

Universidade Estadual de Campinas.
Faculdade de Engenharia de Alimentos.
Departamento de Engenharia de Alimentos.

Modelagem da Extração Multiestágio e Contracorrente Aplicada à Cana-de-açúcar.

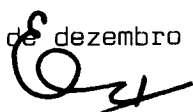
Brian Castelli Azevedo.
Engenheiro de Alimentos.

Orientador: Prof. Dr. Enrique Ortega Rodríguez

PARECER

Este exemplar corresponde à redação final da tese defendida por BRIAN CASTELLI AZEVEDO e aprovada pela Comissão Julgadora em 18.12.96.

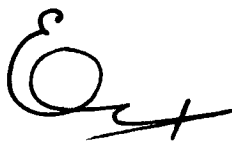
Campinas, 18 de dezembro de 1996


Prof. Dr. Enrique Ortega Rodríguez
Presidente da Banca

**Tese apresentada à Faculdade de
Engenharia de Alimentos da
Universidade Estadual de Campinas
para obtenção do título de Mestre em
Engenharia de Alimentos.**

Campinas, 1996.

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Enrique Ortega Rodriguez
Orientador



Prof. Dr. Theo Kieckbusch
Membro



Prof. Dr. Satoshi Tobinaga
Membro

Prof. Dra. Florencia Cecilia Menegalli
Membro

Campinas, novembro de 1996

Dedico este trabalho a Deus Supremo,
aos meus pais que não mediram esforços
no meu crescimento, à Sylvia, minha esposa,
e Kali, minha filha, pela compreensão e
apoio durante este tempo todo.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Enrique Ortega, pela orientação, chamadas de atenção na hora certa e amizade que demonstrou nestes anos de convivência.

Aos membros da banca Prof. Dr. Theo Kieckbusch, Prof. Dr. Satoshi Tobinaga e Prof. Dra. Florencia Menegalli pelas correções e sugestões, fazendo com que este trabalho fosse apresentado de uma maneira mais clara.

Aos meus colegas de departamento, em especial ao Fábio Marson Ferreira e ao Eder Dutra, pelos momentos de luta, alegrias e esforços conjuntos.

Ao pessoal do Departamento de Engenharia, Secretaria de Pós-graduação e Biblioteca, pela atenção e boa vontade.

Ao Conselho Nacional de Pesquisa - CNPQ, pela bolsa concedida.

E a todos aqueles que de uma forma ou de outra trocaram experiências, contribuindo não só para elaboração deste trabalho, mas sim para uma maior compreensão dos objetivos da vida.

SUMÁRIO

RESUMO	i
SUMMARY	ii
ÍNDICE	iii
ÍNDICE DE TABELAS	v
ÍNDICE DE FIGURAS	vi
NOMENCLATURA.....	vii
1. INTRODUÇÃO.....	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	3
3. METODOLOGIA.....	15
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO	27
5. CONCLUSÕES.....	43
6. RECOMENDAÇÕES.....	45
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	46
8. APÊNDICE	48

RESUMO

Este trabalho buscou analisar a viabilidade da utilização de modelos matemáticos, que explicassem o comportamento do processo de extração sólido-líquido por difusão multiestágio em contracorrente, no dimensionamento de extratores que funcionam com o processo descrito.

Os conceitos de “desenvolvimento sustentável” e dos chamados Sistemas Integrados de Produção de Energia e Alimentos (SIPEA) foram os pontos iniciais da pesquisa e fundamentais para a escolha do tipo de extrator e processo a ser estudado.

A partir da revisão bibliográfica realizada sobre o processo de extração por difusão, identificando fatores que influenciam este processo, tipos de equipamentos e modelos de análise da extração, escolhemos o método proposto por Schwartzberg, e Desai como o mais interessante para o desenvolvimento do nosso estudo.

Os autores consideram uma dependência entre os estágios com relação a fração de soluto retirada. A dificuldade de entender fisicamente esta dependência levou-nos a propor um modelo alternativo que visse o processo como sendo uma somatória de estágios independentes.

Para verificação da validade dos modelos foram elaborados programas de computador que simulam o comportamento do processo de extração e compara o perfil de concentração simulado com o perfil experimental obtido em um extrator tipo Kennedy em escala piloto.

