

ÍNDICE

CAPÍTULO 1. Introducción.....	1
1.1 Antecedentes y motivación	2
1.2 Descripción del problema.....	3
1.3 Solución propuesta.....	3
1.4 Objetivos.....	4
1.4.1 Objetivo general	4
1.4.2 Objetivos específicos	4
1.5 Alcances.....	4
1.6 Metodología y herramientas a utilizar	5
1.6.1 Formulación de los modelos matemáticos	5
1.6.2 Cálculo de propiedades.....	5
1.6.3 Evaluación de las propiedades.....	5
1.6.4 Simulación de extracción líquido-líquido.....	5
1.6.5 Simulación de perstracción.....	6
1.7 Resultados esperados.....	6
1.8 Organización del documento.....	6
CAPÍTULO 2. Marco teórico	8
2.1 Operaciones de Transferencia de Masa	9
2.1.1 Difusión de masa.....	9
2.1.2 Convección de masa	10
2.2 Métodos de separación	10
2.2.1 Extracción líquido-líquido	10
2.2.2 Perstracción	11
2.2.3 Membranas.....	12
2.2.4 Líquidos Iónicos	13
2.3 Hidroxitirosol	13
2.4 Tirosol.....	14
2.5 Oleuropeína.....	14
2.6 Modelos matemáticos para perstracción.....	15
CAPÍTULO 3. Desarrollo teórico	18
3.1 Extracción líquido-líquido.....	19
3.2 Modelación matemática para la extracción líquido-líquido.....	26
3.3 Simulaciones de extracción líquido-líquido para hidroxitirosol, tirosol y oleuropeína.....	27
3.4 Simulación de hidroxitirosol, tirosol y oleuropeína en una sola mezcla	31
3.5 Perstracción de Hidroxitirosol, Tirosol y Oleuropeína.....	33
CAPÍTULO 4. Resultados y discusiones	36
4.1 Resultados de perstracción de hidroxitirosol, tirosol y oleuropeína en sistemas aislados	37
4.2 Resultados de perstracción de hidroxitirosol, tirosol y oleuropeína en un mismo sistema.....	41
4.3 Discusiones sobre los resultados obtenidos.....	42
CONCLUSIONES.....	43
BIBLIOGRAFÍA	44
ANEXOS.....	45
Modelo de extracción líquido-líquido para Hidroxitirosol	45
Modelo de extracción líquido-líquido para Tirosol	49
Modelo de extracción líquido-líquido para Oleuropeína	53
Modelo de extracción líquido-líquido para los tres sistemas.....	57
Modelo de perstracción para Hidroxitirosol	63
Modelo de perstracción para Tirosol	67
Modelo de perstracción para Oleuropeína	71
Modelo de perstracción para los tres sistemas.....	75

ÍNDICE DE TABLAS

TABLA 1: RESULTADOS DE PERSTRACCIÓN DE BUTANOL, ITERANDO UN COEFICIENTE DE REPARTO.	16
TABLA 2: RESULTADOS DE PERSTRACCIÓN DE VAINILLINA	17
TABLA 3: CONCENTRACIÓN EXPERIMENTAL, Y COEFICIENTE DE REPARTO.	21
TABLA 4: RESUMEN DE PROPIEDADES FÍSICAS DE LOS COMPUESTOS.	25
TABLA 5: RESUMEN DE PORCENTAJES DE EXTRACCIÓN, COEFICIENTES DE REPARTO Y CONCENTRACIONES DE TIROSOL EN ELL CON [OMIN][TF2N].....	25
TABLA 6: RESUMEN DE PORCENTAJES DE EXTRACCIÓN, COEFICIENTES DE REPARTO Y CONCENTRACIONES DE OLEUROPEÍNA EN ELL CON [P6,6,6,14][DCA].	25
TABLA 7: DECAIMIENTO DE CONCENTRACIÓN DE HIDROXITIOSOL CON [P6,6,6,14][DCA].	28
TABLA 8: ERRORES CALCULADOS PARA ELL DE HIDROXITIOSOL.....	28
TABLA 9: DECAIMIENTO DE CONCENTRACIÓN DE TIROSOL CON [OMIN][TF2N].....	29
TABLA 10: ERRORES CALCULADOS PARA ELL DE TIROSOL.	29
TABLA 11: DECAIMIENTO DE CONCENTRACIÓN DE OLEUROPEÍNA CON [P6,6,6,14][DCA].	29
TABLA 12: ERRORES CALCULADOS PARA ELL DE OLEUROPEÍNA.	29
TABLA 13: RESUMEN DE PROPIEDADES CALCULADAS PARA HIDROXITIOSOL EN AMBAS FASES	30
TABLA 14: RESUMEN DE PROPIEDADES DE TRANSPORTE CALCULADAS PARA HIDROXITIOSOL	30
TABLA 15: RESUMEN DE PROPIEDADES CALCULADAS PARA TIROSOL EN AMBAS FASES	30
TABLA 16: RESUMEN DE PROPIEDADES DE TRANSPORTE CALCULADAS PARA TIROSOL	30
TABLA 17: RESUMEN DE PROPIEDADES CALCULADAS PARA OLEUROPEÍNA EN AMBAS FASES	31
TABLA 18: RESUMEN DE PROPIEDADES DE TRANSPORTE CALCULADAS PARA OLEUROPEÍNA	31
TABLA 19: PORCENTAJE NORMAL DE CADA COMPUESTO EN 100 MG DE OLIVOS.	31
TABLA 20: CONCENTRACIONES DE HIDROXITIOSOL, TIROSOL Y OLEUROPEÍNA, EN [PPM].	32
TABLA 21: COEFICIENTES DE REPARTO PARA CADA COMPUESTO, EN AMBOS LÍQUIDOS IÓNICOS.....	34
TABLA 22: DIFUSIVIDAD EN MEMBRANA DE PDMS PARA CADA COMPUESTO	35

