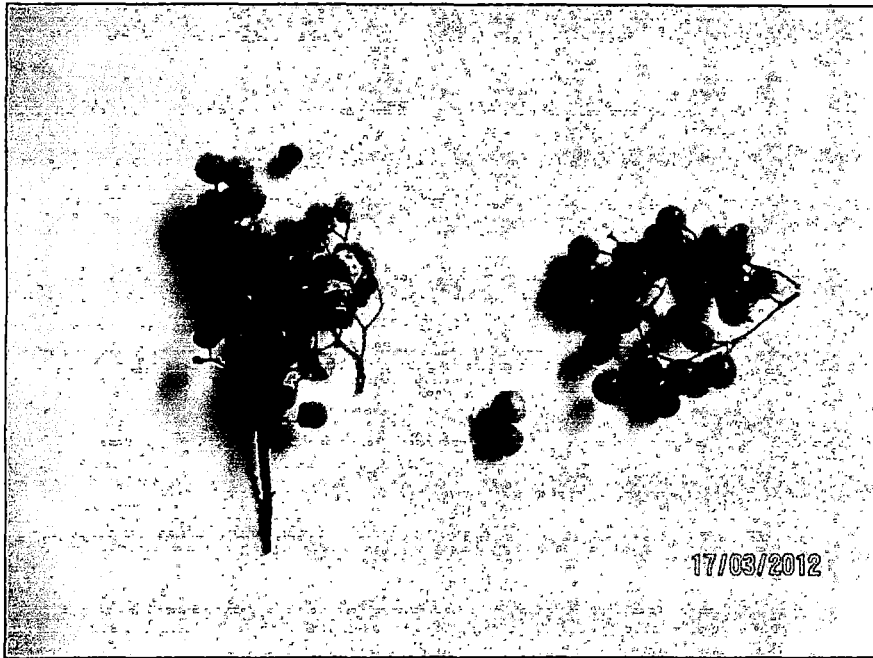


Figura 4.3. Clasificación de las semillas de molle.



Figura 4.4. Secado del molle al medio ambiente.

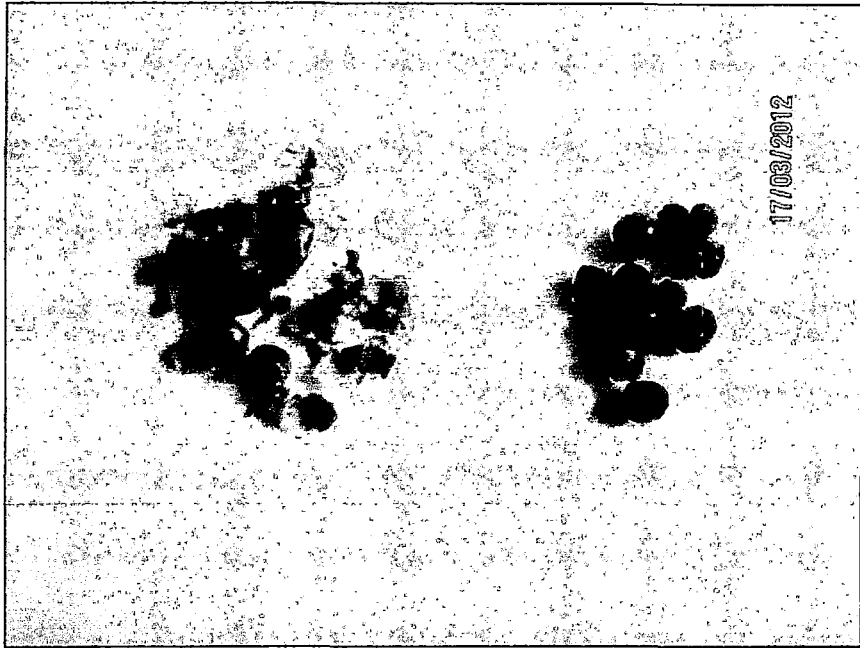


Figura 4.5. Descascarado del fruto de molle seco.

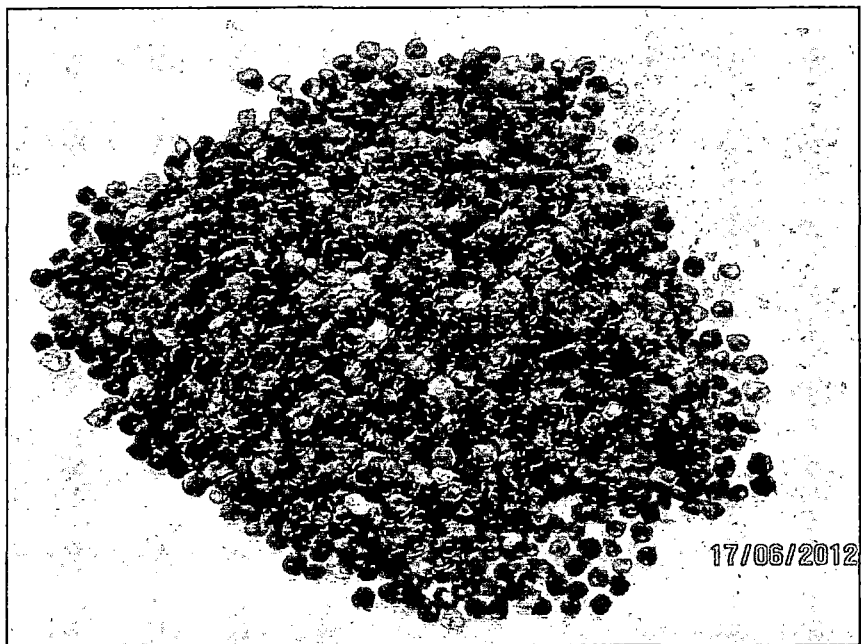


Figura 4.6. Fruto del molle seco (después del lavado con agua) a ser usado en la extracción del aceite esencial.



Figura 4.7. Molienda del fruto de molle.

Durante el proceso de secado al medio ambiente es poco probable que se produzca degradación, para que esto ocurra se necesitará condiciones más drásticas de secado, es decir altas temperaturas.

4.4. Principales Variables y Parámetros de Operación.

Los principales variables del proceso son el volumen total de aceite esencial extraído y el rendimiento en la extracción del aceite. Los principales parámetros de operación son: la densidad del lecho, flujo de vapor, la presión (del sistema) que se mantendrá constante. Hay una relación directa entre el flujo de vapor y el tiempo de operación. Otro parámetro que también se toma en cuenta es la composición del aceite esencial extraído en el condensado.

4.5. Diseño experimental.

Se establecerá un conjunto de pruebas experimentales en un equipo de arrastre con vapor (descrito en el capítulo 4.1), considerando diferentes pesos del fruto de molle previamente tratados que varían desde 1,0 hasta 4,0 kg.; diferentes flujos de vapor de agua que varían desde 1,93 hasta 3,04 kg/h.; diferentes densidades aparentes (los tamaños del fruto de

molle varían debido al lugar de procedencia) que varían desde 0,3475 hasta 0,4867 g/ml y los diferentes tiempos que duran el experimento que varían desde 39 hasta 101 minutos. La densidad aparente del lecho de molle se medirá tomando la masa del material entre el volumen ocupado en el alambique (g/cm^3).

En la tabla 4.1 se muestra los resultados obtenidos de las pruebas experimentales realizadas en el Laboratorio N° 11 de Físico-Química de la FIQT.

Tabla 4.1. Pruebas experimentales en la extracción del aceite de molle.

P.N°	Peso de semilla (kg)	Flujo de vapor (g/h)	Densidad aparente (g/ml)	Volumen Aceite (ml)	Rendimiento (ml/g)	Rendimiento (g/g)	Tiempo (min)
1	2,0	1990,0	0,3835	115	5,77%	4,81%	66
2	2,0	1930,0	0,4277	122,72	6,14%	5,12%	94
3	2,0	2500,0	0,3972	133,11	6,66%	5,56%	64
4	2,0	2979,6	0,3972	131,38	6,57%	5,48%	60
5	3,0	3040,0	0,4277	197,62	6,59%	5,50%	69
6	3,0	1958,4	0,4277	206,25	6,88%	5,74%	100
7	4,0	3354,4	0,4502	274,39	6,86%	5,72%	86
8	3,0	2150,0	0,4558	186,67	6,22%	5,19%	101
9	3,0	2150,0	0,4766	157,89	5,26%	4,39%	101
10	1,0	1958,4	0,3475	27,88	2,79%	2,32%	39
12	193(*)	1958,4		186,00			25
13	2,0	2083,0	0,4277	122,00	6,10%	5,09%	79
14	3,0	2420,0	0,4558	182,00	6,07%	5,07%	76
15	3,0	2330,0	0,4561	180,00	6,00%	5,01%	84
16	2,0	2205,0	0,4277	158,00	7,90%	6,59%	65
17	3,0	2224,0	0,4867	241,00	8,03%	6,70%	80

(*): Volumen de aceite.

Las pruebas experimentales N° 13, 14, 15, 16 y 17 son pruebas de repetitividad que van a validar las pruebas anteriores, mostrando que la toma de datos fueron correctas por que las gráficas correspondientes se superponen (ver Anexo XII).

El procedimiento para cada uno de los experimentos realizados es la siguiente:

- 1) El calderín se llena con 9 litros de agua y luego se conecta a un toma corriente para que caliente el agua (por medio de resistencias eléctricas) hasta que hierva.
- 2) El fruto de molle (previamente tratado) se pesa en una balanza mecánica de triple barra marca OHAUS con capacidad de 610 gramos y una precisión de 1 gramo.

- 3) El fruto del molle se traslada a un molino de discos para producir la ruptura del mesocarpio, para ello se regula la separación de los discos.
- 4) El fruto de molle que sale del molino, inmediatamente se alimenta al alambique que en su fondo tiene una base de plato perforado que sostiene todo el molle.
- 5) El alambique se une al calderín por medio de roscas internas y después de 30 minutos aproximadamente la corriente de flujo de vapor de agua atraviesa el lecho de los frutos de molle arrastrando el aceite esencial hacia el condensador.
- 6) En el condensador la corriente de la mezcla de vapor de agua y aceite esencial pasan a la fase líquida.
- 7) El líquido condensado (inmiscible), se separa usando de un separador de fases llamado Florentino, el aceite esencial que es menos denso (0.835 g/ml) que el agua, la cual facilita la separación inmediata.

El caudal del agua floral se medirá por volumetría usando probetas de 500 ml, en vez de medir el flujo del vapor saturado, porque es más preciso y tiene menores fluctuaciones, debido a la condensación del vapor en las conexiones del alambique destilador. Durante los experimentos, el volumen del aceite esencial se medirá con una precisión de $\pm 1,0$ ml respecto al tiempo, a partir de la primera gota del agua floral que caiga del florentino.

4.6. Resultados Experimentales.

4.6.1. Localización del aceite esencial en el fruto del molle.

Para confirmar la hipótesis de que el aceite esencial del molle se encuentra en el mesocarpio, se hace un análisis histológico del fruto del molle en La Unidad de Investigación en Productos Naturales de la Universidad Peruana Cayetano Heredia. LID-Laboratorio de Botánica Aplicada.

En la Figura 4.7 se muestra un corte transversal del fruto seco de molle, en la cual se observa que el aceite esencial se encuentra localizado en las cavidades secretoras de aceite en el mesocarpio, entonces podemos afirmar que en el lecho de frutos del molle, el aceite se encuentra rodeando la semilla con una delgada capa de aceite esencial, confirmando que el aceite se encuentra en estado libre, no intrapartícula. (ver Anexo I)

Esta condición del molle simplifica el proceso de extracción, donde el **mecanismo controlante** es la evaporación del aceite esencial debido a la corriente del flujo de vapor de agua.

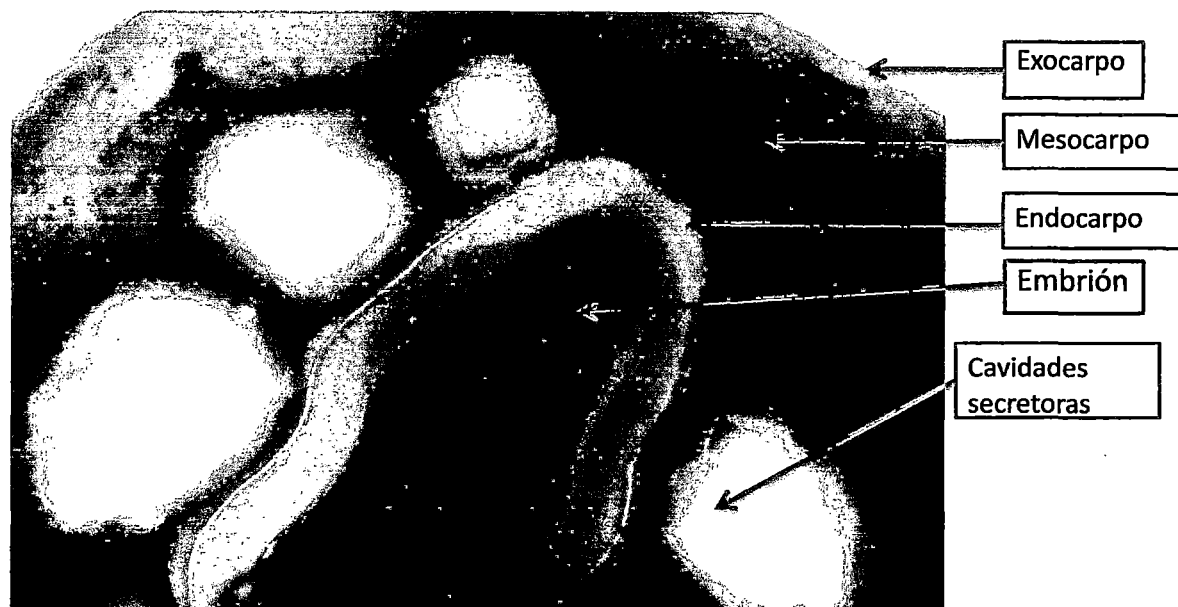


Figura 4.7. Corte transversal: Fruto seco del molle.
Cavidades secretoras de aceite en el mesocarpo.
Microscopio 10x y 40x. LID. UPCH.

4.6.2. Principales componentes del aceite esencial.

La mayoría de los aceites esenciales tienen un gran número de componentes, muchos de ellos son sólo trazas por lo tanto es fundamental realizar los análisis químicos que permitan identificar los principales componentes y sus respectivas composiciones que constituyen el aceite esencial. Se realiza el análisis de la composición química del aceite esencial del molle por Cromatografía de Gases acoplada a Espectrometría de Masas, este análisis fue realizado en La Unidad de Investigación en Productos Naturales de la Universidad Peruana Cayetano Heredia. LID-Laboratorio 209.

El aceite esencial del *Schinus molle* está constituido principalmente por seis componentes: α - felandreno 32,73%, β - mirceno 23,33%, β -felandreno 11,38%, D-limoneno 11,34%, m-cimeno 3,88%, α -pineno 2,93%; los porcentajes en peso. (Ver Anexo II). El análisis Físicoquímico de una muestra del aceite esencial de molle se muestra en el Anexo III.

4.6.3. Efecto de la densidad aparente en el rendimiento.

La densidad aparente está directamente relacionada con el tamaño de partícula. Lo que se busca en la molienda es solo descascarar (quebrar la capa fina del mesocarpio), tratando de no moler las semillas, por lo tanto el tamaño de partícula será una sola, la del tamaño de la semilla (Tabla 4.1). Experimentalmente se demuestra que a mayor densidad aparente menor rendimiento en la extracción del aceite (ver Gráfico 4.1), esto se debe a que los tamaños del fruto del molle varían según el lugar de procedencia (también se debe a que algunos frutos de molle han sido triturados en la molienda).

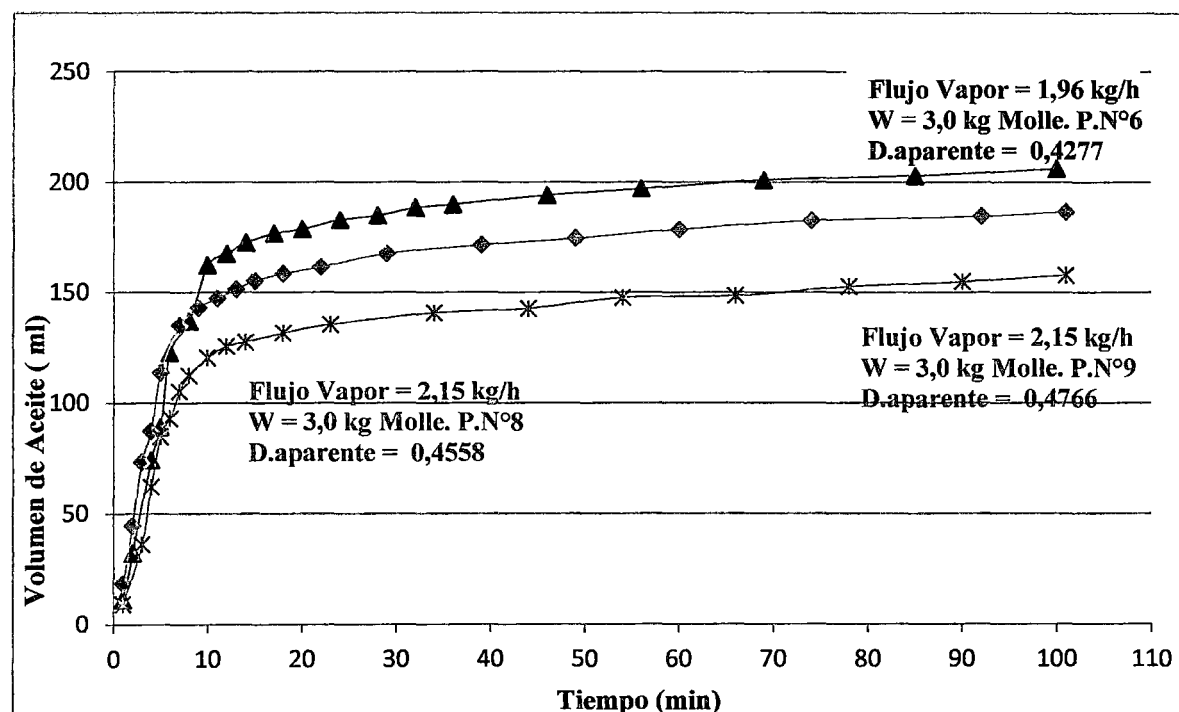


Gráfico 4.1. Extracción del Aceite esencial de Molle (Influencia de la densidad aparente).

Por ejemplo 2 kg de un molle ocupa un volumen de alambique de 5215,4 ml originando una densidad aparente de 0,3835 g/ml. Otra muestra de 2,0 kg de molle ocupa un volumen de alambique de 4 675,86 ml, originando una densidad aparente de 0,4277 g/ml. (Tablas 1 y 2 del Anexo X).

4.6.4. Efecto del flujo de vapor en el rendimiento.

En el Gráfico 4.2 se observa que, para una misma carga (2 kg de molle) y diferentes flujos de vapor, a mayor flujo de vapor, se extrae mayor volumen de aceite esencial, lo cual implica también que se incrementa el rendimiento de extracción (ver gráfico 4 del Anexo

XI). La mayor transferencia de masa del aceite esencial a la corriente de vapor de agua, se produce mediante una evaporación instantánea del aceite esencial en el lecho, esta afirmación es cierta porque el aceite esencial se encuentra libre.

El molle tiene un rendimiento aproximado de 6,07% (182,1 ml aceite/3000g fruto de molle) o 5,06% (151,9 g de aceite/ 3000g de fruto de molle) de **aceite total**, del cual 5,5% (ml/g) corresponde al *aceite libre* y alrededor del 0,5% (ml/g) corresponde al aceite intrapartícula adsorbido por algunas semillas trituradas.

4.6.5. Tiempo Óptimo de Operación.

En el Gráfico 4.2 se observa que, para una misma carga (2 kg de molle) y diferentes flujos de vapor, a mayor flujo de vapor menor tiempo de operación. Así para la Prueba N°2 el tiempo óptimo de operación es aproximadamente 75 min y para la Prueba N°4 el tiempo óptimo se redujo a 60 minutos.

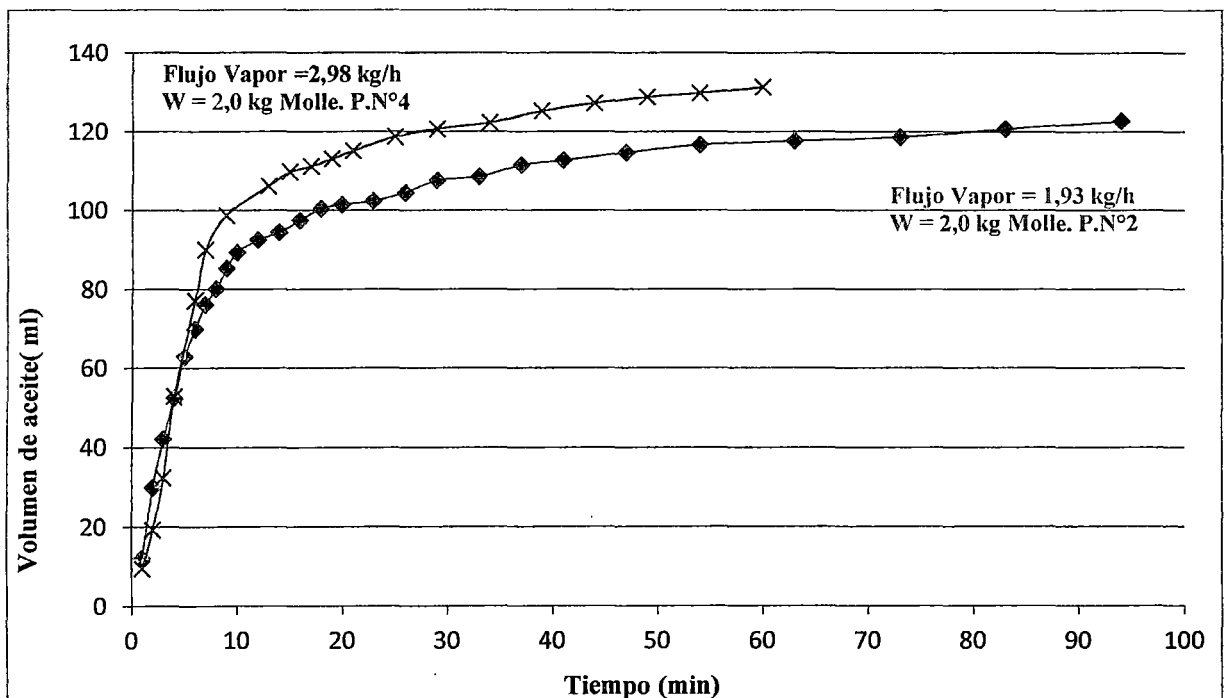


Gráfico 4.2. Extracción del Aceite Esencial de Molle. Masa de Molle: 2,0 kg.

CAPÍTULO V

ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE LOS RESULTADOS EXPERIMENTALES

5.1. Análisis de los resultados

En el Gráfico 5.1, la pendiente de la recta representa el flujo de vapor en el proceso de extracción del aceite esencial de Molle (1,93 kg vapor/h). Aparentemente el flujo de vapor es independiente del aceite a arrastrar, para esta prueba con 2 kg de molle el *flujo neto de vapor destilado* quedó en 1,93 kg/h; si se cargan 3 kg de molle con las mismas condiciones de *flujo neto total inicial*, se espera que el *flujo neto de destilado* se mantenga igual.

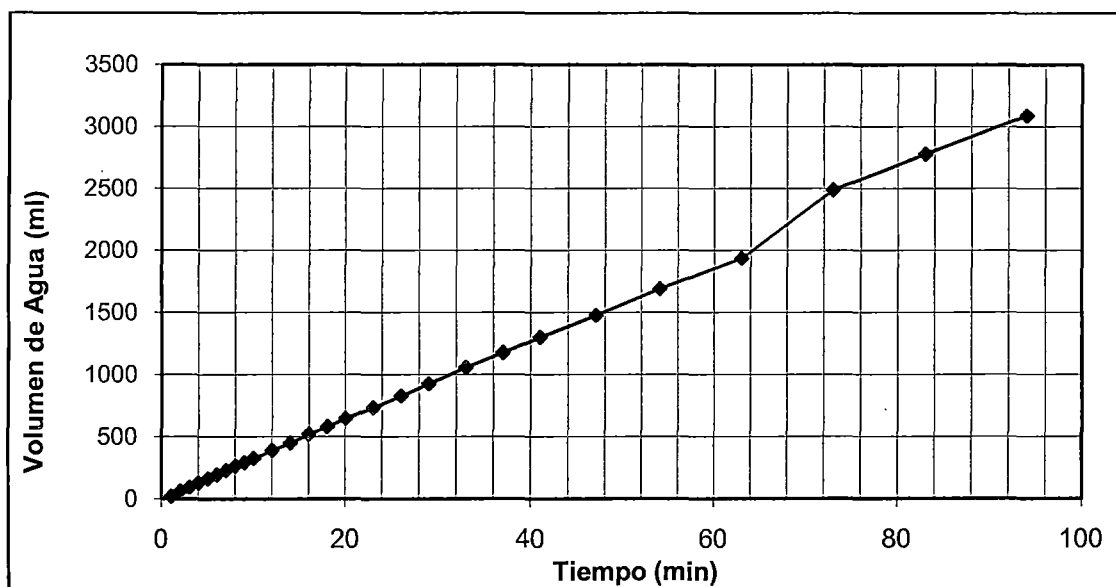


Gráfico 5.1. Extracción de Aceite Esencial de Molle.

Prueba N°2 (W. molle = 2,0 kg).

Flujo de vapor 1,93 kg/h.

En el Gráfico 5.2, en las Pruebas N° 4 y 5, con casi un mismo flujo de vapor total y dos cargas diferentes, se logra un *flujo neto de destilado* prácticamente constante (la misma pendiente), no obstante que en la Prueba N°5 se procesó 1,0 kg más de molle (3kg), el flujo de vapor prácticamente no disminuye con el incremento de carga del fruto del molle en el alambique.

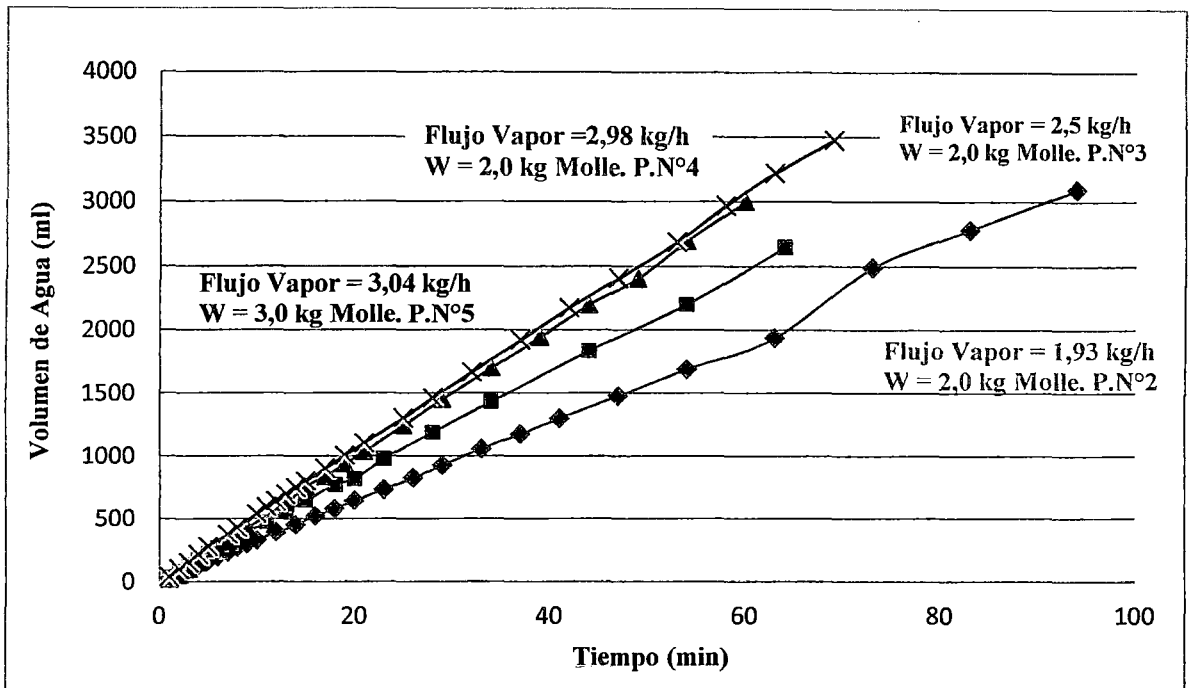


Gráfico 5.2. Extracción Aceite Esencial de Molle.
Influencia del flujo de vapor de agua.

5.2. Tendencias de las curvas experimentales.

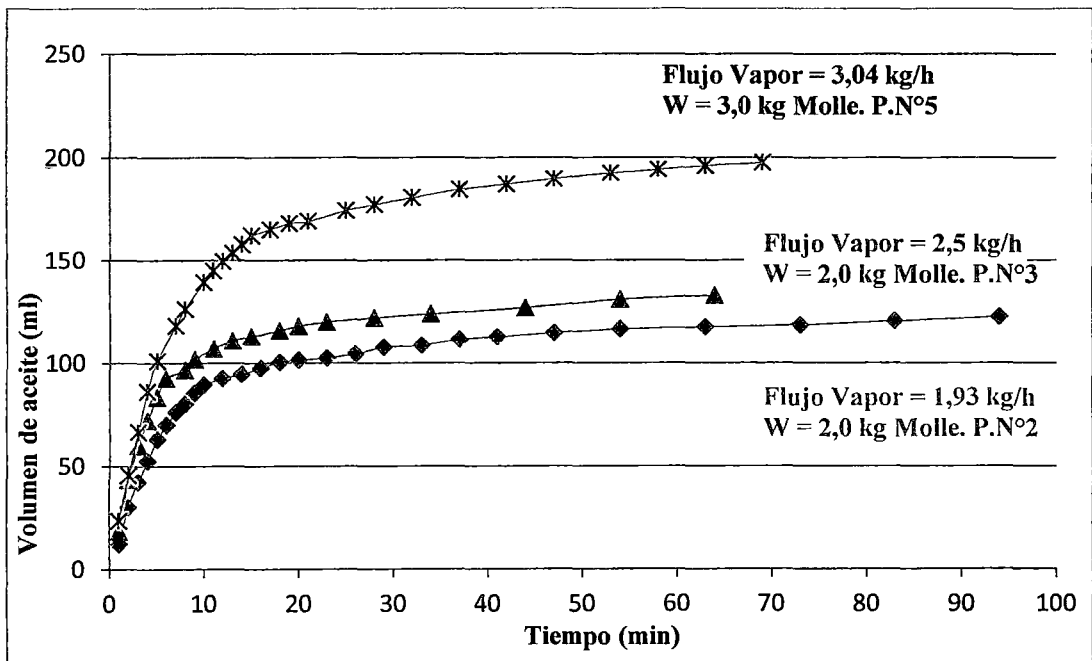


Gráfico 5.3. Extracción del Aceite Esencial de Molle.
Influencia del flujo de vapor.

Del Gráfico 5.3, las Pruebas N° 2 y 3 tienen una carga constante de 2,0 kg de molle, se observa que a mayor flujo de vapor se obtiene una mayor extracción de aceite esencial.

Del Gráfico 5.4, en las Pruebas N°6, 8 y 9 se observa que el flujo de vapor de agua se mantiene casi constante a lo largo del proceso de extracción por arrastre con vapor del aceite esencial de Molle. La curva de la Prueba N°6 está ligeramente por debajo de las otras dos Pruebas N°8 y 9, que tienen las mismas pendientes (dos rectas paralelas), lo que nos demuestra que los flujos de vapor están sobre dimensionados (1,96 y 2,15 kg vapor/h) con respecto al volumen de aceite extraído por arrastre con vapor, por lo que están aún lejos de la saturación. Dicho de otra manera con el flujo de vapor de 2,15 kg vapor/h se puede procesar muestras mayores de 3,0 kg de Molle.

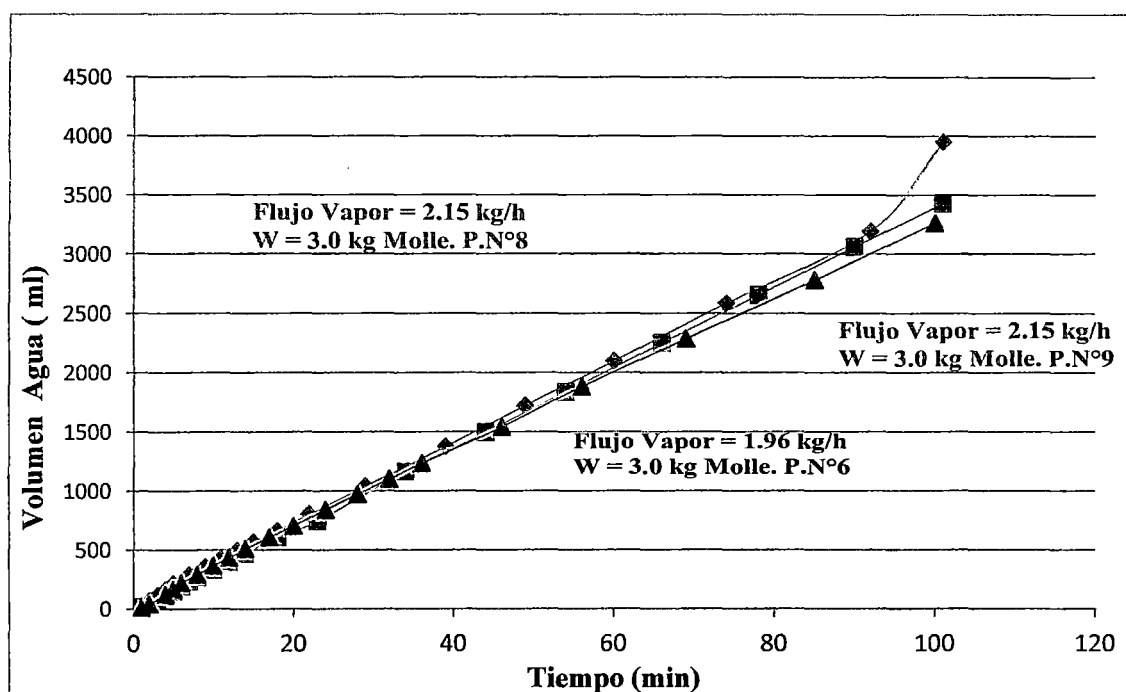


Gráfico 5.4. Flujo de Vapor de Agua. Pruebas N°6, 8 y 9.

En el Gráfico 5.5 (ampliación del Gráfico 5.4), se visualiza que en realidad el *flujo de vapor* de agua no se mantiene constante a lo largo de todo el proceso. Luego de los primeros 5 minutos de extracción hay un cambio en la pendiente (*flujo de vapor*) debido a que en estos primeros minutos (5') la extracción de aceite es mucho mayor saturando de aceite esencial a la corriente de vapor de agua, generando una ligera *curva cóncava*, hasta alcanzar la pendiente constante desde los 5 minutos hasta el final del proceso de 100 minutos.

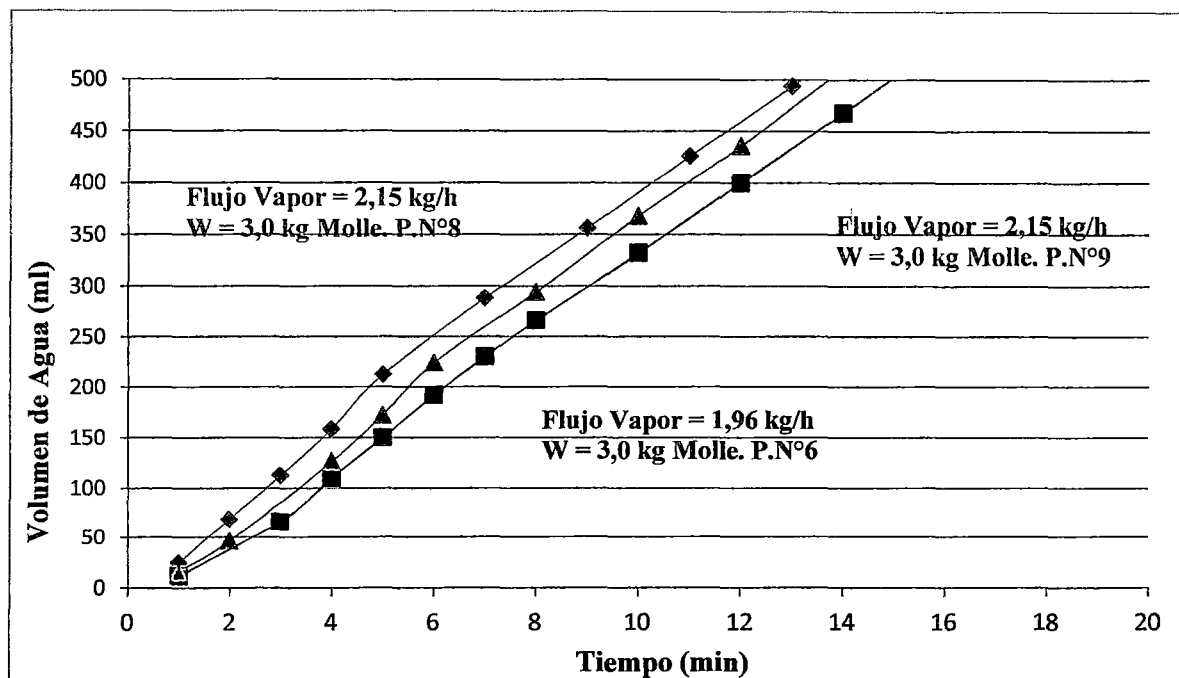


Gráfico 5.5. Flujo de Vapor de Agua. Pruebas N°6, 8 y 9.

5.3. Mecanismos de la extracción experimental.

En el gráfico 5.6 se muestran las graficas de tres pruebas de extracción de aceite realizadas con 2,0; 3,0; 4,0 kg de molle y con diferentes flujos de vapor.

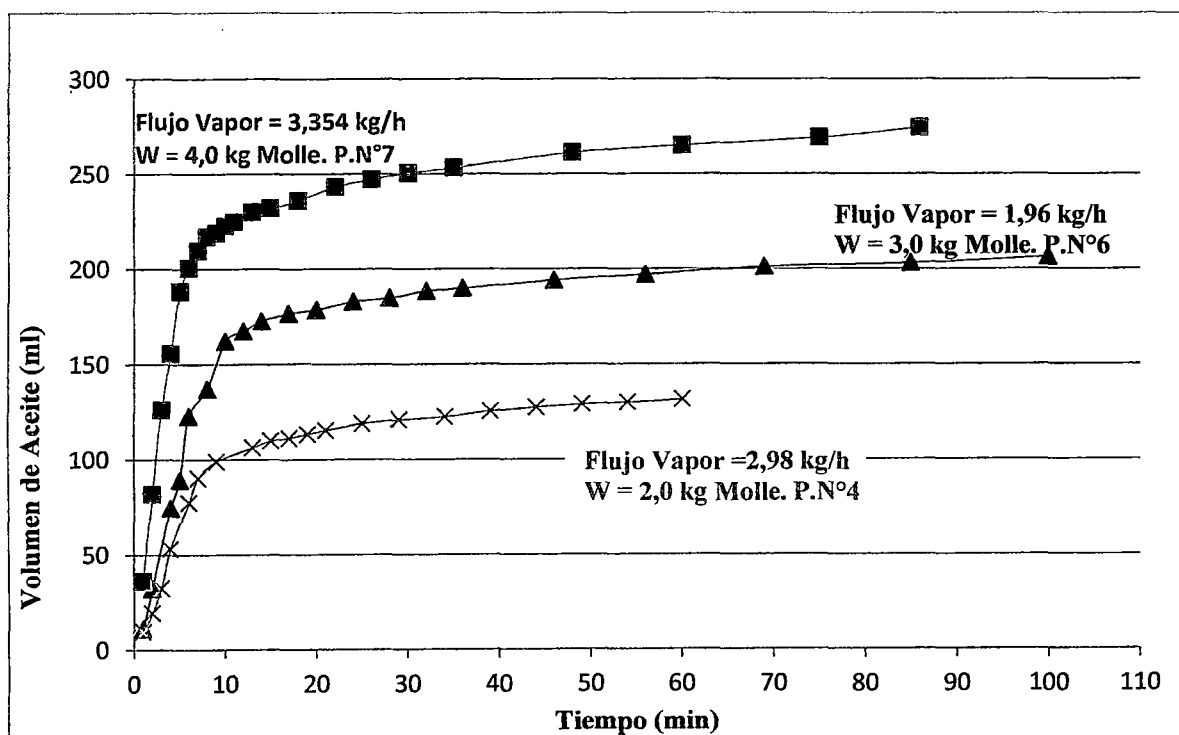


Gráfico 5.6. Extracción del Aceite Esencial de Molle (hay dos Mecanismos).

Masa de Molle: 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

Se visualiza claramente que existen **dos mecanismos** (dos curvas) de extracción del aceite esencial de molle: al inicio del proceso hay una curva cuyas rectas tangentes tienen grandes pendientes hasta los 10 primeros minutos tiempo en el cual se extraen el **aceite libre** situado entre el mesocarpio y el endocarpio; después de los 10 minutos las pendientes de la curva disminuyen bruscamente aproximándose a cero lo cual indica un segundo mecanismo que sería la extracción **del aceite intrapartícula** situado dentro de la semilla del molle. Es decir existen dos mecanismos en un mismo proceso de extracción.

