INGENIERÍA QUÍMICA

ALGORITMO ETAPA A ETAPA PARA LA SIMULACIÓN DE CASCADAS DE EXTRACCIÓN EN FASE LÍQUIDA

Grupo de investigación: GRUPO DE INVESTIGACION EN PROCESOS DE SEPARACION NO CONVENCIONALES (G.P.S.). UNIVERSIDAD DE AMERICA

César Augusto Sánchez Correa* Andrés Camilo Cárdenas Ospina** Iaime Eduardo Arturo Calvache*

RESUMEN

Se presenta y prueba una estrategia de solución etapa a etapa del conjunto de ecuaciones MESH que representan el modelo de equilibrio de un proceso de extracción en fase líquida. El algoritmo de simulación desarrollado se basa en la termodinámica del equilibrio líquido/líquido y en la implementación de los cálculos de flash isotérmico y flash no isotérmico, superando los alcances de los métodos gráficos e isotérmicos disponibles en la literatura; permite además, la especificación de variables para la simulación en condiciones con transferencia de calor en las etapas y diferente temperatura para los flujos de alimentación y solvente. Se ilustran tres ejemplos de aplicación relacionados con la separación de la mezcla ácido acético y agua.

Palabras clave: Extracción en fase líquida, flash isotérmico, flash no isotérmico, simulación.

ABSTRACT

It's shown and test a stage by stage solution strategy for the set of MESH equations that represents the equilibrium model of the liquid phase extraction process. The simulation algorithm developed is based on liquid/liquid thermodynamics equilibrium and the implementation of isothermal flash and non-isothermal flash calculations, exceeding the scope of graphics and isothermal methods available in literature; also allows specifying variables for heat transfer simulation conditions and different

Recibido: 18 de noviembre de 2009 Aceptado: 26 de mayo de 2.010

- * Docente investigador, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de América.
- ** Estudiante coinvestigador

temperature for feed and solvent streams. We illustrate three examples of application related to the separation of acetic acid-water mixture.

Keywords: Liquid phase extraction, isothermal flash, non-isothermal flash, simulation.

INTRODUCCIÓN

Los métodos de solución de las ecuaciones del modelo de equilibrio en procesos de separación como destilación, absorción y extracción, se dividen típicamente en: a) métodos gráficos; b) métodos etapa por etapa; c) métodos de manipulación simultánea; d) métodos de convergencia global. Para el caso de la extracción en fase líquida, los métodos gráficos y de etapa por etapa tienen su fundamento en el conocimiento del equilibrio líquido/líquido, el cálculo de las envolventes y de etapas de separación parcial o flash isotérmico. Desde el punto de vista computacional son de fácil implementación, no requieren la manipulación de grandes matrices y la aproximación numérica de derivadas es reducida; en contraste con los métodos de manipulación simultánea como el Newton-Raphson o los métodos de convergencia global como los de continuación por Homotopía que requieren manipular grandes matrices y hacen uso permanente de la aproximación numérica de derivadas.

Típicamente la solución de cascadas de extracción se lleva a cabo en forma gráfica empleando los diagramas de equilibrio líquido/líquido como lo detalla Treybal (1968); en sistemas de tres componentes se emplean diagramas triangulares planos, cuando el número de componentes aumenta se requieren representaciones espaciales laboriosas; adicionalmente, los métodos gráficos están limitados a situaciones de operación isotérmica y la simulación de operaciones con transferencia de calor en las etapas no se tiene en cuenta.

El algoritmo desarrollado por Tsuboka y Katayama (1975) para la simulación del proceso de extracción en fase líquida para sistemas multicomponente en multietapa presenta ventaja respecto a los métodos gráficos; sin embargo, el algoritmo está limitado a la simulación de cascadas de extracción en operación isotérmica, lo cual implica dos situaciones: 1) el calor de disolución no se tiene en cuenta y las entalpías se calculan como la solución ideal o, 2) se transfiere la cantidad de calor necesaria para mantener la secuencia isotérmica, este flujo de calor puede ser obtenido al realizar los balances de energía. El algoritmo denominado de suma de flujos isotérmico (ISR, por sus siglas en inglés) para la simulación del proceso de extracción en fase líquida presentado por Henley y Seader (1987) es el desarrollo del algoritmo de Tsuboka y Katayama.