Os resultados do estudo da variação da relação líquido-sólido (α) e do número de Fick permitiram constatar, tomando certos cuidados na determinação dos parâmetros de entrada, a possibilidade do uso dos dois modelos para o desenvolvimento de um método de análise visando o dimensionamento de extratores multiestágios em contracorrente.

O modelo alternativo mostrou-se o mais adequado para este desenvolvimento pois permite a utilização do α usado no cálculo da eficiência do equipamento.

SUMMARY

It was intended to analyse the viability of using mathematical models, to explain the behaviour of the diffusional solid-liquid extraction in a counter-current, multi-stage process equipment, for the desing of industrial extractors.

The concepts related with "Sustained Development" and "Integrated Systems for Food and Energy Production" were the initial marks for the development of this research.

Basead on bibliography review of theoretical basis of diffusional extraction process, the factors that influence the process, kinds of equipments and some models that describe the extraction process, the method proposed by Schwartzberg and Desai is considered as the most interesting model .

These authors considered a dependency of the fraction of solute separated from the matrix in relation with stages. A problem of explanation in this methodology make us to propose and alternative method of calculation, that sees the whole process as somatory of inter-independent stages.

For the verification of the validity of the two models were elaborated two computer programs that simulate the behaviour of the extraction process and and lets do the comparison between the concentration profile obtained by the computer simulation and the experimental profile obtained with a pilot plant extractor (Kennedy type).

The results of the studies carried out to show the variation of the extraction yield with different values of two variables: the liquid-solid relation (α) and the number of Fick. evidences the possibility of using both methods as design tool in process equipment calculation. The alternative model showed to be the most adequate for development a method to analyse the dimension of multi-stage extractors in a counter-current.

ÍNDICE

1 - INTRODUÇÃO	1
2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1 - Histórico.....	3
2.2 - Extração sólido-líquido por difusão.....	4
2.3 - Fatores que influenciam o processo de difusão	5
2.3.1- Tamanho de partícula.....	5
2.3.2- Gradiente de concentração.....	5
2.3.3- Relação líquido-sólido.....	5
2.3.4- Tempo de retenção	5
2.3.5- Temperatura	5
2.3.6- pH.....	6
2.3.7- Agitação	6
2.4 - Tipos de Extratores.....	6
2.4.1 - Extratores por percolação	6
2.4.2 - Extratores por imersão.....	8
2.4.3 - Extratores compostos	9
2.5 - Modelos de Análise da Extração por Difusão	10
2.6 - O Modelo de Schwartzberg.....	11
2.6.1 - Teoria da extração	11
2.6.2 - Sistema multiestágio contracorrente.....	12
3 - METODOLOGIA	15
3.1- Escolha do Modelo	15
3.2 - Definição dos Parâmetros R e A.....	15
3.3 - Análise do Modelo de Schwartzberg	16
3.4 - Análise do Modelo Alternativo.....	20
3.5 - Resolução dos Modelos	22
3.6 - Elaboração dos Programas	24
3.7 - Comparação entre os Perfis Calculados e o Experimental.	25
4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO	27
4.1 - Influência dos Parâmetros de Entrada nos Modelos	27
4.1.1 - Relação líquido-sólido (α).....	27
4.1.2 - Número de Fick.....	31
4.1.3 - Número de Biot	34
4.1.4 - Análise da variação de α e do número de Fick.....	35
4.1.5 - Discussão	38
4.2 - Simulação	39
4.3 - Determinação do Número de Estágios de um Extrator	42

5 - CONCLUSÕES	43
6 - RECOMENDAÇÕES	45
7 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	46
8 - APÊNDICE	48
8.1 - Programa PERFIL1.BAS	48
8.2 - Programa PERFIL2.BAS	52
8.3 - Programa SIMULA.BAS	58
8.4 - Programa ESTAGIO.BAS	62
8.5 - Síntese da Comparação dos Dois Modelos	64

ÍNDICE DE TABELAS

2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA:

2.1 - Equações para a determinação de q_i e C_i	12
2.2 - Funções e termos para uso em sistemas contracorrente multiestágio	14

