

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

Aspectos termodinámicos del equilibrio líquido vapor en la destilación de mostos fermentados: Estado del arte

Thermodynamic aspects of vapor liquid equilibrium in fermentation of distillation must: state of the art

Mayra Leal

deperezmayra@gmail.com

Universidad Nacional Experimental Francisco de Miranda
Venezuela

Edgar Pérez

cienciamatria@gmail.com

Universidad Nacional Experimental Francisco de Miranda
Venezuela

Juan Ferrer

cienciamatria@gmail.com

Universidad Politécnica Territorial Alonso Gamero
Venezuela

Osney Pérez

cienciamatria@gmail.com

Instituto Superior Politécnico José Antonio Echeverría
Cuba

América García

cienciamatria@gmail.com

Universidad de Oriente
Cuba

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

Recibido: 17 de junio de 2017

Aprobado: 23 de julio /2017

RESUMEN

En la destilación de mostos fermentados, la presencia de sustancias polares que se encuentran en la mezcla, llamados congéneres, dificultan el modelaje termodinámico por la complejidad y diversidad de sus estructuras químicas e interacciones moleculares. En esta revisión documental se hace un estudio detallado sobre la aplicación de fundamentos termodinámicos del equilibrio a estos sistemas y se aborda la disponibilidad de datos adecuados para el modelado de estos procesos. Todo ello, lleva a concluir que para el caso de la destilación de mostos de *Agave cocui*, se debe usar la estimación de propiedades termodinámicas basadas en los modelos predictivos de los coeficientes de actividad y fugacidad para sistemas no ideales, debido a que la mayoría de los componentes de la mezcla son sustancias polares lo cual impide tratar la mezcla multicomponentes como ideal; esto es importante considerarlo para su posterior aplicación en la simulación y optimización de procesos.

Palabras clave: Equilibrio, mostos fermentados, simulación, *Agave cocui*, termodinámica

ABSTRACT

In the fermented musts distillation, the presence of polar substances that are found in the mixture, called fellows, complicate the thermodynamic modeling because of the complexity and diversity of their chemical structures and molecular interactions. In this documentary revision it is made a detailed study about the application of thermodynamical fundamentals of the balance to these systems and it is approached the availability of suitable data for the modeling of these processes. All this leads to the conclusion that in the case of the distillation of *Agave cocui* musts, use the estimation of thermodynamic properties based on predictive models of activity coefficients and transience for non-ideal systems, because most the components of the mixture are polar substances which prevents treat multicomponent mixture as an ideal; it is important to consider for further implementation in the simulation and optimization of processes.

Key words: Balance, musts, simulation, *Agave cocui*.

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

INTRODUCCIÓN

Las buenas prácticas, la disciplina tecnológica y el propio conocimiento del proceso son herramienta que permiten optimizar y mantener estables tanto la calidad del producto como las condiciones de operación de un proceso químico. En el caso particular de las operaciones de destilación de mostos fermentados, el conocimiento detallado de los aspectos termodinámicos del equilibrio líquido vapor de la mezcla de interés corresponde al elemento de mayor importancia dentro de todos los aspectos que deben considerarse. Para la industria vinícola, se han logrado grandes avances en la incorporación de métodos termodinámicos para el análisis del equilibrio, caso no tan común en el resto de bebidas obtenidas vía fermentación de matrices vegetales.

De esta manera, la producción del mosto fermentado de cocuy se conoce desde la época precolombina y, desde el siglo XVII [1] se elabora el producto destilado que en la actualidad se produce de manera artesanal en la población de Pecaya, Municipio Sucre del Estado Falcón, Venezuela, de donde obtiene su nombre, “Cocuy Pecayero”. El proceso de obtención de la bebida destilada ha permanecido gracias a una transferencia de conocimientos que se ha dado a través de las diversas generaciones de familiares de habitan en dicha comunidad.

El Cocuy Pecayero, es una bebida alcohólica elaborada en varias etapas: la primera etapa incluye el corte de la planta el cual se realiza durante la maduración, cuando la planta tiene entre 7 y 10 años. Seguidamente, el corno central o piña de la planta es cocido en un horno de piedra construido en el suelo, durante 72 a 120 horas. Una vez horneadas, las piñas son trituradas en cubas de madera que posteriormente son lavadas, prensadas y filtradas. El jugo obtenido se fermenta durante 4 ó 5 días en envases de plástico o de metal para finalmente ser destilado [2].