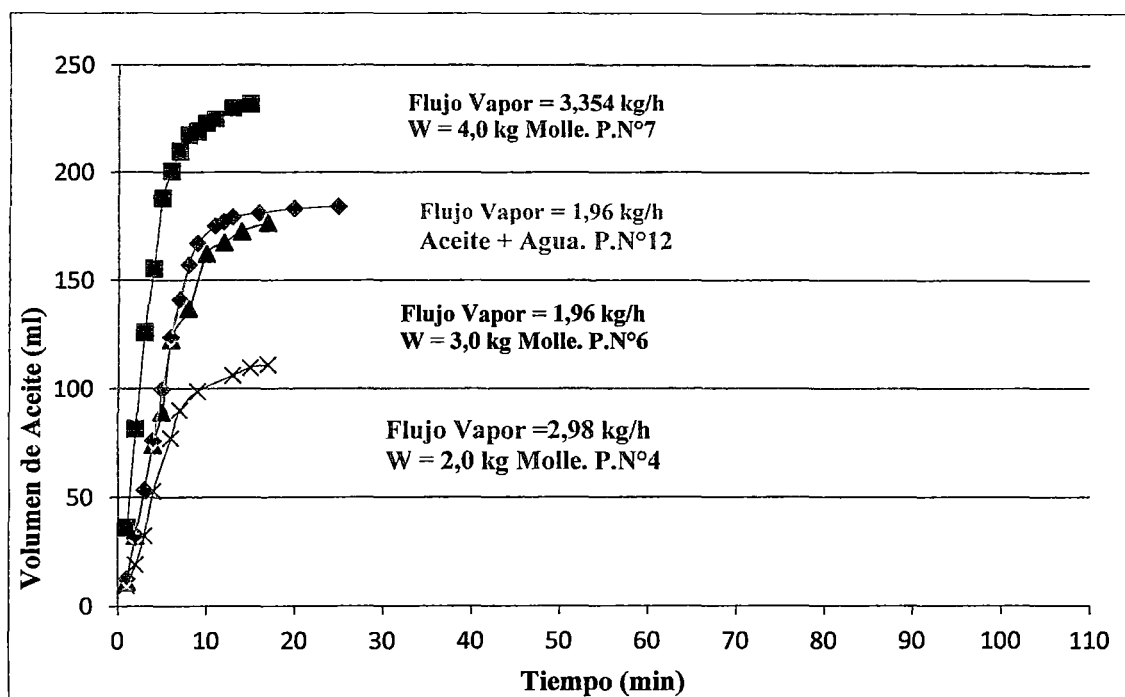


Gráfico 5.7. Extracción del Aceite Esencial de Molle (Primera Etapa).
Masa de Molle: 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

Los Gráficos 5.7 y 5.8 son curvas que se han separado adecuadamente del Gráfico 5.6. En el Gráfico 5.7 tenemos las curvas que representan la extracción del **aceite libre** (Primera etapa) de las Pruebas N° 4, 6 y 7, además tenemos la **re-distilación** (Prueba N°12, con el aceite obtenido de la Prueba N°6), que supuestamente tendría una mayor pendiente que la de la Prueba N° 6, pero resulta que la curva de extracción es casi idéntica a la curva de la Prueba N°6, comprobando con esto que sí existe aceite libre, y que además la resistencia del lecho de semillas no tiene influencia en el arrastre del aceite.

En el Gráfico 5.8 tenemos las curvas que representan la extracción del **aceite intrapartícula** (Segunda etapa) de las Pruebas N° 4, 6 y 7. Se observa que la extracción

del aceite esencial en esta etapa es muy lenta y requiere más tiempo para obtener una cantidad pequeña de aceite, comparada con la extracción de aceite en la primera etapa.

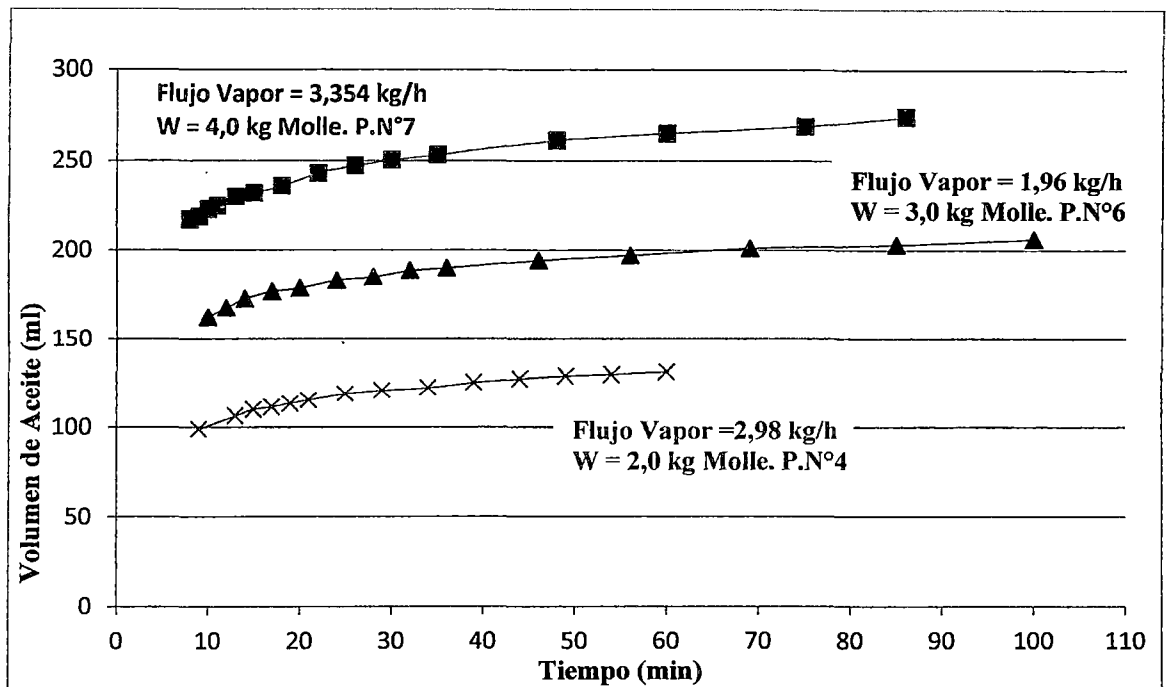


Gráfico 5.8. Extracción del Aceite Esencial de Molle (Segunda Etapa).
Masa de Molle: 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

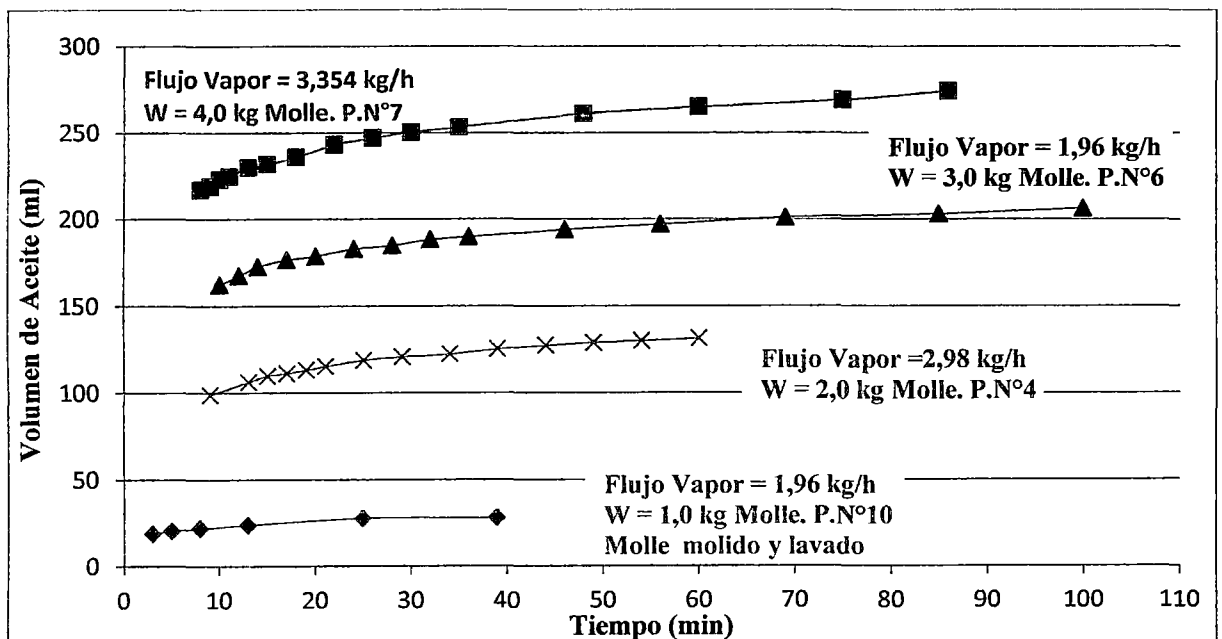


Gráfico 5.9. Extracción del Aceite Esencial de Molle (Segunda Etapa).
Masa de Molle: 1,0; 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

En el Gráfico 5.9, la Prueba N° 10 confirma la hipótesis: de que **existe aceite libre y aceite intrapartícula**. A 1,0 kg de Molle (descascarado) se le hizo un lavado con agua caliente para extraer el aceite libre, obteniéndose una solución oscura, luego esta solución (agua+ aceite+ resina) se destila y sólo se obtiene 1 ml de aceite. A la semilla lavada con agua caliente que quedó de la primera operación, se le somete a un arrastre con vapor y se obtiene 28 ml de aceite (intrapartícula), entonces nos damos cuenta que $(66-28=38\text{ml})$ 38 ml de aceite (libre) se han quedado en la solución atrapados o encapsulados por la resinas (lo más probable es que el aceite libre sea soluble en la resina y esto lo hace no destilable). Por lo tanto el aceite extraído de la semilla lavada (28 ml) es en gran parte aceite intrapartícula.

En el Gráfico 5.10 se muestran los resultados de 2 pruebas experimentales con molle. Mediante dos líneas verticales fijamos los tiempos donde termina el primer mecanismo y donde se inicia el segundo mecanismo (que consiste en una extracción lenta y controlada por el mecanismo de difusión).

En la Prueba N° 2 el tiempo de corte es a los 11 minutos y en la Prueba N° 3 el tiempo de corte ocurre aproximadamente a los 10 minutos.

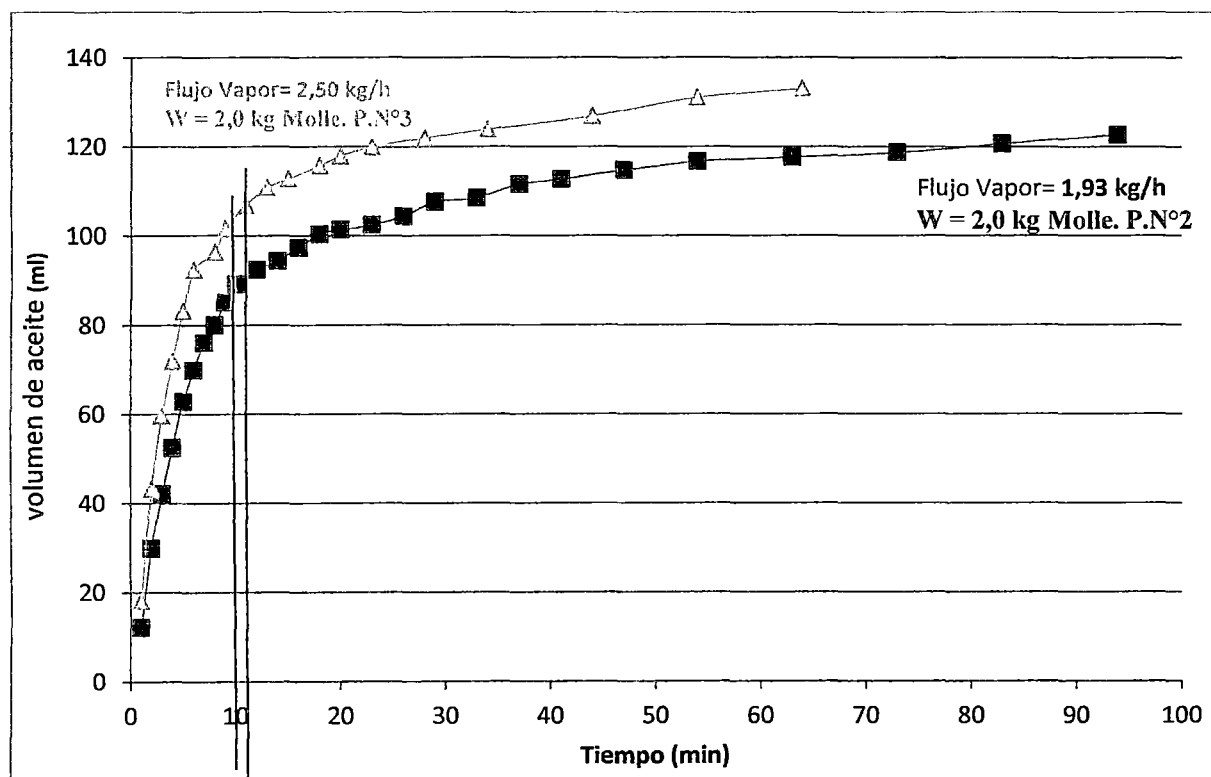


Gráfico 5.10. Extracción del Aceite Esencial de Molle. Masa de molle 2,0 kg.

5.4. Discusión de los Resultados.

5.4.1. Discusión de resultados experimentales.

El efecto de las diferentes resistencias en la extracción de los aceites esenciales define el comportamiento del proceso, así tenemos en el caso de la extracción del aceite esencial de molle este se encuentra en estado libre, no existiendo ninguna resistencia al paso del aceite hacia la corriente de vapor de agua, el aceite esencial se vaporiza instantáneamente y luego es arrastrado por el vapor de agua.

Se puede afirmar que existe una resistencia del lecho del fruto de molle descascarado al paso del vapor, pero esta resistencia es mínima, debido a que: en primer lugar por el bajo flujo de vapor empleado y en segundo lugar por la pequeña altura que ocupa el lecho de molle en el alambique. Es importante indicar que 13,65 cm es la altura promedio del lecho con 2 kg de molle dentro del alambique, similarmente 18,7 cm y 24,7 cm son las alturas promedio del lecho con 3,0 y 4,0 kg de molle respectivamente en el interior del alambique. Se puede afirmar que en el proceso de extracción de aceite esencial, existen dos etapas definidas: aceite libre y aceite intrapartícula. En el Gráfico 5.10 y prueba N° 2, se observa que en los 20 primeros minutos se obtienen 101,34 ml de aceite libre (86,09%), luego 34 minutos después se obtiene 15,38 ml de aceite intrapartícula, es decir en 54 minutos se obtiene aproximadamente 116,72 ml (95,1%) del aceite total. En el mismo gráfico se observa además que se requeriría 40 minutos adicionales para extraer los 6 ml de aceite (94 minutos) al final de la operación, estos últimos 6 ml de aceite se tornan difíciles de extraer por ser los componentes pesados del aceite bruto.

Se puede afirmar que a mayor flujo de vapor se requerirá menor tiempo de extracción y el rendimiento se incrementa, esto se demuestra experimentalmente. En el Gráfico 5.10 y en la Prueba N° 3, se incrementa el flujo de vapor a 2.5 kg /h, también el tiempo óptimo fue de 54 minutos pero el rendimiento se incrementó a 6.55%, con esto concluimos que para el molle (aceite libre + aceite intrapartícula) a mayor flujo menor tiempo de operación y mayor rendimiento. En esta misma prueba a los 20 min se obtuvo 117,92 ml del aceite, mientras que en la Prueba N°2 se demoró 63 minutos.

CAPÍTULO VI

MODELAMIENTO MATEMÁTICO DEL PROCESO DE EXTRACCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL LIBRE DEL *Schinus molle L.*

6.1. Modelamiento del proceso de extracción del aceite esencial *Schinus molle L.*

El fruto del molle tiene una característica particular, debido a que la mayor parte de su aceite esencial está contenido en el mesocarpio del fruto (ver Figura 4.7 página 46).

Para desarrollar del modelo matemático del proceso de extracción del aceite esencial del molle por el método de arrastre por vapor consideraremos como referencia la Figura 6.1.

En primer lugar haremos todas las suposiciones necesarias que sostengan este procedimiento de modelamiento matemático.

- a) El lecho es fijo, no se mueve durante el paso del flujo de vapor de agua que varía entre 1,99 a 3,04 kg/h (esta suposición se confirma al observar la operación con el alambique abierto, además el flujo de vapor es baja) y las partículas (fruto del molle) tiene una distribución aleatoria en el lecho.
- b) Se considera al lecho de molle como consistente de una sola etapa de separación; esto quiere decir que la concentración de aceite en la capa superficial es igualmente distribuida para todas las partículas que conforman el lecho.
- c) Cada fruto de molle descascarado se comporta como un material poroso, con una geometría esférica y que no se deforma durante el proceso.
- d) El aceite esencial, en mayor proporción (75 al 80%) se localiza homogéneamente alrededor de la semilla descascarada, cubriéndola con una capa delgada.
- e) La presión de trabajo en el alambique es constante y es igual a la presión atmosférica, la temperatura dependerá del equilibrio de fases dado en el sistema.
- f) Se considera la corriente de vapor como flujo continuo tipo pistón, sin acumulación de aceite en ella.
- g) La cantidad de aceite esencial remanente en el agua floral se desprecia.
- h) El aceite esencial tiene muchos componentes químicos, se tendrá que considerar los componentes más representativos, es decir los compuestos químicos que tienen mayor porcentaje de participación.

ALAMBIQUE

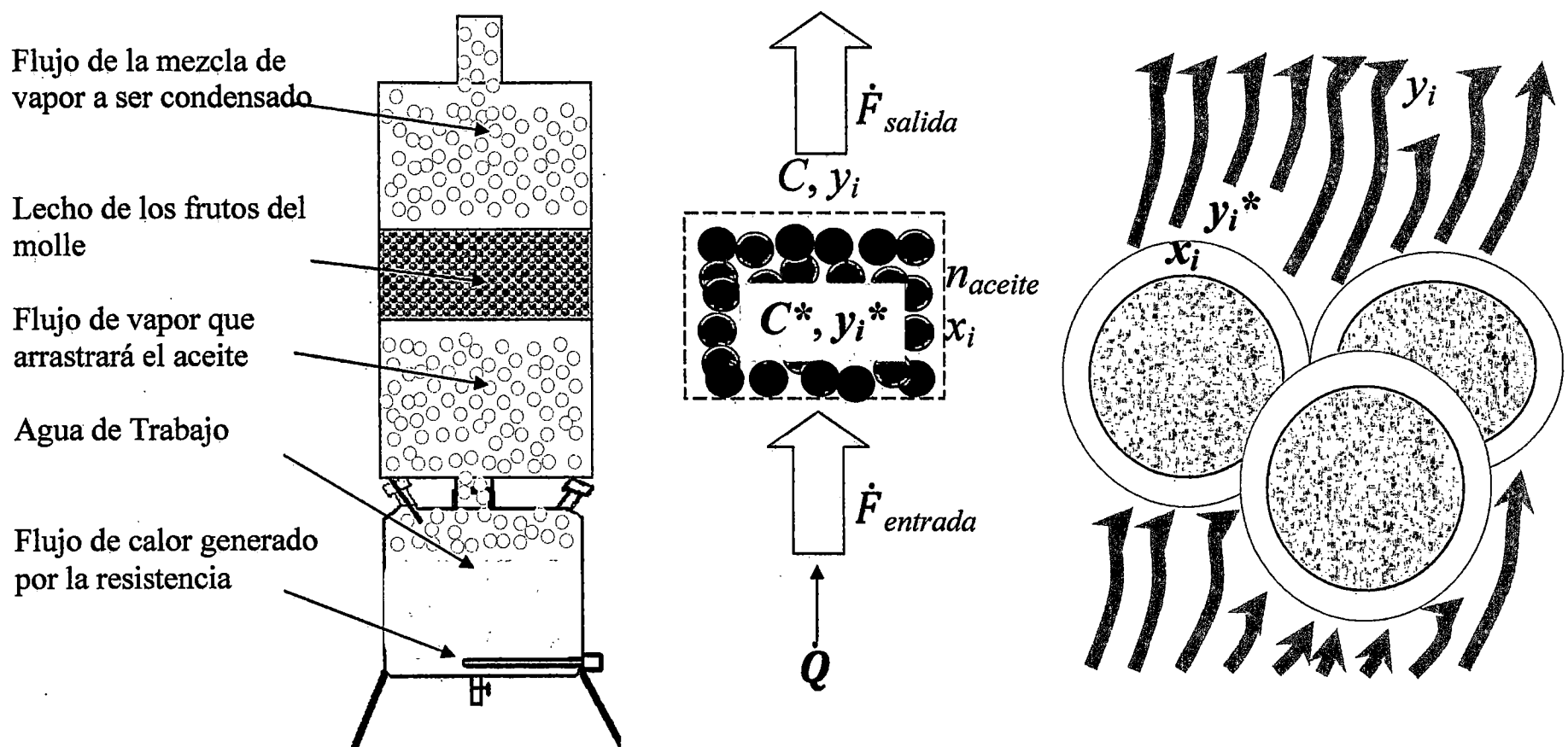


Figura 6.1. Esquema del proceso de extracción del aceite esencial del molle por arrastre con vapor.

- i) El vapor saturado será siempre puro a la entrada del lecho con concentración del aceite esencial igual a cero.
- j) En la capa líquida del fruto, el aceite esencial es completamente inmiscible con algo de agua (del propio fruto) que puede coexistir con el aceite.
- k) Los componentes del aceite esencial se encuentran en equilibrio en las fases líquido-vapor y se comportan como una solución ideal (en la fase líquida) y como gas ideal (en la fase vapor).
- l) El mecanismo de extracción del aceite esencial es sólo debido a la transferencia de masa de la interfase de la capa líquida superficial de los frutos hacia el vapor.

Luego en base a las suposiciones sustentadas se establece esquemáticamente en la Figura 6.1 el proceso de extracción, definiendo las variables correspondientes en ella.

Donde:

n_{aceite} : Es el número de moles del aceite esencial en el lecho.

\dot{F}_{salida} : Es el flujo molar de vapor que sale del lecho.

y_w : Es la fracción molar del agua en el vapor que sale del lecho.

Haciendo un balance molar del aceite esencial en el destilador:

$$\text{Entrada} - \text{Salida} + \text{Generación} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

Como no hay entrada de aceite esencial, ni se genera ni se consume en el lecho, entonces tendremos:

$$0 - (1 - y_w)\dot{F}_{salida} + 0 - 0 = \frac{dn_{aceite}}{dt}$$

$$\frac{dn_{aceite}}{dt} = -(1 - y_w)\dot{F}_{salida} \quad (6.1)$$

Balance molar para el componente i del aceite esencial:[26]

$$1 = y_w + \sum_{i=1}^n y_i \quad (6.2)$$

$$\frac{dn_i}{dt} = -y_i(1 - y_w)\dot{F}_{salida}$$

Donde:

n_i : son los moles del componente i del aceite esencial en el lecho.

y_i : es la fracción molar del componente i del aceite esencial.

También:

$$x_i = \frac{n_i}{n_{aceite}} \quad (6.3)$$

Donde x_i es la fracción molar del componente i del aceite esencial en la película del aceite esencial contenido en el fruto del molle.

También se establece la siguiente expresión que representa la difusión del aceite esencial al vapor desde la interfase del aceite libre con la fase vapor.

$$\frac{dn_i}{dt} = K_y S C (y_i^* - y_i) \quad (6.4)$$

Donde:

K_y : Es el coeficiente de transferencia de masa en términos de moles/s.

S : Es el área de transferencia de masa.

C : Es la concentración molar del aceite esencial en la fase vapor.

y_i^* : Es la fracción molar del componente i del aceite esencial en la interfase líquido-vapor.

C^* : Es la concentración molar del aceite esencial en la interfase líquido-vapor.

Examinando las características del transporte del aceite esencial de la interfase al vapor se puede notar que prácticamente no hay resistencia alguna para este mecanismo, por tanto el coeficiente de transferencia de masa debe ser muy grande. Treybal [26]. Matemáticamente esto se puede expresar como:

$$K_y \rightarrow \infty \quad (6.5)$$

Y como la transferencia de masa es finita se debe cumplir, por otro lado, que el gradiente de concentraciones debe tender a cero, esto es:

$$y_i^* - y_i \rightarrow 0 \quad (6.6)$$

Lo cual implica que

$$y_i^* \cong y_i \quad (6.7)$$

Del equilibrio de fases:

$$P = P_w + P_{aceite} \quad (6.8)$$

Donde:

P : Es la presión del sistema.

P_w : Es la presión de vapor del agua.

P_{aceite} : Es la presión de vapor del aceite esencial.

$$P_{aceite} = \sum_{i=1}^{n=6} x_i P_i \quad (6.9)$$

Donde P_i es la presión de vapor del componente i en el aceite esencial.

Del equilibrio líquido-vapor, según la ley de *Raoult*:

$$y_i P = x_i P_i \quad (6.10)$$

También para el agua:

$$y_w P = P_w \quad (6.11)$$

Usando la ecuación de *Antoine* para modelar las presiones de vapor de los componentes del aceite esencial:

$$P_i = 10^{A_i - \frac{B_i}{C_i + T}} \quad (6.12)$$

Donde A_i , B_i y C_i son los parámetros de la ecuación de *Antoine* para cada uno de los componentes i del aceite esencial. [PRO II][21].

Consideramos para el agua:

$$P_w = 10^{A_w - \frac{B_w}{C_w + T}} \quad (6.13)$$

Donde A_w , B_w y C_w son los parámetros de la ecuación de *Antoine* para el agua.

Por otra parte, la siguiente relación permite determinar la temperatura de equilibrio líquido-vapor para este sistema:

$$y_w + \sum_{i=1}^{n=6} y_i = 1 \quad (6.14)$$

Haciendo un balance molar total del aceite esencial en un tiempo t cualquiera.

$$n_0 = n_{aceite} + n_{cond} + n_{vapor} \quad (6.15)$$

Donde:

n_0 : Moles de aceite esencial en el destilador antes de iniciar el proceso.

n_{vapor} : Moles del aceite esencial en el vapor (dentro del condensador) que se puede considerar despreciable.

n_{cond} : Moles del aceite esencial condensado en el vaso separador florentino.

Haciendo un balance de energía alrededor del lecho:

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(P.V)$$

El término $\Delta(P.V) = 0$, porque la presión y volumen del sistema es constante. Esta relación indica que la energía de presión no tiene influencia sobre el valor energético del lecho.

Por lo que queda: $\Delta H = \Delta U$

$$\frac{dn\tilde{U}_L}{dt} = \dot{F}_{entrada}\tilde{H}_{v,entrada} - \dot{F}_{salida}\tilde{H}_{v,salida} \quad (6.16)$$

Donde:

\tilde{U}_L : Energía interna molar del sistema agua-aceite esencial líquida en el sistema agua de trabajo-lecho de molle (kJ/mol).

$\dot{F}_{entrada}$: Flujo molar de vapor que ingresa al lecho (mol/h).

$\tilde{H}_{v,entrada}$: Entalpía molar del flujo de vapor que ingresa al lecho (kJ/mol).

$\tilde{H}_{v,salida}$: Entalpía molar del flujo de vapor que sale del lecho (kJ/mol).

El alambique tiene un aislante de fibra de vidrio y considerando que el lecho está constituido básicamente por los frutos de molle rodeados por una película delgada de aceite esencial (libre), se concluye que el cambio de energía interna en el lecho cambia muy poco durante el tiempo que dura el proceso, por lo que:

$$\frac{dn\tilde{U}_L}{dt} = 0 \quad (6.17)$$

También se cumple

$$\dot{Q} - \dot{F}\tilde{H}_{v,salida} = 0 \quad (6.18)$$

Donde:

\dot{Q} = Flujo de calor neto que se transfiere al extractor (kJ/h).

\dot{Q} = Flujo de calor que ingresa – Pérdidas de calor por la pared.

$\tilde{H}_{v,entrada}$ se determina usando las propiedades térmicas del vapor de agua (kJ/mol).

$\tilde{H}_{v,salida}$ se determina mediante la contribución del vapor de agua como de los componentes del aceite esencial en la fase vapor usando las siguientes ecuaciones:

$$\tilde{H}_{v,salida} = \sum_{i=1}^{n=6} (y_i \cdot \tilde{H}_i) + \tilde{H}_w \quad (6.19)$$

$$\tilde{H}_i = \int_{T_0}^T C_{pi}(T)dT + \Delta\tilde{H}_{iv} \quad (6.20)$$

$$\tilde{H}_w = y_w \left[\int_{T_0}^T C_{pw}(T) dT + \Delta \tilde{H}_{wv} \right] \quad (6.21)$$

Donde C_{pi} y C_{pw} son los calores específicos del componente i del aceite esencial y del agua, respectivamente.

A fin de comprobar la validez de esas ecuaciones, se procedió a efectuar un proceso de destilación en una sola etapa de una mezcla de agua (en exceso) y aceite esencial del molle. La descripción de este proceso y su modelamiento matemático se presenta a continuación.

6.2. Modelo del proceso de destilación de una etapa de una mezcla de agua y aceite esencial del molle (re-destilación del aceite).

Para este proceso se mezcló agua en exceso con un volumen de aceite esencial previamente extraído por arrastre de vapor de un lecho de frutos de molle.

En el Gráfico 6.1 se observa como la curva de re-destilación del **aceite libre** de la Prueba N° 12 tiene similar comportamiento con la curva que representa la extracción de aceite libre de la primera etapa de la Prueba N°6. Esta similitud de las curvas se puede interpretar: que la altura del lecho de molle no tiene influencia en el proceso de extracción de aceite esencial libre.

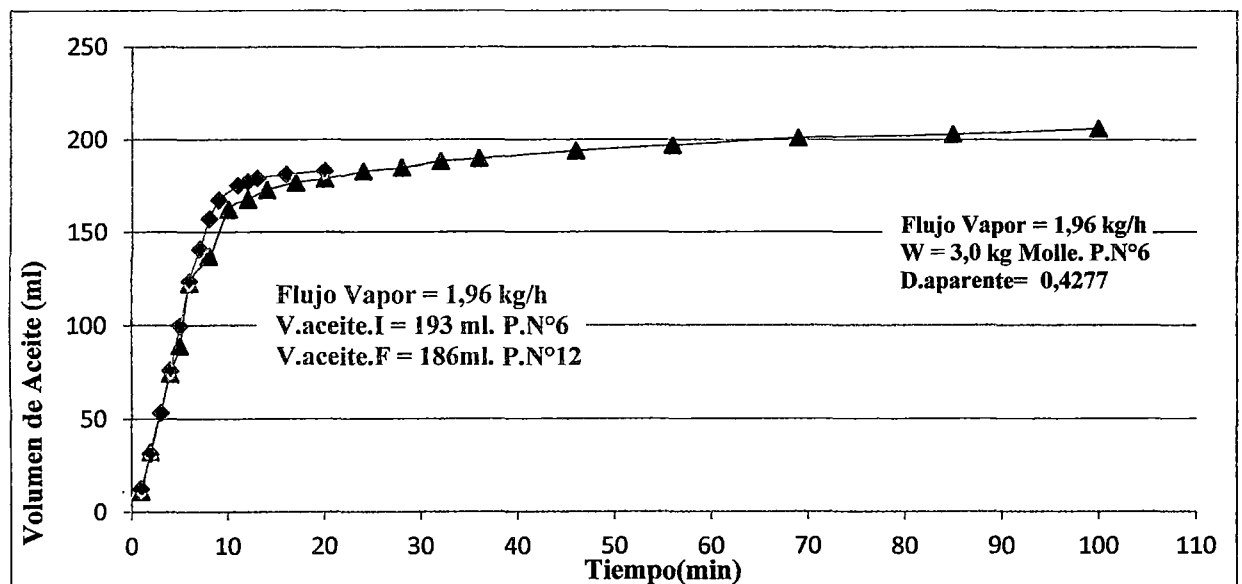


Gráfico 6.1. Extracción del Aceite Esencial de Molle.

Prueba N°6: Masa de Molle: 3,0 kg.

Prueba N°12: 193 ml de aceite.

La operación de este proceso se representa en forma esquemática en la Figura 6.2.

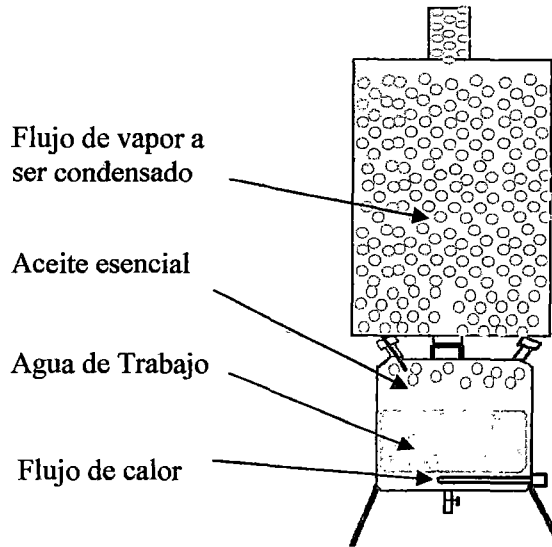


Figura 6.2.- Esquema del proceso de destilación de una mezcla de agua y aceite esencial del molle, a presión atmosférica.

Haciendo un balance de moles totales en el destilador:

$$\frac{dn}{dt} = -\dot{F} \quad (6.22)$$

Donde:

n : Es el número de moles del agua y aceite esencial en el destilador.

\dot{F} : Es el flujo molar de vapor que sale del destilador (mol/h).

Haciendo un balance de moles del agua en el destilador:

$$\frac{d(nx_w)}{dt} \equiv \frac{d(n_w)}{dt} = -y_w \dot{F} \quad (6.23)$$

Donde n_w y x_w es el número de moles y fracción molar del agua en el destilador.

Haciendo un balance de moles del aceite esencial en el destilador:

$$\frac{dn_{aceite}}{dt} = -(1 - y_w) \dot{F} \quad (6.24)$$

Donde n_{aceite} es el número de moles del aceite esencial en el destilador.

Haciendo un balance molar del componente i del aceite esencial en el destilador:

$$\frac{dn_i}{dt} \equiv \frac{d(n_{aceite}x_i)}{dt} = -y_i \dot{F} \quad (6.25)$$

Donde n_i y x_i es el número de moles y fracciones molares del componente i en el aceite esencial en el destilador.

Haciendo un balance de energía en el sistema:

$$\frac{dn\tilde{U}_L}{dt} = \dot{Q} - \dot{F}\tilde{H}_V \quad (6.26)$$

Donde:

\tilde{U}_L : Energía interna molar del sistema agua-aceite esencial líquido en el destilador.

\dot{Q} : Flujo de calor neto que se transfiere al destilador.

\tilde{H}_V : Entalpía molar del flujo de vapor que sale del destilador.

La energía interna molar puede calcularse mediante:

$$\tilde{U}_L = \sum_{i=1}^{n=6} (x_i\tilde{U}_i) + \tilde{U}_w \quad (6.27)$$

Donde:

\tilde{U}_i : Energía interna molar del componente i del aceite esencial.

\tilde{U}_w : Energía interna molar del agua en el destilador.

A su vez, las energías internas de los componentes del aceite esencial y del agua pueden expresarse mediante las capacidades caloríficas respectivas, que son dependientes de la temperatura (cuando la energía de presión es despreciable), según:

$$\tilde{U}_i = \int_{T_0}^T C_{pi}(T)dT \quad (6.28)$$

$$\tilde{U}_w = x_w \int_{T_0}^T C_{pw}(T)dT \quad (6.29)$$

Donde x_w es la fracción molar del agua en el destilador.

\tilde{H}_V se determina mediante un procedimiento similar al previamente descrito para la energía interna:

$$\tilde{H}_V = \sum_{i=1}^{n=6} (y_i\tilde{H}_i) + \tilde{H}_w \quad (6.30)$$

$$\tilde{H}_i = \int_{T_0}^T C_{pi}(T)dT + \Delta\tilde{H}_{iv} \quad (6.31)$$

$$\tilde{H}_w = y_w \left[\int_{T_0}^T C_{pw}(T)dT + \Delta\tilde{H}_{wv} \right] \quad (6.32)$$

Donde:

$\Delta\tilde{H}_{iv}$: Entalpía de vaporización molar del componente i del aceite esencial.

$\Delta\tilde{H}_{wv}$: Entalpía de vaporización molar del agua.

Este sistema de ecuaciones se representa en el siguiente diagrama de bloques, Figura 6.3 donde se puede apreciar la dinámica de este sistema.

Analizando la ecuación del balance de energía, ecuación (6.26), podemos inferir que el término $\frac{dn\tilde{U}_L}{dt}$ no variará mucho respecto a los otros dos términos, dado que el agua se encuentra en una mayor proporción que el aceite esencial en el sistema. Por tanto, esta ecuación se reduce a:

$$\dot{F} = \frac{\dot{Q}}{\tilde{H}_V} \quad (6.33)$$

Con esta ecuación 6.33 usando los conceptos de la termodinámica, transferencia de masa, transferencia de calor y los métodos numéricos se construirá el diagrama de bloques del sistema de ecuaciones, presentado en la Figura 6.3, y también se construye el diagrama flujo del procedimiento de solución del modelo matemático la cual se presenta en la Figura 6.4, que permitirá elaborar el programa en MATLAB que se presentan en los Anexos V, VI y VII. Chapra - Canale[28], Mark E. Davis[37] y Said-Parag[38].

A continuación se presenta el algoritmo del programa para el proceso de extracción del aceite esencial del Schinus molle.

ALGORITMO DEL PROCESO DE EXTRACCIÓN DEL ACEITE SCHINUS MOLLE.

1. Datos iniciales:

W_m : Peso del molle.

x_i : Composición inicial del aceite líquido en la semilla.

Rend: Rendimiento del aceite libre 1º etapa (5.5% volumen/masa)

Den : Densidad del aceite bruto de molle.

\bar{M}_{ac} : Peso molecular promedio del aceite de molle.

t_i : Tiempo inicial del proceso (ac. libre) , 0 min

t_f : Tiempo final del proceso (ac. libre) , 10 min.

\dot{m}_v : Flujo del vapor de agua (g/h)

D_t : Tamaño de paso o $\Delta t = 1$ minuto.

2. Con estos datos hacemos los cálculos iniciales:

i) $N = \frac{t_f - t_i}{\Delta t}$, es el numero de etapas (10 etapas).

ii) Vol. del aceite total = $(W_m \cdot \text{Rend}/100)$ ml.

iii) n(numero de moles) iniciales del aceite $\Rightarrow n = \frac{\text{Vol} \cdot \text{Den}}{\bar{M}_{ac}}$

iv) n_i (numero de moles de cada componente) : $n_i = x_i \cdot n$

Para $j = t_i$ hasta t_f (de 1 hasta 10 min.)

3. Calculo de la composición inicial de los componentes en el vapor. Usando la ley de

Raoult $y_i \cdot P = x_i \cdot P_i^{sat}$ $y_i = \frac{x_i \cdot P_i^{sat}}{P}$

Necesito hallar P_i^{sat}

i) La ecuación de Antoine $P_i^{sat} = 10^{A_i + \frac{B_i}{C_i + T}}$

ii) $\sum y_i = 1$ condición necesaria que debe cumplir, para lo cual se usa el método de bisección, comenzando con dos datos iniciales $T_{inf} = 85^\circ\text{C}$ y $T_{sup} = 105^\circ\text{C}$ dentro de estas temperaturas debe encontrarse la temperatura de saturación de la mezcla en

el primer minuto del arrastre con vapor. Es decir $\sum_1^7 \frac{\left(10^{A_i + \frac{B_i}{C_i + T}}\right) \cdot x_i}{P} = 1$

4. El lazo termina hallando la fracción y_i , y la T_1^{sat} , en el primer minuto.

5. Se procede a calcular las entalpias H_i de cada componente en la mezcla de vapor, para lo cual se usa la T^{sat} encontrada en el tiempo $j=1$ minuto.

$$\tilde{H}_i = \underbrace{(A_i + B_i T + C_i T^2)}_{\text{Líquido saturado}} + \underbrace{Av_i \left(1 - \frac{T^{sat}}{T_{c_i}}\right)^{nv_i}}_{\text{vapor}}$$

“calor sensible a T °C” calor latente

Los valores de (A_i, B_i, C_i) y (Av_i, T_{c_i}, nv_i) para cada componente se encuentran respectivamente en las Tablas 1 y 2 del ANEXO III.