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1: DECAIMIENTO DE CONCENTRACIÓN DE BUTANOL ITERANDO UN COEFICIENTE DE REPARTO.....	16
FIGURA 2: DECAIMIENTO DE CONCENTRACIÓN DE VAINILLINA	17
FIGURA 3: DIAGRAMA DE EXTRACCIÓN LÍQUIDO-LÍQUIDO.	20
FIGURA 4: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE HIDROXITIRO SOL EN LA MEZCLA, CON EL LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA]	32
FIGURA 5: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE TIROSOL EN LA MEZCLA, CON EL LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA]	32
FIGURA 6: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE OLEUROPEÍNA EN LA MEZCLA, CON EL LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA]	33
FIGURA 7: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE HIDROXITIRO SOL, TIROSOL Y OLEUROPEÍNA SIMULTÁNEAMENTE EN LA MEZCLA, CON EL LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA]	33
FIGURA 8: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE HIDROXITIRO SOL EN PERSTRACCIÓN, CON LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA]	38
FIGURA 9: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE VAINILLINA EN PERSTRACCIÓN, CON LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA]	39
FIGURA 10: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE TIROSOL EN PERSTRACCIÓN, CON LÍQUIDO IÓNICO [OMIM][TF2N]	40
FIGURA 11: DECAIMIENTO DE LA CONCENTRACIÓN DE OLEUROPEÍNA EN PERSTRACCIÓN, CON LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA]	40
FIGURA 12: RESULTADOS DE LA PERSTRACCIÓN DE HIDROXITIRO SOL (CURVA ROJA), TIROSOL (CURVA VERDE), Y OLEUROPEÍNA (CURVA AZUL) EN UN MISMO SISTEMA, CON EL LÍQUIDO IÓNICO [P6,6,6,14][DCA].	41
FIGURA 13: RESULTADOS DE LA PERSTRACCIÓN DE HIDROXITIRO SOL (CURVA ROJA), TIROSOL (CURVA VERDE), Y OLEUROPEÍNA (CURVA AZUL) EN UN MISMO SISTEMA, CON EL LÍQUIDO IÓNICO [OMIM][TF2N].	42

NOMENCLATURA

Variable	Nombre	Unidades
D	Coeficiente de reparto	-
E	Porcentaje de extracción	-
C	Concentración	mg/L
$D_{ste,f}$	Difusividad del soluto (ste) en solvente (f)	m ² /s
PM	Peso molecular	g/mol
V	Volumen molar	cm ³ /mol
T	Temperatura	K
Re	Número de Reynols	-
v_t	Velocidad terminal	cm/s
d_{cr}	Diámetro crítico de la gota	cm
Sh	Número de Sherwood	-
Sc	Número de Schmidt	-
HT	Flujo de transferencia de masa	m ² /s
k	Coeficiente de transferencia de masa	m/s
Δx	Espesor de membrana	m
Dc	Coeficiente de distribución	-
K_F	Coeficiente global de transferencia de masa	-
AE	Error Absoluto	-
RMS	Error cuadrático medio	-
$LRMS$	Error cuadrático medio logarítmico	-
C_{sim}	Concentración simulada	mg/L
C_{exp}	Concentración experimental	mg/L
Símbolos griegos	Nombre	Unidades
μ	Viscosidad cinemática	Pa*s
ρ	Densidad	kg/m ³
$\Delta\rho$	Diferencia de densidades	kg/m ³
Superíndices	Nombre	
aq	Fase acuosa	
og	Fase orgánica	
ext	Líquido extractante: Ext=1 Ac. Etilo	

	ext=2 Ac. N-butilo ext=3 [P6,6,6,14][DCA] ext=4 [omin][tf2N] ext=5 [P6,6,6,14][tf2N]	
<i>Diff</i>	Interface entre fase acuosa y orgánica	
Subíndices	Nombre	
<i>b</i>	Seno del líquido	
<i>ste = 1,2,3</i>	Soluto; 1=Hidroxitirosol, 2=Tirosol, 3=Oleuropeína	
<i>aq</i>	Fase acuosa	
<i>og</i>	Fase orgánica	
<i>mix</i>	Mezcla	
<i>ext</i>	Líquido extractante: Ext=1 Ac. Etilo ext=2 Ac. N-butilo ext=3 [P6,6,6,14][DCA] ext=4 [omin][tf2N] ext=5 [P6,6,6,14][tf2N]	
<i>i</i>	Interfase	
<i>LL</i>	Membrana	