Algoritmos de estructura desconocida implementados en simuladores de tipo comercial como CHEMCAD 5.2.0 permiten la simulación en condiciones de operación adiabática, pero la imposición de un perfil de flujo de calor en las etapas que componen la cascada de extracción es imposible. En el presente trabajo se presenta la simulación del proceso de extracción en fase líquida empleando un algoritmo de solución etapa a etapa que permite la evaluación de secuencias de separación en condiciones adiabáticas y con transferencia de calor.

Fundamento teórico del algoritmo

En los procesos de separación por extracción en fase líquida, la segunda fase se genera a través de un proceso selectivo de mezclado tendiente a la remoción de un componente clave. La

separación básica se logra por mezclado de la solución que se va a separar y el solvente; posteriormente se lleva a cabo la decantación de las fases generadas. Comúnmente la distribución de los componentes en equilibrio se calcula a partir de la formulación simétrica del equilibrio de fases:

$$x_i^R \gamma_i^R = x_i^E \gamma_i^E$$

La definición del coeficiente de distribución obedece al concepto manejado en los procesos de separación, como lo definen Henley y Seader (1987), además de Treybal (1968),

$$K_{i} \equiv \frac{x_{i}^{E}}{x_{i}^{R}} = \frac{\gamma_{i}^{R}}{\gamma_{i}^{E}}$$

En la ecuación (2) los coeficientes de actividad del componente *i* en la fase de extracto (fase con mayor contenido de solvente) y en la fase de refinado (fase acuosa o con menor contenido de solvente), se calculan a partir de un modelo para la energía libre de Gibbs en exceso que pueda tener en cuenta la inestabilidad material de la fase líquida, entre estos: NRTL, Renon y Prausnitz (1968); UNIQUAC, Abrams y Prausnitz (1975); UNIFAC, Fredenslund y Rasmussen (1981); son las elecciones básicas en los problemas de ingeniería aplicada.

Las propiedades energéticas de las corrientes (fundamentalmente la entalpía y la energía libre de Gibbs) se obtienen a partir de las relaciones termodinámicas entre propiedades en exceso, Smith J. M., Van Ness H. C., Abott M. M. (2006); Reid R. C., Prausnitz J. M., Poling B., (1987). Como los modelos para la energía libre de Gibbs en exceso, son independientes de la presión, las propiedades energéticas también resultan independientes de esta; situación que puede resolverse empleando una ecuación de estado que describa adecuadamente la fase líquida empleando reglas de mezclado adecuadas; por ejemplo: la ecuación PSRK (Sven Horstmann, et al., 2005); o las reglas de mezclado MHV2, entre otras.

La figura 1 es la representación conceptual de una etapa de equilibrio que divide la operación en tres procesos: 1) mezclado adiabático de las corrientes solución que se van a separar con el solvente; 2) transferencia indirecta de calor; 3) separación de fases en un decantador o cámara de separación. En la práctica, los procesos de mezclado y separación ocurren en la misma etapa y la transferencia de calor puede efectuarse sobre el solvente, la solución que se va a separar o incluso en ambas.

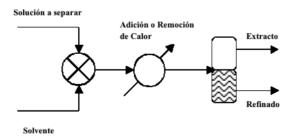


Figura 1. Representación conceptual de una etapa de equilibrio en extracción líquido-líquido

De acuerdo con la figura 1, se tienen dos definiciones importantes:

- a. Flash isotérmico: Cálculo de las composiciones y cantidades de las corrientes de refinado y extracto cuando se especifica la temperatura y la presión en el decantador. En este caso es suficiente el análisis en el decantador y el balance de energía proporciona el flujo de calor para mantener el proceso isotérmico.
- b. Flash no isotérmico: Cálculo de las composiciones y cantidades de las corrientes de refinado y extracto cuando se especifica la presión en el decantador y el flujo de calor. En el caso particular cuando el flujo de calor es cero, la operación se denomina flash adiabático; en cualquier caso, se requiere el balance de energía para establecer la temperatura en el decantador.