El proceso de destilación de mostos de *Agave cocui* se lleva a cabo en un alambique artesanal constituido por un calderín, un rectificador y un condensador. El mosto

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

fermentado se introduce al calderín, que se encuentra colocado sobre una fuente de calor constituida por leñas encendidas, la transferencia de calor avanza hasta que el sistema esté en equilibrio y los componentes más volátiles pasan a la fase de vapor. Los vapores que ascienden en el calderín, a través de un sistema de tuberías pasan al rectificador, en donde se enriquecen en el componente más volátil y aquellos compuestos menos volátiles presentes en los vapores condensan en la parte interna de este rectificador. Posteriormente, los vapores saturados que salen del rectificador pasan por un sistema de enfriamiento en donde ocurre la condensación de dichos vapores, obteniendo como producto final, la bebida alcohólica destilada.

En el referido proceso, la definición de los cortes del destilado (cabeza, destilado medio y cola) se realiza empíricamente, es decir, no existen normas de operación, lo cual trae como consecuencia que el producto no cumpla con las especificaciones de grado alcohólico, concentración de metanol, furfural y total de congenéricos establecidos en la Norma COVENIN 3340 [3].

Actualmente, se estima una producción de 200 mil litros de Cocuy pecayero al año [4], a través de un proceso completamente artesanal. La obtención de la Denominación de Origen del producto y el proceso de legalización de la bebida que aún se encuentra en proceso, conllevaron al diseño, construcción e instalación de una planta piloto para elaboración de Cocuy Pecayero, como parte del proyecto de la Red Socialista de Innovación Productiva de Agave Cocui del Ministerio del Poder Popular para Ciencia, Tecnología e Industrias Intermedias (MPPCTI) a través de Fundacite Falcón, con la finalidad de beneficiar a los productores de Agave cocui, quienes pueden mejorar sustancialmente los procedimientos artesanales al implementar buenas prácticas de manufactura que garanticen la calidad e inocuidad de los productos, así como la higiene, seguridad y confort de los trabajadores [4].

Se estima que con la puesta en marcha de la planta piloto la producción de Cocuy Pecayero se incrementará exponencialmente para dar cumplimiento a la demanda

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

debido a la legalización de la bebida previo cumplimiento de la norma Covenin bajo los estándares necesarios para su comercialización y exportación, lo cual a mediano plazo va a requerir de un planta de mayor capacidad con mayor control del proceso; es por esto que se hace necesario el conocimiento del equilibrio termodinámico de la mezcla multicomponentes que representa los mostos fermentados de *Agave cocui*, lo cual sirve de base para llegar a establecer el modelo termodinámico que mejor describa al proceso de destilación artesanal y simularlo para establecer recomendaciones operacionales que garanticen la calidad del producto final.

Destilación de mostos: Aspectos termodinámicos

Fundamentos del equilibrio líquido-vapor en sistemas multicomponentes

El equilibrio es una condición estática en el cual no ocurren cambios con respecto al tiempo en las propiedades macroscópicas [5]. En el proceso de destilación de mostos de *Agave cocui* se asume en todo momento que existe un equilibrio entre las fases líquido y vapor.

El problema de equilibrio entre fases consiste en el cálculo de algunas variables del conjunto (T, P, x, y) , cuando se conocen algunas de ellas. Para una mezcla dada, el número de variables F que debe ser fijado para que el sistema quede completamente definido es determinado por la Regla de las Fases de Gibbs. El equilibrio termodinámico entre las fases vapor y líquida de un sistema multicomponente requiere tres condiciones: 1) equilibrio térmico, para lo cual la temperatura debe ser igual en ambas fases; 2) equilibrio mecánico, que implica igualdad de la presión en ambas fases; 3) equilibrio químico, que exige la igualdad de la fugacidad en la mezcla de cada componente en cada fase. La *ecuación fundamental del equilibrio entre fase* puede ser expresada como la igualdad de fugacidades en la mezcla de cada componente en cada fase, la cual se expresa de distintas maneras, según el grado de idealidad que se admita para el sistema.

