

Simulación de la separación de isoamil acetato, de baja concentración, de una mezcla acuosa

Simulation of low concentrated isoamyl acetate separation from an aqueous mixture

Z. Gerónimo-Valencia¹, C. Conde-Mejía¹ *, L. M. Valenzuela-Gómez¹ 
(*carolina.conde@ujat.mx)

Recibido: 27 de abril de 2026 Aceptado: 19 de junio de 2026

RESUMEN

La preferencia de consumo de compuestos naturales ha impulsado el desarrollo de métodos sustentables para su obtención. La fermentación es uno de los procesos biotecnológicos con mayor potencial para obtener compuestos naturales que se destinen a las industrias alimenticia, cosmética y farmacéutica. Sin embargo, en la fermentación los productos de interés resultan en muy baja concentración en el medio acuoso. Entre estos compuestos figura el isoamil acetato (IA), un éster con olor a plátano. Este compuesto posee una baja solubilidad en agua, pero al encontrarse en muy baja concentración en el medio acuoso, una alternativa para su separación sería recurrir al uso de solventes. Además, para mantener el origen natural del compuesto el solvente a su vez debería provenir de fuentes naturales, lo que puede complicar y elevar los costos del proceso de separación. Es por ello que en este trabajo se ha propuesto diseñar un proceso eficiente para recuperar y purificar isoamil acetato de un medio acuoso evitando el uso de solventes. Se simuló un proceso en Aspen Plus V.14, que incluye desorción con aire, condensación y destilación. La columna de desorción con 8 etapas de equilibrio y flujo mínimo de aire de 585 kg h^{-1} alcanzó una recuperación del 99.7 % de IA; mientras que, en la columna de destilación con 6 etapas de equilibrio se mejoró la pureza al 99.1 %. El consumo energético total se cuantificó en $3,046 \text{ kJ kg}^{-1}$ de producto. La propuesta evita el uso de solventes químicos y se obtienen una alta recuperación y una alta pureza del compuesto de interés.

Palabras clave: Isoamil acetato, simulación de procesos, esteres volátiles, separación sustentable

¹Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, División Académica Multidisciplinaria de Jalpa de Méndez. Carretera estatal libre Villahermosa-Comalcalco km 27 S/N, Ranchería Ribera Alta, C.P. 86205. Jalpa de Méndez, Tabasco, México.

ABSTRACT

The consumer preference for natural compounds has driven the development of sustainable methods for their production. Fermentation is one of the greatest potential biotechnological processes for obtaining natural compounds, that can be used in food, cosmetic, and pharmaceutical industries. However, in fermentation, the interest products are regularly found in very low concentrations in the aqueous medium. Among these compounds is isoamyl acetate (IA), an ester with a banana odor. This compound has low water solubility; however, when IA is at very low concentrations in the aqueous medium, one alternative for its separation would be the use of solvents. Furthermore, to maintain the natural origin of the compound, the solvent should come from natural sources, which can complicate the separation process and increase

costs. Therefore, this work proposes the design of an efficient process to recover and purify isoamyl acetate from an aqueous medium without solvents use. An integrated system was simulated in Aspen Plus V.14, including air desorption, condensation and distillation. The desorption column with 8 equilibrium stages and a minimum air flow rate of 585 kg h^{-1} achieved a recovery of 99.7 %, while the distillation column with 6 equilibrium stages improved the purity to 99.1 %. The total energy consumption was quantified at $3,046 \text{ kJ kg}^{-1}$ of product. This proposal avoids the use of chemical solvents, offering a viable alternative for sustainable processes.

Keywords: *Isoamyl acetate, Process simulation, Volatile esters, Sustainable separation*

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, muchos procesos industriales destinados a la extracción o purificación de compuestos naturales siguen dependiendo del uso de sustancias inorgánicas o disolventes tóxicos. Esto no solo representa un riesgo para el medio ambiente, sino también para la salud de quienes consumen o manipulan estos productos [1]. Por otro lado, la demanda global de aromas de origen natural sigue creciendo debido a regulaciones alimentarias más estrictas, como las implementadas por la Unión Europea (EC 1334/2008) y la *Food and Drug Administration* en Estados Unidos (21-CFR 101.22), que promueven el uso de saborizantes de origen biológico [2, 3]. El isoamil acetato (IA) conocido como “aceite de plátano” es una sustancia con aroma dulce y frutal a plátano que se utiliza ampliamente en la industria de alimentos, bebidas y fragancias [4]. De acuerdo con la página *EMERGEN RESEARCH*, para Estados Unidos se estimó un valor de mercado de este compuesto de 528.4 millones de dólares en 2025, y se prevé un crecimiento del 3.7 % anual hasta 2035 [5]. Por ello, es de interés desarrollar métodos más naturales y sostenibles para su producción.