6. Calculo de la entalpia de la mezcla del vapor aceite- agua

$$\tilde{H}_i = \sum_{i=1}^{i=7} y_i \tilde{H}_i = H_v(j)$$

7. Calculo del calor entrante al sistema como vapor de agua.

$T = 99.8 \text{ }^\circ\text{C} + 273$, Temperatura de ebullición del agua.

$$H_w = \underbrace{A_w + B_w T + C_w T^2 + D_w T^3 + E_w T^4 + F_w T^5}_{\text{Calor sensible del agua}} + \underbrace{A_{vw} \cdot [1 - T_{rw}]^{(B_{vw} + C_{vw} T_{rw} + D_{vw} T_{rw}^2)}}_{\text{Calor latente del agua}}$$

Los valores de esta fórmula lo determinamos de las Tablas 2.4 y 2.5 (página 12)

Ahora calculamos el flujo de calor del vapor de agua que ingresa al sistema $\dot{Q}_v \left(\frac{\text{kjoule}}{\text{min}} \right)$

$$\dot{Q}_v = \left[\left(\frac{\dot{m}_v}{60} / 18 \right) \right] \cdot H_w$$

Ahora calculamos el flujo molar de vapor de agua $F(j) = \frac{Q_v}{H_v(j)}$ (mol/min)

8. Calculo de los moles totales de aceite que salen con el vapor de agua y los moles totales que quedan en la matriz herbácea. (semilla de molle en el tiempo j minutos)

$$dn_{\text{aceite total}} = -(1 - y_w) \dot{F} \cdot \Delta t$$

i) Moles totales de aceite que salen con el vapor.

$$n_{\text{aceite out. T(j)}} = \left((1 - y_{wj}) \right) \cdot F_j \cdot \Delta t$$

Fracción molar de aceite en la mezcla de vapor \rightarrow tamaño de paso 1 minuto.

ii) moles de aceite total que queda en la matriz herbácea

$$n_{\text{aceite que queda T(j)}} = n_{\text{aceite que queda T(j-1)}} - n_{\text{aceite out. T(j)}}$$

9. Solución de las seis ecuaciones diferenciales (Método de Euler)

Estas ecuaciones diferenciales son lineales

Para $i = 1$ hasta $i = 6$

i) Moles del componente i del aceite que salen con el vapor

$$n_{ac \text{ out}(i,j)} = y_{(i,j)} \cdot F(j) \cdot \Delta t$$

ii) Se determina el número de moles de cada componente que queda en el lecho de la semilla en el tiempo j minutos.

$$n_{ac \text{ que queda}(i,j)} = n_{ac \text{ que queda}(i,j-1)} - n_{ac \text{ out}(i,j)} \text{ Ecuación de Euler.}$$

iii) Fracción molar del componente i en el aceite líquido que queda en la semilla

$$x_{(i,j)} = \frac{n_{ac \text{ queda}(i,j)}}{n_{ac \text{ queda T(j)}}$$

Fin de Para

10. Calculo del nuevo tiempo (2 minutos)

$$t_{(j)} = t_{(j-1)} + \underset{\downarrow \text{1 minuto}}{Dt}$$

11. Calculo del volumen acumulado del aceite extraído por arrastre con vapor.

i) Calculo de la masa de aceite total de molle que sale con el vapor de agua en el tiempo j minutos

$$M_{(j)} = n_{ac\ out\ T_{(j)}} \cdot \overline{Mac}$$

ii) Calculo del volumen acumulado del aceite de molle que sale en cada etapa del tiempo j

$$V_{(j)} = V_{(j-1)} + M_{(j)} \cdot \text{den}(\text{aceite})$$

\downarrow
Volumen Acumulado
en el tiempo (j-1) minutos

Nuevamente se vuelve al paso 3° y así sucesivamente hasta llegar al tiempo $t = 10$ minutos

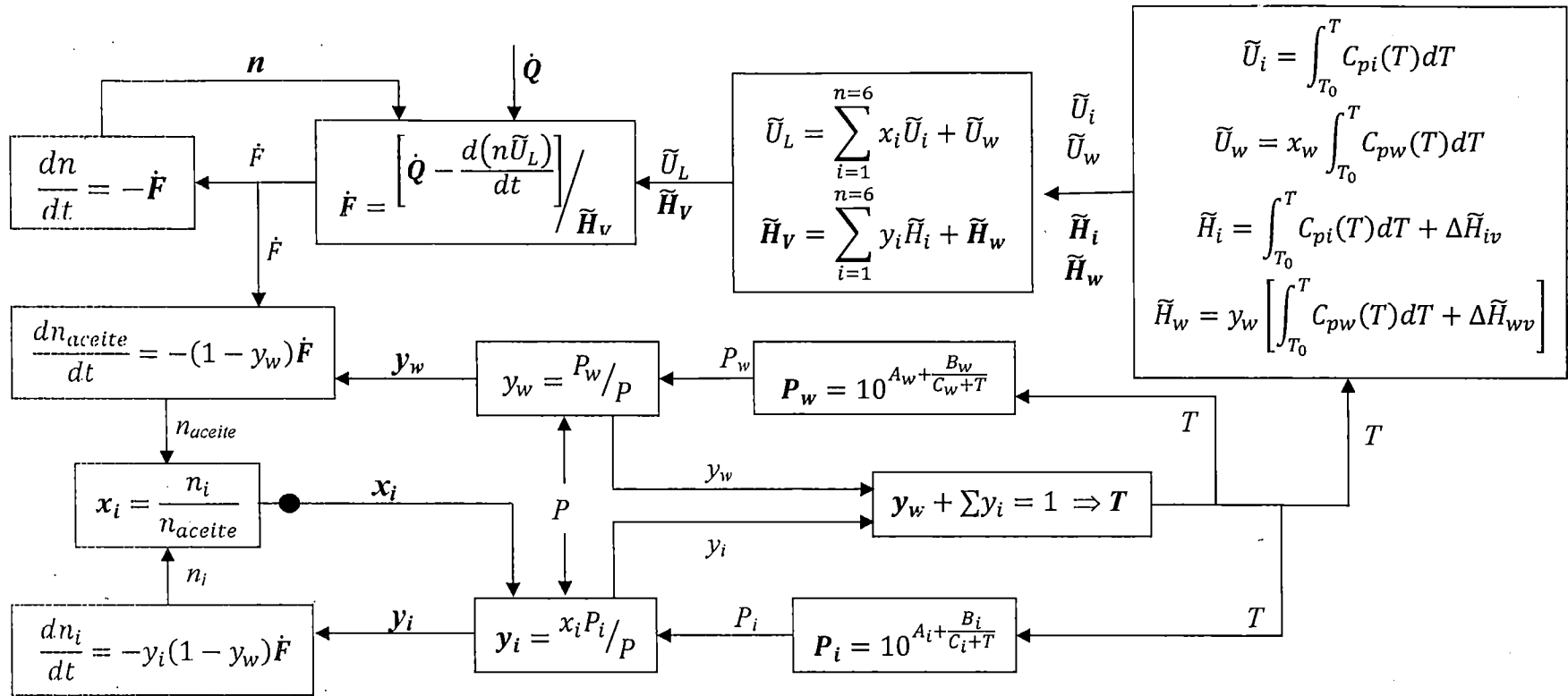


Figura 6.3. Diagrama de bloques del modelo matemático del proceso de extracción por lotes por arrastre con vapor de agua del aceite esencial libre del Schinus molle L.

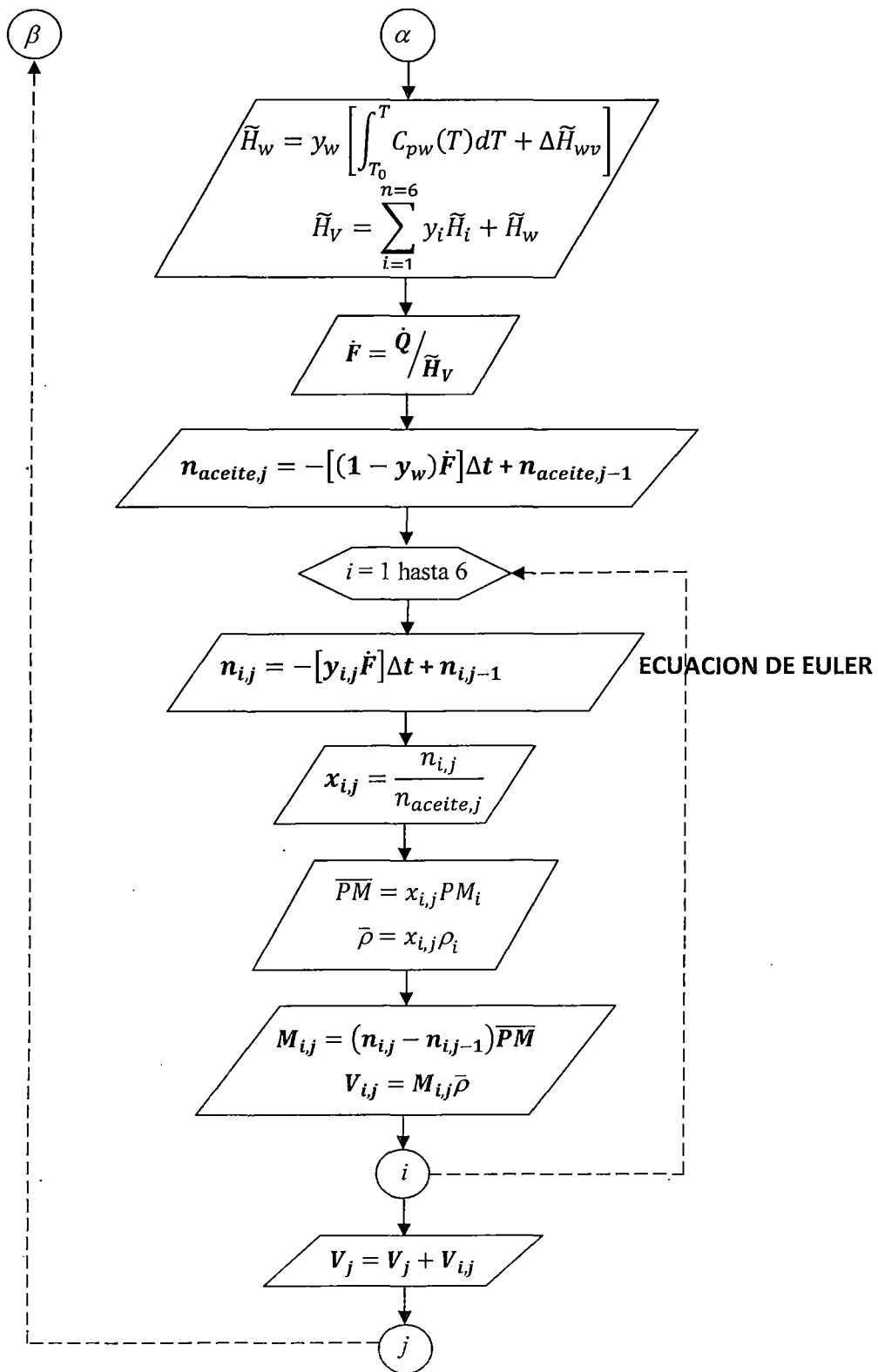


Figura 6.4. Diagrama de flujo del procedimiento de solución del modelo matemático del proceso de destilación agua-aceite esencial del molle.

6.3. Discusión de Resultados considerando el Modelo Matemático

Del Gráfico 6.1 (página 64) en la prueba de re-destilado, se destiló el aceite esencial extraído de la Prueba N°6 (193 ml) y se agregó el aceite esencial al generador de vapor que tenía 10 litros de agua caliente, destilándolo durante 25 minutos y se recuperó 186 ml, quedando 7 ml sin destilar (se considera como pérdida). Se visualiza que las dos curvas se superponen, así demostramos experimentalmente que el aceite esencial de molle tiene una etapa de aceite libre, porque las dos curvas de las Pruebas N°6 y N°12 tienen el mismo comportamiento.

Con la prueba del re-destilado se determina que la resistencia del lecho de molle no tiene mucha influencia en la extracción del aceite esencial, para el equipo empleado.

En el anexo IX, se muestran las tablas comparativas entre los resultados experimentales y los valores obtenidos usando el modelo matemático. Se observan estas curvas son casi similares cuando se analizan en intervalos de tiempo comprendidos entre 6 a 8 minutos, etapa de extracción de aceite libre.

La etapa más productiva del proceso de extracción de aceite se lleva a cabo durante los 8 a 13 minutos, porque en ese intervalo de tiempo se extrae casi el 85 % de todo el aceite esencial del fruto del molle, después de ese tiempo el proceso de extracción se vuelve bien lenta. Por tal razón es nuestro interés, hacer el modelamiento matemático en la etapa productiva donde se extrae aceite esencial libre.

Actualmente no hay trabajos sobre el tema de modelamiento matemático para el proceso de extracción del aceite esencial del molle, por ello no hay forma de hacer comparaciones de nuestro trabajo, en cambio si hay trabajos de extracción de aceite esencial del fruto del molle por arrastre con vapor en las cuales se obtienen rendimientos de hasta 3.0%, mientras que en nuestro trabajo obtenemos rendimientos de hasta 5.4%(peso de aceite esencial / peso del fruto de molle).

CONCLUSIONES

Las principales conclusiones que se obtienen de esta investigación son las siguientes:

- 1) Cuando se hace la extracción del aceite del fruto de molle con cáscara (epicarpio o exocarpo), no se obtiene nada de aceite esencial debido a que el epicarpio es impermeable al paso de vapor, encapsulando al aceite esencial dentro del fruto. Por ello para extraer aceite esencial del molle es necesario realizar tratamientos previos al fruto tales como: secado, descascarado, lavado, secado y molienda; en ésta última etapa el aceite esencial queda expuesto para la extracción.
- 2) Mediante el análisis histológico realizado al fruto del molle se concluye, que el aceite esencial se genera biológicamente en las cavidades secretoras ubicadas en el mesocarpio del fruto, éste aceite se almacena en las porosidades situadas entre el mesocarpio y el endocarpio, quedando como aceite libre.
- 3) Al realizar la molienda del fruto del molle sin romper la semilla, el aceite libre emerge de las porosidades del mesocarpio, esto facilita que la corriente de vapor de agua que atraviesa el lecho por efecto térmico produce una evaporación instantánea del aceite, siendo éste el fenómeno controlante del proceso de extracción del aceite esencial de molle.
- 4) En las gráficas de la curva volumen de aceite extraído versus tiempo de extracción se observa dos características, la **primera curva** tiene un comportamiento aproximadamente lineal, el elevado valor de su pendiente refleja la rapidez del proceso de extracción; en cambio en la **segunda curva**, la gráfica del tiempo de extracción versus el volumen de aceite extraído es una curva creciente, cóncava hacia abajo y se aproxima a una recta asíntota horizontal. Cualquier recta tangente trazada a ésta última curva se observa que hay una disminución drástica de la pendiente, lo cual refleja que la rapidez de extracción es lenta.
- 5) Se concluye que el aceite esencial está situado en dos niveles: El primer nivel está **en estado libre** situado en el mesocarpio sobre la semilla, en esta etapa se encuentra la mayor cantidad de aceite (aproximadamente 85%) y se extrae en un tiempo aproximado de 10 minutos; en el segundo nivel, el aceite esencial está **en estado intrapartícula** donde el vapor tiene que atravesar la pared celular, y el proceso se hace lento (demora aproximadamente 80 minutos) donde probablemente el mecanismo controlante sea la difusión con un rendimiento de 1,5%

(volumen de aceite/g molle) de aceite, éste rendimiento del aceite esencial se correlaciona bien con el *modelo de difusión*.

- 6) Desde el punto de vista de ingeniería de procesos se concluye que, la extracción del aceite esencial libre sería la etapa más productiva debido a que ésta extracción se realiza en el intervalo de tiempo comprendido entre los 6 y 14 minutos, extrayéndose aproximadamente entre el 80 y el 85% del aceite total.
- 7) En la extracción del aceite esencial libre se concluye que a mayor flujo de vapor menor tiempo de extracción. Para un peso de 2 kg. de fruto de molle y un flujo de vapor de 2,97 kg/h, se emplea un tiempo de extracción de 60 minutos. Para un peso de 3 kg. de fruto de molle y un flujo de vapor de 3,04 kg/h, se emplea un tiempo de extracción de 69 minutos.
- 8) El grado de molienda tiene un efecto directo en la densidad aparente del lecho de molle y esto a su vez influye en el rendimiento del aceite esencial de molle, a mayor densidad aparente menor rendimiento. El rango óptimo de variación de la densidad aparente debe oscilar entre 0,39 y 0,42 g/ml.
- 9) La altura del lecho de molle para estas cargas del fruto (desde 1 hasta 3 kg) no se ve afectado a lo largo del proceso, debido a que está compuesto por frutos esféricos duros y por lo tanto no se compactan a lo largo del proceso; por lo cual no tendrían injerencia en el modelo matemático.
- 10) Las curvas generadas por el modelo matemático, comparadas con las curvas experimentales tienen unas tendencias lineales muy similares, hasta los 8 primeros minutos que es la etapa que se extrae la mayor cantidad de aceite libre, luego de este tiempo las curvas experimentales tienen un comportamiento similar a una curva exponencial que representa la extracción del aceite intrapartícula (segunda etapa).
- 11) El tiempo que demora la extracción del aceite esencial para distintas cargas de puede variar según las condiciones de operación: extracción al vacío, temperatura de equilibrio del sistema, flujo de vapor empleado.

RECOMENDACIONES

Referidas al proceso:

- 1) Se debería trabajar con equipos de mayor capacidad para verificar si las condiciones de rango de variación de tiempo y rendimiento se mantienen en las dos etapas del proceso experimental. Sabiendo que a escala industrial existen fenómenos que no son perceptibles a escala piloto, como por ejemplo en equipo de gran escala el efecto de la carga del lecho de molle si tendría efecto en la compactación y resistencia al paso del flujo de vapor.
- 2) Sería recomendable hacer un análisis químico del aceite esencial obtenido en cada una de las etapas, para identificar los componentes y determinar la composición del aceite.
- 3) Sería recomendable realizar una destilación al vacío lo cual favorecerá la extracción del aceite esencial a bajas temperaturas, de esta forma se reducirá la descomposición térmica de algunos componentes orgánicos que forman parte del aceite esencial..

Con respecto al modelamiento:

- 1) Se recomendaría la continuación de este trabajo, para plantear el modelamiento matemático de la segunda etapa, utilizando condiciones termodinámicas más reales, por que en esta etapa los mecanismos de transferencia de masa incluyen procesos de difusión intrapartícula.
- 2) Para estimar algunas propiedades termodinámicas de alguno de los componentes del aceite esencial, se sugiere usar el método *UNIFAC* ya que permite trabajar con hidrocarburos terpénicos, productos oxigenados y muchos otros compuestos que, con otro método sería muy difícil de conseguir los parámetros de interacción binaria para un sistema de multicomponente. La ventaja del método de *UNIFAC* es que con un número relativamente pequeño de subgrupos orgánicos se combinan fácilmente para formar una molécula orgánica más grande con los grupos funcionales adecuados.
- 3) Para calcular la temperatura de burbuja en equilibrio se puede usar el método de Newton-Raphson, que es más preciso que el método de la bisección.
- 4) Para resolver el sistema de seis ecuaciones diferenciales lineales se puede usar el método de Runge-Kutta, que es más preciso que el método de Euler.

BIBLIOGRAFIAS

LIBROS

1. Schulte A. – Rojas C. – Rojas R. “Reforestación y Agroforestería en los Andes- Uso sostenido, conservación, restauración de los suelos con árboles y arbustos nativos “. Editorial Agruco Eco Bolivia. 1992.
2. Reynel C.- Pennington T.- Pennington R. Marcelo J.- Daza A. “Arboles útiles del Ande Peruano “. UNALM. 2006.
3. Gilg Engler & Shurhoff. “Botánica Aplicada a la Farmacia“. 3ra. Edición. (1950) pág. 945.
4. Torres Carbajal J. M. “Elaboración de Chicha, Vinagre y Extracción de aceite esencial del *Schinus molle* L.” Tesis para optar el título de Ingeniero en Industrias Alimentarias. Programa Académico de Industrias Alimentarias. UNALM. 1978.
5. Martínez Rodríguez M. “Contribución al Estudio y Aplicaciones Industriales del Aceite Esencial de *Schinus molle* L.”. Tesis de Bachiller para la obtención del título para Industrias Químico Farmacéutico. Facultad de Farmacia y Bioquímica. UNMSM. Lima. 1961.
6. Cuya Matos O.A. “Influencia del Tamaño y Peso de la Semilla sobre la Germinación y Crecimiento de Plántulas de Molle. *Schinus molle* L.” Tesis para optar el título de Ingeniería Forestal. Facultad de Ciencias Forestales. UNALM. 1989.
7. George T. Austin. “Manual de los Procesos Químicos en la Industria“. 5ta Edición. Ed. Mc Graw Hill. 1990.
8. Hüsnü Can Baser – Gerhard Buchbauer. “Handbook of Essential Oils Science, Technology and Applications”. CRC Press. Taylor & Francis Group. 2010.
9. Muñoz F. “Plantas Medicinales y Aromáticas: Estudio, Cultivo y Procesado. Ediciones Mundi - Prensa. Madrid, España, 1996.
10. Milojević S. Z., T. D. Stojanović, R. Palić, M. L. Lazić, V. B. Veljković. “Kinetics of distillation of essential oil from comminuted ripe juniper (*Juniperus communis* L.) berries”. *Biochemical Engineering Journal* 39: 547–553, 2008.
11. Barroso M. S. T., G. Villanueva, A. M. Lucas, G. P. Perez, R. M. Vargas, G.W. Brun and E. Cassel. “ Supercritical fluid extraction of volatile and non-volatile compounds from *Schinus molle*” L. *Braz. J. Chem. Eng.* 28 (2), 2011.
12. Sefidkon F., K. Abbasi, Z. Jamzad, Shahla Ahmadi. “The effect of distillation methods and stage of plant growth on the essential oil content and composition of *Satureja rechingeri* Jamzad” *.Food Chemistry* 100: 1054–1058, 2007.
13. Moran Sullca J. E. “Determinación de la Actividad Antimicótica in Vitro del Aceite Esencial de *Shinus molle* frente a *Candida albicans*”. Tesis para optar el Título Profesional de Químico Farmacéutico, UNJBG, Tacna, 2009.
14. Hayouni El A., I. Chraief, M. Abedrabba, M. Bouix, J.-Y. Leveau, H. Mohammed, M. Hamdi, Tunisian *Salvia officinalis* L. and *Schinus molle* L. essential oils: their chemical compositions and their preservative effects against *Salmonella* inoculated in minced beef meat. *Int J Food Microbiol* 125 (3): 242-51, 2008.

15. Zahed N., K. Hosni, N. B. Brahim, H. Sebei. "Essential Oil Composition of *Schinus Molle* L. Fruits: An ornamental species used as Condiment". *Journal of Food Biochemistry*, 35 (2): 400-408, 2011.
16. Bendaoud H., M. Romdhane, J. P. Souchard, S. Cazaux, J. Bouajila. "Chemical composition and anticancer and antioxidant activities of *Schinus molle* L. and *Schinus terebinthifolius* Raddi berries essential oils". *J Food Sci.* 75 (6), 2010.
17. Batiu I., Acha O. and Bosilcov. A. "Composition of essential oil from the fruits of *Schinus molle* L. (Anacardiaceae) from Peru". 2003. Perú.
18. Lange's "Handbook of Chemistry". 10^o Edición. Ed Mc Graw Hill. 1996.
19. Haynes W.M., Lide D.R. "Handbook of Chemistry and Physics" CRC. Pres. Edicion 2011-2012.
20. Yaws C. L., "Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons". William Andrew, 2008.
21. Simulador PRO II^R, Process Engineering Suite, V.8.0.
22. NIST (National Institute of Standards and Technology), <http://www.nist.gov/index.html>.
23. Garcia Araez H. "Esencias Naturales", Ediciones Aguilar S.A. España. 1953.
24. Kirk-Othmer. "Encyclopedia of Chemical Technology Essential Oils", 4ta Edición. Wiley & Sons. New York, USA, Vol.17. pag 1-60 1993.
25. Cerpa Chávez M.G. "Hidrodestilación de aceites esenciales: *Modelado y Caracterización*". *Tesis Doctoral*. 2007. España.
26. Treybal Robert E. "Operaciones de Transferencia de Masa". 7ma. Edición. Mc Graw Hill. 2007.
27. Smith J.M.- Van Ness H.C.- Abbott M.M. "Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química". 7ma. Edición. Mc Graw Hill. 2008.
28. Chapra Steven C. – Canale Raymond P. "Métodos Numéricos para Ingenieros". 5ta. Edición. Mc Graw Hill. 2007.
29. Himmelblau D.M. & Bischoff K.B. "Análisis y Simulación de Procesos" .Editorial Reverté S.A. 1976.
30. Sablani S.S., A.K. Datta, M.S. Rahman, A.S. Mujumdar. "Handbook of Food and Bioprocess Modeling Techniques". CRC Press, 2006.
31. Tzia C., G. Liadakis. "Extraction Optimization in Food Engineering". CRC Press, 2003.
32. Ozilgen M., "Handbook of Food Process Modeling and Statistical Quality Control". 2da Edición. CRC Press, 2011.
33. Romdhanel M. and Tizaoui C. "The kinetic modelling of a steam distillation unit for the extraction of aniseed (*Pimpinella anisum*) essential oil". *J Chem Technol. Biotechnol* 80: 759–766, 2005
34. Benyoussef, E.-H.; Hasni, S.; Belabbes, R.; Bessiere, J.-M. "Modélisation du transfert de matière lors de l'extraction de l'huile essentielle des fruits de coriander". *Chem. Eng. J.* 2002. 85, 1-5.

35. Xavier V. B., R. M. F. Vargas, E. Cassel, A. M. Lucas, M. A. Santos, C. A. Mondin, E.R. Santarem, L.V. Astarita, T. Sartor. "Mathematical modeling for extraction of essential oil from *Baccharis* spp. by steam distillation". *Industrial Crops and Products*, 33: 599–604, 2011.
36. Sharma, S. Sangwan, N.S. Sangwan, R.S. "Developmental process of essential oil glandular trichome collapsing in menthol mint". *Current Science*, 2003, 84, 4, 544-550.
37. Mark E. Davis "Métodos y Modelos Numéricos para Ingenieros Químicos". 1ra Edición. Compañía Editorial Continental S.A. México. 1990.
38. Said S.E.H. Elnashaie – Parag Garhyan. "Conservation Equations and Modeling of Chemical and Biochemical Processes". Marcel Dekker, Inc. New York. Basel 2003.

ANEXOS

ANEXO I.

ANÁLISIS HISTOLÓGICO DEL FRUTO DEL MOLLE.



UNIVERSIDAD PERUANA
CAYETANO HEREDIA

Facultad de Ciencias y Filosofía Alberto Cazorla Talleri.

INFORME CORTES HISTOLÓGICOS

Descripción anatómica – Fruto de “Molle” *Schinus molle* L. ANACARDIACEAE.

De: **Biólogo-Botánico Camilo Díaz Santibañez**

Laboratorio de Botánica aplicada (LID).

Universidad Peruana Cayetano Heredia.

Para: **Ingeniero Freddy Tineo Córdova**

Universidad Nacional de Ingeniería.

Muestra recibida: Racimo de frutos maduros de “Molle” – *Schinus molle* L. – ANACARDIACEAE. (Fotografía 1).

Origen de la muestra: Km 95 de la carretera a Canta.

Requerimiento:

- a. Realizar cortes transversales de frutos de “molle”.
- b. Reconocer y fotografiar microscópicamente las estructuras anatómicas, especialmente el lugar de producción y almacenamiento de Aceites esenciales.

Materiales y Métodos de trabajo:

1. Se fijaron los frutos recibidos en Solución FAA (Formol - Ácido Acético - Alcohol) por 5 días.
2. Luego de retirar el exocarpo, se realizaron los primeros cortes a mano alzada del material fijado.
3. Los cortes se tiñeron con Colorante Sudán III.
4. Se observaron y fotografiaron las primeras estructuras reconocidas. (fotografía 2).
5. Se reconocen con claridad El pericarpo (tres partes de afuera hacia adentro) y la semilla: El **exocarpo rojo**, muy frágil y fácilmente desprendible, el **Mesocarpo** carnoso atravesado longitudinalmente por 6 a 7 cavidades secretoras y, separando la semilla, se presenta el **Endocarpo** esclerosado, muy duro.

6. Para verificar y aclarar la formación y funcionamiento de las **cavidades secretoras**, se recolectó nuevo material de estudio: Frutos de "Molle" en diferentes grados de maduración.
7. Se procedió a fijarlos en Solución FAA (5 días).
8. Se colorearon con Solución Sudan III,
9. Se observaron al Microscopio (10x y 40x) y se fotografiaron.

CONCLUSIONES:

- A. En frutos verdes se observó el proceso de formación de las **cavidades secretoras**. (fotografías 3, 4 y 5).
- B. En el **Mesocarpo** de frutos semimaduros se observaron las cavidades secretoras, células secretoras internas y gotas lipídicas. (Fotografías 6, 7 y 8).
- C. El almacenamiento de aceite sucede en el tejido **parenquimático del mesocarpo**.
- D. El **Endocarpo** – visto en la fotografía inicial de fruto maduro como una capa gruesa de color amarillo -, corresponde al ordenamiento apretado de células con paredes lignificadas, dándole la dureza característica.

Lima, 20 de Junio 2012.



Biólogo Camilo Díaz Sanfibañez.

Laboratorio de Botánica Aplicada (LID)

Universidad Peruana Cayetano Heredia.

ANATOMÍA DE SEMILLA DE «MOLLE» *Schinus molle* L. – ANACARDIACEAE.

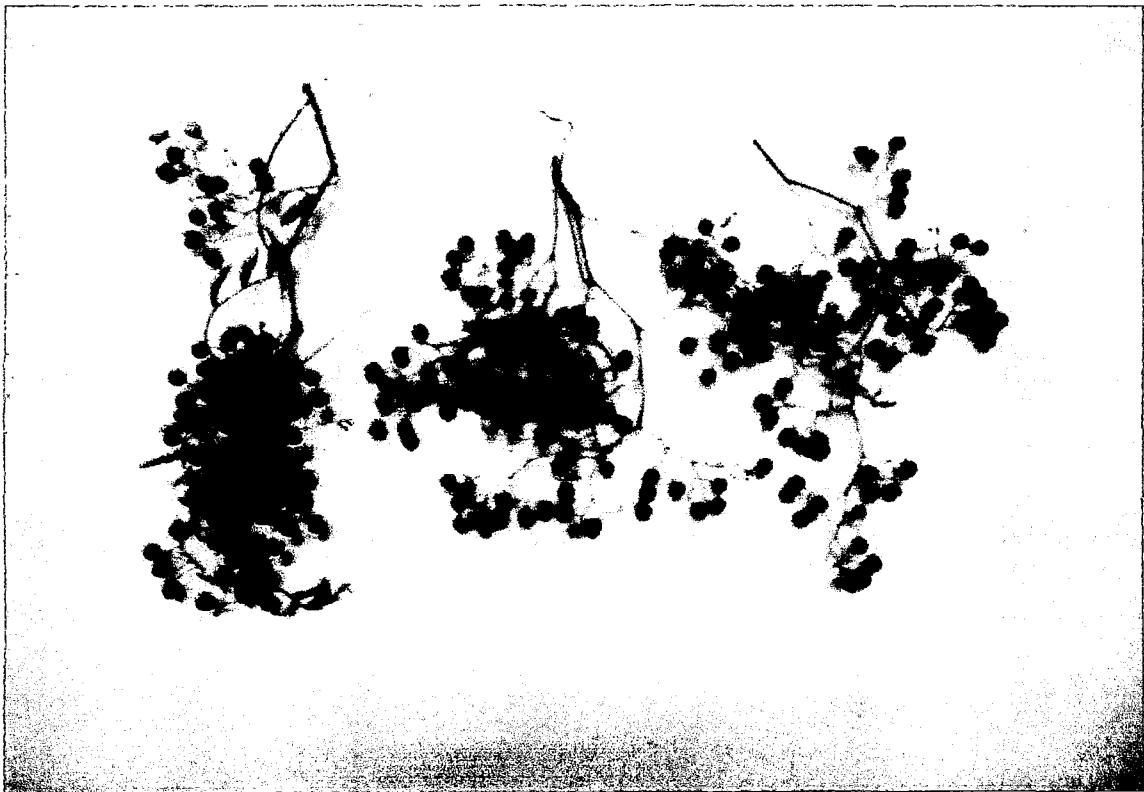
Blgo. Botánico: Camilo Díaz Santibañez.

Estudiante: Hugo Galindo García.

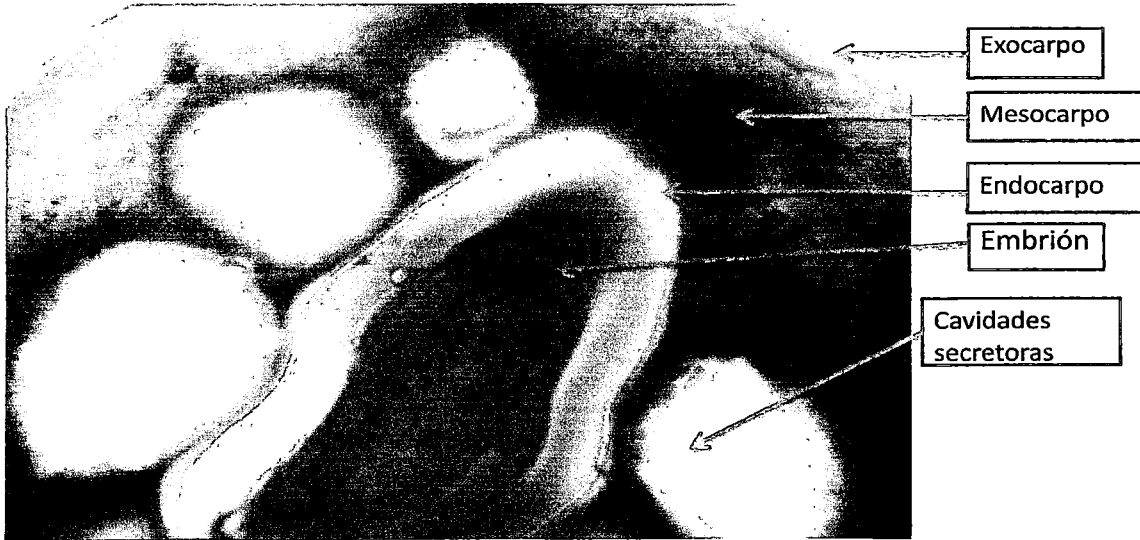
Lab. Botánica Aplicada

LID – UPCH.

MUESTRA RECIBIDA.



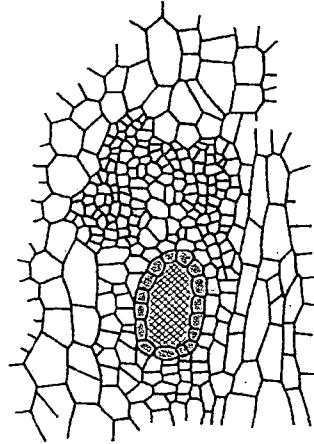
CORTE TRANSVERSAL : FRUTO SECO.
CAVIDADES SECRETORAS:
MESOCARPO.



CORTE TRANSVERSAL: CAVIDADES SECRETORAS.



CORTE TRANSVERSAL: CAVIDADES SECRETORAS (gotas lipídicas).



- Representación gráfica – Cavidad secretora Anacardiaceae

CORTE TRANSVERSAL – FRUTO VERDE – PARTES SEMILLA: ENDOCARPO



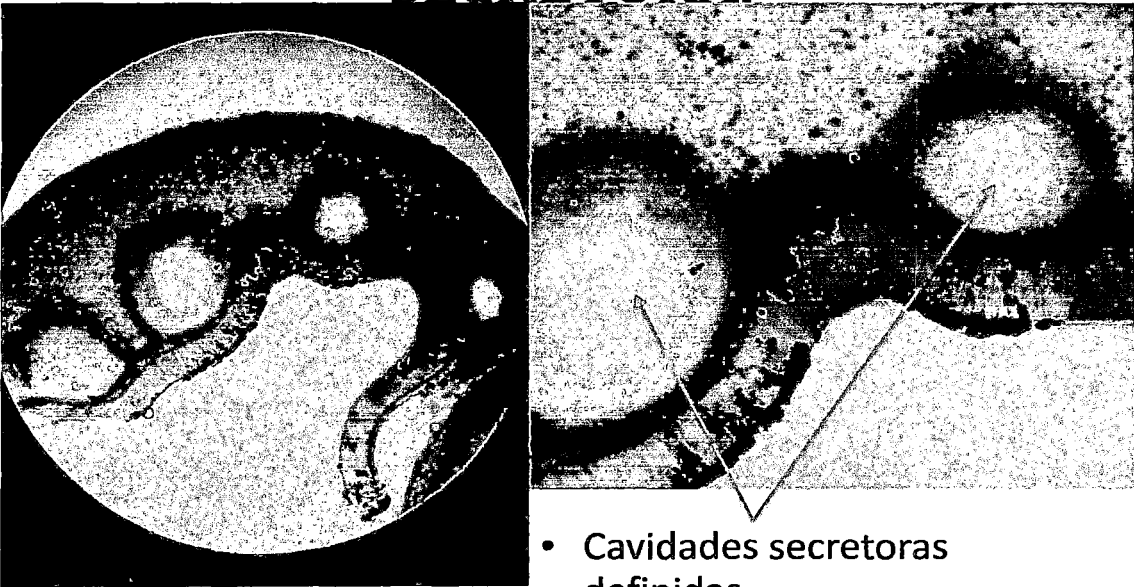
- Cavidades secretoras en formación

Embrión

**CORTE TRASVERSAL FRUTO –
SEMI MADURO – CAVIDAD
SECRETORA.**



**CORTE TRASVERSAL FRUTO –
SEMI MADURO – CAVIDAD
SECRETORA.**

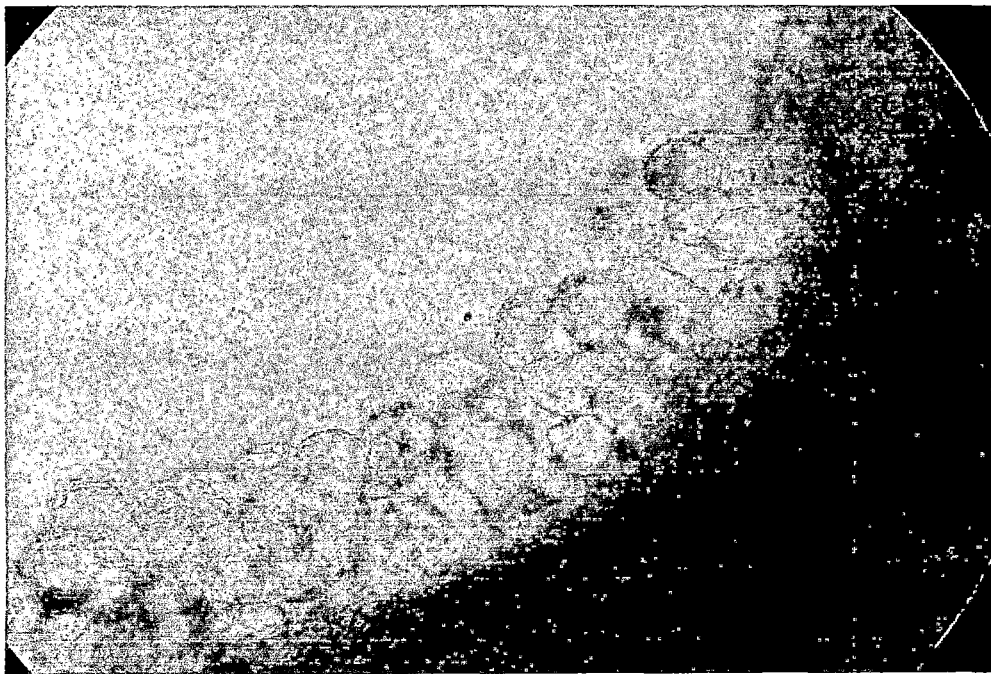


- Cavidades secretoras definidas.

**CORTE TRASVERSAL FRUTO –
SEMI MADURO – CAVIDAD
SECRETORA.**



**CANAL SECRETOR –
CÉLULAS SECRETORAS.**



ANEXO II

ANÁLISIS CROMATOGRÁFICO DEL ACEITE DE MOLLE



UNIVERSIDAD PERUANA
CAYETANO HEREDIA

Facultad de Ciencias y Filosofía Alberto Cazorla Talleri

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN EN PRODUCTOS NATURALES

Informe de resultados: N° 03/2012

Solicitante: Ing. Freddy Tineo Córdova, Universidad Nacional de Ingeniería
Muestras: Aceite esencial de molle
Análisis: Composición química de aceite esencial por Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas
Fecha de recepción: 20 Marzo del 2012
Fecha de entrega de Resultados: 2 Abril del 2012

Resultados

En las páginas 2 a 9 del presente informe.

