Unidad 2: Ejemplo de Aplicación
Extractor Líquido-Líquido

Prof.: Dr. Juan Ignacio Manassaldi

J.T.P.: Ing. Amalia Rueda

Extracción Líquido-Líquido

Se puede definir como la transferencia de una sustancia B desde una "fase líquida A" a otra "fase líquida C" inmiscibles entre si. El reparto de esta sustancia entre las fases A y C viene dado por

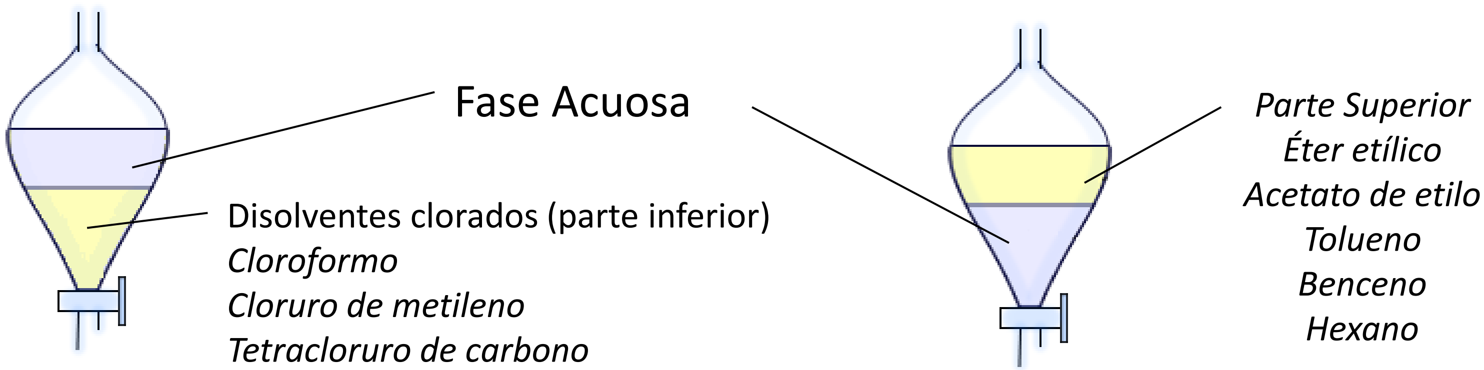
$$K = \frac{C_A}{C_C}$$

Donde:

- C_A y C_C son las concentraciones de B en las respectivas fases.
- K el coeficiente de reparto.
- A y C son dos líquidos inmiscibles.
- B es miscible en ambas fases

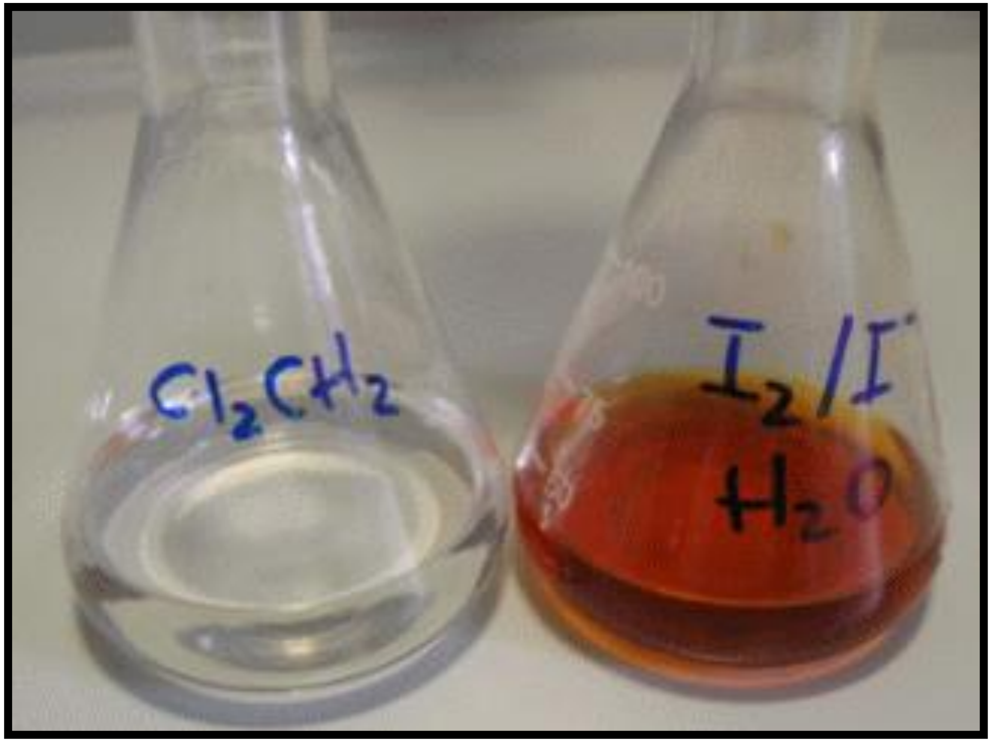
Extracción Líquido-Líquido

En el laboratorio, esta operación se suele realizar entre una disolución acuosa (fase acuosa) y otro disolvente inmiscible con el agua (fase orgánica) con la ayuda de un embudo de decantación. La posición relativa de ambas fases (arriba o abajo) depende de la relación de densidades.



Ejemplo

A continuación se explica como se separan yodo (I_2) del anión yoduro (I^-) que están formando una disolución acuosa (Erlenmeyer de la derecha coloreado), mediante la extracción del yodo (I_2) hacia la fase orgánica de cloruro de metileno (Cl_2CH_2) (Erlenmeyer de la izquierda transparente).

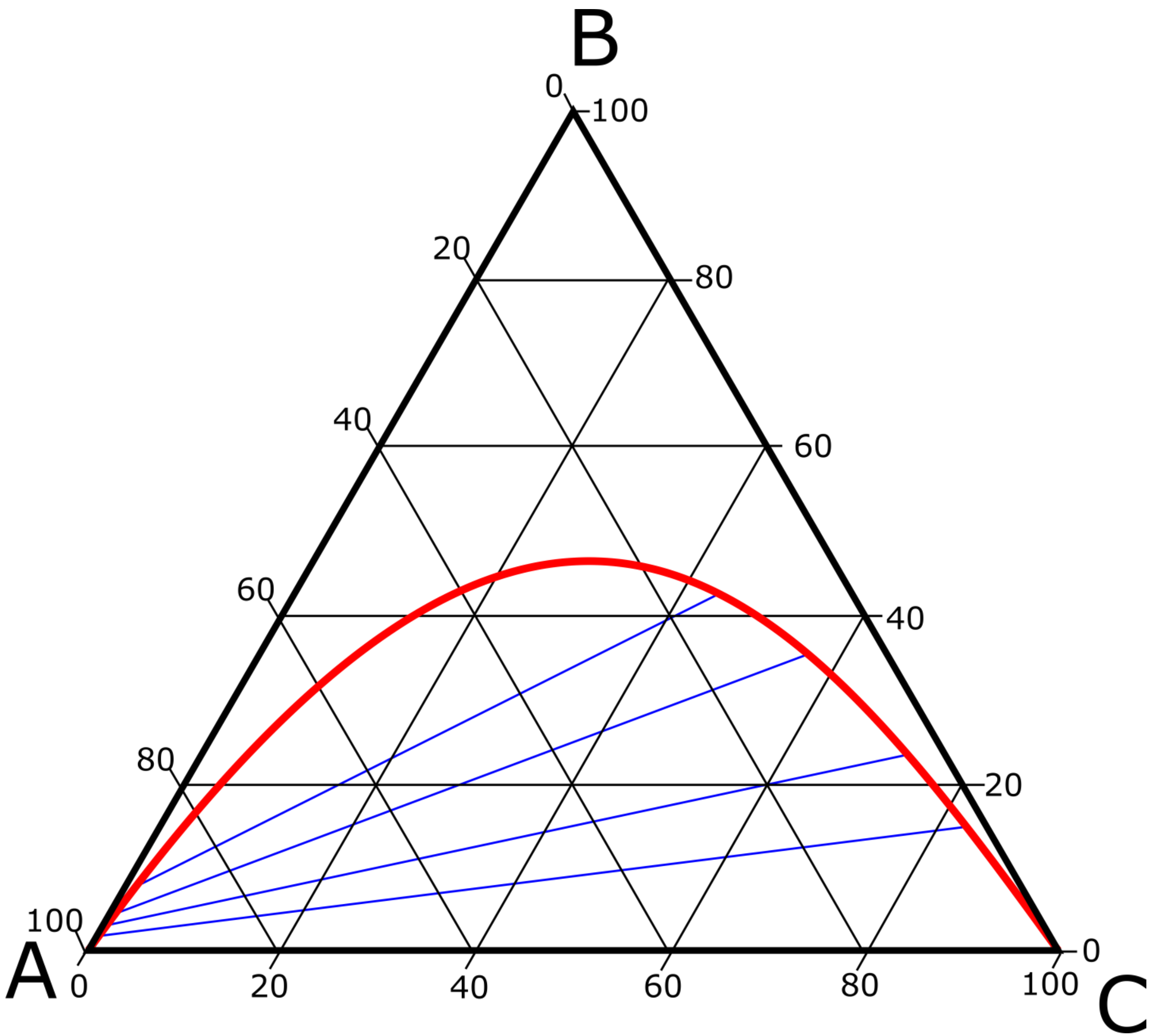


Fuente: http://www.ugr.es/~quiored/lab/oper_bas/ex_li_li.htm

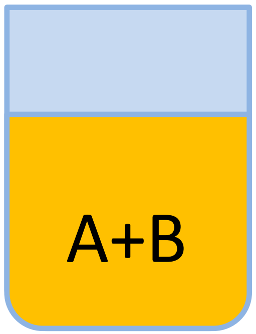
Ejemplo

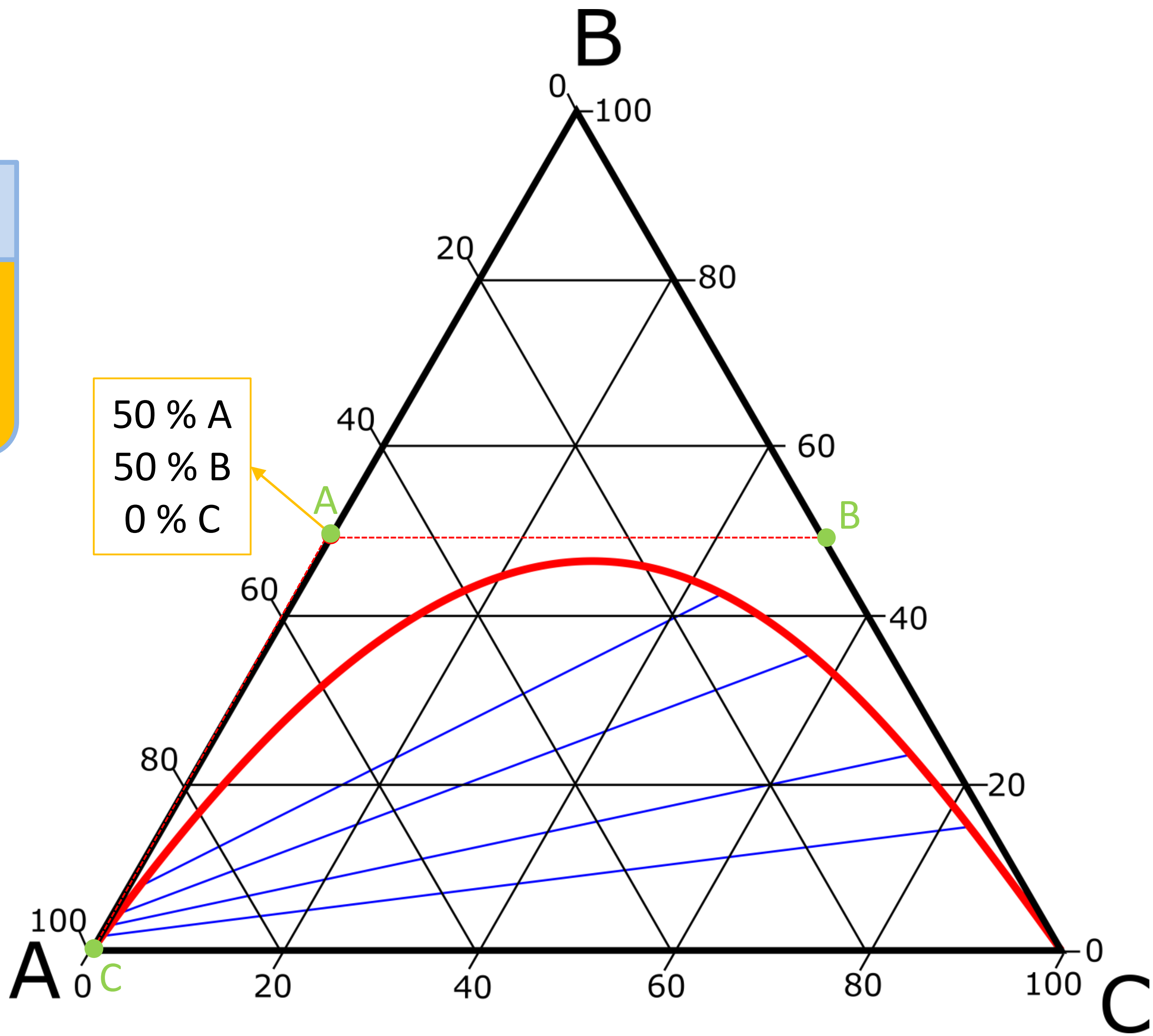
www.ugr.es/~quiored
Extracción
Líquido-
Líquido
Quiored 2004

