



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES
"ZARAGOZA"

19

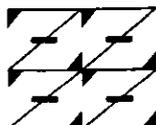
MODELACION PARA LA
EXTRACCION
LIQUIDO-LIQUIDO

297244

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUIMICO
P R E S E N T A :
RUBEN LOPEZ LOPEZ

ASESOR:
I.Q. ANTONIO AVALOS RAMIREZ

U. N. A. M.
F E S
ZARAGOZA



LO HUMANO
ES JE DE NUESTRA REFLEXION

MAYO, 2001



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A mis padres Nelly e Isidro por todo el apoyo y cariño que me han dado.

Para Araceli, Jorge e Isidro que me ayudan y me quieren.

Para mis amigos que conocen este camino y saben lo que significa.

MODELACIÓN PARA LA EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO

INTRODUCCIÓN	1
Capítulo 1	
1.0 Operaciones de separación	7
1.1 Historia de la extracción líquido-líquido	10
1.2 Campos de utilidad	14
1.3 Equipos de extracción	16
Capítulo 2	
2.0 Características necesarias de los disolventes	24
2.1 Cálculos gráficos de etapas múltiples	27
2.2 Extracción de una sola etapa	31
2.3 Extracción a varias etapas a corriente cruzada	33
2.4 Extracción en varias etapas a contracorriente continua	36
2.5 Método analítico para calcular el número de etapas requeridas	38
2.6 Extracción con reflujo	40
2.7 Extracción con dos alimentaciones	45
2.8 Extracción fraccionada	51
2.9 Diseño con diagramas másicos	54
2.10 Descripción del método McCabe-Thiele para extracción	61
Capítulo 3	
3.1 Métodos rigurosos para extracción líquido - líquido.	66
3.2 Método de la \emptyset - simple	83
Capítulo 4	
4.1 Ejemplo de método gráfico.	98
4.2 Ejemplo de método riguroso.	101
Conclusiones	116
Recomendaciones	120
Bibliografía	122

INTRODUCCIÓN

Durante el transcurso de la carrera se contempló amplio espectro de las labores del ingeniero químico. Dentro de esta gama de funciones, hay una que llamó poderosamente la atención, la cual está enfocada a la purificación de un componente, ya sea esto después una reacción, o para poder separar mezclas que no son producto de una reacción.

Para separar una mezcla, las operaciones que se pueden realizar son de dos tipos: separación mecánica, o separación por medio de transferencia de masa.

La separación mecánica no implica un cambio en la composición de las mezclas, un ejemplo de esto es la filtración de un sólido a partir de una suspensión en un líquido, la operación de cribado o la separación de algunas partículas basándose en su densidad.

La separación por medio de transferencia de masa tienen como uno de sus aspectos la transferencia de un componente, de una fase a otra a escala molecular. Un ejemplo sencillo indicará el propósito de la operación y alguna de sus características. Si una disolución de ácido acético en agua se agita con un líquido como acetato de etilo, parte del ácido pero relativamente poco agua entrará en la fase éster. Puesto que las densidades de la capa acuosa y la del éster son diferentes en el equilibrio, se separarán al cesar la agitación; también se pueden separar por decantación.

Este es un ejemplo de contacto por etapas; puede llevarse a cabo en lotes o en forma continua.

En el tema a tratar la parte de interés en la extracción líquido-líquido es la transmisión de un componente, debido a la diferencia de concentraciones, de una zona de mayor a una de menor concentración.

A pesar de la aplicación cada vez mayor de la extracción líquida debida a su gran adaptabilidad y no obstante la gran cantidad de investigaciones realizadas es una operación unitaria relativamente incipiente.

Contacto directo de dos fases inmiscibles

Esta categoría es la más importante de todas e incluye a la mayoría de las operaciones utilizadas en la ingeniería química. En este caso, se toma ventaja del hecho de que, con muy pocas excepciones, las composiciones de las fases son distintas en un sistema de dos fases de varios componentes en equilibrio.

Puede presentarse en alguna de sus múltiples aplicaciones que, la separación llevada a cabo de cómo producto final una sustancia pura, ya que en el sistema en equilibrio contiene sólo un componente.

En estos sistemas al llegar al equilibrio, ninguna de las fases consta de un solo componente una vez que se alcanza el mismo. Por ello, cuando inicialmente se ponen en contacto las dos fases, no tienen (excepto en forma casual) la composición que tienen en el equilibrio.

Estas operaciones es difícil que se realicen al 100%, aunque se pueden llevar hasta un porcentaje cercano, tanto como se desee, por medio de manipulaciones adecuadas. Las operaciones que se mencionan a continuación abarcan las posibilidades de contacto interfacial.

- Gas - gas
- Gas - líquido
- Gas - sólida
- Líquido - líquido
- Líquido - sólido
- Sólido - sólido

Por medio de esta lista de los métodos para la separación de soluciones, se puede ver que este campo es bastante amplio, por lo que se decidió delimitarlo a un sólo tipo de operación, la extracción líquido - líquido. Esto debido a que es un tema de amplia importancia en la Ingeniería Química, y que es usado con frecuencia en la industria farmacéutica, al igual que en la metálica, tratamiento de efluentes entre otras. Lo que lo hace necesario un amplio estudio de los métodos ocupados para su cálculo. Aunque los procedimientos para el procesamiento de los datos es similar al ocupado en la destilación, es importante conocer a detalle cada uno de sus pasos. Por las razones antes descritas es que se decidió escoger la extracción líquido - líquido como tema de estudio de este trabajo.

Métodos de cálculo de equipos

Para poder realizar el diseño de un equipo de extracción existen varios métodos, uno de estos son los cálculos gráficos, los cuales se utilizan para poder ver las relaciones existentes entre un conjunto de variables, lo cual hace que su uso sea común para la especificación de sistemas de contacto de varias etapas; debido a que involucra relaciones de equilibrio, balances de materia y energía. Uno de los problemas de este tipo de métodos es que durante su graficación pueden existir problemas de amontonamiento de líneas de unión, con lo que se pueden producir errores.

Un procedimiento diferente es el de los métodos analíticos los cuales son un conjunto de algoritmos empíricos y aproximados para la resolución de los problemas de separación. Aunque son validos para diseños preliminares, su exactitud es mayor que la del otros método mencionado. Uno de sus defectos es que hasta antes del apogeo de los sistemas computacionales, el llevar a cabo uno de estos sistemas resultaba engorroso debido a la gran cantidad de cálculos necesarios debido a la naturaleza iterativa de este tipo de problemas.

En los capítulos II y III se presenta una revisión de los métodos mencionados anteriormente con los que se da una visión general de los pasos que se deben de seguir para el diseño de este tipo de equipos.

En el capítulo IV se presentan dos ejemplos del diseño de estos equipos. Los ejemplos que se presentan son uno de un cálculo gráfico y en el otro se utiliza un método riguroso, con lo cual se desea explicar de una forma práctica la diferencia entre ambos métodos así como también sus ventajas y sus inconvenientes, para comprender mejor la naturaleza de cada método y sus posibles áreas de aplicación.

Objetivos

Generales

- Revisión de los métodos para el diseño y cálculo de extractores existentes.
- Comparar las ventajas y desventajas de un método grafico y uno riguroso a través de ejemplos de los mismos.

CAPITULO 1

**ANTECEDENTES DE LA
EXTRACCION LIQUIDO-LIQUIDO**

1.0 Operaciones de separación

Una de las actividades de más importancia del Ingeniero químico está relacionada con el hecho de modificar las composiciones de mezclas y soluciones por medio de operaciones que no implican necesariamente reacciones químicas. Por lo común estas operaciones se encaminan a obtener un componente, o a separarlo.

En caso de que sea una mezcla, las operaciones que se realizan para separar un determinado componente son de dos tipos: separación mecánica o separación por medio de transferencia de masa y/o calor.

La separación mecánica no implica un cambio en la composición de las mezclas, un ejemplo de esto es la filtración de un sólido a partir de una suspensión en un líquido, la operación de cribado o la separación de algunas partículas basándose en su densidad.

La separación por medio de transferencia de masa tienen como uno de sus aspectos la transferencia de un componente, de una sustancia a otra a escala molecular. Un ejemplo de esto, es cuando el agua, por evaporación pasa de una alberca a una corriente de aire que fluye sobre la superficie del agua, las moléculas de vapor de agua se difunden, a través de las moléculas de aire en la superficie, dentro de la masa de aire, la cual las arrastra consigo.

El tema por tratar es la transmisión de un componente, debido a la diferencia de concentraciones, de una zona de mayor a una de menor concentración.

Para tener un panorama general, acerca de la extracción con disolventes, es menester dar una clasificación general de las operaciones de transferencia de masa. Este tipo de procedimientos se puede dividir en dos grandes grupos que son: Contacto directo entre dos fases inmiscibles y fases separadas por una membrana.

Contacto directo de dos fases inmiscibles

Esta categoría es la más importante de todas e incluye a la mayoría de las operaciones utilizadas en la ingeniería química. En este caso, se aprovecha el hecho de que, con muy pocas excepciones, las composiciones de las fases son distintas en un sistema de dos fases de varios componentes en equilibrio.

En algunos casos, la separación llevada a cabo por medio del contacto directo de dos fases inmiscibles da como resultado una sustancia casi pura, debido a que una de las fases en equilibrio contiene sólo un componente. Una muestra de este caso, es el vapor en contacto con una solución salina acuosa, en el equilibrio no contiene sal, sin importar la concentración de ésta en el líquido.

En las operaciones de este tipo, ninguna de las fases en el equilibrio consta de un único componente. Por ello, cuando se ponen inicialmente en contacto las dos fases, no tienen (excepto en forma casual) la composición que tienen en el equilibrio.

Debido a esto, el sistema trata de alcanzar el equilibrio, mediante un movimiento de los componentes participantes en el proceso. Este tipo de operaciones es difícil que se realicen al 100%, aunque se pueden llevar hasta un porcentaje cercano (aprox. 99%), tanto como se desee, por medio de manipulaciones adecuadas. A continuación se mencionan las posibilidades de contacto interfacial.

Gas- líquido Si todos los componentes del sistema se distribuyen entre las fases en el equilibrio, la operación se conoce como destilación fraccionada (o con frecuencia simplemente destilación). En este caso, la fase gaseosa se crea a partir del líquido por calentamiento; o a la inversa se crea líquido a partir de la eliminación de calor del vapor.

Las dos fases pueden ser soluciones; sin embargo, ambas poseen sólo un componente común (o grupo de componentes) que se distribuye en las fases. Cuando una mezcla de gases se pone en contacto con un líquido, y en este último se disuelve uno de los gases, a esta operación se le llama absorción. En forma contraria si se pone en contacto una mezcla líquido-gas con un gas y parte del gas de la mezcla se une con el gas que está en contacto con la mezcla, a esta operación se le conoce como desorción.

Si la fase líquida es un líquido puro que sólo contiene un componente, mientras que la gaseosa contiene dos o más, la operación se conoce como humidificación o deshumidificación, según el sentido de la transferencia.

Gas- sólido Nuevamente conviene clasificar las operaciones en esta categoría de acuerdo con el número de componentes que aparecen en las dos fases.

Si se va a evaporar parcialmente una solución sólida sin la aparición de una fase líquida, la nueva fase vapor formada y el sólido residual contienen todos los componentes originales, pero en proporciones diferentes; la operación se llama destilación fraccionada.

Sin embargo, puede suceder que no todos los componentes estén presentes en las dos fases. Si un sólido humedecido con un líquido volátil se expone a un gas relativamente seco, el líquido abandona el sólido y difunde en el gas, operación que se conoce como secado, y en forma inversa como desorción.

Líquido – líquido Las separaciones en que interviene el contacto entre dos fases líquidas insolubles se conocen como operaciones de extracción líquida. En esta operación es de vital importancia la elección del disolvente, ya que este debe tener una afinidad superior por el soluto que la que tiene el líquido en el cual se encuentra disuelto, además de ser inmiscible o parcialmente inmiscible con el otro disolvente.

Líquido- sólido. Cuando todos los componentes se encuentran presentes en las dos fases en equilibrio la operación se llama cristalización fraccionada. Aunque si bien son más frecuentes los casos en que las fases son soluciones (o mezclas) que contienen un único componente en común.

La disolución selectiva de un componente en una mezcla sólida mediante un disolvente líquido se llama lixiviación, la difusión en este sistema se efectúa sólo en la fase líquida. Si la difusión se realiza en el sentido opuesto se conoce como adsorción.

1.1 Historia de la extracción líquido-líquido

En el año 500 a.C. los filósofos griegos reconocían cuatro elementos: tierra, agua, aire, y fuego. Este punto de vista armoniza con el concepto presente de los tres estados físicos de agregación y el calor. Aristóteles enfatizaba que esos “elementos” no eran eternos, pero podían ser cambiados unos a otros. Cinco siglos antes, el hombre había hallado que ciertos minerales verdes cuando se calentaban, de ellos se obtenía cobre metálico. En la época de Aristóteles se sabía como producir metales como cobre, oro, estaño, plata, hierro, plomo, mercurio y arsénico. Además, por medio de la transmutación de ciertas tierras a través del fuego, se hacía cerámica y vidrios. Este arte se desarrollo probablemente por los egipcios, realmente los primeros químicos. Alquimia es una palabra derivada del griego y el árabe y significa “ el arte de las transmutaciones”. Se fermentaban jugos de fruta; se separaban aceites y grasas de partes de vegetales y animales, y se purificaban por digestión con tierras, huesos, y cosas por el estilo. Crisoles, y demás partes del equipo de destilación se utilizaban por los antiguos alquimistas. Lo que lleva a pensar que esos alquimistas mezclaban continuamente, calentaban, hervían, enfriaban, etc., todas las cosas que pudieran obtener de la naturaleza.

Los propósitos de todas estas operaciones eran variados: lámparas, armas, pigmentos, perfumes y venenos; cosméticos y medicinas contra el envejecimiento y el elixir de la vida; químicos curtidores, jabón, anestésicos, y también para crear oro. De hecho, tuvieron éxito en producir metales parecidos al oro (por ejemplo el bronce). Aunque también sabían destilar alcohol (kautilya ~300 a.C.). Este tipo de experimentación vino a menos en la época de la civilización griega. Los griegos eran filósofos y no muy experimentalistas. Los romanos eran administradores y los cristianos consideraban la alquimia como malévol.

Sin embargo la alquimia en los siglos subsecuentes, fue practicada por los árabes, esto la volvió sospechosa por lo que fue prohibida por varias leyes (aunque fue seguida en secreto por otros). Alrededor del siglo XVII, la alquimia revivió abiertamente en Europa y progresó en muy poco tiempo hasta convertirse en una ciencia moderna.

La digestión de varios tipos de tierra con alcohol produce muchos disolventes orgánicos (éter, acetona, y otros). Esos disolventes pueden obtenerse a través de la destilación. Tales disolventes orgánicos pudieron producirse hace 2000 años, debido a que la destilación se conocía en los tiempos remotos, pero en 1800 los disolventes más comunes que se conocían eran el agua, alcohol, éter y "aceites etéricos". Es difícil el tratar de seguir el rastro de los disolventes orgánicos hacia tiempos más remotos.

Esto puede tener una explicación simple, ya que los disolventes obtenidos de la destilación simple de los productos naturales eran poco interesantes (excepto el alcohol), debido a que tenían poco valor práctico, y no servían para producir oro.

Debido a que la extracción requiere de disolventes puros de limitada miscibilidad en el agua, es entendible que la extracción líquido-líquido es un procedimiento relativamente nuevo en los métodos de separación.

A principios del siglo XIX la química mostró un enorme desarrollo. Ya que se pudieron sintetizar diversos disolventes, y compuestos puros. La extracción inorgánica se convirtió en una práctica muy común sin ser una gran noticia.

El uso práctico de la extracción por medio de disolventes y la purificación de diferentes sustancias condujo a los investigadores Berthelot y Jungfleisch a indagar la distribución de un gran número de compuestos orgánicos e inorgánicos entre el éter y el agua. En 1872, introdujeron el término de factor de distribución para describir como la distribución del soluto depende de su concentración en las fases orgánica y acuosa.

Durante los años subsecuentes, la extracción líquido-líquido fue principalmente una herramienta de los químicos analistas, especialmente para analizar metales a través de su formación selectiva de complejos, y para los químicos orgánicos en la separación de sustancias orgánicas. En algunos casos, la extracción con disolventes alcanzó escala industrial, principalmente para la purificación de químicos orgánicos.

Un acontecimiento de interés para la extracción ocurrió en las décadas de los años 40 y 50, iniciada por su aplicación en la producción de uranio y para reprocesar los materiales irradiados por energía nuclear durante el "proyecto Manhattan" de los Estados Unidos. La primera extracción líquido-líquido a gran escala realizada en 1942, para la purificación de metales, por Mallinckrodt Chemical Company en San Luis, donde se utilizaba para obtener uranio usando una extracción selectiva de nitrato de uranio por medio de éter de la solución acuosa. El alto grado de pureza (>99.9%) requerido para el uso de uranio en los reactores nucleares se logró con este método. Una explosión condujo al reemplazo del éter por otros disolventes. Al mismo tiempo, se utilizaron nuevos tipos de disolventes utilizados como extractores. Esta actividad se convirtió en un gran estímulo para la industria diferente de la nuclear y la extracción por disolventes se introdujo como un proceso de separación y de purificación en numerosas industrias químicas y metalúrgicas en las décadas de los años 50 y 60.

Para estas aplicaciones, la técnica de extracción con disolventes tuvo un desarrollo posterior, en el que se desarrollaron nuevos tipos de extractores continuos, mezcladores-sedimentadores y columnas pulsadas.

A diferencia de un extractor de una sola etapa (en la versión más sencilla de un tanque de separación), estos nuevos separadores se podían construir para un flujo continuo y de múltiples etapas, permitiendo una separación muy eficiente en un amplio campo de sustancias. Un buen ejemplo de esto es la producción de tierras raras con un 99.9% de pureza en una batería de mezcladores-sedimentadores.

En las recientes aplicaciones analíticas de la extracción con disolventes, las condiciones de separación óptimas se obtuvieron en forma empírica. Estas son insatisfactorias, y las descripciones matemáticas generales se han desarrollado por muchos investigadores en varios países. Con lo cual se ha obtenido un alto grado de sofisticación, tanto en la teoría como en la práctica.

La extracción líquida, llamada algunas veces extracción con disolventes, es la separación de los componentes de una solución líquida por contacto con otro líquido insoluble. Si las sustancias que componen la solución original se distribuyen de manera distinta entre las dos fases líquidas, se puede lograr cierto grado de separación, que puede incrementarse mediante el uso de contactos múltiples.

En todas las operaciones de este tipo, la solución que se va a extraer se llama alimentación, y disolvente el líquido con el cual se pone en contacto la alimentación. El producto de la operación rico en disolvente se llama extracto; el líquido residual de donde se separó el soluto es el refinado.

En procesos más complicados se pueden utilizar dos disolventes para separar los componentes de una alimentación.

1.2 CAMPOS DE UTILIDAD

Las aplicaciones de la extracción líquida se clasifican en varias categorías: aquellas aplicaciones en que la extracción está en competencia directa con otros métodos de separación y aquellas aplicaciones en que es el único método adecuado.

En competencia con otras operaciones de transferencia de masa.- Aquí, los costos relativos son importantes. La destilación y la evaporación son métodos directos de separación; los productos obtenidos están formados básicamente de sustancias puras. Por otra parte, la extracción líquida produce nuevas soluciones, que a su vez deben de separarse, frecuentemente por destilación o evaporación. Por ejemplo, es difícil separar, por destilación, el ácido acético de una solución diluida de agua; en cambio, puede separarse con relativa facilidad mediante la extracción de un disolvente adecuado y la destilación posterior del extracto. En particular, para las soluciones más diluidas en las cuales el agua debe evaporarse por destilación, la extracción es más económica; especialmente, porque el calor de evaporación de la mayoría de los disolventes orgánicos es sustancialmente menor que el del agua. La extracción también puede resultar aconsejable como alternativa frente a la destilación al alto vacío, a temperaturas muy bajas, para evitar la descomposición térmica.

Como un sustituto de métodos químicos.- Los métodos químicos consumen reactivos y con frecuencia conducen a una costosa eliminación de los subproductos químicos. La extracción líquida, que no provoca gastos químicos o la eliminación de subproductos puede ser menos costosa. La separación de metales como uranio- vanadio, hafnio – circonio, tungsteno – molibdeno y los productos de fisión de los procesos de energía atómica, se llevan a cabo más económicamente por extracción líquida.

Aun los metales menos costosos como cobre y sustancias químicas inorgánicas como ácido fosfórico, ácido bórico y similares, se pueden purificar de manera económica mediante la extracción líquida, a pesar de que el costo de recuperación del disolvente debe incluirse en las cuentas finales.

Para separaciones que por ahora no se pueden realizar por otros métodos.- En la destilación, en donde la fase vapor se crea a partir del líquido por adición de calor, el vapor y el líquido están compuestos necesariamente de las mismas sustancias; por lo tanto son muy similares químicamente. Entonces, las separaciones producidas dependen de las presiones de vapor de las sustancias. En contraste, en el caso de la extracción líquida, los componentes principales de las dos fases son muy distintos químicamente; por esto, son posibles las separaciones de acuerdo con el tipo químico. Por ejemplo, los hidrocarburos aromáticos y parafínicos de aproximado peso molecular no se pueden separar por destilación, ya que sus presiones de vapor son casi iguales; sin embargo, pueden separarse fácilmente por extracción con diferentes disolventes, como dióxido de azufre líquido, dietilenglicol o sulfolano. (Es importante observar que la destilación extractiva también es útil en esta operación, pero es simplemente la extracción de la fase vapor con un disolvente, mientras que la destilación líquido es la extracción de la fase líquida. Con frecuencia, los mismos disolventes son útiles en los dos casos, como era de esperarse.) Muchos productos farmacéuticos — penicilina por ejemplo—, se producen en mezclas tan complejas que sólo la extracción líquida es un método adecuado de separación.

1.3 EQUIPOS DE EXTRACCIÓN

En la extracción líquido- líquido, lo mismo que en absorción y destilación, hay que poner en contacto dos fases, con el fin de favorecer la transferencia de materia, y posteriormente separarlas. En absorción y destilación la mezcla y separación se realiza con rapidez y facilidad.

Sin embargo, en extracción las dos fases tienen densidades parecidas, de forma que la energía disponible para la mezcla y separación (cuando se utiliza flujo por gravedad) es mucho menor que cuando una de las fases es líquida y la otra gaseosa. Con frecuencia resulta difícil en la extracción mezclar y separar las fases. Por otra parte, las viscosidades de las dos fases son relativamente altas, y las velocidades lineales de flujo a través de la mayor parte de los aparatos de extracción son pequeñas. Por consiguiente, en algunos tipos de extractores la energía necesaria para la mezcla y separación se suministra mecánicamente.

Los aparatos de extracción pueden operar en régimen continuo o por cargas. En la operación discontinua se mezcla una masa de alimentación líquida con otra masa de disolvente en un tanque agitado, para, una vez decantadas las capas, separar el extracto y el refinado. De esta forma se obtiene aproximadamente un contacto teórico, que resulta adecuado para el caso de extracciones sencillas. Si es necesario más de un contacto, se puede repetir varias veces la operación, pero las cantidades de disolvente necesarias son grandes y resulta más económico operar por flujo continuo, o bien utilizando sucesivas etapas de contacto diferencial. Tipos representativos de aparatos de extracción son los mezcladores - sedimentadores, diversas torres verticales con flujo por gravedad, torres con agitación y extractores centrífugos. A continuación se indican las características típicas de algunos aparatos de extracción.

Mezcladores sedimentadores.- En el caso de extracción por cargas, el mismo aparato se puede utilizar como mezclador y sedimentador. Lo más frecuente es que el tanque esté provisto de un agitador de turbina o hélice. Al terminar el ciclo de agitación se para el agitador, se dejan decantar las capas por gravedad, y se descargan separadamente el extracto y el refinado a través de una tubería situada en el fondo del tanque, que lleva una mirilla de vidrio para observar la línea de separación de las dos fases. Los tiempos necesarios para la mezcla y separación en una extracción concreta hay que determinarlos experimentalmente.

Para la operación de flujo continuo, el mezclador y el sedimentador tienen que ser partes separadas del aparato. El mezclador puede estar formado por un pequeño tanque agitado, provisto de tubuladuras de entrada y salida y de placas deflectoras para favorecer la mezcla. El sedimentador consiste generalmente en un sencillo tanque de decantación por gravedad. Cuando se opera con líquidos de densidades muy próximas y que se emulsionan fácilmente, puede ser necesario hacer pasar el producto que sale del mezclador a través de tela metálica o lana de vidrio con el fin de favorecer la coalescencia de gotitas de la fase dispersa y hacer posible la sedimentación de las fases por gravedad.

Si, como es habitual, se requieren varias etapas de contacto, se utiliza una batería de mezcladores – sedimentadores en contracorriente.

Torres de pulverización y de relleno.- Estas torres de extracción proporcionan un contacto diferencial, no por etapas, en el que los procesos de mezcla y decantación se producen de forma continua y simultánea. En las torre de pulverización se introduce el líquido ligero por el fondo, dispersándolo en pequeñas gotas mediante las boquillas. Las gotas del líquido ligero ascienden a través de la masa del líquido pesado que desciende formando una corriente continua. Las gotas coalescen en la parte superior para formar la corriente de la fase ligera que sale de la torre. La fase pesada sale por el fondo de la torre. En la descripción anterior la fase ligera es la dispersa y la fase pesada es la continua. Sin embargo, se puede invertir la forma de operar dispersando la fase pesada en la parte superior de la torre, para descender luego a través de una corriente continua de la fase ligera.

En cualquiera de los casos, las gotas se “mezclan” continuamente, es decir, se ponen en contacto renovado con la fase continua, y también continuamente se están separando de ella. Se produce así una transferencia de materia ininterrumpida entre las fases, variando la composición de las mismas a medida que circulan a través de la torre. Como es lógico, el equilibrio no se alcanza en ningún plano horizontal del aparato, sino que, por el contrario, el alejamiento del equilibrio constituye la fuerza impulsora de la transferencia de materia. Sin embargo utilizando una torre suficientemente alta se pueden conseguir teóricamente varios contactos ideales.

En las torres reales de pulverización el contacto entre las gotas y la fase continua no es muy eficaz, excepto en el momento de su formación. En la zona de dispersión puede tener lugar del 40 al 45 % de la transferencia total. Por esta razón, aunque las torres de pulverización son de construcción sencilla y fáciles de operar, resultan poco eficaces. En general si se aumenta la altura de la torre aumenta poco la eficacia, y resulta mucho más práctico redispersar las gotas a intervalos frecuentes a lo largo de la misma. Esto se puede lograr llenando la torre con cuerpos de relleno, tal como anillos o monturas.

El relleno favorece la coalescencia y redispersión de las gotas, con lo cual aumenta considerablemente la eficacia de la torre. Las torres de relleno se parecen a las de pulverización en su sencillez, y pueden resolver cualquier problema de corrosión o presión con un costo razonable. Su principal desventaja es que los sólidos tienden a depositarse sobre el relleno y favorecer el canalizamiento.

Torres de platos perforados.- La redispersión de las gotas del líquido se puede conseguir también mediante platos transversales perforados, análogos a los usados para la torre de destilación. El diámetro de las perforaciones en una torre de extracción está comprendidos entre 1.5 y 10 mm. La separación entre los platos es de 15 a 60 cm. La fase dispersa es generalmente la ligera, mientras que la fase pesada continua circula entre los platos a través de los tubos de bajada, la fase ligera se reúne formando una película delgada debajo de cada plato y se proyecta en forma de chorros en la fase pesada situada encima. En muchas torres de platos perforados las perforaciones están dispuestas en secciones verticales de los mismos. En este diseño los chorros de la fase ligera se proyectan horizontalmente en la fase continua.