4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO:

4.1 - Dados Experimentais.....	27
4.2 - Valores de α do Experimento	28
4.3 - Perfil de Concentração para diferentes α - Modelo I.....	29
4.4 - Perfil de Concentração para diferentes α - Modelo II.....	30
4.5 - Perfil de Concentração para diferentes Fick - Modelo I.....	31
4.6 - Perfil de Concentração para diferentes Fick - Modelo II.....	33
4.7 - Resumo dos Resultados para o Modelo I.....	37
4.8 - Resumo dos Resultados para o Modelo II.....	37
4.9 - Eficiências para Diferentes Condições Iniciais.....	40

ÍNDICE DE GRÁFICOS E FIGURAS

2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA:

2.1 - Extrator DDS	7
2.2 - Extrator De Smet	7
2.3 - Extrator por baterias	8
2.4 - Extrator Detrex	8
2.5 - Extrator Kennedy	9
2.6 - Extrator Saturno	10

3 - METODOLOGIA

3.1 - Esquema de um sistema multiestágio	17
--	----

4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO:

4.1 - Concentração na saída dos estágios para diferentes α - Modelo I	30
4.2 - Concentração na saída dos estágios para diferentes α - Modelo II	31
4.3 - Concentração na saída x estágios para diferentes Fick - Modelo I	32
4.4 - Concentração na saída x Fick para cada estágio - Modelo I	32
4.5 - Concentração na saída x estágios para diferentes Fick - Modelo II	33
4.6 - Concentração na saída x Fick para cada estágio - Modelo II	34
4.7 - Comparação entre os perfis dos Modelos e o experimental	39

NOMENCLATURA

A	Fração de soluto não retirada do sólido
B	Elementos da matriz diagonal obtida da matriz original após a Eliminação de Gauss
Bi	Número de Biot
C _i	Iésimo coeficiente da série de solução
D	Difusividade de soluto no sólido
Fick	Número de Fick
F _n	Função que caracteriza a transferência de massa no enésimo estágio
F _t	Função que caracteriza a transferência de massa no tempo t
J _s	Fluxo de soluto
K	Coefficiente de transferência de massa no extrato, na interface sólido-líquido
L	Vazão mássica do líquido
M _(i,j)	Elementos da matriz original obtida do sistema de equações para N estágios
M _t	Massa transferida no tempo t
M _∞	Massa transferida no tempo infinito
N	Número total de estágios
R	Fração de soluto retirada do sólido
S	Vazão mássica do sólido
X	Concentração de soluto no sólido
X _E	Concentração experimental no sólido
X ₀	Concentração inicial de soluto no sólido
X _n	Concentração de soluto no sólido no estágio n
Y	Concentração de soluto no líquido
Y _E	Concentração experimental no extrato
Y _e	Concentração no líquido que entra num estágio
a	Variável espacial, para partícula esférica (nosso caso) corresponde ao raio
m	Relação entre concentração de soluto no líquido e no sólido, no equilíbrio
q _i	Iésima raiz positiva da série de solução
t	Tempo de contato sólido-líquido
α	Fator de diluição ou relação sólido-líquido
η	Rendimento
θ	Tempo de contato sólido-líquido num estágio
v	Índice de geometria da partícula
∇X	Gradiente de concentração do soluto

1 - INTRODUÇÃO

Este trabalho tem como ponto de partida a pesquisa de doutorado "O Desenvolvimento de um Difusor para Mini-usinas de Álcool" (ORTEGA, 1990), realizada no Departamento de Engenharia da Faculdade de Engenharia de Alimentos. A motivação desta pesquisa era gerar uma tecnologia adequada ao ecodesenvolvimento que segue três princípios básicos (SACHS, 1984):

1. necessidade social
2. sustentabilidade ecológica
3. viabilidade econômica,

O trabalho citado visava contribuir ao estudo da tecnologia de Extração por Difusão, podendo ajudar a viabilizar pequenas e médias destilarias. Na época, em meio a crise do petróleo, havia a premência na pesquisa de obtenção de álcool combustível para automotores. Embora hoje as perspectivas sejam outras, o entendimento mais claro da tecnologia de extração por difusão ainda se faz necessária.