Atentamente,

Dra. Rosario Rojas Durán
Unidad de Investigación en Productos Naturales
LID-Laboratorio 209
e-mail: rosario.rojas@upch.pe
página web: www.uipn-upch.pe
Teléfono: 51-1-3190000 Anexo 2705

Dra. Rosario Rojas
Unidad de Investigación en Productos Naturales
Laboratorios de Investigación y Desarrollo-UPCH
Profesora. Depto. Ciencias Farmacéuticas

Av Honorio Delgado N° 430 Lima 31 - Apartado Postal 4314 Lima 100, PERU
☎ Central: 319-0000 / 452-0252 Anexo: 2401 - 2402 Fax: 382-1782
email: fcs1@upch.edu.pe / fcs2@upch.edu.pe

ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Muestra molle Canta: Km 95

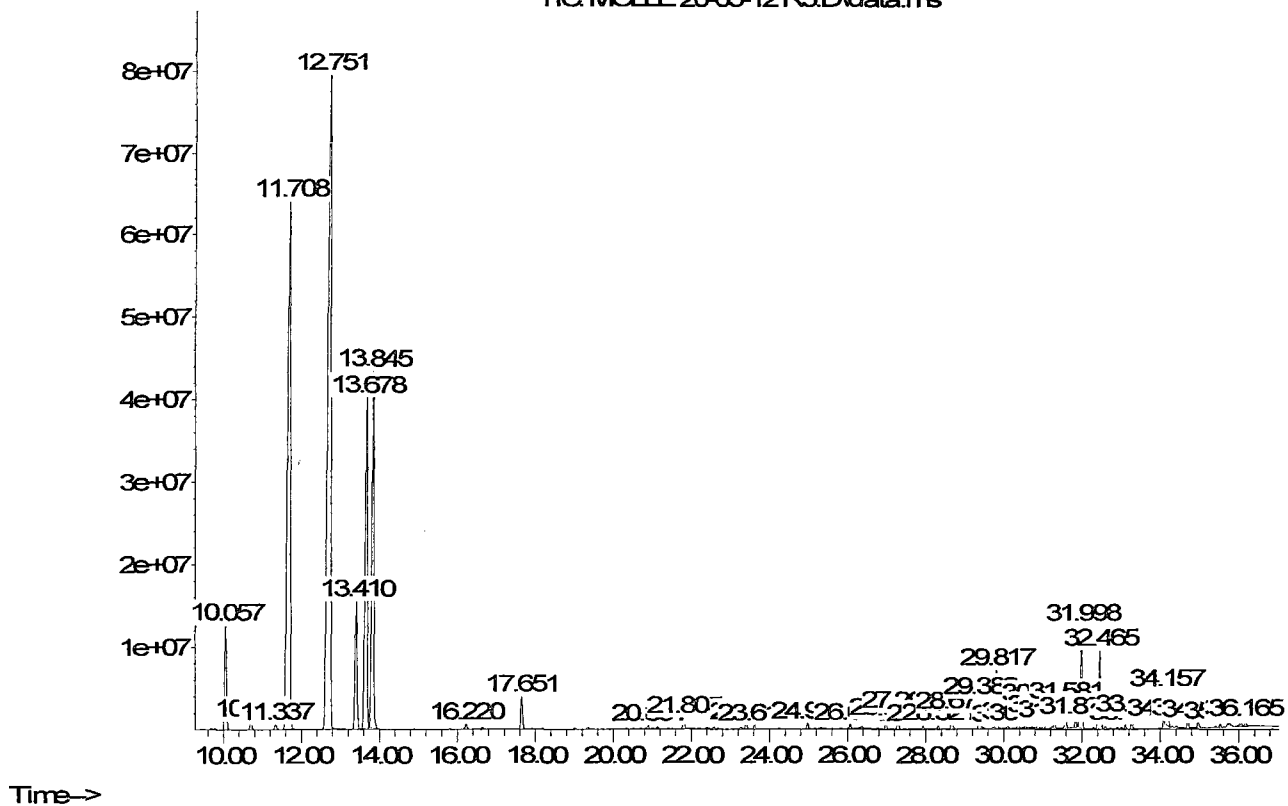
Se identificaron **42** compuestos que comprenden el **100%** de la composición total del aceite esencial.

Numero	Nombre del compuesto (NIST08.L)	% en la muestra (áreas relativas)	t _R (min)
1	α-Pineno	2.93	10.057
2	Canfeno	0.25	10.732
3	Sabineno	0.16	11.337
4	β-Mirceno	23.33	11.708
5	α-felandreno	32.73	12.751
6	m-Cimeno	3.88	13.410
7	D-Limoneno	11.34	13.678
8	β-felandreno	11.38	13.845
9	Terpinoleno	0.14	16.22
10	octanoato de metilo	0.89	17.651
11	3,5-dimetilheptanoato de metilo	0.09	20.891
12	(-)-cis-Sabinol	0.27	21.805
13	Ascaridol	0.14	23.407
14	citronelato de metilo	0.11	23.613
15	acetate de borneol	0.13	24.981
16	geranato de metilo	0.1	26.07
17	acetato de citronelol	0.2	26.982
18	acetato de nerol	0.36	27.291
19	acetato de geraniol	0.07	27.932
20	Copaeno	0.08	28.321
21	β-Elemeno	0.39	28.671
22	α-Gurjuneno	0.73	29.382
23	Cariofileno	1.3	29.817
24	acetato de nerolidol	0.07	30.1
25	.(+)-Aromadendreno	0.1	30.366
26	Gurjuneno	0.07	30.556
27	α-Humuleno	0.49	30.883
28	(-)-Aloaromadendreno	0.24	31.02
29	Muuroleno	0.17	31.301
30	β-Cubebeno	0.54	31.581
31	Eremofileno	0.19	31.839
32	Elixeno	2.69	31.998
33	β-Cadineno	2.23	32.465
34	isobutirato de geraniol	0.08	33.111
35	Elemol	0.27	33.273
36	Palustrol	0.08	34.082
37	Germacreno D-4-ol	1.1	34.157
38	Viridiflorol	0.18	34.703
39	Ledol	0.15	34.963
40	β-Guaieno	0.07	35.529
41	α-Cadinol	0.15	36.06
42	α-Eudesmol	0.13	36.165

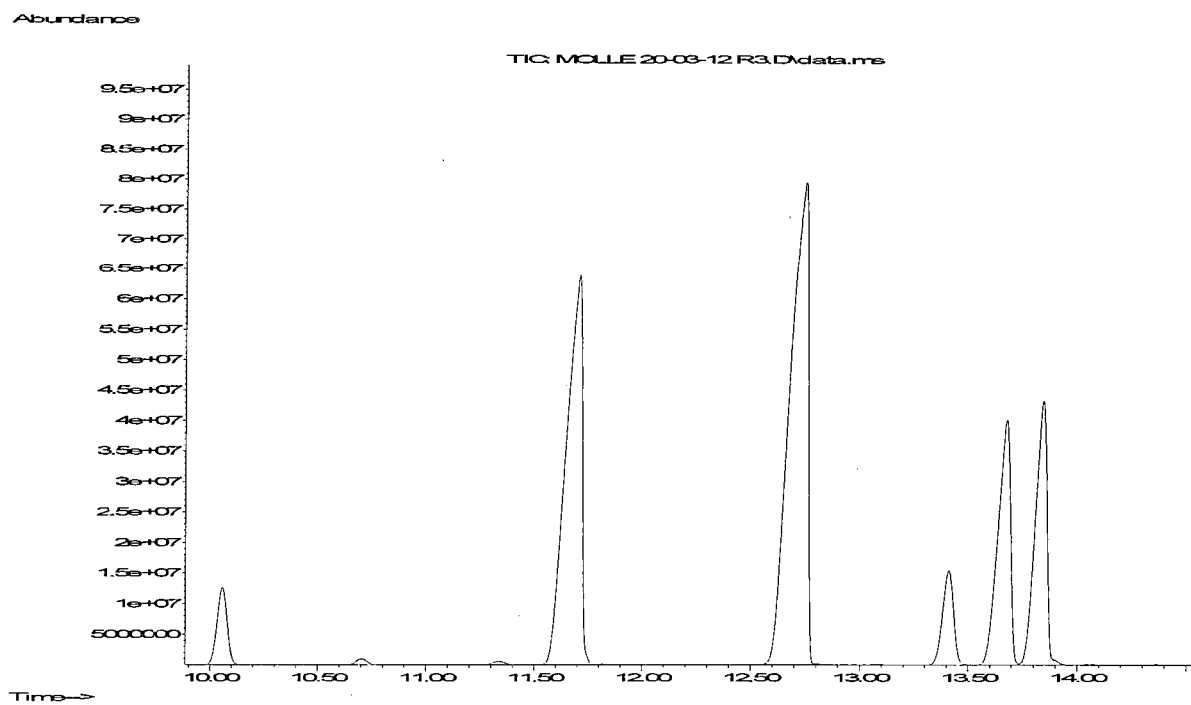
Cromatograma de GC-MS del aceite esencial

Abundance

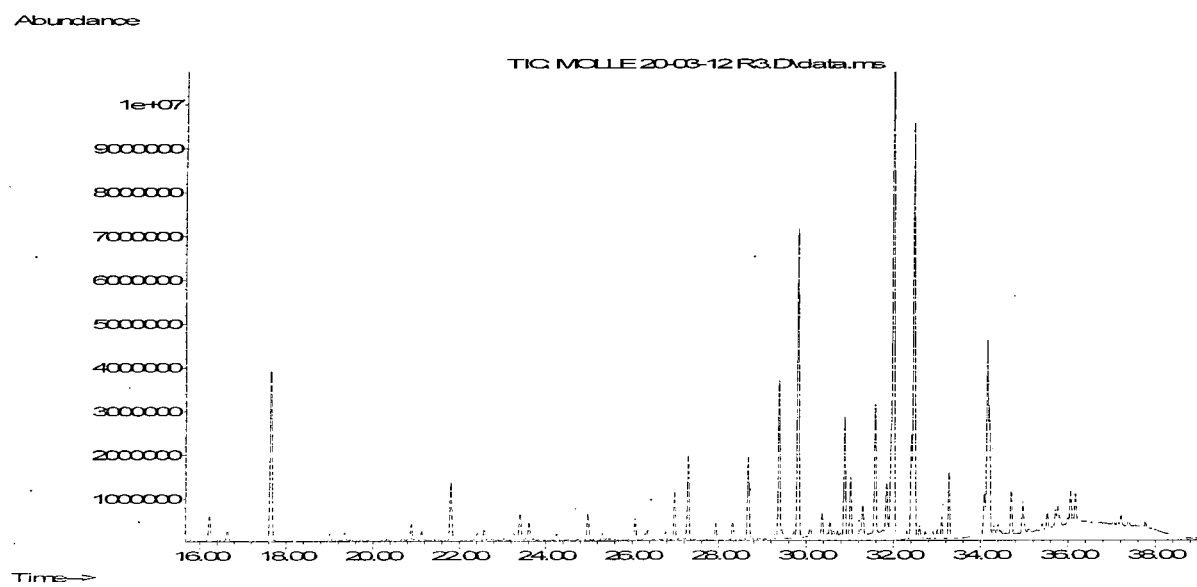
TIC: MOLLE 20-03-12 R3.D\data.ms



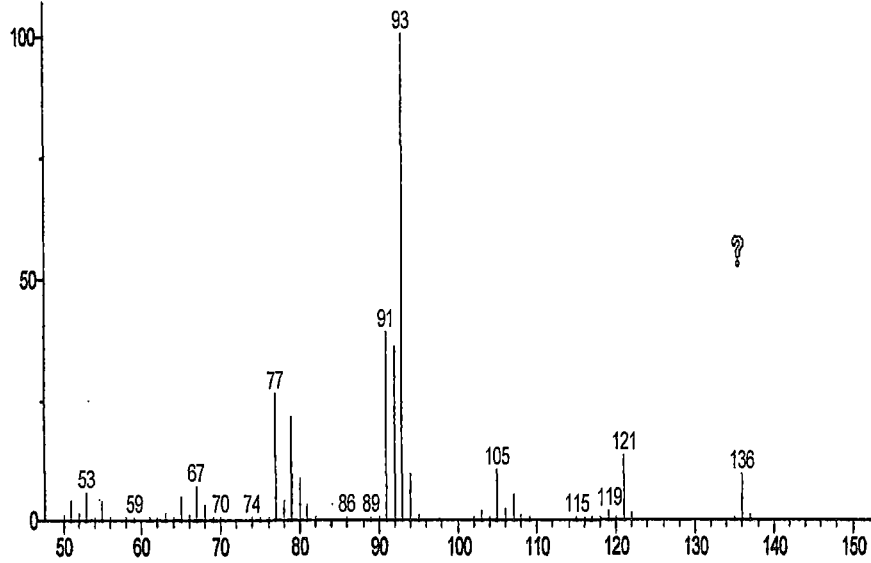
Cromatograma de GC 6 mayoritarios



Cromatograma de GC minoritarios

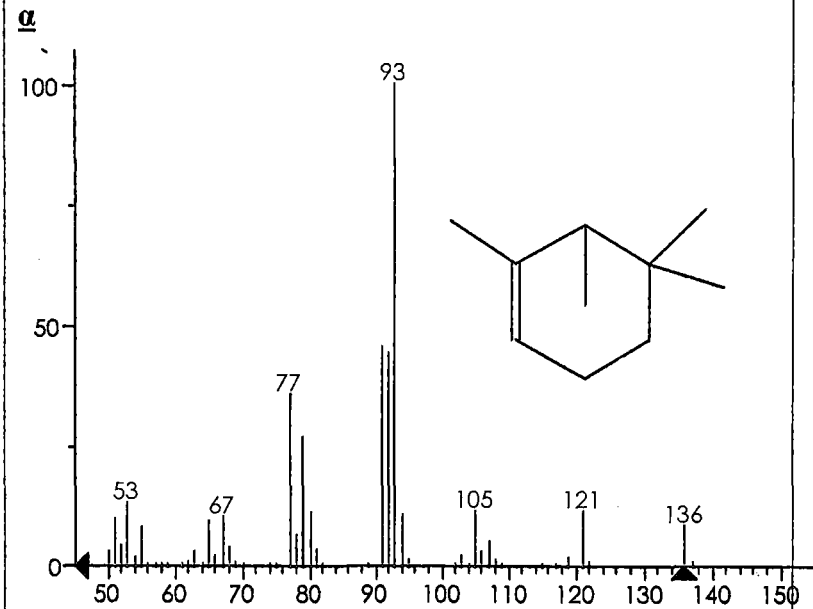


Espectro de masa desconocido

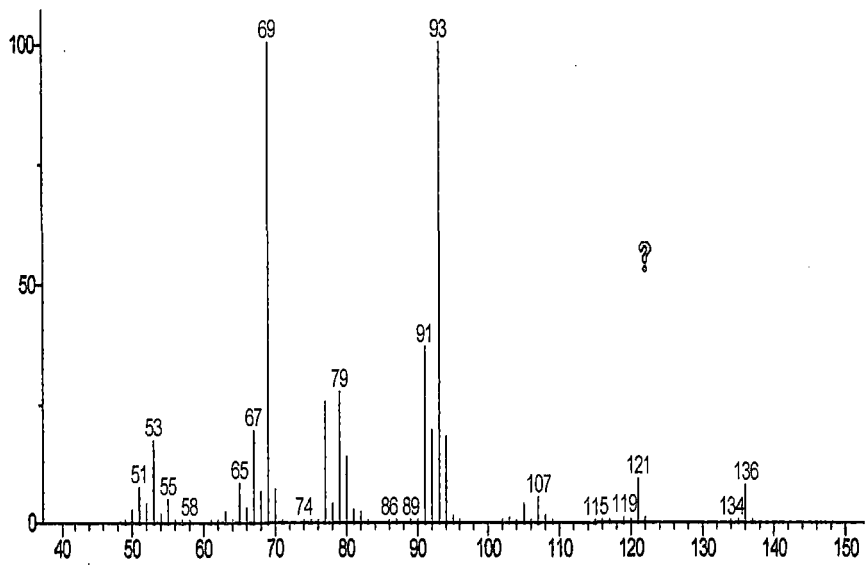


(Text File) Scan 769 (10.067 min): MOLLE20-03-12 R3.D\data.ms

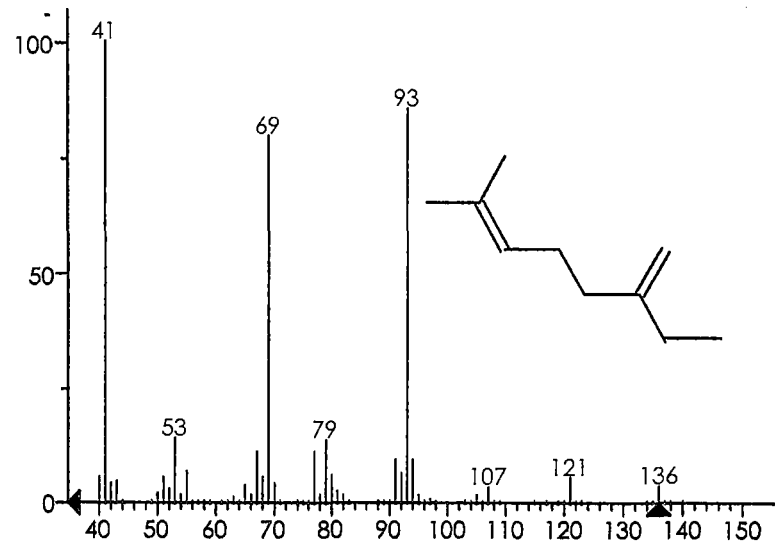
Espectro de masa compuesto probable por NIST
08. L



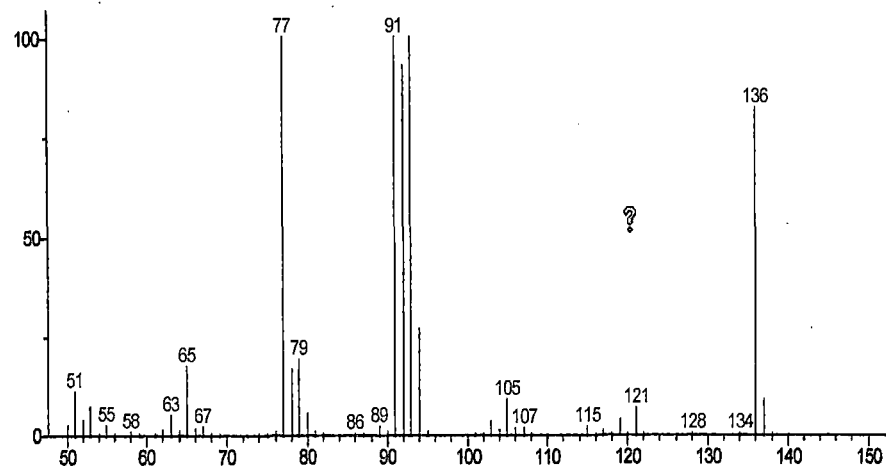
(replib) IR- α -Pinene



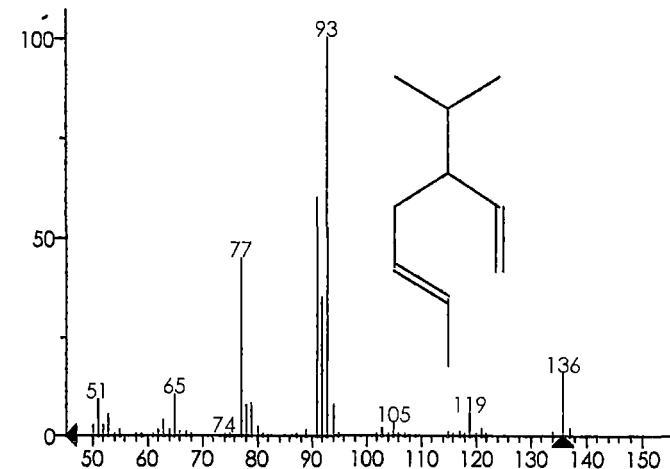
(Text File) Scan 1389 (11.664 min): MOLLE20-03-12 R3.D\data.ms



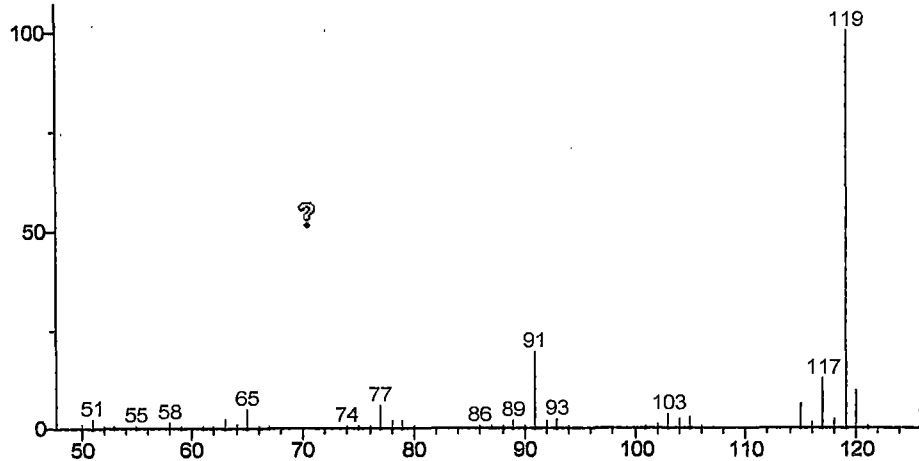
(mainlib) β -Myrcene



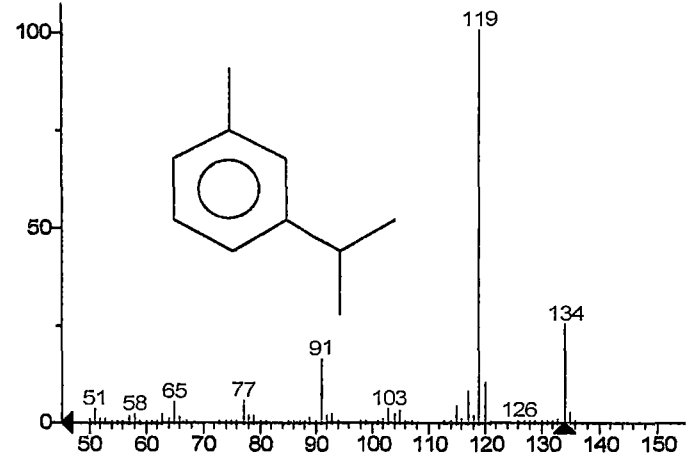
(Text File) Scan 1798 (12.717 min): MOLLE20-03-12 R3.D\data.ms



(replib) α -Phellandrene

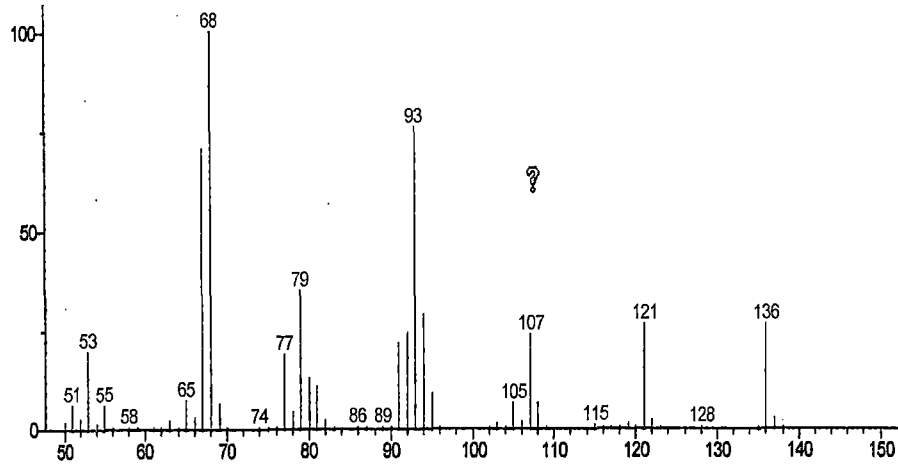


(Text File) Scan 2067 (13.410 min): MOLLE20-03-12 R3.D\data.ms

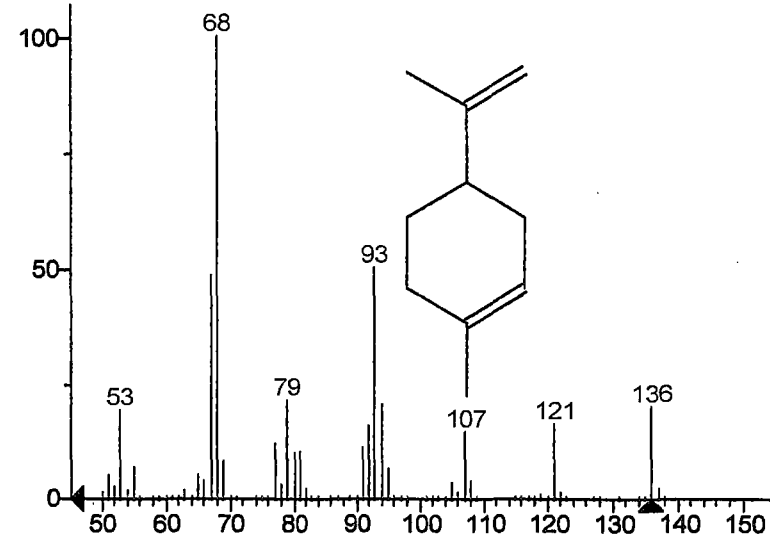


(replib) Benzene, 1-methyl-3-(1-methylethyl)-

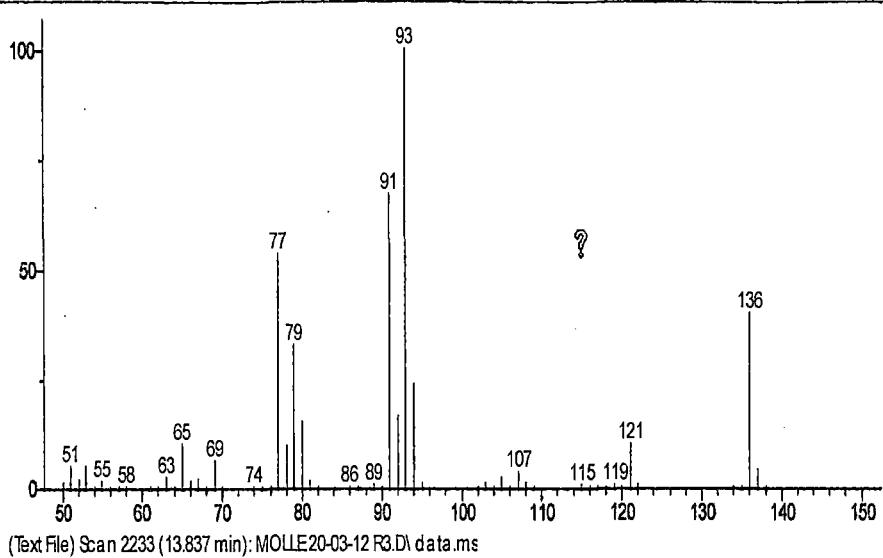
m-cimeno



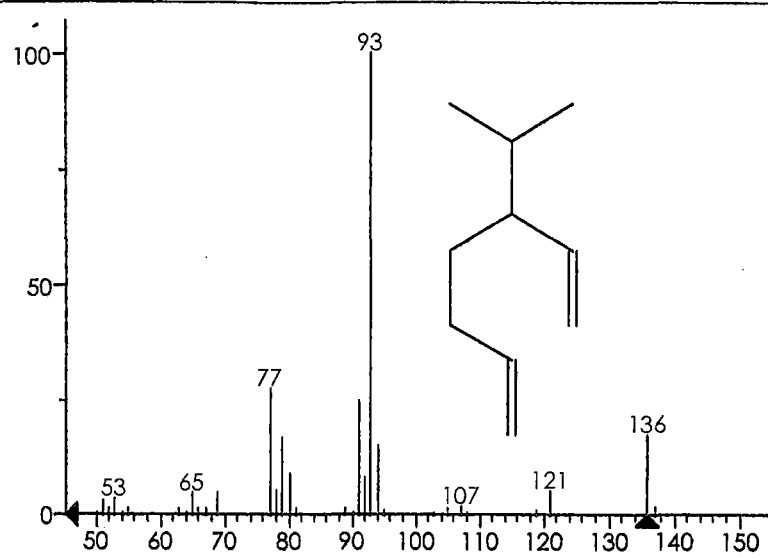
(Text File) Scan 2164 (13.660 min): MOLLE20-03-12 R3.D\data.ms



(replib) D-Limonene



(Text File) Scan 2233 (13.837 min): MOLLE20-03-12 R3.D\data.ms



(mainlib) β -Phellandrene

Condiciones cromatográficas:

Columna: 1545.67659 DB-5ms, 325 °C: 60 m x 250 µm x 0.25 µm

Programa del horno:

100 °C por 10 min, 3 °C/min hasta 120 °C y finalmente 5 °C/min hasta 250 °C

Tiempo de corrida: 42.667 min

Inyección: 1 µL

Split: 20: 1

Gas portador: **He**, 20.443 cm/sec.

Detector: Espectrómetro de Masa

Muestra: Se diluyó 10 µL de muestra en 1ml de diclorometano.



UNIVERSIDAD PERUANA
CAYETANO HEREDIA

Facultad de Ciencias y Filosofía Alberto Cazorla Talleri

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN EN PRODUCTOS NATURALES

Informe de resultados: N° 04/2012

Solicitante: Ing. Freddy Tineo Córdova, Universidad Nacional de Ingeniería

Muestras: Aceite esencial de molle

Análisis: Composición química de aceite esencial por Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas

Fecha de recepción: 9 Abril del 2012

Fecha de entrega de Resultados: 19 Abril del 2012

Resultados

En las páginas 2 a 10 del presente informe.

Atentamente,

Dra. Rosario Rojas Durán
Unidad de Investigación en Productos Naturales
LID-Laboratorio 209
e-mail: rosario.rojas@upch.pe
página web: www.uipn-upch.pe
Teléfono: 51-1-3190000 Anexo 2705

Av. Honorio Delgado N° 430 Lima 31 - Apartado Postal 4314 Lima 100, PERÚ
☎ Central: 319-0000 / 482-0252 Anexo: 2401 - 2402 Fax: 382-1762
email: fcs1@upch.edu.pe / fcs2@upch.edu.pe

Dra. Rosario Rojas
Unidad de Investigación en Productos Naturales
Laboratorios de Investigación y Desarrollo - LID
Profesora. Depto. Ciencias Farmacéuticas

ACEITE ESENCIAL DE MOLLE (muestra 2)

Muestra: aceite esencial de molle proveniente de Canta 3 de abril:

Muestra molle Canta: Km 68

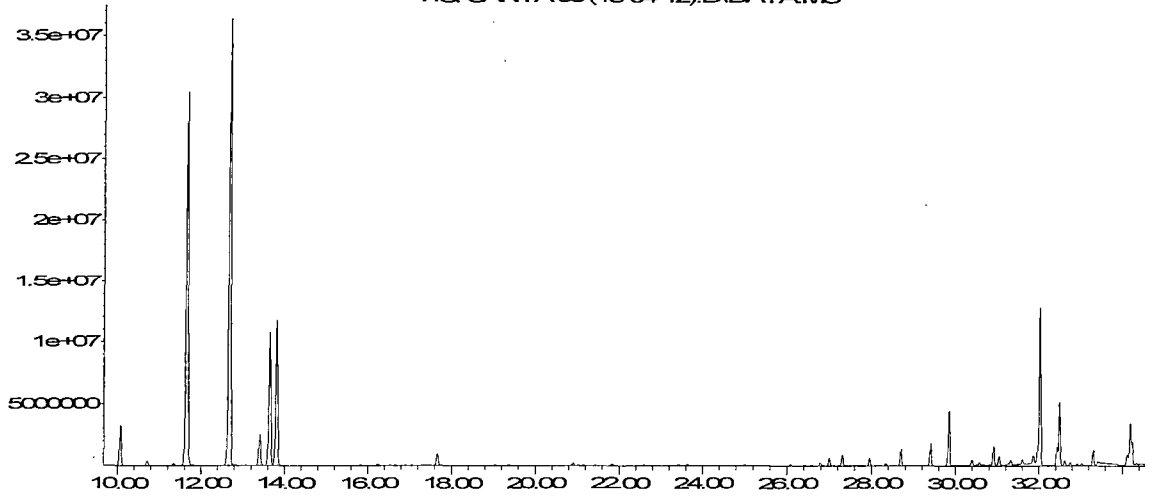
Se identificaron **44** compuestos que comprenden el 100% de la composición total del aceite esencial.

Número	Nombre del compuesto (NIST08.L)	% en la muestra (áreas relativas)	t _R (min)
1	α-Pineno	2.22	10.06
2	Canfeno	0.29	10.71
3	Sabineno	0.12	11.34
4	β-Mirceno	23.58	11.65
5	α-felandreno	28.81	12.68
6	m-Cimeno	1.89	13.40
7	D-Limoneno	8.16	13.64
8	β-felandreno	8.77	13.81
9	Terpinoleno	0.12	16.25
10	octanoato de metilo	0.71	17.66
11	3,5-dimetilheptanoato de metilo	0.14	20.91
12	(-)-cis-Sabinol	0.12	21.84
13	Ascaridol	0.08	23.43
14	citronelato de metilo	0.08	23.64
15	acetato de borneol	0.06	24.99
16	geranato de metilo	0.09	26.09
17	acetato de citronelol	0.36	27.00
18	acetato de nerol	0.54	27.31
19	acetato de geraniol	0.36	27.95
20	Copaeno	0.11	28.34
21	β-Elemeno	0.84	28.69
22	α-Gurjuneno	1.10	29.40
23	Cariofileno	2.60	29.83
24	(+)-Aromadendreno	0.30	30.39
25	Gurjuneno	0.16	30.56
26	α-Humuleno	0.87	30.91
27	(-)-Aloaromadendreno	0.42	31.04
28	τ-Muurolene	0.22	31.32
29	β-Cubebeno	0.17	31.60
30	Longifolene	0.37	31.86
31	Elixeno	8.27	32.02
32	β-Cadineno	3.93	32.49
33	Farnesol	0.25	32.62
34	acetato de nerolidol	0.17	32.76
35	δ-Muurolene	0.09	33.04
36	Elemol	0.71	33.30
37	Palustrol	0.20	34.11
38	Germacreno D-4-ol	0.92	34.18
39	Spatulenol	0.23	34.23
40	Ledol	0.44	34.73
41	globulol	0.49	35.00
42	β-Guaieno	0.16	35.56
43	α-Cadinol	0.31	36.08
44	α-Eudesmol	0.19	36.20

Cromatograma GC-MS del aceite esencial de molle

Abundance

TIC CANTA 65 (13-04-12).D.DATAMS

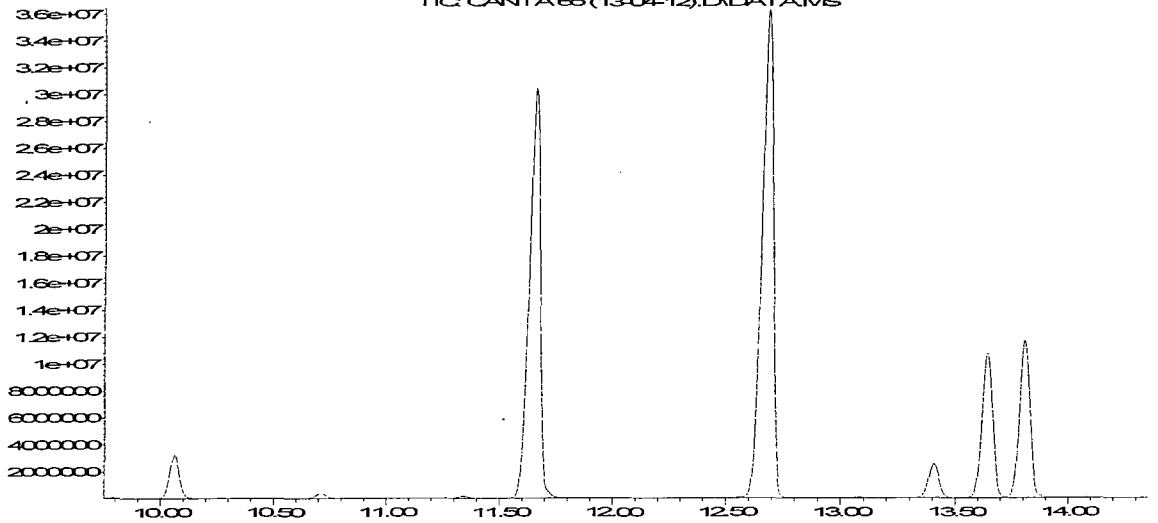


Time→

Cromatograma GC de los compuestos mayoritarios

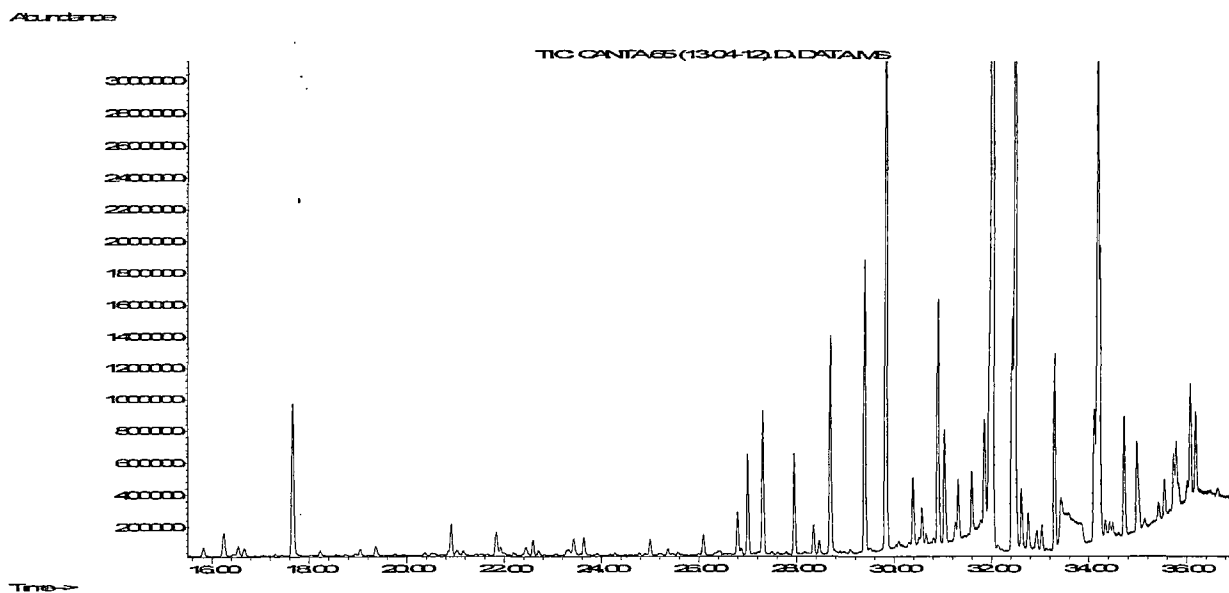
Abundance

TIC CANTA 65 (13-04-12).D.DATAMS

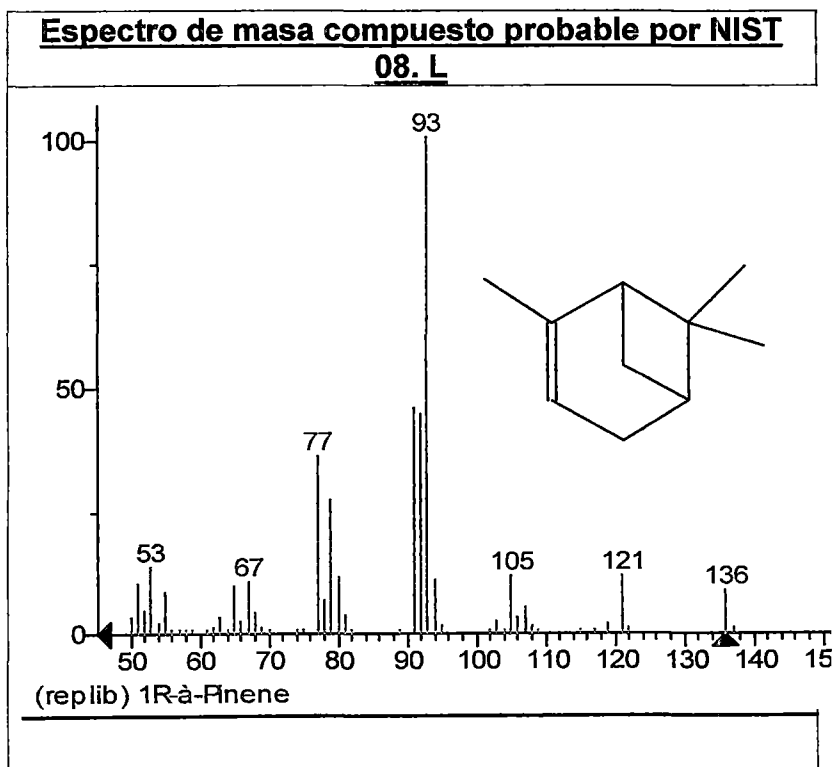


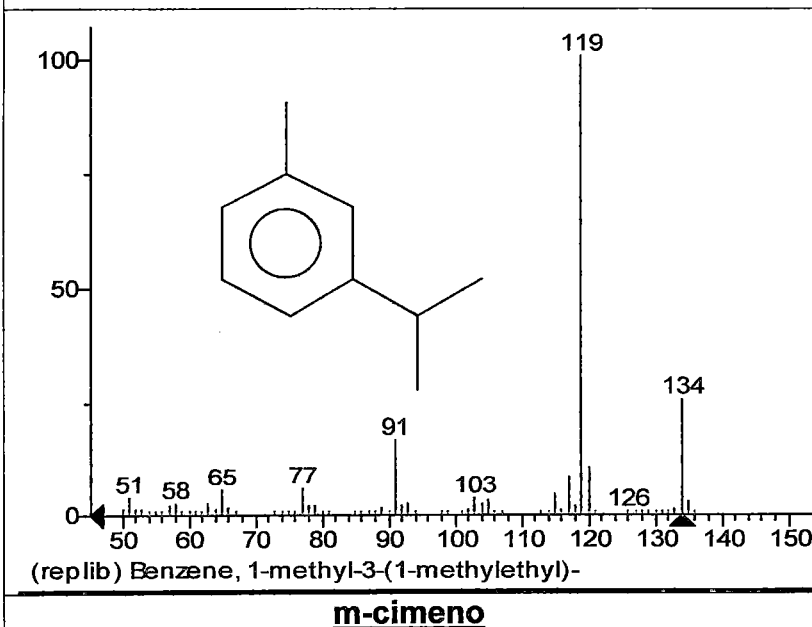
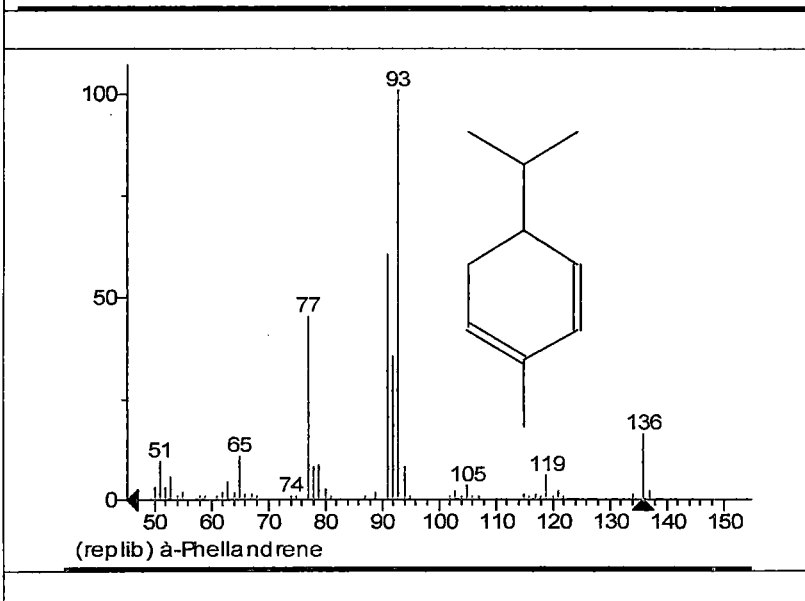
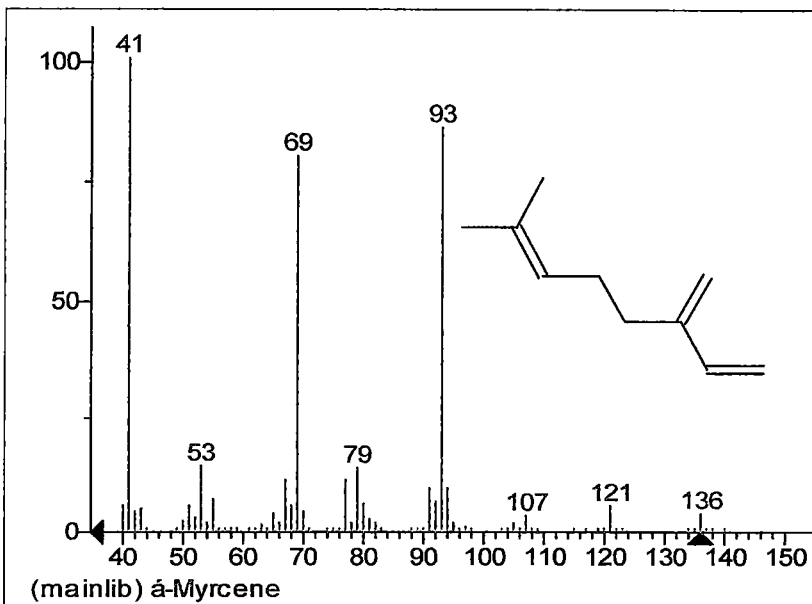
Time→