Los procesos biotecnológicos como la fermentación son una alternativa para producir esterres volátiles como el isoamil acetato, usando levaduras [6]. Sin embargo, uno de los principales retos

que presenta su obtención por fermentación es la baja concentración resultante [7]; ya que complica la separación y purificación del producto final. Existen propuestas basadas en el uso de solventes eutécticos profundos (DESs, por sus siglas en inglés) como agentes extractores considerados “verdes”. No obstante, estudios recientes han revelado que algunos DESs pueden presentar toxicidad significativa y baja biodegradabilidad, lo cual pone en duda su sustentabilidad real [1]. Esto resalta la necesidad de utilizar procesos físicos más limpios, como la desorción, que permiten recuperar compuestos sin recurrir a productos químicos adicionales [8].

La desorción es un proceso que consiste en liberar un compuesto desde una superficie o fase líquida mediante medios físicos como el calor, vacío, agitación o contacto con una fase gaseosa, sin alterar su estructura o generar residuos [9]. Una de las aplicaciones de este proceso que ha tomado relevancia en la industria de bebidas es la elaboración de cerveza sin alcohol; una vez que termina la fermentación, el alcohol que se encuentra en baja concentración se remueve del medio [10]. La desorción por contacto con una fase gaseosa a escala industrial puede realizarse en columnas empacadas para favorecer la transferencia de masa del soluto desde el líquido al gas; estas columnas se conocen como *stripping*. Las técnicas de desorción térmica o el *stripping* con gases purgantes son especialmente adecuadas para compuestos aromáticos volátiles como el isoamil acetato, porque usan condiciones de operación suaves que evitan que el producto se dañe [11].

Este trabajo presenta el diseño de un proceso para la separación y purificación de IA, a partir de una mezcla acuosa que representa la salida de una fermentación, usando como primera operación unitaria la desorción. Se utiliza aire como fase gaseosa, que entra en contacto con la mezcla, para arrastrar el éster; seguido de otras operaciones unitarias, como la condensación y destilación para concentrar y purificar el compuesto. Para el diseño del proceso se emplea un enfoque de simulación usando Aspen Plus V.14. Este simulador es de tipo modular, determinista y la operación del proceso se encuentra en estado estable.

MATERIALES Y MÉTODOS

El proceso diseñado para separar el IA incluye dos secciones principales: una de separación y otra de purificación. La alimentación al proceso está compuesta por un flujo másico de $5,000 \text{ kg h}^{-1}$ de una mezcla de agua, etanol e IA, con una composición porcentual en peso de 2.5 % de etanol y 0.9 % de IA. De acuerdo con los trabajos experimentales, la concentración de IA a la salida del proceso de fermentación varía de acuerdo con el tipo de sustrato usado y las condiciones del proceso empleadas [12–14], por lo que la composición propuesta en este trabajo corresponde a un valor entre el rango de concentraciones reportadas.

Para la predicción de las propiedades termodinámicas de los compuestos dentro del simulador, se definió el método termodinámico NRTL-HOC, que utiliza el modelo NRTL (Non-Random-Two-Liquid)

para predecir las propiedades de la fase líquida y la ecuación de Hayden y O'Connell para la predicción de las propiedades en la fase vapor.