O difusor ou extrator sólido-líquido por difusão tem uma importância fundamental devido a possibilidade de miniaturização do equipamento sem afetar substancialmente sua eficiência de extração. Possui aplicabilidade muito grande sendo utilizado na extração de sucos de frutas, óleos, pigmentos, açúcares, aromatizantes e muito mais. Muitas vezes com o mesmo tipo de equipamento pode-se processar diferentes matérias primas, como por exemplo o extrator DDS, com cerca de 400 unidades em uso no mundo (SCHWARTZBERG, 1980), processando maçãs, pêras, uva, cereja, cenoura, polpa de groselha, café, chás, alcaçuz, beterrabas, cana, gelatina, cola, glicosídeos, proteína de soja, proteína de levedura, fungos, ração de peixe, etc.

Esta característica de versatilidade do difusor é um dos fatores mais atraentes desse equipamento, pois se adequa as necessidades dos complexos agroindustriais denominados Sistemas Integrados de Produção de Energia e Alimentos (SIPEA) que colocam como fator essencial a adoção de tecnologias agrícolas e industriais eficientes que permitam uma utilização máxima dos subprodutos. O aproveitamento econômico dos resíduos, a harmonização entre a produção de alimentos e energia, reciclagem, viabilização da produção em pequena ou média escala e uma diversificação da matéria prima, o que cada vez mais torna-se uma necessidade global, devido à crescente escassez mundial de recursos (LA ROVERE e TOLMASQUIN, 1984).

Crentes da importância social, econômica, ecológica e técnica da tecnologia de extração por difusão, neste trabalho nos propomos ao estudo do processo de extração sólido-líquido por difusão tendo como base o sistema multiestágio, devido a grande variedade de extratores que utilizam este sistema e porque contamos com a experiência de trabalho com extrator de planta piloto tipo Kennedy desenvolvido por ORTEGA (1990).

Este trabalho tem os seguintes objetivos principais:

- Analisar o processo físico envolvido na extração multiestágio.

- Propor um modelo matemático que explique o processo físico definido acima.
- Desenvolver programas computacionais para simular o comportamento da extração a partir do modelo matemático proposto.
- Verificar o comportamento do modelo com relação a variação dos parâmetros envolvidos: número de Fick (Dt/a^2) - [difusividade (D), tempo de residência (t) e diâmetro de partícula (a)] e relação líquido-sólido, visando sua utilização em análises de desempenho e dimensionamento de difusores, bem como no desenvolvimento de sistemas de controle computacional em tempo real.

2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 - Histórico.

A extração sólido-líquido, ou seja, a transferência do soluto de um sólido para um meio solvente, é largamente utilizada na indústria de alimentos, em alguns casos para recuperar ou obter produtos desejados e em outros para remover constituintes ou contaminantes indesejáveis (SCHWARTZBERG, 1980).

As aplicações existentes e o potencial para o uso da tecnologia de difusão são muito grandes e variadas e inclui, entre outros, os seguintes casos (McPHERSON, 1987):

Vegetais:

- sucos de frutas (maçã, pêra, cítricos, uvas, etc) e de seus resíduos como pele, polpa, bagaço.
- extração de corantes, óleos, aromas, outros.
- açúcar de cana, beterraba, sorgo.
- extração de bebidas (café, chás).
- extração de malte.

Carnes e Peixes:

- extração de proteína de resíduos tais como: cabeça e esqueleto de peixe, resíduos de crustáceos, tripas e carcaças de frango.

Os pesquisadores BINKLEY e WILEY (1978) estudaram a possibilidade do uso do difusor DDS, usado originalmente para extração de açúcar de beterraba, na produção de suco de maçã e compararam este suco com o obtido no processo de prensagem. Foi verificado um rendimento 13,47% maior para a difusão, resultando uma polpa com teor de sólidos residuais mais baixo, porém a comparação sensorial mostrou uma preferência pelo suco da prensagem.