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

La fugacidad de un componente en la fase vapor es usualmente expresada a través del coeficiente de fugacidad ϕ_i^V , mientras que la fugacidad de un componente en la fase líquida es expresada a través del coeficiente de actividad (γ_i) o del coeficiente de fugacidad (ϕ_i^L).

Si se utiliza el coeficiente de fugacidad ϕ en ambas fases, el método de solución del problema de equilibrio entre fases es conocido como *método de la Ecuación de Estado (EdE)*. Si existe una ligera o moderada no idealidad en ambas fases se puede utilizar una formulación del equilibrio que incluye los coeficientes de fugacidad (ϕ), los que se calculan a partir de una ecuación de estado para sistemas reales.

$$\phi_i^V y_i P = \phi_i^L x_i P \quad (1)$$

Donde y_i , x_i y P representan la composiciones de la fase vapor, composición de la fase líquida y la presión del sistema, respectivamente

Si la fase líquida presenta una marcada no idealidad, por ejemplo, debido a la existencia de puentes de hidrógeno, se acude al modelo de soluciones, a través del coeficiente de actividad (γ).

$$y_i \phi_i^V P = \gamma_i x_i \phi_i^{sat} P_i^{sat} POY_i \quad (2)$$

En la ecuación (1) se agrega, además, el factor de Poyting POY_i , que permite tener en cuenta la influencia de la variación de la presión entre la presión de vapor p^{sat} y la del presión del sistema P .

Si el coeficiente de fugacidad (ϕ) es utilizado para la fase vapor y el coeficiente de actividad (γ) es utilizado para la fase líquida se conoce como *método gama-fi* (ϕ - γ). Los métodos modernos para la correlación del equilibrio entre fases incluyen la energía libre de Gibbs de exceso g^E en las reglas de mezcla de la EdE.

La mayoría de los modelos disponibles en la literatura son del tipo de *correlación*, lo

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

que significa que los datos experimentales son necesarios para calcular ciertos parámetros empíricos, generalmente usando datos de equilibrio líquido-vapor para sistemas binarios.

Los datos necesarios para el modelado utilizando los diferentes métodos son algunas de las propiedades de las sustancias puras, tales como temperatura crítica, la presión crítica, la temperatura de ebullición normal, factor acéntrico, presión de vapor, y la masa molar.

La mayoría de los modelos utilizados actualmente requieren algunos datos de la mezcla para estimar ciertos parámetros, dichos datos no están disponibles para todos los componentes puros, sin embargo, pueden determinarse con precisión empleando diferentes métodos disponibles en la literatura [6]. Para el caso de las sustancias presentes en los mostos de *Agave cocui* (metanol, furfural, acetaldehído, acetato de metilo, acetato de etilo, 1-propanol, alcohol isoamílico y alcohol isobutílico) no existen datos del equilibrio líquido-vapor, ya que no han sido estudiados experimentalmente, lo cual hace difícil una buena correlación y modelado de los datos a ser utilizados en la simulación del proceso de destilación y el diseño de los equipos.

Modelos termodinámicos en el equilibrio líquido vapor de mostos fermentados

Para mezclas multicomponentes de destilación alcohólica se hace imprescindible conocer los datos del equilibrio de fases para un buen modelado del proceso de destilación, por lo que muchas veces para poder conseguir datos confiables que puedan ser utilizados en el estudio de estos sistemas es indispensable analizar la estimación de la constante de equilibrio para mezclas multicomponentes, o lo que vale decir también, las propiedades directamente relacionadas para su cálculo, como son coeficientes de actividad, coeficientes de fugacidad y presiones de vapor, o cuando las composiciones de la mezcla son desconocidas se evalúan las propiedades parciales de los componentes de la mezcla, lo que permite caracterizar el equilibrio de fases.

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

Diferentes estudios sistemáticos con modelos de correlación y predicción han sido reportados por diversos autores y se encuentran publicados en la literatura abierta para modelado de mezclas que contienen agua, etanol y congéneres, para mostos de vinos [7].