Separación del isoamil acetato

La columna de desorción se simuló con el módulo RadFrac, este módulo está basado en modelos rigurosos para la resolución de los balances de masa y energía y puede ser empleado para simular procesos de destilación, absorción y *stripping* principalmente. Inicialmente, se definieron 8 etapas de equilibrio para la columna. Las condiciones de operación se supusieron constantes para todas las etapas de equilibrio y fueron definidas como 1 bar de presión y 30 °C de temperatura. A la columna ingresa la mezcla líquida en la parte superior y se pone en contacto a contracorriente con aire, el cual se utiliza como gas de arrastre, produciendo la transferencia del IA desde la mezcla acuosa a la fase gaseosa. Para determinar el mínimo flujo de aire que debe ser alimentado a la columna, se implementó un análisis de sensibilidad para analizar la recuperación del IA en la corriente de salida del gas, en función del flujo de aire alimentado. El objetivo del análisis es determinar la cantidad mínima de aire que permite alcanzar recuperaciones del IA de al menos el 99 % en peso.

Posteriormente, la corriente gaseosa pasa a través de una válvula para reducir la presión de 1 a 0.8 bares y se envía al condensador. El proceso de condensación se implementó en el módulo Heater; en el condensador la temperatura de la mezcla gaseosa se reduce a 10 °C y esto permite que los líquidos condensen, obteniendo una mezcla gas-líquido-líquido. En este punto del proceso la concentración de IA se ha incrementado al grado de formarse dos fases líquidas, debido a la inmiscibilidad del éster en el agua. Por ello, la mezcla se envía al módulo Flash3, separador basado en el equilibrio líquido-líquido-vapor, para separar las fracciones de líquidos y el vapor. Las condiciones de operación del tanque *flash* se mantienen iguales a las del condensador.

En la corriente de fondos que sale del tanque *Flash* se obtiene el agua residual; la corriente intermedia (segunda corriente líquida) se encuentra con una mayor concentración de IA. Este líquido rico en IA se introduce al bloque SEP, este tiene como objetivo eliminar el aire remanente de esta corriente; el separador SEP representa la operación de desgasificación, la cual aprovecha la agitación del líquido y la reducción de presión para facilitar la liberación de gases disueltos [15]. Después, la corriente concentrada en IA es impulsada mediante una bomba para incrementar la presión antes de ingresar a una columna de destilación para alcanzar la pureza deseada.

Purificación del isoamil acetato

La destilación permite purificar al IA a niveles de concentración superiores al 95 % en peso. Para obtener la configuración de la columna de destilación se realizó un prediseño usando el modelo DSTWU (método corto de diseño basado en las ecuaciones de Winn-Underwood-Gilliland), en el cual se evaluó la relación

de reflujo más adecuada en función del número de etapas teóricas. A partir de los resultados obtenidos, se establecieron las condiciones iniciales para el diseño de la columna, utilizando el modelo RadFrac (modelo basado en métodos rigurosos de diseño) dentro del simulador. La presión en el condensador de la columna de destilación se definió igual a 1 bar. En la corriente de fondos de la columna se obtiene el IA, por su mayor punto de ebullición, mientras que por el domo se retira el agua residual.

En este diseño se habilitó la paquetería *Internals* del simulador para las columnas de desorción y destilación, lo cual permitió dimensionar las dos columnas.

Estimación de costos del proceso

Finalmente, se activó la paquetería de costos asociados al proceso; fueron dados de alta los siguientes servicios: refrigeración para el condensador inicial, electricidad para la bomba, y para la columna de destilación se usó agua de enfriamiento para el condensador y vapor para el rehervidor. Esta herramienta permitió obtener una estimación preliminar de costos de operación y el costo total anual del proceso (TAC).

Además, se estimó el costo de producción por kilogramo de IA relacionando el costo de operación anual con la producción de IA, según la Ec. (1). Esta estimación considera los costos de energía, servicios, mantenimiento, personal y otros aspectos operativos integrados en Aspen Plus V.14, lo cual proporciona una visión más integral del gasto real en la operación continua de la planta. Asimismo, se calculó el consumo energético por kilogramo de producto a partir de los datos de calor y enfriamiento obtenidos del balance de energía de los equipos involucrados, utilizando la Ec. (2).

$$\text{Costos} \left[\frac{\text{USD}}{\text{kg}} \right] = \frac{\text{Costo de operación} \left[\frac{\text{USD}}{\text{año}} \right]}{\text{Flujo másico del producto} \left[\frac{\text{kg}}{\text{año}} \right]} \quad (1)$$

$$\text{Consumo de energía} \left[\frac{\text{kJ}}{\text{kg}} \right] = \frac{\text{Consumo de energía} \left[\frac{\text{kJ}}{\text{h}} \right]}{\text{Flujo másico del producto} \left[\frac{\text{kg}}{\text{h}} \right]} \quad (2)$$

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Diagrama de flujo

En la Figura 1 se presenta el diagrama de flujo del proceso modelado en Aspen Plus V.14 para la separación y purificación del isoamil acetato. La Tabla 1 muestra las propiedades de las principales corrientes del proceso.