Torres de placas.- Estas torres de extracción contienen una serie de placas deflectoras horizontales. La fase pesada fluye sobre cada una de las placas y va cayendo en cascada sobre la placa inmediatamente inferior, mientras que la fase ligera fluye por la parte inferior de las placas y asciende por el borde de ellas, dispersándose en forma de gotas a través de la fase pesada. Las formas más frecuentes de las placas son de "disco y anillo" y las segmentadas o laterales o "laterales". En ambos tipos la separación entre las placas está comprendida entre 10 y 15 cm.

Las torres de placas presentan la ventaja de no poseer pequeños orificios que se puedan obstruir por sólidos o agrandar por corrosión. Por esta razón resultan adecuadas para operar con soluciones que contienen sólidos en suspensión. Algunas modificaciones de las torres de disco y anillo están provistas de un sistema rascador para separar los sólidos depositados sobre las placas. Puesto que el flujo de las fases es suave y no hay cambios bruscos de velocidad o dirección, las torres de placas son muy adecuadas para operar con líquidos que se emulsionan fácilmente. Sin embargo, por esta misma razón, la eficacia de mezcla es baja, y cada placa equivale solamente de 0.05 a 0.1 etapas ideales.

Torres agitadas.- En los mezcladores sedimentadores se suministra energía mecánica para realizar la mezcla de las dos fases líquidas, lo cual no se hace en cambio en las torres descritas hasta ahora, que dependen exclusivamente del flujo por gravedad de la mezcla y separación.

Sin embargo, en algunas torres de extracción se suministra energía mecánica mediante turbinas u otros agitadores internos montados sobre un eje central rotatorio. Las secciones agitadas están frecuentemente separadas por otras sin agitación para dar lugar, de hecho, a un conjunto de mezcladores - sedimentadores dispuestos unos sobre otros. En algunos casos las secciones no agitadas están rellenas con tela metálica para favorecer la coalescencia y separación de las fases. La mayor parte de la extracción tiene lugar en las secciones de mezcla, pero también se produce algo en las secciones no agitadas, de forma que la eficacia de cada unidad mezclador - sedimentador es a veces superior al 100%.

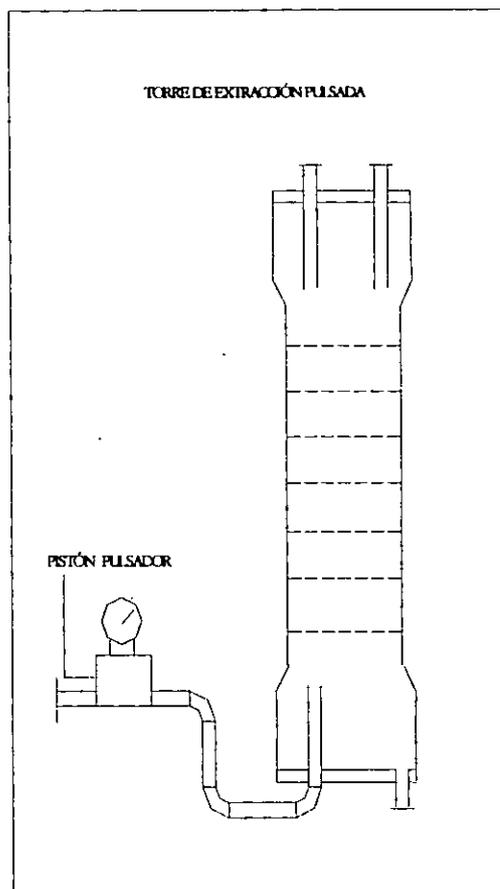
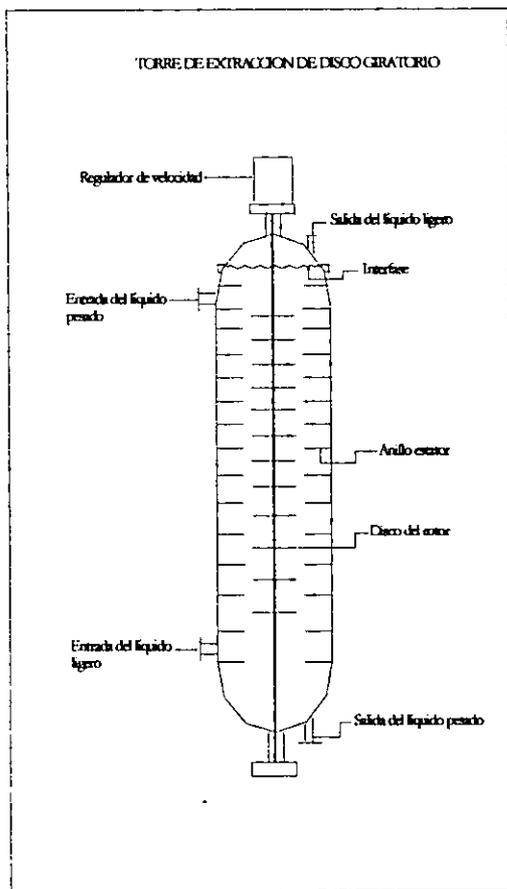
La altura típica de cada mezclador- sedimentador es de 30 a 60 cm, lo cual permite obtener varios contactos teóricos con una altura de columna relativamente pequeña de columna. Sin embargo, el mantenimiento de las partes internas móviles, especialmente cuando se opera con líquidos corrosivos, puede constituir una desventaja importante.

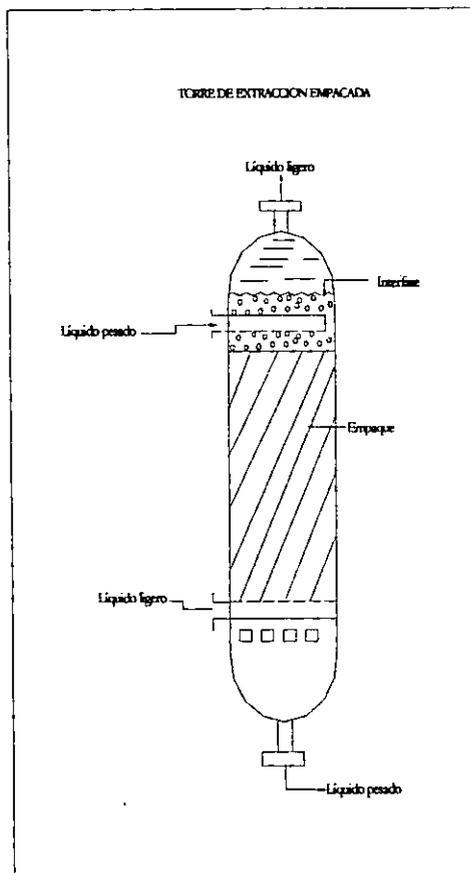
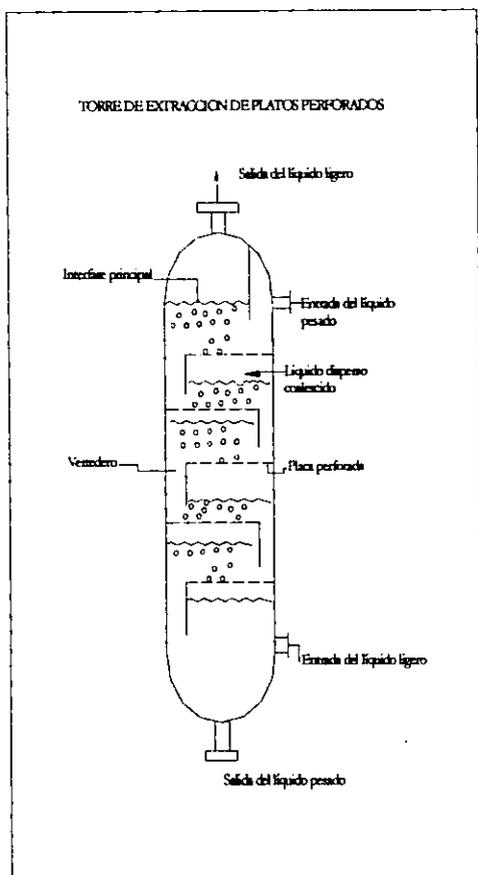
Columnas pulsadas.- También se puede suministrar agitación por medios externos, como ocurre en la columna de pulsación, en la cual el contenido total de la columna se "pulsas" a intervalos frecuentes, mediante una bomba de émbolo. De esta forma hay un movimiento alternativo superpuesto al flujo normal de las fases líquidas. La torre contiene generalmente relleno o platos perforados especiales. En una torre de relleno, la pulsación provoca una dispersión en toda la masa de los líquidos y evita la formación de canalizamiento, con lo cual se mejora notablemente el contacto entre las fases. En las torres de platos perforados con pulsación las perforaciones son más pequeñas que en las torres no pulsadas. Desde un punto de vista ideal, la pulsación provoca la dispersión de la fase ligera en la pesada durante la etapa ascendente del émbolo, y la formación de chorros de la fase pesada en la fase ligera durante la etapa descendente. En estas condiciones, la eficacia de las etapas puede llegar al 70%. Sin embargo, esto sólo es posible cuando los volúmenes de las dos fases son aproximadamente iguales y no hay variación de volumen durante la extracción.

Las dispersiones sucesivas son generalmente menos eficaces y se produce mezcla de retroceso de una de las fases en determinada dirección, dando lugar a una caída de la eficacia hasta aproximadamente el 30%. La altura de las columnas pulsadas, tanto de relleno como de platos perforados, necesaria para obtener un determinado número de unidades de transferencia o de contactos teóricos, es de todas formas inferior a una tercera parte de la que se necesitaría en una columna no pulsada.

Extractores centrífugos.- la dispersión y separación de las fases se puede acelerar mucho utilizando la fuerza centrífuga. Existen diversos extractores comerciales basados en este hecho. El extractor Podbielniak consta de una carcasa metálica, dentro de la cual hay una banda perforada arrollada en espiral sobre un eje horizontal hueco por el que entran y salen líquidos. El líquido ligero es bombeado a la parte exterior de la espiral a una presión comprendida entre 3 y 14 kg/ cm², con el fin de vencer la fuerza centrífuga; el líquido pesado se bombea a la parte central. Los líquidos fluyen en contracorriente sobre la banda. El líquido pesado se mueve hacia fuera sobre la cara exterior de la espiral, mientras que el ligero es forzado por desplazamiento a circular hacia dentro sobre la cara interior. El elevado esfuerzo cortante que se da en la interfase líquido – líquido da lugar a una rápida transferencia de materia. Por otra parte, algo de líquido se proyecta en forma de lluvia a través de las perforaciones de la banda y aumenta la turbulencia. En un solo extractor se pueden obtener hasta 20 contactos teóricos, aunque lo más frecuente es que se consigan de 3 a 10 contactos. Los extractores centrífugos son caros y por esta razón tienen un uso muy limitado. Sus principales ventajas consisten en que permiten obtener muchos contactos teóricos con un pequeño volumen y tiempos de residencia muy bajos (del orden de 4 segundos). Por esta razón son muy adecuados para la extracción de productos que se alteran con facilidad, tales como vitaminas y antibióticos.

Figura 1. Equipos de extracción líquido-líquido





CAPITULO 2

**METODOS ANALITICOS DE
EXTRACCION**

2.0 Características necesarias de los disolventes

Antes de poder describir los sistemas con los cuales se puede trabajar es conveniente mencionar algunas de las características deseables en el disolvente que será utilizado para llevar a cabo la separación, y que ésta resulte lo más exitosa posible; además de tener en consideración que la recuperación del soluto del extracto debe ser de la manera más simple y efectiva.

Alta selectividad.- Normalmente esta cualidad es la más importante de todas las que se desea posea el disolvente. La selectividad que esta definida como:

$$\alpha_{a/b} = m_a / m_b$$

donde $\alpha_{a/b}$ representa la selectividad del disolvente con respecto a los componentes, m_a es el coeficiente de distribución del componente "a" con respecto a la alimentación y el disolvente, lo mismo para m_b . Obviamente el punto de interés en un disolvente es que el coeficiente de distribución del soluto que va a extraerse sea mayor del que queda en el refinado. Cuando se puede obtener un disolvente con estas características decimos que es un disolvente muy selectivo.

Fácil regeneración.- Este punto es casi tan importante como el de la selectividad, debido a que en cualquier sistema de extracción el disolvente debe ser regenerado, por medio de la separación del soluto, y reciclado al extractor.

Baja miscibilidad con la alimentación.- Así como buscamos que una alta selectividad minimice la cantidad de material indeseado que va con el disolvente, también se busca una baja miscibilidad de la alimentación y el disolvente para minimizar el monto de disolvente que va con el refinado, ya que el disolvente tendrá que ser recuperado. Otro punto a considerar es que el disolvente no debe reaccionar con el extracto ya que en ese caso la operación no cumpliría con el cometido de facilitar la separación de componentes.

Densidad diferente a la de la alimentación.- Debido a que en esta operación se mezclan dos fases líquidas y después se dejan asentar para que se separen, la fuerza conductora de este fenómeno es la diferencia de densidades. Es importante que la diferencia de densidades sea mayor de 2% y preferiblemente sobre el 5% con lo cual podrá minimizarse el tiempo de asentamiento.

Tensión interfacial moderada.- En forma parecida en la que la densidad afecta el asentamiento, la tensión interfacial tiene un gran impacto en el mezclado. Mientras menor sea la tensión interfacial menor será la energía necesaria para que se dispersen las gotas de la fase dispersa en la fase continua.

Sin embargo un valor menor a 1 dina/cm puede crear emulsiones que son imposibles o imprácticas para esperar su asentamiento. Por el contrario un gran valor en la tensión (cerca de 50 dina/cm) significa que será necesario aplicar una gran cantidad de energía para la creación de gotas y tenderán fácilmente a la coalescencia.

Baja Viscosidad.- Generalmente es deseable para los sistemas de extracción, que las viscosidades de los componentes sean menores de 10 cp, para minimizar la resistencia a la transferencia de masa, por lo cual es deseable que el disolvente cumpla con esta requisición.

Baja flamabilidad y toxicidad.- Cuando no es posible el escoger un disolvente con baja flamabilidad, los equipos y condiciones de operación deben ser escogidos de tal manera que se minimice el riesgo. Si el disolvente asignado para esta operación es de una alta toxicidad, el ingeniero que diseñe deberá tomar en cuenta muchas consideraciones para evitar que parte de este disolvente quede dentro de las corrientes que salen del proceso.

Baja corrosividad.- Es preferible escoger un disolvente con una menor corrosividad que la alimentación; en otras palabras, los materiales de construcción del equipo deberán ser fijados por la alimentación, no por el disolvente.

Precio bajo y fácil disponibilidad.- Mientras que en las pruebas de laboratorio un disolvente cumpla con todas las disposiciones antes mencionadas, no es de gran ayuda si este mismo disolvente no es de fácil acceso en el mercado y su precio es demasiado caro. Cuando el ingeniero escoja el disolvente deberá tomar en cuenta las otras operaciones que se llevan a cabo en el mismo sitio. Ya que si este mismo disolvente se está utilizando con otros propósitos, evitará posteriores incompatibilidades y hará más fácil el inventario de disolventes.

Otra forma de poder escoger el tipo de disolvente a usar para realizar la operación de extracción es por medio de la tabla de Robbins (modificada), la cual se basa en el efecto de la interacción del soluto y del disolvente en el coeficiente de actividad del soluto.

Este principio es que si el coeficiente de actividad es alto en la alimentación, pero bajo en el disolvente de extracción, la fracción mol será alta en el extracto pero baja en el refinado, y por lo tanto el coeficiente de distribución será lo suficientemente alto. Lo que se desea son disolventes con un coeficiente de actividad bajo para el soluto de la alimentación.

Disolvente Grupo (Solute)	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	0	-	-	-	-	0	+	+	+
2	-	0	+	+	+	+	+	+	+
3	-	+	0	+	+	-	0	+	+
4	-	+	+	0	+	-	+	+	+
5									
6	0	+	-	-	-	0	0	+	0
7	+	+	0	+	0	0	0	0	0
8	+	+	+	+	+	+	0	0	0
9	+	+	+	+	+	0	0	+	0

Tabla 1.- Interacción de grupos de disolventes, ésta tabla puede ayudar a delimitar la búsqueda de disolventes. El signo (+) indica que el compuesto en el grupo representado por la columna tiende a elevar la actividad con respecto a los grupos representados en la fila. El signo (-) representa un decrecimiento de la actividad; un cero significa que no produce ningún efecto. Los disolventes que disminuyen la actividad son los que se deben elegir.

Los grupos son los siguientes:

1. - Acidos, OH aromáticos (fenol)
2. - OH parafinicos(alcohol), agua, amidas con H activo.
3. - Acetona nitratos aromáticos, aminas terciarias, piridina, sulfatos, trialquilsulfato, u óxido de fosfina.
4. -Esteres, aldehídos, carbonatos, fosfatos, nitratos, amidas sin H activo; enlaces intramoleculares, o-nitrofenol.
5. -Éter , óxidos, sulfuros, sulfóxidos, aminas primarias y secundarias
- 6- Parafinas multialifáticas con H activo.
- 7.-Aromáticos halógenados, oleofinas aromáticas
- 8.-Parafinas
- 9.-Monómeros de oleofinas o parafinas

Aunque si bien ninguno de los dos criterios de elección de disolvente es definitorio, la tabla para la selección de este proporciona un criterio de elección confiable para iniciar el trabajo con un grupo de disolventes reducido.

2.1 Cálculos gráficos de etapas múltiples

Este tipo de métodos se utiliza para ver las relaciones existentes entre un conjunto de variables, lo cual hace que su uso sea general en la ingeniería química. Son de gran ayuda en el diseño de sistemas de contacto por etapas, debido a que en ellos se involucran relaciones en el equilibrio, balances de materia y energía, todo esto de manera simultánea, y con un procedimiento que facilita los cálculos. Los datos de las relaciones en el equilibrio son resultado de propiedades del sistema, y estas, se representa en forma gráfica, —en el caso de extracción líquido-líquido están dados por los diagramas ternarios, los cuales son la representación más común de estas relaciones—. En donde también pueden incluirse los balances de materia y energía. Realizando una elección adecuada de las coordenadas y construcción geométrica es posible dar solución gráfica a los problemas de diseño, aunque si bien esto puede lograrse de manera analítica. Con el apogeo de los sistemas computacionales es posible realizar los mismos cálculos de una manera más rápida y más exacta, con lo cual este tipo de cálculos es un poco arcaico para un diseño riguroso, pero su utilidad radica en que nos dan una visión general de las relaciones de las variables.

Antes de entrar completamente a este tipo de cálculos, se mostrará una breve definición de lo que es la línea de operación.

Fases inmiscibles

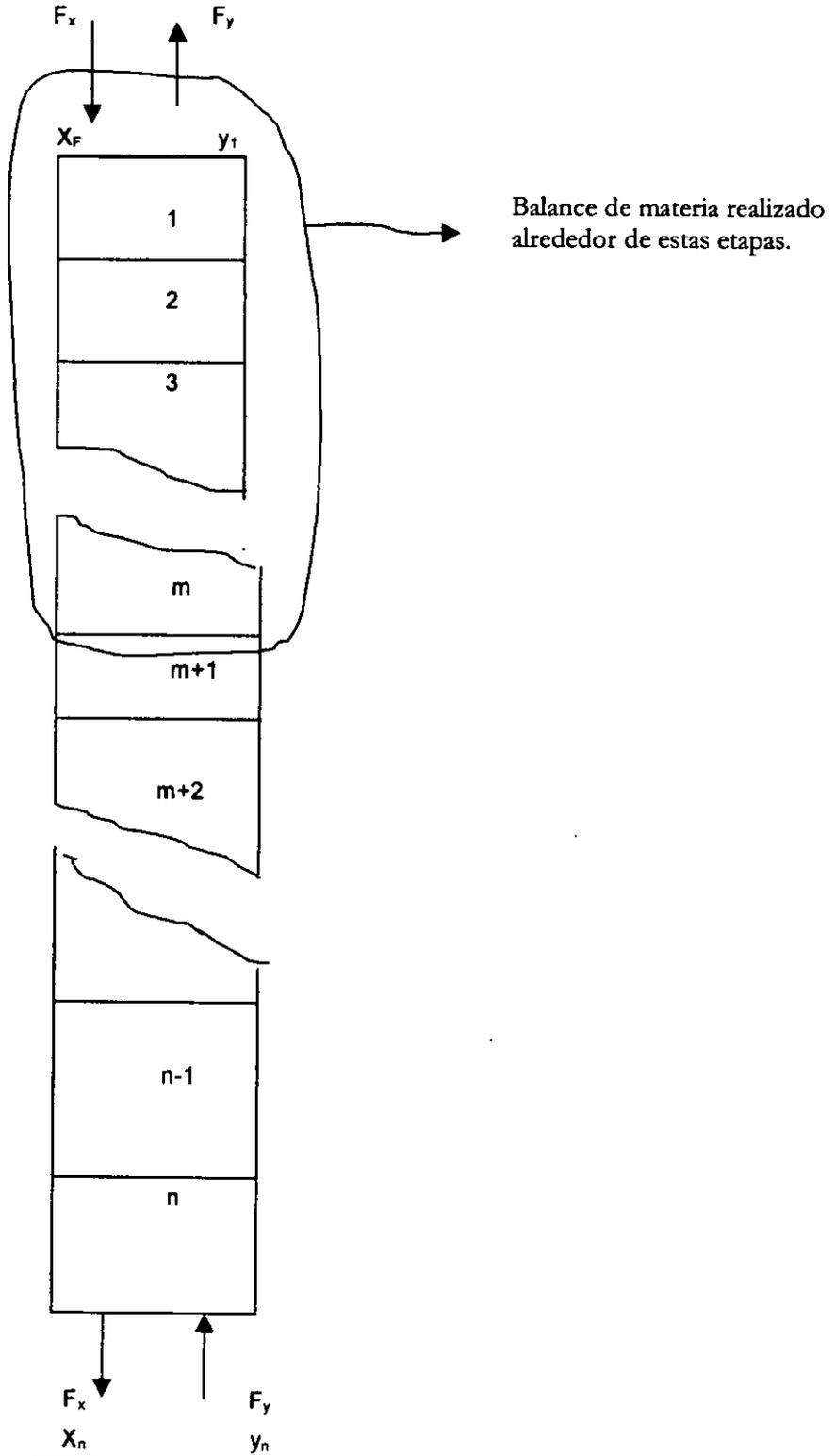
Los datos del equilibrio es más conveniente representarlos en una simple gráfica de coordenadas $x - y$, como la concentración de una fase en función de otra.

Considerando un proceso de extracción a contracorriente, como se ilustra en la figura (1), x y y representan las concentraciones del soluto en las fases de alimentación y disolvente respectivamente, el subíndice indica el número de la etapa de la cual emerge la corriente. Similarmente, F_x es el flujo del soluto en la fase de alimentación y F_y del disolvente. Debido a que las dos fases son inmiscibles, el flujo volumétrico tanto de la alimentación como del disolvente sólo cambia de etapa a etapa como resultado de la transferencia del soluto.

Si los niveles de concentración son bajos, cualquier cambio será mínimo y F_x y F_y pueden asumirse como constantes siempre y cuando estén expresados en términos de volumen total. Si la concentración es alta, F_x y F_y pueden seguir constantes (lo cual es de gran conveniencia para los cálculos), usando flujos en base libre de disolvente, por ejemplo F_x y F_y son flujos de dos disolventes puros (masa o moles por unidad de tiempo) sin soluto. Las unidades de x y y deben escogerse y fijarse. Si F_x y F_y están en términos volumétricos, entonces x y y son tasas de concentración (masa de soluto por unidad de disolvente, etc.). En cualquier base, los productos F_y y F_x dan los flujos de los solutos (masa o moles por unidad de tiempo) para la etapa indicada.

Regresando a la figura (1) el problema más común es calcular el número de etapas de equilibrio requerido para reducir la concentración del soluto en el refinado a un valor predeterminado. El primer paso es encontrar un valor adecuado para F_y . Este se encuentra usualmente por medio de la elección de y_1 . Un valor adecuado para y_1 puede encontrarse por medio de una revisión de las curvas de equilibrio. Un balance total de materia basado en el soluto da el valor de F_y .

Figura (1) Esquematización de una extracción líquido - líquido en etapas múltiples



Esto hace posible realizar un cálculo etapa a etapa empezando en la número 1, involucrando relaciones de equilibrio y balances de energía para encontrar el número necesario de etapas para reducir X_n al valor deseado. Entonces, teniendo el y_1 fijado, x_1 se deduce de la curva de equilibrio, debido a que las dos fases están en equilibrio. Un balance de masa alrededor de la etapa 1 nos da el valor de y_2 . Se repite el proceso entero. Usando la terminología de la figura, un balance alrededor de las etapas 1 a m da:

$$F_x x_F + F_y y_{m+1} = F_x X_m + F_y y_1 \quad (2-1)$$

Reordenando:

$$y_{m+1} = ((F_x / F_y) X_m) + [y_1 - ((F_x / F_y) X_F)] \quad (2-2)$$

La ecuación anterior es de una línea recta de pendiente F_x/F_y , la cual se conoce como línea de operación. El término dentro de los corchetes involucra sólo condiciones terminales. Una ecuación análoga aplica para cualquier valor de m junto con las corrientes y composiciones que pasan de una etapa a otra (ejemplo de esto son y_{m+1} , x_m) donde todos estos puntos están relacionados con la línea de operación. Lo mismo puede aplicarse a las composiciones que salen de cada etapa y caen en la línea de equilibrio.

En la figura (2) se muestra la línea de operación que corresponde a la relación mínima de disolvente alimentado (por ejemplo el máximo F_x/F_y), con la cual es posible que la corriente de alimentación tenga una concentración x_F y lograr un refinado con concentración x_r . Con esta cantidad de disolvente sería necesario tener un número infinito de etapas. El efecto del cambio de la relación de entrada en el número de etapas requeridas es fácil de observar en este tipo de diagramas por medio del cambio de la pendiente en la línea de operación. También es posible encontrar la concentración del refinado si se usa un determinado número de etapas con un valor predeterminado en la relación de entrada de los flujos.

2.2 Extracción de una sola etapa

El proceso de extracción más simple es el de extracción en un solo contacto, entre la alimentación y el disolvente. La alimentación y el disolvente se mezclan completamente y después se les permite separarse a las dos fases en equilibrio, las cuales se retiran como extracto y refinado. El proceso puede realizarse en etapas o en forma continua. La figura (3) representa el proceso de extracción en una sola etapa.

Puede usarse una serie de contactos de una sola etapa. En ese tipo de procesos, el refinado de cada etapa se convierte en la alimentación de siguiente etapa, en donde se mezcla con más disolvente y se separa nuevamente.