Os efeitos do tipo de processo e do cultivar de maçãs nas propriedades do suco foram examinados por CLIFF et alli (1991) usando métodos analíticos e sensoriais, os processos comparados foram os seguintes: extração mecânica oxidativa (sem inibição da polifenol oxidase), extração mecânica não oxidativa (com inibição da polifenol oxidase), extração por liquefação enzimática, extração por difusão. Mostraram analiticamente que os processos e variedades tem diferença significativa, porém sensorialmente apenas os processos apresentaram diferença significativa entre si.

Freqüentemente a extração contracorrente minimiza o uso de solvente e o custo de recuperação tanto do soluto quanto do próprio solvente. Embora sistemas em batelada e semi-contínuos ainda sejam usados, equipamentos automatizados contínuos em contracorrente estão aumentando cada vez mais, sobretudo na indústria açucareira sendo esta uma das principais responsáveis pelo desenvolvimentos dos processos de extração por difusão.

O primeiro processo por difusão para recuperação de açúcar de beterraba foi proposto por Davydov em 1833, e o processo de difusão por baterias em multicoluna foi desenvolvido por Robert na Boêmia em 1862. O primeiro extrator contínuo, bem sucedido, usado para beterraba, foi o difusor rotatório de Bergé, introduzido na Bélgica em 1930 (IVERSON e SCHWARTZBERG, 1984).

Segundo Maede, citado por IVERSON e SCHWARTZBERG (1984), o processo de extração por difusão em cana de açúcar, foi testado pela primeira vez em 1886 na Luisiana, Estados Unidos, apresentando algum êxito. Payne, citado por IVERSON e SCHWARTZBERG (1984), relata a utilização de um processo de difusão descontínuo em 1907 pela indústria da cana no Havaí. A extração por difusor contínuo, aplicada na Bélgica antes da Segunda Guerra Mundial, difundiu-se rapidamente, após o término do conflito, e no início da década de 50 o modelo do difusor contínuo para beterraba foi adaptado para cana (HUGOT, 1977; LOPES, 1982; IVERSON e SCHWARTZBERG 1984).

Esta técnica foi aplicada com bons resultados econômicos em vários lugares do mundo, Egito, Havaí, Filipinas entre outros, mas o seu grande impacto foi na África do Sul tendo seus primeiros difusores instalados em 1966 e 1967. A partir de então, todas as novas usinas de açúcar instaladas neste país utilizaram esta técnica de extração.

No Brasil, nesta mesma época, algumas tentativas de introdução do difusor não ofereceram bons resultados, devido a problemas operacionais resultantes de uma insuficiente integração com os equipamentos auxiliares, desconhecimento, em nosso país, da técnica de operação do equipamento e pelo receio de técnicos conservadores sobre a conveniência do sistema na extração de sacarose (LOPES, 1982).

2.2 - Extração sólido-líquido por difusão.

O conceito de difusão é visto de forma diferente pelos pesquisadores do assunto.

A difusão é o fenômeno pelo qual duas soluções de concentrações diferentes, separadas por um meio permeável ou poroso, estabelecem o escoamento por movimentação de soluto e solvente tendendo atingir o equilíbrio (HUGOT, 1977), ou o fenômeno causado pela movimentação molecular ao acaso no sentido de completar uma mistura (CUSSLER, 1984).

A cinética da extração sólido-líquido por difusão tem sido estudada por vários pesquisadores que, em muitos dos casos, verificaram que a extração poderia ocorrer em duas etapas, uma etapa de lavagem (lixiviação) onde o soluto externo às células, liberado por algum processo físico-químico, é removido rapidamente e uma segunda etapa de extração lenta por difusão onde o soluto é removido do interior das células. Para o óleo de canola, SO e MACDONALD (1986), verificaram ainda que esta segunda etapa de difusão era controlada por dois mecanismos, um lento onde ocorre difusão do soluto do interior das células rompidas e outro muito mais lento com a difusão do soluto retido no interior das células não rompidas.

A extração de substâncias solúveis do café foi estudada por ZANONI et alli (1992) demonstrando que a produção de café não pode ser considerada como um mecanismo de difusão simples, como tinha sido reportado na literatura. O fenômeno tem duas fases, a fase

de lavagem onde as substâncias solúveis dissolvem-se instantaneamente e são transferidas para o extrato e outra fase de difusão extraindo os solutos internos às partículas porosas.