Por simplicidad, la representación de una etapa de equilibrio se muestra como en la figura 2. Los subíndices F, S, R y E, se refieren a las corrientes de alimentación, solvente, refinado y extracto respectivamente. Un arreglo de etapas como la de la figura 2, constituyen una cascada o secuencia de extracción en contracorriente. Al conjunto de ecuaciones que representan el modelo de una secuencia en contracorriente se le conoce como MESH (acrónimo en inglés de Material balances, Equilibrium relations, Summation equations, Enthalphy balances). La estrategia de solución del MESH presentada en este trabajo se basa en la aplicación secuencial de cálculos de flash isotérmico y no isotérmico sobre las etapas; consecutivamente, etapa por etapa. El algoritmo emplea el flash como elemento central en el proceso de cálculo, pero no implica ninguna rutina para resolverlo; esta estructura es ventajosa porque el algoritmo puede ser implementado con diferentes procedimientos de cálculo para el flash.

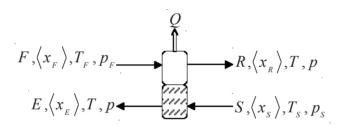


Figura 2. Representación simplificada de una etapa de equilibrio

En este trabajo, la solución al problema de flash isotérmico se lleva a cabo mediante el algoritmo de Rachford & Rice, descrito por Henley & Seader (1987), y Henley & Rosen (1993). La solución del flash adiabático se lleva a cabo mediante una adaptación del algoritmo de Rachord & Rice; Henley & Seader (1987); Henley & Rosen (1993); Cárdenas O., (2009).

Algoritmo de solución para una cascada de extracción en contracorriente

El esquema de la figura 3 representa una cascada de extracción a contracorriente que opera en forma no isotérmica. Un análisis de grados de libertad para tal proceso puede ser efectuado a partir de la tabla 1 y 2. Las especificaciones comunes que reducen los grados de libertad a cero se indican en la tabla 3.

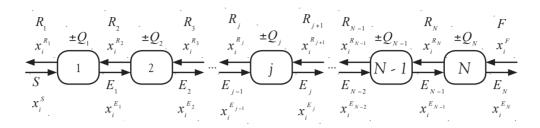


Figura 3. Cascada de extracción en fase líquida a contracorriente.

Si la cascada de extracción de la Figura 3 opera en condiciones no isotérmicas, un análisis de grados de libertad arroja los siguientes resultados tabulados.

Tabla 1. Variables de la cascada de extracción de la Figura 3 en operación no isotérmica

Variables	Número de variables
Flujos molares	2(N+1)
Flujos de calor	N
Composiciones	2c(N+1) $2(N+1)$
Temperatura	2(N+1)
Número de etapas	1
Total	2Nc + 2c + 5N + 5

Tabla 2. Ecuaciones que restringen la cascada de extracción de la Figura 3 en operación no isotérmica

Ecuación	Número de ecuaciones
Balance de masa por componente $E_{j-1}x_i^{E_{j-1}} + R_{j+1}x_i^{R_{j+1}} = E_jx_i^{E_j} + R_jx_i^{R_j}$	Nc
Balance de energía $E_{j-1}H^{E_{j-1}} + R_{j+1}H^{R_{j+1}} - E_{j}H^{E_{j}} - R_{j}H^{R_{j}} = \pm Q$	N
Relaciones de equilibrio $x_i^{E_j} = K_i x_i^{R_j}$	Nc
Restricción de sumatoria $\sum_{i=1}^{c} x_i = 1$	2(N+1)
Equilibrio térmico $T^{E_j} = T^{R_j}$	N
Total	2Nc + 4N + 2

Los grados de libertad resultantes son entonces de 2c + N + 3. La especificación de variables para reducir los grados de libertad convenientemente se muestra a continuación.

Variables a especificar (conteo)						
Composición	Temperatura	Flujos molares	Flujo de calor			
$x_i^F \left(c-1\right)^*$	$T^{F}\left(1\right)$	F(1)		N. (1)		
$x_i^s \left(c-1\right)^*$	T^{s} (1)	S(1)	$\pm Q_{j}(N)$	N (1)		
Total $(2c-2)$	Total (2)	Total (2)	Total (N)	Total (1)		

Tabla 3. Variables a especificar para la cascada de extracción de la Figura 3 en operación no isotérmica

La figura 4 muestra el diagrama de bloques del algoritmo para la simulación de cascadas de extracción en fase líquida por etapas de equilibrio a contracorriente; el algoritmo permite establecer condiciones de operación isotérmicas y no isotérmica, para lo cual, se emplea el flash isotérmico y no isotérmico respectivamente.