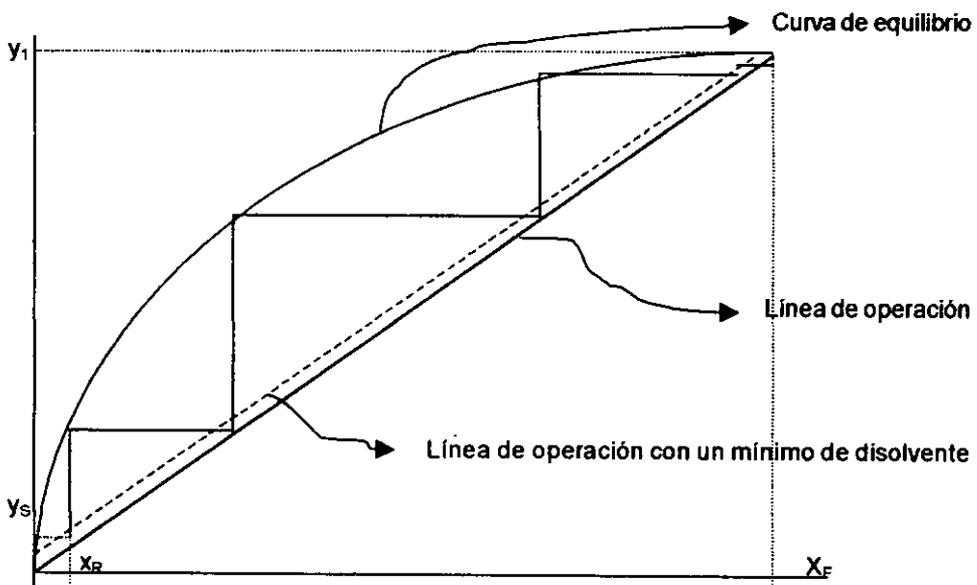
Los cálculos de extracción son similares a los utilizados en la destilación y la absorción, y se llevan a cabo fácilmente cuando la solución contiene sólo dos componentes. La cantidad de soluto presente en el extracto y refinado puede encontrarse por medio del uso del diagrama ternario, y un balance de masa alrededor de la etapa, o por el uso de diagramas en base libre de disolvente acompañado de balances en base libre de disolventes. El balance para el sistema mostrado en la figura (3) es:

$$F + S_1 = E_1 + R_1 = M$$

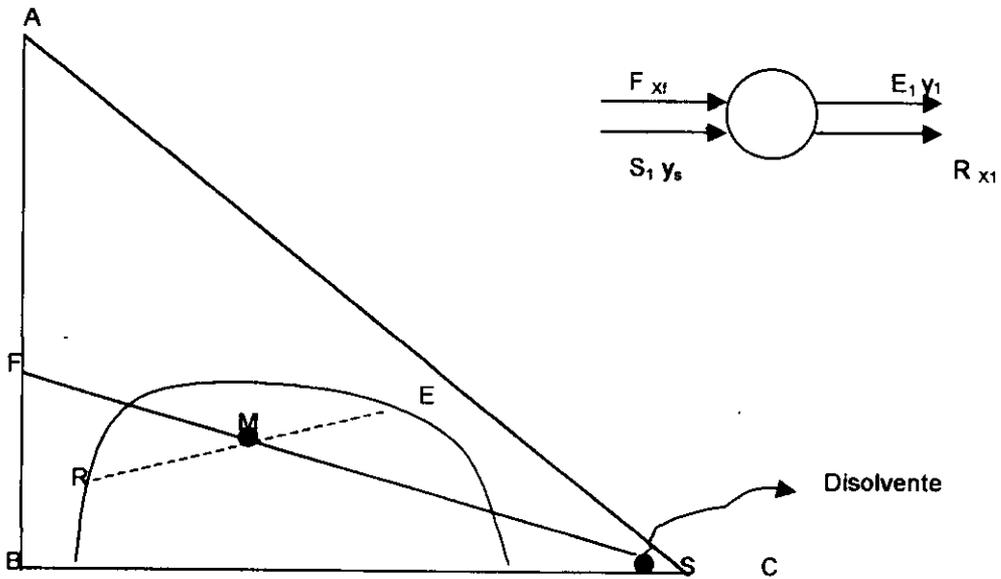
El balance de materia para cualquier componente es:

$$F_{x_f} + S1_{y_s} = E_1 y_1 + R_1 X_1 = M_{x_M}$$

En donde F , S_1 , E_1 , y R_1 son los flujos máscicos, y las composiciones X_f , y_s , y_1 , y x_1 son las fracciones peso del soluto a extraer. En la expresión antes mencionada M es igual a la masa total entrando o saliendo del contactor. La concentración, X_M , es la fracción máscica del soluto en la mezcla total que entra en el sistema.



Figura(2).- Diagrama de una línea de operación para fases inmiscibles, es de ayuda en el diseño preliminar, para encontrar el número de etapas teóricas.



Figura(3).- Esquematación y diagrama ternario, para un sistema de extracción líquido-líquido de una etapa.

De lo dicho anteriormente podemos observar que la composición X_M cae en la línea que une las composiciones X_F y y_s . La composición X_M también cae en la línea que une las composiciones y_1 y x_1 . La localización del punto M en un diagrama ternario puede determinarse de las cantidades relativas de la alimentación y el disolvente que entran en la etapa por medio de la regla de la palanca.

2.3 Extracción en varias etapas a corriente cruzada.

Esta es una ampliación de la extracción en una sola etapa, en la cual el refinado se pone sucesivamente en contacto con disolvente fresco; puede hacerse en forma continua o por lotes. Revisando la figura(4) que muestra el diagrama ternario y el esquema de este sistema de extracción, al final de la operación se obtiene un solo refinado en cambio los extractos se pueden combinar para obtener un extracto compuesto. Para este sistema se pueden utilizar las etapas que se deseen o que sean necesarias para lograr la concentración deseada.

Los cálculos, al igual que en la extracción en una sola etapa, se pueden realizar en coordenadas triangulares o en gráficos en base libre de disolvente.

Las etapas subsecuentes se trabajan de la misma forma que en el sistema de una sola etapa, excepto que la alimentación en la entrada de la siguiente etapa es el refinado de la etapa anterior. Entonces para, cualquier etapa n,

$$R_{n-1} + S_n = E_n + R_n = M_n \quad (2-5)$$

Para cualquier componente:

$$R_{n-1} X_{n-1} + S_n y_s = E_n y_n + R_n X_n \quad (2-6)$$

Figura (4a)

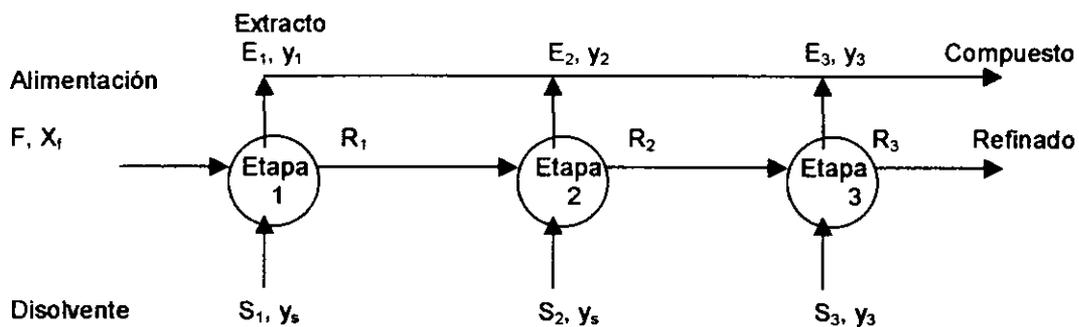


Figura (4b)

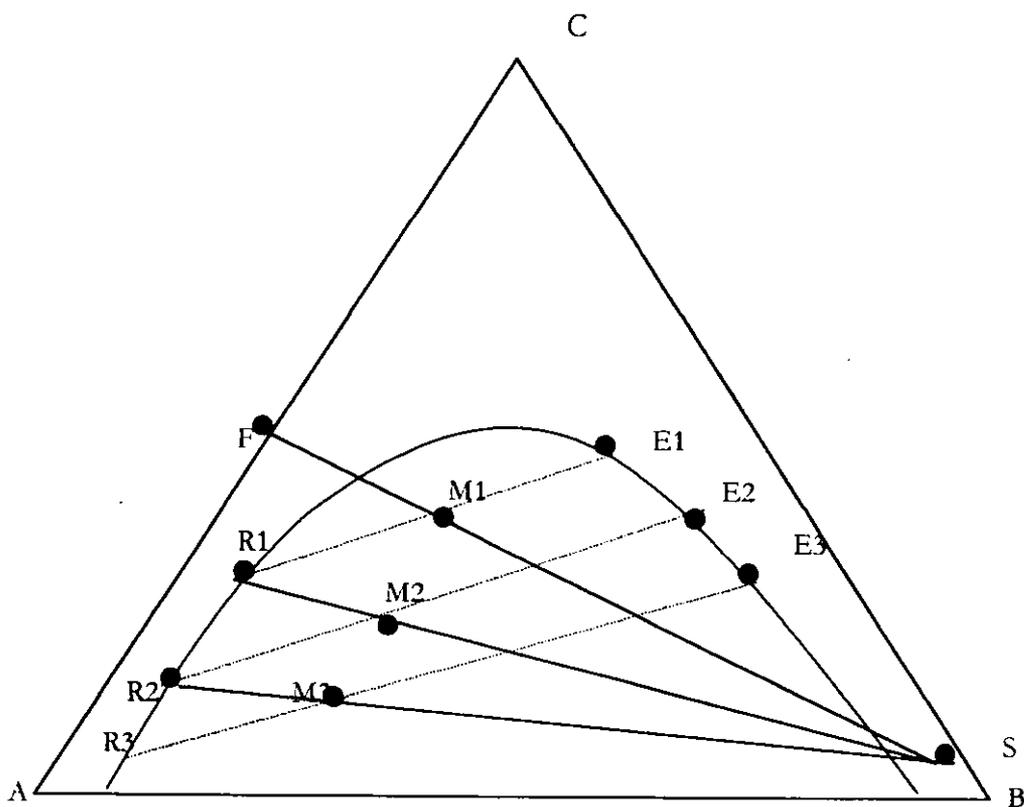


Figura (4) Extracción líquido - líquido a corriente cruzada.

a.- Esquemmatización de un extractor en etapas

b.- Diagrama ternario para determinación del balance de masa.

2.4 Extracción en varias etapas a contracorriente continua

En este tipo de proceso la alimentación y el disolvente entran en lados opuestos del aparato. Para obtener una composición dada, con un número de etapas determinado, es más eficiente la extracción a contracorriente que a flujo cruzado, ya que se utiliza menos cantidad de disolvente para lograr la concentración deseada. La figura 5 muestra un diagrama sencillo para este tipo de extracción.

El método gráfico para obtener el número de etapas requerido se lleva a cabo en coordenadas rectangulares, esto como se había mencionado es con el fin de simplificar el método, ya que es más fácil expandir o reducir la escala para llevar a cabo los cálculos.

El balance total de materia en el equipo completo es:

$$F + S = E_1 + R_N = M \quad (2-7)$$

Y para cualquier componente:

$$F x_f + S y_s = E_1 y_1 + R_N x_N = M x_M \quad (2-8)$$

En donde M es el flujo másico total que entra y sale del proceso y x_M es la composición total.

Debido a que los puntos F, S y M se encuentran ubicados dentro de una misma línea recta, lo mismo sucede con los puntos R_N , E_1 , y M, M representa la intersección de las líneas que unen todos los puntos anteriores. Para poder obtener la composición de dicho punto, y con esto la localización del mismo dentro del diagrama, se reordena la ecuación del balance total para cualquier componente, con lo que se obtiene:

$$x_M = \frac{F x_f + S y_s}{M} = \frac{F x_f + S y_s}{F + S} \quad (2-9)$$

Representando el balance en forma de diferencias de las corrientes que entran en el sistema se tiene:

$$F - E_1 = R_N - S = \Delta_R \quad (2-10)$$

Este arreglo nos indica que las líneas E_1F y SR_N , si se extienden deben intersectarse en el punto Δ_R . Este punto se localiza en la mayoría de las construcciones a la izquierda. Para un proceso a contracorriente el punto Δ_R representa el punto focal en donde se unen todas las líneas que se utilizan en el método y que representan todas las corrientes en el equipo.

Para realizar los cálculos de este método gráfico el primer paso es ubicar los puntos F, S, M, E_1, R_N , y Δ_R . Una vez realizado esto, una de las líneas de equilibrio dará la ubicación de R_1 , y una línea desde este punto hasta el foco, y que toque el otro extremo de la curva de equilibrio, proporcionará el punto E_2 , y así sucesivamente, el final de este procedimiento es cuando se llega a la concentración deseada o a la línea que une los puntos S y Δ_R , y que representa la máxima concentración que se puede lograr en el extracto en caso de que el traslape entre las líneas no sea claro, supóngase un caso en donde por aproximación gráfica se diga que son 3.7 etapas necesarias se aplica el factor de eficiencia de etapa y se procede a redondear la cantidad, esto a la cantidad inmediata superior (que en este caso sería a la etapa siguiente) ya que es en la que se obtendría la separación requerida.

Cabe mencionar que en este tipo de cálculo se supone que el proceso se llevará a cabo isotérmicamente, por lo cual el gráfico sólo presenta una curva de equilibrio. En caso de que el método se realice a diferentes temperaturas en cada etapa, el principio del cálculo es el mismo, se trazan las líneas de las condiciones del disolvente y la alimentación, se localiza el foco y se procede a dibujar las líneas de cada etapa; con la excepción de que dependiendo de su temperatura será la curva de equilibrio a utilizarse.

2.5 Método analítico para calcular el número de etapas requeridas

En caso de que el método gráfico sea tardado en realizarse o sea muy ambigua la información encontrada, pueden realizarse los cálculos necesarios por medio de las relaciones que utilizan la ecuación de Kremser (Brian, pp. 37-41, y Roger W. Cusak):

$$N = \log \left(\frac{(X_f - Y_s/m) / (X_N - Y_s/m)}{[1 - 1/E] + 1/E} \right) / \log E \quad (2-11)$$

En donde N es el número de etapas teóricas, X_f es la concentración del soluto en la alimentación y X_N la concentración del soluto en el refinado (ambas concentraciones en base libre de disolvente), Y_s es la concentración del soluto en el disolvente y E es el factor de extracción, el cual es igual a $m^*(S/F)$ donde S y F son las cantidades de disolvente y la alimentación respectivamente.

Esta ecuación se ha resuelto gráficamente, en donde la variable paramétrica es el factor de extracción. Este esquema se muestra en la referencia antes dada y se da una explicación acerca del modo de usarla.

Figura 5(a)

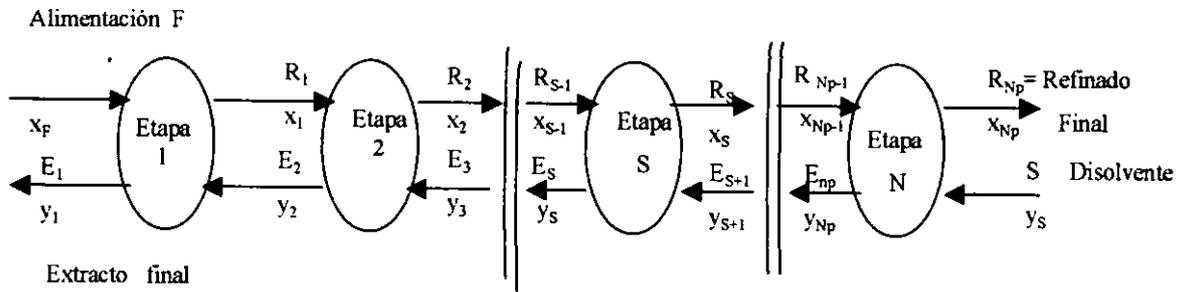
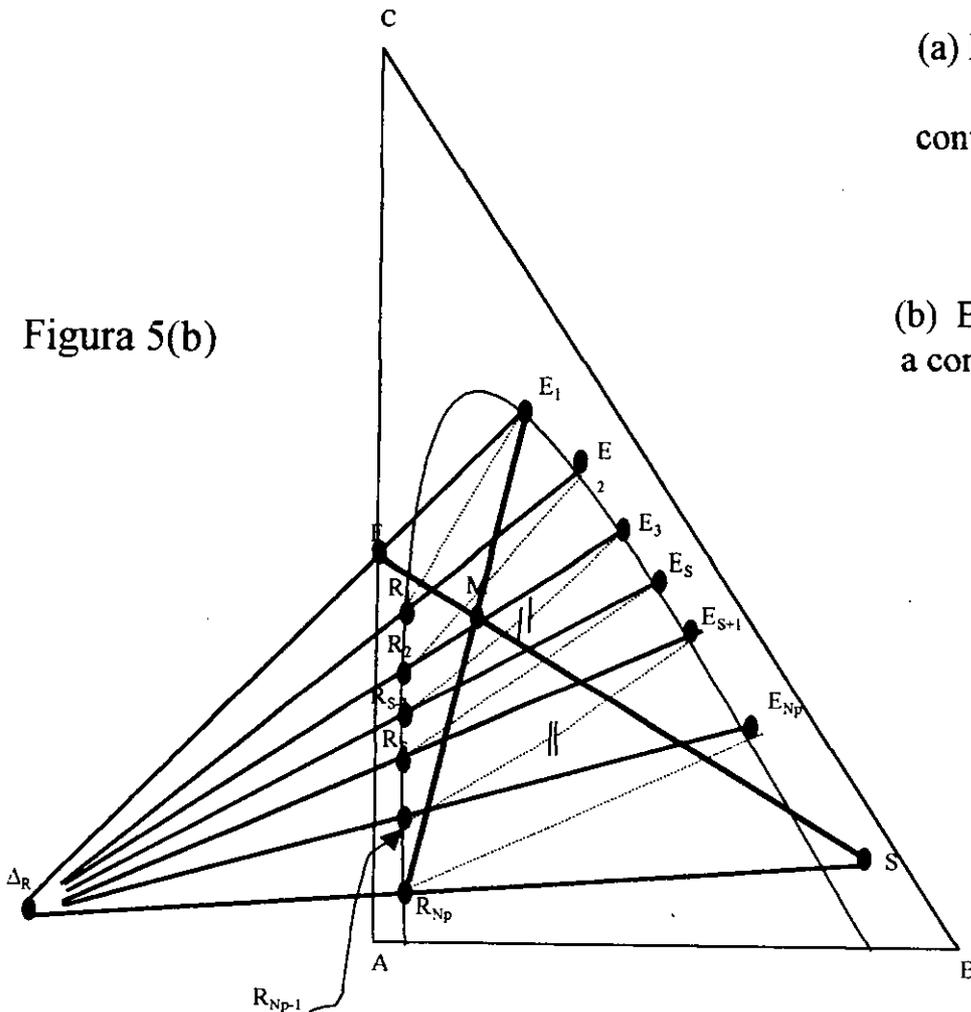


Figura 5.

(a) Diagrama de flujo de una extracción a contracorriente en varias etapas.

Figura 5(b)



(b) Esquema de extracción a contracorriente en varias etapas

2.6 Extracción con reflujo

En los procesos antes mencionados, la corriente final del extracto que está en equilibrio con el disolvente, se retira en la misma etapa en que se admite la alimentación. No bien puede alcanzar el equilibrio con V_1 , y se pone en contacto con la alimentación entrante, por lo cual la introducción de la alimentación restringe la pureza que puede alcanzarse de L_1 . Esto sucede si la alimentación tiene particularmente una baja concentración del componente principal del extracto. La solución obvia a este problema es reemplazar la alimentación con una corriente que tenga una alta concentración del componente a extraer, con lo cual se obtiene una mayor pureza del extracto L_1 que se va a retirar. Esto puede realizarse por medio de un reflujo en el extracto como se puede observar en la figura(6).

El punto de introducción de la alimentación se mueve entonces de la etapa 1 a una etapa intermedia $M+1$. Parte del efluente del disolvente pobre (B') de la etapa de recuperación del disolvente se regresa a la etapa 1 como V_0 . Lo anterior sucede si se remueve suficiente disolvente de la corriente L_1 para lograr que el punto B' se recorra hasta el otro lado del diagrama de solubilidad como se muestra en la figura (7). En caso de que todo el disolvente se removiera entonces B' correspondería con el punto \hat{L}_1 . Usualmente el trazo B' caerá en algún lugar entre \hat{L}_1 y la curva de solubilidad.

Para ilustrar el cálculo gráfico de este tipo de sistemas se muestra un diagrama del tipo II, esto debido a dos razones: la primera es que se puede observar que los principios de solución gráfica son los mismos que para el tipo I,— en lo referente a la construcción de las líneas y cálculos— y segundo, debido a que la extracción con reflujo generalmente se usa más en los sistemas de tipo II. El reflujo es necesario cuando el disolvente es parcialmente inmiscible con ambos componentes y no muestra una gran selectividad por alguno.

Para obtener la solución gráfica de este tipo de problema, se realiza de una manera similar a la extracción con dos alimentaciones, esto se logra dándole a V_0 el tratamiento de segunda alimentación.

En el final de la sección del refinado el punto Δ se define como:

$$\Delta_L = V_N - L_{N+1} = F + V_O - L_1 = M_P - L_1 \quad (2-12)$$

$$\Delta_R = L_{N+1} - V_N = L_1 - F - V_O = L_1 - M_P \quad (2-13)$$

En el final de la sección el punto Δ' debe caer a la derecha, debido a que L_1 debe ser mayor que V_O .

$$\begin{aligned} \Delta'_R &= L_1 - V_O = F + L_{N+1} - V_N \quad (2-14) \\ &= F + \Delta_R \\ &= F - \Delta_L \end{aligned}$$

Un balance alrededor del equipo de recuperación del extracto relaciona a Δ' con B y S_E

$$\Delta'_R = L_1 - V_O = B + S_E \quad (2-15)$$

Las ecuaciones mencionadas antes más el balance alrededor de la etapa de recuperación de disolvente se representan gráficamente en la fig. 7. La resta de S_R y S_E de V_N y L_1 da D' y B' , respectivamente. El punto que representa B' también representa a B y V_O y F da M_P , y el punto Δ debe quedar en la intersección de la línea que va de M_P y L_1 con la línea que pasa por V_N y L_{N+1} .

El punto Δ' puede localizarse mediante el trazado de la línea del balance total que conecta F con los dos puntos de diferencia y revisando la intersección de ésta con la línea que va de L_1 a V_O .

Después de que se han localizado los dos puntos de diferencia, la construcción de etapa a etapa procede de la misma forma que si fuera una columna de dos alimentaciones. Las etapas pueden escalonarse desde cualquiera de los dos puntos finales. En la figura la construcción se empieza desde L_1 . La línea punteada de L_1 localiza V_1 , y una línea de operación de V_1 a Δ' localiza L_2 . El uso alternativo de las líneas punteadas y Δ' se continúa hasta que la línea punteada de etapa cruza la línea continua que va de F, Δ , y Δ' se alcanza. Como se había explicado anteriormente esta etapa es la etapa óptima de alimentación. La introducción de la alimentación en esta etapa requiere que el punto de diferencia para las etapas restantes se cambien de Δ' a Δ .

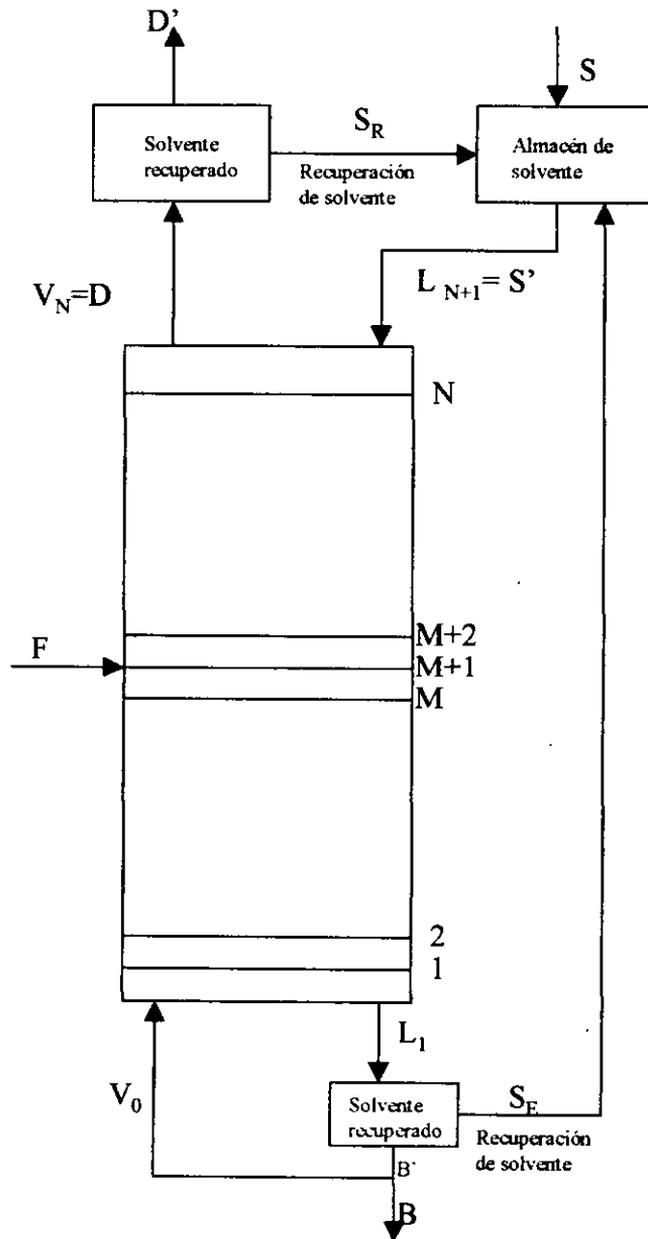


Figura (6) Columna de extracción con una sola alimentación y reflujo

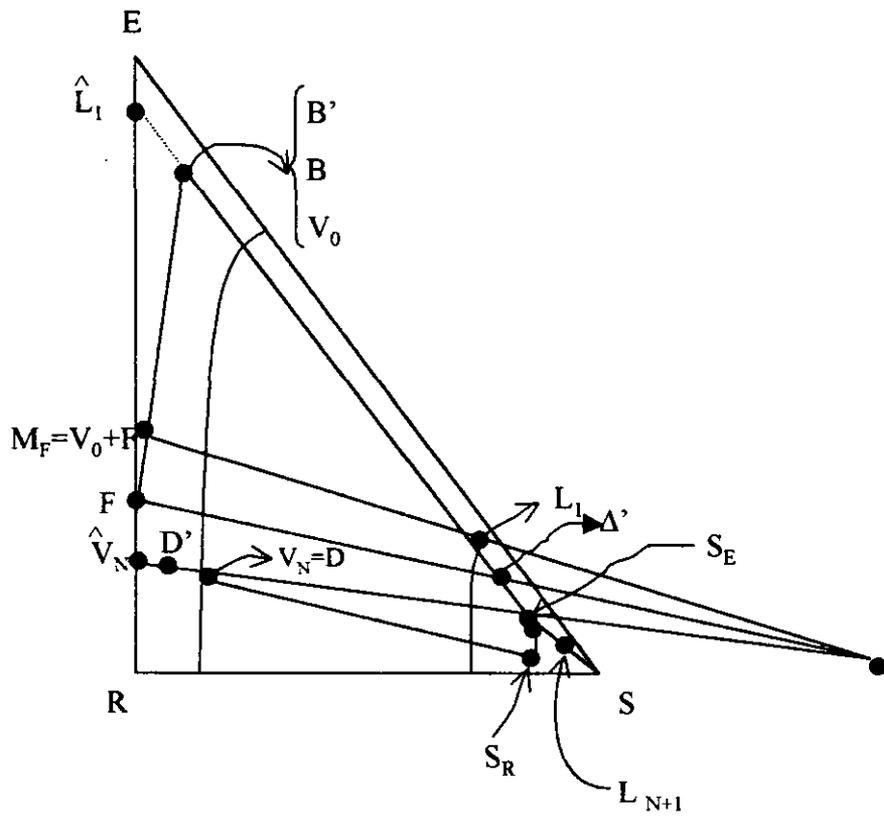


Figura (7) Líneas de balance de materia y localización de Δ y Δ' para el proceso con reflujo de extracto mostrado en la figura (6)

2.7 Extracción con dos alimentaciones

Hasta aquí, sólo se ha hecho mención de la extracción con una alimentación, pero a menudo el diseñador se encontrará con que es posible utilizar dos alimentaciones para el proceso; una de las cuales será relativamente más rica en el componente a extraer, y la otra será relativamente pobre en dicho compuesto. En lugar de combinar las dos corrientes en una sola y perder la separación ya alcanzada, es preferible diseñar un proceso con dos alimentaciones separadas (Smith). Un ejemplo de esto se da en la figura 8, en donde la corriente con la mayor composición de soluto se introduce por el fondo de la columna como V_0 . La corriente pobre en el compuesto se introduce en medio de la columna, en la etapa $M+1$.