Los clásicos modelos termodinámicos comúnmente utilizados en la literatura para tratar mezclas multicomponentes a baja presión requieren una gran cantidad de parámetros binarios que se determinan a partir de datos experimentales, es decir, al conocer los parámetros binarios se puede predecir el comportamiento de las mezclas multicomponentes utilizando relaciones termodinámicas estándar y modelos termodinámicos [6, 8].

Dado que no existen muchas ecuaciones para describir el comportamiento del equilibrio líquido-vapor para los diferentes tipos de mezclas con cualquier tipo de componentes, hay que emplear modelos parciales que sólo pueden aplicarse a mezclas y componentes específicos. La selección del mejor modelo conlleva a mejores resultados en la simulación del proceso. Para seleccionar el “mejor modelo” es necesario considerar el comportamiento de la mezcla estudiada tanto en fase líquida como en fase vapor, lo cual se puede resumir en la tabla N° 1.

Tabla 1.
Resumen de consideraciones para la selección del modelo termodinámico

Tipo de solución	Modelo recomendado	Consideraciones
Soluciones Ideales	Ecuación de estado SRK para el vapor	La fase de vapor es esencialmente ideal a bajas presiones
	El equilibrio líquido-vapor se determina por la Ley de Raoult	Todas las moléculas de la fase líquida son del mismo tamaño, no hay fuerzas de atracción intermolecular

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

Soluciones Regulares	Ecuaciones de estado como PR, SRK para todos los casos, excepto cuando la mezcla contiene hidrocarburos ramificados, hidrocarburos halogenados o algunos compuestos polares, donde se recomienda MSRK	La no idealidad es debida a las interacciones físicas moderadas
Soluciones Polares	NTRL, UNIFAC, UNIQUAC, Wilson, Van Laar, Margules. En ausencia de datos experimentales se recomienda NTRL, UNIFAC, UNIQUAC	La no idealidad procede fundamentalmente de asociaciones moleculares. Se requieren parámetros de interacción binaria para modelar los coeficientes de actividad y la fase de vapor se trata como una solución regular

Selección de modelos termodinámicos

Una de las razones fundamentales por la cual los simuladores de procesos son exitosos, es su habilidad para modelar con precisión el comportamiento termodinámico de las mezclas de fluidos con muy poca información de entrada por parte del usuario.

La mayoría de los simuladores tienen una gran base de datos de componentes y una amplia variedad de modelos termodinámicos y correlaciones estadísticas incluidos en el paquete de propiedades físicas disponibles. Es por ello que el paso más propenso a errores en una simulación es la selección del modelo correcto y los datos de propiedades físicas.

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

Para seleccionar el método apropiado de evaluación de propiedades se deben tener en cuenta los siguientes factores: la naturaleza de las propiedades de interés, la composición de la mezcla, los intervalos de presión y temperatura y la disponibilidad de parámetros.

En los simuladores comerciales de procesos existe un gran número de ecuaciones de estado, de las cuales las más comunes son: Soave-Redlich-Kwong (SRK) y sus variantes y, Peng-Robinson (PR) y sus variantes.

Cuando se elige una ecuación de estado, debe especificarse el método que se desea usar para el cálculo de entalpías. Existen dos opciones: 1) Ecuación de estado o 2) Lee-Kesler. La primera opción usa el método propio de la ecuación de estado seleccionada; en cambio, al elegir Lee-Kesler, se usa la ecuación de estado para los cálculos de equilibrio líquido vapor y la de Lee-Kesler para el cálculo de entalpías y entropías. Los resultados obtenidos por Lee-Kesler son comparables a los hallados por las ecuaciones de estado estándares y tiene idénticos rangos de aplicabilidad, pero las entalpías calculadas con la segunda opción pueden ser ligeramente más exactas en sistemas con hidrocarburos pesados.

Cuando se elige alguno de los paquetes PR, Sour PR, SRK o Sour SRK debe optarse por alguna de las maneras de calcular las densidades de los líquidos: 1) EOS Density y 2) Smooth Liquid Density.

En general, todas las ecuaciones requieren el uso de coeficientes de interacción binarias para considerar adecuadamente las mezclas multicomponentes. La amplitud y calidad de la base de datos disponible en un simulador en particular determina el ajuste de los resultados obtenidos dentro del rango de validez de aplicación del método elegido.

