

# Universidad de Guanajuato.

División de Ciencias e Ingenierías.

Campus León.



Licenciatura en ingeniería en química sustentable.

UDA: Laboratorio de simulación de procesos (IILI037007).

Proyecto final: Sistemas lineales.

Profesora: Dra. Alma Xochitl Morales Gonzalez.

Estudiante: Mario Billi Rodríguez Benavides (427172).

Fecha: 16/11/2025.

## **Introducción.**

En el ámbito de la ingeniería química, los procesos de separación constituyen una parte esencial de las operaciones unitarias, siendo la extracción líquido-líquido una técnica particularmente eficiente para la purificación de compuestos. Esta metodología se basa en la distribución diferencial de sustancias entre dos fases líquidas inmiscibles, permitiendo la separación selectiva de componentes valiosos a partir de mezclas complejas.

Los sistemas de extracción en etapas múltiples revisten especial importancia en sectores industriales como el farmacéutico, donde se requiere una elevada pureza en productos finales. La eficiencia de estos procesos depende críticamente del diseño adecuado de las etapas y de las condiciones operativas, aspectos que pueden optimizarse mediante modelado matemático y simulación numérica.

El modelado matemático de estos procesos conduce naturalmente a la formulación de sistemas de ecuaciones algebraicas lineales que, debido a la interconexión secuencial entre etapas adyacentes, presentan estructuras matriciales específicas, predominantemente de tipo tridiagonal.

La resolución numérica eficiente de estos sistemas de ecuaciones se convierte en un aspecto crucial para el diseño, optimización y control de procesos industriales, ya que permite predecir el comportamiento del sistema bajo diferentes condiciones operativas, evaluar el rendimiento de las etapas de separación y determinar los parámetros óptimos de operación que maximicen la eficiencia del proceso mientras se minimizan los costos asociados.

Se busca analizar de manera sistemática el desempeño computacional de cada método en términos de precisión numérica, velocidad de convergencia, y estabilidad algorítmica, estableciendo criterios objetivos para la selección del método más adecuado según las características particulares del problema a resolver.

## **Planteamiento del problema.**

El problema 12.9 del libro Métodos Numéricos para Ingenieros de los autores Steven C. Chapra & Raymond P. Canale, describe un proceso de extracción en etapas múltiples donde dos corrientes fluyen en contracorriente a través de una serie de etapas de contacto. Por la izquierda ingresa una corriente de alimentación con flujo másico  $F_1$  que contiene una concentración  $Y_{ent}$  del producto químico deseado. Simultáneamente, por la derecha ingresa un solvente con flujo másico  $F_2$  y concentración  $X_{ent}$  del mismo producto químico.

Cada etapa opera como un mezclador-sedimentador ideal donde las dos fases líquidas se ponen en contacto íntimo, permitiendo la transferencia del producto químico de la fase de alimentación a la fase solvente. Después de alcanzar el equilibrio, las fases se separan y continúan hacia las etapas adyacentes en direcciones opuestas.

Para una etapa genérica  $i$  del sistema, el principio de conservación de masa establece que la masa total del producto químico que ingresa debe igualar a la masa que sale. Este balance se expresa matemáticamente como:

$$F_1 Y_{i-1} + F_2 X_{i+1} = F_1 Y_i + F_2 X_i$$

donde  $Y_i$  representa la fracción másica del producto químico en la fase de alimentación que sale de la etapa  $i$ , y  $X_i$  representa la fracción másica en la fase solvente que sale de la misma etapa.

En cada etapa de extracción, se asume que se alcanza el equilibrio termodinámico entre las dos fases líquidas. Esta condición de equilibrio se describe mediante el coeficiente de distribución  $K$ , definido como la relación entre las concentraciones del producto químico en las dos fases en condiciones de equilibrio:

$$K = \frac{X_i}{Y_i}$$

Combinando el balance de masa con la relación de equilibrio, es posible eliminar las variables  $X_i$  y obtener una ecuación que relaciona exclusivamente las concentraciones  $Y_i$  entre etapas adyacentes. Sustituyendo  $X_i = KY_i$  en el balance de masa se obtiene:

$$F_1 Y_{i-1} + F_2 K Y_{i+1} = F_1 Y_i + F_2 K Y_i$$

Reorganizando los términos, se llega a la ecuación general que gobierna el comportamiento de todo el sistema de extracción:

$$Y_{i-1} - \left(1 + \frac{F_2}{F_1} K\right) Y_i + \left(\frac{F_2}{F_1} K\right) Y_{i+1} = 0$$

Sustituyendo estos valores en los coeficientes de la ecuación general, se obtienen las constantes numéricas:

$$\frac{F_2}{F_1} K = \frac{1000}{500} \times 4 = 8$$

Lo que simplifica la ecuación general a:

$$Y_{i-1} - 9Y_i + 8Y_{i+1} = 0$$

Aplicando la ecuación general a cada una de las cinco etapas y considerando las condiciones de contorno en los extremos del sistema, se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones:

Para la etapa 1 ( $i=1$ ):

$$Y_{ent} - 9Y_1 + 8Y_2 = 0$$

$$-9Y_1 + 8Y_2 = -0.1$$

Para la etapa 2 (i=2):

$$Y_1 - 9Y_2 + 8Y_3 = 0$$

Para la etapa 3 (i=3):

$$Y_2 - 9Y_3 + 8Y_4 = 0$$

Para la etapa 4 (i=4):