Para empezar con la solución gráfica del diseño de este tipo de columnas es necesario definir la localización del plato óptimo de alimentación. El cual se define por Smith de la siguiente manera: es aquel que provee la separación máxima entre el refinado y el extracto en un número dado de etapas ó como aquel que requiere el número mínimo de etapas para obtener una separación específica.

La solución gráfica de este tipo de problemas se parece a la del tipo de extracción con una sola alimentación; su punto de diferencia radica en el hecho de que en este tipo de proceso, la torre de extracción tiene dos secciones y por lo tanto también en la solución gráfica hay dos puntos de diferencia (Δ). El punto de diferencia en el refinado se define por alguno de los dos balances generales de materia.

$$\Delta_L = V_N - L_{N+1} = F + V_0 - L_1 = M_F - L_1 \quad (2-16)$$

$$\text{ó} \quad \Delta_R = L_{N+1} - V_N = L_1 - F - V_0 = L_1 - M_F \quad (2-17)$$

Donde $V_0 = F'$ y $M_F = F + F'$, también es de notarse que $\Delta_R = -\Delta_L$ en donde ambos representan el mismo punto de diferencia Δ .

En esta expresión el signo sólo denota la posible ubicación del punto de diferencia (Δ') en el triángulo que representa al diagrama, en donde R y L por sus siglas en inglés significan si cae en el lado derecho o en el lado izquierdo respectivamente. Para el extracto:

$$\Delta'_L = V_0 - L_1 = V_N - L_{N+1} - F \quad (2-18)$$

ó

$$\Delta'_R = L_1 - V_0 = F + L_{N+1} - V_N \quad (2-19)$$

Asimismo aquí también Δ'_L y Δ'_R representan la localización del punto Δ' en la izquierda o derecha del gráfico respectivamente.

Las relaciones entre los dos puntos diferentes y la alimentación intermedia son las siguientes:

$$\Delta'_L = \Delta_L - F \quad (2-20)$$

$$\Delta'_R = F + \Delta_R \quad (2-21)$$

$$\Delta'_R + \Delta_L = F \quad (2-22)$$

$$\Delta'_L + \Delta_R = -F \quad (2-23)$$

Estas ecuaciones dan la diferencia entre dos puntos e indican que la alimentación intermedia debe caer en medio de ellos.

La construcción de la solución gráfica es posible realizarla en cualquiera de los dos extremos de la columna. La alimentación se introduce en la etapa especificada, o si la localización óptima se establece en ese punto se iniciará la construcción.

Una vez establecida la etapa de entrada de alimentación (ya sea en la etapa óptima o no), las líneas del balance de materia deben desviarse hacia el otro punto de diferencia.

Los balances de materia globales se usan para localizar los puntos de diferencia. La especificación de las dos corrientes de alimentación F' y F fija su relación, y con su adición permite encontrar M_R . El punto de diferencia Δ para la sección del refinado se halla por medio de la ecuación de Δ_L . La resta de L_{N+1} de V_N da la línea recta, la cual pasa a través de Δ . La resta de L_1 de V_0 también da una línea que debe pasar a través de Δ .

Sin embargo, es posible calcular Δ por medio de la intersección de esas dos líneas, esto sin el previo conocimiento de las razones relativas de L_{N+1} , V_N , L_1 , y M_F . La ubicación del punto Δ' está dada por la intersección de las líneas que van desde V_0 hasta L_1 , y la que va desde Δ hasta F . Las etapas deberán empezarse a escalonar con la localización de la alimentación óptima. Se puede utilizar otro tipo de diagrama en el cual se omiten las líneas del balance general; lo cual evita amontonamientos en su trazado, este tipo de diagrama se muestra en la figura (9). La línea punteada que va hasta L_1 se localiza para iniciar el cálculo. El punto de diferencia Δ' se utiliza para localizar las líneas del balance de materia durante todo el proceso hasta el final de la sección de extracción. La línea punteada para la etapa 3 cruza la línea del balance total de materia, la cual conecta Δ y Δ' y pasa hasta F . Esto puede ejemplificarse con el uso de Δ para localizar L_4 , lo cual da una gran diferencia entre L_3 y L_4 , que es mayor si se utiliza Δ' otra vez. El diseñador también puede observar que el uso de Δ en la etapa anterior podría hacer decrecer la diferencia entre L_2 y L_3 . Por consiguiente la localización de la etapa 3 es la localización de la etapa óptima. El punto óptimo de la introducción de la alimentación siempre será en la línea punteada que cruza la línea del balance de materia total que conecta Δ y Δ' . En la figura de ejemplo se requieren cinco etapas cuando la alimentación se introduce en el punto óptimo. Como se ha mencionado antes, la alimentación puede hacerse en otra etapa que no sea la óptima. Esto sucede cuando el equipo utilizado o las condiciones de operación son diferentes a las de diseño. Cuando la alimentación entra fuera del punto óptimo, sucede que la cantidad de soluto separada es menor que la esperada en un número determinado de etapas con alimentación óptima.

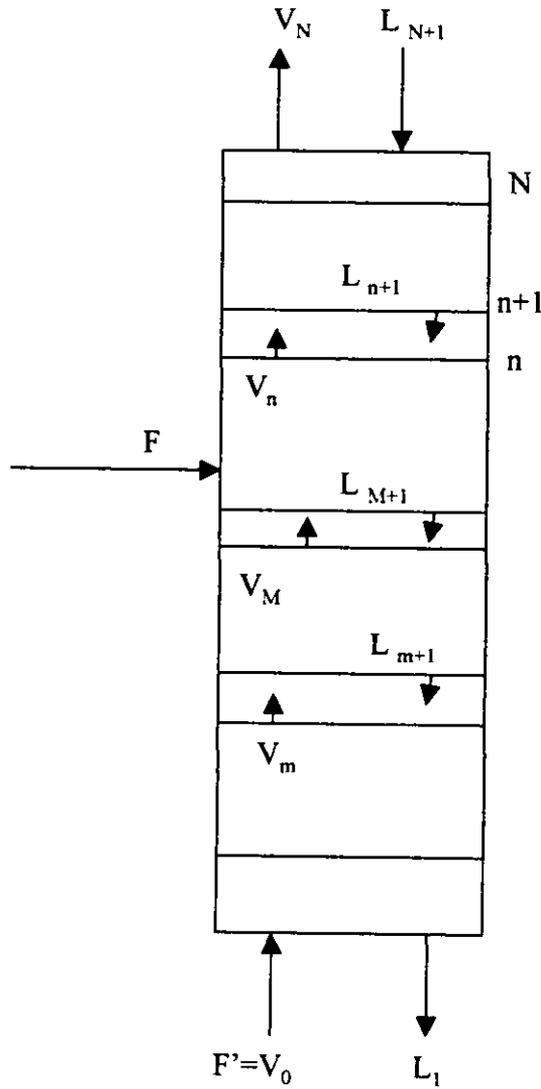


Figura (8) Proceso con dos alimentaciones

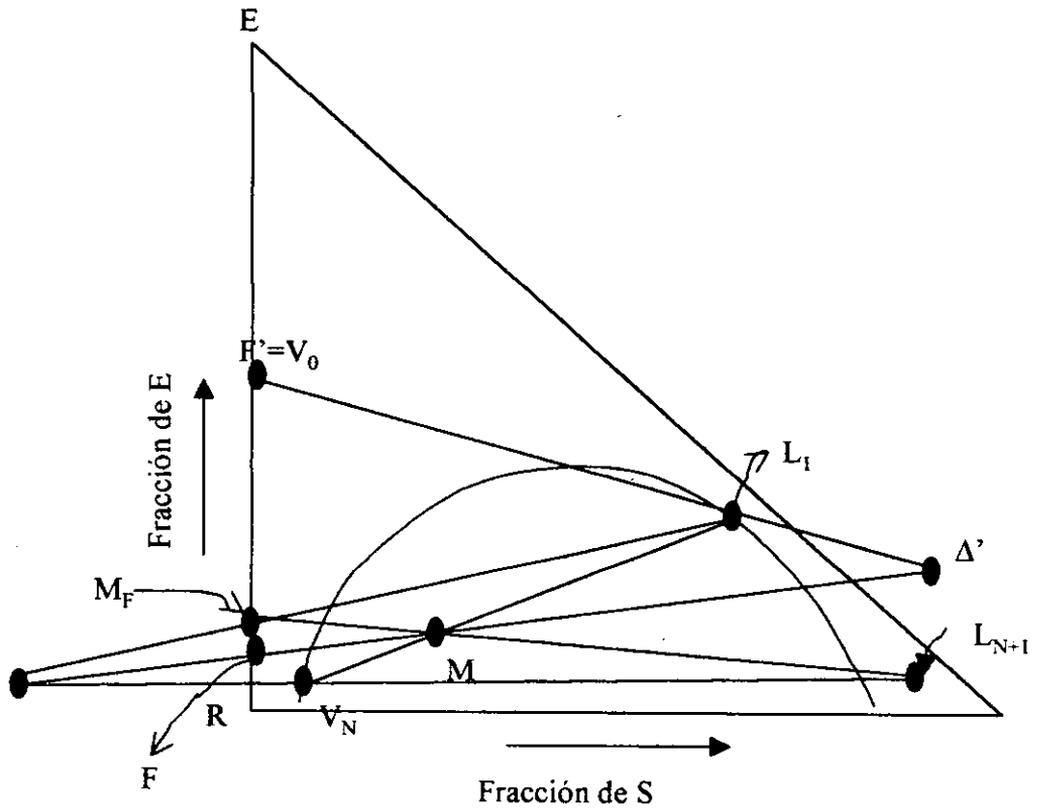
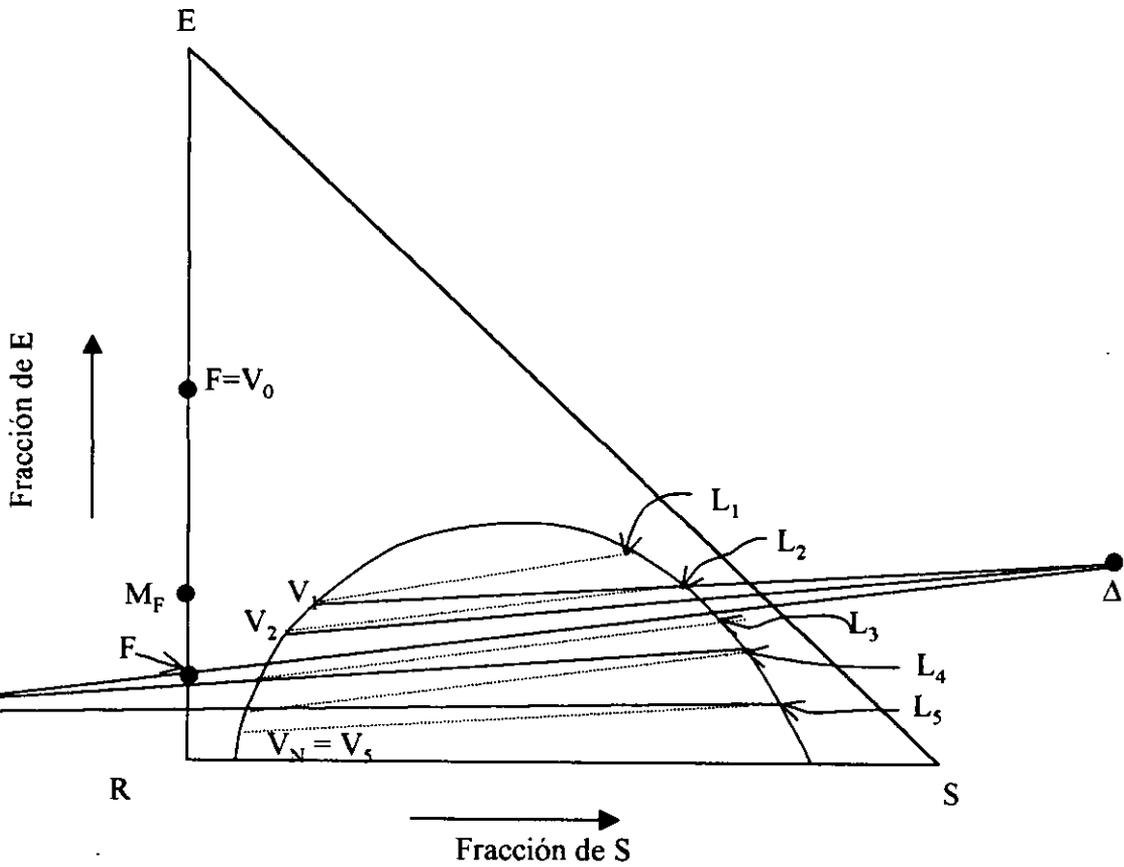


Figura (9) Localización de los puntos de diferencia para un proceso con dos alimentaciones como el mostrado en la figura(8)



Figura(9') Construcción etapa a etapa para un proceso con dos alimentaciones

2.8 Extracción fraccionada

Este tipo de operación difiere de los otros tipos de extracción en cuanto a que aquí se utilizan dos disolventes para separar los dos solutos que se encuentran en la alimentación y a su vez uno de otro. Un bosquejo de una extracción fraccional se muestra en la figura 10. En la parte media de la columna entra la alimentación, la cual contiene los solutos A y B, que se desean separar. La sección por debajo de la alimentación se conoce como la sección de agotamiento, y la sección de la parte de arriba se conoce como sección de lavado. Los solutos se separan por medio de la concentración de uno de ellos en el disolvente de lavado y el otro en el disolvente de agotamiento. La técnica se basa en el hecho de que el coeficiente de distribución de cada soluto es diferente para cada uno de los disolventes, ya que un soluto se irá con el disolvente de lavado y el otro se irá con el disolvente de agotamiento.

Para ejemplificar esto, se asume que la mayoría del soluto A abandonará el equipo en la corriente del extracto, y la mayoría del compuesto B en la corriente del refinado. La sección del extractor por debajo de la alimentación puede tratarse como un extractor simple, como los que los considerados anteriormente. Conforme la solución alimentada va descendiendo a través de esta sección, va entrando en contacto con el disolvente de agotamiento, el cual va ascendiendo en la columna. La mayor parte de la sustancia A y un poco de B se transferirán de la alimentación al disolvente, dependiendo de los diferentes grados que tome el coeficiente de distribución.

Conforme la corriente del extracto va pasando hacia arriba de la etapa de alimentación, se encuentra con el disolvente de lavado que desciende por la columna, el cual preferirá el soluto B sobre el componente A, por lo que ahora "lavará" el indeseado componente B, y en efecto purificará al componente que se está extrayendo con el disolvente de la sección de agotamiento.

Asimismo, el disolvente de agotamiento debajo de la alimentación purifica la sustancia B por medio de la remoción de A y lo lleva de regreso a la columna. El resultado de estas acciones es una sustancia A pura en el extracto que abandona la columna por la parte superior y un componente B puro en el refinado. Esto es análogo a la destilación fraccionada, la diferencia es que la separación se da por diferencias en la estructura química de B y A, en lugar de diferencias en el punto de ebullición.

La extracción fraccionada es un proceso muy útil, pero al igual que todas las operaciones en ingeniería tiene ciertas características que deben tomarse en cuenta para que su aplicación sea de manera efectiva. Una de estas condiciones es la concentración del soluto, debido a que alrededor de la etapa de alimentación puede aparecer un perfil de concentraciones diferente al establecido en el diseño, esto se debe a que en torno a la entrada de la alimentación pasan las corrientes de lavado y de agotamiento, lo que hace que cambien rápidamente las concentraciones en este punto. Estos perfiles de concentración pueden afectar las relaciones de equilibrio (coeficientes de difusión) y las propiedades físicas de las corrientes, y en cualquier diseño de este tipo debe tomarse en cuenta este punto.

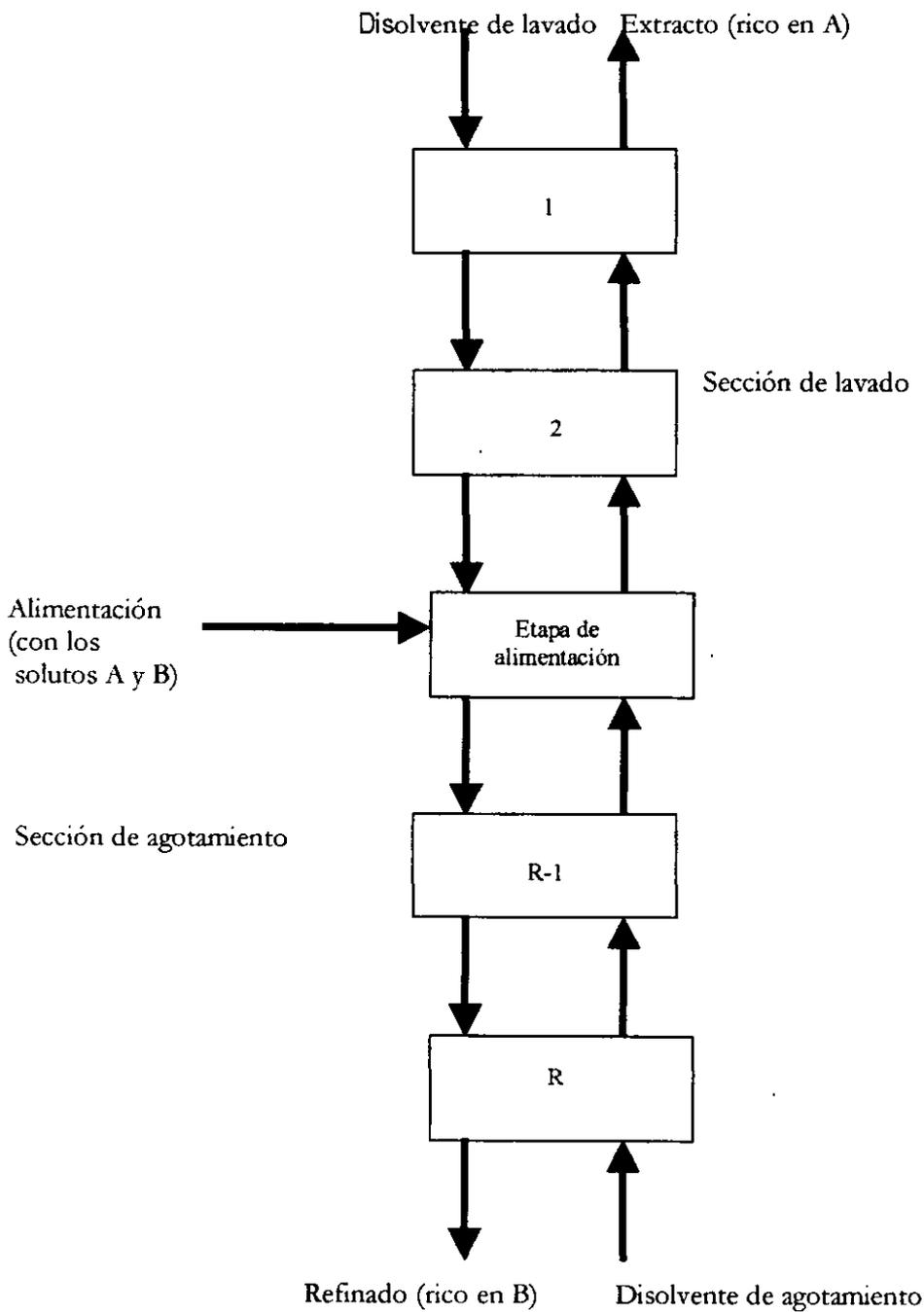


Figura (10) Extracción Líquido - Líquido fraccionada

2.9 Diseño con diagramas másicos

Las líneas de construcción en un diagrama triangular al momento de realizar su trazado resultan difíciles de representar, debido a que las líneas en las cuales se trabaja se amontonan y ocasionan errores de lectura, si esto sucede es deseable que los puntos de los datos del equilibrio se transformen en razones másicas que se definen como:

$$Y_S \text{ ó } X_S = \text{Cantidad de S} / \text{Cantidades combinadas de R y E}$$

$$Y_E \text{ ó } X_E = \text{Cantidad de E} / \text{Cantidades combinadas de R y E}$$

y entonces graficar estos puntos, lo que en el diagrama triangular aparece de forma amontonada, en los diagramas másicos se esparcirá, y en caso de que se proceda de forma inversa se aglutinará. Las razones másicas pueden definirse en términos de moles, peso, o volumen, mientras que las razones o velocidades de las corrientes están dadas en las mismas unidades con las que se definió el sistema.

Enseguida se muestran los diagramas de diseño en base másica, los cuales no difieren mucho de los diagramas triangulares; por lo que sólo se señalarán los puntos más significativos en los cuales difieren los diagramas másicos de los triangulares, y que ya se hizo mención antes. Es de esperarse que en lo correspondiente a la forma de la curva de solubilidad estos diagramas no tienen una correspondencia exacta con los triangulares. Cualquier punto del diagrama triangular se convierte a base libre de disolvente con el simple hecho de trazar una línea del vértice S a través del punto del lado R – E. El valor que se lee de la ordenada puede graficarse directamente en la abscisa en el diagrama másico. Los valores de X_S e Y_S pueden calcularse aritméticamente.

2.9.1 Contacto simple

Es el proceso más simple de todo el espectro de la extracción líquido – líquido. Una construcción típica y análoga en base másica es el diagrama que se muestra en la figura 11. Se debe notar que una corriente de disolvente puro cae en $X_s = \infty$, por consiguiente el punto de adición $M = F + S$ no puede localizarse con la regla de la palanca; pero debe calcularse aritméticamente a partir de las especificaciones de las corrientes de entrada de la alimentación y el disolvente. Cuando es usado un disolvente impuro, el punto que lo representa caerá en una parte alta del diagrama, que hace que la localización de M sea impráctica. La línea de F a través de M es vertical para un disolvente puro, pero se inclina un poco a la derecha o a la izquierda para un disolvente impuro. La dirección de la inclinación depende de la composición de la porción del disolvente libre con respecto al disolvente impuro. La construcción de un gráfico de un extractor de varios contactos simples, esto es una extracción con disolvente fresco en cada etapa se muestra en la figura 12.

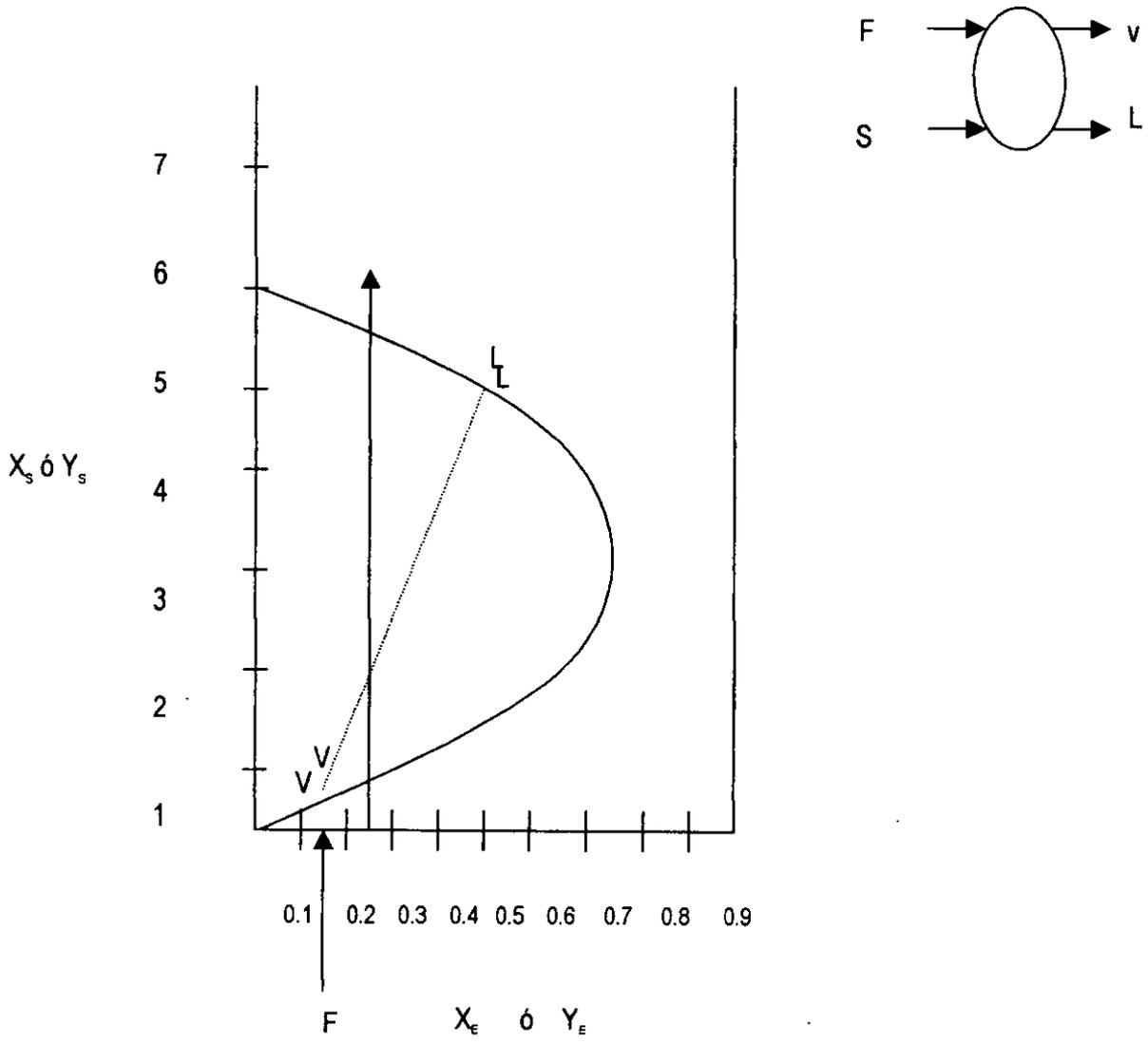


Figura (11) Diagrama másico de una extracción a contacto simple

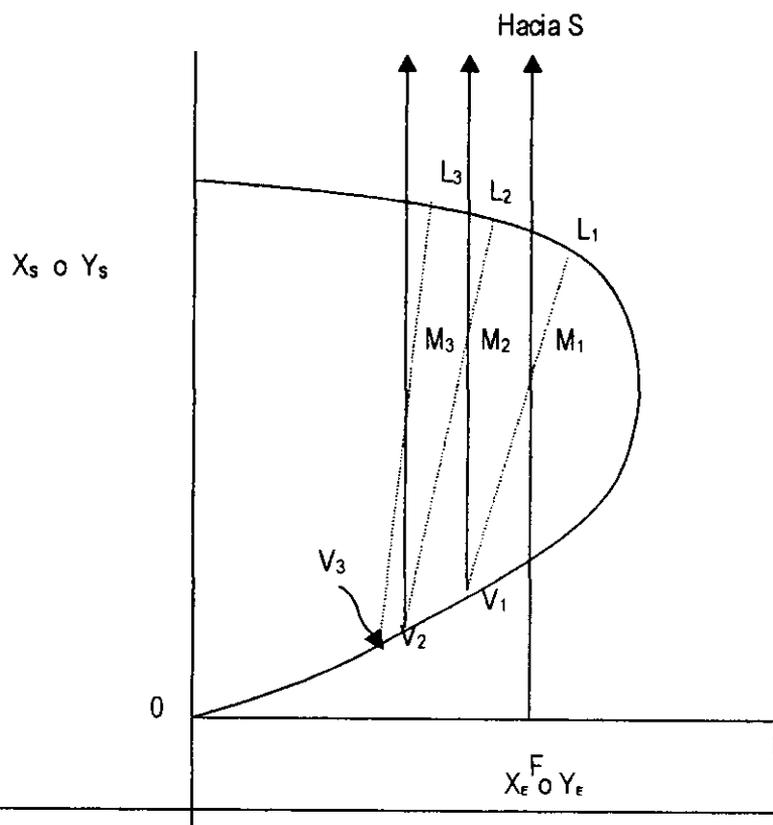
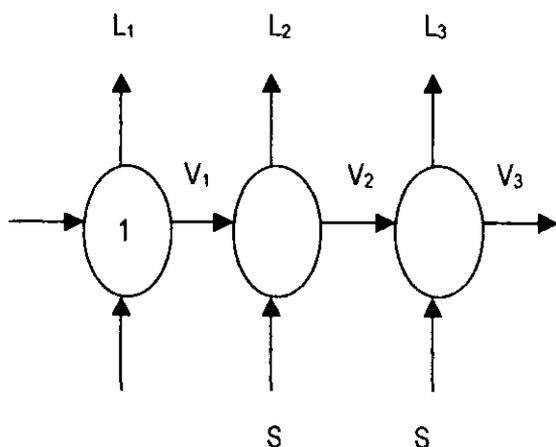


Fig. (12) Diagrama másico extracción a contactos múltiples

2.9.2 Contacto a contracorriente en múltiples etapas

El proceso de etapas múltiples a contracorriente ya se presentó, al igual que su gráfica en coordenadas triangulares. La construcción del diagrama análogo en coordenadas másicas se muestra en la fig.13. Notese que las líneas no se congestionan en comparación con el diagrama triangular. Los puntos S_E , S_R , y L_{N+1} que están apretados en su representación en el diagrama triangular aparecen un poco más separadas en el gráfico en base másica.