Para el cálculo de coeficientes de actividad se dispone, de varias alternativas, las más comunes son: Ecuación de Wilson, Ecuaciones de Margules, Modelo Non Random Two

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

Liquids (NRTL), Modelo UNiversal QUAsi Chemical (UNIQUAC), Modelo UNIquac Functional group Activity Coefficient (UNIFAC). Las cuatro primeras metodologías requieren, para su aplicación, valores experimentales de parámetros de interacción entre los compuestos de la mezcla en tanto que UNIFAC es un método predictivo, basado en la contribución de grupos, por lo que se transforma en una alternativa valiosa cuando la información experimental es escasa [9, 10].

Los modelos de coeficiente de actividad son, comparados con las ecuaciones de estado, de una naturaleza más empírica, y por lo tanto, no pueden ser usadas con seguridad en generalizaciones o extrapolaciones a condiciones no probadas. Los modelos sólo realizan los cálculos de la fase líquida, por lo que debe especificarse el método a usar para calcular la fase vapor. Para todos, con exclusión de Margules y Van Laar, esa elección se restringe a las opciones siguientes:

- Ideal, se aplica en casos donde se opera a presiones bajas o moderadas y donde, en la fase vapor, existe poca interacción molecular entre los compuestos. Es la opción por defecto.
- R-K puede aplicarse a todos los gases. Lo usual es reemplazarla por PSRK.
- Virial, modela con buenos resultados las fugacidades de la fase vapor de sistemas con fuertes interacciones en dicha fase. Esto ocurre cuando están presentes ácidos carboxílicos u otros compuestos que tienen tendencia a formar puentes de hidrógeno estables.

Otra elección es la temperatura que será usada para estimar los parámetros de interacción del método UNIFAC. Hay un valor por defecto, pero, para obtener mejores resultados conviene seleccionar la temperatura más cercana a las condiciones de operación.

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

En la tabla 2 se resumen los modelos de coeficientes de actividad recomendados para distintos tipos de mezclas reportados por la empresa VirtualMaterials, proveedora de paquetes de propiedades para su uso en simulación:

Tabla 2.

Modelos de coeficientes de actividad recomendados para algunas muestras

<i>Tipo de mezcla</i>	<i>Modelo recomendable</i>
Compuestos orgánicos con presencia de agua	NRTL
Alcoholes o en mezclas con fenoles	Wilson
Alcoholes, cetonas y éteres	Margules
Hidrocarburos C ₄ – C ₁₈	Wilson
Hidrocarburos aromáticos	Margules

Para el caso de la destilación de mostos de *Agave cocui*, se usará la estimación de propiedades termodinámicas basadas en los modelos predictivos de los coeficientes de actividad y fugacidad para sistemas no ideales, debido a que la mayoría de los componentes de la mezcla son sustancias polares lo cual impide tratar la mezcla multicomponentes como ideal. Además, la presencia compuestos como alcoholes, aldehídos y ésteres, que son sustancias que contienen grupos capaces de formar fuertes enlaces de hidrógeno, hacen que la fase vapor se comporte de un modo tan alejado de la idealidad que las ecuaciones de tres o más parámetros (P-R, S-R-K, B-W-R, L-K) no son capaces de describir adecuadamente su comportamiento, y por ende debe usarse un modelo especialmente diseñado para tales casos.

Simulación y optimización de procesos de destilación de mostos

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

La mayoría de los procesos industriales requieren un mejor diseño para nuevos equipos, el desarrollo de nuevos procesos y, controles automáticos. En el caso de la destilación de mostos para la elaboración de bebidas alcohólicas requieren precisión en el modelado termodinámico y eficientes herramientas de simulación para optimizar los procesos de destilación. Existen diversos estudios sobre la destilación por lotes y la destilación continua, pero en la simulación de procesos de destilación de mostos para la producción de bebidas alcohólicas hay pocos trabajos disponibles [11, 12].

Con el desarrollo de los softwares de simulación, en la década de los 80, se ha tenido mucho avance en el modelado y simulación de procesos de destilación de forma más rápida y fácil, sin embargo, aún no existen disponibles simuladores específicos para destilaciones alcohólicas.