Diagrama Triangular

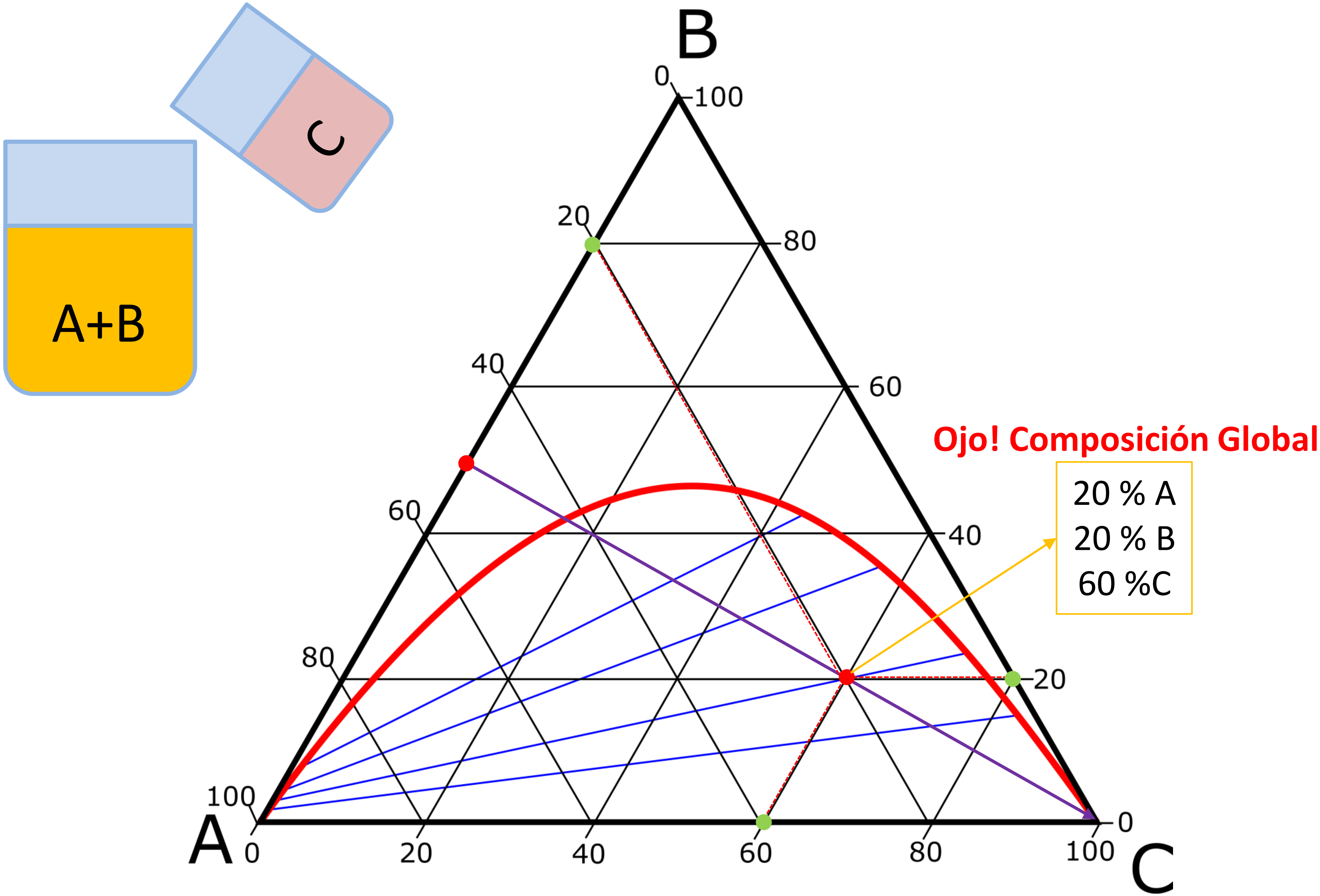


Mezcla A + B (a extraer)