El proceso inicia con la alimentación de la mezcla líquida (Feed) y el flujo de aire a la columna de desorción (DSB), donde se facilita la transferencia de masa para arrastrar el IA hacia la fase gaseosa. La

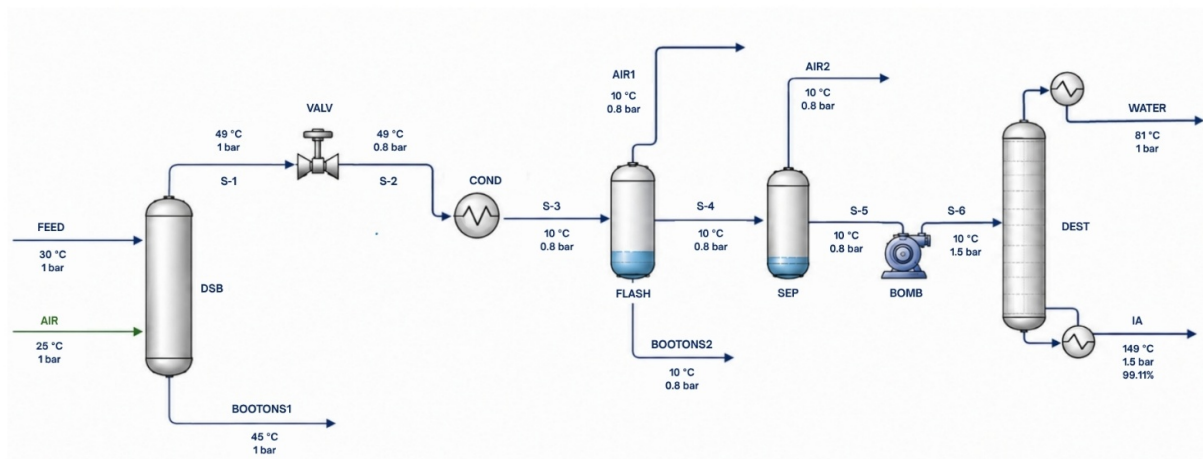


FIGURA 1. Diagrama de flujo del proceso de separación y purificación del IA. Fuente: Elaboración propia mediante Aspen Plus V.14.

corriente gaseosa húmeda (S-1) pasa a una expansión mediante una válvula (VALV) y posteriormente a un condensador (COND) para enfriar y favorecer la separación de las fases. El líquido obtenido (S-3) se dirige a un separador *flash* (FLASH), donde se obtiene una corriente líquida intermedia (S-4) que contiene una mayor concentración de IA. La corriente líquida (S-4) se envía a un separador (SEP) para retirar el aire remanente (AIR2) y obtener la fase líquida purificada (S-5), la cual es impulsada mediante una bomba (BOMB). El flujo presurizado (S-6) se introduce en una columna de destilación (DEST), donde se logra la purificación final del IA con una pureza del 99.11 % en la corriente inferior (IA), mientras que por la corriente de destilado se obtiene principalmente agua.

Tabla 1. *Propiedades de las corrientes dentro del proceso. Fuente: Elaboración propia.*

	FEED	AIR	S-2	S-3	S-4	S-6	IA
Temperatura (°C)	30	25	49	10	10	10	149
Presión (bar)	1	1	0.8	0.8	0.8	1.5	1.5
Flujo másico (kg h ⁻¹)	5000	585	302	302	49	46	40.2
<i>Porcentaje en masa (%)</i>							
Agua	96.6	0	6.2	6.2	2.5	2.6	0.02
Etanol	2.5	0	1.6	1.6	6.7	7.2	0.85
Acetato de Isoamilo	0.9	0	14.8	14.8	84.4	90	99.1
Aire	0	100	77.2	77.2	6.2	0	0

Diseño de las columnas

Los resultados del análisis de sensibilidad de la recuperación del IA en función del flujo de aire de la columna de desorción se muestran en la Figura 2.