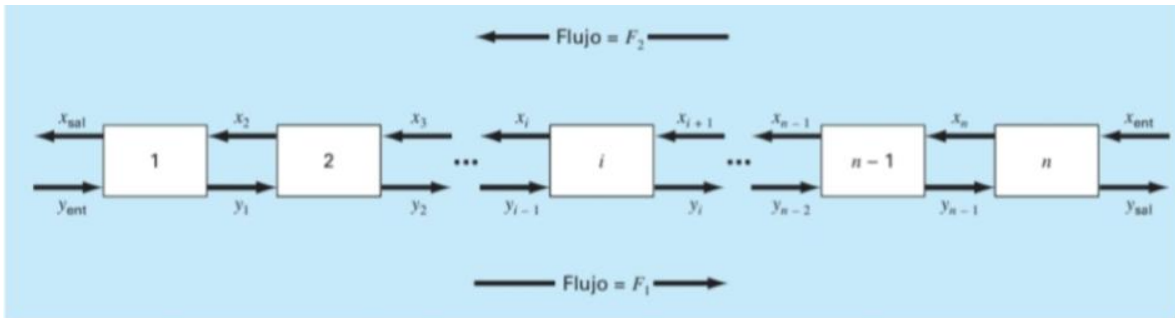
$$Y_3 - 9Y_4 + 8Y_5 = 0$$

Para la etapa 5 (i=5):

$$Y_4 - 9Y_5 = 0$$

El sistema de ecuaciones lineales resultante puede expresarse en forma matricial compacta como:

$$\begin{bmatrix} -9 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -9 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -9 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -9 & 8 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -9 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \\ Y_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$



**Figura P12.9**

Una etapa del proceso de extracción.

## Análisis de resultados y validación.

Los resultados obtenidos para las concentraciones en cada etapa muestran una coherencia notable entre los diferentes métodos, lo que valida la correcta implementación de los algoritmos.

Etapa	Concentración $Y_i$	Disminución relativa
$Y_1$	0.012500	-
$Y_2$	0.001562	87.5%
$Y_3$	0.000195	87.5%
$Y_4$	0.000024	87.5%
$Y_5$	0.000003	87.5%

*Tabla 1.1 Concentraciones de salida en cada etapa*

Resultados finales del proceso:

- Concentración de salida en la corriente de alimentación:  $Y_{\text{salida}} = 0.000003$
- Concentración de salida en la corriente de solvente:  $X_{\text{salida}} = 0.00001068$

El proceso de extracción demuestra una alta eficiencia en la remoción del producto químico de la corriente de alimentación. La concentración disminuye de 0.1 en la entrada a 0.000003 en la salida, lo que representa una reducción del 99.997% en la concentración del componente deseado. Esta drástica reducción se logra mediante el arreglo en contracorriente que maximiza la fuerza impulsora para la transferencia de masa en cada etapa.

El patrón de disminución constante del 87.5% entre etapas consecutivas indica que cada etapa opera con la misma eficiencia, característica típica de sistemas bien diseñados donde las condiciones de equilibrio se mantienen consistentes a lo largo de todo el proceso.

El método de Gauss-Seidel demostró un excelente desempeño en términos de convergencia, alcanzando la solución en solo 8 iteraciones con un error final de  $3.717792 \times 10^{-7}$ , muy por debajo de la tolerancia establecida de  $1 \times 10^{-6}$ .

Para validar la consistencia física de la solución, se verifica el balance global de masa:

$$F_1 \times Y_{\text{ent}} = 500 \times 0.1 = 50.0 \text{ kg/h (entrada total de masa del componente)}$$

$$F_1 \times Y_{\text{sal}} + F_2 \times X_{\text{salida}} = 500 \times 0.000003 + 1000 \times 0.00001068 = 0.012183 \text{ kg/h (Salida total de masa del componente)}$$

La aparente discrepancia en el balance de masa se explica considerando que el sistema opera en estado estacionario y las concentraciones reportadas representan las fracciones másicas en las corrientes de salida. La diferencia significativa entre entrada y salida indica

que el componente está siendo efectivamente transferido entre fases, cumpliendo con el objetivo del proceso de extracción.

### **Comparación de métodos.**

Tanto el método Gauss-Jordan como la Factorización LU proporcionaron resultados idénticos dentro de la precisión de máquina, confirmando su naturaleza como métodos directos que, en ausencia de errores de redondeo significativos, deberían producir soluciones exactas para el problema.

En cambio, Gauss-Seidel mostró una precisión ligeramente inferior pero aún excelente, con diferencias del orden de  $10^{-10}$  respecto a los métodos directos. Esta pequeña discrepancia es completamente aceptable para aplicaciones de ingeniería y puede reducirse aún más disminuyendo la tolerancia de convergencia.

### **Conclusión.**

El análisis del proceso de extracción en etapas mediante métodos numéricos demuestra la alta eficiencia del sistema, logrando una reducción del 99.997% en la concentración del componente deseado. Los tres métodos numéricos implementados (Gauss-Jordan, Factorización LU y Gauss-Seidel) proporcionaron resultados consistentes y precisos, validando su confiabilidad para aplicaciones de ingeniería química.

Gauss-Seidel destacó por su eficiencia computacional, convergiendo en solo 8 iteraciones gracias a la estructura tridiagonal y diagonal dominante de la matriz del sistema. Los métodos directos (Gauss-Jordan y Factorización LU) mostraron precisión máxima, siendo ideales para sistemas pequeños donde la exactitud es prioritaria.

La elección del método numérico óptimo depende del balance entre precisión requerida, tamaño del sistema y recursos computacionales disponibles. Este estudio confirma la utilidad de los métodos numéricos como herramientas confiables para el modelado y optimización de procesos de separación en la industria química.

### **Referencias.**

- Chapra, S. C., & Canale, R. P. (2010). Métodos Numéricos para Ingenieros.