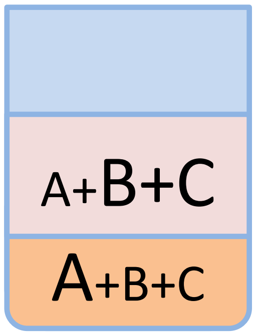
Agrego solamente C

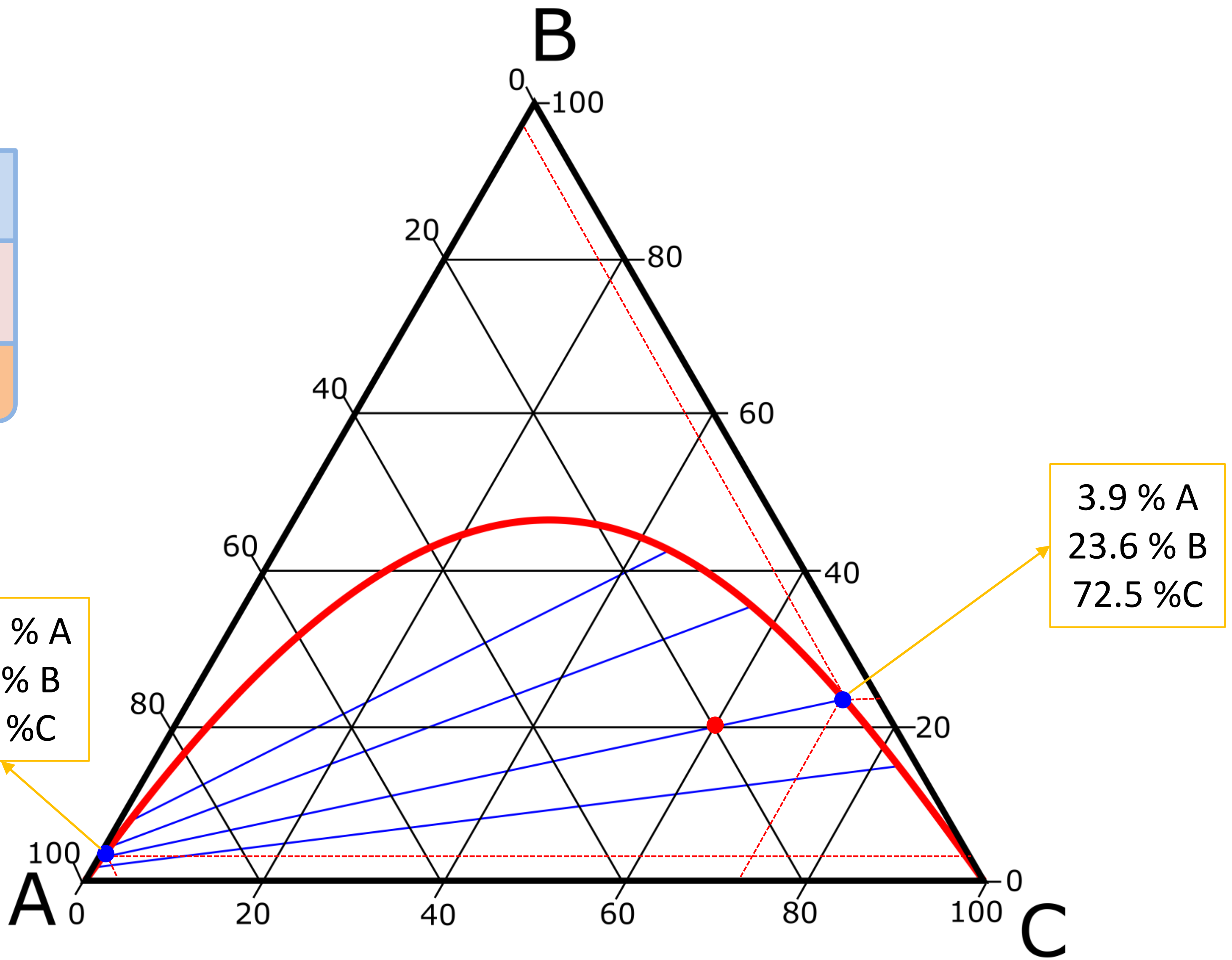


Matemática Superior Aplicada

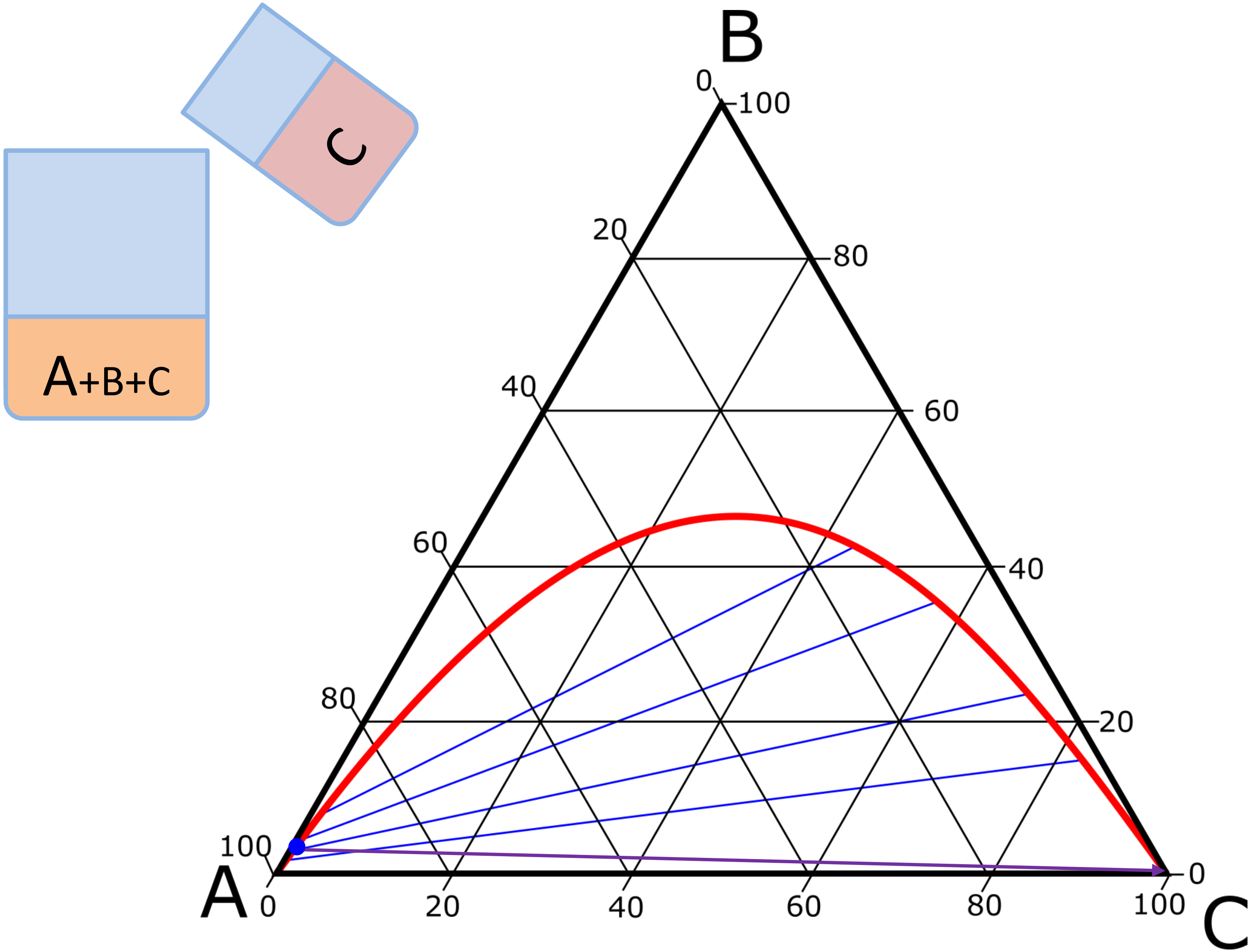
Se forman dos fases

UTN

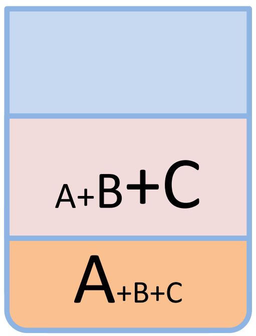


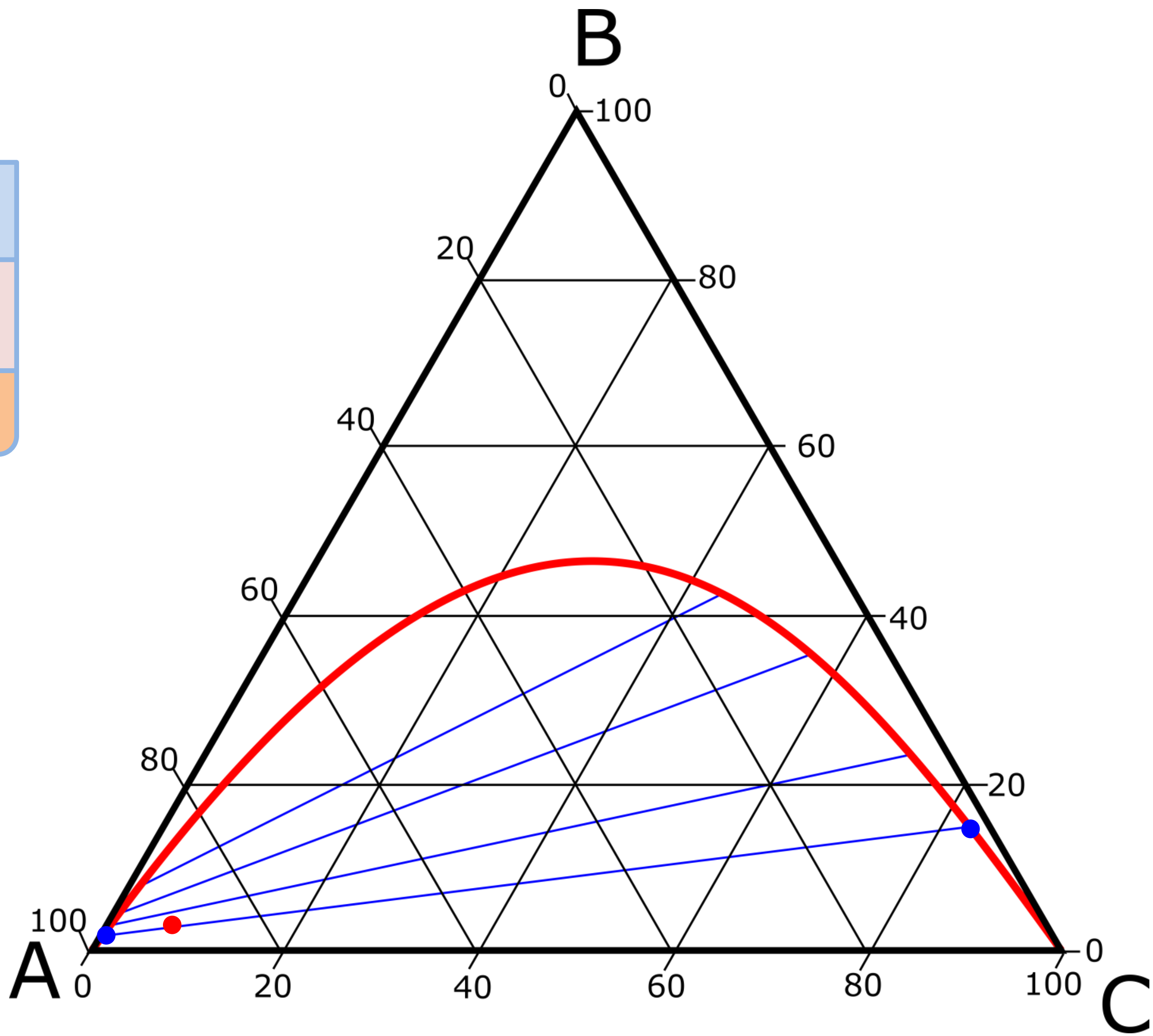


Se forman dos fases

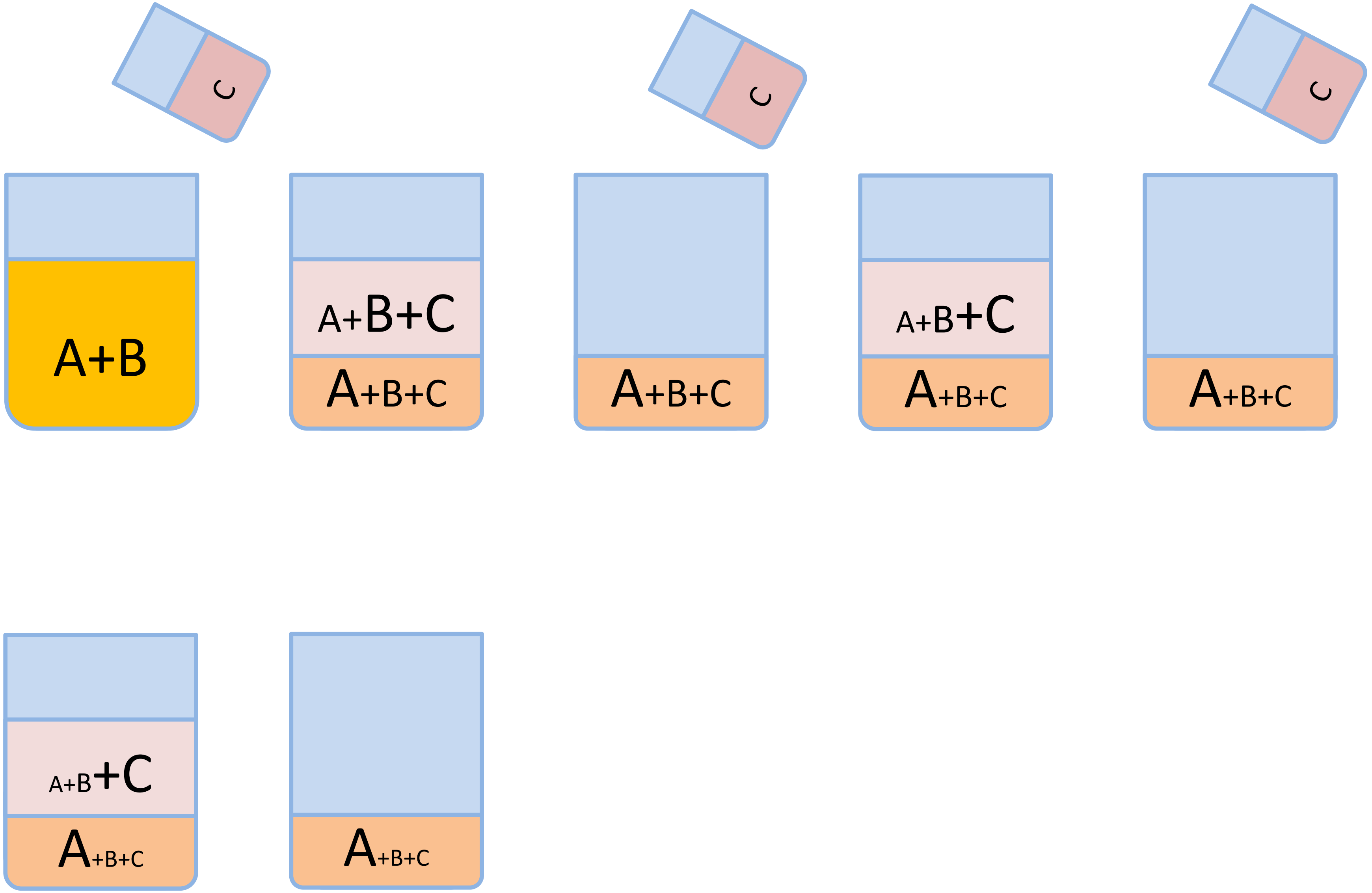


Se forman dos fases

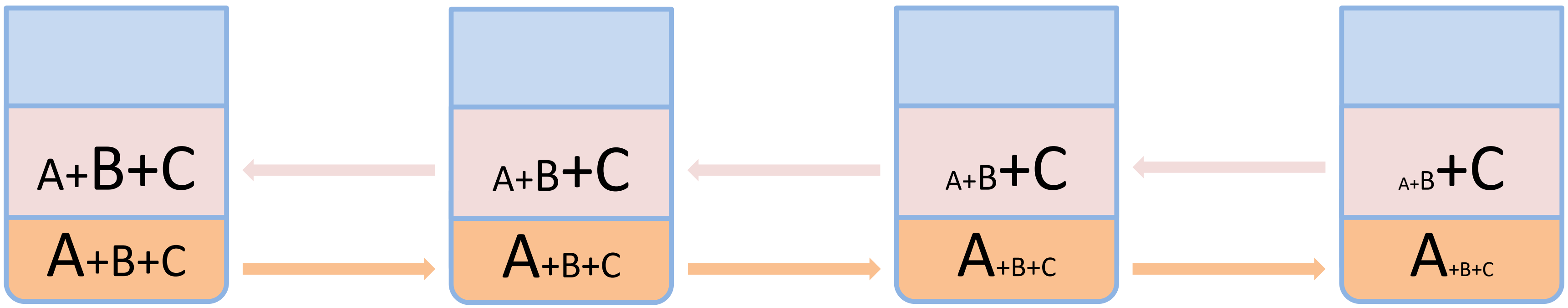




Escala Laboratorio (ineficiente)