Los programas de simulación pueden ajustarse para representar un proceso real, lo que significa que se pueden predecir algunas características y variables del proceso, como la concentración del destilado, por ejemplo, cuando otras condiciones del proceso varían.

Hoy en día, la mayoría de los paquetes de simulación incluyen modelos termodinámicos y bases de datos que contienen numerosas propiedades físicas, químicas y termodinámicas necesarias para resolver los balances de energía. En el caso de la destilación de mostos para elaborar bebidas alcohólicas, como en muchos otros procesos, un factor crítico para la correcta simulación del proceso es la condición de equilibrio de fases determinado por el modelo termodinámico empleado para relacionar las diferentes propiedades: la temperatura, la presión y la concentración de todos los componentes tanto en la fase líquida como en la fase de vapor.

En la Tabla 3, se resumen algunos trabajos sobre simulación de procesos de destilación de vino y mostos para la elaboración de bebidas alcohólicas. Aunque cada trabajo tiene características propias, toda la información es pertinente para lograr una

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

visión general sobre la importancia de la simulación en procesos de destilación de mostos. La mayoría de los estudios presentados en la tabla son de base teórica y sus resultados son hipotéticos, sin embargo, revelan que la simulación es una herramienta muy útil para obtener información semicuantitativa.

Tabla 3.
 Algunas investigaciones sobre simulación de procesos de destilación de mostos y vinos

Autores	Comentarios
[13]	Los autores presentaron un modelo matemático de un alambique, con el cual al resolver matemáticamente las ecuaciones diferenciales, se obtenían de manera simultánea las curvas de destilación. Dichas curvas al ser comparadas con los datos de la literatura presentan resultados aceptables.
[11]	Se utilizó un modelo empleando 26 sustancias que incluyen etanol, agua y congéneres. Los autores simularon el proceso de destilación continua de la mezcla multicomponentes y obtuvo resultados con desviaciones menores del 5% en comparación con los datos experimentales disponibles.
[14]	Los autores utilizan el simulador de procesos ProSim para el análisis de la concentración del aroma del vino, en una mezcla de 13 componentes. Emplearon UNIFAC para describir el comportamiento no ideal de las mezclas. Los resultados muestran que el uso de ProSim es ventajoso debido al ahorro de tiempo.
[15]	Se realizó la simulación de la destilación del vino utilizando el simulador comercial CHEMCAD-Batch y, se analizaron los efectos de las propiedades termodinámicas en la distribución del producto, en especial en los congéneres. Los resultados obtenidos fueron buenos comparados con los datos encontrados en la literatura
[16]	Los autores utilizaron el paquete de simulación AspenPlus y datos experimentales para determinar las variables óptimas de funcionamiento de una

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

	destilación continua para satisfacer ciertas características definidas del producto alcohólico.
[12]	Los autores presentan una estrategia para la simulación de destilación por lotes de mezclas complejas, tales como vino. Dicha estrategia es presentada y evaluada en términos de eficiencia de la computación y precisión, obteniendo resultados 40% más rápido que con soluciones rigurosas de las ecuaciones diferenciales algebraicas
[17]	Utilizaron el simulador ProSim Plus para simular el funcionamiento de columnas de destilación usadas para producir alcohol neutro de la cerveza y del jugo fermentado, empleando una solución modelo que constó de agua, etanol y 6 congéneres
[18]	Los investigadores utilizaron el software CHEMCAD para enseñar a los estudiantes de Ingeniería Química, simulando la destilación por lotes de una mezcla alcohólica conocida y, describen la experiencia en la enseñanza de la simulación como una herramienta informática muy importante para la formación de los estudiantes
[19]	Los autores utilizaron un modelo de destilación diferencial para la simulación de la producción artesanal de Cachaça, emplearon el modelo NTRL y compararon los resultados de la simulación con los datos experimentales, encontrando semejanzas satisfactorias en cuanto a la temperatura, los perfiles de grado alcohólico y de concentraciones de los congéneres principales.
[20]	Los autores emplearon el simulador de procesos HYSSYS para validar las siguientes consideraciones: el vino se puede simplificar como una mezcla binaria etanol-agua para los cálculos energéticos de columnas de destilación, se puede despreciar el calor cedido al medio ambiente en columnas de destilación y, las diferencias en las propiedades requeridas en los balances de energía son despreciables si se el paquete de propiedades seleccionado en el

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

simulador es adecuado.