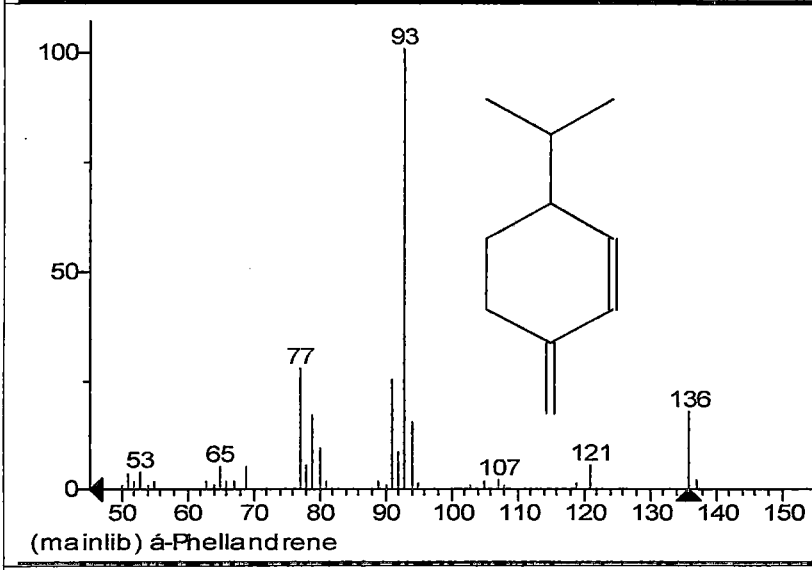
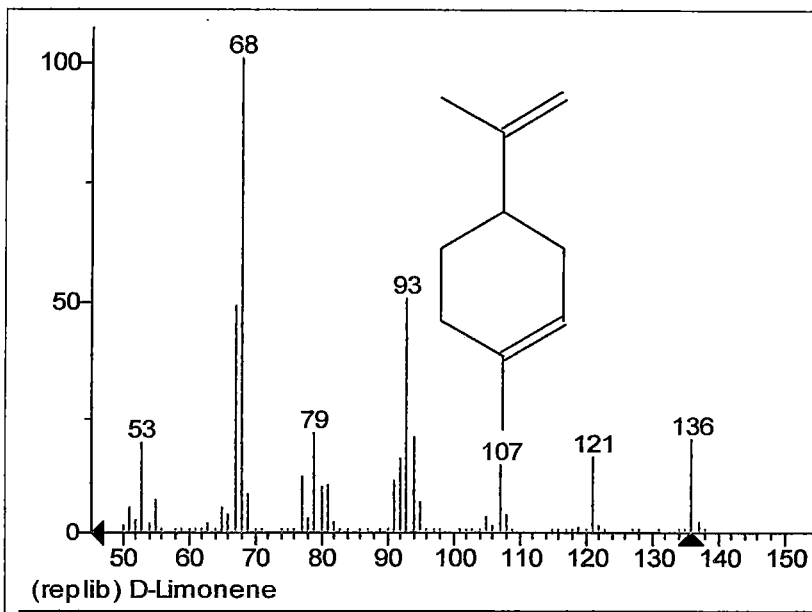
Cromatograma GC de compuestos mayoritarios/minoritarios

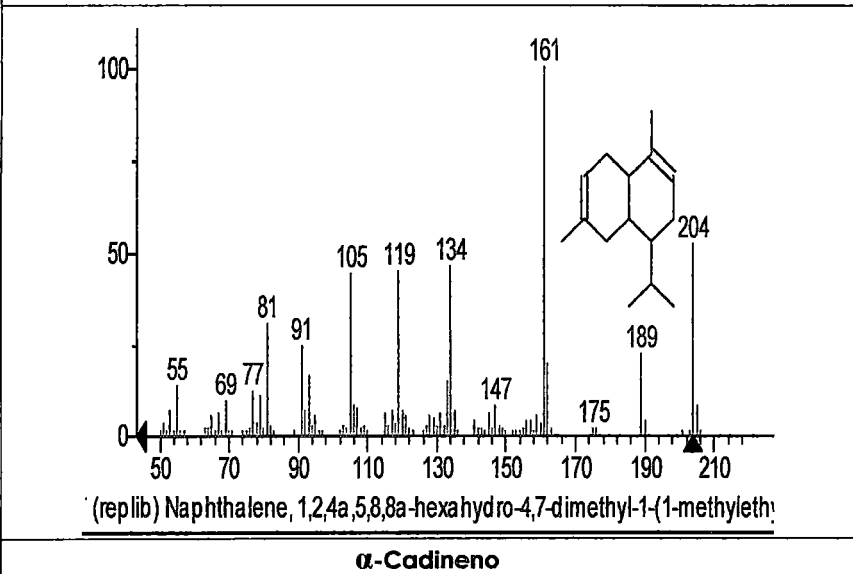
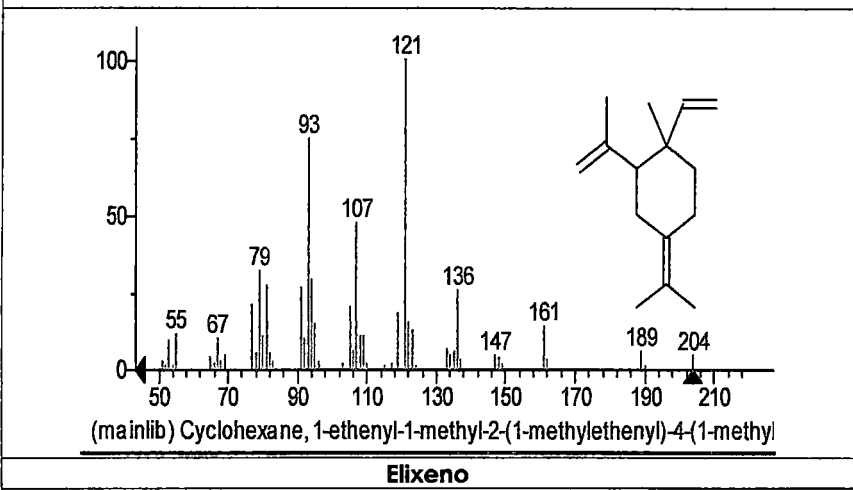
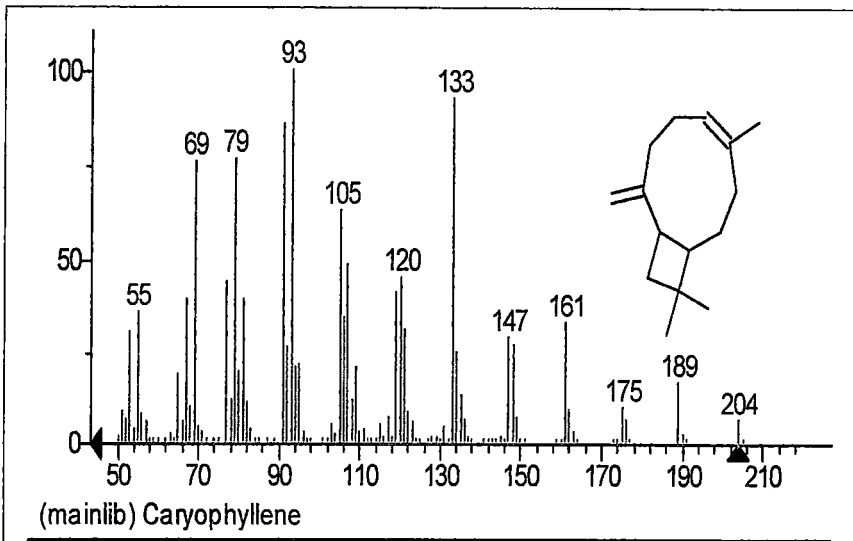


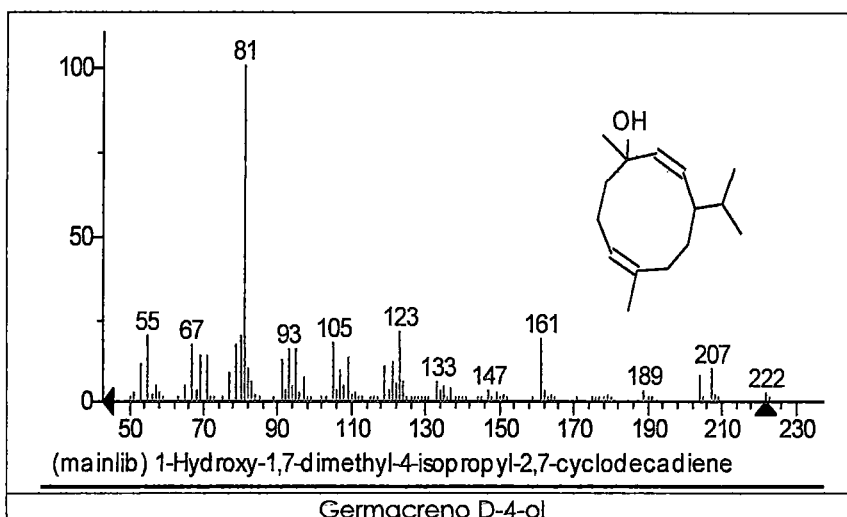
Espectros de masas de Compuestos mayoritarios











Condiciones cromatográficas:

Columna: DB-5ms, 325 °C: 60 m x 250 µm x 0.25 µm

Rampa de temperatura: 100 °C por 10 min, 3 °C/min hasta 120 °C y finalmente 5 °C/min hasta 250 °C

Tiempo de corrida: 42.67 min

Inyección: 1 µL

Split: 20:1

Gas portador: He, 20.443 cm/sec

Detector: Espectrómetro de Masa

Muestra: Se diluyó 10 µL de muestra en 1ml de diclorometano

ANEXO III



UNIVERSIDAD PERUANA
CAYETANO HEREDIA

Facultad de Ciencias y Filosofía Alberto Cazorla Talleri

UNIDAD DE INVESTIGACIÓN EN PRODUCTOS NATURALES

Solicitante: Ing. Freddy Tineo Córdova, Universidad Nacional de Ingeniería
Muestras: Aceite esencial de molle (KM 90 Canta)
Análisis: Análisis Físicoquímico de aceite esencial
Fecha de recepción: 10 Abril del 2012
Fecha de entrega de Resultados: 17 Abril del 2012

Resultados

Densidad relativa = 0.835 g/ml a T° 21°C

Índice de refracción= 1,4805

Índice de acidez (mg de KOH/g de grasa)= 0.598

Atentamente,

Dra. Rosario Rojas Durán
Unidad de Investigación en Productos Naturales
LID-Laboratorio 209
e-mail: rosario.rojas@upch.pe
página web: www.uipn-upch.pe
Teléfono: 51-1-3190000 Anexo 2705

Av. Honorio Delgado N° 430 Lima 31 - Apartado Postal 4314 Lima 100, PERÚ
Central ☎ : 319-0000 482-0252 Anexo 2605 - 2402 Fax: 382-1782
email: facien.decanato@oficinas-upch.pe / facien.soc@oficinas-upch.pe

ANEXO IV

TABLAS Y GRAFICAS DE LAS PROPIEDADES TERMODINAMICAS DE LOS COMPONENTES DEL ACEITE DE MOLLE.

Table 1. Enthalpy of Vaporization - Organic Compounds
Thermophysical Properties of Chemicals and Hydrocarbons – C. L. Yaws

ID	FORMULA	NAME	CAS No	A	T _C (K)	n	T _{MIN} (K)	T _{MAX} (K)	code	T(K)	H _{VAP@T}
	C ₁₀ H ₁₆	Mirceno									
20319	C ₁₀ H ₁₆	α-felandreno	99-83-2	61,8090	649,00	0,3730	348,15	649,00	1,2	448,15	39,908
20316	C ₁₀ H ₁₆	D-limoneno	5989-27-5	60,4424	660,00	0,3800	199,00	660,00	1,2	449,65	39,141
20317	C ₁₀ H ₁₆	Limoneno	138-86-3	59,2765	660,00	0,3800	178,15	660,00	1,2	451,15	38,282
20318	C ₁₀ H ₁₆	L-limoneno	5989-54-8	59,2765	660,00	0,3800	351,15	660,00	1,2	451,15	38,282
20320	C ₁₀ H ₁₆	β-felandreno	555-10-2	62,9621	648,00	0,3980	347,15	648,00	1,2	447,15	39,502
20321	C ₁₀ H ₁₆	α-pineno	80-56-8	55,4400	632,00	0,3860	209,15	632,00	1,2	429,29	35,744
20322	C ₁₀ H ₁₆	α-pineno, (-)	7785-26-4	50,6248	647,00	0,3800	209,15	647,00	1,2	428,15	33,533
20323	C ₁₀ H ₁₆	β-pineno	127-91-3	60,0345	643,00	0,4020	211,61	643,00	1,2	439,19	37,828
20324	C ₁₀ H ₁₆	β-pineno, (1 R)	19902-08-0	55,7324	647,00	0,3800	223,15	647,00	1,2	437,75	36,293
20325	C ₁₀ H ₁₆	α-terpineno	99-86-5	62,1650	652,00	0,3850	350,35	652,00	1,2	450,35	39,567
20326	C ₁₀ H ₁₆	γ-terpineno	99-85-4	63,8650	661,00	0,3930	356,15	661,00	1,2	456,15	40,301
19869	C ₁₀ H ₁₄	Cimeno	25155-15-1	58,1612	664,65	0,3800	205,25	664,65	1,2	449,50	37,887
19870	C ₁₀ H ₁₄	m-cimeno	535-77-3	61,4941	657,00	0,3950	209,44	657,00	1,2	448,23	39,099
19871	C ₁₀ H ₁₄	o-cimeno	527-84-4	62,1799	662,00	0,3990	201,64	662,00	1,2	451,33	39,377
19872	C ₁₀ H ₁₄	p-cimeno	99-87-6	64,2701	653,15	0,4110	205,25	653,15	1,2	450,28	39,747

In an engineering analysis, the **enthalpy of vaporization** is needed for methyl chloride (CH₃Cl) at 248,93°K. Determine the enthalpy of vaporization of methyl chloride at this temperature. Substitution of the coefficients from the tabulation and temperature into the above equation yields:

$$H_{VAP} = A(1 - T/T_c)^n : \quad (H_{VAP} : \text{kJ/mol}, T: ^\circ\text{K})$$

$$H_{VAP} = 32,5337 \times (1 - 248,93/416,25)^{0,4520}$$

$$H_{VAP} = 21,549 \text{ kJ/mol}$$

Table 2. Enthalpy of Vaporization at Boiling Point - Organic Compounds

H_{VAP} at Boiling Point (H_{VAP} : kJ/mol, T_B :K)

ID	FORMULA	NOMBRE	CAS N°	T_B : K	H_{VAP} a T_B	code
20350	$C_{10}H_{16}$	β -mirceno	123-35-3	440,15	38,165	1, 2
20319	$C_{10}H_{16}$	α -felandreno	99-83-2	448,15	39,908	1, 2
20320	$C_{10}H_{16}$	β -felandreno	555-10-2	447,15	39,502	1, 2
20317	$C_{10}H_{16}$	Limoneno	138-86-3	451,15	38,282	1, 2
20318	$C_{10}H_{16}$	L-limoneno	5989-54-8	451,15	38,282	1, 2
20321	$C_{10}H_{16}$	α -pineno	80-56-8	429,29	35,744	1, 2
20322	$C_{10}H_{16}$	α -pineno, (-)	7785-26-4	428,15	33,533	1, 2
20323	$C_{10}H_{16}$	β -pineno	127-91-3	439,19	37,828	1, 2
20324	$C_{10}H_{16}$	β -pineno, (1 R)	19902-08-0	437,75	36,293	1, 2
20326	$C_{10}H_{16}$	γ -terpineno	99-85-4	456,15	40,301	1, 2
19869	$C_{10}H_{14}$	cimeno	25155-15-1	449,50	37,887	1, 2
19870	$C_{10}H_{14}$	m-cimeno	535-77-3	448,23	39,099	1, 2
19871	$C_{10}H_{14}$	o-cimeno	527-84-4	451,33	39,377	1, 2
19872	$C_{10}H_{14}$	p-cimeno	99-87-6	450,28	39,747	1, 2

FORMULA	NOMBRE	Tmin (K)	Tmax (K)	$C_1 \times 10^{-7}$	C_2	C_3	C_4	T_C (K)
$C_{10}H_{16}$	α -felandreno	220,00	649,00	6,178	0,3726	0		649,00
$C_{10}H_{16}$	β -felandreno	220,00	648,00	6,294	0,3977	0		648,00
$C_{10}H_{16}$	α -pineno	209,15	644,00	5,6472	0,3803	0		644,00
$C_{10}H_{16}$	β -pineno	211,61	643,00	5,8954	0,3956	0		643,00
$C_{10}H_{14}$	m-cimeno	209,44	657,00	6,1480	0,3948	0		657,00
$C_{10}H_{14}$	o-cimeno	201,64	662,00	6,2160	0,39872	0		662,00
$C_{10}H_{14}$	p-cimeno	205,25	653,15	6,3314	0,4029	0		653,15
$C_{10}H_{16}$	δ -limoneno	198,80	653,00	6,1938	0,39769	0		653,00
$C_{10}H_{16}$	Mirceno							
H ₂ O	Agua	273,16	647,13	5,2053	0,3199	-0,212	0,258	647,13

$$\text{Latent Heat (J/kmol)} = C_1(1 - T_r)^X,$$

$$X = C_2 + C_3 T_r, \quad T_r = T / T_c$$

FORMULA	NAME	$T_r = T/T_c$	X	$H_v \times 10^{-7}$
$C_{10}H_{16}$	α -felandreno	0,57165	0,3726	4,5046
$C_{10}H_{16}$	β -felandreno	0,57253	0,3977	4,4880
$C_{10}H_{16}$	α -pineno	0,57609	0,3803	4,0746
$C_{10}H_{16}$	β -pineno	0,576983	0,3956	4,1947
$C_{10}H_{14}$	m-cimeno	0,564690	0,3948	4,4772
$C_{10}H_{14}$	o-cimeno	0,560420	0,39872	4,4790
$C_{10}H_{14}$	p-cimeno	0,568016	0,4029	4,5147
$C_{10}H_{16}$	δ -limoneno	0,568150	0,39769	4,4354
$C_{10}H_{16}$	Mirceno			
H ₂ O	Agua	0,57330	0,3199	3,9639

$$T_r = (98+273)/649 = 0,57165$$

Table 3 :Density of Liquid - Organic Compounds

10	FORMULA	NAME	CAS No	A	B	C	n	T _{MIN}	T _{MAX}	code	T: K	density at T
20316	C ₁₀ H ₁₆	<i>δ</i> -limoneno	5989-27-5	0,26000	0,25166	660,00	0,27210	199,00	660,00	1,2	298,15	0,8390
20317	C ₁₀ H ₁₆	<i>Limoneno</i>	138-86-3	0,26000	0,24949	660,00	0,28571	178,15	660,00	1,2	298,15	0,8371
20318	C ₁₀ H ₁₆	<i>L</i> -limoneno	5989-54-8	0,26000	0,24878	660,00	0,28571	188,58	660,00	1,2	298,15	0,8391
20319	C ₁₀ H ₁₆	<i>α</i> -felandreno	99-83-2	0,27250	0,26020	649,00	0,28570	220,00	649,00	1,2	298,15	0,8430
20320	C ₁₀ H ₁₆	<i>β</i> -felandreno	555-10-2	0,27970	0,26421	648,00	0,31500	220,00	648,00	1,2	298,15	0,8370
20321	C ₁₀ H ₁₆	<i>α</i> -pineno	80-56-8	0,27030	0,25601	632,00	0,26040	209,15	632,00	1,2	298,15	0,8570
20322	C ₁₀ H ₁₆	<i>α</i> -pineno, (-)	7785-26-4	0,26963	0,25239	647,00	0,28571	209,15	647,00	1,2	298,15	0,8550
20323	C ₁₀ H ₁₆	<i>β</i> -pineno	127-91-3	0,26920	0,26436	643,00	0,20685	211,61	643,00	1,2	298,15	0,8670
20324	C ₁₀ H ₁₆	<i>β</i> -pineno, (1R)	19902-08-0	0,26963	0,25017	647,00	0,28571	223,15	647,00	1,2	298,15	0,8613
20325	C ₁₀ H ₁₆	<i>α</i> -terpineno	99-86-5	0,26920	0,26164	652,00	0,28571	214,12	652,00	1,2	298,15	0,8300
20326	C ₁₀ H ₁₆	<i>γ</i> -terpineno	99-85-4	0,26980	0,25794	661,00	0,28570	214,12	661,00	1,2	298,15	0,8450
20367	C ₁₀ H ₁₆	(±)- <i>α</i> -pineno	2437-95-8	0,26963	0,25133	647,00	0,28571	218,25	647,00	1,2	298,15	0,8580
20368	C ₁₀ H ₁₆	(+)- <i>α</i> -pineno	7785-70-8	0,26963	0,25168	647,00	0,28571	211,15	647,00	1,2	298,15	0,8570
19869	C ₁₀ H ₁₄	<i>Cimeno</i>	25155-15-1	0,27564	0,25799	664,5	0,28571	205,25	664,65	2	298,15	0,8644
19870	C ₁₀ H ₁₄	<i>m</i> -cimeno	535-77-3	0,27670	0,25907	657,00	0,29420	209,44	657,00	1,2	298,15	0,8570
19871	C ₁₀ H ₁₄	<i>o</i> -cimeno	527-84-4	0,27450	0,25293	662,00	0,28800	201,64	662,00	1,2	298,15	0,8730
19872	C ₁₀ H ₁₄	<i>p</i> -cimeno	99-87-6	0,27280	0,25742	653,15	0,28750	205,25	653,15	1,2	298,15	0,8520

$$\text{density} = A \times B^{-(1 - T/C)^n} \quad ; \quad (\text{density: g/ml, T: K})$$

In an engineering analysis, the liquid density is needed for methyl chloride (CH₃Cl) at 343,15 K. Determine the liquid density of methyl chloride at this temperature. Substitution of the coefficients from the tabulation and temperature into the above equation yields:

$$\text{density} = 0,36320 \times 0,26631^{-(1 - 343,15/416,25)^{0,28690}}$$

$$\text{density} = 0,811 \text{ g/ml}$$

Table 4: Heat capacity or Liquid Enthalpy

	$C_{p,liquid}$ (J/mol*K)	Temperaturea (K)	Referencia
<i>δ-Limoneno</i>	249,40	293,3	Kolosovskii and Udovenko, 1934
	249,40	293,4	de Kolossowsky and Udowenko, 1933
<i>β-Mirceno</i>	241,58	$C_{p,gas}$ (373,15K)	
<i>α-elandreno</i>	230,79	$C_{p,gas}$ (373,15K)	
<i>Cimeno</i>	216,72	$C_{p,gas}$ (373,15K)	
<i>α y β-Pineno</i>	467,68	$C_{p,gas}$ (373,15K)	
<i>Terpineol</i>	257,62	$C_{p,gas}$ (373,15K)	

FORMULA	NAME	CAS No	$A \times 10^{-7}$	$B \times 10^{-4}$	C
$C_{10}H_{16}$	<i>α-felandreno</i>		-4,45897	8,2800	294,500
$C_{10}H_{16}$	<i>β-felandreno</i>		-4,36707	7,8380	298,605
$C_{10}H_{16}$	<i>α-pineno</i>		-3,13029	2,3092	335,010
$C_{10}H_{16}$	<i>β-pineno</i>		-3,00475	1,5708	345,245
$C_{10}H_{14}$	<i>m-cimeno</i>		-4,27980	8,8300	250,350
$C_{10}H_{14}$	<i>o-cimeno</i>		-4,35748	9,2660	244,800
$C_{10}H_{14}$	<i>p-cimeno</i>		-5,03186	14,5600	124,350
$C_{10}H_{16}$	<i>δ-limoneno</i>		-4,43340	8,3432	288,770

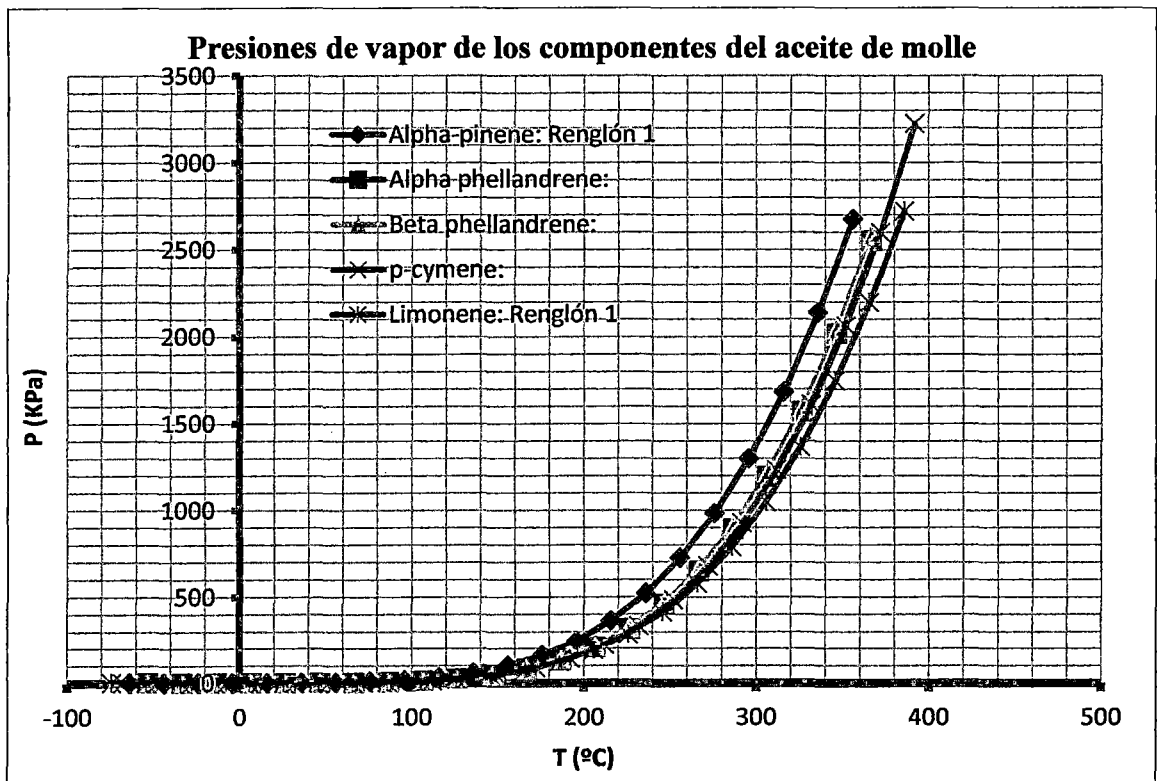
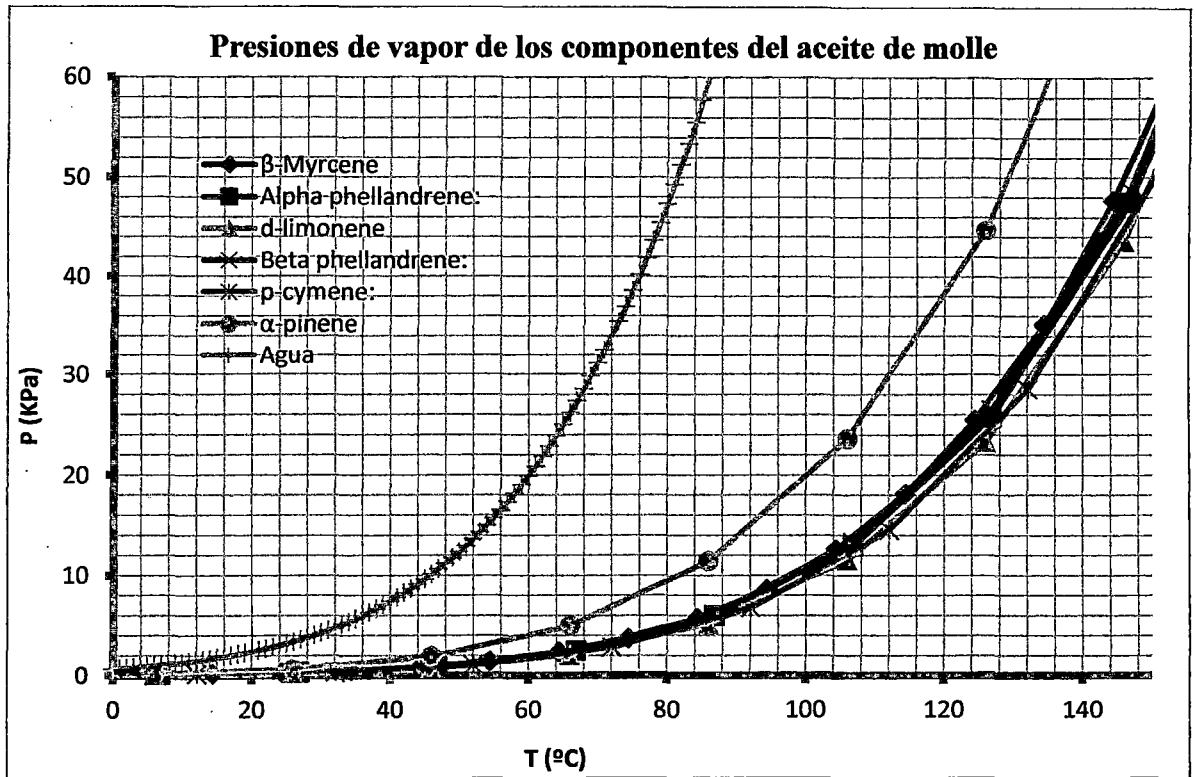
$$\Delta H \text{ (J/kmol)} = A + BT + CT^2 \quad T: K$$

Tabla N° 5 Entalpias del líquido saturado

Compuestos	C1 (A)	C2 (B)	C3 (C)	Tmin: K	Tmax: K	Tc: °
<i>α-Pineno</i>	-3,13030E+07	2,30920E+04	335,010	209,15	429,29	644,00
<i>β-Pineno</i>	-3,00475E+07	1,57000E+04	345,245	211,61	439,19	643,00
<i>α-Felandreno</i>	-4,36718E+07	78318,00	298,605	220,00	448,00	649,00
<i>β-Felandreno</i>	-4,45897E+07	82800,00	294,500	220,00	447,15	648,00
<i>d-Limoneno</i>	-4,43348E+07	83432,00	288,770	198,80	450,60	653,00
<i>p-Cimeno</i>	-5,03189E+07	145600,00	124,350	205,25	450,28	653,15
<i>m-Cimeno</i>	-4,27980E+07	88300,00	250,350	209,44	448,23	657,00
<i>o-Cimeno</i>	-4,35748E+07	92660,00	244,800	201,64	451,33	662,00
<i>Agua</i>	-3,59185E+07	27637,00	-1045,050			

$$H_{Liq \text{ Sat.}} = \sum_{i=1}^n C_i T^{i-1}$$

PRESIONES DE VAPOR DE LOS PRINCIPALES COMPONENTES DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE



ANEXO V

PSEUDOCODIGO DEL ALGORITMO SOLUCION

1. **Pvapor:** es para encontrar las presiones de vapor de los constituyentes (6); que pueden extenderse a más y redefinir los componentes;
2. **Tsatura:** es para hallar la temperatura de equilibrio líquido - vapor dado la composición y presión del sistema.

Programa Para Determinar Presiones de Vapor – Método de Bisección

P = 0,99; % presión del sistema en atm, considerado constante.

T = 96,59; % dinámicamente iterativo.

% fracciones molares de los componentes en la capa del aceite:

x1(1)= 0,0342;	% x1: 0,0293	: x1 = 0,0342	α -Pino
x2(1)= 0,3824;	% x2: 0,3273	: x2 = 0,3824	α -Felandreno
x3(1)= 0,1325;	% x3: 0,1134	: x3 = 0,1325	D-Limoneno
x4(1)= 0,1330;	% x4: 0,1138	: x4 = 0,1330	β -Felandreno
x5(1)= 0,0453;	% x5: 0,0388	: x5 = 0,0453	m-Cimeno
x6(1)= 0,2726;	% x6: 0,2333	: x6 = 0,2726	β -Mirceno
	% \sum xi = 0,8559	\sum xi = 1,0000	

% Presiones de vapor de los componentes. *Antoine:* $P_i = 10^{A_i + \frac{B_i}{C_i + T}}$

COMPONENTES PRINCIPALES DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE:

Componente	[CC%]	Peso Molecular (g/mol)	Frac. P.M.
α -Felandreno	32,73%	136,24	44,5914
β -Mirceno	23,33	136,23	31,7825
β -Felandreno	11,38	136,24	15,5040
D-Limoneno	11,34	78,78% 136,24	15,4496
m-Cimeno	3,88	136,21	5,2849
α -Pino	2,93%	85,59% 136,26	3,9924 116,6048
Elixeno	2,69	204,3511	5,4970
β -Cadineno	2,23	204,35 1	4,5570
Cariofileno	1,30	204,3511	2,6566
Germacreno D-4-ol	1,10	204,350	2,2479 131,5633
	7,09	131,5633	9,3278
Total	92,91%	131,563 (al 92,91%)	140,89 (al 100%)

PM_molle = input ('Ingrese Peso Molecular Aceite Molle (PM molle): ') = 140,89

PSEUDOCÓDIGO DEL ALGORITMO SOLUCIÓN: del Modelamiento de la Extracción del Aceite Esencial Libre de Molle (1era Etapa)

(1°) **Datos Iniciales:** Masa de molle W_m , composición inicial del aceite en la semilla $x(i)$, peso molecular del aceite $PM.ac$, flujo de vapor $\dot{m}v$, rendimiento del aceite ($v. \text{ aceite} / g. \text{ semilla}$): **Rend.aceite**, densidad del aceite $d.molle$, tiempo inicial t_i , tiempo final t_f , Δt del proceso de extracción del *aceite libre* Dt .

(2°) **Cálculos Iniciales:** $N = \text{round}((t_f - t_i) / Dt)$; % Número de etapas
 $V.aceite.o = W_m * (Rend.ac / 100)$; % Volumen inicial Total del aceite de molle en la Semilla
 $n.ac.o = (V.ac.o) * d.molle / PM.ac$; % moles iniciales Total del aceite de molle en la Semilla

(3°) Para $i = 1: 6$

$n.ac(i, 0) = x(i) * n.ac.o$; % moles del componente (i), en el tiempo inicial ($j=0$)

Fin

(4°) **Hallar:** $y(i) = x(i) * P(i) / P$ % Ley de Raoult

Para $j = 1: N$

$T_{inf} = \text{Ingrese}$ ($^{\circ}T$ Inferior del Proceso $T_{inf} = \text{'}$)

$T_{sup} = \text{Ingrese}$ ($^{\circ}T$ Superior del Proceso $T_{sup} = \text{'}$)

- 1° Se necesita hallar la **Presión de vapor** (P_v) de los componentes (i) en la fase

vapor, mediante la ecuación de **Antoine**: $P_{v(i)} = 10^{A_i + \frac{B_i}{C_i + T}}$

- 2° La ecuación de **Antoine** es función de la **Temperatura de saturación** de la Mezcla en el vapor, para lo cual se utiliza la función:

- **Función** [y T_{sat}] = $T_{satura}(x(i), T_{inf}, T_{sup}, P)$;

% Calcula: $y(i)$ y la $^{\circ}T$ de Saturación de la Mezcla; a partir de los Datos ($x(i), T_{inf}, T_{sup}, P$)

Para $k = 1: 100$ % Número de Iteraciones Máximas: 100

- $T_{sat} = (T_{inf} + T_{sup}) / 2$; % 1ª Iteración: Método numérico de **Bisección**

- **Función** $P_v = P_{vapor}(T_{sat})$ % Función que calcula la $P_v(i)$ de cada componente como si estuviera puro.

Para $i = 1: 7$

$P_v(i) = 10^{A_i + \frac{B_i}{C_i + T_{sat}}}$ % Ecuación de Antoine

Fin

- Para $i = 1: 7$

$Y_R(i, k) = P_v(i) * x(i) / P$; % Ley de Raoult

- Fin

$SY_R = \sum Y_R(i)$

- If $\text{abs}(SY_R(i) - 1) < 0.0001$ Then % Suma de las Fracciones debe ser: $SY_R(i) \approx 1$

$y = Y_R(:, k)$; break;

Elseif $(SY_R(i) - 1) > 0$

$T_{sup} = T_{sat}$;

Else

$T_{inf} = T_{sat}$;

- End

Fin

- El lazo termina encontrando la fracción [$y(i)$], y la Temperatura de Saturación: [T_{sat}]

- Para $i = 1: 7$

$Y(i, j) = y(i)$; % $Y(i, j)$ es la Matriz composición en la fase vapor en las N etapas (j) de tiempo para c /componente (i)

- Fin

(5°) Se procede a calcular la Entalpía [H(i)] de cada componente en la mezcla de vapor

▪ Para lo cual se Utiliza la [Tsat], encontrado en el tiempo j=1. T= Tsat:

▪ Función [H(i)] = HLv(T)

Para i=1:7

$$H_i(i) = (A(i) + B(i) \cdot T + C(i) \cdot T^2) + (A_v(i) \cdot (1 - T/T_c(i))^{n_v(i)});$$

Fin

▪ Hi(i): Se ha determinado la Entalpía de cada componente (i) en la mezcla de Vapor

▪ Hv(j) = 0;

▪ Para i=1:7

▪ Hv(j) = Hv(j) + y(i) * Hi(i); %Entalpía de Mezcla del vapor aceite y agua: [kJ/mol]

▪ Fin

▪ Tv = 99.8 + 273.15; % T. ebullición del agua, en °K, a P = 0.99474 atm

▪ [HQv] = HLv(Tv); % Función de Entalpía, Function: Hv = HLv(T)

▪ Función [HQv(i)] = HLv(Tv)

Para i= 1:7

$$HQ_v(i) = (A(i) + B(i) \cdot T + C(i) \cdot T^2) + (A_v(i) \cdot (1 - T/T_c(i))^{n_v(i)});$$

Fin

(6°) Cálculo de Calor Entrante (vapor de agua):

▪ HQv.agua = HQv(7); % Entalpía del vapor de agua a 99.8°C, [kJ/mol]

▪ Qv = ((mv / 60) / 18) * HQv.agua;

▪ %Qv = Flujo de Calor del Vapor Agua [Entra] = (mol/min) * (kJ/mol) = [kJ/min]

▪ F(j) = Qv / Hv(j); %Flujo molar de vapor de agua: [mol/min]

(7°) Cálculo de moles de aceite Total que Salen con el vapor de agua y los moles de aceite Total que Quedan en la matriz herbácea (semilla de molle), en el tiempo (j):

$n_{ac.out.T(j)} = ((1 - Y(7, j)) \cdot F(j) \cdot Dt$; % moles del aceite Total que salen con el vapor

$n_{ac.queda.T(j)} = n_{ac.queda.T(j-1)} - n_{ac.out.T(j)}$; %moles de aceite Total que quedan en la matriz herbácea (semilla) en el tiempo (j).

(8°) Solución de la Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (6)

% EDO: Solución por el Método de Euler

Para i=1:6

$n_{ac.out}(i, j) = Y(i, j) \cdot F(j) \cdot Dt$; % moles del componente i del aceite que sale con el vapor

if $n_{ac.out}(i, j) \leq 0.00000$

$n_{ac.out}(i, j) = 0.000$;

end

$n_{ac.queda}(i, j) = n_{ac.queda}(i, j-1) - n_{ac.out}(i, j)$; % moles de aceite del componente i que queda en la capa líquida de la Semilla.