Contra Corriente

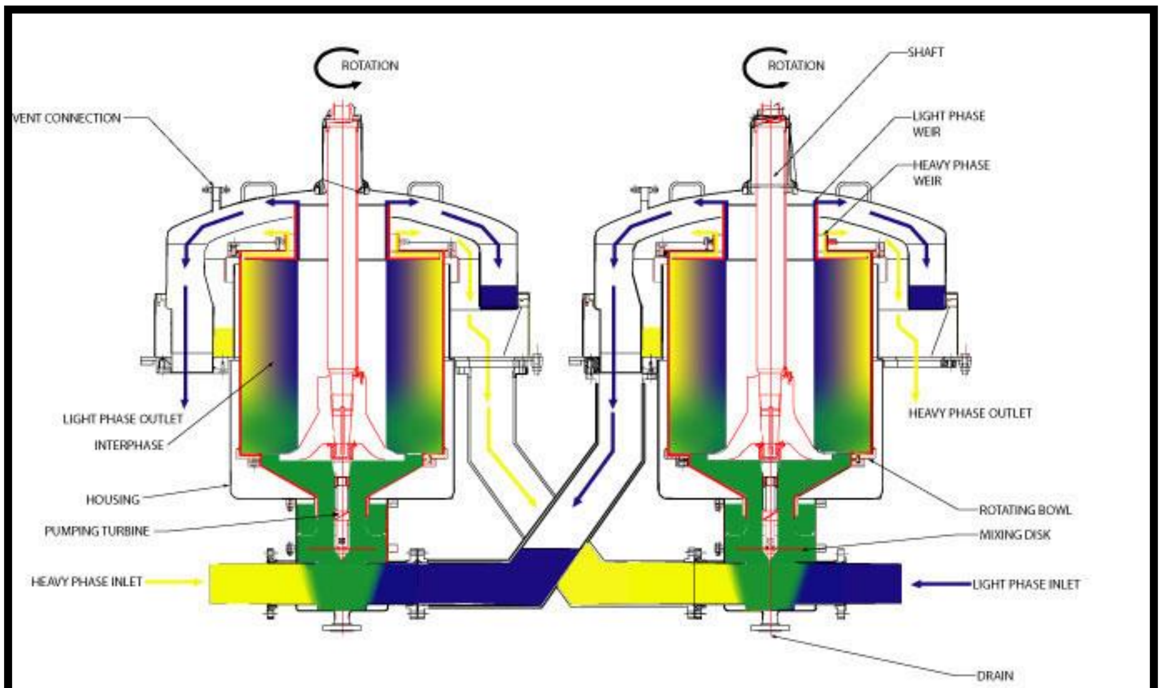


Aplicaciones

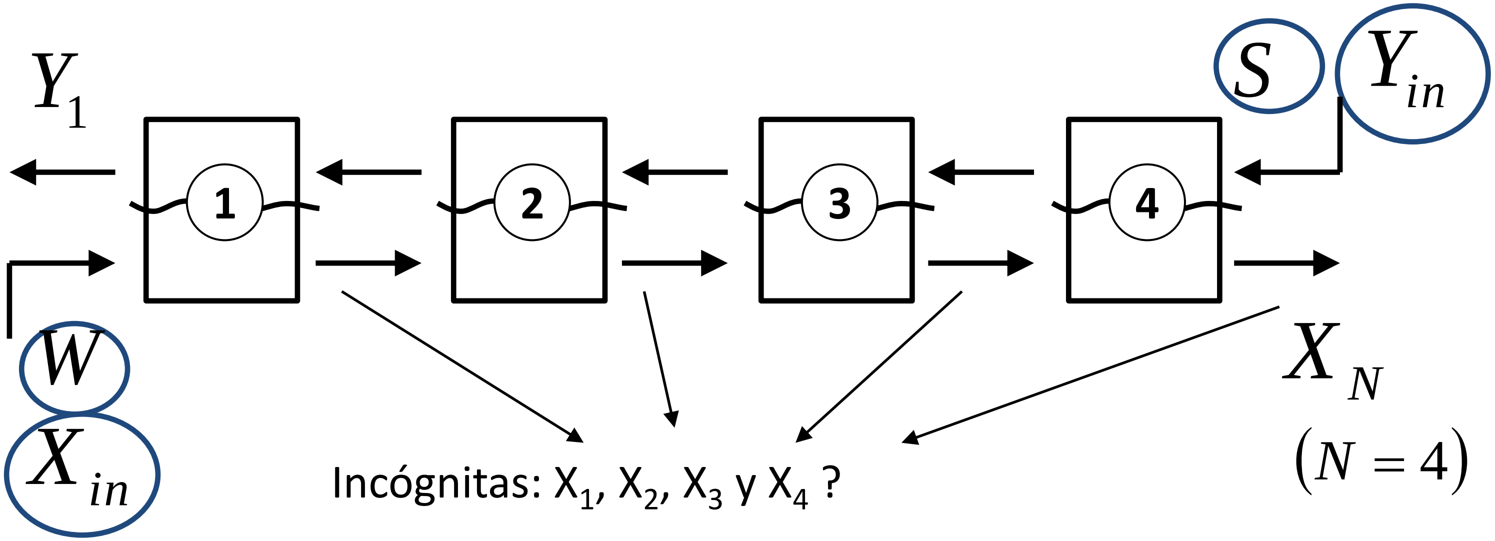
Planta piloto de extracción por solvente a escala de banco, usada para un programa de investigación sobre la extracción a contracorriente continua de metales preciosos.

Fuente: http://www.sxkinetics.com/spanish/index.sp.htm

Escala Industrial



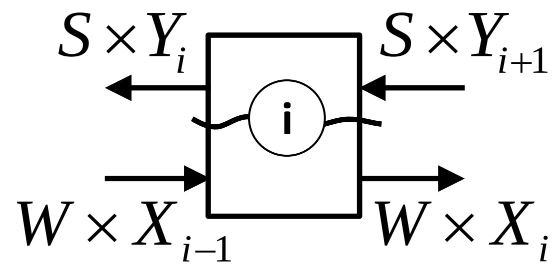
Sistema extracción Líquido-Líquido Multietapa en contracorriente



W [kg/h] = Corriente acuosa que contiene un soluto disuelto de composición X [kgsol/kgw]

S [kg/h] = Corriente de solvente, composición del soluto Y [kgsol/kgs]

Balance de masa en la etapa i:



$$WX_{i-1} + SY_{i+1} = WX_i + SY_i$$

Mediante la relación de equilibrio

$$Y_i = KX_i$$

Combinando estas dos expresiones

$$WX_{i-1} + SKX_{i+1} = WX_i + SKX_i = (W + SK)X_i$$

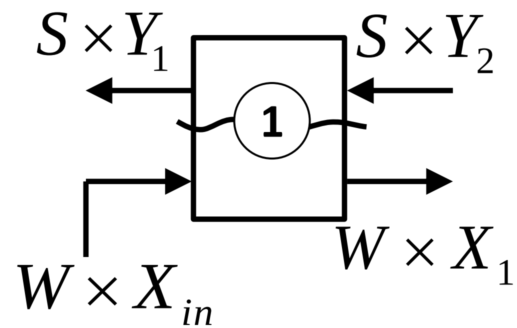
Dividiendo por W y reordenando

$$X_{i-1} - \left(1 + \frac{SK}{W}\right)X_i + \frac{SK}{W}X_{i+1} = 0$$

Modelado Matemático

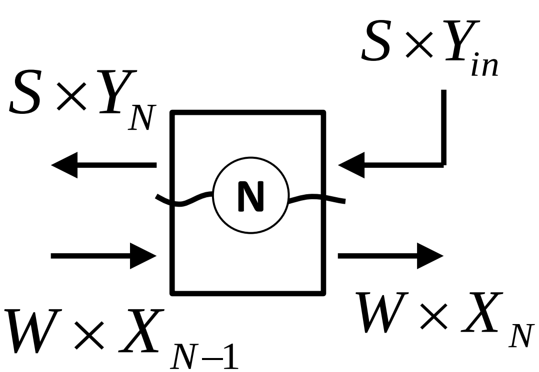
Etapa 1:

$$WX_{in} + SKX_2 = (W + SK)X_1$$



Dividiendo por W y reordenando

$$-\left(1 + \frac{SK}{W}\right)X_1 + \frac{SK}{W}X_2 = -X_{in}$$



Etapa N:

$$WX_{N-1} + SY_{in} = (W + SK)X_N$$

Dividiendo por W y reordenando

$$X_{N-1} - \left(1 + \frac{SK}{W}\right)X_N = -\frac{S}{W}Y_{in}$$

Modelado Matemático

Etapa 1:

$$-\left(1+\frac{SK}{W}\right)X_1+\frac{SK}{W}X_2=-X_{in}$$

Etapa i:

$$X_{i-1}-\left(1+\frac{SK}{W}\right)X_i+\frac{SK}{W}X_{i+1}=0$$

Etapa N:

$$X_{N-1}-\left(1+\frac{SK}{W}\right)X_N=-\frac{S}{W}Y_{in}$$

$$\chi\equiv\frac{SK}{W}$$

Etapa 1: $$-(1+\chi)X_1 + \chi X_2 = -X_{in}$$

Etapa i: $$X_{i-1} - (1+\chi)X_i + \chi X_{i+1} = 0$$

Etapa N: $$X_{N-1} - (1+\chi)X_N = -Y_{in}\frac{S}{W}$$

Para N=4 (cuatro etapas)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

Para N etapas:

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ X_{n-2} \\ X_{n-1} \\ X_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\dfrac{S}{W} \end{pmatrix}$$

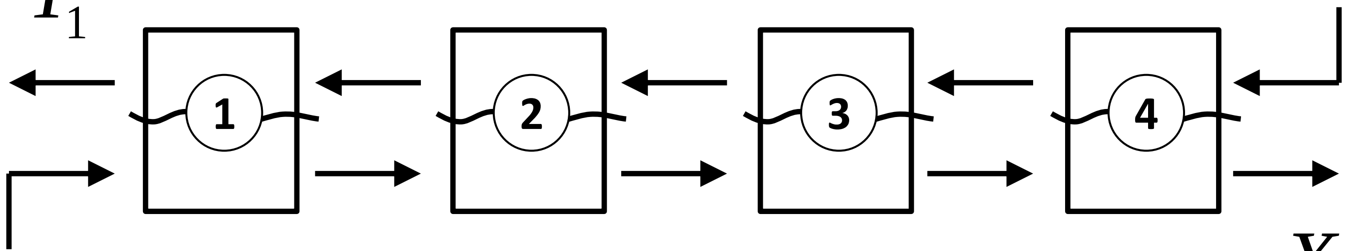
Matriz Tridiagonal

Ejemplo: 4 etapas – K=0.32

$$S = 2500\ \frac{kgS}{h}$$

$$Y_1$$

$$Y_{in} = 0\ \frac{kgsol}{kgS}$$



$$X_N$$

$$W = 700\frac{kgW}{h}$$

$$X_{in} = 0.43\frac{kgsol}{kgW}$$

$$\chi \equiv \frac{SK}{W} = \frac{2500\,\frac{kgS}{h}\,0.32}{700\,\frac{kgW}{h}} = 1.1428\ldots$$

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

$$\chi = \frac{SK}{W}$$

```
S=2500
K=0.32
W=700
Xin=0.43
Yin=0;
chi = S*K/W;
n=4;
```

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-Yin*S/W;
x=a\b;
```

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-chi*Yin/K;
x=a\b;
```

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-chi*Yin/K;
x=a\b;
```

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-chi*Yin/K;
x=a\b;
```

Código Scilab (n=4)


```
-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
```

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(1+\chi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\chi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(1+\chi) \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
```

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(1+\chi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\chi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(1+\chi) \end{pmatrix}$$

MSA Matemática Superior Aplicada

Código Scilab (n=4)

UTN

```
-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
```

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(1+\chi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\chi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(1+\chi) \end{pmatrix}$$

```
diag(ones(1,n-1),-1)
```

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
```

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(1+\chi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\chi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(1+\chi) \end{pmatrix}$$

Código Scilab (n=4)


```
-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
```

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(1+\chi) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -(1+\chi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -(1+\chi) \end{pmatrix}$$

```
diag(ones(1,n-1),-1)
```

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

```
chi*diag(ones(1,n-1),1)
```

$$\begin{pmatrix} 0 & \chi & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \chi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \chi \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
```

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix}$$

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\dfrac{S}{W} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-Yin*S/W;
x=a\b;
```

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -\chi \frac{Y_{in}}{k} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-Yin*S/W;
x=a\b;
```

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -\chi \dfrac{Y_{in}}{k} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-Yin*S/W;
x=a\b;
```

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -\chi \dfrac{Y_{in}}{k} \end{pmatrix}$$

¿Es la mejor forma de resolverlo?