[21]	Los investigadores estudiaron la destilación continua a través del simulador AspenPlus que presenta algunas estrategias de control de procesos para regular el contenido volátil. El procedimiento de simulación validó los resultados experimentales obtenidos de una planta industrial para la destilación de biodiesel. Los resultados mostraron que la relación de reflujo y el caudal de producto tenían una influencia considerable sobre la composición del producto y que las elevadas relaciones de reflujo y tasas de flujo permitían un mejor control de la contaminación sobre el producto final.
------	---

Los simuladores pueden desempeñar un papel importante en la comprensión de los procesos, en la optimización de recursos y en destilación de mostos y vinos. En los paquetes de destilación por lotes se puede establecer la distribución de los congéneres en el producto y el tiempo correcto en el que los congéneres indeseables se producen en mayor concentración, mientras que, en los paquetes de destilación continua se pueden establecer los requisitos del producto final. Adicionalmente, se puede estimar la demanda de energía de diferentes condiciones de funcionamiento y estimar el costo de destilaciones adicionales o modificaciones que puedan ser necesarias.

CONCLUSIONES

- Para el caso de las sustancias presentes en los mostos de *Agave cocui* no existen datos del equilibrio líquido-vapor, ya que no han sido estudiados experimentalmente, lo cual hace difícil una buena correlación y modelado de los datos a ser utilizados en la simulación del proceso de destilación y el diseño de los equipos.
- La determinación del equilibrio líquido-vapor en mostos de destilación alcohólica

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

es esencial para la simulación del proceso de destilación y consecuente diseño de equipos u optimización de los mismos.

- Para el caso de la destilación de mostos de *Agave cocui*, se debe usar la estimación de propiedades termodinámicas basadas en los modelos predictivos de los coeficientes de actividad y fugacidad para sistemas no ideales, debido a que la mayoría de los componentes de la mezcla son sustancias polares lo cual impide tratar la mezcla multicomponentes como ideal.
- La presencia de compuestos como alcoholes, aldehídos y ésteres en los mostos de *Agave cocui*, hacen que la fase vapor se comporte de un modo tan alejado de la idealidad que las ecuaciones de tres o más parámetros (P-R, S-R-K, B-W-R, L-K) no son capaces de describir adecuadamente su comportamiento, y por ende debe usarse un modelo especialmente diseñado para tales casos.
- La tendencia en el modelaje de este tipo de procesos apunta hacia la combinación de modelos basados en la termodinámica estadística (ecuaciones como SAFT, SOFT SAFT, BACK) con modelos predictivos de coeficientes de actividad más completos (UNIFAC, UNIQUAC), debido a lo fundamental de sus planteamientos y a la disponibilidad de constantes para los elementos que conforman los mostos fermentados.
- El módulo de destilación discontinua del simulador comercial CHEMCAD ofrece paquetes de datos termodinámicos más completos para su aplicación en mezclas de destilación alcohólica.

REFERENCIAS CONSULTADAS

- [1] González, C., 2001. Noticia histórica sobre el Cocuy (*Agave cocui*). Croizatia, Vol. 2, N°. 3, pp. 173-176.

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

[2] Ventura, J., 2001. Caracterización del proceso de producción artesanal del Cocuy Pecayero, Tesis en Ingeniería Industrial. Universidad Nacional Experimental Francisco de Miranda: Punto Fijo - Venezuela.

[3] COVENIN *Norma Venezolana de Bebidas Alcohólicas*, 1997., Industriales editor. Fecha de publicación: 12/11/1997.

[4] Ministerio del poder popular para la Ciencia, Tecnología e Innovación, 2010. Inaugurada unidad piloto para procesamiento de Agave Cocui. Fecha de consulta: 10 de octubre 2012.

[5] Smith, J., Van Ness, H., & Abbott, M. (2007). *Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química* (U. A. M. I. Edmundo G. Urbina Medal. Departamento de Ingeniería Eléctrica & D. e. Q. María del Consuelo Hidalgo Mondragón. Química. Universidad Nacional Autónoma de México, Trans. Séptima ed.). Mexico.