La localización del extracto L_1 que dará la concentración máxima de E en base libre de disolvente puede encontrarse en el dibujo 13 por medio del trazado de una línea vertical tangente a la curva de solubilidad. Este trazo corresponde al dibujo de la línea tangente desde el disolvente en el diagrama triangular.

La construcción de etapa a etapa se muestra en la fig.14. Como se dijo anteriormente Δ se localiza por la intersección de las líneas rectas de V_N a L_{N+1} y la de F y L_1 .

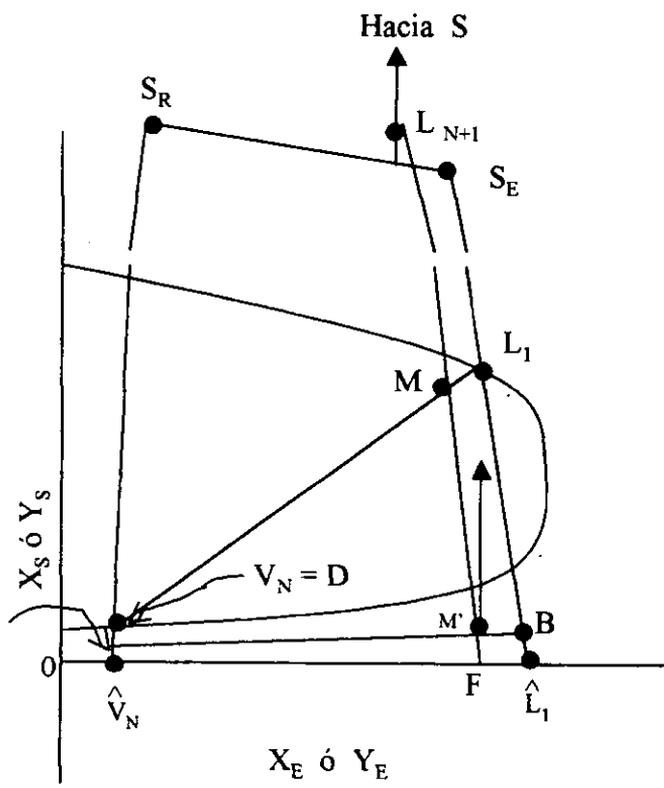


Figura 13 Líneas para un balance total de materia en un proceso de múltiples etapas a contracorriente

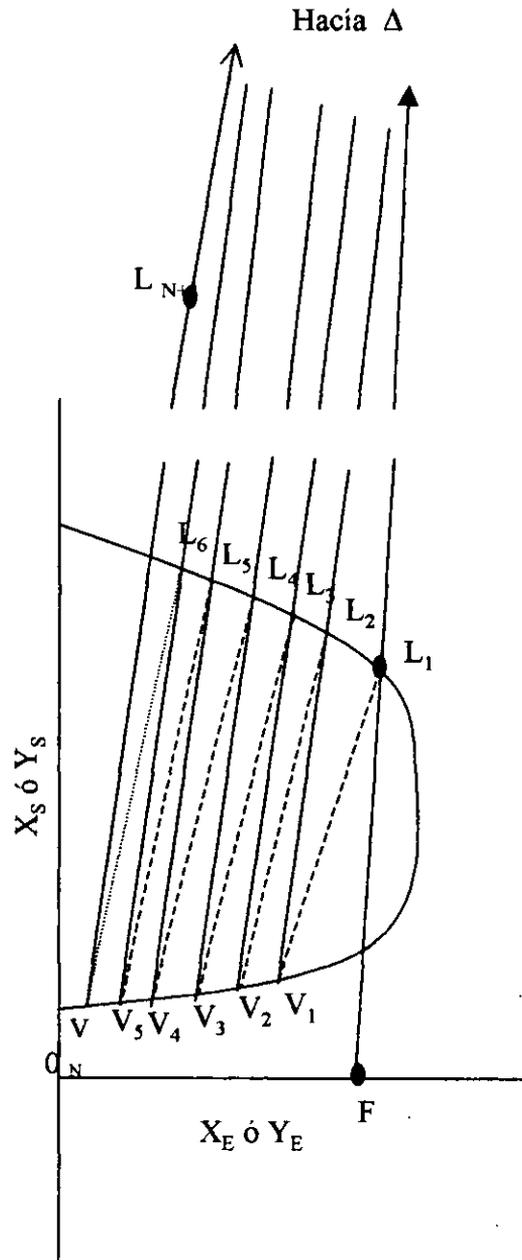


Fig. 14 Diseño etapa a etapa para el balance de materia mostrado en la figura 13.

2.10 Descripción del método McCabe-Thiele para extracción líquido-líquido

La extracción líquido-líquido introduce una complejidad adicional, puesto que el balance de materia debe considerar al menos dos componentes en la alimentación y además un componente adicional como agente material de separación. En destilación el transporte de energía hace posible la separación. En extracción se utiliza un disolvente S, en vez de calor, para extraer un soluto de una mezcla del mismo con otro disolvente W. Los disolventes son inmiscibles entre sí, pero el soluto es miscible con ambos. La fase de extracto, rica en disolvente se representa por E y la fase de refinado por R.

La nomenclatura adoptada es:

$E_1, E_{n-2}, \text{etc.}$ = Flujos de masa totales de la fase del extracto.

E_S = Flujo de masa de disolvente en la fase de extracto (supuesto constante)

$y_1, y_{n-2}, \text{etc.}$ = Fracción en peso de soluto en la fase E

$Y_1, Y_{n-2}, \text{etc.}$ = Flujo de masa de soluto / flujo de masa de disolvente en la fase E.

$R_n, R_{n-1}, \text{etc.}$ = Flujo total de la fase de refinado

R_W = Velocidad de flujo de masa de W inerte en la fase de refinado (supuesta constante).

$x_n, x_{n-1}, \text{etc.}$ = Fracción de masa de soluto en la fase R.

$X_n, X_{n-1}, \text{etc.}$ = Flujo de masa soluto / flujo de masa de inertes en la fase R

Los balances de materia total y de componente por unidad de tiempo, en función de los flujos totales de masa y de fracciones de masa, son:

$$E_2 + R_b = E_b + R_a \quad (2-24)$$

$$R_b x_b + E_2 y_2 = E_b y_b + R_a x_a \quad (2-25)$$

O, de relaciones de masa con R_w y E_s constantes,

$$R_w (X_b - X_a) = E_s (Y_b - Y_a) \quad (2-26)$$

La ecuación anterior expresa la pendiente de una línea de operación en un diagrama X-Y, en función de la diferencia de composición de dos corrientes que se cruzan en la columna

$$\frac{R_w}{E_s} = \frac{Y_b - Y_a}{X_b - X_a} = \frac{\Delta Y}{\Delta X} \quad (2-27)$$

Análogamente , aplicando un balance de materia a la etapa n-2, se obtiene una expresión para la línea de operación

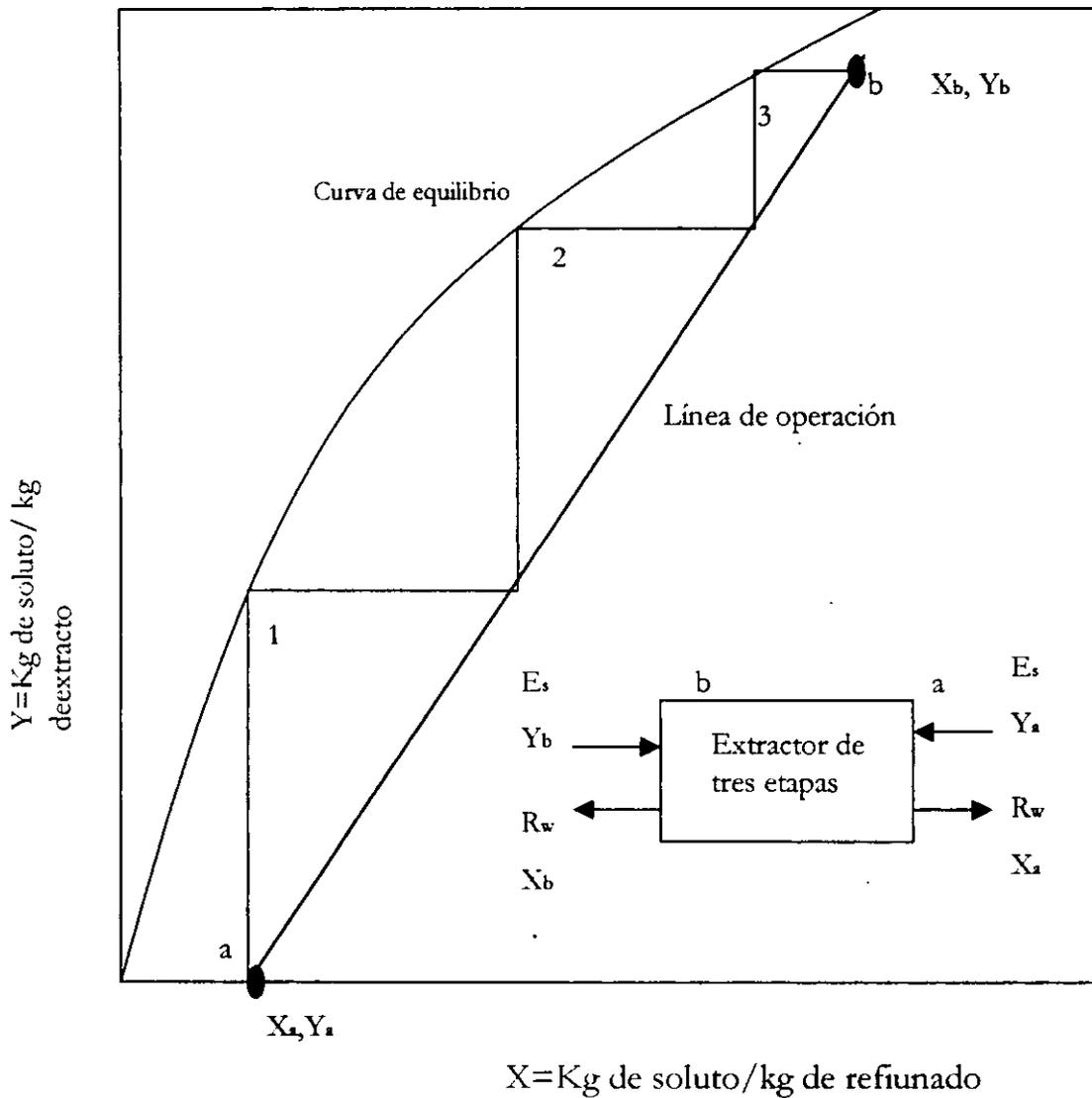
$$E_s Y_2 + R_w X_{n-1} = E_s Y_{n-2} + R_w X_2 \quad (2-28)$$

Por tanto,

$$Y_{n-2} = \frac{R_w}{E_s} (X_{n-1}) + \frac{E_s Y_2 - R_w X_2}{E_s} \quad (2-29)$$

La ecuación anterior es la relación entre las corrientes que se cruzan entre las etapas n-1 y n-2 y representan una línea de operación recta en el diagrama de equilibrio entre fases Y-X, así como para todas las parejas de corrientes que se cruzan entre las etapas cuando R_w y E_s son constantes. Esto es algo análogo a la suposición de flujo superior molar constante en destilación. Obsérvese , sin embargo, que la suposición simplificante de que R_w/E_s es constante permite utilizar indistintamente relaciones de masa o de moles. Un sistema característico que permite suponer que la relación R_w/E_s es constante, con un error relativamente pequeño, es el formado por un disolvente S con el inerte W.

Si las ecuaciones de la curva de equilibrio y del balance de materia se expresan en otras magnitudes diferentes de concentraciones en relaciones de masa X e Y, así como masa de disolvente y masa de inerte F_s y R_w , la línea de operación no será recta, aún para condiciones de inmiscibilidad completa, puesto que la relación de fases totales no es constante debido a la transferencia de soluto entre las fases.



CAPITULO 3

**METODOS RIGUROSOS EN EL
EQUILIBRIO**

3.0 Métodos rigurosos para extracción líquido – líquido.

Anteriormente se consideran los métodos gráficos, los cuales según Henley (1988) son un conjunto de algoritmos empíricos y aproximados para la resolución de los problemas de separación, y los cuales sólo son válidos para el estudio de diseños preliminares. El diseño final del equipo para la separación requiere de una determinación rigurosa de temperaturas, presiones, flujos de las corrientes, composiciones y velocidades de transferencia de calor para cada etapa (sin embargo, los métodos de cálculo riguroso no tienen razón de ser cuando las propiedades físicas del sistema multicomponente o la eficacia de las etapas no son bien conocidas).

Estos datos sólo se pueden obtener por medio de la resolución de los balances de materia y energía (entalpía), y relaciones de equilibrio para cada etapa. Desafortunadamente, estas relaciones son ecuaciones algebraicas no lineales que interaccionan entre sí fuertemente. En consecuencia, las rutinas matemáticas se vuelven complejas y repetitivas. Pero con la ayuda de los sistemas computacionales, las soluciones se alcanzan de forma rápida y rutinaria.

Los cálculos rigurosos de extracción multicomponente difieren de los procesos líquido – vapor (destilación, absorción, y lavado) en muchos aspectos. Esto es debido a que en la extracción se encuentran involucradas dos fases líquidas y segundo el cálculo del coeficiente de distribución entre estas dos fases líquidas, ya que en este se involucra dos coeficientes de actividad en vez de uno:

$$K_i = (y_i / x_i) = (\gamma_i^L / \gamma_i^V) \dots\dots\dots (3-1)$$

Donde V y y se refieren a la fase del refinado y x y L a la fase del extracto. Se observa que en un sistema multicomponente, el cálculo de la composición del refinado en equilibrio con el extracto a una composición conocida es iterativo por naturaleza. Los coeficientes de actividad pueden substituirse en la ecuación (3-1) por sus correlaciones como función de su composición por medio de la ecuación (3-A).

$$\begin{aligned} \log \gamma = & \sum_i B_r x_i (x_r - x_i)^{-1} [x_r (1 - x_r + x_i) - x_i] - \sum_{i \neq j} B_y x_i x_j (x_i - x_j)^0 \\ & + \sum_i C_r x_i (x_r - x_i)^0 [2x_r (1 - x_r + x_i) - x_i] - 2 \sum_{i \neq j} C_y x_i x_j (x_i - x_j)^1 \\ & + \sum_i D_r x_i (x_r - x_i)^1 [3x_r (1 - x_r + x_i) - x_i] - 3 \sum_{i \neq j} D_y x_i x_j (x_i - x_j)^2 \end{aligned} \quad (3-A)$$

La ecuación (3-A) se escribe para cada componente lo cual permite fijar un juego de C ecuaciones simultáneas las que no son lineales o explícitas en los términos de las y_i , las cuales contienen términos logarítmicos debido a la naturaleza de la ecuación (3-A).

Los coeficientes de distribución pueden correlacionarse obviamente con la composición en sistemas ternarios y cuaternarios. Los grados de libertad en un sistema ternario son en número C-1. Para un sistema ternario a una temperatura (o presión) dada, es necesario expresar sólo la variable de concentración para obtener las concentraciones de toda la fase y los coeficientes de distribución. Por lo tanto, K puede graficarse con relación a la variable de concentración en un sistema ternario. En sistemas cuaternarios a temperatura constante, deben especificarse dos variables de concentración y la K deberá graficarse versus una variable de concentración manteniendo constantes los valores de la segunda.

Una segunda y gran diferencia entre la extracción líquido- líquido y los procesos líquido - vapor es la naturaleza del perfil de temperaturas. El perfil de temperaturas en una torre o tren de extracción se fija a priori para tomar la máxima ventaja del comportamiento de la solubilidad del sistema. La temperatura puede ser constante a través de la torre, o puede sostenerse un gradiente de temperatura de la entrada a la salida de la torre para inducir el reflujo. En cualquiera de los casos, las temperaturas de las etapas no están determinadas por la composición de la etapa y no pueden calcularse por la composición por medio del punto de rocío o de burbuja.

Por consiguiente, las temperaturas de cada etapa, especificadas originalmente, se mantienen constantes a través de los cálculos iterativos que tienen como propósito el cálculo de las composiciones de las etapas y fases que correspondan a las condiciones de operación especificadas. Las solubilidades, más que las entalpías, controlan las velocidades de las fases, y los balances no pueden utilizarse para calcular la tasa de los perfiles. Los balances de entalpía, por supuesto, pueden utilizarse para dimensionar el intercambiador de calor que se utilizará para mantener las temperaturas deseadas en cada etapa, pero no son parte del cálculo por etapas.

La transferencia de masa entre las dos fases puede ser unidireccional (similar a la absorción y lavado), o puede ser igual en ambas direcciones (similar a la destilación): el comportamiento de la solubilidad determina cual situación existirá. Una inmiscibilidad completa entre el disolvente y el componente mayoritario del refinado causará que la transferencia de masa sea unidireccional por naturaleza. Si el disolvente muestra un alto grado de miscibilidad con los componentes de la alimentación, ocurrirá la transferencia de masa en ambas direcciones.

La extracción es similar a la absorción y al lavado, en el hecho de que usualmente no es conveniente especificar las tasas de los productos como se hace comúnmente en la destilación. Esto haría difícil calcular la relación disolvente/alimentación que corresponde a la especificación de tasa de productos.

Todos los cálculos de múltiples etapas y componentes, puede considerarse que consisten en dos grandes partes o ciclos en términos de programación de computadoras. El primer ciclo calcula la composición por etapas y las velocidades de las fases que corresponden a un perfil determinado de temperatura, en los métodos de cálculo para la destilación, no es deseable que el programa tenga una convergencia total en el primer ciclo. En la extracción líquido-líquido el primer conjunto de composiciones de etapa, obtenidos en el primer ciclo o ciclo interno, se utiliza en el segundo ciclo para corregir el perfil original de temperatura, después de esto los cálculos se regresan al primer ciclo. La convergencia se obtiene cuando el perfil de temperaturas ya no sufre modificaciones en los cálculos.

En la extracción, como puede observarse, sólo el primero de esos ciclos estará involucrado y será necesaria una convergencia completa en este ciclo sin corrección de perfil de temperaturas. Por lo que es necesario calcular exactamente la composición de las etapas y las velocidades de las fases que corresponden al perfil de temperaturas originalmente especificado. Los cálculos para extracciones de multicomponentes (cuatro o más componentes) no se han desarrollado al mismo grado que los de destilación.

Smith y Brinkey (1960) propusieron un procedimiento de cálculo analítico, el cual puede aplicarse a cualquier número de componentes si sus correlaciones están disponibles para proporcionar valores de K como función de la composición de las fases. Esencialmente su método se reduce a una búsqueda de una composición L_1 y a acompañarla con perfiles de V y L que cuando se usan en el cálculo de etapa a etapa hacia arriba a través de la columna reproducirán la composición especificada del disolvente.

Las temperaturas, más que las pérdidas de calor de las etapas, se especifican para cada una de ellas y se fija así el perfil de temperatura. Las variables de iteración que se asumen al empezar el cálculo son las siguientes:

1. - Producto del extracto (L_1), composición.
2. - Producto del extracto (L_1), tasa.
3. - Velocidad lineal del extracto (L), perfil.

El perfil de velocidades del refinado (V) se calcula del perfil (L) asumido. Los cálculos de etapa a etapa se hacen desde el fondo hacia el domo de manera usual (uso alternado de las relaciones de equilibrio y balances de materia). Las y_n y x_n calculadas, sin embargo, nunca se normalizan. La razón para no normalizar las composiciones de las fases calculadas será evidente más adelante por medio de la derivación de la ecuación (3-10). El cálculo de etapa a etapa proporciona una composición calculada de disolvente. Los errores de la x_s calculada, cuando se utilizan con la ecuación (3-10) para calcular las composiciones de aquellas etapas que si se usan en otro cálculo de etapa a etapa con los mismos perfiles de velocidad, y K podrán reproducir la composición especificada del solvente sin error.

Los autores (Smith et. al.) modificaron ligeramente los perfiles de fase- velocidad por medio de balances de materia alrededor de cada etapa para obtener un nuevo conjunto de perfiles de V y L, los cuales eran consistentes en el sentido del balance de materia, esto es con la composición correcta de las etapas. Los cálculos de etapa a etapa se repiten entonces con la nueva composición de L_1 y los nuevos perfiles de velocidades. Los errores en las x , se utilizan otra vez en la ecuación (3-10) para dar una nueva composición de la etapa y cambiar hacia nuevos perfiles de velocidad.

Después de unos cuantos intentos las composiciones correctas de las etapas y los perfiles de velocidad convergen en valores constantes.

El resultado final de esta iteración es un conjunto de perfiles de composición y velocidades de fase que satisfacen los requerimientos de equilibrio y balances de materia, pero fallan en el criterio de que Σy y Σx debe ser igual a 1.0 en cada corriente a través de la columna. (Los requerimientos de balances de entalpía pueden asumirse como convenientes, debido a que la carga en los calentadores o enfriadores utilizados para mantener las temperaturas de las etapas puede ajustarse independientemente).

Smith y Brinkley (1960) hicieron muchas iteraciones como se describió en el párrafo anterior. La Σx_1 obtenida de cada iteración se grafico contra la tasa L_1 correspondiente. La tasa L_1 a la cual la Σx_1 se convierte en 1.0 se asume como la respuesta final. En otras palabras, el criterio final de convergencia, fue $\Sigma x_1 = 1.0$. Incluso con $\Sigma x_1 = 1.0$, Smith y Brinkley (1960) encontraron que algunas composiciones en medio de las fases no sumaban 1.0. Esta falla se atribuye a errores en la determinación de la representación gráfica de los valores experimentales de K. Se hizo la hipótesis de que una solución numérica perfecta ($\Sigma x = 1.0$ y las $\Sigma y = 1.0$ en todas las corrientes) no sería posible a menos que los datos de equilibrio fueran exactamente correctos. Algunos trabajos realizados posteriormente han demostrado que este razonamiento es incorrecto. Para cualquier conjunto de datos de equilibrio, correctos o incorrectos, se puede obtener una solución numérica perfecta. Una solución perfecta se define como aquella en donde se reúnen todas las restricciones de equilibrio, balances de materia y balances de entalpía, y todas las composiciones de las corrientes suman 1.0 sin normalización. Para cualquier grupo de datos en equilibrio sólo hay una solución perfecta.

El método de Smith y Brankley (1960) falló en su intento de obtener la solución perfecta debido a que no se incluía un procedimiento para la corrección de velocidades de fase para forzar a las Σy y Σx a que sumen la unidad en cada etapa. Friday recalculó el mismo problema de ejemplo y obtuvo una solución perfecta. Las ecuaciones y el procedimiento usado se mostrará en seguida. Pero antes de seá derivada, la ecuación usada por Smith y Brankley (1960). para corregir las composiciones de las etapas. Aún cuando esta ecuación es más difícil de trabajar que las ecuaciones derivadas más adelante, su presentación es valiosa para propósitos de ejemplo debido a que ilustra claramente alguna de las dificultades computacionales que aparecen en sistemas multicomponentes (líquido- vapor o líquido – líquido) donde uno o más componentes tienen valores altos de K.

Ecuación Error .- Para los propósitos de esta derivación, se hace que x_n y y_n se refieran a las concentraciones correctas, es decir, aquellas concentraciones en la etapa n que corresponden al perfil de temperatura especificado y a los perfiles de velocidad asumidos. La concentración asumida del extracto para cualquier componente dado y todas las concentraciones calculadas de los líquidos de la asunción hecha se deduce que contendrán un error e_x el cual se define por la siguiente ecuación

$$\text{Concentración calculada} = x_n + e_{xn} \quad (3-2)$$

La relación de equilibrio para un componente dado en la etapa 1 es:

$$y_1 = K_1 x_1 \quad (3-3)$$

Sin embargo, cuando los cálculos se inician de etapa a etapa, el valor correcto de x_1 no se conoce y se asume un valor equivalente a $x_1 + e_{x1}$. Por consiguiente la relación de equilibrio debe escribirse como:

$$y_1 + e_{y1} = K_1 (x_1 + e_{x1}) \quad (3-4)$$

La resta de (3-3) de (3-4) da

$$e_{y1} = K_1 e_{x1}$$

Debido a que la x_1 "correcta" no se conoce en este punto, las K_1 en las ecuaciones (3-3) y (3-4) deben asumirse o evaluarse a partir de las demás x_1 asumidas. En cualquiera de los dos casos, el error e_{y_1} se relaciona con el error e_{x_1} por cada K_1 usada.