NO, conviene utilizar el método de Thomas

Código Scilab (n=4)

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi) & \chi & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi) & \chi & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi) & \chi \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -\chi \frac{Y_{in}}{k} \end{pmatrix}$$

```
a=-(1+chi)*diag(ones(1,n),0)
a=a+diag(ones(1,n-1),-1)
a=a+chi*diag(ones(1,n-1),1)
b=zeros(n,1);
b(1)=-Xin;
b(n)=-Yin*S/W;
x=Thomas(a,b)
```

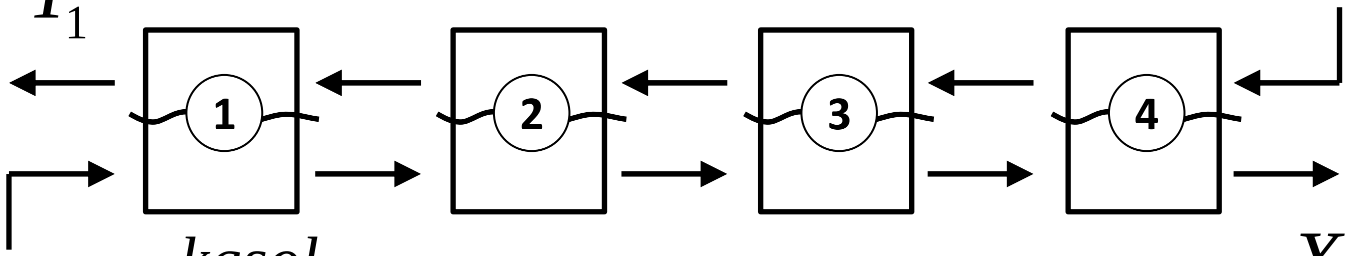
```
x  =

  0.3196510
  0.2230957
  0.1386097
  0.0646845
```

```
--> y=K*x
 y  =

  0.1022883
  0.0713906
  0.0443551
  0.0206991
```

Ejemplo: 4 etapas – K=0.32



$$Y_1$$

$$Y_{in} = 0\ \frac{kgsol}{kgS}$$

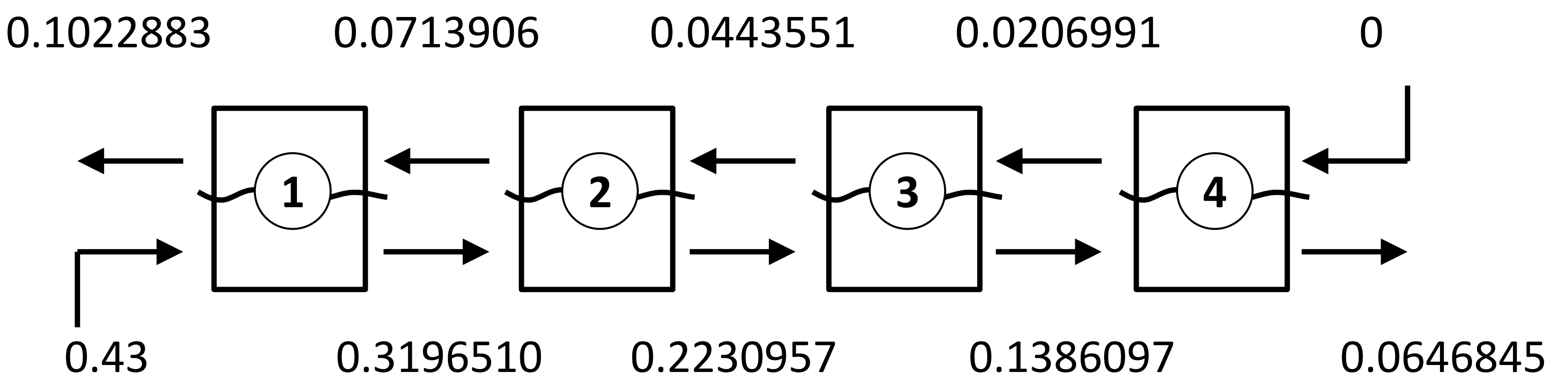
$$X_{in} = 0.43\frac{kgsol}{kgW}$$

$$X_4$$

```
x =            y =

   0.3196510     0.1022883
   0.2230957     0.0713906
   0.1386097     0.0443551
   0.0646845     0.0206991
```

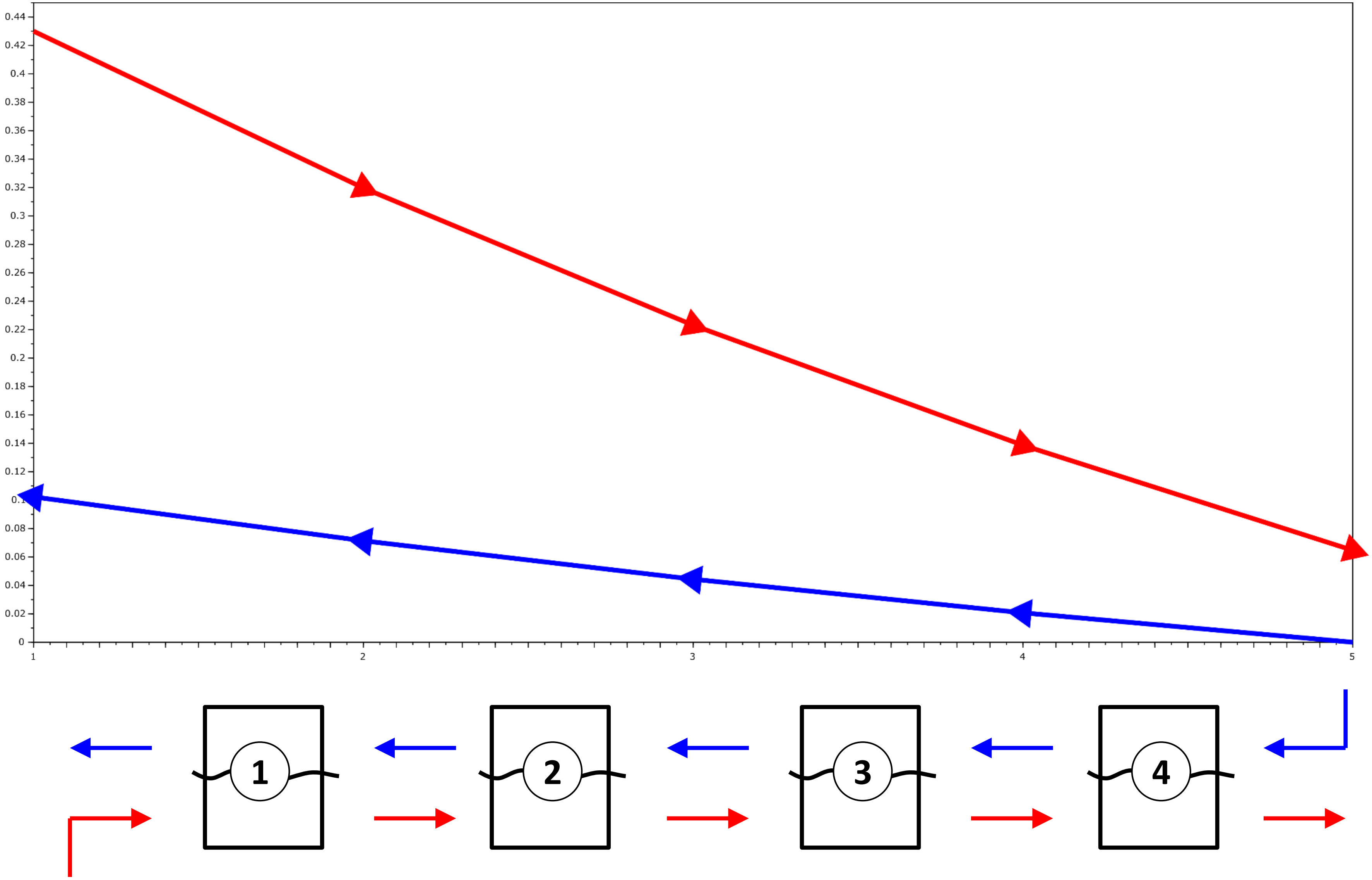
Ejemplo: 4 etapas – K=0.32




```
x  =          y  =

  0.3196510     0.1022883
  0.2230957     0.0713906
  0.1386097     0.0443551
  0.0646845     0.0206991
```

Ejemplo: 4 etapas – K=0.32



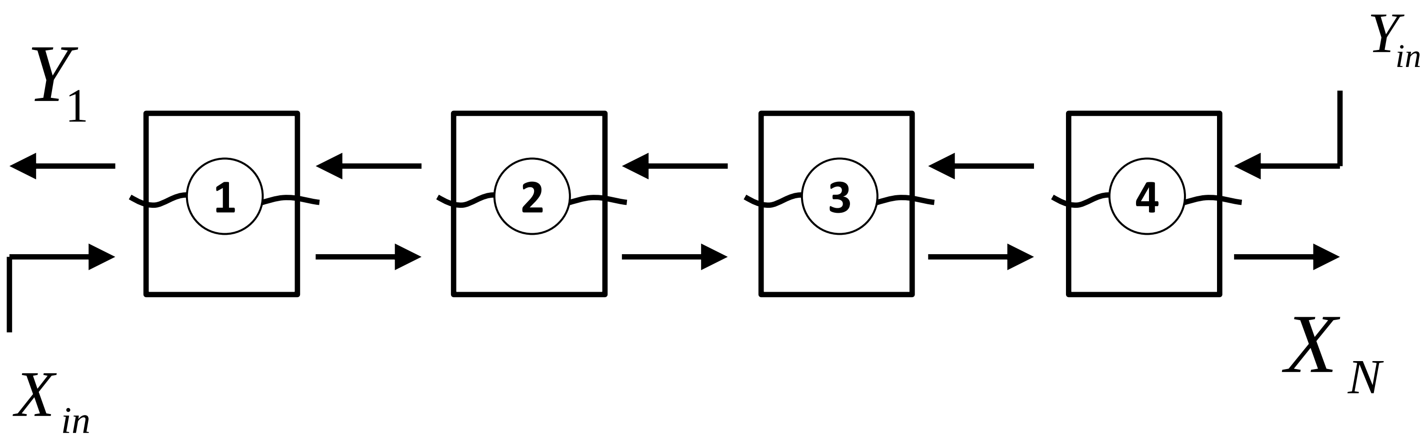
Unidad 2: Ejemplo de aplicación
Extractor Liquido-Liquido
(No lineal)

Prof.: Dr. Juan Ignacio Manassaldi

J.T.P: Ing. Amalia Rueda

Extractor Liquido-Liquido

- Como simplificación, en los ejemplos anteriores se consideró que la constante de equilibrio (K) era la misma para todas las etapas.
- La constante de equilibrio depende de varios factores pero principalmente de la temperatura y composición.
- La temperatura suele ser conocida e idéntica para todas las etapas pero la composición no es la misma en cada etapa de extracción.
- Por lo tanto, para mayor generalidad consideraremos la constante de equilibrio como función de composición.