Se optó por tomar el flujo mínimo de aire de 585 kg h⁻¹ para un número definido de 8 etapas en el desorbedor y así alcanzar una recuperación del 99.7 % en peso de IA en la corriente gaseosa. Se observa en el gráfico que con un flujo de 500 kg h⁻¹ ya se alcanza una recuperación del 99 %.

Para la columna de destilación, la Tabla 2 presenta los resultados obtenidos para las variables de diseño. El modelo indicó que con 6 etapas de equilibrio y una relación de reflujo de 1.05 es posible obtener un desempeño eficiente. Bajo estas condiciones, la recuperación del IA alcanzó el 96 %, logrando además una pureza del 99.1 % en la corriente de fondos.

Costos de operación total y energético

El proceso de producción de isoamil acetato presentó una demanda energética de 636,5 kJ kg⁻¹ en calentamiento y 2,409,5 kJ kg⁻¹ en enfriamiento; los valores fueron obtenidos del balance energético de los equipos involucrados. La planta alcanzó una producción anual de 346 473 kg de IA, con un costo

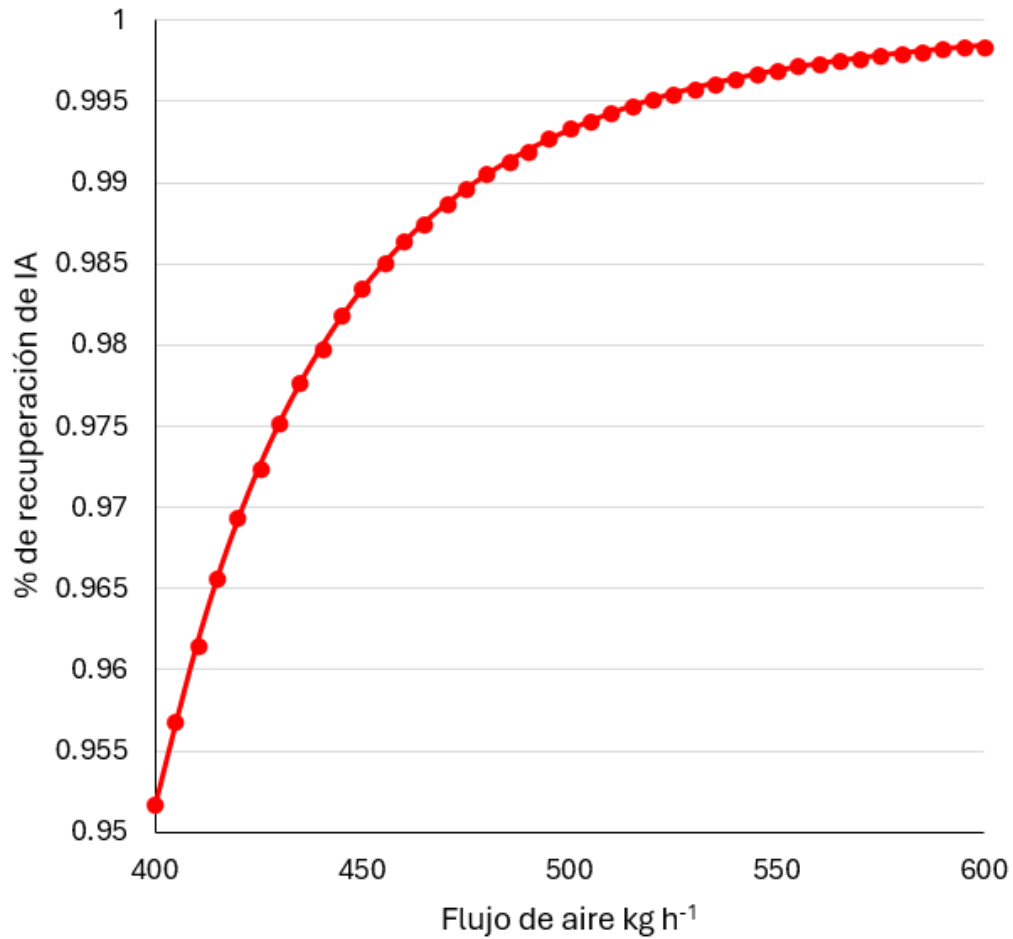


FIGURA 2. Efecto del flujo de aire en la recuperación de IA. Fuente: Elaboración propia.