El balance de materia alrededor de la etapa 1 en la figura 15 es

$$L_2 x_2 = V_1 y_1 + L_1 x_1 - V_0 y_0$$

El proceso más complicado que se discutirá, se muestra en la figura 15. Para tal proceso V_0 y_0 se relaciona con L_1 x_1 por

$$V_0 y_0 = \frac{R'(1-g)}{1+R'} L_1 x_1 + F' y_{F'} \quad (3-5)$$

Donde
$$g = \frac{S_E x_{SE}}{L_1 x_1} \quad (3-6)$$

El cual representa el factor de recuperación de un componente dado en el esfuerzo de recuperación en el disolvente. Substituyendo en el balance de materia alrededor de la etapa 1 nos da:

$$x_2 = (S_1 + k) \frac{L_1}{L_2} x_1 - \frac{F' y_{F'}}{L_2} \quad (3-7)$$

Donde
$$S_1 = \frac{K_1 V_1}{L_1} \quad \text{y} \quad K = 1 - \frac{R'(1-g)}{1+R'} = \frac{1+gR'}{1+R'}$$

Debido al error al asumir x_1 , la ecuación (3-7) debe escribirse de la siguiente manera

$$x_2 + e_{x_2} = (S_1 + k) \frac{L_1}{L_2} (x_1 + e_{x_1}) - \frac{F' y_{F'}}{L_2} \quad (3-8)$$

La resta de (3-7) de (3-8) da

$$e_{x2} = (S_1 + k) \frac{L_1}{L_2} e_{x1}$$

Es de notar que los términos de alimentación se cancelan, debido a que la concentración especificada de y_p no contiene error. Se repite este procedimiento en la etapa número 3 con el balance de materia.

$$L_3 x_3 = V_2 y_2 + L_1 x_1 - V_0 y_0$$

Y da la siguiente relación entre e_{x3} y e_{x1}

$$e_{x3} = (S_1 S_2 + k S_2 + k) \frac{L_1}{L_3} e_{x1} \quad (3-9)$$

Debido a que todos los términos de alimentación se cancelan, esto hace posible escribir la ecuación para una etapa N de la columna por analogía

$$e_{xN+1} = (S_1 \dots S_N + k \phi) \frac{L_1}{L_{N+1}} e_{x1} \quad (3-10)$$

Donde ϕ se define como

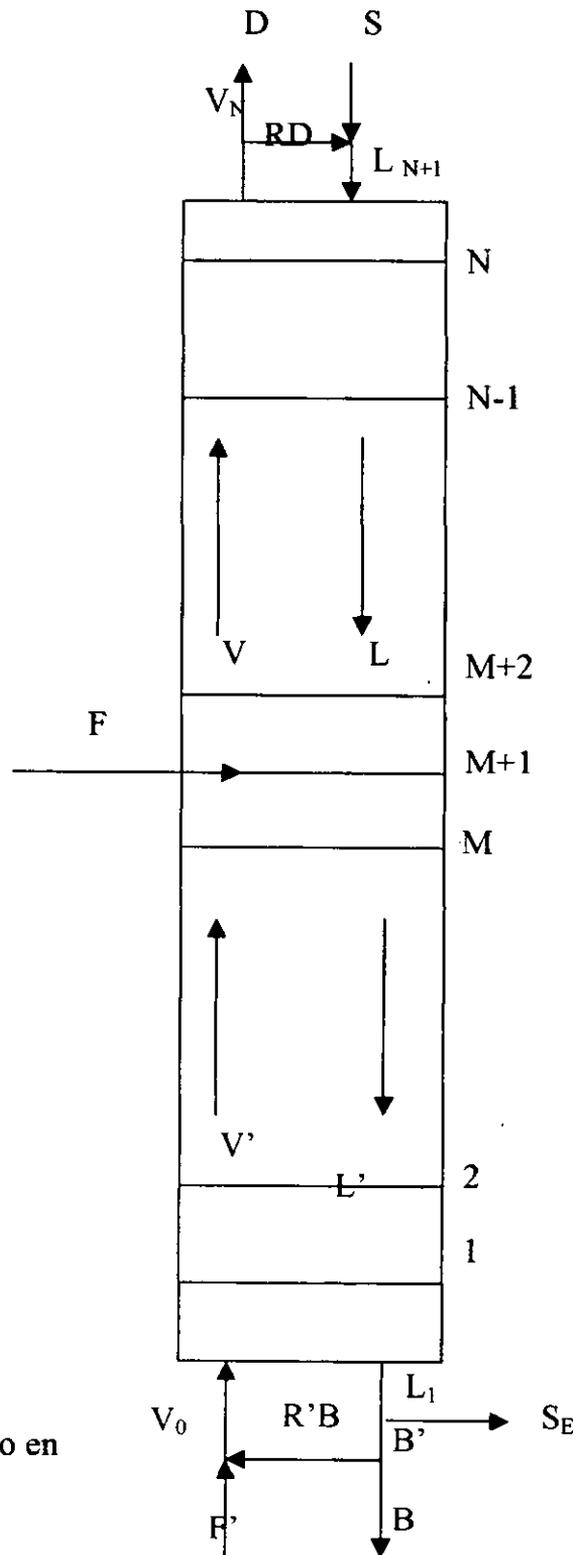
$$\phi = (S_2 \dots S_N + S_3 \dots S_N + \dots + S_{N-1} S_N + S_N + 1)$$

Si no se usa reflujo del refinado, entonces, $e_{xN+1} = e_{xN}$ y la ecuación (3-10) relaciona el error de la composición calculada del disolvente con el error en la x_1 asumida. Si se usa reflujo del refinado, entonces e_{xN} puede relacionarse con e_{x1} por

$$Se_{xN} = De_{yN} + L_1 e_{x1} \quad (3-11)$$

Donde

$$e_{yN} = K_N (S_1 \dots S_{N-1} + K_{S2} \dots S_{N-1} + \dots + K S_{N-2} S_{N-1} + K S_{N-1} + K) (L_1/L_N) (e_{x1}) \quad (3-12)$$



Figura(15) Proceso de extracción con dos alimentaciones y reflujo en ambos extremos.

Una vez que e_{x_1} se obtiene de e_m , las ecuaciones similares a (3-10) y (3-12) se pueden escribir para cada etapa y utilizarse para corregir las concentraciones de la etapa calculada. La aplicación de la ecuación error proporciona de esta manera aquellas composiciones de etapa que corresponden al factor de separación usado. Un nuevo cálculo de etapa por etapa comienza con las x_1 corregidas que pueden reproducir exactamente las x , especificadas si se usaran los mismos factores.

Si la sumatoria de las composiciones x_1 es 1.0, entonces los factores de separación usados son los correctos. Si no, se deben asumir otros perfiles y repetir los cálculos.

Las ecuaciones (3-10) y (3-12) pueden aplicarse a cualquier proceso de etapas en equilibrio que no tenga corrientes laterales. Las concentraciones de las corrientes laterales contienen el mismo error que la corriente de la interetapa de la cual se separa la corriente lateral, y por lo tanto los términos de las corrientes laterales no se cancelan en la derivación como los términos de alimentación. Se pueden derivar ecuaciones similares a las (3-10) y (3-12) para procesos de corrientes laterales. Debe de considerarse que se utiliza $K=1.0$ para destilación, absorción, y extracción, debido a que estos procesos deben realizarse con reflujo del extracto.

Las ecuaciones error muestran la proporcionalidad entre la composición de un componente en una etapa dada con el error asumido en x_1 para ese componente. La e_m para un componente con factor de separación menor que la unidad no diferirá ampliamente del de e_{x_1} para este componente. Las concentraciones obtenidas de la etapa para tales componentes en los cálculos por etapa son estables; esto es, no toman valores fuera de lo razonable. Por otra parte los componentes con factores de separación muy altos son inestables. En la extracción donde la temperatura de la etapas no puede ajustarse para hacer que las y 's sumen 1.0, las concentraciones de las etapas calculadas de los componentes inestables, si no se normalizan, algunas serán igual o mayor que 1.0, esto se notará cuando se empiecen a realizar los cálculos a partir de unas cuantas etapas desde el fondo. Si la x_1 asumida es demasiado pequeña, las concentraciones se harán negativas; si la x_1 es demasiado grande, las fracciones calculadas se harán demasiado grandes. Si estas mismas fracciones se normalizan (o si la temperatura se ajusta, como en la destilación) para hacer que las composiciones calculadas sumen 1.0, el rápido crecimiento de los errores en las concentraciones de los componentes inestables afectará a los componentes estables.

Por lo tanto Smith y Brinkley encontraron necesario calcular cada componente por separado en la columna. Las composiciones por etapas no se normalizaron, y por ende la imperfección de los componentes con valores grandes de K no tuvieron efecto en los valores pequeños de K (disolventes) de los ejemplos trabajados. Los valores altos de K fueron lo suficientemente estables para permitir la selección de los valores de K a partir del conocimiento del valor de las concentraciones en la etapa. Por esta razón, las correlaciones gráficas de los valores k deben graficarse siempre versus las concentraciones del componente u otros componentes con valores menores de K .

Ecuaciones del factor de separación

El cálculo de etapa a etapa puede realizarse utilizando el tipo de etapa por medio del uso alternado de las ecuaciones de equilibrio y balances de materia de un componente dado a través de la columna en una sola expresión analítica, la cual relaciona la composición de un componente en cualquier etapa dada con su concentración en la corriente de salida de los fondos. Tal tipo de expresión se derivará del proceso descrito en la fig.15.

La derivación se inicia escribiendo un balance de componentes alrededor de la etapa 1.

$$L_2 x_2 = V_1 y_1 + L_1 x_1 - V_0 y_0$$

Substituyendo $V_0 y_0$ de la ecuación (3-5) y reemplazando y_1 con $K_1 x_1$ permite que se reescriba el balance como:

$$L_2 x_2 = K_1 V_1 x_1 + k L_1 x_1 - F' y_F$$

Multiplicando el primer término de la derecha por L_1 / L_1 y definiendo S_1 como :

$$S_1 = (K_1 V_1) / L_1$$

$$L_2 x_2 = (S_1 + k) L_1 x_1 - F' y_F \quad (3-13)$$

Moviéndose a las etapas superiores y desarrollando las mismas operaciones del balance de componente

$$L_3 x_3 = V_2 y_2 + L_1 x_1 - V_0 y_0$$

$$L_3 x_3 = S_2 L_2 x_2 + k L_1 x_1 - F' y_F$$

La sustitución de x_2 en (3-13) da

$$L_3 x_3 = (S_1 S_2 + k S_2 + k) L_1 x_1 - (S_2 + 1) F' y_F \quad (3-14)$$

Por analogía ahora es posible escribir la siguiente ecuación, la cual relaciona la concentración del componente en el sobreflujo de la etapa de alimentación con la concentración en la fase del extracto en la primera etapa.

$$L_{M+1} x_{M+1} = (S_1 \dots S_M + k S_2 \dots S_M + \dots + k S_{M-1} S_M + k S_M + k) L_1 x_1 - (S_2 \dots S_M + S_3 \dots S_M + \dots + S_{M-1} S_N + S_{M+1}) F' y_F \quad (3-15)$$

Después de cruzar la alimentación intermedia, otra serie de productos de factores de separación se forma al multiplicarlo por el término $F y_F$. La ecuación que relaciona la concentración en la corriente L_{N+1} con x_1 es como sigue:

$$L_{N+1} x_{N+1} = (S_1 \dots S_N + k S_2 \dots S_N + \dots + k S_{N-1} S_N + k S_N + k) L_1 x_1 - (S_2 \dots S_N + S_3 \dots S_N + \dots + S_{N-1} S_N + S_{N+1}) F y_F - (S_{M+2} \dots S_N + S_{M+3} \dots S_N + \dots + S_{N-1} S_N + 1) F y_F \quad (3-16)$$

Para un manejo más fácil de la ecuación (3-16) se usarán las siguientes definiciones:

$$\Phi = (S_2 \dots S_N + S_3 \dots S_N + \dots + S_{N-1} S_N + S_{N+1}) \quad (3-17)$$

$$\varphi = (S_{M+2} \dots S_N + S_{M+3} \dots S_N + \dots + S_{N-1} S_N + S_{N+1}) \quad (3-18)$$

la ecuación (3-16) se puede escribir como:

$$L_{N+1} x_{N+1} = (S_1 \dots S_N + k \Phi) L_1 x_1 - \Phi F' y_F - \varphi F y_F \quad (3-19)$$

Si el disolvente que entra se presatura con el reflujo (reflujo de refinado), $L_{N+1} x_{N+1}$ no será idéntico con S_w de la siguiente manera: un balance de componentes alrededor de las columnas da

$$L_{N+1} x_{N+1} = V_N y_N + L_1 x_1 - F y_F - V_0 y_0 \quad (3-20)$$

La ecuación (3-5) puede usarse para eliminar $V_0 y_0$. El término $V_N y_N$ puede reemplazarse por medio de un balance alrededor del mezclador de reflujo.

$$V_N y_N = \frac{1+R}{R} L_{N+1} x_{N+1} - \frac{1+R}{R} S x_s \quad (3-21)$$

La sustitución de (3-5) y (3-21) en (3-20) da

$$L_{N+1} x_{N+1} = (1+R) S x_s - k R L_1 x_1 + R F y_F + R F' y_{F'}$$

La sustitución de $L_{N+1} x_{N+1}$ en la ecuación (3-19) y resolviendo la expresión resultante para $L_1 x_1$ da la siguiente relación entre x_1 y x_s para cualquier componente dado

$$L_1 x_1 = \frac{(\phi + R) F' y_{F'} + (\phi + R) F y_F + (1 + R) S x_s}{S_1 \dots S_N + k \phi + k R} \quad (3-22)$$

Si los valores especificados de R , k , $F' y_{F'}$, $F y_F$ y $S x_s$, se sustituyen en la ecuación (3-22), y si los perfiles de temperatura, velocidad y concentración se asumen para fijar los factores de separación de cada etapa, es posible resolver directamente para x_1 que debe asumirse para reproducir la concentración especificada de disolvente en un cálculo de etapa a etapa hacia arriba en la columna. La x_1 obtenida, no será la correcta, desde luego, a menos que los perfiles asumidos sean los correctos. Asimismo, las composiciones por etapas no sumarán 1.0, a menos que los perfiles sean los correctos.

Las formas de la ecuación (3-22) que se aplican a procesos más simples pueden escribirse por inspección. Si no se usa un reflujo de refinado, entonces $R=0$ y

$$L_{N+1}x_{N+1} = S x,$$

Y es aplicable la ecuación (3-19). Si no se usa un reflujo del extracto, $R'=0$ y $k=1.0$. La ecuación (3-15) es aplicable a procesos con una alimentación F' en el fondo y reflujo de extracto si se sustituye N por M en las ecuaciones en donde en donde aparece la alimentación.. Si el reflujo del extracto se usa con una alimentación introducida en una etapa intermedia, se puede aplicar la ecuación (3-19) omitiendo el término $\Phi F' y_F$.

Una columna de extracción simple con una alimentación en el fondo es análoga a una columna simple de absorción, y debido a que $k=1$ mientras $R'=R = F y_F = 0$, $F' y_F = V_0 y_0$, y $L_{N+1}x_{N+1} = S x_s$, la ec. (3-22) se reduce a:

$$L_1 x_1 = \frac{\phi V_0 y_0 + L_{N+1} x_{N+1}}{S_1 \dots S_N + \phi} \quad (3-23)$$

La ecuación (3-23) es idéntica con la ecuación presentada por Edmister para un lavador y sus ecuaciones son análogas para absorbedores, las cuales se basan en el número de etapas desde el domo, en lugar de empezar en los fondos como se mencionó antes. Para una columna de destilación con una alimentación con un condensador total $k=1.0$, mientras que $F' = V_0 = S = 0$ y la ecuación (3-22) se reduce a

$$L_1 x_1 = \frac{(\phi + R) F x_F}{S_1 \dots S_N + \phi + R} \quad (3-24A)$$

El operador y_F se cambió a x_F , que es más común en la nomenclatura de la destilación. La ecuación (3-24 A) aplica a una columna con un condensador total, debido a que la ecuación (3-16) se extiende solo a L_{N-1} y se va a aplicar a una columna de destilación, es necesario que $x_{N+1} = y_D$; es decir, el condensador debe ser total. La ecuación para una columna con un condensador parcial se obtiene escribiendo un balance total para el componente.

$$Dy_D = DK_{N+1} + x_{N+1} = Fx_F + L_1x_1$$

Y substituyendo x_{N+1} de la ecuación (3-16) para dar

$$x_1 = \frac{(\phi + 1/S_{N+1})Fx_F}{L_1(S_1 \dots S_{N+1} + \phi + 1/S_{N+1})} \quad (3-24 B)$$

Donde $S_{N+1} = K_{N+1}D/L_{N+1}$ e igual a $1/R$ para un condensador total.

Las ecuaciones mencionadas arriba, que son llamadas ecuaciones de factor de separación. Estas relacionan la concentración L_1 con una concentración en L_{N+1} y por lo tanto desempeñan la misma función que la de un cálculo de etapa a etapa. Si la derivación se hace de arriba hacia debajo de la columna, los valores de K , L , y V para cada etapa deberán agruparse en la razón L/KV que se define como el factor de absorción.

Ecuaciones de balance de materia.

Las ecuaciones de balance de materia que relacionan L_1x_1 con otras corrientes en la columna se convierten en algo complicado si se utiliza el reflujo del extracto.

Sin embargo para dar una revisión en forma breve, sólo se mostrarán las mas utilizadas.

La cantidad del componente dado en el extracto para la etapa 1 se representa por L_1x_1 . La cantidad del componente en el disolvente recuperado S_E viene dado por

$$S_E x_{SE} = gL_1x_1 \quad (3-6)$$

También

$$\sum_{i=1}^C (gx_1)_i = \frac{S_E}{L_1} \sum_{i=1}^C (x_{SE})_i$$

ó
$$S_E = L_1 \sum_{i=1}^C (gx_1)_i \quad (3-25)$$

Debido a que $S_E = L_1 - (1 + R')B$

Entonces $B = \frac{L_1}{1 + R'} \left[1 - \sum_{i=1}^c (gx_1)_i \right]$ (3-26)

La corriente V_0 esta dada por $V_0 = R'B + F'$ (3-27)

Y $V_0 y_0 = \frac{R'(1-g)}{1+R'} L_1 x_1 + F' y_F$ (3-5)

Un balance del componente alrededor del equipo recuperador de disolvente y el divisor de reflujo del extracto,

$$L_1 x_1 = S_E x_{SE} + (1 + R') B x_B$$

Que se reagrupa para obtener

$$B x_B = \frac{1-g}{1+R'} L_1 x_1$$
 (3-28)

Un balance del componente alrededor de la columna relaciona L_1 con la composición del refinado de la siguiente manera

$$F y_F + S x_S + V_0 y_0 = D y_D + L_1 x_1$$

La sustitución de $V_0 y_0$ de (3-5) da

$$F' y_{F'} + F y_F + S x_S = D y_D + k L_1 x_1$$
 (3-29)

La D puede eliminarse con un balance total

$$D = F + S + V_0 - L_1$$
 (3-30)

Las ecuaciones (3-26) y (3-27) se combinan para dar una expresión para V_0 , la cual cuando se sustituye en la ecuación (3-30) da

$$D = F' + F + S + j L_1$$
 (3-31)

Donde j representa un grupo de términos que se muestran en la siguiente ecuación:

$$j = \frac{R'}{1+R'} \left[1 - \sum_{i=1}^c (gx_i)_i \right] - 1.0 \quad (3-32)$$

Sustituyendo en la ecuación (3-31) en la (3-29) y reacomodando se obtiene la expresión deseada para L_1 .

$$L_1 = \frac{F'(y_{F'} - y_D) + F(y_F - y_D) + S(x_S - y_D)}{kx_1 - jy_D} \quad (3-33)$$

Si no se utiliza reflujo del extracto, $R'=0$ y el denominador se reduce a $x_1 - y_D$.

El método de cálculo que se describió en los párrafos anteriores utiliza los datos de equilibrio en la forma de coeficiente de distribución $K = y_i / x_i$, donde y_i y x_i se refieren al refinado y al extracto respectivamente. Uno de los puntos a considerar es que estos datos son muy escasos, por lo que generalmente hay que calcular las líneas de traslape analíticamente u obtener datos experimentales. Esto se manifestará más adelante cuando se describa el ejemplo de cálculo para este método.

3.1 Método de la θ -simple

El método numérico que se presenta enseguida, se aplica a sistemas que contienen cualquier número de componentes distribuidos entre las dos fases líquidas.

Afortunadamente, para su diseño las columnas de extracción líquido - líquido se operan usualmente en condiciones cercanas a las isotérmicas, debido a que los datos de equilibrio y entalpía para esos sistemas raramente están disponibles. Por lo tanto, en el método que se presenta a continuación sólo se consideran las operaciones en condiciones cercanas a las isotérmicas. Cuando los datos dependientes de la temperatura están disponibles, el efecto de la temperatura puede incluirse, con el uso de otros procedimientos de cálculo.

Cálculo de un extractor isotérmico a contracorriente. Figura 16

El proceso de separación en la extracción líquido - líquido se basa en el hecho de que existen ciertos pares de líquidos que se apartan grandemente del comportamiento ideal en sus relaciones, por lo que son solamente parcialmente miscibles.

Para este método se parte de la consideración de platos perfectos, es decir,

$$v_{1i} = \frac{v_{N+1,i} + l_{0i}}{1 + \theta \left(\frac{l_{Ni}}{v_{1i}} \right)_{ca}}$$

A través del uso de conceptos de termodinámica clásica, esta expresión puede clasificarse dentro de los conceptos de equilibrio líquido - vapor, a través de:

$$y_i = K_i x_i \quad (3-34)$$

En este caso K_i esta definida por:

$$K_i = \frac{\gamma_i^L}{\gamma_i^V}$$

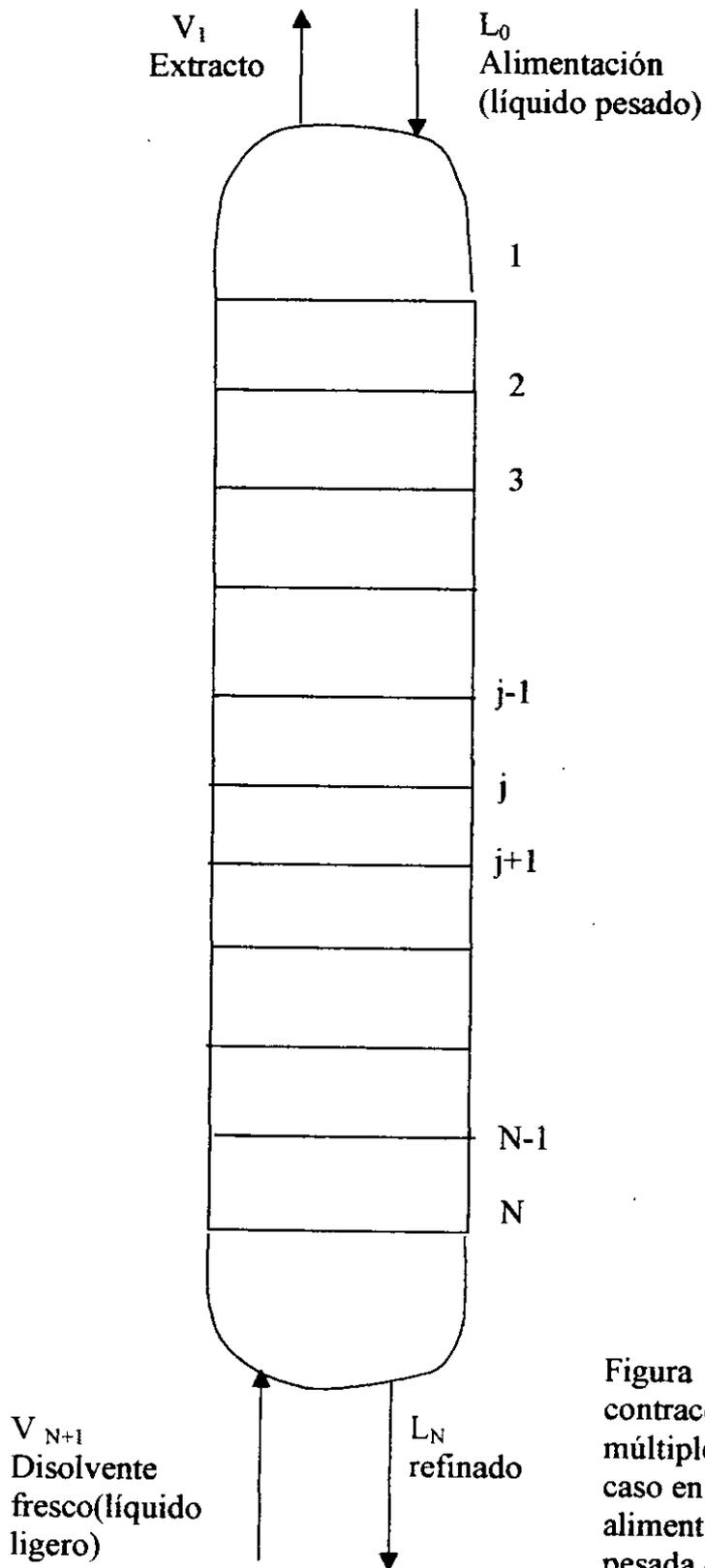


Figura 16 Extractor a contracorriente con múltiples etapas para el caso en el cual la alimentación es más pesada que el disolvente.

Para dar una mejor visión acerca de este algoritmo, se consideran los problemas involucrados en la unidad de extracción a contracorriente como se muestra en la figura 16. Se supone que el problema a resolver consiste en la determinación de la distribución del producto que se puede esperar cuando se especifica la tasa de disolvente fresco V_{N+1} , la tasa de alimentación L_0 , el número de etapas, los juegos de composiciones $\{x_{0i}\}$ y $\{y_{N+1i}\}$, la temperatura y la presión de la columna.

Para iniciar el procedimiento de cálculo propuesto, se asumen los grupos de tasas de disolvente y refinado, $\{(V)_a\}$ y $\{(L)_a\}$ así como también los grupos de composiciones, $\{(x)_a\}$ y $\{(y)_a\}$, y se utilizan para calcular el grupo correspondiente de valores de K , $\{(K)_a\}$.

Sobre la base de esos valores asumidos, el valor de absorción es

$$(A_{ji})_a = \left(\frac{L_j}{K_j V_j} \right)_a$$

y se calculan todos los valores.

Después de que se realizó el cálculo de las A_{ij} , las tasas de componentes del flujo pueden determinarse a través de la resolución de la matriz de ecuaciones que se presenta a continuación

$$A_i = \begin{bmatrix} -(A_{1i}+1) & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_{1i} & -(A_{2i}+1) & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & A_{N-1i} & -(A_{Ni}+1) & \dots \end{bmatrix}$$

No obstante que la matriz representa una combinación de balances de materia y relaciones de equilibrio, algunas veces se hace mención de ella como un simple balance de materia de componentes. La resolución de la tasa del componente de flujos $\{V_{ij}\}$ de la matriz se puede obtener mediante el uso de fórmulas simples, algunas veces llamadas algoritmo de Thomas.