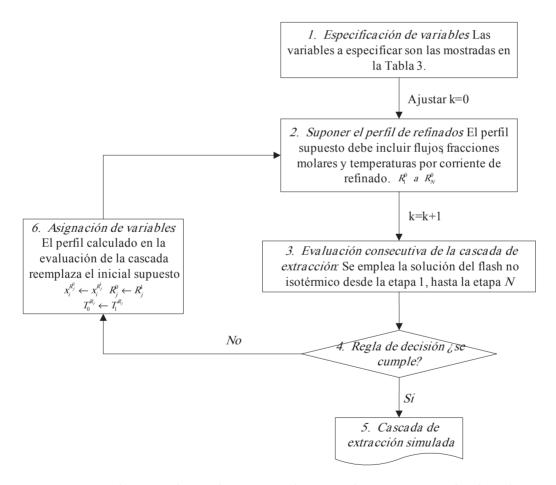


Figura 4. Algoritmo de simulación para el proceso de extracción en fase líquida.

La suposición de fracciones molares del perfil de refinados se puede llevar a cabo teniendo en cuenta los diagramas de equilibrio (envolventes líquido/líquido); por otra parte, los flujos y las temperaturas supuestos pueden proponerse como una variación lineal teniendo en cuenta los

flujos y las temperaturas de las corrientes de alimentación y solvente. Este algoritmo presenta un único lazo de iteración establecido por la siguiente regla de decisión,

$$\xi = \sum_{j=1}^{N} \sum_{i=1}^{c} \Delta x_{i,j} < 1 (10)^{-6} \qquad \Delta x_{i,j} = \left| x_{i,j}^{k} - x_{i,j}^{k-1} \right| \qquad {}_{i=1,2,3,\dots,c}^{j=1,2,3,\dots,N}$$

Donde k hace referencia al número de iteración y $\Delta x_{i,j}$ es una matriz de N por c elementos que representa las diferencias absolutas entre las fracciones molares por etapa y componente supuestas inicialmente para la iteración y, las calculadas durante la evaluación consecutiva de la cascada de extracción. En tanto no se cumpla la regla de decisión establecida no se considera la simulación terminada.

En la tabla 4 se formulan tres ejemplos de extracción en fase líquida representativos que son resueltos empleando el algoritmo presentado en la figura 4. Los ejemplos involucran sistemas de cuatro componentes en 15 etapas de equilibrio, estas secuencias de separación operan en condiciones adiabáticas y con transferencia de calor.

EJEMPLOS

La simulación de los ejemplos presentados a continuación se lleva a cabo empleando como programa intérprete Matlab R2007b en un procesador Intel Pentium Dual CPU T2330 1.60 GHz y memoria RAM de 1014 MB.

Tabla 4. Especificación de variables para los ejemplos 1,2 y 3

Tabla 7. Especificación de variables para los ejemplos 1,2 y 3								
Ej. Compor		Composiciones		- Flujos ,	()	- 4 -)		
	Componente	x_i^F	x_i^S	kmol/h	T, (K)	P,(kPa)	N	Modelo
1	n-amil acetato	0	0.6	F = 35	$T^F = 308.15$	$P^{F} = 101.3$	15	NRTL*
	Agua	0.8	0	S = 15	$T^s = 308.15$			
	Ácido acético	0.2	0					
	n-amil alcohol	0	0.4					
2	n-butil acetato	0	0.8	F = 35	$T^F = 333.15$	$P^{F} = 101.3$	15	UNIQUAC*
	Agua	0.7	0	S = 15	$T^s = 293.15$			
	Ácido acético	0.2	0					
	n-butanol	0.1	0.2					
3	n-butil acetato	0	0.8	F = 50	$T^F = 293.15$	$P^{F} = 101.3$	15	UNIFAC
	Agua	0.7	0	S = 20	$T^s = 333.15$			LLE*
	Ácido acético	0.3	0					
	Etanol	0	0.2					

Las propiedades termoquímicas como calores específicos a presión constante y entalpías de formación como líquidos de los componentes, son los reportados por Perry & Green (1997); junto con Afeefy & Liebman (2009).