Tabla 2. Configuración de la columna de destilación. Fuente: Elaboración propia.

Variable de diseño	Valor
Número de etapas	6
Relación de reflujo	1.05
Etapas de alimentación	4
Presión etapa superior (atm)	1
Caída de presión (atm)	0.5
Flujo másico de destilado (kg h ⁻¹)	40.27
<i>Consumo de energía</i>	
Rehervidor (kJ h ⁻¹)	27 905.47
Condensador (kJ h ⁻¹)	-11 689.55

total anual de 974 408 USD, lo que representa un costo unitario, para el proceso de separación, de 2,81 USD kg⁻¹ de producto. Este resultado evidencia un potencial económico del proceso de separación propuesto, ya que el precio en el mercado del isoamil acetato grado alimenticio puede rondar los 90 dólares por kilogramo [16].

CONCLUSIONES Y LÍNEAS ABIERTAS

Se logró diseñar y evaluar el proceso para recuperar y purificar el isoamil acetato, utilizando una columna de desorción asistida con aire, condensación y destilación. La simulación mostró que la columna de desorción con 8 etapas de equilibrio y un flujo mínimo de aire de 585 kg h⁻¹ alcanzó una recuperación del 99.7 %. La purificación por destilación logró una recuperación del 96 % en peso de IA y una pureza final del 99.11 % en peso. Energéticamente, el proceso requirió 636,5 kJ kg⁻¹ de producto en calentamiento y 2,409,5 kJ kg⁻¹ de producto en enfriamiento. La producción anual fue de 346 473 kg con un costo total anual de 974 408 USD. Este proceso muestra un potencial económico positivo y no requiere el uso de solventes. La metodología desarrollada no solo es aplicable a la recuperación de IA, sino que también puede adaptarse a otros esteres volátiles de interés, particularmente en las industrias alimentaria, cosmetológica y farmacéutica. Al reducir la dependencia de solventes y minimizar el impacto ambiental, este diseño contribuye a la transición hacia los procesos más sustentables.

Cabe destacar que el enfoque de diseño conceptual de procesos que se ha empleado en este trabajo permitió obtener un esquema de separación con potencial técnico y económico para complementar la producción de isoamil acetato vía fermentación. Sin embargo, se requiere de la validación experimental de los resultados y posterior escalamiento en planta piloto para asegurar la implementación exitosa del proceso a mayor escala.

DECLARACIÓN DE CONTRIBUCIÓN DE AUTORES Y COLABORADORES

Zaira Gerónimo Valencia: Estado del arte, Conceptualización, Metodología, Manejo de Software, Escritura del Manuscrito. **Carolina Conde Mejía:** Conceptualización, Metodología, Manejo de Software, Escritura y Revisión del Manuscrito. **Luis Miguel Valenzuela Gómez:** Conceptualización, Metodología, Revisión del Manuscrito.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al programa de Verano de la Investigación Científica UJAT-2025, por el apoyo brindado en la realización de este trabajo.