$n(i, j) = n(i, j-1) - Y(i, j) \cdot F(j) \cdot Dt$: Ec. De Euler: $n(j+1) = n(j) + m \cdot h$

$X(i, j) = n_{ac.queda}(i, j) / (n_{ac.queda.T(j)})$; %Frac. molar del componente i que queda en la capa líquida de la semilla.

$x(i) = X(i, j)$;

Fin

$t(j) = t(j-1) + Dt$; % Incremento del Tiempo (cada minuto).

(9°) Cálculo del Volumen Acumulado de Aceite Extraído por Arrastre con Vapor

$M(j) = n_{ac.out.T(j)} \cdot PM_{aceite}$; % Masa de aceite de molle que sale con el vapor

$V(j) = V(j-1) + M(j) \cdot d_{aceite}$; % Volumen Acumulado del aceite de molle [out]; para cada Etapa de tiempo(j). Se regresa al punto (4°) hasta que N= tf (j=10 min).

Fin


```

for j = 2:N+1
    Tinf=85;           % T Inferior estimada del Proceso en °C
    Tsup=105;         % T Superior estimada del Proceso en °C

    [y Tsat]=Tsat(x, Tinf, Tsup, P); % P = 756/760 = 0.99474 atm.
    Tx(j)=Tsat;

    for i=1:7
        Y(i, j)= y(i); % y(i) es la fracción en la fase vapor en un tiempo j, y Y(i, j) es la Matriz
        % composición en la Fase vapor en la etapa (j) de tiempo para c/componente (i).
    end
    T=Tsat+273.15; %°T en grados °K
    Hi = HLv3(T); %Entalpías: Componentes de la mezcla en el vapor
    Hv(j)=0;
    for i=1:7
        Hv(j)= Hv(j) + y(i).*Hi(i); %Entalpía del vapor, kJ/mol
    end
    TQv = 99.8 + 273.15; % °T.ebullición del agua, en °K, a P = 0.99474 atm
    HQv = HLv3(TQv); % Función de Entalpía: function Hv = HLv3(T)

    HQv_agua = HQv(7); % Entalpía del vapor de agua a 99.8°C: [kJ/mol]
    Qv = ((mv/60)/18)*HQv_agua; %Calor entrante al sistema (mol/min)*(kJ/mol)= [kJ/min]
    F(j)= Qv./ Hv(j); %Flujo molar de vapor de agua: [mol/min].
    nF(j)=F(j)*Dt; % moles del vapor

    n_ac_outT(j) = (1-Y(7, j)).*F(j)*Dt; % moles del aceite Total que salen en el vapor en el
    tiempo j.
    n_ac_quedaT(j) = [n_ac_quedaT(j-1)] - [n_ac_outT(j)]; %moles de aceite Total Liquido que
    queda en la Semilla de molle en el tiempo j.

% EDO: Solución por el Método de EULER: % CORREGIDO
for i=1:6
    n_ac_out(i, j) = Y(i, j).*F(j)*Dt; % moles del componente i del aceite que sale [out] con
    el vapor de agua.
    if n_ac_out(i, j)<= 0.000001
        n_ac_out(i, j) = 0.000;
        n_ac_queda(i, j-1)= 0.0000;
    end
    n_ac_queda(i, j) = [n_ac_queda(i, j-1)] - [(n_ac_out(i, j))]; % moles de aceite del
    componente i que queda en la capa líquida de la Semilla.
    X(i, j)= n_ac_queda(i, j)./(n_ac_quedaT(j)); %Matriz de la Fracción molar del
    componente i, en el tiempo J en la capa líquida de la Semilla.
    x(i)=X(i, j);
end
t(j)= t(j-1)+ Dt;
M(j)= n_ac_outT(j)*PM_aceite;
V(j)= V(j-1)+ M(j)*d_aceite;
end

```

ANEXO VII

FUNCIONES DEL PROGRAMA PRINCIPAL

function [y Tsat] = Tsatura (Xac, Tinf, Tsup, P)

% Xaceite: vector de composición del aceite esencial en la capa líquida.

% Tinf y Tsup: intervalo de temperaturas donde se encontrará la Tsat.

% P: es la presión del sistema en equilibrio.

% $Y_i = x_i P_i / P$: Raoult

y = zeros(7, 1); Y_R = zeros(7, 100);

Pv = zeros(7,1);

for i=1:100

Tsat = (Tinf + Tsup)/2;

Pv = Pvapor (Tsat);

Y_R(1,i) = Pv(1)*Xac(1)/ P;

Y_R (2, i) = Pv(2)*Xac(2)/ P;

Y_R (3, i) = Pv(3)*Xac(3)/ P;

Y_R (4, i) = Pv(4)*Xac(4)/ P;

Y_R (5, i) = Pv(5)*Xac(5)/ P;

Y_R (6, i) = Pv(6)*Xac(6)/ P;

Y_R (7, i) = Pv(7)/ P;

% Llama a: function [Pv] = Pvapor (Tsat)

% Pv(i), es un vector de Presión

% fracción molar [1] en la fase vapor aceite.

% fracción molar [2] en la fase vapor aceite.

% fracción molar [3]

% fracción molar [4]

% fracción molar [5]

% fracción molar [6]

% fracción molar del agua en la fase vapor.

SY_R(i) = Y_R(1, i) + Y_R(2,i) + Y_R(3,i) + Y_R(4,i) + Y_R(5,i) + Y_R(6,i) + Y_R(7,i);

y= Y_R(:, i);

if abs(SY_R(i) -1) < 0.0001 % Suma de la Fracciones debe ser: SY_R(i) = 1

break;

elseif (SY_R(i) -1) > 0

Tsup = Tsat;

else

Tinf = Tsat;

end

end

function Pv = Pvapor(T)

% Parámetros de Antoine de cada componente: A(i), B(i), C(i)

% $P_i = 10^{A_i + \frac{B_i}{C_i + T}}$

Pv = zeros(7,1); A = zeros(5,1);

B = zeros(5,1); C = zeros(5,1);

% 1: alpha pinene

A(1) = 7.06153;

B(1) = 1621.22;

C(1) = 231.645;

% 2: alpha phellandrene

A(2) = 7.16911;

B(2) = 1695.59;

C(2) = 220.401;

% 3: Limonene

A(3) = 7.06744;

B(3) = 1691.15;

C(3) = 227.441;

% 4: beta phellandrene

A(4) = 7.14903;

B(4) = 1675.74;

C(4) = 218.609;

% 5: P-cymene

A(5) = 7.13218;

B(5) = 1671.47;

C(5) = 216.013;

for i = 1:5

Pv(i) = (10^(A(i)-(B(i)/(C(i)+T)))/760; % es un vector de P, en atm

end

% 6: Myrcene

A6 = 4.56112;

B6 = 1849.102;

C6 = -38.899;

TK = T + 273.15;

P6 = 10^(A6-(B6/(C6+TK))); % Bar

Pv(6) = P6/1.01325; % en atm

% w: agua

Aw = 7.96687;

Bw = 1668.21;

Cw = 228;

Pv(7) = (10^(Aw - (Bw/ (Cw+T)))) / 760; % en atm (Antoine)

function Hi = HLv3(T)

```
%  $H = \sum_{i=1}^n C_i T^{i-1}$  : Tabla N°10.           %  $H_{VAP} = Av(1 - T/T_c)^{nv}$  : Tabla N°7.  
% Parámetros de los componentes  
Hi=zeros(7,1); A=zeros(7,1); B=zeros(7,1); C=zeros(7,1);  
Av=zeros(7,1); Tc=zeros(7,1); nv=zeros(7,1);  
% 1: alpha pinene  
A(1) = -3.13030E+07;  
B(1) = 2.30920E+04;  
C(1) = 335.010;  
Av(1) = 55.44;  
Tc(1) = 632;  
nv(1) = 0.386;  
% 2: alpha phellandrene  
A(2) = -4.36718E+07;  
B(2) = 78318;  
C(2) = 298.605;  
Av(2) = 61.809;  
Tc(2) = 649;  
nv(2) = 0.373;  
% 3: Limonene  
A(3) = -4.43348E+07;  
B(3) = 83432;  
C(3) = 288.770;  
Av(3) = 59.2765;  
Tc(3) = 660;  
nv(3) = 0.380;  
% 4: beta phellandrene  
A(4) = -4.45897E+07;  
B(4) = 82800;  
C(4) = 294.500;  
Av(4) = 62.9621;  
Tc(4) = 648;  
nv(4) = 0.3980;  
% 5: P-cymene  
A(5) = -5.03189E+07;  
B(5) = 145600;  
C(5) = 124.350;  
Av(5) = 64.2701;  
Tc(5) = 653.15;  
nv(5) = 0.411;  
% 6: Myrcene  
A(6) = -3.13030E+07;  
B(6) = 2.30920E+04;  
C(6) = 335.010;  
Av(6) = 64.44;  
Tc(6) = 632;  
nv(6) = 0.386;
```



```

for i = 1:6
    Hi(i) = (A(i)+B(i)*T+C(i)*T^2)/1000000+(Av(i)*(1-T/Tc(i))^nv(i)); % [kJ/mol]
end

```

```

% W: agua: J/Kmol

```

```

A(7) = -3.59185E+07;

```

```

B(7) = 276370;

```

```

C(7) = -1045.05;

```

```

D(7) = 2.70833;

```

```

E(7) = -0.003529;

```

```

F(7) = 1.87402E-06;

```

```

Av(7)= 5.2053E07;

```

```

Bv(7) = 0.3199;

```

```

Cv(7) = -0.212;

```

```

Dv(7) = 0.25795;

```

```

Tc(7)= 647.13;

```

```

Trw = T/Tc(7);

```

```

Hi(7) = ((A(7)+ B(7)*T+ C(7)*T^2+D(7)*T^3+E(7)*T^4+F(7)*T^5) /1000000) +(Av(7)*(1-
Trw)^(Bv(7) + Cv(7)*Trw + Dv(7)*Trw^2))/1000000; % [kJ/mol]

```

ANEXO VIII

RESULTADOS DEL PROGRAMA PRINCIPAL (Que resuelve el Modelo)

>> MolleCanta3C

[P. Modelo N°4b]

Ingreso Flujo de Vapor Agua: [mv = g Vapor/h]= 3354

Ingreso Masa de Molle: Wm [g]= 4000

Ingreso [Rendimiento] del Aceite Libre de Molle = 5.5

Ingreso tiempo Inicial del Proceso: ti[**min**] = 0

Ingreso tiempo Final del Proceso: tf[**min**] = 10

Ingreso Incremento de tiempo: Dt[**min**] = 1

Ingreso la Temp. Inicial Inferior [Tinf: °C] = 80

Ingreso la Temp. Inicial Superior [TSup: °C] = 100

>> X =

0	0.0258	0.0170	0.0076	-0.0028	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.3884	0.3957	0.4052	0.4237	0.3991	0.3850	0.3796	0.3760	0.3733	0.3711
0	0.1323	0.1316	0.1298	0.1235	0.1424	0.1443	0.1462	0.1477	0.1488	0.1497
0	0.1341	0.1352	0.1362	0.1368	0.1416	0.1396	0.1393	0.1392	0.1391	0.1390
0	0.0469	0.0491	0.0524	0.0605	0.0422	0.0383	0.0366	0.0354	0.0345	0.0338
0	0.2723	0.2711	0.2677	0.2555	0.2931	0.2965	0.3003	0.3031	0.3053	0.3070

>> Y =

0	0.0061	0.0046	0.0030	0.0014	-0.0005	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.0341	0.0346	0.0353	0.0362	0.0379	0.0356	0.0344	0.0339	0.0336	0.0334
0	0.0126	0.0126	0.0125	0.0124	0.0118	0.0136	0.0137	0.0139	0.0141	0.0142
0	0.0122	0.0123	0.0124	0.0125	0.0126	0.0130	0.0128	0.0128	0.0128	0.0128
0	0.0037	0.0039	0.0040	0.0043	0.0050	0.0035	0.0032	0.0030	0.0029	0.0028
0	0.0259	0.0259	0.0258	0.0255	0.0243	0.0278	0.0282	0.0286	0.0288	0.0290
0	0.9055	0.9061	0.9069	0.9078	0.9089	0.9065	0.9076	0.9078	0.9078	0.9078

>> Tx =

97.0947 97.0947 97.1143 97.1387 97.1631 97.1973 97.1240 97.1582 97.1631 97.1631
97.1631

>> V =

0 33.1855 66.1493 98.8300 131.2329 163.2453 196.0800 228.5349 260.9332 293.3326
325.7326

>> MolleCanta3C

[P. Modelo N°5b]

Ingrese Flujo de Vapor Agua: [mv = g Vapor/h]= 3000

Ingrese Masa de Molle: **Wm [g]= 4000**

Ingrese [Rendimiento] del Aceite Libre de Molle = 5.5

Ingrese tiempo Inicial del Proceso: **ti[*min*] = 0**

Ingrese tiempo Final del Proceso: **tf[*min*] = 10**

Ingrese Incremento de tiempo: **Dt[*min*] = 1**

Ingrese la Temp. Inicial Inferior [**Tinf: °C**] = 80

Ingrese la Temp. Inicial Superior [**TSup: °C**] = 100

>> **X =**

0	0.0269	0.0193	0.0113	0.0028	-0.0083	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.3876	0.3938	0.4017	0.4137	0.4617	0.4544	0.4438	0.4391	0.4359	0.4336
0	0.1323	0.1318	0.1307	0.1278	0.1078	0.1154	0.1169	0.1184	0.1195	0.1205
0	0.1339	0.1349	0.1359	0.1369	0.1363	0.1393	0.1383	0.1383	0.1383	0.1384
0	0.0467	0.0485	0.0511	0.0557	0.0798	0.0706	0.0660	0.0635	0.0618	0.0605
0	0.2723	0.2715	0.2694	0.2639	0.2246	0.2398	0.2427	0.2456	0.2479	0.2499

>> **Y =**

0	0.0061	0.0048	0.0035	0.0020	0.0005	-0.0015	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.0341	0.0346	0.0352	0.0359	0.0370	0.0413	0.0406	0.0397	0.0393	0.0390
0	0.0126	0.0126	0.0125	0.0124	0.0122	0.0103	0.0110	0.0111	0.0113	0.0114
0	0.0122	0.0123	0.0124	0.0125	0.0126	0.0126	0.0128	0.0127	0.0127	0.0127
0	0.0037	0.0038	0.0040	0.0042	0.0046	0.0066	0.0058	0.0054	0.0052	0.0051
0	0.0259	0.0259	0.0258	0.0256	0.0251	0.0214	0.0228	0.0231	0.0234	0.0236
0	0.9055	0.9060	0.9066	0.9073	0.9081	0.9094	0.9069	0.9079	0.9081	0.9082

>> **Tx =**

97.0947 97.0947 97.1094 97.1289 97.1484 97.1729 97.2119 97.1387 97.1680 97.1729
97.1777

>> **V =**

0 29.6829 59.2201 88.5554 117.6904 146.5708 175.0499 204.2725 233.2001 262.0803
290.9085

>> MolleCanta3C

[P. Modelo N°6b]

Ingreso Flujo de Vapor Agua: [mv = g Vapor/h]= 2000

Ingreso Masa de Molle: **Wm [g]= 3000**

Ingreso [Rendimiento] del Aceite Libre de Molle = 5.5

Ingreso tiempo Inicial del Proceso: **ti[*min*] = 0**

Ingreso tiempo Final del Proceso: **tf[*min*] = 10**

Ingreso Incremento de tiempo: **Dt[*min*] = 1**

Ingreso la Temp. Inicial Inferior [**Tinf: °C] = 80**

Ingreso la Temp. Inicial Superior [**TSup: °C] = 100**

>> **X =**

0	0.0279	0.0214	0.0146	0.0074	-0.0004	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.3869	0.3921	0.3984	0.4066	0.4208	0.3316	0.3150	0.3093	0.3055	0.3026
0	0.1323	0.1319	0.1311	0.1294	0.1246	0.1770	0.1782	0.1803	0.1818	0.1829
0	0.1338	0.1346	0.1355	0.1362	0.1367	0.1459	0.1422	0.1415	0.1410	0.1407
0	0.0465	0.0480	0.0500	0.0530	0.0593	0.0031	0.0028	0.0026	0.0025	0.0025
0	0.2724	0.2717	0.2702	0.2669	0.2576	0.3613	0.3632	0.3672	0.3699	0.3720

>> **Y =**

0	0.0061	0.0050	0.0038	0.0026	0.0013	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.0341	0.0345	0.0350	0.0356	0.0363	0.0376	0.0296	0.0281	0.0276	0.0273
0	0.0126	0.0126	0.0126	0.0125	0.0123	0.0119	0.0168	0.0170	0.0172	0.0173
0	0.0122	0.0123	0.0124	0.0125	0.0125	0.0126	0.0134	0.0131	0.0130	0.0130
0	0.0037	0.0038	0.0040	0.0041	0.0044	0.0049	0.0003	0.0002	0.0002	0.0002
0	0.0259	0.0259	0.0258	0.0257	0.0254	0.0245	0.0343	0.0345	0.0349	0.0352
0	0.9055	0.9060	0.9065	0.9071	0.9078	0.9086	0.9057	0.9071	0.9071	0.9071

>> **Tx =**

97.0947 97.0947 97.1094 97.1240 97.1436 97.1631 97.1875 97.0996 97.1436 97.1436
97.1436

>> **V =**

0 19.7886 39.4781 59.0689 78.5238 97.8452 117.0002 136.7421 156.1916 175.6420
195.0925

>> MolleCanta3C

[P. Modelo N°7b]

Ingrese Flujo de Vapor Agua: [mv = g Vapor/h]= 3000

Ingrese Masa de Molle: **Wm [g]= 3000**

Ingrese [Rendimiento] del Aceite Libre de Molle = 5.5

Ingrese tiempo Inicial del Proceso: **ti[*min*] = 0**

Ingrese tiempo Final del Proceso: **tf[*min*] = 10**

Ingrese Incremento de tiempo: **Dt[*min*] = 1**

Ingrese la Temp. Inicial Inferior [**Tinf: °C**] = 80

Ingrese la Temp. Inicial Superior [**TSup: °C**] = 100

>> X =

0	0.0236	0.0124	0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.3899	0.3997	0.4157	0.2741	0.2600	0.2522	0.2480	0.2450	0.2427	0.2408	
0	0.1322	0.1312	0.1273	0.2027	0.2041	0.2041	0.2049	0.2056	0.2062	0.2068	
0	0.1344	0.1358	0.1370	0.1467	0.1430	0.1406	0.1395	0.1387	0.1382	0.1378	
0	0.0473	0.0503	0.0564	0.0240	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0	0.2722	0.2703	0.2629	0.4117	0.4139	0.4135	0.4148	0.4160	0.4171	0.4181	

>> Y =

0	0.0061	0.0042	0.0022	-0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0	0.0341	0.0348	0.0357	0.0372	0.0244	0.0232	0.0225	0.0221	0.0219	0.0217	
0	0.0126	0.0126	0.0125	0.0121	0.0193	0.0194	0.0194	0.0195	0.0196	0.0196	
0	0.0122	0.0123	0.0125	0.0126	0.0135	0.0131	0.0129	0.0128	0.0127	0.0127	
0	0.0037	0.0039	0.0042	0.0047	-0.0020	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0	0.0259	0.0259	0.0257	0.0250	0.0391	0.0392	0.0393	0.0394	0.0395	0.0396	
0	0.9055	0.9063	0.9073	0.9084	0.9057	0.9050	0.9060	0.9061	0.9063	0.9065	

>> Tx =

97.0947 97.0947 97.1191 97.1484 97.1826 97.0996 97.0801 97.1094 97.1143 97.1191
97.1240

>> V =

0 29.6829 59.1181 88.2515 117.0341 146.6517 176.4691 205.9911 235.4692 264.8983
294.2755

>> MolleCanta3C

[P. Modelo N°8] OK!

Ingreso Flujo de Vapor Agua: [mv = g Vapor/h]= 1960

Ingreso Masa de Molle: Wm [g]= 3000

Ingreso [Rendimiento] del Aceite Libre de Molle = 5.4

Ingreso tiempo Inicial del Proceso: ti[**min**] = 0

Ingreso tiempo Final del Proceso: tf[**min**] = 10

Ingreso Incremento de tiempo: Dt[**min**] = 1

Ingreso la Temp. Inicial Inferior [Tinf: °C] = 80

Ingreso la Temp. Inicial Superior [TSup: °C] = 100

>> X =

0	0.0279	0.0214	0.0146	0.0075	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.3869	0.3921	0.3983	0.4065	0.4205	0.3205	0.3032	0.2969	0.2930	0.2901
0	0.1323	0.1319	0.1312	0.1294	0.1247	0.1835	0.1842	0.1859	0.1872	0.1883
0	0.1338	0.1346	0.1355	0.1362	0.1367	0.1470	0.1428	0.1417	0.1411	0.1407
0	0.0465	0.0480	0.0500	0.0530	0.0592	-0.0037	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.2724	0.2717	0.2702	0.2669	0.2577	0.3742	0.3749	0.3780	0.3806	0.3826

>> Y =

0	0.0061	0.0050	0.0038	0.0026	0.0013	-0.0001	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.0341	0.0345	0.0350	0.0356	0.0363	0.0376	0.0286	0.0271	0.0265	0.0262
0	0.0126	0.0126	0.0126	0.0125	0.0123	0.0119	0.0174	0.0175	0.0177	0.0178
0	0.0122	0.0123	0.0124	0.0125	0.0125	0.0126	0.0135	0.0131	0.0130	0.0130
0	0.0037	0.0038	0.0040	0.0041	0.0044	0.0049	-0.0003	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.0259	0.0259	0.0258	0.0257	0.0254	0.0245	0.0355	0.0356	0.0359	0.0362
0	0.9055	0.9060	0.9065	0.9071	0.9078	0.9086	0.9053	0.9066	0.9069	0.9069

>> Tx =

97.0947 97.0947 97.1094 97.1240 97.1436 97.1631 97.1875 97.0898 97.1289 97.1387
97.1387

>> V =

0 19.3928 38.6885 57.8874 76.9532 95.8881 114.6601 134.0698 153.2288 172.3210
191.4140

>> MolleCanta3C

[P. Modelo N°13]

Ingreso Flujo de Vapor Agua: [mv = g Vapor/h]= 3000

Ingreso Masa de Molle: Wm [g]= 3000

Ingreso [Rendimiento] del Aceite Libre de Molle = 5.5

Ingreso tiempo Inicial del Proceso: ti[**min**] = 0

Ingreso tiempo Final del Proceso: tf[**min**] = 5

Ingreso Incremento de tiempo: Dt[**min**] = 0.5

Ingreso la Temp. Inicial Inferior [Tinf: °C] = 80

Ingreso la Temp. Inicial Superior [TSup: °C] = 100

>> X =

0	0.0297	0.0251	0.0204	0.0155	0.0105	0.0052	-0.0005	0.0000	0.0000	0.0000
0	0.3856	0.3892	0.3932	0.3977	0.4034	0.4110	0.4251	0.3587	0.3448	0.3392
0	0.1324	0.1322	0.1318	0.1311	0.1301	0.1280	0.1228	0.1608	0.1636	0.1658
0	0.1336	0.1342	0.1348	0.1353	0.1359	0.1364	0.1366	0.1433	0.1413	0.1409
0	0.0462	0.0472	0.0484	0.0499	0.0519	0.0549	0.0616	0.0186	0.0167	0.0158
0	0.2724	0.2721	0.2714	0.2702	0.2682	0.2642	0.2540	0.3294	0.3344	0.3387

>> Y =

0	0.0061	0.0053	0.0045	0.0036	0.0028	0.0019	0.0009	-0.0001	0.0000	0.0000
0	0.0341	0.0344	0.0347	0.0351	0.0355	0.0360	0.0367	0.0380	0.0320	0.0308
0	0.0126	0.0126	0.0126	0.0125	0.0125	0.0124	0.0122	0.0117	0.0153	0.0156
0	0.0122	0.0123	0.0123	0.0124	0.0124	0.0125	0.0126	0.0126	0.0132	0.0130
0	0.0037	0.0038	0.0039	0.0040	0.0041	0.0043	0.0045	0.0051	0.0015	0.0014
0	0.0259	0.0259	0.0258	0.0258	0.0257	0.0255	0.0251	0.0242	0.0313	0.0318
0	0.9055	0.9058	0.9061	0.9066	0.9069	0.9074	0.9079	0.9086	0.9066	0.9074

>> Tx =

97.0947 97.0947 97.1045 97.1143 97.1289 97.1387 97.1533 97.1680 97.1875 97.1289
97.1533

>> V =

0 14.8415 29.6338 44.3771 59.0433 73.6613 88.2028 102.6691 117.0347 131.6956
146.2346

ANEXO IX

TABLAS Y GRAFICAS DE COMPARACION DE RESULTADOS ENTRE EL PROCESO EXPERIMENTAL Y EL MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE LA EXTRACCION CON VAPOR DEL ACEITE LIBRE DEL MOLLE.

Tabla N°2 (Prueba N°2): Aceite Esencial de Molle			Modelamiento N°12	
Peso Neto Semilla = 2,0 kg			2,0 kg	
Flujo Neto Destila= 1,93 kg/h			1,93 kg/h	
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen (ml) *	Volumen Modelo (ml)	T(°C) Modelo
0,0	94,00	0,00	0,00	96,94
0,5	94,37	4,31	9,5480	96,94
1,0	95,00	12,00	19.0642	96,97
1,5	95,63	21,14	28.5488	97,01
2,0	96,00	29,78	37.9836	97,04
2,5	96,00	36,52	47.3874	97,08
3,0	96,00	41,97	56.7420	97,13
3,5	96,47	47,14	66.0485	97,19
4,0	97,00	52,36	75.2907	97,03
4,5	97,13	57,71	84.2323	97,08
5,0	97,20	62,75	93.5670	97,08
5,5	97,20	66,95	102.840	97,07
6,0	97,50	69,75	112.098	97,05

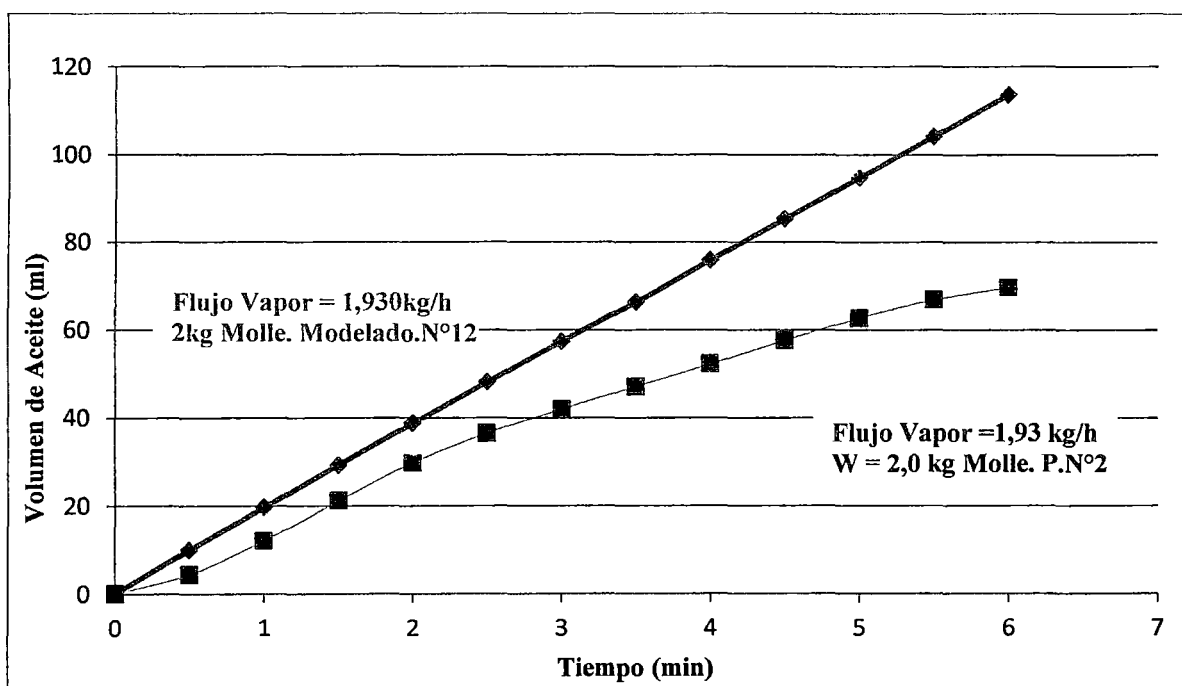


Gráfico.EM1: EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.

(Modelo: 1ra Etapa) Masa de Molle: 2kg. Flujo vapor 1,93kg/h.

* Los valores reales del Volumen de aceite se dan cada minuto, para la prueba N°2 el punto de quiebre es a los 6 minutos, ha sido necesario interpolar valores de volumen vs tiempo cada 0,5 minutos mediante Matlab: $V^* = \text{interp1}(t, V, [tx], 'spline')$

Tabla N°6 (Prueba N°6): Aceite Esencial de Molle			Modelamiento N°6	
Peso Neto Semilla = 3,0 kg			3,0 kg	
Flujo Neto Destila= 1,96 kg/h			1,96 kg/h	
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen Aceite (ml)	Volumen Modelo (ml)	T(°C) Modelo
0.00	94.0	0.00	0,00	96,00
1,0	94,0	11,195	19,3928	96,600
2,0	95,0	32,362	38,6883	96,953
3,0	95,1	53,350	57,8867	97,031
4,0	95,2	74,335	76,9519	97,070
5,0	95,8	89,114	95,8863	97,109
6,0	96,2	122,697	114,6583	97,188
7,0	96,6	129,892	129,4602	97,070
8,0	97,0	137,087	156,7615	97,188
9,0	97,4	149,684	178,2391	97,266
10	97,8	162,281	198,6232	97,266

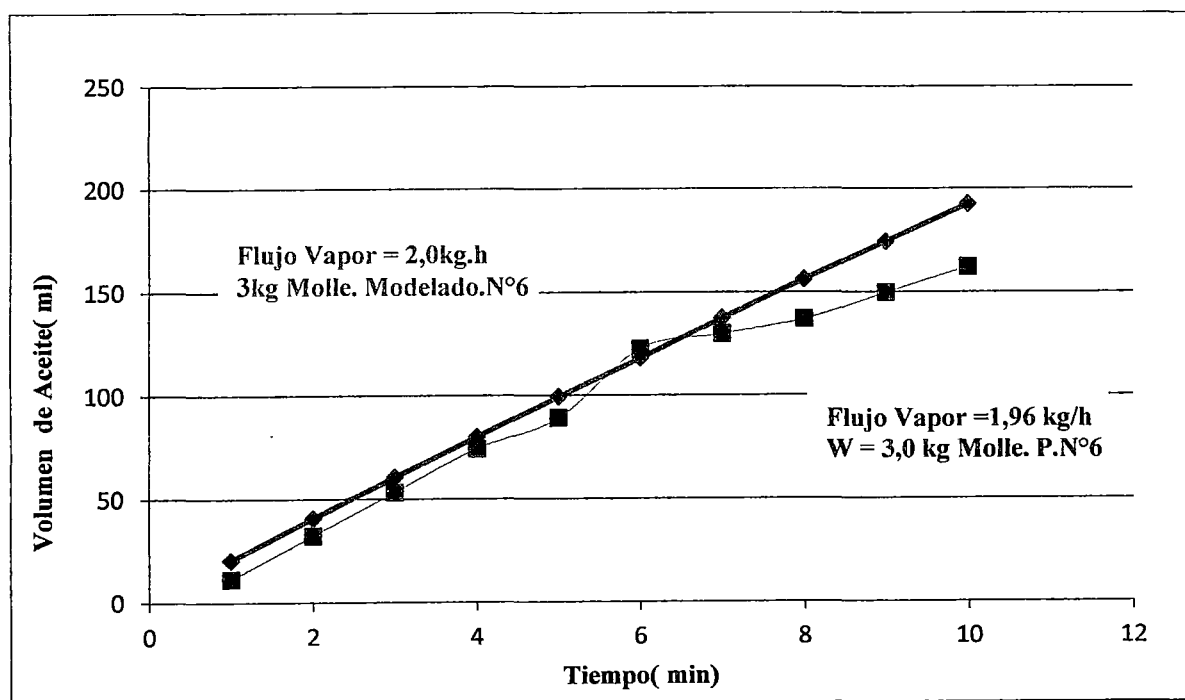


Gráfico.EM2. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.
(Modelo: 1ra Etapa). Masa de Molle: 3kg. Flujo vapor 2,0kg/h.

Tabla N°7 (Prueba N°7): Aceite Esencial de Molle			Modelamiento N°4	
Peso Neto Semilla = 4,0 kg			4,0 kg	
Flujo NetoDestila= 3354 g/h			3354 g/h	
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen Aceite (ml)	Volumen Modelo(ml)	T(°C) Modelo
0		0,00	0,00	96,7000
1	94,0	35,95	33,1855	96,9531
2	95,0	81,50	66,1493	96,9922
3	95,5	125,87	98,8300	97,0313
4	96,2	155,25	131,2329	97,1094
5	97,0	187,84	163,2453	97,1875
6	97,5	200,23	196,0800	97,2656
7	98,0	209,42	228,5349	97,2656
8	98,0	216,81	260,9332	97,3828
9	98,0	218,62	293,3326	97,4219
10	98,0	222,62	325,7326	97,5000

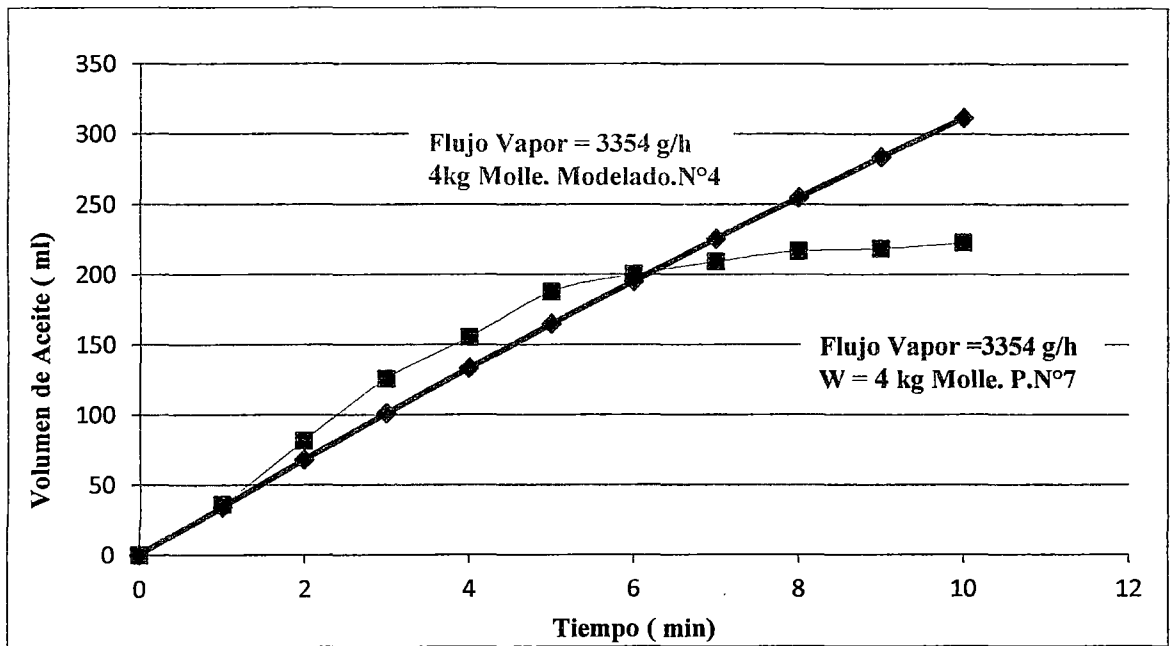


Gráfico EM3. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.

(Modelo: 1ra Etapa) Masa de Molle: 4kg. Flujo vapor 3,354kg/h.

En el Gráfico EM3, se visualiza que la Prueba N°7 tiene un claro cambio de pendiente, lo que indica que en este punto se agotó el aceite libre y comienza la Extracción del aceite intracelular; el modelo reproduce la extracción del aceite libre y su grafica es semejante al proceso experimental hasta los primeros 6 minutos.

Tabla N°6 (Prueba N°6): Aceite Esencial de Molle			Modelamiento N°8	
Peso Neto Semilla = 3,0 kg			3,0 kg	
Flujo Neto Destila= 1,96 kg/h			1,96 kg/h	
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen Aceite (ml)	Volumen Modelo (ml)	T(°C) Modelo
0,00		0,00	0,000	96,939
1,0	94,0	11,195	19,3928	96,939
2,0	95,0	32,362	38,6885	96,973
3,0	95,1	53,350	57,8874	97,012
4,0	95,2	74,335	76,9532	97,056
5,0	95,8	89,114	95,8881	97,100
6,0	96,2	122,697	114,6601	97,153
7,0	96,6	129,892	134,0698	97,188
8,0	97,0	137,087	153,2288	97,105
9,0	97,4	149,684	172,3210	97,095
10	97,8	162,281	191,4140	97,085

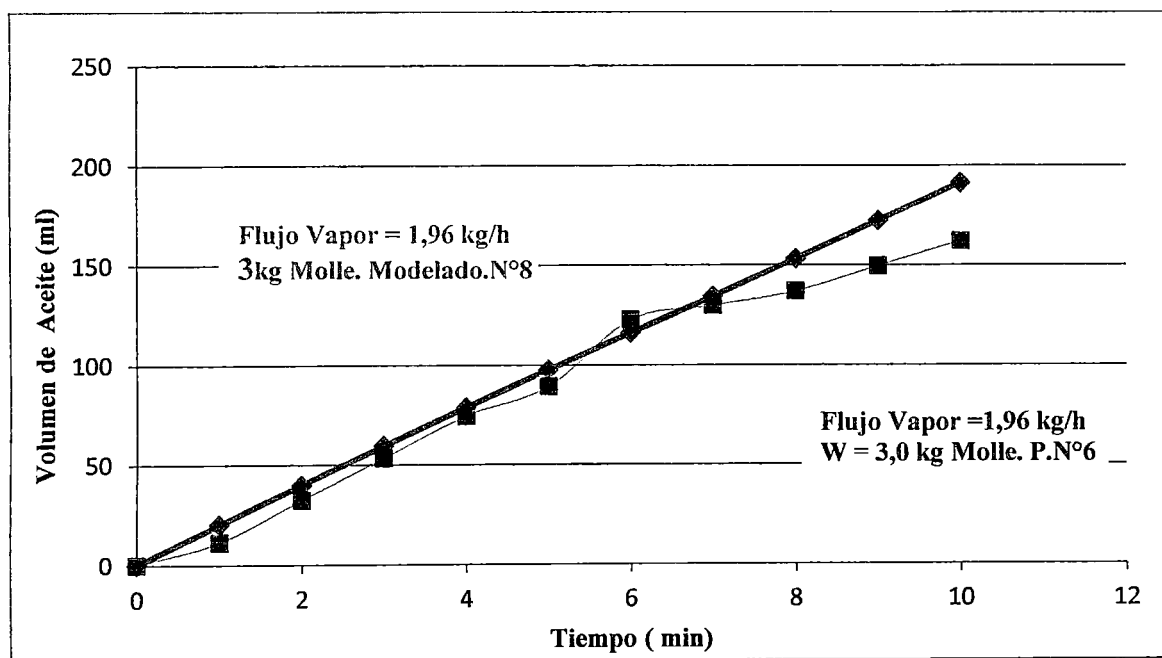


Gráfico EM4. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.

(Modelo: 1ra Etapa). Masa de Molle: 3kg. Flujo vapor 1,96kg/h.

En el Gráfico EM4 se observa que hay una gran similitud en las rectas que representan el modelo y la parte experimental hasta los primeros 7 minutos, a partir de este tiempo hay una ligera separación de la curva de la parte experimental aunque la tendencia sigue siendo lineal.

Tabla N°5 (Prueba N°5): Aceite Esencial de Molle			Modelamiento N°7	
Peso Neto Semilla = 3,0 kg			3,0 kg	
Flujo Neto Destila= 3,04 kg/h			3,0 kg/h	
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen Aceite (ml)	Volumen Modelo(ml)	T(°C) Modelo
0		0,00	0,000	96,939
1	96,0	23,42	29,6829	96,939
2	96,0	45,64	59,1181	97,002
3	96,5	66,65	88,2515	97,070
4	97,0	86,25	117,0341	97,158
5	97,0	101,07	146,6517	97,183
6	97,25	110,5	176,4691	97,178
7	97,5	118,28	205,9911	97,188
8	97,5	126,49	235,4692	97,207
9	97,75	132,89	264,8983	97,222
10	98,0	139,29	294,2755	97,241

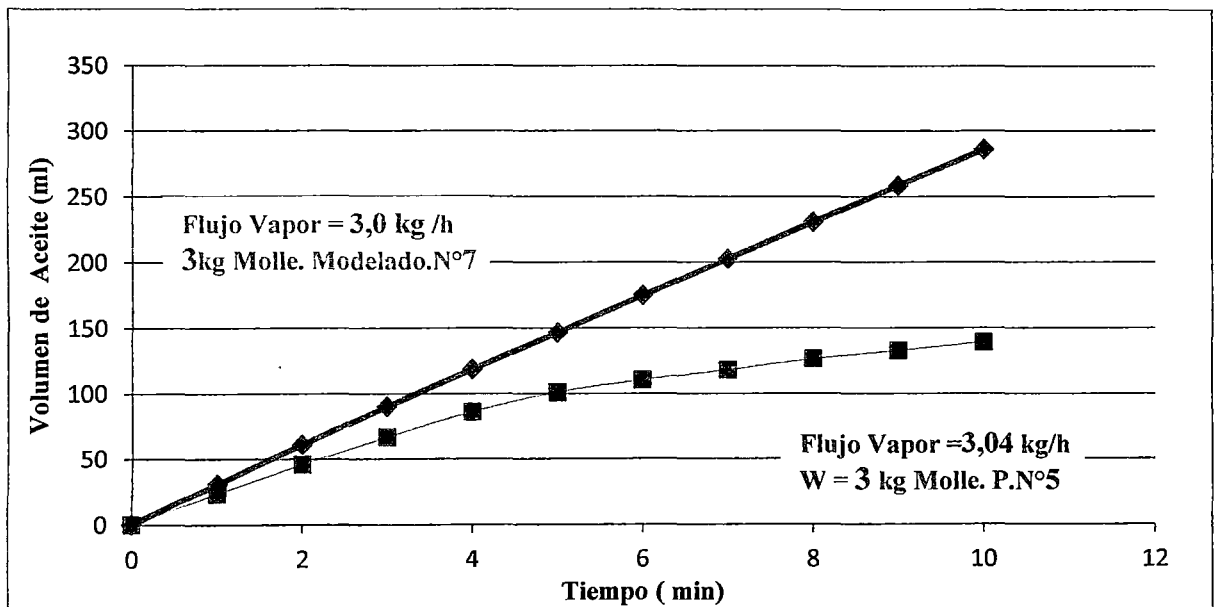


Gráfico EM5. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.