Ejemplo 1

La extracción de ácido acético de la mezcla de ácido acético y agua se lleva a cabo empleando como solvente de extracción n-amil acetato mezclado con n-amil alcohol; el modelo de actividad empleado para el cálculo de las propiedades termodinámicas es NRTL desarrollado por Renon y Prausnitz (1968), los parámetros del modelo son los reportados por Sheng-Feng Chian y otros (2002) y se muestran en la tabla 5. El modo de operación de la cascada de extracción es adiabático.

Tabla 5. Parámetros binarios para el modelo NRTL; sistema n-amil acetato (1), agua (2),	
ácido acético (3), n-amil alcohol (4)	

(i, j)	a_{ij} (K)	a_{ji} (K)	$\alpha_{ij=ji}$	
(1,2)	254.47	2221.5	0.2000	
(1,3)	214.55	-37.943	0.2000	
(1,4)	320.6521	-144.8	0.3009	
(2,3)	424.018	-110.57	0.2987	
(2,4)	1447.5	100.1	0.2980	
(3,4)	-316.8	178.3	0.1695	

Fuente: Sheng-Feng Chian, et al, (2002).

La suposición de fracciones molares puede efectuarse teniendo en cuenta el envolvente líquido/líquido para el sistema de cuatro componentes de la Figura 5.

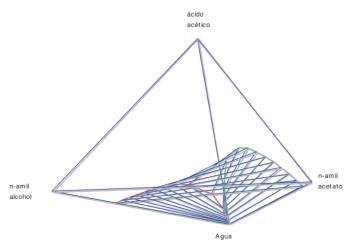


Figura 5. Equilibrio líquido/líquido a 298.15K y 101.3 kPa para el sistema, n-amil acetato (1), agua (2), ácido acético (3), n-amil alcohol (4); modelo de actividad NRTL

La regla de decisión del algoritmo presentado, anteriormente, se establece luego de 26 iteraciones en un tiempo aproximado de 113 segundos logrando la convergencia del algoritmo; los resultados y especificaciones globales del ejemplo 1 se muestran en la Figura 6,

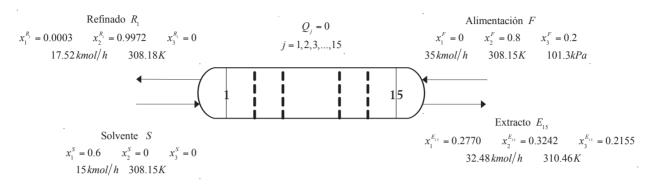


Figura 6. Especificaciones y resultados globales del Ejemplo 1

Los resultados gráficos del Ejemplo 1 se muestran en la Figura 7,

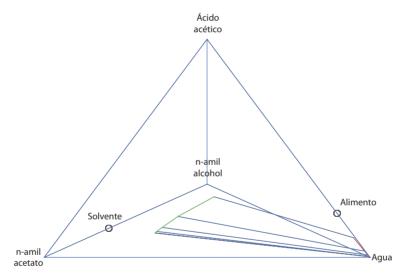


Figura 7. Resultados gráficos del Ejemplo 1, sistema: n-amil acetato (1), agua (2), ácido acético (3), n-amil alcohol (4)

Ejemplo 2

La extracción de ácido acético de la mezcla de ácido acético y agua se lleva a cabo empleando como solvente de extracción n-butil acetato mezclado con n-butanol; el modelo de actividad empleado para el cálculo de las propiedades termodinámicas es UNIQUAC desarrollado por Prausnitz (1975), los parámetros necesarios del modelo son los reportados por Gomis y Vicente (1986) señalados en la tabla 6. El modo de operación de la cascada de extracción es adiabático.

sistema n-butil acetato (1), agua (2), ácido acético (3), n-butanol (4)						
Parámetros de interacción			Constantes de	Constantes de estructura molecular		
(i, j)	$U_{i,j}(K)$	$U_{j,i}(K)$	Componente i	r_i	q_{i}	
(1,2)	849.7	71.5	1	4.83	4.20	
(1,3)	193.8	-52.8	2	0.92	1.40	
(1,4)	-306.7	262.9	3	2.30	2.04	
(2,3)	167.4	-116.0	4	3.45	3.05	
(2,4)	621	50.8				
(3,4)	220.6	-132.4				

Tabla 6. Parámetros de interacción y constantes de estructura molecular del modelo UNIQUAC; sistema n-butil acetato (1), agua (2), ácido acético (3), n-butanol (4)

Fuente: Ruiz, F. & Gomis, V. (1986).