Modelado Matemático No lineal

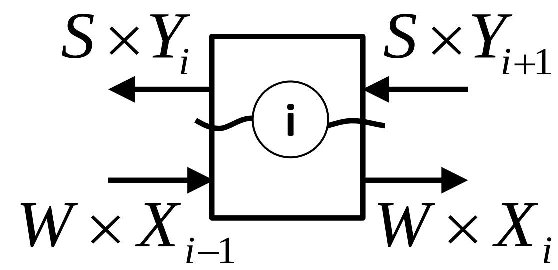
- Por lo tanto, la constante de reparto es ahora función de la composición:

$$K_i = f(X_i)$$

- La nueva condición de equilibrio es, por ejemplo:

$$Y_i = K_i X_i$$

- Recordamos el balance de materia en una etapa de equilibrio Liq-Liq:



$$WX_{i-1} + SY_{i+1} = WX_i + SY_i$$

Utilizamos la nueva relación de equilibrio:

$$WX_{i-1} + SK_{i+1}X_{i+1} = WX_i + SK_iX_i$$

- Reordenamos de manera similar al ejemplo anterior (lineal)

$$\frac{WX_{i-1} + SK_{i+1}X_{i+1}}{W} = \frac{WX_{i} + SK_{i}X_{i}}{W}$$

$$X_{i-1} + \frac{SK_{i+1}}{W}X_{i+1} = X_{i} + \frac{SK_{i}}{W}X_{i}$$

$$X_{i-1} + \frac{SK_{i+1}}{W}X_{i+1} = \left(1 + \frac{SK_{i}}{W}\right)X_{i}$$

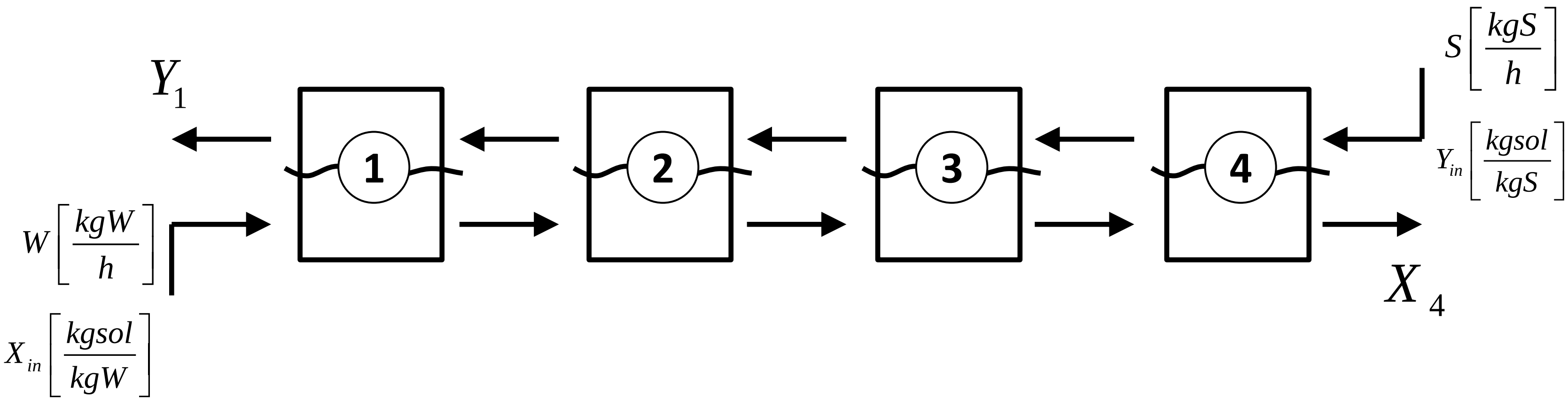
$$X_{i-1} - \left(1 + \frac{SK_{i}}{W}\right)X_{i} + \frac{SK_{i+1}}{W}X_{i+1} = 0$$

$$X_{i-1} - \left(1 + \frac{SK_i}{W}\right) X_i + \frac{SK_{i+1}}{W} X_{i+1} = 0$$

Ahora, cada etapa tiene su propio "chi": $\chi_i \equiv \dfrac{SK_i}{W}$

$$X_{i-1} - (1 + \chi_i) X_i + \chi_{i+1} X_{i+1} = 0$$

Modelado Matemático No Lineal



Etapa 1: $$-(1+\chi_1)X_1+\chi_2X_2=-X_{in}$$

Etapa 2: $$X_1-(1+\chi_2)X_2+\chi_3X_3=0$$

Etapa 3: $$X_2-(1+\chi_3)X_3+\chi_4X_4=0$$

Etapa 4: $$X_3-(1+\chi_4)X_4=-Y_{in}\frac{S}{W}$$

Modelado Matemático No Lineal

Matemática Superior Aplicada

UTN

Etapa 1: $$-\left(1+\chi_1\right)X_1+\chi_2 X_2=-X_{in}$$

Etapa 2: $$X_1-\left(1+\chi_2\right)X_2+\chi_3 X_3=0$$

Etapa 3: $$X_2-\left(1+\chi_3\right)X_3+\chi_4 X_4=0$$

Etapa 4: $$X_3-\left(1+\chi_4\right)X_4=-Y_{in}\frac{S}{W}$$

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi_1) & \chi_2 & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi_2) & \chi_3 & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi_3) & \chi_4 \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi_4) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -(1+\chi_1) & \chi_2 & 0 & 0 \\ 1 & -(1+\chi_2) & \chi_3 & 0 \\ 0 & 1 & -(1+\chi_3) & \chi_4 \\ 0 & 0 & 1 & -(1+\chi_4) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -X_{in} \\ 0 \\ 0 \\ -Y_{in}\frac{S}{W} \end{pmatrix}$$

$$\chi_i = \frac{SK_i}{W}, \quad K_i \rightarrow f(X_i)$$

$$\chi_i \rightleftarrows X_i$$

¿Como lo resolvemos?

Suponemos las composiciones de cada etapa

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4\right)$$

Calculamos el chi de cada etapa

$$\chi_i = \frac{Sf\left(X_i\right)}{W}$$

Resolvemos utilizando Thomas y obtenemos una solución

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4\right)^*$$

Comparamos la solución con los valores propuestos

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4\right) \quad \text{Vs} \quad \left(X_1, X_2, X_3, X_4\right)^*$$

Si no son similares repetimos la operación pero con

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4\right) = \left(X_1, X_2, X_3, X_4\right)^*$$

Extracción Líquido-Líquido

Example 10.3 A feed with a flowrate of 1000 kg·h^{-1} contains 30% acetic acid by mass in aqueous solution. The acetic acid (AA) is to be extracted with isopropyl ether to produce a raffinate with 2% by mass on a solvent-free basis. Equilibrium data are given in Table 10.1[1,8].

Table 10.1 Equilibrium data for acetic acid–water–isopropyl ether[1,8]. (Reproduced from Cambell H, 1940, *Trans AIChE*, **36**: 628 by permission of the American Institute of Chemical Engineers).

Mass fraction in water phase			Mass fraction either phase		
Acetic acid	Water	Isopropyl ether	Acetic acid	Water	Isopropyl ether
0.0069	0.981	0.012	0.0018	0.005	0.993
0.0141	0.971	0.015	0.0037	0.007	0.989
0.0289	0.955	0.016	0.0079	0.008	0.984
0.0642	0.917	0.019	0.0193	0.010	0.971
0.1330	0.844	0.023	0.0482	0.019	0.933
0.2550	0.711	0.034	0.1140	0.039	0.847
0.3670	0.589	0.044	0.2160	0.069	0.715

Promedio:

$$K = 0.3218$$

Ajuste lineal:

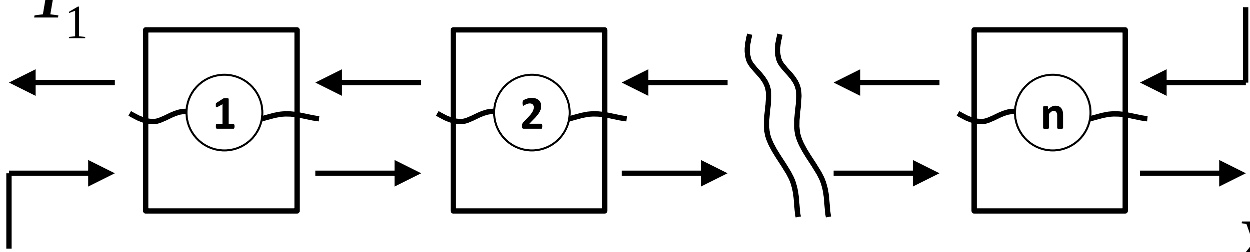
$$K_i = 0.3618\,X_i \;+\; 0.2566$$

Smith, R. (2005). Chemical Process: Design and Integration (Chichester, West Sussex, England ; Hoboken, NJ: Wiley).