(Modelo: 1ra Etapa). Masa de Molle: 3kg. Flujo vapor 3,0 kg/h.

La prueba de Modelado N°7 (gráfico EM5) se desvía a partir del minuto 4, e incluso cambia de pendiente señal de que hay una distorsión del modelo con el proceso experimental, esto se explica debido a que para una cantidad limitada de molle y un flujo de vapor relativamente alto, en el minuto 5 empieza agotarse el aceite esencial de molle y el modelo falla.

Tabla N°6 (Prueba N°6): Aceite Esencial de Molle			Modelamiento N°9	
Peso Neto Semilla = 3,0 kg			3,0 kg	
Flujo Neto Destila= 1,96 kg/h			2,0 kg/h	
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen Aceite (ml)	Volumen Modelo(ml)	T(°C) Modelo
0		0,00	0,00	96,94
1,0	94,0	11,19	19,7886	96,94
2,0	95,0	32,36	39,4781	96,98
3,0	95,1	53,35	59,0689	97,02
4,0	95,2	74,34	78,5238	97,06
5,0	95,8	89,11	97,8452	97,11
6,0	96,2	122,70	117,0002	97,17
7,0	96,6	129,89	136,7421	97,02
8,0	97,0	137,09	156,1916	97,08
9,0	97,4	149,68	175,6420	97,07
10	97,8	162,28	195,0925	97,05

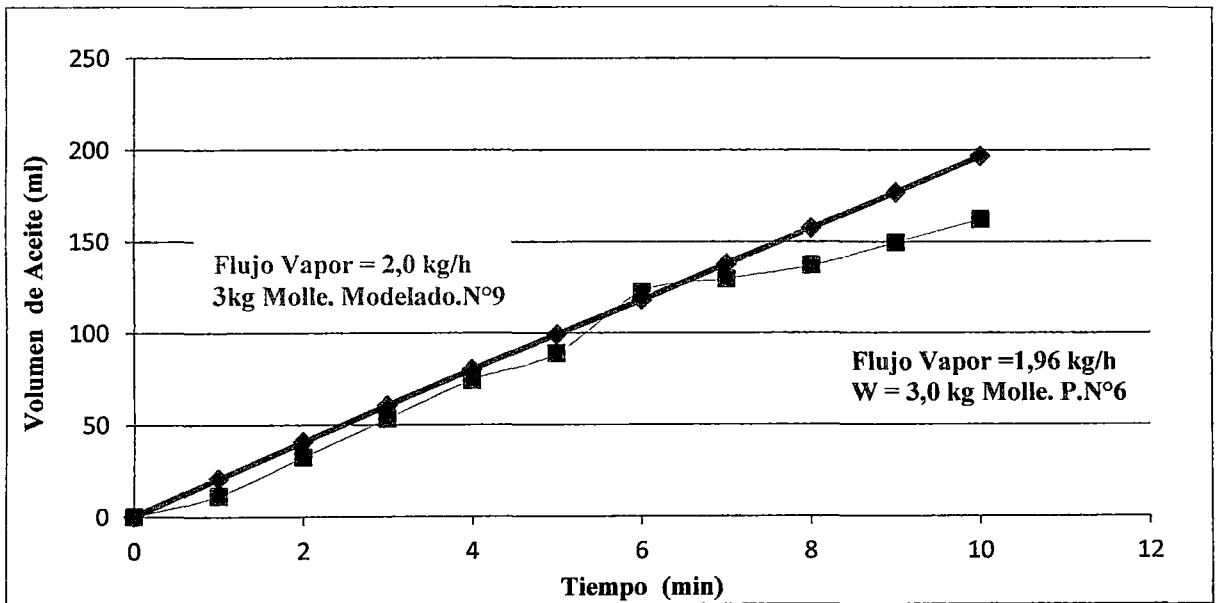


Gráfico EM6. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.

(Modelo: 1ra Etapa) Masa de Molle: 3kg. Flujo vapor 1,96kg/h.

En el Gráfico EM6, en las rectas que representan la prueba experimental y el modelamiento no existe mucha distorsión, son casi paralelas, esto se explica porque ha habido suficiente aceite libre por extraer en el proceso de modelamiento.

Tabla N°5 (Prueba N°5): Aceite Esencial de Molle			Modelamiento N°10	
Peso Neto Semilla = 3,0 kg			3,0 kg	
Flujo Neto Destila= 3,04 kg/h			3,0 kg/h	
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen Aceite (ml)	Volumen Modelo(ml)	T(°C) Modelo
0		0,00	0,00	96,939
1	96,00	23,42	30,62	96,939
2	96,00	45,64	60,61	97,002
3	96,50	66,65	89,91	97,070
4	97,00	86,25	118,33	97,158
5	97,00	101,07	147,33	97,100
6	97,25	110,5	176,34	97,100
7	97,50	118,28	205,49	97,085
8	97,50	126,49	234,74	97,075
9	97,75	132,89	264,14	97,061
10	98,00	139,29	293,63	97,051

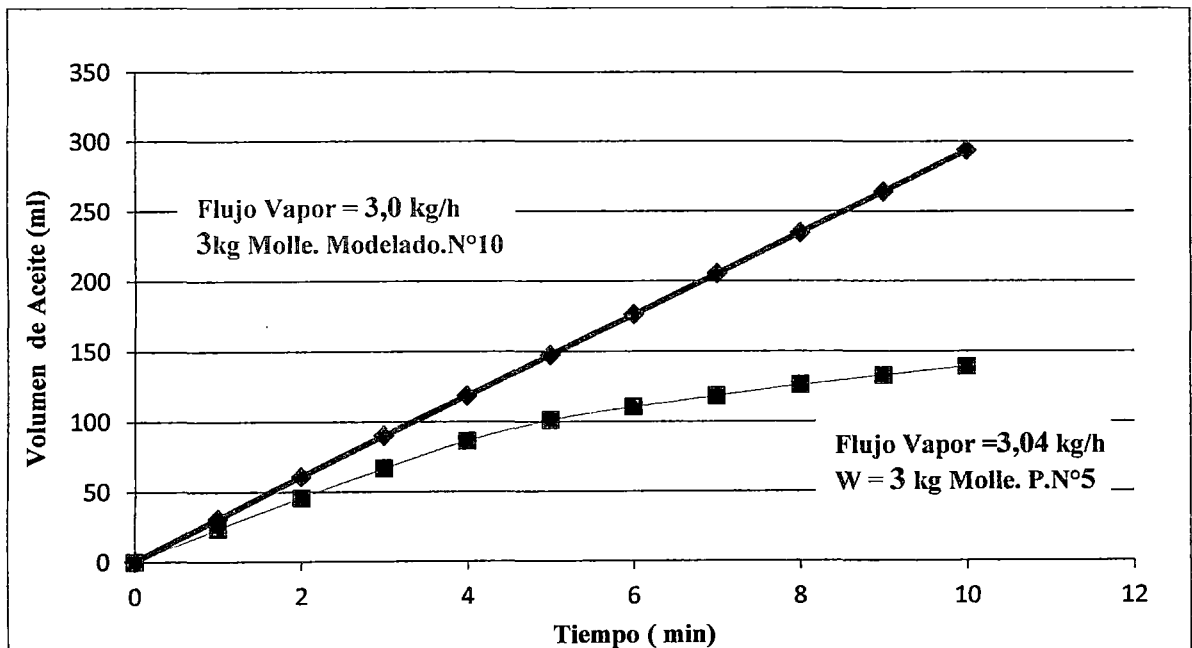


Gráfico EM7. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.
(Modelo: 1a Etapa) Masa de Molle: 3kg. Flujo vapor 3,0kg/h.

Tabla N°5 (Prueba N°5): Aceite Esencial de Molle		Modelamiento N°13 Similar al Modelo N°7		
Peso Neto Semilla = 3,0 kg		3,0 kg		
Flujo Neto Destila= 3,04 kg/h		3,0 kg/h		
Tiempo (min)	T(°C)	* Volumen Aceite (ml)	Volumen Modelo(ml)	T(°C) Modelo
0,0	95,5	0,00	0,00	96,640
0,5	95,9	11,85	14,8415	96,939
1,0	96,0	23,42	29,6338	96,963
1,5	96,0	34,69	44,3771	96,992
2,0	96,0	45,64	59,0433	97,022
2,5	96,2	56,27	73,6613	97,051
3,0	96,5	66,65	88,2028	97,085
3,5	96,8	76,79	102,6691	97,124
4,0	97,0	86,25	117,0347	97,168
4,5	97,2	94,52	131,6956	97,070
5,0	97,3	101,07	146,2346	97,095

* Los valores reales del Volumen de aceite se dan cada minuto, para la prueba N°5 el punto de quiebre es a los 5 minutos, ha sido necesario interpolar valores de *volumen vs tiempo* cada 0.5 minutos mediante Matlab: $V^* = \text{interp1}(t, V, [tx], \text{'spline'})$.

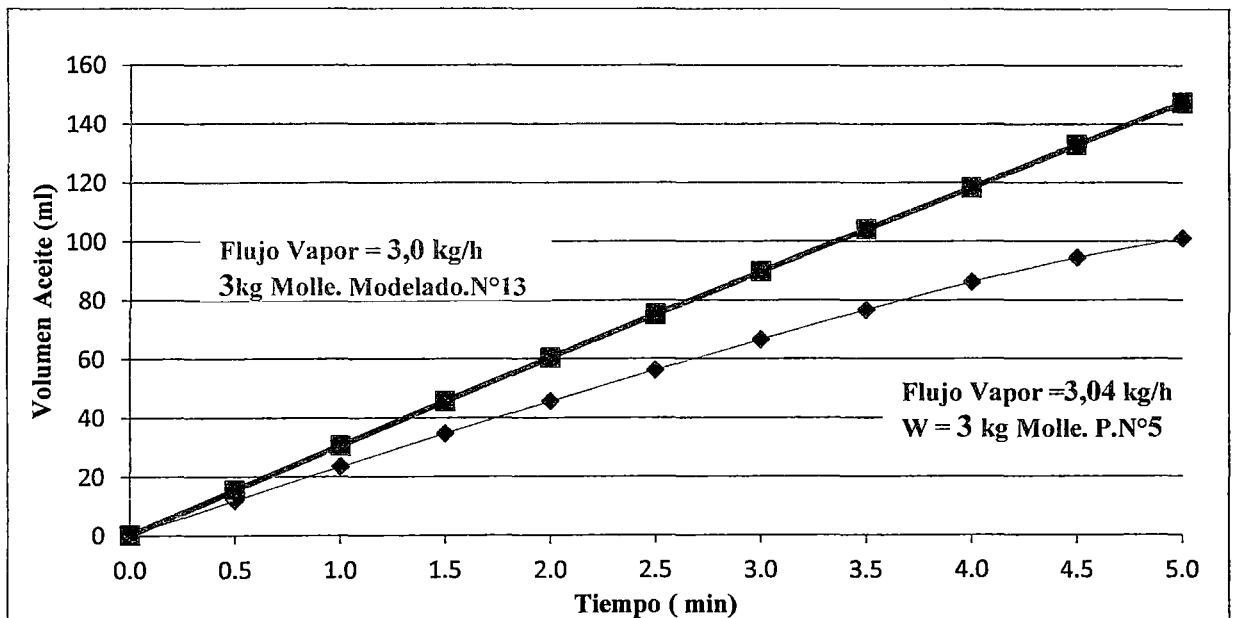
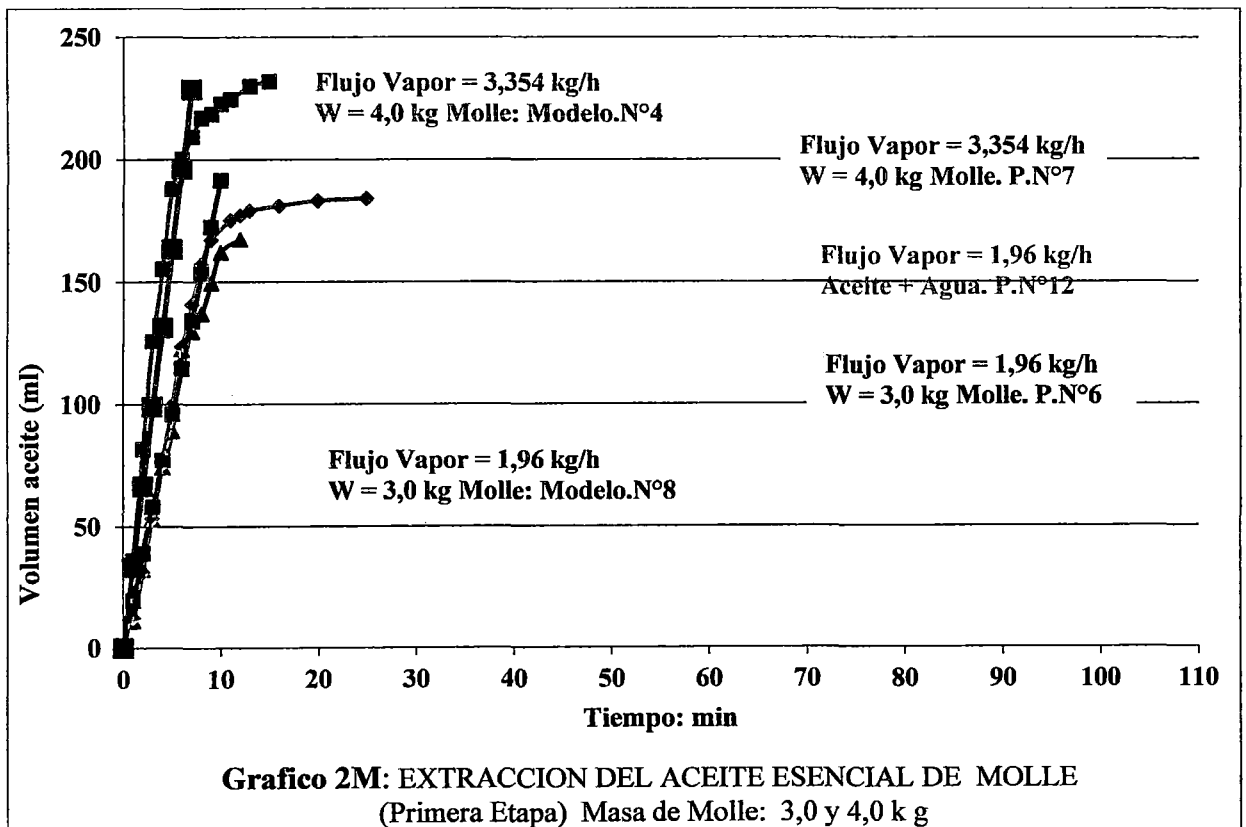
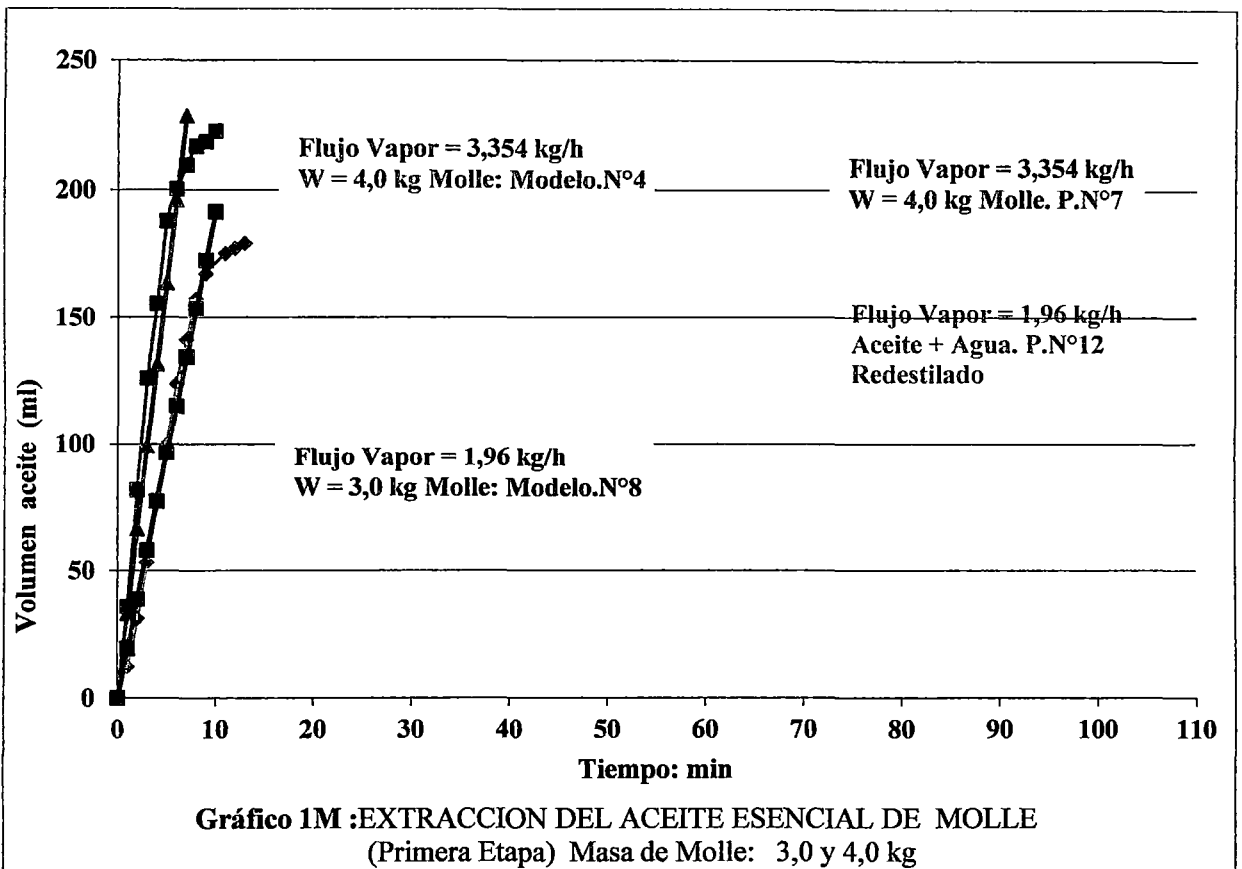


Gráfico EM8. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DEL MOLLE.
(Modelo: 1ra Etapa) Masa de Molle: 3kg. Flujo vapor 3,0 kg/h.

RESULTADOS GRÁFICOS



ANEXO X

TABLAS DE LAS PRUEBAS EXPERIMENTALES

TABLA N° 1 : ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE							
Peso Neto Semilla =	2,00	kg.	Flujo neto destilado = 1,99 kg/ h				
Flujo Vapor Total =	2,29	kg/h (*)	Flujo alamb.Vacio = 1,80 kg/ h				
Flujo Vapor.Semilla =	1,99	kg/h	V. Molle = 5215,4 ml				
Densidad Aparente =	0,3835	g/ml	Altura Alam.Total = 47,0 cm				
Densidad.Aceite =	0,8338	g/ml	Altura Alam.Molle = 14,5 cm				
Tiempo (min)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de la mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	12	0,622	40	52,44	2,40	3,022	0,62
2	23	0,586	65	88,44	1,95	2,536	1,17
3	35	0,591	95	130,44	1,90	2,491	1,77
4	52	0,654	130	182,27	1,95	2,604	2,61
6	65	0,540	200	264,73	2,00	2,540	3,24
8	74	0,461	270	343,71	2,03	2,486	3,69
13	86	0,330	410	495,71	1,89	2,222	4,29
17	90	0,265	540	630,20	1,91	2,171	4,51
22	95	0,216	714	809,16	1,95	2,164	4,76
27	98	0,182	875	973,16	1,94	2,126	4,91
33	101	0,153	1185	1286,14	2,15	2,308	5,06
38	103	0,135	1313	1415,64	2,07	2,208	5,13
45	107	0,119	1383	1490,11	1,84	1,963	5,36
55	112	0,102	1625	1736,60	1,77	1,874	5,58
66	115	0,087	2225	2340,31	2,02	2,110	5,77

(*) Generador de Vapor

TABLA N°2 : ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso Neto Semilla = 2,00kg. Flujo Vapor Total = 2,29 kg/h Flujo Vapor.Semilla = 1,93 kg/h Densidad Aparente = 0,4277g/ml Densidad Aceite = 0,8338g/ml					Flujo neto destilado = 1,93 kg/ h Flujo alamb. Vacio = 1,80 kg/ h Volumen. Molle = 4675,863 ml Altura Alam.Total = 47 cm Altura Alam.Molle i = 13 cm			
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	95	12,00	0,600	18	30	1,08	1,680	0,60
2	96	29,78	0,745	60	90	1,80	2,545	1,49
3	96	41,97	0,700	90	132	1,80	2,500	2,10
4	97	52,36	0,655	128	180	1,92	2,575	2,62
5	97	62,75	0,628	160	223	1,92	2,548	3,14
6	97	69,75	0,582	194	264	1,94	2,522	3,49
7	97	75,95	0,543	228	304	1,95	2,497	3,80
8	97,5	79,95	0,500	264	344	1,98	2,480	4,00
9	97,5	85,14	0,473	294	379		2,433	4,26
10	98	89,14	0,446	324	413	1,94	2,390	4,46
12	98	92,34	0,385	388	480	1,94	2,325	4,62
14	98	94,34	0,337	448	542	1,92	2,257	4,72
16	98	97,34	0,304	518	615	1,94	2,247	4,87
18	98	100,34	0,279	578	678	1,93	2,206	5,02
20	98	101,34	0,253	644	745	1,93	2,185	5,07
23	98	102,34	0,223	732	834	1,91	2,132	5,12
26	98	104,34	0,201	824	928	1,90	2,102	5,22
29	98	107,53	0,186	924	1032	1,91	2,097	5,38
33	98	108,53	0,165	1056	1165	1,92	2,085	5,43
37	98,2	111,53	0,151	1174	1286	1,90	2,055	5,58
41	98,2	112,72	0,138	1299	1412	1,90	2,039	5,64
47	98,2	114,72	0,122	1476	1591	1,88	2,006	5,74
54	98,2	116,72	0,108	1690	1807	1,88	1,986	5,84
63	98,2	117,72	0,093	1938	2056	1,85	1,939	5,89
73	98,2	118,72	0,081	2490	2609	2,05	2,128	5,94
83	98,2	120,72	0,073	2782	2903	2,01	2,084	6,04
94	98,2	122,72	0,065	3092	3215	1,97	2,039	6,14

TABLA N°3 : ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso Neto Semilla = 2,0 kg. Flujo Vapor Total = 2,97 kg/h Flujo Vapor.Semilla = 2,50 kg/h Densidad Aparente = 0,3972 g/ml Densidad.Aceite = 0,8338 g/ml					Flujo neto destilado = 2,50 kg/ h Temp. Inicial = 88°C (1ra. Gota) V. Molle = 5035,545 ml Altura alamb.total = 47 cm Altura alamb.molle i = 14 cm			
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	94	18,00	0,901	30	48	1,80	2,701	0,90
2	96	43,17	1,080	74	117	2,22	3,300	2,16
3	96,5	59,56	0,993	124	184	2,48	3,473	2,98
4	97	71,75	0,897	170	242	2,55	3,447	3,59
5	97,2	83,14	0,832	218	301	2,62	3,448	4,16
6	97,5	92,34	0,770	260	352	2,60	3,370	4,62
8	98	96,34	0,602	346	442	2,60	3,197	4,82
9	98	101,54	0,564	392	494	2,61	3,178	5,08
11	98	106,72	0,485	472	579	2,57	3,060	5,34
13	98	110,72	0,426	560	671	2,58	3,011	5,54
15	98	112,72	0,376	644	757	2,58	2,952	5,64
18	98	115,72	0,322	770	886	2,57	2,888	5,79
20	98	117,92	0,295	814	932	2,44	2,737	5,90
23	98	119,92	0,261	974	1094	2,54	2,802	6,00
28	98	121,92	0,218	1186	1308	2,54	2,759	6,10
34	98	123,92	0,182	1430	1554	2,52	2,706	6,20
44	98	126,92	0,144	1834	1961	2,50	2,645	6,35
54	98	131,11	0,121	2202	2333	2,45	2,568	6,56
64	98	133,11	0,104	2648	2781	2,48	2,587	6,66

TABLA N°4: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso Neto Semilla = 2,0 kg Flujo Vapor Total = 3,5353 kg/h Flujo Vapor Semilla = 2,9796 kg/h Densidad Aparente = 0,3972 g/ml Densidad.Aceite = 0,8338 g/ml					Flujo neto destilado = 2,979 kg/ h Temp. Inicial = 92°C (1ra. Gota) V. Molle = 5035,545 ml Altura Alam.Total = 47cm Altura Alam.Molle i = 14 cm			
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	95,5	9,41	0,471	18	27	1,08	1,551	0,47
2	96,5	19,22	0,481	50	69	1,50	1,981	0,96
3	97,0	32,23	0,537	94	126	1,88	2,417	1,61
4	97,0	52,84	0,661	148	201	2,22	2,881	2,64
6	97,5	77,06	0,643	254	331	2,54	3,183	3,85
7	97,5	89,87	0,642	314	404	2,69	3,334	4,49
9	98,0	98,67	0,548	418	517	2,79	3,335	4,93
13	98,0	106,08	0,408	630	736	2,91	3,316	5,30
15	98,2	109,68	0,366	756	866	3,02	3,390	5,48
17	98,2	111,08	0,327	836	947	2,95	3,277	5,55
19	98,2	113,08	0,298	934	1047	2,95	3,247	5,65
21	98,2	115,08	0,274	1030	1145	2,94	3,217	5,75
25	98,2	118,68	0,237	1240	1359	2,98	3,213	5,93
29	98,2	120,68	0,208	1450	1571	3,00	3,208	6,03
34	98,2	122,28	0,180	1698	1820	3,00	3,176	6,11
39	98,2	125,28	0,161	1942	2067	2,99	3,148	6,26
44	98,2	127,28	0,145	2196	2323	2,99	3,139	6,36
49	98,2	128,88	0,132	2406	2535	2,95	3,078	6,44
54	98,2	129,88	0,120	2696	2826	3,00	3,116	6,49
60	98,2	131,38	0,110	2999	3130	3,00	3,109	6,57

TABLA N°5: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso Neto Semilla = 3,0 kg Flujo Vapor Total = 3,6071 kg/h Flujo Vapor Semilla = 3,04 kg/h Densidad Aparente = 0,4277 g/ml Densidad Aceite = 0,8338 g/ml					Flujo neto destilado = 3,04 kg/h Temp. Inicial = 92°C (1ra. Gota) V. Molle = 7013,7948 ml Altura alamb.total = 47cm Altura alam.molle i = 19,5cm			
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	96,0	23,42	1,172	40	63	2,40	3,572	0,78
2	96,0	45,64	1,142	96	142	2,88	4,022	1,52
3	96,5	66,65	1,111	150	217	3,00	4,111	2,22
4	97,0	86,25	1,079	212	298	3,18	4,259	2,88
5	97,0	101,07	1,011	276	377	3,31	4,323	3,37
7	97,5	118,28	0,845	372	490	3,19	4,034	3,94
8	97,5	126,49	0,791	426	552	3,20	3,986	4,22
10	98,0	139,29	0,697	542	681	3,25	3,949	4,64
11	98,0	144,9	0,659	600	745	3,27	3,932	4,83
12	98,0	149,5	0,623	644	794	3,22	3,843	4,98
13	98,0	153,5	0,591	696	850	3,21	3,803	5,12
14	98,0	157,7	0,564	752	910	3,22	3,786	5,26
15	98,0	161,91	0,540	802	964	3,21	3,748	5,40
17	98,0	164,91	0,485	902	1067	3,18	3,669	5,50
19	98,0	167,91	0,442	1006	1174	3,18	3,619	5,60
21	98,0	168,91	0,402	1104	1273	3,15	3,557	5,63
25	98,0	174,11	0,348	1302	1476	3,12	3,473	5,80
28	98,2	177,11	0,316	1462	1639	3,13	3,449	5,90
32	98,2	180,32	0,282	1666	1846	3,12	3,406	6,01
37	98,2	184,32	0,249	1920	2104	3,11	3,363	6,14
42	98,2	186,92	0,223	2174	2361	3,11	3,328	6,23
47	98,2	189,52	0,202	2406	2596	3,07	3,273	6,32
53	98,2	192,52	0,182	2686	2879	3,04	3,222	6,42
58	98,2	194,12	0,167	2968	3162	3,07	3,238	6,47
63	98,2	196,12	0,156	3220	3416	3,07	3,222	6,54
69	98,2	197,62	0,143	3476	3674	3,02	3,166	6,59

TABLA N°6: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso Neto Semilla = 3,0 kg					Flujo neto destilado = 1,96 kg./ h			
Flujo Vapor Total = 2,164 kg/h					Temp. Inicial = 90°C (1ra. Gota)			
Flujo Vapor Semilla = 1,9584 kg/h					V. Molle = 7013,7948 ml			
Densidad Aparente = 0,4277 g/ml					Altura alamb.Total = 47 cm			
Densidad.Aceite = 0,8338 g/ml					Altura Alam.Molle i = 19,5 cm			
Tiempo (min)	T(C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1,0	94,0	11,195	0,560	16	27	0,96	1,520	0,37
2,0	95,0	32,362	0,810	46	78	1,38	2,190	1,08
4,0	95,2	74,335	0,930	126	200	1,89	2,820	2,48
5,0	95,8	89,114	0,892	172	261	2,06	2,956	2,97
6,0	96,2	122,697	1,023	224	347	2,24	3,263	4,09
8,0	97,0	137,087	0,857	294	431	2,21	3,062	4,57
10	97,8	162,281	0,812	368	530	2,21	3,020	5,41
12	98,0	167,476	0,698	436	603	2,18	2,878	5,58
14	98,0	172,670	0,617	510	683	2,19	2,803	5,76
17	98,0	176,670	0,520	608	785	2,15	2,666	5,89
20	98,0	178,670	0,447	704	883	2,11	2,559	5,96
24	98,0	182,865	0,381	842	1025	2,11	2,486	6,10
28	98,2	184,865	0,330	972	1157	2,08	2,413	6,16
32	98,2	188,365	0,294	1102	1290	2,07	2,361	6,28
36	98,2	189,865	0,264	1236	1426	2,06	2,324	6,33
46	98,2	194,060	0,211	1542	1736	2,01	2,222	6,47
56	98,2	197,060	0,176	1882	2079	2,02	2,192	6,57
69	98,2	201,060	0,146	2286	2487	1,99	2,134	6,70
85	98,2	203,060	0,120	2782	2985	1,96	2,083	6,77
100	98,2	206,254	0,103	3264	3470	1,96	2,062	6,88

TABLA N°7: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso Neto Semilla = 4,0 kg					Flujo neto destilado = 3,3544kg/h			
Flujo Vapor Total = 3,789 kg/h					Temp. Inicial = 93°C (1ra. Gota)			
Flujo Vapor Semilla = 3,3544 kg/h					V. Molle = 8884,1401 ml			
Densidad Aparente = 0,4502 g/ml					Altura alamb.Total = 47,0 cm			
Densidad Aceite = 0,8338 g/ml					Altura Alam.Molle i = 24,7 cm			
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	94	35,95	1,798	46	82	2,760	4,558	0,90
2	95	81,50	2,039	114	196	3,420	5,459	2,04
3	95,5	125,87	2,099	194	320	3,880	5,979	3,15
4	96,2	155,25	1,942	284	439	4,260	6,202	3,88
5	97	187,84	1,879	352	540	4,224	6,103	4,70
6	97,5	200,23	1,669	406	606	4,060	5,729	5,01
7	98	209,42	1,497	464	673	3,977	5,474	5,24
8	98	216,81	1,356	525	742	3,938	5,293	5,42
9	98	218,62	1,215	584	803	3,893	5,109	5,47
10	98	222,62	1,114	638	861	3,828	4,942	5,57
11	98	224,62	1,022	694	919	3,785	4,807	5,62
13	98	229,81	0,884	800	1030	3,692	4,577	5,75
15	98	231,81	0,773	912	1144	3,648	4,421	5,80
18	98	235,81	0,655	1064	1300	3,547	4,202	5,90
22	98	243,01	0,553	1310	1553	3,573	4,125	6,08
26	98,2	247,01	0,475	1528	1775	3,526	4,001	6,18
30	98,2	250,20	0,417	1748	1998	3,496	3,913	6,26
35	98,2	253,20	0,362	2022	2275	3,466	3,828	6,33
48	98,2	261,20	0,272	2748	3009	3,435	3,707	6,53
60	98,2	265,20	0,221	3412	3677	3,412	3,633	6,63
75	98,2	269,20	0,180	4276	4545	3,421	3,600	6,73
86	98,2	274,39	0,160	4808	5082	3,354	3,514	6,86

TABLA N°8: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso neto Semilla = 3,0 kg				Flujo alamb.Semilla = 2,15 kg/ h				
Flujo Vapor Total = 2,274 kg/h				Temp. Inicial = 90°C (1ra. Gota)				
Flujo Vapor Semilla = 2,15 kg/h				V. Molle.i = 6582,17665 ml				
Densidad Aparente = 0,4558 g/ml				Altura Alam.Total = 47,0 cm				
Densidad Aceite = 0,8338 g/ml				Altura Alam.Molle i = 18,3 cm				
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	95,0	18,39	0,920	24	42	1,44	2,360	0,61
2	96,0	44,36	1,110	68	112	2,04	3,150	1,48
3	96,5	73,14	1,220	112	185	2,24	3,460	2,44
4	97,0	87,14	1,090	158	245	2,37	3,460	2,90
5	98,0	113,50	1,136	212	326	2,54	3,680	3,78
7	98,5	134,89	0,964	288	423	2,47	3,433	4,50
9	99,0	142,89	0,794	356	499	2,37	3,168	4,76
11	99,0	147,09	0,669	426	573	2,32	2,993	4,90
13	99,0	151,09	0,581	494	645	2,28	2,861	5,04
15	99,0	155,09	0,517	564	719	2,26	2,773	5,17
18	99,0	158,28	0,440	660	818	2,20	2,640	5,28
22	99,0	161,28	0,367	800	961	2,18	2,549	5,38
29	99,0	167,48	0,289	1036	1203	2,14	2,432	5,58
39	99,0	171,48	0,220	1375	1546	2,12	2,335	5,72
49	99,0	174,48	0,178	1722	1896	2,11	2,287	5,82
60	99,0	178,67	0,149	2098	2277	2,10	2,247	5,96
74	99,0	182,67	0,123	2586	2769	2,10	2,220	6,09
92	99,0	184,67	0,100	3196	3381	2,08	2,185	6,16
101	99,0	186,67	0,092	3954	4141	2,35	2,441	6,22

TABLA N°9: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso neto Semilla = 3,0 kg				Flujo Alamb.Semilla = 2,15 kg/ h				
Flujo Vapor Total = 2,274 kg/h				Temp. Inicial = 88°C (1ra. Gota)				
Flujo Vapor.Semilla = 2,15 kg/h				V. Molle = 6294,43122 ml				
Densidad Aparente = 0,4766 g/ml				Altura alamb.Total = 47,0 cm				
Densidad.Aceite = 0,8338 g/ml				Altura alamb.Molle i = 17,5 cm				
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	94,0	9,00	0,450	12	21	0,72	1,170	0,30
3	96,0	36,00	0,600	66	102	1,32	1,920	1,20
4	97,0	61,95	0,775	110	172	1,65	2,425	2,06
5	97,0	84,53	0,846	150	235	1,80	2,646	2,82
6	98,0	92,92	0,775	192	285	1,92	2,695	3,10
7	98,5	105,11	0,751	230	335	1,97	2,723	3,50
8	98,5	112,31	0,702	266	378	2,00	2,697	3,74
10	99,0	120,31	0,602	332	452	1,99	2,594	4,01
12	99,0	125,50	0,523	400	526	2,00	2,523	4,18
14	99,0	127,50	0,456	468	596	2,01	2,461	4,25
18	99,0	131,50	0,365	604	736	2,01	2,379	4,38
23	99,0	135,50	0,295	742	878	1,94	2,230	4,52
34	99,0	140,70	0,207	1164	1305	2,05	2,261	4,69
44	99,0	142,70	0,162	1496	1639	2,04	2,202	4,76
54	99,0	147,70	0,137	1836	1984	2,04	2,177	4,92
66	99,0	148,70	0,113	2252	2401	2,05	2,160	4,96
78	99,0	152,70	0,098	2656	2809	2,04	2,141	5,09
90	99,0	154,89	0,086	3062	3217	2,04	2,127	5,16
101	99,0	157,89	0,078	3430	3588	2,04	2,116	5,26

TABLA N°10: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Peso neto semilla = 1,0 kg				Flujo Alamb.Semilla = 1,96 kg/ h			
Flujo Vapor Neto Total = 2,1639 kg/h				Temp. Inicial = 88°C (1ra. Gota)			
Flujo Vapor semilla = 1,9584 kg/h				Altura Alam.Total = 47,0 cm			
Densidad Aparente = 0,433 g/ml							
Densidad Aceite = 0,8338 g/ml							
Tiempo (min)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)
1	12,00						
3	18,58	0,310	76	95	1,520	1,830	1,86
5	20,08	0,201	134	154	1,608	1,809	2,01
8	21,58	0,135	226	248	1,695	1,830	2,16
13	23,58	0,091	382	406	1,763	1,854	2,36
25	27,58	0,055	788	816	1,891	1,946	2,76
39	27,88	0,036	1275	1303	1,962	1,997	2,79

TABLA N°12: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE

Volumen Aceite.I = 193 ml				Flujo Alamb.semilla = 1,96 kg/ h			
Flujo Vapor Total = 2,163934 kg/h				Flujo Alam.Vacio = 1,82 kg/h			
Flujo Vapor.Semilla = 1,9584 kg/h				Temp. Inicial = 90°C (1ra. Gota)			
Volumen Aceite.F = 186 ml							
Densidad Aceite = 0,8338 g/ml							
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)
1	95,00	12,39	0,620	14	26	0,84	1,460
2	96,00	31,17	0,780	56	87	1,68	2,460
3	96,00	53,14	0,886	86	139	1,72	2,606
4	96,30	75,92	0,950	126	202	1,89	2,840
5	96,50	99,50	0,996	170	270	2,04	3,036
6	97,00	123,48	1,030	220	343	2,20	3,230
7	97,50	140,87	1,007	260	401	2,23	3,235
8	98,50	157,06	0,982	298	455	2,24	3,217
9	99,00	167,06	0,929	338	505	2,25	3,182
11	99,00	175,06	0,796	402	577	2,19	2,989
12	99,00	177,06	0,738	440	617	2,20	2,938
13	99,00	179,06	0,689	504	683	2,33	3,015
16	99,00	181,06	0,566	558	739	2,09	2,659
20	99,00	183,06	0,458	704	887	2,11	2,570
25	99,00	184,06	0,368	878	1062	2,11	2,476

En la prueba N°12, se re-destilo 193 ml de aceite esencial (obtenida en la prueba N°6), agregando el aceite esencial al generador de vapor con 10 litros de agua caliente, destilando 184,06 ml durante 25 minutos, quedando 7 ml sin destilar (se considera como pérdida).

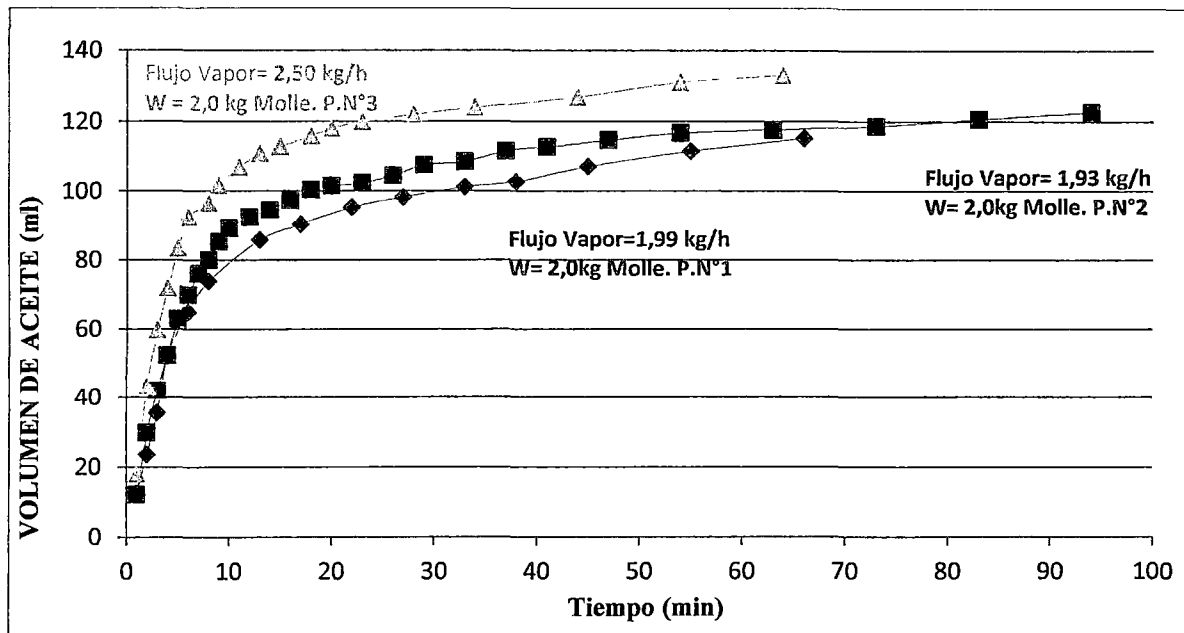


Gráfico 1. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.
Masa de Molle 2,0 kg.