REFERENCIAS

- [1] J. Marchel, H. Cieśliński, and G. Boczkaj, “Deep eutectic solvents microbial toxicity: Current state of art and critical evaluation of testing methods,” *Journal of Hazardous Materials*, vol. 425, p. 127963, 2022. DOI: [10.1016/j.jhazmat.2021.127963](https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.127963)
- [2] Diario Oficial de la Unión Europea, “Reglamento (CE) no. 1334/2008 del Parlamento Europeo y del Consejo,” <https://www.boe.es/doue/2008/354/L00034-00050.pdf>, 2008.
- [3] Food and Drug Administration, “Normativa federal 21-CFR 101.22,” <https://www.ecfr.gov/current/title-21/chapter-I/subchapter-B/part-101/subpart-B/section-101.22>, 2024.
- [4] G. Guan, Y. Zhang, J. Qian, F. Wang, L. Qu, and B. Zou, “Advancements in the research on the preparation of isoamyl acetate catalyzed by immobilized lipase,” *Materials*, vol. 18, no. 11, p. 2476, 2025. DOI: [10.3390/ma18112476](https://doi.org/10.3390/ma18112476)
- [5] EMERGEN RESEARCH, “Isoamyl acetate market (2025–2035),” <https://www.emergenresearch.com/industry-report/isoamyl-acetate-market>, consultada 12/06/2026.
- [6] O. Rentería-Martínez, J. B. Páez-Lerma, J. A. Rojas *et al.*, “Enhancing isoamyl acetate biosynthesis by *Pichia fermentans*,” *Revista Mexicana de Ingeniería Química*, vol. 20, no. 2, pp. 621–633, 2021. DOI: [10.24275/rmiq/Bio2125](https://doi.org/10.24275/rmiq/Bio2125)
- [7] I. I. López-Álvarez, A. López-Molina, and C. Conde-Mejía, “Biorrefinería integral, producción de etanol y isoamil acetato a partir de lactosuero: una aproximación a su diseño,” 2021. DOI: [10.19136/Jeeos.a5n2.4776](https://doi.org/10.19136/Jeeos.a5n2.4776)
- [8] A. Inayat, S. R. Ahmad, S. J. Awan *et al.*, “In vivo and in vitro toxicity profile of deep eutectic solvents,” *Scientific Reports*, vol. 13, p. 1777, 2023. DOI: [10.1038/s41598-023-28928-y](https://doi.org/10.1038/s41598-023-28928-y)
- [9] J. D. Seader and E. J. Henley, *Separation Process Principles*. John Wiley & Sons, 1998.
- [10] A. Ammari and K. Schroen, “Effect of ethanol and temperature on partition coefficients of ethyl acetate, isoamyl acetate, and isoamyl alcohol: instrumental and predictive investigation,” *Journal of Chemical & Engineering Data*, vol. 64, no. 7, pp. 3224–3230, 2019. DOI: [10.1021/acs.jced.8b01125](https://doi.org/10.1021/acs.jced.8b01125)
- [11] W. Zhang, G. Li, H. Yin, K. Zhao *et al.*, “Adsorption and desorption mechanism of aromatic VOCs onto porous carbon adsorbents for emission control and resource recovery: recent progress and challenges,” *Environmental Science: Nano*, vol. 9, no. 1, pp. 81–104, 2022. DOI: [10.1039/D1EN00929J](https://doi.org/10.1039/D1EN00929J)

- [12] C. A. Gómez-Aldapa, J. Castro-Rosas, A. López-Molina *et al.*, “Best conditions for the production of natural isopentyl acetate (Banana aroma) from cheese industry waste: an experimental precursor approach,” *Processes*, vol. 9, no. 11, p. 1880, 2021. DOI: [10.3390/pr9111880](https://doi.org/10.3390/pr9111880)
- [13] A. K. Sánchez-Castañeda, V. Athès, M. Moussa *et al.*, “Modeling of isoamyl acetate production by fermentation with *Pichia fermentans* in an aerated system coupled to *in situ* extraction,” *Process Biochemistry*, vol. 60, pp. 11–20, 2018. DOI: [10.1016/j.procbio.2017.10.010](https://doi.org/10.1016/j.procbio.2017.10.010)
- [14] M. A. Hernández-Cruz, A. Cadena-Ramírez, J. Castro-Rosas *et al.*, “Comparative analysis of three types of whey as substrate for fermentation by *Kluyveromyces marxianus* and its influence on isoamyl acetate synthesis,” *Waste and Biomass Valorization*, vol. 15, pp. 3413–3424, 2024. DOI: [10.1007/s12649-023-02380-5](https://doi.org/10.1007/s12649-023-02380-5)
- [15] E. V. Ibarra Hernández, M. Dupin Fonseca, and B. F. Guerra Valdez, “El sistema de agitación en equipos empleados en la industria química,” *Revista Centro Azúcar*, 2024.
- [16] Millipore Sigma, “Isoamyl acetate, W205508,” <https://www.sigmaaldrich.com/US/en/product/aldrich/w205508>, consultada 16/06/2026.