La suposición del perfil de refinados se lleva a cabo teniendo en cuenta la envolvente líquido/líquido del sistema de cuatro componentes (no mostrada). La regla de decisión del algoritmo expuesto en este documento se establece luego de 29 iteraciones en un tiempo aproximado de 410 segundos.

Los resultados gráficos del ejemplo 2 se muestran en la figura 8,

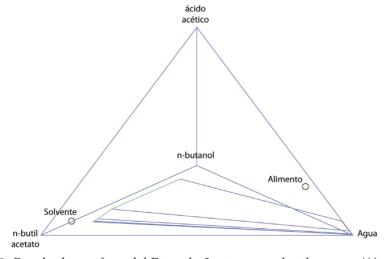


Figura 8. Resultados gráficos del Ejemplo 2, sistema: n-butil acetato (1), agua (2), ácido acético (3), n-butanol (4)

Ejemplo 3

La extracción de ácido acético de la mezcla de ácido acético y agua se lleva a cabo empleando como solvente de extracción n-butil acetato mezclado con etanol; el modelo de actividad empleado para el cálculo de las propiedades termodinámicas es UNIFAC LLE, Fredenslund (1981). El flujo de calor que se establece por cada etapa de equilibrio se halla en una variación lineal desde la etapa 1 en la cual el flujo de calor es -1kJ/h, hasta la etapa 15 en la cual el flujo de calor es

-15kJ/h. La regla de decisión del algoritmo expuesto en este documento se establece luego de 44 iteraciones en un tiempo aproximado de 1.32 horas. Los resultados y especificaciones globales del ejemplo 3 se muestran en la figura 9.

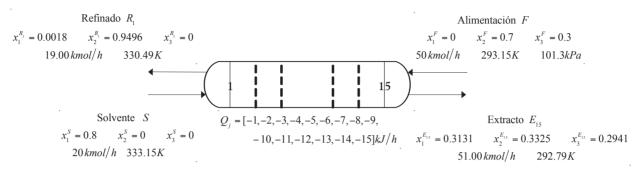


Figura 9. Especificaciones y resultados globales del Ejemplo 3

El perfil de temperatura establecido en la cascada de extracción se muestra en la figura 10.

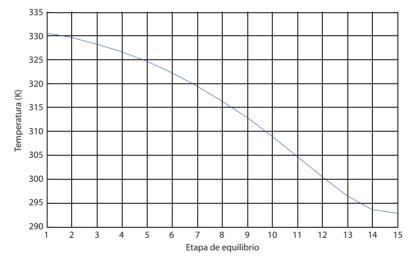


Figura 10. Variación de temperatura respecto a las etapas de equilibrio del ejemplo 3

CONCLUSIONES

El algoritmo, etapa a etapa, presentado en este trabajo para la solución rigurosa del modelo de equilibrio para secuencias de extracción en fase líquida a contracorriente, permite resolver casos que no pueden ser tratados con los métodos gráficos y tampoco por métodos exclusivos de secuencias isotérmicas. El algoritmo permite la simulación de cascadas de extracción en condiciones de operación no isotérmica (adiabática o con transferencia de calor) en uso del flash no isotérmico; adicionalmente, puede ser empleado para simular condiciones isotérmicas empleando el flash isotérmico. Las condiciones no isotérmicas de simulación en una secuencia de extracción en fase líquida pueden ser de mayor consideración en un análisis de extracción reactiva como lo muestra Minotti, Doherty y Malone (1998); ya que, la temperatura es una variable de gran influencia en los procesos de cinética química.

El algoritmo es de fácil implementación en el computador como lo demuestra el diagrama de bloques correspondiente; adicionalmente, al pertenecer a los métodos de solución secuencial, no requiere la manipulación simultánea de todas las ecuaciones y por tanto, no opera grandes matrices: éstas son obvias ventajas computacionales.