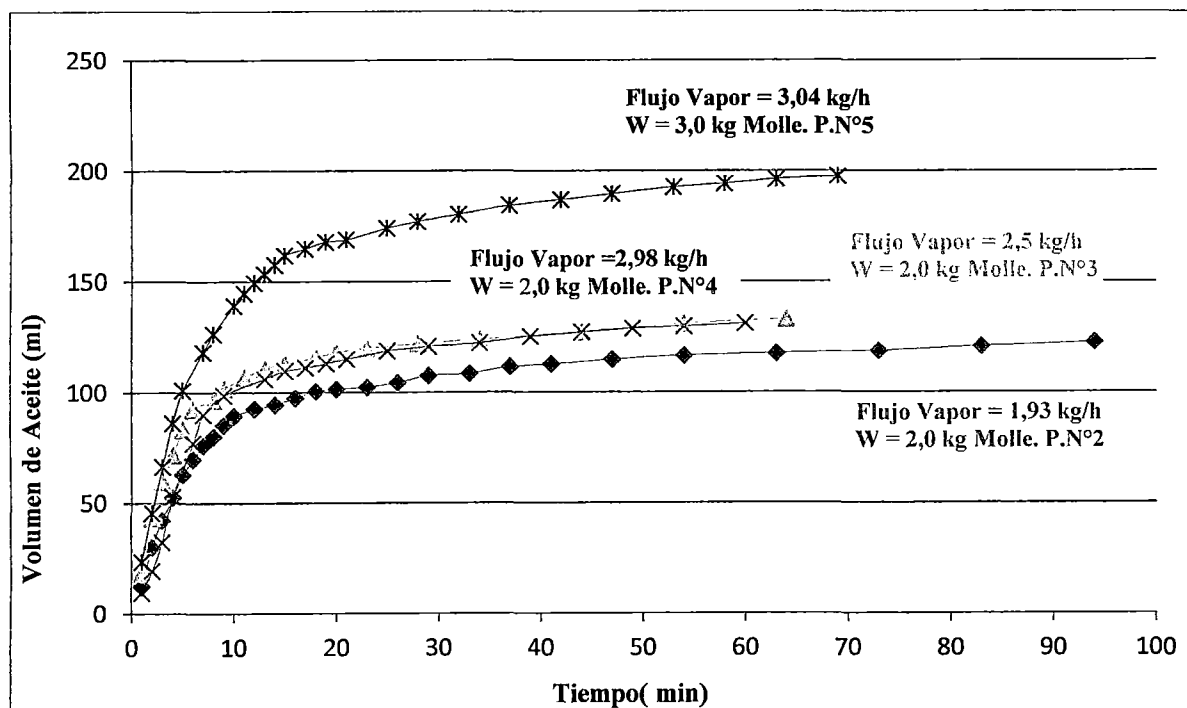


Gráfico 2. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.
Masa de Molle: 2,0 y 3,0 kg.

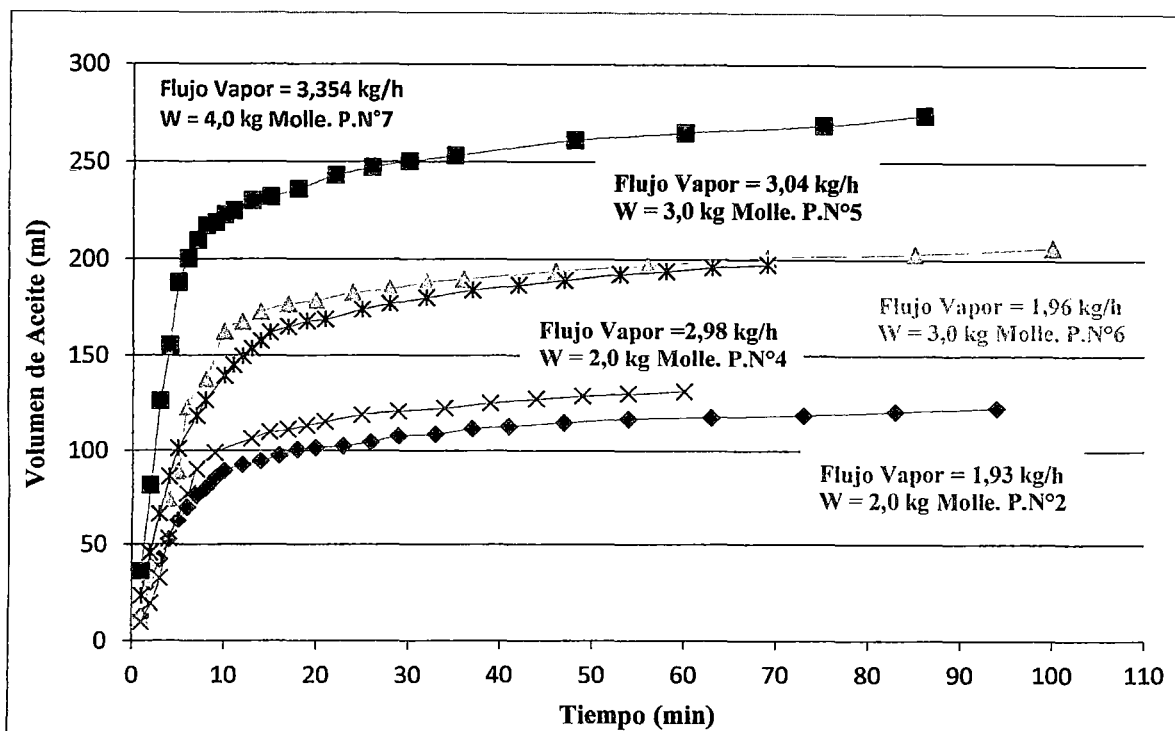


Gráfico 3. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.
Masa de Molle: 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

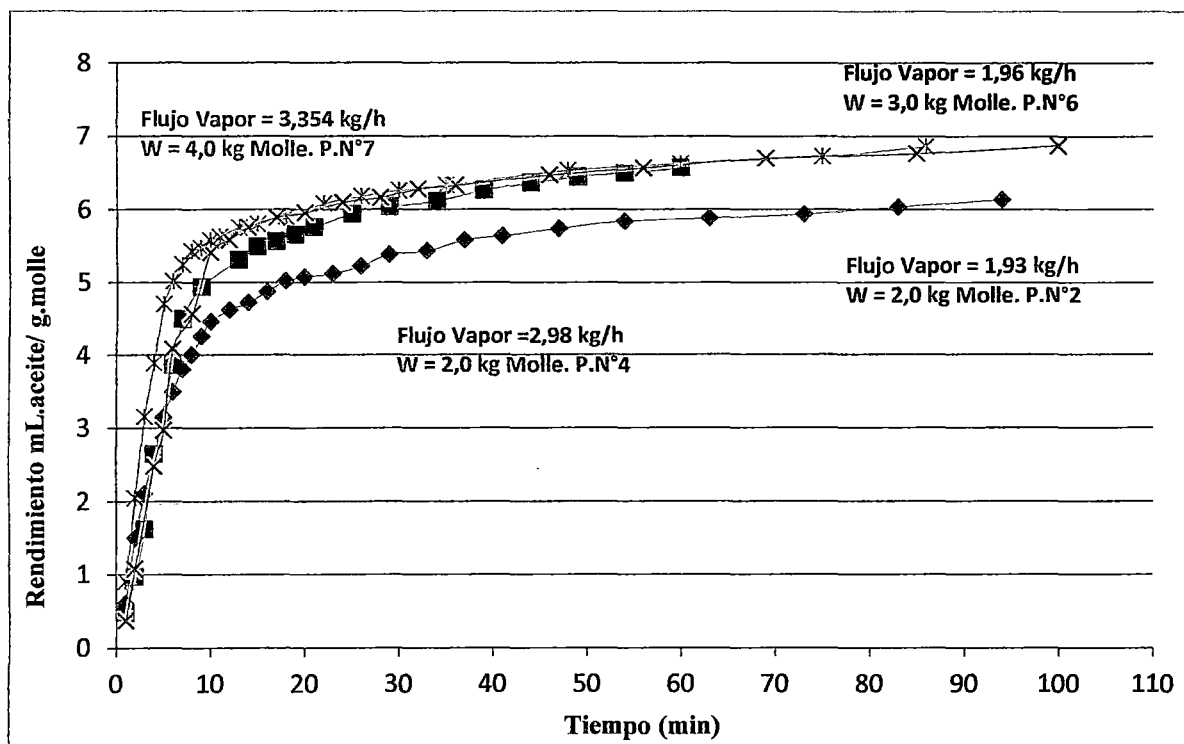


Gráfico 4. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE (Rendimiento).
Masa de Molle: 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

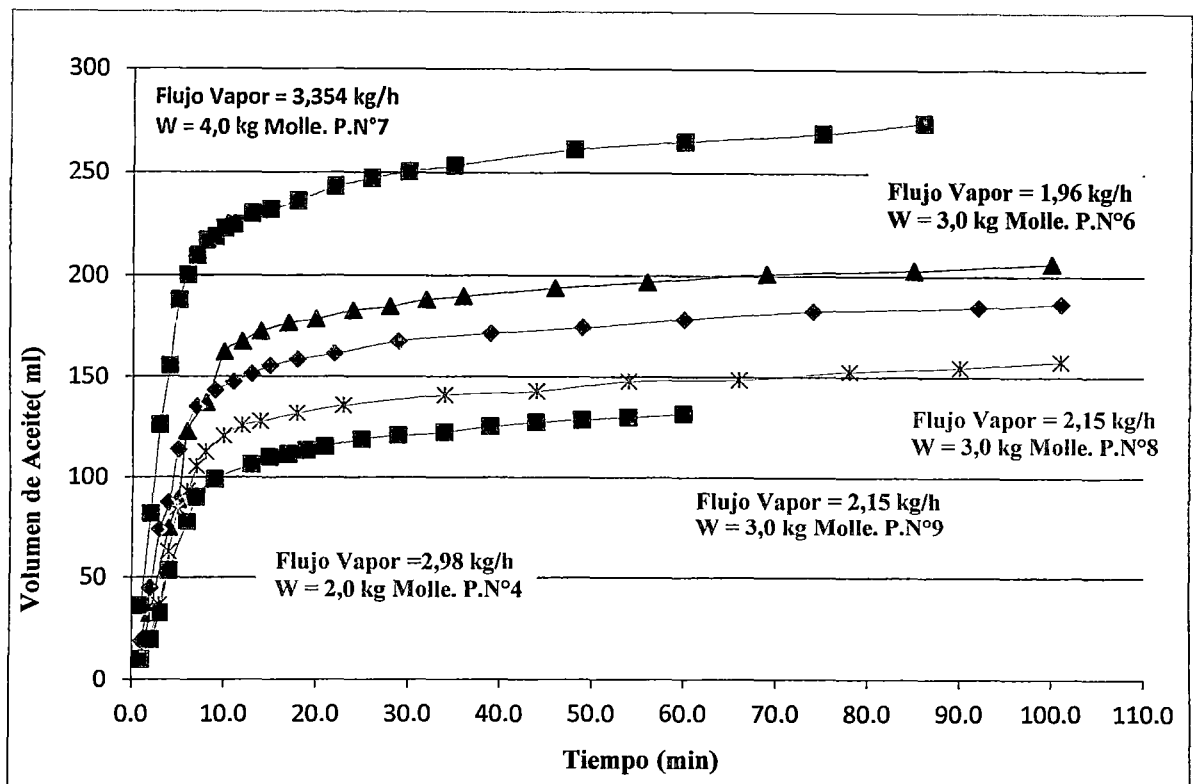


Gráfico 5. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.
Masa de Molle: 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

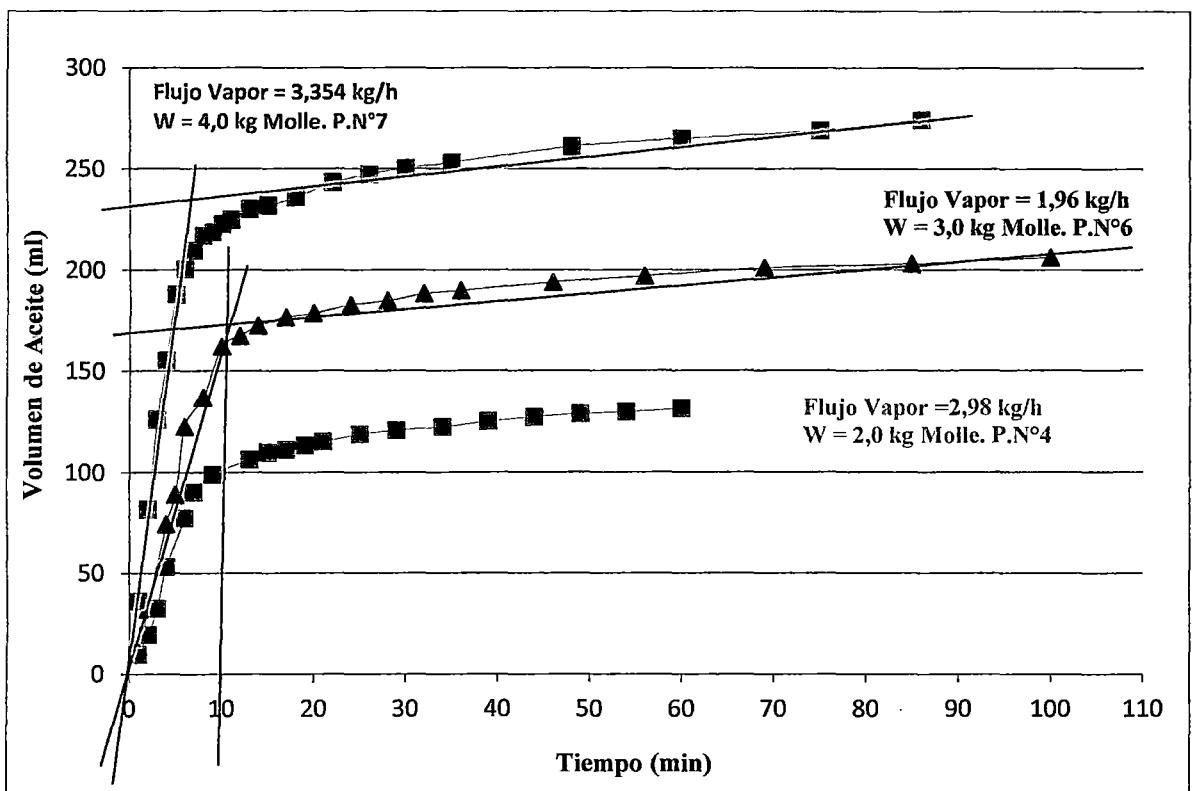


Gráfico 6. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE.
Masa de Molle: 2,0; 3,0 y 4,0 kg.

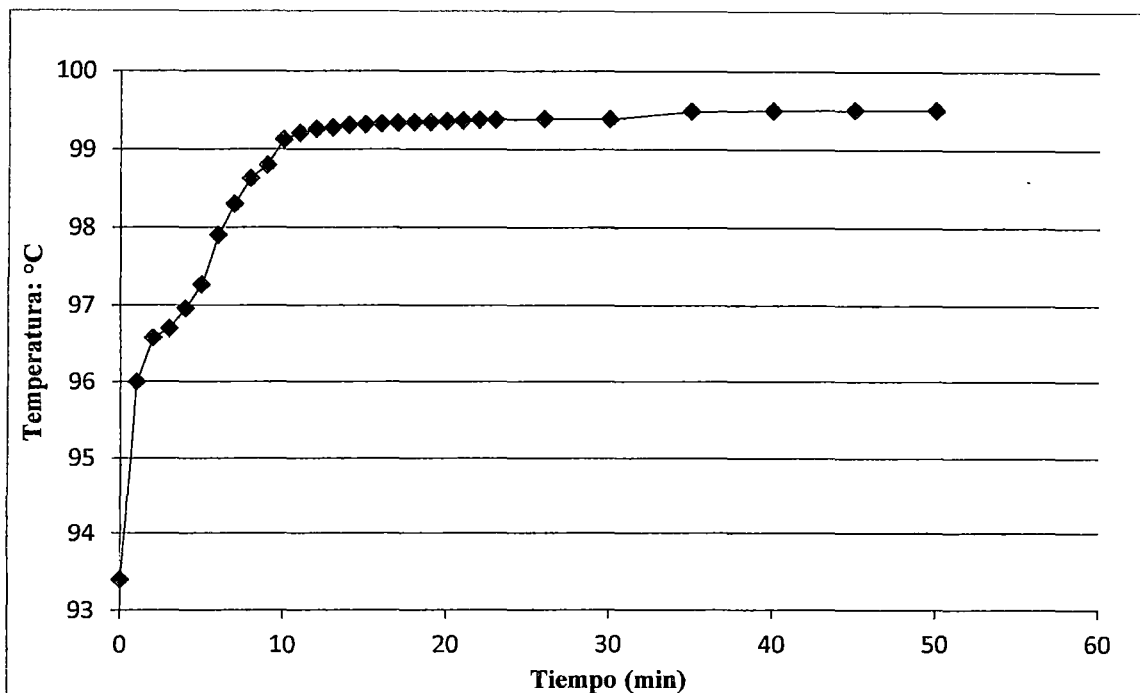


Gráfico 7. PERFIL DE TEMPERATURA.(Experimental)
 Prueba N°13. Masa de molle: 3,0 kg.

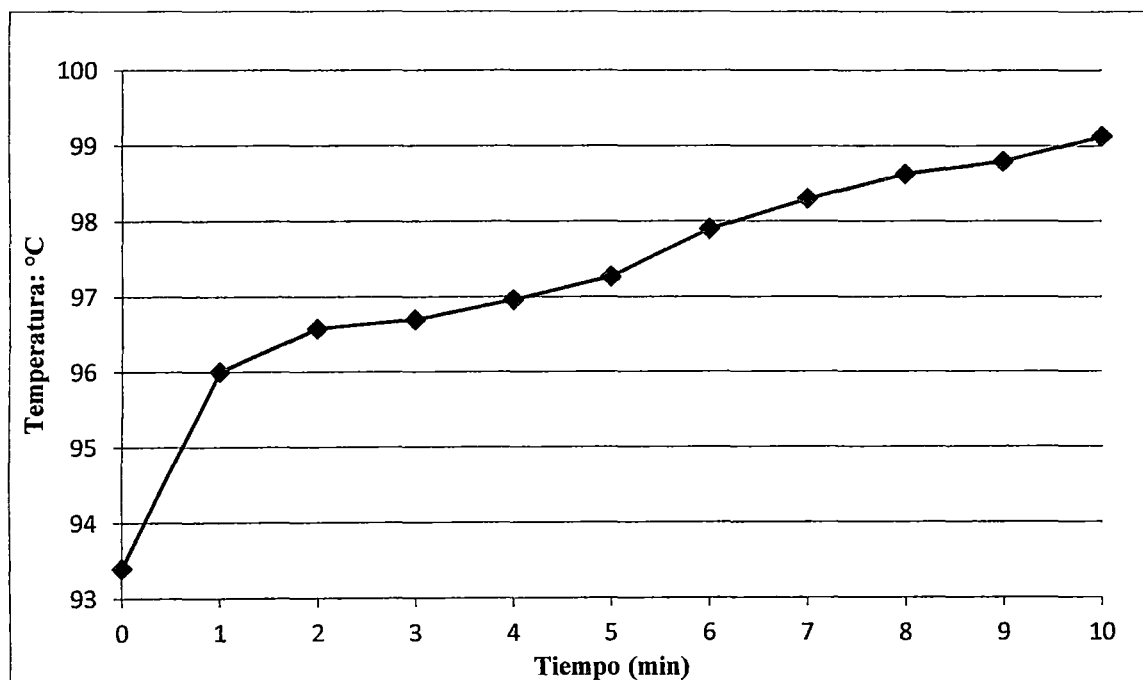


Gráfico 8. PERFIL DE TEMPERATURAS.(Experimental).
 Prueba N°13: 1ra Etapa. Masa de molle: 3,0 kg.

En el gráfico 8 se presenta el perfil de temperaturas experimentales de la prueba No 13, se observa que el rango de variación de la temperatura varía desde 93,4°C hasta 99,2°C.

El perfil de temperaturas para la prueba N° 13 generado por el Modelamiento matemático se muestra en el Gráfico 9, se observa que el perfil tiene una tendencia similar a la que presenta el proceso experimental, con la diferencia que el rango de variación de temperaturas varía desde 96,6°C hasta 97,27°; en el modelo existe una disminución en el rango, esto quizás es debido a que en los cálculos de las presiones de vapor y de las temperaturas de saturación en la mezcla se usó el modelo de *Antoine* (aproximación a un comportamiento ideal), quizás utilizando una relación que considere los coeficientes de actividad, podríamos habernos aproximado a los rangos de temperatura reales obtenidos en las pruebas experimentales.

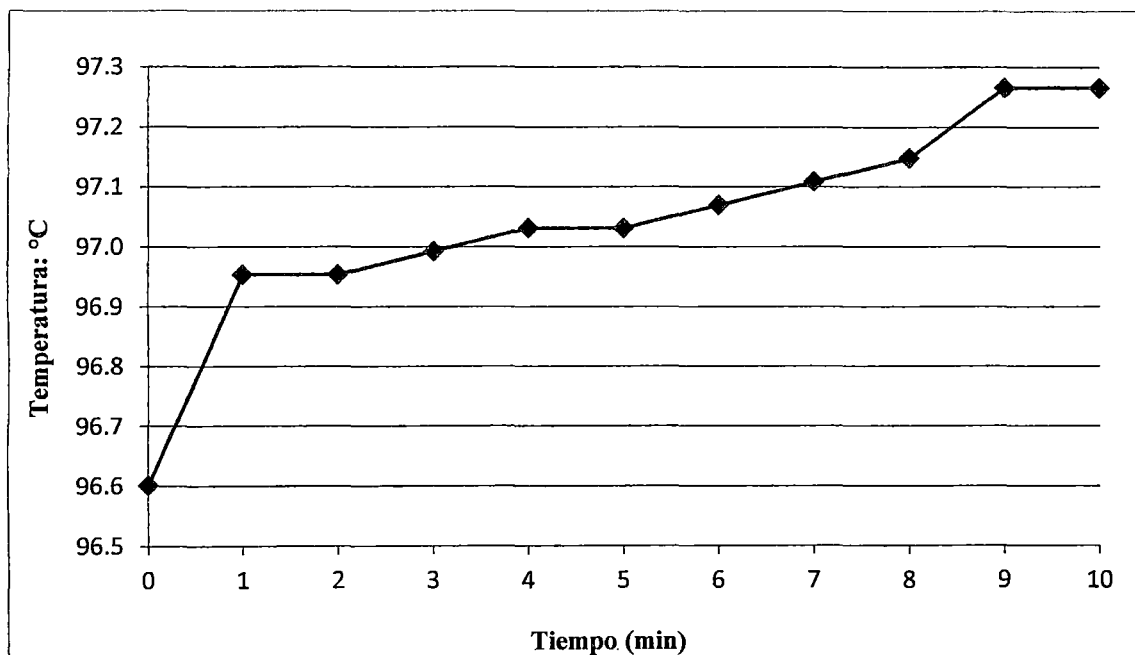


Gráfico 9. PERFIL DE TEMPERATURAS.(Modelamiento).
Prueba N° 13: 1ra. Etapa. Masa de molle: 3,0 kg.

ANEXO XII

TABLAS Y GRAFICAS DE LAS PRUEBAS DE REPETITIVIDAD.

TABLA N°14: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE. R1								
Peso Neto Semilla = 2,0 kg. Flujo Vapor Total = 2,30 kg/h. Flujo Vapor.Semilla = 2,083 kg/h Densidad Aparente = 0,4277 g/ml Densidad.Aceite = 0,8338 g/ml					Flujo Neto Destilado= 2,083 kg/ h Flujo Alam.Vacio = 1,90 kg/ h. V. Molle = 4675,9 ml Altura Alam.Total = 47 cm Temp.Inicial = 68°C			
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento (ml/g)*100
0	68	0	0	0	0	0	0	0
1	86,00	8,0	0,400	30	38	1,80	2,200	0,40
2	94,00	16,0	0,400	52	68	1,56	1,960	0,80
3	96,00	48,0	0,800	100	148	2,00	2,800	2,40
4	96,65	60,0	0,750	148	208	2,22	2,970	3,00
5	97,70	72,0	0,720	190	262	2,28	3,000	3,60
6	98,10	76,0	0,634	212	288	2,12	2,754	3,80
7	98,50	80,0	0,572	256	336	2,19	2,766	4,00
8	98,60	84,0	0,525	290	374	2,18	2,700	4,20
9	99,17	88,0	0,489	315	403	2,10	2,589	4,40
12	99,22	90,0	0,375	425	515	2,13	2,500	4,50
14	99,28	92,0	0,329	495	587	2,12	2,450	4,60
16	99,30	104,0	0,325	550	654	2,06	2,388	5,20
18	99,33	106,0	0,295	615	721	2,05	2,345	5,30
20	99,35	107,0	0,268	700	807	2,10	2,368	5,35
24	99,44	108,0	0,225	830	938	2,08	2,300	5,40
28	99,46	111,0	0,198	996	1107	2,13	2,333	5,55
32	99,46	114,0	0,178	1120	1234	2,10	2,278	5,70
35	99,48	115,0	0,164	1230	1345	2,11	2,273	5,75
40	99,48	116,0	0,145	1400	1516	2,10	2,245	5,80
46	99,49	117,0	0,127	1630	1747	2,13	2,253	5,85
52	99,49	118,0	0,114	1815	1933	2,09	2,208	5,90
58	99,49	119,0	0,103	2040	2159	2,11	2,213	5,95
69	99,50	120,0	0,087	2440	2560	2,12	2,209	6,00
79	99,50	122,0	0,077	2790	2912	2,12	2,196	6,10

TABLA N°15: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE. R2

Peso i. Semilla = 3,0 kg.				Flujo Alam.Semilla = 2,42 kg/ h				
Flujo Vapor Neto T . = 2,65 kg/h				Temp. Inicial = 78.3°C (1ra. Gota)				
Flujo Vapor.Semilla = 2,42 kg/h				V. Molle.i = 6582,176647 ml				
Densidad Aparente.i= 0,4558 g/ml				Altura Alam.Total = 47 cm				
Densidad.Aceite = 0,8338 g/ml				Altura Alam.Molle i = 18,3 cm				
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite (kg/h)	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento. (ml/g)*100
0	78,3	0	0	0	0	0	0	0
1	88,50	23,0	1,151	40	63	2,40	3,551	0,77
2	91,75	55,0	1,376	80	135	2,40	3,776	1,83
3	94,90	77,0	1,284	120	197	2,40	3,684	2,57
5	96,50	105,0	1,051	200	305	2,40	3,451	3,50
6	96,73	130,0	1,084	240	370	2,40	3,484	4,33
8	97,40	135,0	0,844	320	455	2,40	3,244	4,50
9	98,60	140,0	0,778	360	500	2,40	3,178	4,67
10	98,90	146,0	0,730	400	546	2,40	3,130	4,87
11	98,90	148,0	0,673	440	588	2,40	3,073	4,93
13	99,00	154,0	0,593	520	674	2,40	2,993	5,13
15	99,17	156,0	0,520	600	756	2,40	2,920	5,20
18	99,18	160,0	0,445	720	880	2,40	2,845	5,33
23	99,31	163,0	0,355	900	1063	2,35	2,702	5,43
28	99,34	166,0	0,297	1130	1296	2,42	2,718	5,53
33	99,36	169,0	0,256	1340	1509	2,44	2,693	5,63
38	99,38	171,0	0,225	1550	1721	2,45	2,672	5,70
46	99,38	173,0	0,188	1890	2063	2,47	2,653	5,77
56	99,40	178,0	0,159	2340	2518	2,51	2,666	5,93
66	99,42	180,0	0,136	2760	2940	2,51	2,646	6,00
76	99,42	182,0	0,120	3180	3362	2,51	2,630	6,07

TABLA N°15b: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE. R3

Peso i. Semilla = 3,0 kg. Flujo Vapor Neto T. = 2,55 kg/h. Flujo Vapor.Semilla = 2,33 kg/h Densidad Aparente.i= 0,4561 g/ml Densidad.Aceite = 0,8338 g/ml				Flujo Alam.Semilla = 2,33 kg./ h Temp. Inicial = 75.3°C (1ra. Gota) V. Molle.i = 6 578 ml Altura Alam.Total = 47 cm Altura Alam.Molle i = 18,4 cm				
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite kg/h	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua (kg/h)	Masa de mezcla (kg/h)	Rendimiento. (ml/g)*100
0	75,3	0	0	0	0	0	0	0
1	83,50	20,0	1,001	38	58	2,28	3,281	0,67
2	90,62	50,0	1,251	78	128	2,34	3,591	1,67
3	93,84	71,0	1,184	115	186	2,30	3,484	2,37
5	95,20	100,0	1,001	194	294	2,33	3,329	3,33
6	96,80	124,0	1,034	233	357	2,33	3,364	4,13
8	97,60	133,0	0,832	312	445	2,34	3,172	4,43
9	98,20	137,0	0,762	350	487	2,33	3,095	4,57
10	98,60	143,0	0,715	390	533	2,34	3,055	4,77
11	98,90	145,0	0,659	420	565	2,29	2,950	4,83
13	99,00	151,0	0,581	505	656	2,33	2,912	5,03
15	99,12	153,0	0,510	580	733	2,32	2,830	5,10
18	99,20	157,0	0,436	700	857	2,33	2,770	5,23
23	99,30	161,0	0,350	880	1041	2,30	2,646	5,37
28	99,35	164,0	0,293	1100	1264	2,36	2,650	5,47
33	99,36	166,0	0,252	1300	1466	2,36	2,615	5,53
38	99,38	169,0	0,222	1480	1649	2,34	2,559	5,63
46	99,39	171,0	0,186	1810	1981	2,36	2,547	5,70
54	99,40	174,0	0,161	2140	2314	2,38	2,539	5,80
64	99,45	175,0	0,137	2550	2725	2,39	2,527	5,83
74	99,47	178,0	0,120	2900	3078	2,35	2,472	5,93
84	99,49	180,0	0,107	3300	3480	2,36	2,441	6,00

TABLA N°16: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE. R3

Peso i. Semilla = 2,0 kg. Flujo Vapor Neto T. = 2,34 kg/h Flujo Vapor.Semilla = 2,205 kg/h Densidad Aparente.i= 0,4277 g/ml Densidad.Aceite = 0,8338g/ml				Flujo Alam.Semilla = 2,205 kg/ h. Canta km. 95 Temp. Inicial = 86°C (1ra. Gota) V. Molle.i = 4 675,9 ml Altura Alam.Total = 47 cm Altura Alam.Molle i = 18,3 cm				
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite kg/h	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua kg/h	Masa de mezcla kg/h	Rendimiento (ml/g)*100
0	86	0	0	0	0	0	0	0
1	91,00	25,0	1,251	35	60	2,10	3,351	1,25
2	93,50	42,0	1,051	65	107	1,95	3,001	2,10
3	95,40	64,0	1,067	116	180	2,32	3,387	3,20
4	96,40	90,0	1,126	160	250	2,40	3,526	4,50
5	96,64	106,0	1,061	200	306	2,40	3,461	5,30
6	97,80	114,0	0,951	230	344	2,30	3,251	5,70
7	98,35	118,0	0,843	260	378	2,23	3,072	5,90
8	98,80	120,0	0,750	295	415	2,21	2,963	6,00
9	99,00	123,0	0,684	340	463	2,27	2,950	6,15
10	99,20	125,0	0,625	365	490	2,19	2,815	6,25
11	99,22	129,0	0,587	410	539	2,24	2,823	6,45
12	99,22	130,0	0,542	435	565	2,18	2,717	6,50
14	99,27	132,0	0,472	520	652	2,23	2,700	6,60
16	99,27	135,0	0,422	580	715	2,18	2,597	6,75
20	99,20	138,0	0,345	725	863	2,18	2,520	6,90
24	99,22	141,0	0,294	864	1005	2,16	2,454	7,05
29	99,23	144,0	0,248	1030	1174	2,13	2,379	7,20
34	99,30	147,0	0,216	1216	1363	2,15	2,362	7,35
39	99,33	148,0	0,190	1395	1543	2,15	2,336	7,40
49	99,38	153,0	0,156	1750	1903	2,14	2,299	7,65
59	99,40	156,0	0,132	2170	2326	2,21	2,339	7,80
69	99,42	158,0	0,115	2540	2698	2,21	2,323	7,90

TABLA N°17: ARRASTRE CON VAPOR DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE. R4

Peso i. Semilla = 3,0 kg. Flujo Vapor Neto T. = 2,35 kg/h Flujo Vapor.Semilla = 2,224 kg/h Densidad Aparente.i= 0,4867 g/ml Densidad Aceite = 0,8338 g/ml				Flujo Alam.Semilla = 2,224 kg/ h. Canta. Km. 95 Temp. Inicial = 69.5°C (1ra. Gota) V. Molle.i = 6164,5 ml Altura Alam.Total = 47 cm Altura Alam.Molle i = 17,3 cm				
Tiempo (min)	T(°C)	Volumen de Aceite (ml)	Masa de aceite kg/h	Volumen de Agua (ml)	Volumen de mezcla (ml)	Masa de agua kg/h	Masa de mezcla kg/h	Rendimiento (ml/g)*100
0	75	0	0	0	0	0	0	0
1	84,78	21,0	1,051	30	51	1,80	2,851	0,70
2	91,00	39,0	0,976	60	99	1,80	2,776	1,30
3	94,68	63,0	1,051	105	168	2,10	3,151	2,10
4	95,95	85,0	1,063	150	235	2,25	3,313	2,83
5	96,29	108,0	1,081	200	308	2,40	3,481	3,60
7	96,59	149,0	1,065	290	439	2,49	3,551	4,97
8	96,70	160,0	1,001	330	490	2,48	3,476	5,33
9	96,85	170,0	0,945	365	535	2,43	3,378	5,67
10	97,12	180,0	0,901	412	592	2,47	3,373	6,00
11	97,39	186,0	0,846	442	628	2,41	3,257	6,20
13	98,39	196,0	0,754	528	724	2,44	3,191	6,53
18	98,84	205,0	0,570	670	875	2,23	2,803	6,83
20	98,91	208,0	0,520	760	968	2,28	2,800	6,93
24	98,90	212,0	0,442	880	1092	2,20	2,642	7,07
27	98,97	216,0	0,400	1030	1246	2,29	2,689	7,20
32	99,08	219,0	0,342	1150	1369	2,16	2,499	7,30
37	99,11	223,0	0,302	1350	1573	2,19	2,491	7,43
43	99,14	230,0	0,268	1520	1750	2,12	2,389	7,67
50	99,17	231,0	0,231	1760	1991	2,11	2,343	7,70
60	99,21	234,0	0,195	2102	2336	2,10	2,297	7,80
70	99,24	238,0	0,170	2450	2688	2,10	2,270	7,93
80	99,28	241,0	0,151	2785	3026	2,09	2,239	8,03

GRAFICOS DE REPETITIVIDAD

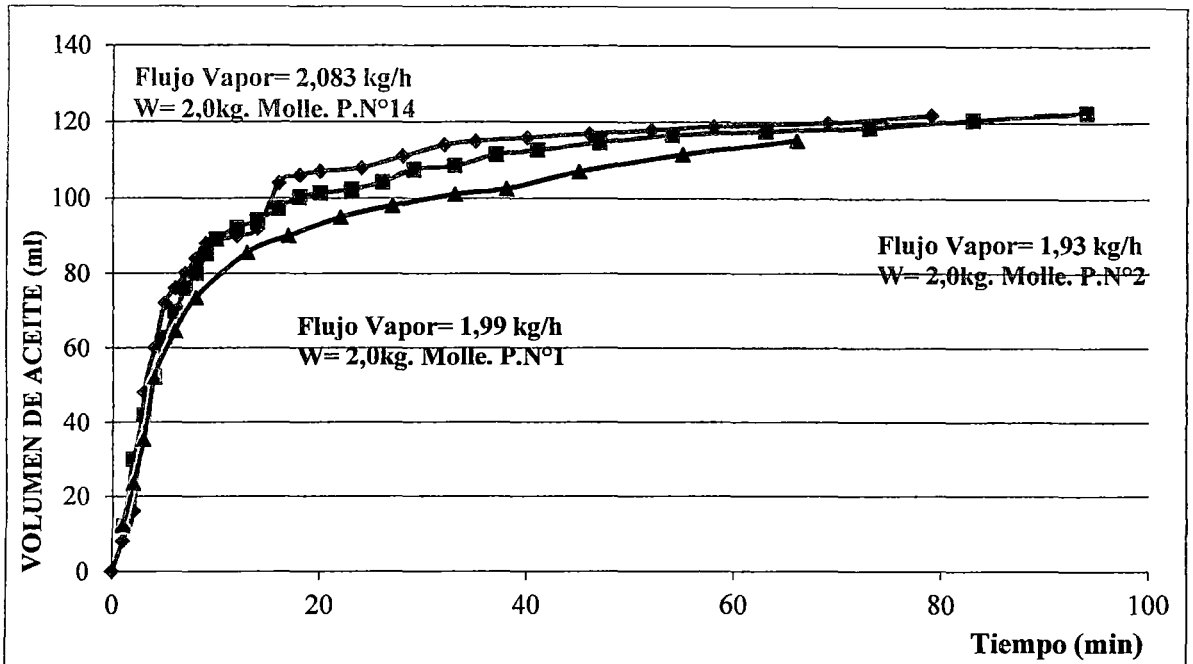


Gráfico 14. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE
Masa de Molle 2,0 kg . Flujo de Aceite. R.

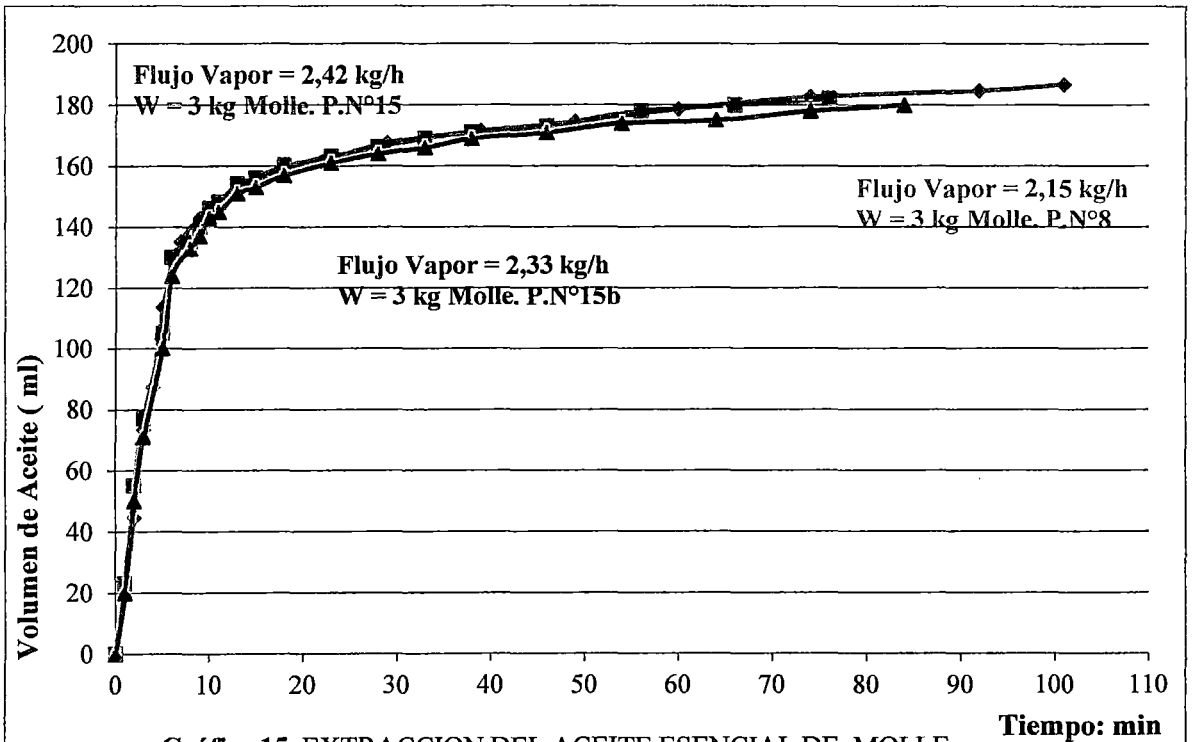


Gráfico 15. EXTRACCION DEL ACEITE ESENCIAL DE MOLLE
Masa de Molle: 3,0 kg. Flujo de Aceite. R.