Ejemplo: Extracción de AA

$$S = 2500 \ \frac{kg\ isopropyl}{h}$$

$$Y_1$$



$$Y_{in} = 0 \ \frac{kg\ AA}{kg\ isopropyl}$$

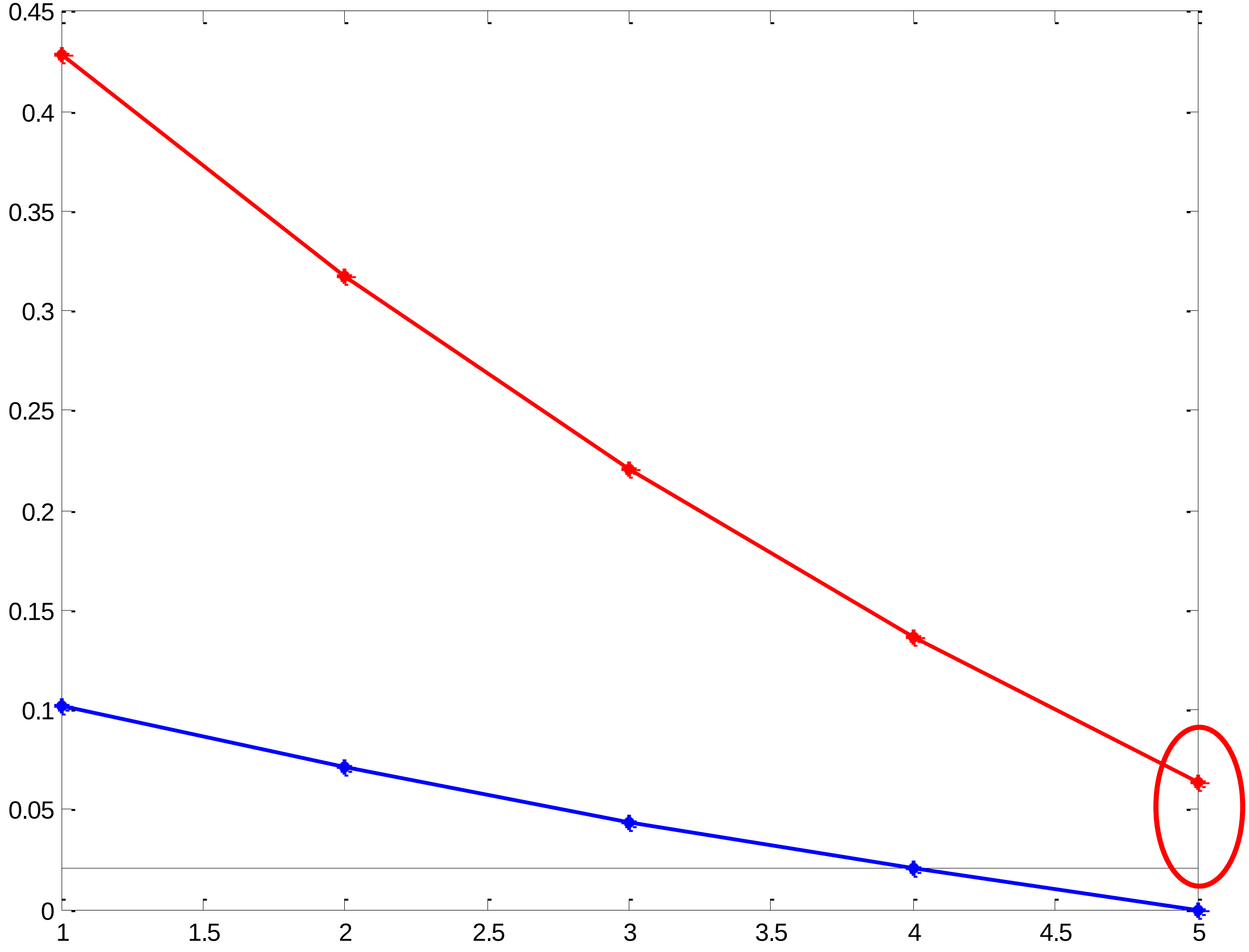
$$X_n \leq 0.0204$$

$$W = 700 \frac{kg\ agua}{h}$$

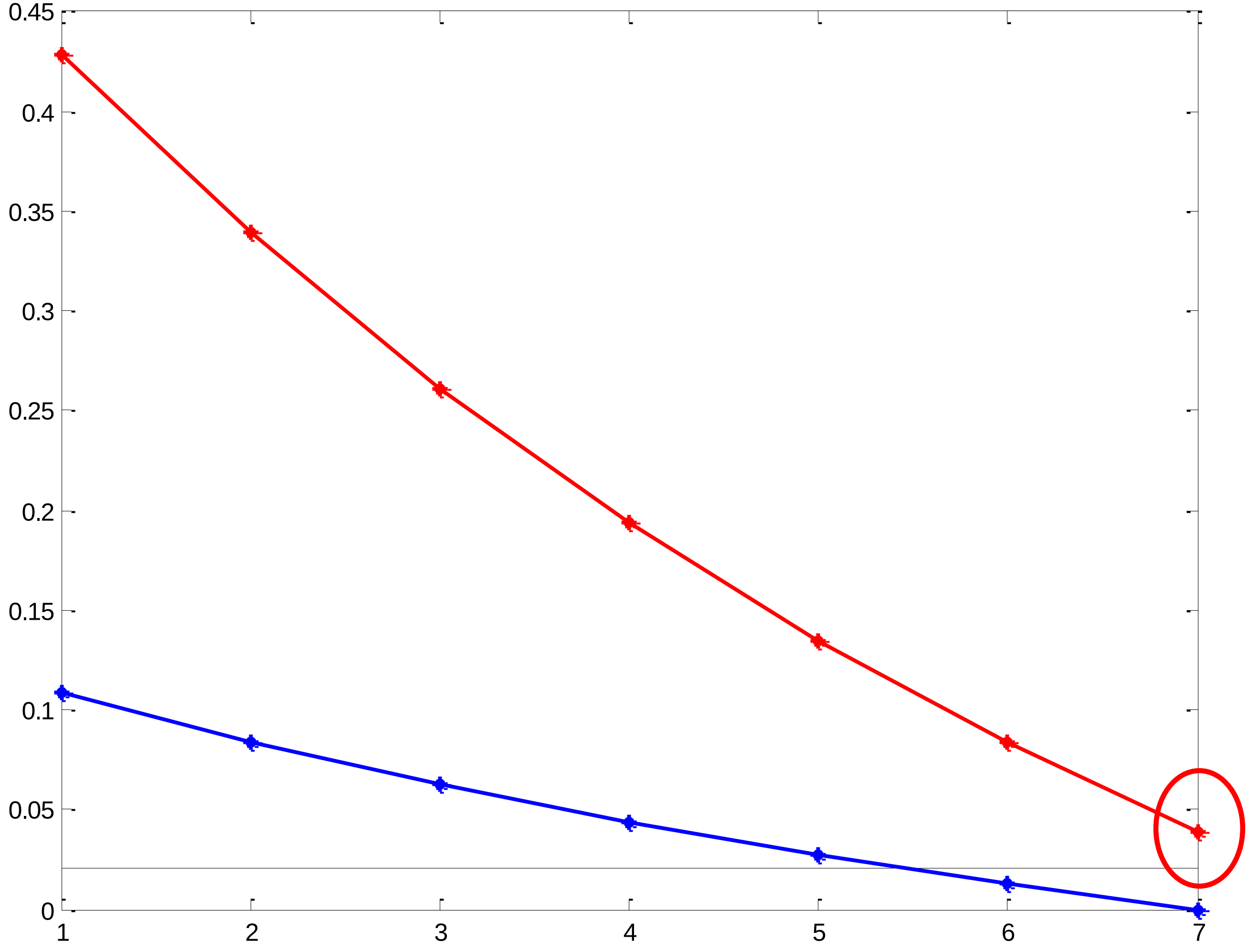
$$X_{in} = 0.4286 \frac{kg\ AA}{kg\ agua}$$

$$K = 0.3218$$

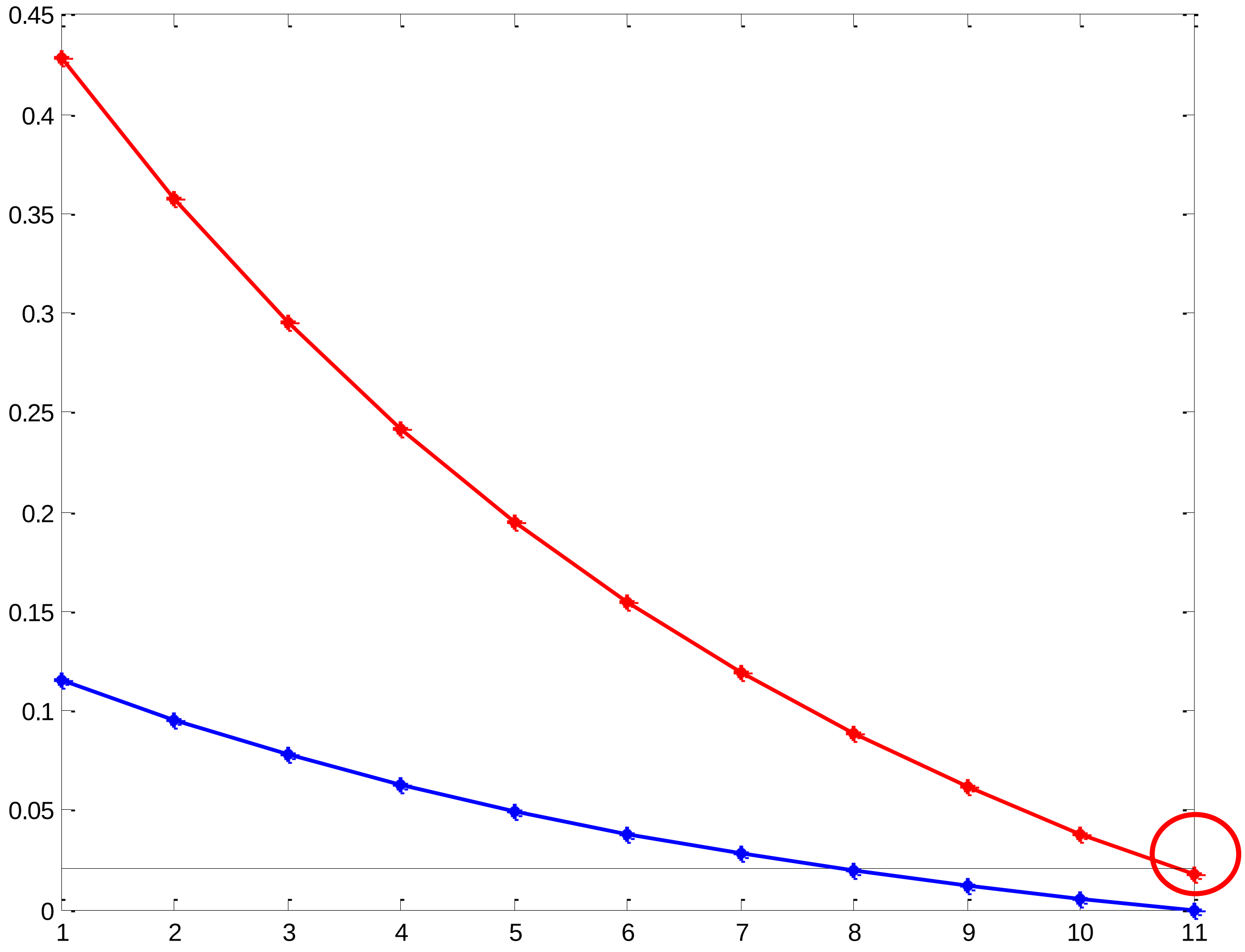
Ejemplo: 4 etapas



Ejemplo: 6 etapas



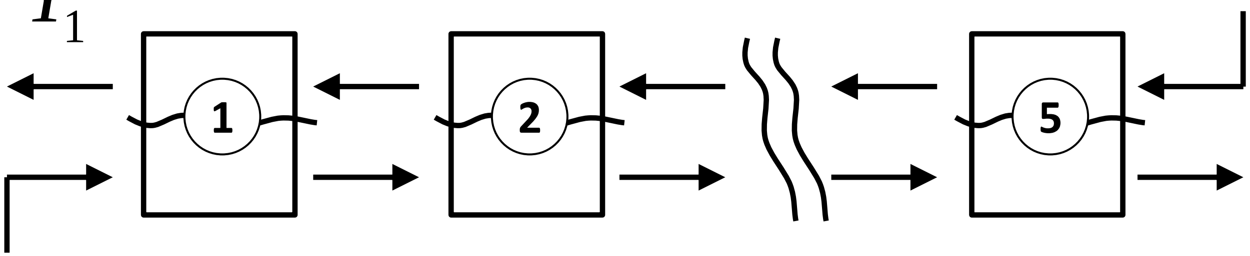
Ejemplo: 10 etapas



Ejemplo: Extracción de AA

$$S = 2500 \; \frac{kg\ isopropyl}{h}$$

$$Y_1$$



$$Y_{in} = 0 \; \frac{kg\ AA}{kg\ isopropyl}$$

$$¿\, X_n \,?$$

$$W = 700 \, \frac{kg\ agua}{h}$$

$$X_{in} = 0.4286 \, \frac{kg\ AA}{kg\ agua}$$

$$K_i = 0.3618\,X_i \; + \; 0.2566$$

Modelado Matemático No Lineal

Suponemos las composiciones de cada etapa

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5\right)$$

Calculamos el chi de cada etapa

$$\chi_i = \frac{S\left(0.3618X_i + 0.2566\right)}{W}$$

Resolvemos utilizando Thomas y obtenemos una solución

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5\right)^*$$

Comparamos la solución con los valores propuestos

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5\right) \quad \text{Vs} \quad \left(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5\right)^*$$

Si no son similares repetimos la operación pero con

$$\left(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5\right) = \left(X_1, X_2, X_3, X_4, X_5\right)^*$$

```
--> error = sqrt(sum((x-xi).^2));

xi  =          A  =                                                              x  =          error  =

 0.4286     -2.470241   1.3382486   0.          0.          0.                   0.2667348   0.2558243
 0.32645     1.        -2.3382486   1.2062562   0.          0.                   0.17209
 0.2243      0.         1.         -2.2062562   1.0742638   0.                   0.112459
 0.12215     0.         0.          1.         -2.0742638   0.9422714            0.0707679
 0.02        0.         0.          0.          1.         -1.9422714            0.0364356

xi  =          A  =                                                              x  =          error  =

 0.2667348  -2.261088   1.1387934   0.          0.          0.                   0.2986169   0.0776258
 0.17209     1.        -2.1387934   1.0617416   0.          0.                   0.2165442
 0.112459    0.         1.         -2.0617416   1.0078708   0.                   0.154959
 0.0707679   0.         0.          1.         -2.0078708   0.9635086            0.1021374
 0.0364356   0.         0.          0.          1.         -1.9635086            0.0520178

xi  =          A  =                                                              x  =          error  =

 0.2986169  -2.3022843  1.1962347   0.          0.          0.                   0.2934083   0.0199159
 0.2165442   1.        -2.1962347   1.1166578   0.          0.                   0.2064055
 0.154959    0.         1.         -2.1166578   1.0484046   0.                   0.143201
 0.1021374   0.         0.          1.         -2.0484046   0.983643             0.0922373
 0.0520178   0.         0.          0.          1.         -1.983643             0.046499
```