[6] Prausnitz, J., Lichtenthaler, R., y Gomes, E., 1999. Termodinámica molecular de los equilibrios de fase líquida. Editorial Prentice Hall International.

[7] Valderrama, J. O., Faúndez, C. A., & Toselli, L. A. (2012). Advances on modeling and simulation of alcoholic distillation. Part 1: Thermodynamic modeling. *Food and Bioproducts Processing*(0). doi: 10.1016/j.fbp.2012.04.004

[8] Kontogeorgis, G. y Folas, G., 2010. Los modelos termodinámicos para aplicaciones industriales de las Reglas de mezcla clásicas y avanzadas a las teorías Asociar. Editorial Wiley.

[9] Valderrama, J., Rojas, R. y Pizarro, C., 2000. Estudio comparativo de modelos termodinámicos para describir mezclas complejas presentes en vino destilación. *Tecnología de la Información*, Vol. 11, N°. 6, pp. 189-192.

[10] Valderrama, J., Pizarro, C., y Rojas, R., 2001. Equilibrio líquido-vapor en mezclas complejas para la simulación de mosto y vino destilación. . *Alimentaria*, Vol. 39, N°. 334, pp. 151-156.

[11] Lora, J., Iborra, M., Pérez, R., y Carbonell, I., 1992. Simulación del proceso de destilación para la concentración de aroma del vino. *J. Sci. españoles. Tecnología de Alimentos*, Vol. 32, N°. 6, pp. 621-633.

[12] Osorio, D., Pérez, R., Belancic, A., y Agosin, E., 2004. Rigorous dynamic modeling and simulation of wine distillations. *Food Control*, Vol. 15, N° 7, pp.515-521.

Mayra Leal; Edgar Pérez; Juan Ferrer; Osney Pérez; América García

[13] Hikari, A. y Kubo, R., 1975. Comportamiento de diversas impurezas en la destilación simple de la solución acuosa de etanol. *Chemical Ingenniering Japón*, Vol. 8, N°. 4, pp. 294-299.

[14] Berna, A., Bon, J., Sanjuán, N., y Mulet, A., 1995. Vino concentración aroma utilizando un simulador de propósito general (ProSim). *Food Sci. Technol. Int.*, Vol. 1, N°. 2, pp. 117-127.

[15] Valderrama, J. y Rosello, A., 1997. Aplicación del Simulador ChemCad-Batch a procesos de destilación vínica. *Información Tecnológica*, Vol. 8, N°. 5, pp. 23-27.

[16] Gaiser, M., Bell, G., Lim, A., Roberts, N., Faraday, D., Schultz, R., y Grob, R., 2002. Simulación por ordenador de un whisky food and Bioproducts Processing, Vol 51, pp. 27-31.

[17] Decloux, M. y Coustel, J., 2005. Simulación de una planta de producción de alcohol neutro utilizando destilación cerveza. *Int. Sugar*, Vol. 107, N°. 1283, pp. 628-643.

[18] Toselli, L., Guerrero, M., Monesterolo, V., y Beltrán, R., 2009. Aplicación del simulador ChemCADTM a la enseñanza en las carreras de ingeniería. *Form. Univ*, Vol. 2, N°. 3, pp. 19-24.

[19] Scanavini, H., Ceriani, A., Cassini, C., Souza, E., Maugeri, F., y Meirelles, A., 2010. Cachaca una producción a escala de laboratorio en un alambique: modelado y simulación computacional. *Food Process Eng*, Vol. 33, N°. 1, pp. 226-252.

[20] Pérez, O., Zumalacárregui, L., y Gozá, O. (2010). Simplificaciones en el Cálculo de Columnas de Destilación Alcohólica *Información Tecnológica* 21(6), 103-112. doi: 10.1612/inf.tecnol.1036it.09

[21] Batista, F. y Meirelles, A., 2011. La simulación por ordenador aplicadas al estudio de destilación continua y el control de calidad del producto. *Control de los Alimentos*, Vol. 22, N°. 10, pp. 1592-1603.