Después de que se han determinado los flujos de los componentes $\{(V_{ij})_{ca}\}$ por medio de la matriz para cada componente i , el juego correspondiente de tasas de flujo $\{(l_{ij})_{ca}\}$ en la otra fase se calcula por medio del uso de la relación:

$$(l_{ij})_{ca} = (a_{ij})_a (V_{ij})_{ca}$$

Luego se aplica el método de convergencia de la θ - simple. Después de que se encuentra la θ deseada ($\theta > 0$) que minimiza $g(\theta)$, los juegos correspondientes de valores para el flujo total y composiciones $[\{V_j\}, \{L_j\}, \{x_{ji}\}, \{y_{ji}\}]$ se encuentran por medio de las siguientes ecuaciones:

$$v_{li} = \frac{v_{N+1,i} + l_{0i}}{1 + \theta \left(\frac{l_{Ni}}{v_{li}} \right)_{ca}} \quad (3-36)$$

$$l_{ji} = \eta_j \left(\frac{l_{ji}}{v_{li}} \right)_{ca} v_{li} \quad \text{y} \quad v_{ji} = \sigma_j \left(\frac{v_{ji}}{v_{li}} \right)_{ca} v_{li} \quad (3-37)$$

Donde η_j y σ_j son hasta este punto multiplicadores indeterminados. Las definiciones dadas por la ecuación anterior implican que:

$$L_j = \eta_j \lambda_j \quad \text{y} \quad V_j = \sigma_j \nu_j \quad \dots\dots\dots(3-38)$$

Donde

$$\lambda_j = \sum_{i=1}^c \left(\frac{l_{ji}}{v_{li}} \right)_{ca} v_{li} \quad \text{y} \quad \nu_j = \sum_{i=1}^c \left(\frac{v_{ji}}{v_{li}} \right)_{ca} v_{li}$$

De la definición de fracción mol y las relaciones anteriores, se obtiene

$$x_{ji} = \frac{\left(\frac{l_{ji}}{v_{li}}\right) v_{li}}{\lambda_j} \quad y \quad y_{ji} = \frac{\left(\frac{v_{ji}}{v_{li}}\right) v_{li}}{v_j} \quad (3-39)$$

Los multiplicadores σ_{j+1} y η_j se relacionan con un balance general de materia que abarca desde el domo de la columna hasta cualquier plato j de la manera siguiente:

$$\sigma_{j+1} v_{j+1} - \eta_j \lambda_j - \beta = 0 \quad (3-40)$$

Donde

$$\beta = V_1 - L_0$$

Para cualquier elección de θ , los valores de las cantidades V_1, v_{j+1} y λ_j se pueden calcular, y entonces la ecuación anterior se puede reducir a una ecuación con dos incógnitas. Consecuentemente, existirán un número infinito de opciones de valores de esas variables que satisfagan la ecuación. Para obtener una resolución satisfactoria se utilizará la siguiente relación

$$\sigma_{j+1} = \frac{1}{\eta_j} (1 \leq j \leq N-1) \quad (3-41)$$

Cuando las ecuaciones anteriores se resuelven para η_j , se obtiene la siguiente fórmula

$$\eta_j = \frac{-\beta + \sqrt{\beta^2 + 4\lambda_j v_{j+1}}}{2\lambda_j} \quad (3-42)$$

Cabe mencionar que las ecuaciones antes descritas requieren que $\eta_N = \theta$ y $\sigma = 1$. Por lo tanto, para cada elección de θ , los valores de las composiciones y tasas totales de flujo deben calcularse con todas las ecuaciones descritas arriba. Ese grupo de composiciones corregidas se utilizan para calcular el coeficiente de actividad γ_{ji}^V γ_{ji}^L [Donde γ_{ji}^V es función de $\{y_{ji}\}$ y γ_{ji}^L es función de $\{x_{ji}\}$ para cada componente i en cada plato j]

Entonces los coeficientes de actividad corregidos se utilizan para calcular un nuevo grupo de valores de K $\{K_{ji}\}$ por medio del uso de la definición proporcionada en la ecuación (3-34).

Sobre la base de ese juego mejorado de valores de las variables, $\{V_j\}, \{L_j\}, \{K_{ji}\}$, el procedimiento descrito se repite resolviendo primero los balances de materia (ecuación 3-35).

El procedimiento descrito se repite hasta que la tolerancia sobre θ y/o las V_j se satisfagan.

Un resumen de los pasos propuestos por el Holland para el cálculo se da a continuación:

1.- Asumir los valores de los siguientes grupos de variables $\{V_j\}, \{y_{ji}\}$ y $\{x_{ji}\}$. Sobre la base del grupo de valores de $\{(V_i)_a\}$ asumidos calcular el juego correspondiente de tasas de flujo $\{(L_i)_a\}$ por medio del uso de balances de materia totales. De los grupos de valores asumidos de composiciones $\{(y_{ji})_a\}$ y $\{(x_{ji})_a\}$, calcular los coeficientes de actividad y por ende los valores correspondientes de K $\{(K_{ji})_a\}$ por medio de la ecuación (3-34).

2.- Usar los resultados del paso 1 para resolver los balances de materia de cada componente i y señalar las tasas de flujo total $\{(V_{ji})_{ca}\}$. Entonces calcular el juego correspondiente de tasas de flujo $\{(l_{ji})_{ca}\}$ para cada componente en la otra fase por medio del uso de la relación:

$$(l_{ji})_{ca} = (A_{ji})_a (V_{ji})_{ca}$$

3.- Sobre la base de las tasas de flujo calculadas, $\{(v_{ji})_{ca}\}$ y $\{(l_{ji})_{ca}\}$, en el paso 2 y las tasas de flujo total, $\{(V_i)_a\}$ y $\{(l_i)_a\}$, asumidas en el paso 1, encontrar la θ que minimiza $g(\theta)$.

Sobre la base de esta θ , calcular el juego correspondiente de composiciones y tasas totales de flujo con el uso de las ecuaciones 3-35 a 3-42. Usar ese grupo de ecuaciones corregidas para encontrar las relaciones correctas de K (K_{ji}), usar el método de búsqueda conocido como la "sección de excelencia" para encontrar la θ que minimiza $g(\theta)$.

4.- Si θ y/u otras variable tal como las tasas de flujo, satisfacen las tolerancias preasignadas, se ha logrado la convergencia; de otra manera, se repite el procedimiento. El juego mas reciente de valores de las variables encontradas en el paso 3 se convierte en los valores asumidos de las variables en el paso 1.

Aplicación del método a otros diseños

Si la alimentación es más ligera que la corriente del disolvente, la alimentación se identifica como V_{N+1} más que L_0 (ver la figura 16). El procedimiento de cálculo para el caso en que la alimentación se define como V_{N+1} es idéntico al descrito anteriormente.

Cuando una alimentación se introduce en un plato intermedio f en la columna, como se muestra en la figura 17, el procedimiento de cálculo es el mismo que el descrito arriba, excepto que los balances de materia deben reflejar la adición de la alimentación en el plato f . En el tratamiento de todos los platos de alimentación así como los platos donde entra el disolvente se utiliza un modelo diferente. En este modelo se hace la suposición de que toda la alimentación entra en contacto íntimo con el líquido que abandona y entra al plato de alimentación, y que la alimentación se distribuye entre las dos fases líquidas como la corriente ligera V_f que abandona el plato de alimentación f y que se encuentra en equilibrio con la corriente del líquido pesado que abandona el plato L_f . El balance de materia de los componentes que abarca el plato de alimentación f está formado entonces por:

$$A_{f-1,i}V_{f-1} - (A_{fi} + 1)V_{fi} + V_{f+1,i} = -FX_i \quad (3-43)$$

Donde

$$A_{f-1,i} = \frac{L_{f-1}}{V_f K_{fi}} \quad \text{y} \quad A_{fi} = \frac{L_f}{V_f K_{fi}}$$

La fórmula de v_{ii} para la columna mostrada en la figura 17 se obtiene cuando se reemplaza $(V_{N+1i} + l_{0i})$ en la ecuación 3-35 por $(V_{N+1i} + l_{0i} + Fx_i)$.

Cuando se utiliza reflujo del extracto para ayudar a efectuar una separación dada como se muestra en la figura 18, el procedimiento de cálculo y método de convergencia es el mismo que el descrito anteriormente, excepto por las matrices de balance de materia que se deben revisar como un requerimiento para reflejar la configuración de la columna. La etapa de "remoción de disolvente" que se muestra en la figura 18 es similar a un condensador en una columna de destilación. A diferencia de un condensador, de cualquier modo, la etapa de remoción de disolvente consiste raramente en sólo una etapa de equilibrio. En vez de esto, "la remoción de disolvente" consiste generalmente en algún otro tipo de proceso de separación, el cual debe solucionarse simultáneamente con el problema del extractor. Para poder enfocar la atención en la solución del problema de extracción, se hará la suposición de que las separaciones efectuadas en la etapa de remoción del disolvente son independientes de la tasa de flujo y la composición de alimentación de V_1 hacia la etapa de remoción del disolvente. Es decir, que S_i se considera el factor de separación, sí para cada componente i es constante, donde

$$s_i = \frac{L_0 x_{0i} + D x_{Di}}{V_0 y_{0i}} = \left(\frac{L_0}{D} + 1 \right) \frac{d_i}{v_{0i}} \quad (3-44)$$

El balance de materia que engloba las etapas de remoción de disolvente está dada por:

$$v_{ii} = v_{0i} + l_{0i} + d_i = v_{0i} + \left(\frac{L_0}{D} + 1 \right) d_i \quad (3-45)$$

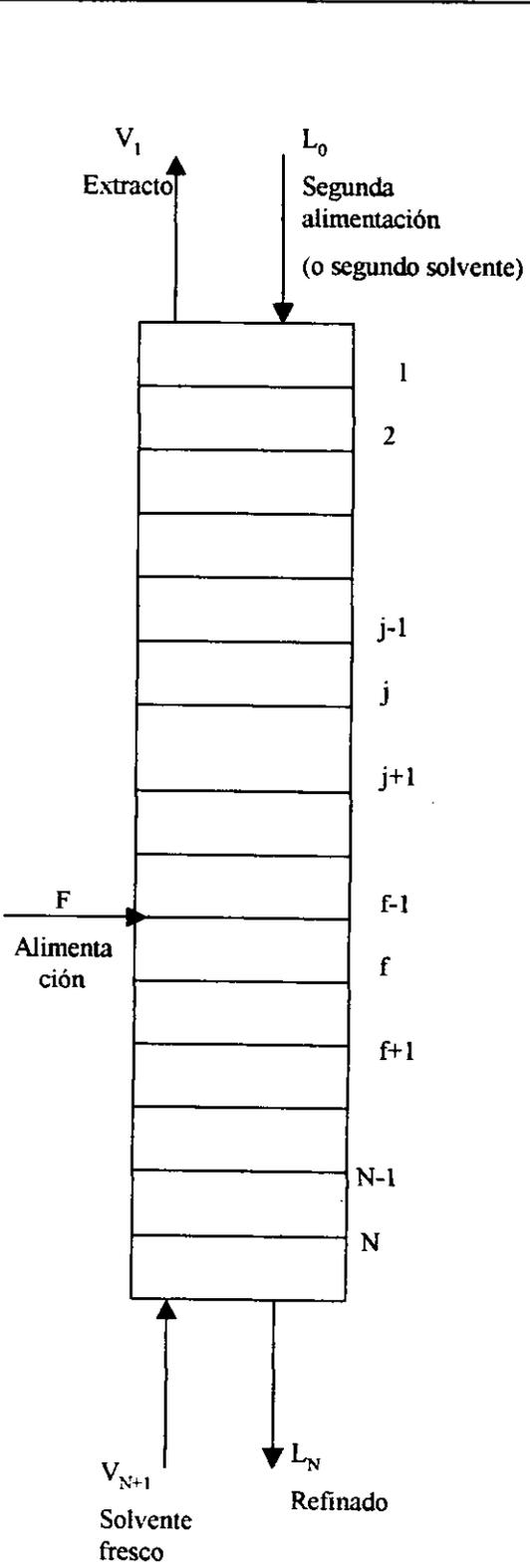


Figura (17) Extractor que puede operar con dos alimentaciones o dos solventes

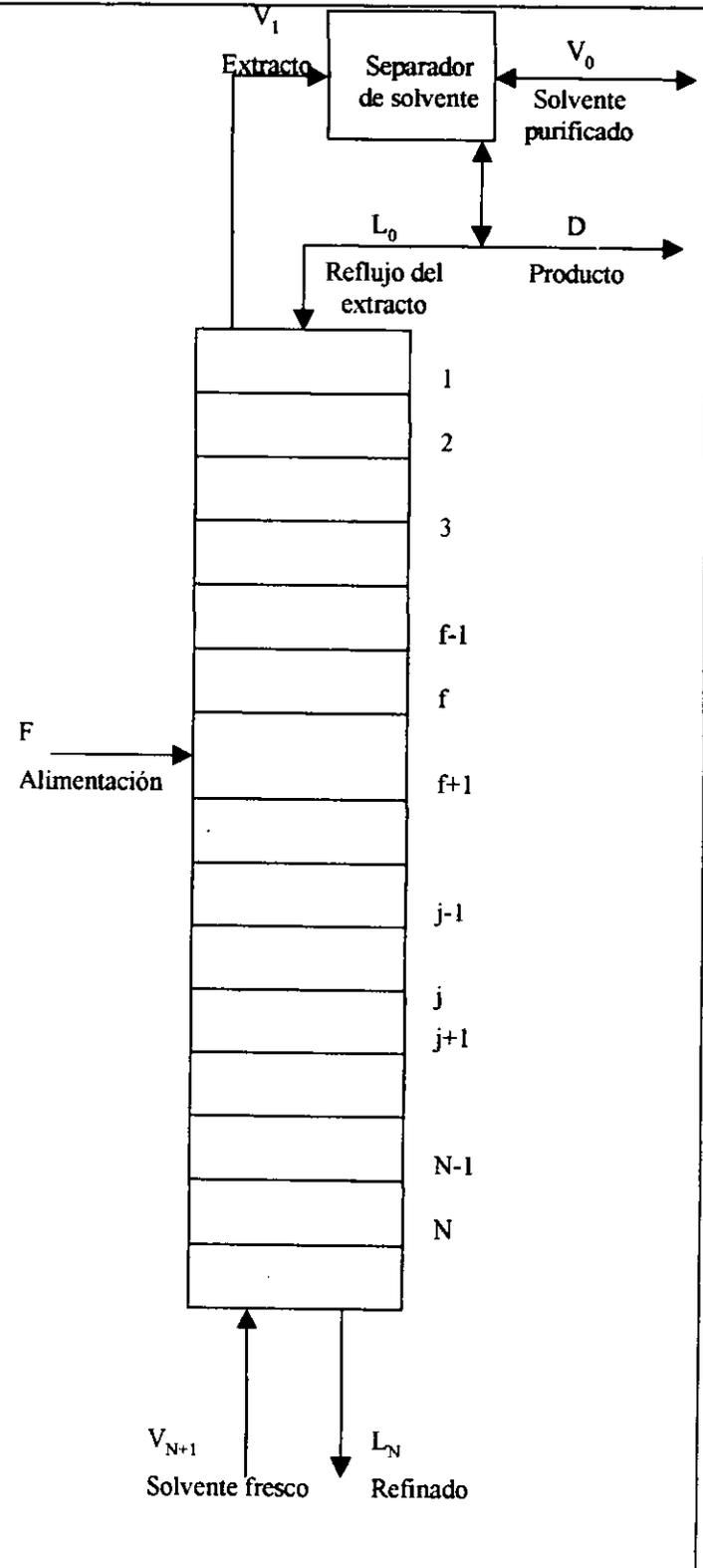


Figura (18) Extractor con reflujo de extracto

La eliminación de d_i de las ecuaciones (3-44) y (3-45) da

$$-(1 + s_i)v_0 + v_{1i} = 0 \quad (3-46)$$

Para cualquier componente i , el balance de materia que encierra el plato 1 está dado por

$$v_{2i} + l_{0i} - v_{1i} - l_{1i} = 0 \quad (3-47)$$

La razón l_{0i}/v_{0i} debe establecerse en términos de S_i mediante el uso de la ecuación (3-44)

$$\frac{l_{0i}}{v_{0i}} = \left(\frac{\frac{L_0}{D}}{\frac{L_0}{D} + 1} \right) s_i \quad (3-48)$$

por medio del uso de esta relación y la relación de equilibrio $l_{1i} = A_{1i}v_{1i}$, es posible restablecer la ecuación (3-47) de la siguiente forma:

$$\left(\frac{\frac{L_0}{D}}{1 + \frac{L_0}{D}} \right) s_i v_{0i} - (A_{1i} + 1)v_{1i} + v_{2i} = 0 \quad (3-49)$$

los balances de los componentes restantes se desarrollan de la misma manera, y el grupo de balances de materia para cualquier componente i en la columna que tenga la configuración mostrada en la figura 18 se representa por una matriz

$$A_i = \begin{bmatrix} -(1+s_i) & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{s_i}{1+D/L_0} & -(1+A_{1i}) & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_{1i} & -(1+A_{2i}) & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & A_{N-1,i} & -(1+A_{Ni}) \end{bmatrix}$$

$$v = [v_0 v_{1i} \dots v_{fi} \dots v_{Ni}]^T$$

$$h = [0 \dots 0 FX_i 0 \dots 0 v_{N+1}]^T \tag{3-50}$$

(El elemento Fx_i aparece en la hilera como f para indicar la ecuación(3-43))

Para un extractor con reflujo, el método de la θ - simple difiere un poco del procedimiento descrito; por lo que el multiplicador θ se define como:

$$\frac{l_{Ni}}{v_{0i}} = \theta \left(\frac{l_{Ni}}{v_{0i}} \right)_{ca} \tag{3-51}$$

Aquí nuevamente, es necesario que las tasas correctas satisfagan el balance total de componente

$$FX_i + v_{N+1,i} = v_0 + d_i + l_{Ni} \tag{3-52}$$

debido a que L_0 / D y el grupo de las s_i son conocidas pero que aún son el resultado de suposiciones hechas en todas las iteraciones, se puede asumir que d_i / v_{0i} está determinado únicamente para todas las iteraciones por medio de la ecuación (3-44).

Entonces, por medio del uso de la ecuación (3-44), la definición de θ como se obtiene por la ecuación (3-51), y la ecuación (3-52), la siguiente fórmula para los valores correctos de v_{0i} se obtiene

$$v_{0i} = \frac{FX_i + v_{N+1,i}}{1 + \left(\frac{s_i}{\frac{L_0}{D} + 1} \right) + \theta \left(\frac{l_{Ni}}{v_{0i}} \right)_{ca}} \quad (3-53)$$

para una columna con reflujo de extracto figura 18, las ecuaciones definen los valores correctos de l_{ip} , v_{ip} , L_p , V_p , λ_p , v_{ip} , x_{ip} e y_{ii} son de la misma forma que las que se utilizan en las ecuaciones 3-35 a 3-42 reemplazando v_1 por v_{0i} .

Por ejemplo, la expresión l_{ji} dada por la ecuación (3-37) se convierte en

$$l_{ji} = \eta_j \left(\frac{l_{ji}}{v_{0i}} \right)_{ca} v_{0i} \quad (3-54)$$

El cálculo de los valores correctos de D y L_0 ameritan una mayor atención. Debido a que cada miembro del juego de $\{s_i\}$ así como también L_0/D continúan supuestas, de esto se tiene que la razón de valores correctos de d_i y v_{0i} está dada por la ecuación (3-44), es decir,

$$\frac{d_i}{v_{0i}} = \frac{s_i}{\frac{L_0}{d} + 1} \quad (3-55)$$

cuando se resuelven para d_i la ecuación y ambos lados de la expresión así obtenida se suman para todos los componentes i , la siguiente expresión es para obtener los valores correctos de D :

$$D = \sum_{i=1}^c d_i = \left(\frac{1}{\frac{L_0}{D} + 1} \right) \sum_{i=1}^c s_i v_{0i} \quad (3-56)$$

Igualmente, la siguiente expresión para el valor correcto de L_0 , se obtiene por medio la ecuación (3-48)

$$L_0 = \sum_{i=1}^c L_{0i} = \left(\frac{1}{1 + \frac{D}{L_0}} \right) \sum_{i=1}^c s_i v_{0i} \quad (3-57)$$

ahora se introducirá σ_1 , la cual está definida por :

$$V_1 = \sigma_1 v_1 = \sigma_1 \sum_{i=1}^c \left(\frac{v_{1i}}{v_{0i}} \right)_{ca} v_{0i}$$

que es igual a la unidad. La eliminación de $(v_{1i}/v_{0i})_{ca}$ a través de la ecuación

$$V_1 = \sigma_1 \sum_{i=1}^c (1 + s_i) v_{0i} \quad (3-58)$$

cuando se sustituye el resultado dado por las ecuaciones (3-56),(3-57) y (3-58), en el balance total de materia

$$V_1 - L_0 - D - V_0 = 0$$

se obtiene la siguiente expresión por un reordenamiento

$$\sigma_1 \sum_{i=1}^c (1 + s_i) v_{0i} - \sum_{i=1}^c (1 + s_i) v_{0i} = 0$$

lo cual da el resultado de $\sigma = 1$.

El cálculo de los miembros restantes de los grupos $\{\eta_j\}$ y $\{\sigma_j\}$ se realizan de manera análoga a los absorbedores.

Este método numérico es aplicable para sistemas que contienen cualquier número de componentes distribuidos entre dos fases líquidas. Aunque su aplicación en algunos problemas nos da una rápida convergencia; en otros su convergencia es lenta o puede fallar definitivamente. Por lo que con el desarrollo del programa de cómputo, se podrá comparar su rapidez y exactitud para un problema conocido y delimitar un poco más el campo de aplicación de este método.

CAPITULO 4

EJEMPLOS DE APLICACION

Para efectuar una comparación entre un método analítico y uno gráfico, es necesario realizar varios ejercicios de aplicación, con lo cual se podrá revisar la exactitud y la simplicidad de cada método. Por lo que a continuación se presentan ejemplos de los modelos que se analizaron en las secciones precedentes.

Ejemplo de resolución gráfica

Se tiene una disolución de acetona a 25° C (20% en peso) del cloroformo (80%) en peso con una mezcla de disolvente compuesta de agua (65% en peso) y ácido acético (35% en peso). Utilice una columna con cinco etapas en equilibrio e introduzca toda la alimentación en la etapa intermedia. Utilice una relación 1:1 de disolvente /alimentación y una razón de reflujo de $R'=10$.

Solución

Para este sistema Brancker, Hunter and Nash publicaron los datos del sistema a 25 °C, y posteriormente Smith adiciona algunas líneas más.

Antes de iniciar con la solución del problema es necesario estimar el rendimiento en la recuperación del solvente. Para los propósitos de este problema se estimara que el 98 % de agua y ácido acético en L_1 es recuperado en S_E y que un 1% de acetona y cloroformo en L_1 aparecen en S_E . En otras palabras $g = 0.98$ para el agua y el ácido acético y $g = 0.98$ para la acetona y el cloroformo.

Los rangos de los productos que se utilizan generalmente no son estimados correctamente se aquí se supondrán, esto con el fin de ver el efecto de estas suposiciones iniciales en la rapidez de convergencia de la resolución.

Una base de $F = S = 100$ se usará. También supondremos que $D = B = 50$ y $S_E = S = 100$. Entonces $V_0 = (10) (50) = 500$ y

$$L_1 = S_E + B + V_0 = 650$$

Debido a que la tasa del solvente no es muy alta, el cambio en las fases que atraviesan N debido a la entrada de disolvente insaturado no será extraordinario.

En tal caso es común suponer con un alto grado de certeza que el extracto variara linealmente de L_{N+1} a L_1 .

$$L_{M+1} \cong L_1 + \frac{M}{N}(S - L_1) = 650 + \frac{2}{5}(100 - 650) = 430$$

$$L_{M+2} \cong L_1 + \frac{M+1}{N}(S - L_1) = 650 + \frac{3}{5}(100 - 650) = 320$$

$$V_{M+1} \cong L_{M+2} + D - S = 320 + 50 - 100 = 270$$

$$V_M \cong L_{M+1} + V_0 - L_1 = 430 + 500 - 650 = 280$$

El cambio de 10 unidades entre V_M y V_{M+1} indica que las tasas calculadas arriba son poco razonables, debido a que la diferencia debe ser aproximadamente igual a la tasa de alimentación de 100. La discrepancia se debe a los 650 usados para L_1 , como se ve en los resultados finales, donde el valor se encuentra situado en la región del 110.

Los valores estimados para las L y las v al final de cada sección de la columna pueden ahora ser promediadas para obtener los valores promedio de V, V', L y L'. Los valores promedio iniciales de K se obtienen promediando todos los valores todos los datos de las líneas de unión del sistema. No se hará ninguna distinción entre K y K' para la primera iteración.

Los valores promedio de las tasas y de K se usan ahora para calcular S_n y S_m para cada componente. La substitución de los factores de separación

En las ecuaciones correspondientes dan un estimado de recuperación. Las K y los factores de separación usados en la primera iteración se muestran a continuación con las f calculadas.

Tabla 4.1

Componente	$K=K'$	S_n	S_m	F
Acetona	2.12	1.49	1.50	0.144
Cloroformo	8.0	5.60	5.66	0.00195
Agua	0.04	0.0278	0.0281	0.972
Acido acético	0.264	0.192	0.194	0.812

$$Bx_B + S_E x_{S_E} = f(Fy_F + F' y_{F'} + Sx_s) \quad (4-1)$$

$$Dy_D = (1-f)(Fy_F + F' y_{F'} + Sx_s) \quad (4-2)$$

$$Bx_B = \frac{1-g}{1+gR'} (Bx_B + S_E x_{S_E}) \quad (4-3)$$

$$L_1 x_1 = \frac{1+R'}{1-g} Bx_B \quad (4-4)$$

Las ecuaciones (4-1) a (4-4) se usan ahora para calcular las tasas finales. Las tasas finales calculadas que se encontraron son diferentes a las asumidas, por lo que la primera iteración es repetida con los mismos valores de K pero con nuevas tasas. Los resultados se muestran a continuación junto con los asumidos inicialmente:

Tabla 4.2

	B	D	L_1	V_0	S_E
Asumida originalmente	50	50	650	500	100
Resultado de la 1ª. Iteración	2.9	105	124	29	92
Resultado de la 2ª. Iteración	4.1	109	132	41	87

Las tasas finales calculadas deberán converger en un solo conjunto de respuestas después de tres o cuatro intentos, esto junto con los valores de K asumidos.

Sin embargo, la convergencia con los valores iniciales de K no es deseable, esto debido a que los valores de K estimados no son los más correctos. Se realizaron dos cálculos con el primer conjunto de valores de K debido a que las suposiciones iniciales de las tasas no eran las adecuadas. Las composiciones finales obtenidas de tales suposiciones no definen el con exactitud cual porción de las dos fases será en la que opere el proceso. Los resultados del segundo intento son más idóneos para este propósito y deberán permitir una mejor selección de los valores de K , a continuación se presentan

Tablas 4.3

Componente	S_n	S_m	f	$V_0 y_0 + L_{N+1} x_{N+1}$	$B x_B + S_E x_E$
Acetona	2.32	0.425	0.197	20	3.93
Cloroformo	8.74	1.60	0.00516	80	0.412
Agua	0.0434	0.008	0.957	65	62.2
Acido acético	0.300	0.055	0.707	35	24.8
				200	91.3

Componente	$D y_D$	$\frac{1-g}{1+gR}$	$B x_B$	$\frac{1+R}{1-g}$	$L_1 x_1$	x_1	y_D
Acetona	16.1	0.9	3.54	11.1	39.3	0.298	0.148
Cloroformo	79.6	0.9	0.371	11.1	4.1	0.031	0.732
Agua	2.82	0.00185	0.115	550	63.4	0.480	0.026
Acido acético	10.2	0.00185	0.046	550	25.2	0.191	0.094
	108.7		4.07		132.0	1.000	1.00

Los factores de separación usados en la segunda iteración y los resultados obtenidos con esos factores de separación se utilizan con las ecuaciones (4-1) a (4-4) para calcular nuevas composiciones. Las figuras citadas antes (Brancker et. Al.) proporcionan los valores requeridos para calcular las x del agua y el ácido acético de las y_D calculadas para esos componentes de la siguiente manera:

Tabla 4.4

Componente	y_D	K_s	X_s
Agua	0.026	0.044	0.588
Acido acético	0.094	0.288	0.327

Los perfiles de concentración del ácido acético y el agua en la fase del extracto se asumen como lineales esto con el fin de aproximar la composición de los platos en toda la columna.

Esas composiciones aproximadas de los platos se utilizan con las figuras a, b, c y d (Brancker et. al) para proporcionar los valores aproximados de K para cada componente en cada etapa.

En este ejemplo mostraron el siguiente comportamiento:

Tabla 4.5

Componente	$K=(K_5K_4K_3)^{1/3}$	$K'=(K_1K_2K_3)^{1/3}$
Acetona	2.82	2.00
Cloroformo	15.6	9.52
Agua	0.0585	0.102
Acido acético	0.294	0.300

Este elaborado procedimiento de cálculo del valor promedio de las K es usualmente necesario debido a que los coeficientes de distribución raramente son funciones lineales de la composición. Cuando las curvas de los valores de K no son lineales, un promedio aritmético de dos valores es inadecuado.