La suposición del perfil de refinados para iniciar la iteración en el algoritmo, puede llevarse a cabo a partir de los diagramas de equilibrio isotérmicos (envolventes líquido/líquido) aun para condiciones de simulación no isotérmicas, sin presentar problemas de convergencia. La implementación del algoritmo en un lenguaje compilado, puede reducir significativamente el tiempo de cómputo.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Departamento de investigaciones de la Universidad de América por el apoyo al Grupo de Procesos de Separación no convencionales (GPS) en el financiamiento para publicación de los resultados de esta investigación en eventos de carácter académico.

BIBLIOGRAFÍA

- Abrams, D. S. & Prausnitz, John M. (1975). Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures: A New Expression for the Excess Gibbs Energy of Partly or Completely Miscible Systems. AIChE Journal, 21(1), 116-128.
- Cárdenas Ospina, A. C. (2009). Desarrollo de un algoritmo robusto para la simulación de cascadas de extracción en fase líquida por etapas de equilibrio, sistema ácido acético agua. Bogotá D. C. Trabajo de grado (Ingeniero Químico). Universidad de América. Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química.
- Chiang, Sheng-Feng, Kuo, Chien-Lin, Yu, Cheng-Ching & Wong, D. S. H. (2002). Design alternatives for the Amyl Acetate process: Coupled reactor/column and reactive distillation. Industrial and Engineering Chemistry Research, 41(13)3233-3246.
- Fredenslund, A.; Jones, R. L. & Prausnitz, J. M. (1975). Group-Contribution Estimation of Activity Coefficients en Nonideal Liquid Mixtures. AIChE Journal, 21(6) 1086-1099.
- Afeefy, H.Y., Liebman, J.F., & Stein, S.E., "Neutral Thermochemical Data" en *NIST Chemistry WebBook*, *NIST Standard Reference Database Number* 69, Eds. P.J. Linstrom and W.G. Mallard, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899, http://webbook.nist.gov, (obtenido 17 Noviembre 2009).
- Henley, E. J. & Seader, J. D. (2000). Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. Mexico: REVERTÉ.
- Henley, E. J. & Marshall, R. E. (1993). Cálculo de balances de materia y energía. España: REVERTÉ.
- Horstmann, S.; Jabloniec, A.; Krafczyk, J.; Fischer, K. & Gmehling, J. (2005). PSRK group contribution equation of state: comprehensive revision and extension IV, including critical constants and α-function parameters for 1000 components. Fluid Phase Equilibria. 157-164.
- Minotti, M.; Doherty, M. F. & Malone, M. F. (1998). Design for simultaneous Reaction and liquid-liquid Extraction. Industrial and Engineering Chemistry Research, 37,12, 4748-4755.

- Perry, R. H. & Green, D. W. (1997). *Perry's Chemical engineers' handbook*. McGraw Hill.Reid, Robert; Prausnitz, Jhon M. y Poling, Bruce (1987). *The properties of gases and liquids*. 4 ed. México: McGraw-Hill.
- Rasmussen, P. & Fredenslund, A. UNIFAC parameter table for prediction of liquid-liquid equilibria. *Industrial and Engineering Chemistry Processes Design and Development*, 20, 2, 331-339.
- Renon, H. & Prausnitz, J. M. (1968). Local Compositions in Thermodynamic Excess Function for Liquid Mixtures. AIChE Journal, 14(1), 135-144.
- Ruiz, F. & Gómez, V. Correlation of quaternary Liquid-Liquid equilibrium data using UNIQUAC. Industrial and Engineering Chemistry Processes Design and Development, 25, 1, 216-220.
- Smith, J.M.; Van Ness, H.C. & Abbott, M.M. (2006). Introducción a la termodinámica en ingeniería química. 6 ed. México: McGraw-Hill.
- Treybal, R. E. (1968). Extracción en fase líquida. México: UTEHA.
- Tsuboka, T. & Katayama, T. (1976). General design algorithm based on pseudo-equilibrium concept for multistage multi-component liquid-liquid separation processes. Journal of Chemical Engineering of Japan, 9, 1, 40-45.