Modelado Matemático No Lineal

xi =

0.2986169
0.2165442
0.154959
0.1021374
0.0520178

A =

-2.3022843	1.1962347	0.	0.	0.
1.	-2.1962347	1.1166578	0.	0.
0.	1.	-2.1166578	1.0484046	0.
0.	0.	1.	-2.0484046	0.983643
0.	0.	0.	1.	-1.983643

x =

0.2934083
0.2064055
0.143201
0.0922373
0.046499

error =

0.0199159

xi =

0.2934083
0.2064055
0.143201
0.0922373
0.046499

A =

-2.295554	1.1831339	0.	0.	0.
1.	-2.1831339	1.1014647	0.	0.
0.	1.	-2.1014647	1.0356124	0.
0.	0.	1.	-2.0356124	0.9765119
0.	0.	0.	1.	-1.9765119

x =

0.2939532
0.208079
0.1455437
0.0944136
0.0477678

error =

0.0038642

xi =

0.2939532
0.208079
0.1455437
0.0944136
0.0477678

A =

-2.2962581	1.1852964	0.	0.	0.
1.	-2.1852964	1.1044918	0.	0.
0.	1.	-2.1044918	1.0384244	0.
0.	0.	1.	-2.0384244	0.9781514
0.	0.	0.	1.	-1.9781514

x =

0.2939694
0.2079055
0.1451941
0.0940409
0.0475398

error =

0.0005861

```
xi  =

   0.2939496
   0.2079053
   0.1452237
   0.0940821
   0.0475669
```

```
A  =

 -2.2962534   1.1850719   0.          0.          0.
  1.         -2.1850719   1.1040784   0.          0.
  0.          1.         -2.1040784   1.0379961   0.
  0.          0.          1.         -2.0379961   0.9778917
  0.          0.          0.          1.         -1.9778917
```

```
x  =

   0.2939496
   0.2079053
   0.1452237
   0.0940821
   0.0475669
```

```
error  =

   3.259D-08
```

```
W=700;
xin=0.4286;
S=2500;
yin=0;
n=5;
b=zeros(n,1);
b(1)=-xin;
xi=linspace(xin,0.02,n)';
error =1;
while error > 1e-7
chi = S*(0.3618*xi + 0.2566)/W;
A = diag(ones(1,n-1),-1) + diag(-(1+chi),0) + diag(chi(2:n),1);
x = Thomas(A,b);
error = sqrt(sum((x-xi).^2));
xi = x;
end
```

Datos

Valor propuesto de "arranque"

Chi de cada etapa

Matriz del sistema

Error

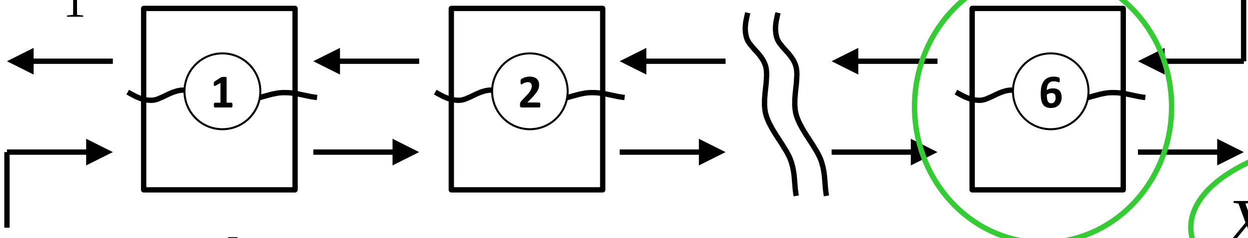
Matemática Superior Aplicada

Ejemplo: Extracción de AA

UTN

$$S = ¿? \frac{kg\ isopropyl}{h}$$

$$Y_1$$



$$Y_{in} = 0 \frac{kg\ AA}{kg\ isopropyl}$$

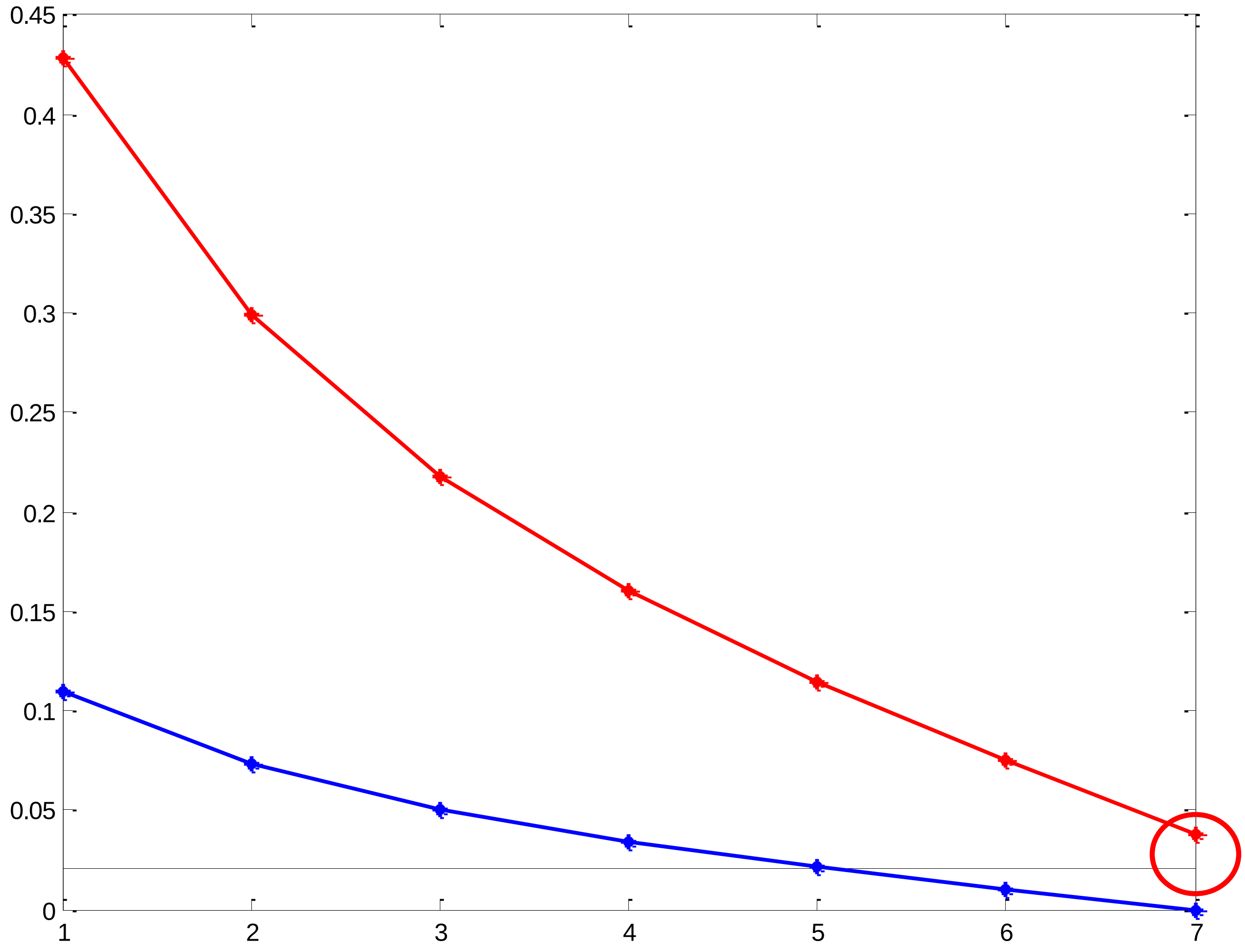
$$X_n \leq 0.0204$$

$$W = 700 \frac{kg\ agua}{h}$$

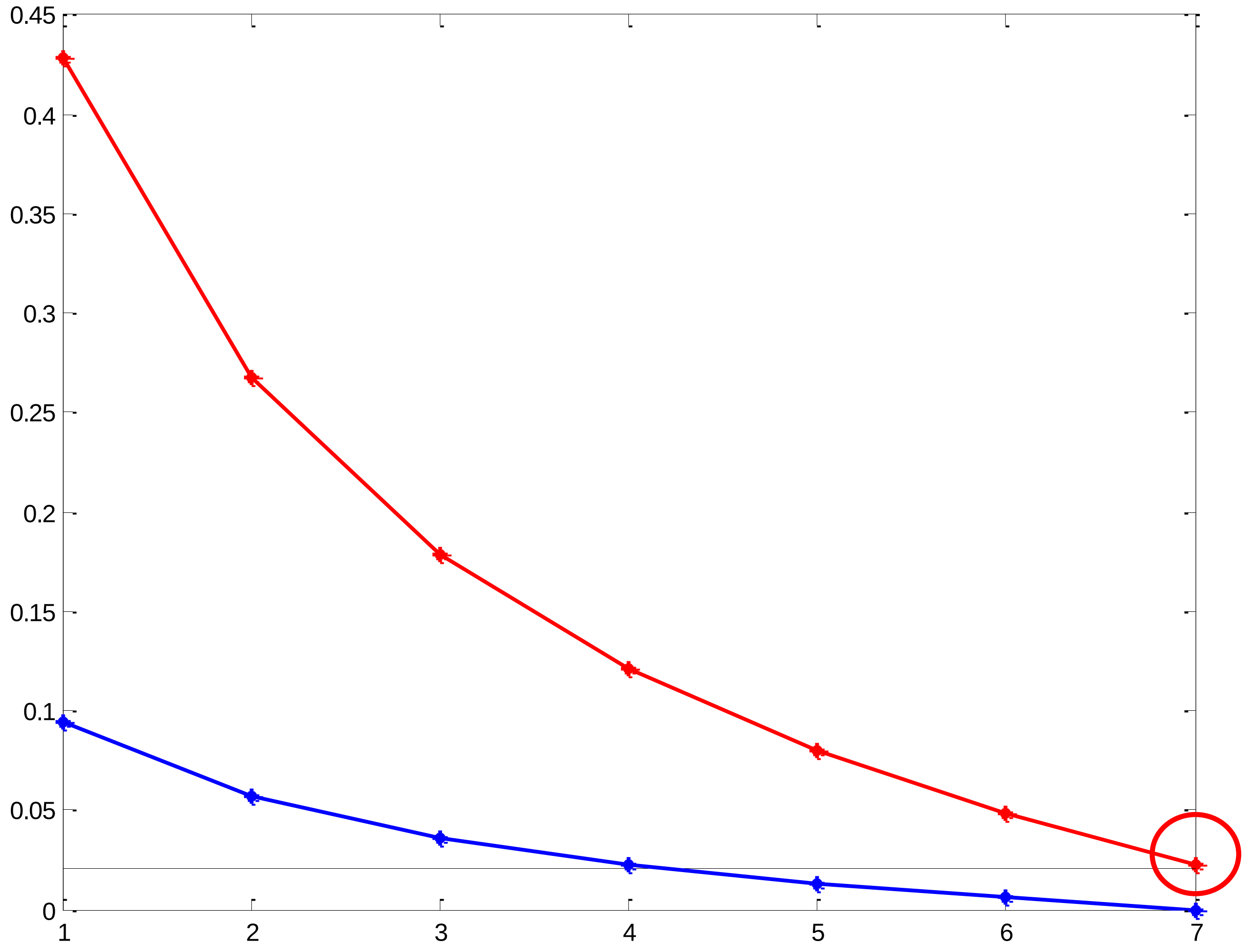
$$X_{in} = 0.4286 \frac{kg\ AA}{kg\ agua}$$

$$K_i = 0.3618\,X_i + 0.2566$$

Ejemplo: S=2500



Ejemplo: S=3000



Ejemplo: S=3200