Los valores de K calculados en cada iteración son usados en la siguiente. Las iteraciones son repetidas hasta que dos conjuntos sucesivos de valores de K convergen. Es necesario realizar cuatro iteraciones en este ejemplo para obtener una convergencia satisfactoria de los valores de K . Uno de esos cuatro intentos fue necesario debido a las pobres suposiciones del inicio.

Los resultados para todas las iteraciones se muestran en la tablas 4.6

Tablas 4.6

	Tasas finales				
	B	D	S_E	L_t	V_o
Asumido originalmente	50	50	100	650	500
Resultados de la 1ª. Iteración	2.91	105.3	91.7	123.7	29.1
Resultados de la 2ª. Iteración	4.07	108.7	87.2	132.0	40.7
Resultados de la 3ª. Iteración	2.85	112.6	84.5	115.9	28.5
Resultados de la 4ª. Iteración	2.46	114.7	82.8	109.9	24.6

	1ª. Iteración	2ª. Iteración	3ª. Iteración	4ª. Iteración
$x_1:$				
A	0.233	0.298	0.247	0.225
B	0.013	0.031	0.012	0.007
C	0.520	0.480	0.533	0.556
D	0.234	0.191	0.208	0.211
$x_2:$				
A	0.893	0.869	0.903	0.908
B	0.048	0.091	0.042	0.030
C	0.040	0.028	0.039	0.045
D	0.018	0.011	0.015	0.017
$x_3:$				
A	0.162	0.148	0.152	0.153
B	0.758	0.732	0.709	0.697
C	0.017	0.026	0.038	0.044
D	0.062	0.094	0.101	0.107

	Sección superior				Sección inferior			
	K_A	K_B	K_C	K_D	K'_A	K'_B	K'_C	K'_D
Asumido originalmente	2.12	8.0	0.04	0.264	2.12	8.0	0.040	0.264
Resultados de la 1ª. Iteración								
Resultados de la 2ª. Iteración	2.82	15.6	0.058	0.294	2.00	9.5	0.102	0.300
Resultados de la 3ª. Iteración	2.78	14.5	0.064	0.301	2.23	12.2	0.083	0.287
Resultados de la 4ª. Iteración	2.81	13.9	0.065	0.304	2.31	13.5	0.075	0.281

Note como los resultados del primer cálculo concuerdan con los de los cálculos finales, esto a pesar de las pobres suposiciones para las tasas y los valores de K . En este problema la repetición de la primera iteración con el primer conjunto de valores de K estorbo la convergencia. El final de la tabla anterior muestra la concordancia del juego de valores de K entre la tercera y cuarta iteración.

El procedimiento descrito anteriormente en la mayoría de los casos provee un buen estimado de la separación. Pero es claro que en algunos problemas, es difícil hacer un buen estimado de los valores promedio de K y las tasas de cada sección de la torre.

Los casos en donde se usa de una gran cantidad de solvente son más difíciles debido al gran cambio en las etapas N y $N-1$ en la cual una gran cantidad de disolvente insaturado disuelve una gran parte de N_{N-1} . El ejemplo descrito presenta una dificultad similar en el otro lado de la columna debido al reflujo de una gran cantidad de extracto. Con las g asumidas, el extracto es removido más allá del área de solubilidad.

Cuando V_0 se mezcla con L_2 , el punto de adición continua dentro de la región de inmiscibilidad pero cerca del área de solubilidad de tal forma que V_1 es una fracción pequeña de V_0 . La disolución obtenida en la fase del extracto contiene una porción bastante alta de V_0 lo que ocasiona que las concentraciones difieran radicalmente de las de la etapa 2, por lo que los valores de K difieren de etapa a etapa.

El método de cálculo descrito a continuación utiliza los datos de equilibrio en la forma del coeficiente de distribución $K_i = y_i / x_i$ donde y_i y x_i se refieren al refinado y al extracto respectivamente. Los datos de coeficiente de distribución son escasos. Un número considerable de líneas de unión fueron determinadas por BRANCKER et al. Para el sistema de cloroformo-agua -ácido acético a 25° C, y SMITH calculó líneas de unión adicionales. Debido a la cantidad de líneas de unión que tiene este sistema, se utilizará para ilustrar el método de cálculo. Como se mencionó antes, los coeficientes de distribución en un sistema de cuatro componentes puede gráficamente correlacionarse con la concentración de dos fases, y los valores de K para este sistema están graficados vs. la concentración del agua y del ácido acético en las figuras B-6 y B-7 de Smith estos dos disolventes se escogieron debido a que tienen valores pequeños de K y son más estables en los cálculos de etapa a etapa que los otros dos componentes.

Ejemplo de aplicación

Se tiene una solución de acetona a 25°C (20% en peso) del cloroformo (80% en peso) con una mezcla de disolvente compuesta de agua (65% en peso) y ácido acético (35% en peso). Utilice una columna con cinco etapas en equilibrio e introduzca toda la alimentación en la etapa intermedia. Utilice una relación 1:1 de disolvente / alimentación y una razón de reflujo de $R'=10$. Si N y M se fijan como 5 y 2, respectivamente, y F' y R son iguales a cero.

Como se es de notarse las características son idénticas al ejemplo anterior, pero el método de resolución es el que cambia.

Solución

A continuación se tabulan las variables especificadas de este proceso

Tabla 4.7

VARIABLES ESPECIFICADAS	Ni ^U		
		N	
Presión en cada etapa		N	
Temperatura en cada etapa		N	
Temperatura y presión en el divisor de reflujo del extracto			2
Temperatura y presión de las corrientes de salida del equipo de recuperación del solvente			4
S	C		+2
F	C		+2
Número total de etapas			1
Localización de la etapa de alimentación			1
Razón de reflujo			1
Recuperación de cada componente en el aparato de recuperación del solvente	C		
			3C+2N+13

La presión de la torre se considera de 1 atm., y todas las temperaturas de las etapas serán de 25°C. La misma presión y temperatura se considerará para el divisor. La temperatura y presión para las corrientes de salida del aparato de recuperación del disolvente no son importantes en este ejemplo excepto por la temperatura del reflujo que debe ser de 25°C. El disolvente y la alimentación deberán entrar en la columna a 25°C y a la presión de la misma. Las composiciones de la alimentación y el disolvente, al igual que las tasas; se han especificado en el enunciado del problema así como también el número de etapas, la localización de la etapa de alimentación, y la razón de reflujo de extracto. Los factores de recuperación (**g**) en el aparato de recuperación se asumirán como $g = 0.01$ para la acetona y el cloroformo y $g = 0.98$ para el agua y el ácido acético.

Estas son suposiciones rápidas, las cuales en un diseño más riguroso tendrán que revisarse por medio de cálculos de separación en el aparato destinado para este fin. El aparato de recuperación no puede diseñarse hasta que se conozcan la tasa y composición de L_1 , y esas cantidades no pueden conocerse hasta que se hayan hecho los cálculos de extracción. Por lo tanto para empezar es necesario asumir valores arbitrarios de **g** para cada componente.

Los supuestos iniciales se obtienen del cálculo corto, L_1 y las x_1 pero se debe tener presente que las predicciones de este método no son muy exactas debido a la naturaleza impredecible de los perfiles de las tasas de este problema en particular. Los valores de x_1 asumidos junto con otros valores se tabulan a continuación.

Tabla 4.8

COMPONENTE	x_1 ASUMIDA	g	gx_1	K
Acetona	0.2255	0.01	0.00226	0.1
Cloroformo	0.0074	0.01	0.00007	0.1
Ácido acético	0.219	0.98	0.20668	0.9818
	1.0000		0.75409	

Las ecuaciones (3-26) y (3-27) no dan los valores de B y V_0 .

$$B = \frac{L_1}{1 + R'} \left[1 - \sum_{i=1}^c (gx_1)_i \right] = \frac{109.9}{11} (1 - 0.75409) = 2.457$$

$$V_0 = R' B = 10 (2.457 = 24.57)$$

$$S_E = L_1 - V_0 - B = 109.9 - 24.6 - 2.5 = 82.8$$

$$D = F + S + V_0 - L_1 = 100 + 100 + 24.6 - 109.9 = 114.7$$

Para el caso en cuestión, $F' y_F = R = 0$, y

$$K = \frac{1+10g}{11}$$

$$\phi = S_2 S_3 S_4 S_5 + S_3 S_4 S_5 + S_4 S_5 + S_5 + 1$$

$$\phi = S_4 S_5 + S_5 + 1$$

Con lo que la ecuación (3-22) se reduce a:

$$L_1 x_1 = \frac{\phi F y_F + S x_s}{S_1 S_2 S_3 S_4 S_5 + K \phi}$$

Esta ecuación hace que $L_1 x_1$ corresponda con los factores de separación usados. Sin embargo si el cálculo de etapa a etapa se inicia con las x_1 proporcionadas por la ecuación (3-22), la formación de errores debido al pequeño redondeamiento de cifras en las x_1 calculadas resultará en concentraciones de etapa irracionales. La necesidad de un cálculo por etapas puede eliminarse por la aplicación de la ecuación (3-22) a $L_2 x_2$, $L_3 x_3$, etc. En la misma manera que $L_1 x_1$ de la misma forma que $L_1 x_1$. Las formas necesarias son como sigue:

$$L_2 x_2 = \frac{(S_3 S_4 S_5 + S_4 S_5 + 1) V_1 y_1 + (S_4 S_5 + S_5 + 1) F_{xF} + S x_s}{S_2 S_3 S_4 S_5 + S_3 S_4 S_5 + S_4 S_5 + S_5 + 1}$$

$$L_3 x_3 = \frac{(S_4 S_5 + S_5 + 1) V_2 y_2 + (S_4 S_5 + S_5 + 1) F_{xF} + S x_s}{S_3 S_4 S_5 + S_4 S_5 + S_5 + 1}$$

$$L_4x_4 = \frac{(S_5 + 1)V_3y_3 + Sx_s}{S_4S_5 + S_5 + 1}$$

$$L_5x_5 = \frac{V_4y_4 + Sx_s}{S_5 + 1} \quad y \quad V_ny_n = S_nL_nx_n$$

El uso de las ecuaciones descritas antes depende de las suposiciones de los perfiles de V,L, y K. Los resultados del método corto de cálculo del ejemplo gráfico se utilizaron para suministrar los valores de V,L, y los valores de los componentes de K. Los valores iniciales para las tres etapas intermedias se obtuvieron por interpolación lineal. Estas suposiciones se listan a continuación:

Tabla 4.9

Etapas	L	V	Acetona	Cloroformo	Agua	Ácido
N+1	100.0					
5	102.0	114.7	2.9	13.00	0.083	0.32
4	104.0	116.7	2.7	13.12	0.0817	0.307
3	105.9	118.7	2.5	13.25	0.0805	0.295
2	107.9	20.6	2.3	13.37	0.0792	0.282
1	109.9	22.6	2.1	13.5	0.078	0.270
0		24.6				

Para poder investigar el efecto de los perfiles de K en la convergencia, en la solución de este ejemplo se hicieron muchas iteraciones, en las cuales los perfiles de V y L se mantuvieron constantes y sólo se permitió variar los perfiles de K de iteración a iteración. En otras palabras se calcularon las composiciones de las etapas que corresponden al perfil especificado de temperatura y los perfiles supuestos de V y L listados arriba. Esta solución satisface las restricciones de equilibrio y balance de materia pero fallo al criterio de $\Sigma y = 1.0$ y $\Sigma x = 1.0$ en cada etapa. Se realizaron cuatro iteraciones con los perfiles iniciales de V y L listados arriba. El comportamiento de las composiciones en cada una de estas cuatro iteraciones es representado por las composiciones de la etapa son listados a continuación.

Tabla 4.10

Componente	Supuesto	x_1 Normalizadas			
		1	2	3	4
Acetona	0.225	0.240	0.205	0.170	0.158
Cloroformo	0.007	0.007	0.004	0.002	0.001
Agua	0.556	0.542	0.570	0.595	0.607
Ácido Acético	0.211	0.211	0.221	0.233	0.234

Puede observarse que la composición de la etapa 1 se va aproximando a algún valor constante.

La Σy_n y Σx_n para cada intento está dada por:

$$\Sigma y_n = \frac{\Sigma V_n y_n}{V_n \text{ asumido}} \quad (3-34) \quad \text{y} \quad \Sigma x_n = \frac{\Sigma L_n x_n}{L_n} \quad (3-35)$$

Donde $\Sigma V_n y_n$ y $\Sigma L_n x_n$ se refieren a los valores calculados obtenidos con las ecuaciones de factor de separación. Las $\Sigma V_n y_n$ y $\Sigma L_n x_n$ obtenidas en los cuatro intentos de la primera iteración se muestran a continuación:

Tabla 4.11

Etapa	Σy			
	1	2	3	4
4	1.053	1.003	1.004	1.006
3	1.031	0.947	0.991	0.987
2	0.686	0.552	0.504	0.494
1	0.703	0.583	0.512	0.497

Etapa	Σx			
	1	2	3	4
5	1.071	1.037	1.039	1.042
4	1.043	0.973	1.024	1.023
3	0.932	0.941	0.937	0.931
2	0.931	0.940	0.930	0.888
1	1.008	1.006	0.973	0.954

Obviamente el criterio de que $\Sigma y_n = 1.0$ y $\Sigma x_n = 1.0$ no se cumplirá con los perfiles de L y V asumidos en la primera iteración.

En este ejemplo se utilizaron las $\Sigma L_n x_n$ calculados en la cuarta prueba de la primera iteración como el perfil de L asumido para la segunda iteración. La $\Sigma L_n x_n$ de cualquier etapa se relaciona con la L_n y Σx_n por medio de la ecuación (3-25). Las ecuaciones (3-26) y (3-27) se utilizaron para obtener la nueva B y V_o . El nuevo perfil de V se calculó por medio de los balances de materia alrededor de los fondos al final de la columna.

El uso de las $\Sigma L_n x_n$ de cada iteración como las suposiciones iniciales para la siguiente iteración proveen de un procedimiento efectivo de convergencia. En este ejemplo fue extremadamente lento debido a que la razón de reflujo de extracto es demasiado grande lo cual hace que los cambios sean pequeños en las tasas de B calculadas. Se realizaron 20 iteraciones Equivalentes a suponer 20 perfiles de L y V) Antes de que Σy y Σx a través de la columna cayeran entre 0.998 y 1.002. Cada iteración requiere menos intentos para obtener esencialmente composiciones de etapas que sean constantes con los perfiles de V y L supuestos.

La primera iteración tomó 4 intentos, la segunda 3, la tercera y cuarta tomaron 2 cada una y las iteraciones subsecuentes requirieron de un intento cada una, para un total de 27 intentos. Realmente, la convergencia pudo haber sido más rápida si los intentos múltiples no se hubieran hecho en las primeras iteraciones. Note como en las iteraciones 1,3 y 4, donde L_1 que es utilizado en la última parte en la iteración su valor es menor que el obtenido en la primera prueba de iteración.

Como se mencionó previamente, la convergencia final fue extremadamente lenta en este ejemplo debido a la razón de reflujo demasiado grande la cual hacía que los cambios pequeños en B , prevalecieran de prueba a prueba y previnieran la caída de las tasas de V_0 , V_1 y V_2 .

Cada tasa después de la cuarta iteración (la prueba No. 11) se aproxima a su valor final asintóticamente. Esto se ilustra en la tabla 4.5, la cual enlista algunos de los valores de prueba. Las únicas Σy y Σx mostradas son de la etapa 1, debido a que estas (junto con Σy_2) fueron las últimas en converger con la unidad.

Se observa que las tasas arriba de la etapa de alimentación rápidamente se convierten esencialmente en constantes. El problema pudo haber convergido rápidamente si el reflujo del extracto se hubiera reemplazado con una segunda alimentación de tasa fijada al igual que la composición.

La tabla 4.13 lista las composiciones finales de las etapas sin normalizar y los valores finales de K . Las tasas de la prueba 27 en la tabla 4.12 y las composiciones en la tabla 4.13 comprenden esencialmente una solución perfecta al problema del ejemplo. Note los grandes cambios en los valores de K de la etapa 1 a la 2 y la gran diferencia entre V_0 y V_1 . Esos cambios son el resultado de introducir una corriente de reflujo la cual está lejos de la región de las dos fases líquidas.

El punto de adición formado cuando V_0 y L_2 son mezclados continua dentro del área de inmiscibilidad pero cerca de la región de solubilidad. Consecuentemente, la mayoría del reflujo V_0 va en la fase del extracto y la tasa del refinado se reduce bruscamente. Asimismo la concentración de L_1 apreciablemente de L_2 debido a la disolución de una gran parte de V_0 .

Esto causa el gran cambio en los valores de K. Estos efectos son análogos a la situación creada cuando la tasa del disolvente es mucho mayor que la de V_{N-1} cuando es usada sin reflujo del refinado. El disolvente insaturado disuelve una gran parte de V_{N-1} y causa que V_N difiera abruptamente de V_{N-1} en lo que se refiere a la tasa y composición.

Los métodos cortos que dependen del uso de un buen promedio de valores de K y tasas de las fases son inadecuados en tales casos a menos que el diseñador haya tenido experiencia previa con el sistema y sea capaz de predecir los cambios de antemano.

Tabla 4.12 Resultados de pruebas típicas para el ejemplo.

	Número de prueba					
	12	15	18	21	24	27
Σy_1	0.931	0.953	0.980	0.988	0.993	0.998
Σx_1	1.030	1.006	1.004	1.002	1.001	1.000
L_1	136.8	142.4	144.3	145.4	146.4	146.6
L_2	97.7	97.4	97.3	97.2	→	
L_3	95.1	→				
L_4	105.4	→				
L_5	107.6	→				
B	4.448	4.994	5.118	5.205	5.300	5.320
V_0	44.48	49.44	51.18	52.05	53.00	53.20
V_1	5.42	4.50	4.17	3.97	3.83	3.81
V_2	2.82	2.14	1.92	1.78	1.70	1.67
V_3	113.1	112.4	112.3	112.2	112.1	112.0
V_4	115.3	114.6	114.4	114.3	114.2	114.2
V_5	107.7	107.1	106.8	106.7	106.6	106.6
S_E	87.8	88.0	88.0	88.1	→	

Tabla 4.13 Composiciones sin normalizar del ejemplo

x_1	K_1	y_1	x_2	K_2	y_2
0.325	1.55	0.504	0.069	3.1	0.213
0.066	5.5	0.364	0.024	28.7	0.698
0.436	0.166	0.072	0.648	0.033	0.021
0.173	0.33	0.058	0.259	0.255	0.066
1.000		0.998	1.000		

x_3	K_3	y_3	x_4	K_4	y_4
0.054	3.35	0.180	0.047	3.6	0.169
0.023	32.5	0.731	0.028	25.5	0.722
0.660	0.029	0.019	0.616	0.0355	0.022
0.263	0.26	0.069	0.309	0.285	0.088
1.000		0.999	1.000		1.001

x_5	K_5	Y_5
0.038	3.75	0.143
0.030	24.5	0.742
0.607	0.035	0.021
0.325	0.290	0.094
1.000		1.000

CONCLUSIONES

Conclusiones

A través de esta tesis se mostraron los métodos tanto gráficos como los analíticos, esto con el fin de hacer una comparación entre ambos métodos, para lograr esto se presentó 2 ejemplos, uno resuelto por un método gráfico y el otro por un método analítico. A continuación se presenta una tabla en donde se muestran los resultados de los dos métodos utilizados.

	Método gráfico	Riguroso
B	2.46	5.32
L_1	109.9	146.6
Acetona	0.225	0.325
Cloroformo	0.007	0.066
Agua	0.556	0.436
Acido Acético	0.211	0.173

Es de notarse que el método gráfico debe de usarse con precaución cuando se usa una gran cantidad de solvente o altas tasas de extracto en el reflujo, y usando las corrientes de entradas insaturadas. Ya que nos puede conducir a discrepancia en los resultados como puede verse en la tabla antes mostrada donde se comparan los resultados obtenidos con uno y otro método, en la salida del extracto y la recirculación. Variando asimismo las concentraciones de salida para cada elemento.

Además fue posible observar en la resolución del problema con el método gráfico que es un procedimiento de uso sencillo, ya que una vez que se tienen los datos del sistema a la temperatura y presión a operar el proceso, se grafica el número de etapas requeridas.

CONCLUSIONES

Este tipo de método se puede utilizar para determinar el número de etapas en las diferentes modalidades que se pueden dar la extracción líquido-líquido, esto es con reflujo, a contracorriente, etc., es posible también determinar la razón de alimentación / disolvente de manera gráfica, asimismo como el uso mínimo de disolvente. Todo lo anterior mediante trazos simples en el gráfico y con ecuaciones de uso sencillo. Estas son algunas de las ventajas del uso de este método.

Las desventajas de este método es que no se encuentran datos de equilibrio termodinámico para todos los posibles sistemas, por lo que es necesario determinarlos en laboratorio lo que ocasiona una inversión adicional de tiempo y esfuerzo. Otra de sus desventajas es que sus resultados no tienen la exactitud deseada, ya que la interpretación de los datos depende de la precisión en el trazado de las líneas, además de que durante el trazado de las etapas puede aparecer el amontonamiento de líneas lo que dificulta la precisión en la medición.

En lo que concierne a los métodos analíticos es que a diferencia de los métodos gráficos no dependen de la apreciación de un diagrama, ya que su resolución no implica el trazo de ningún esquema, con lo cual no hay dependencia de la capacidad observador. Su exactitud es mucho mayor que cualquier otro procedimiento, ya que las ecuaciones utilizadas no dependen de la experiencia del diseñador.

La desventaja de estas técnicas es que sus ecuaciones no son de fácil manejo, y de que se requiere el diseño de un programa de cómputo para que su manejo sea de forma rápida y simple, lo que ahorra tiempo. La desventaja de esta forma de resolución es que el programa podría caer en un ciclo interminable de cálculos, lo que impediría dar respuesta al problema planteado.

CONCLUSIONES

De todo lo anteriormente mencionado se desprende que los cálculos gráficos son de gran ayuda para un diseño preliminar y en el cual no se requiera de gran exactitud, esto es de gran beneficio durante la selección del tipo de equipo ya que da un panorama general de los beneficios del equipo elegido, obviamente es necesario que los datos del sistema se conozcan y se puedan graficar de manera sencilla. Con lo cual se puede obtener un costo preliminar del equipo.

El que toca a los métodos rigurosos estos son de mayor utilidad en el diseño del equipo, ya que son más exactos, y permiten ejercer un mayor control de las variables de diseño y las características deseadas del extracto. Otro punto a favor de este tipo de cálculos es que nos ayuda en la selección adecuada del equipo, ya que con los datos exactos podemos ver cual sistema de extracción es el que más se acerca a los datos obtenidos; facilitando así la cotización misma del equipo.

RECOMENDACIONES

Este trabajo se desarrolló con el objetivo de tener una visión más clara acerca de la extracción líquido-líquido, debido a que es una operación importante dentro de la Ingeniería Química.

Para el estudio de este tipo de operaciones en clase se nos hace mención de que la descripción hecha para destilación es idéntica a la que se usa para el tipo de operación estudiada en este trabajo, pero en la literatura revisada para este trabajo nos muestra que son diferentes y que los criterios a utilizar son diferentes, por lo que este tema debe de tratarse con más amplitud en la clase.

Otro de los puntos importantes es que para la resolución de problemas en los que se emplean métodos analíticos se desarrolle un programa de computo, esto con el fin de que a la vez que se aprende el método y se aplica para la resolución de problemas de Ingeniería Química, sirva para el desarrollo de habilidades en el manejo y diseño de sistemas de computo.

Con los programas desarrollados se podrían comparar los resultados del diseño gráfico con los resultados de un método analítico, además de establecer los tiempos de resolución de cada método, lo de que ayudaría a visualizar con mayor claridad las ventajas y desventajas de cada sistema.

Otro elemento que sería de gran ayuda es utilizar estos métodos con datos de una corrida en laboratorio de algún sistema que se este estudiando, para poder tener resultados más reales y más consistentes, y validar los métodos estudiados; este tipo de ejercicio también debería realizarse con datos de algún equipo de extracción que se encuentre en la industria. Asimismo podrían obtenerse datos de diferentes tipos de equipos que se encuentren en la industria o en los laboratorios, para ver cual modelo describe mejor cada equipo, aunque esto dependerá no sólo del cálculo sino de otras variables más.

BIBLIOGRAFIA

A. Chouai, M. Cabassud, , M. V. Le Lann. March 2000. Use of neural networks for liquid-liquid extraction column modelling: an experimental study. Chemical Engineering and Processing. 171-180

Arun Kumar and Stanley Hartland. Marzo 1999. Computational Strategies for Sizing Liquid-liquid extractors. Industrial & Engineering Chemistry Research.1040-1056.

Buford D. Smith. (1963). Design of equilibrium stage processes. McGraw Hill book Company. U.S.A.

Charles D. Holland. (1975.) Fundamentals And modeling of separation processes. Prentice Hall Inc. U.S.A.

Donald G Jordan. (1979). Chemical process development part 2. Robert E. Krieger Publishing Company. Huntington, New York

Ernest J. Henley.(1988). Operaciones de separación por etapas en equilibrio en ingeniería química. Editorial Reverté, S.A.; España.

Gregiory R. Chopin .Claude M.(1992) Principles and practices of solvent extraction. Edited by Marcel Dekker, Inc.;U.S.A. New York.

J.C. Godfrey , M.J. Slater.(1994).Liquid - Liquid Extraction Equipment. John Wiley & Sons. Great Britain.

J.M Coulson, J.F. Richardson.(1981). Ingeniería Química Tomo II (Operaciones Básicas). Editorial Reverté, España

L. Alders. (1959). Liquid - Liquid Extraction Theory and laboratory Practice. Second revised Edition Elsevier Publishing Company.,Netherlands

Masahiro Nabeshima. July 2000. Consistent structure and thermodynamic characteristics of transport potential model proposed for liquid-liquid solvent extraction. Chemical Engineering Science. 2417-2428.

Phillip C. Wankat.(1988). Separations in Chemical Engineering Equilibrium Staged Separation. PTR Prentice Hall, U.S.A

P. L. Thibaut Brian. (1972) Staged Cascades in Chemical Processing. Prentice Hall Inc., U.S.A.

Rajaram K. Probhudesai, Dilip K D.(1984). Chemical Engieniering for professional Engenieers'examination. McGraw-Hill, U.S.A.

Robert E. Treybal.(1968). Extracción en fase líquida Primera edición en español Unión tipográfica editorial Hispano Americana, México D.F.

Roger W. Cusak,Pierre-Fremeaux. Febrero 1991. A fresh look at liquid-liquid extraction (part 1). Chemical Engineering.67-76

Roger W. Cusak,Pierre-Fremeaux. Marzo 1991. A fresh look at liquid-liquid extraction (part 2). Chemical Engieneering.133-138

Roger W. Cusak, Andrew Karr. Abril 1991. A fresh look at liquid-liquid extraction (part 3). Chemical Engieneering.112-118.

Ruth Blumberg. (1988). Liquid - Liquid Extraction. Academic Press, Great Britain.

Smith B. D and W.K. Brinkley.(1960). American I. Chemical Engineering Journal 6, 451

Takahiko Ban, , Fumio Kawaizumi, Susumu Nii. November 2000. Study of drop coalescence behavior for liquid-liquid extraction operation. Chemical Engineering Science. 5385-5391

Walter L. Badger, Julius T. B.(1964). Introducción a la Ingeniería Química. McGraw-Hill, México