Na beterraba, a membrana celular deve ser desorganizada pela ação do calor ou outro meio, de modo que o material solúvel do seu interior possa se difundir devido ao gradiente de concentração entre o líquido intracelular e o líquido externo (MC PHERSON, 1987).

Na cana, a membrana das células, mesmo usando temperaturas altas, mostra-se refratária a osmose. O açúcar é retirado por lavagem das células abertas por tratamento mecânico, este processo é conhecido como lixiviação. Como a maioria das leis da difusão osmótica aplica-se também a lixiviação, a expressão "difusão" foi mantida (HUGOT, 1977).

2.3 - Fatores que influenciam o processo de difusão.

2.3.1- Tamanho de partícula.

O tamanho das partículas está diretamente ligado ao grau de preparo, ou seja, a eficiência de ruptura das membranas celulares. O formato, tamanho e rigidez exercem influência direta na distribuição do líquido de extração no colchão de sólido.

2.3.2- Gradiente de concentração.

Outro fator importante no desempenho do difusor é o gradiente de concentração entre a solução interna ao sólido e o solvente. No difusor, o açúcar está em solução no suco interno da cana, a transferência de massa se dá deste suco concentrado para um mais diluído que rodeia a partícula (LAMUSSE, 1980).

2.3.3- Relação líquido-sólido.

Relação entre as vazões de líquido e sólido que entram no equipamento, para extratores onde o líquido percola através do leito de sólido é chamada de taxa de percolação, é o volume do líquido de extração que passa por uma certa área do colchão por unidade de tempo. Ela depende da preparação e distribuição das partículas e da temperatura de operação, sendo que o aumento desta razão resulta num aumento da taxa de extração, como observou SO e MACDONALD (1986) na produção de óleo de canola.

2.3.4- Tempo de retenção.

Refere-se ao tempo de permanência da fibra ou do caldo no difusor. A contribuição positiva de um maior tempo de retenção no aumento da extração deve porém ser balanceado com os possíveis efeitos negativos de uma longa exposição às condições internas do difusor como temperatura e pH. Por exemplo, no caso da cana pode aumentar a inversão da sacarose e causar escurecimento do suco (LAMUSSE, 1980).

2.3.5- Temperatura.

SO e MACDONALD (1986) e REIN, citado por LAMUSSE (1980) mostraram que altas temperaturas favorecem a extração, aumentando a difusão molecular, reduzindo a viscosidade do líquido melhorando o contato sólido-líquido. MCMASTER e RAVNÖ,

citados por LAMUSSE (1980), recomendaram o uso de temperaturas acima de 75°C para controlar a atividade de bactérias termófilas.

A temperatura tem um efeito positivo no processo de difusão, porém verificou-se uma relação inversa entre o aumento do grau de extração e o aumento da temperatura na faixa de 55° a 70°C para cana (ORTEGA, 1990).

No caso de sucos de frutas as altas temperaturas provocam o cozimento alterando o sabor. MCPHERSON (1987) recomenda uma faixa ótima de temperatura de 60-65°C.

2.3.6- pH.

BRÛNICHE-OLSEN (1969), demonstrou que o pH tem pouca influência no grau de extração do açúcar de cana, pode interferir porém, na inversão da sacarose diminuindo a produção de açúcar e também na corrosão do equipamento.

2.3.7- Agitação.

SO e MACDONALD (1986) verificaram que a agitação afeta a extração, sugerindo então que a resistência de película pode ser significativa na extração de óleo de canola.

2.4 - Tipos de Extratores.

Na extração sólido-líquido por difusão podemos observar dois mecanismos físicos básicos:

- extração por percolação, onde o solvente flui através do leito ou colchão de partículas sólidas.
- extração por imersão, neste caso o sólido fica imerso no solvente sendo separado ao final da extração.

Os difusores podem então ser divididos em três grandes grupos: extratores por percolação, extratores por imersão e os compostos onde percolação e imersão estão presentes.

2.4. 1 - Extratores por percolação.

a) Extratores com rosca transportadora: os sólidos são levados por meio de roscas de uma extremidade a outra enquanto o líquido flui por gravidade em sentido contrário.

Os exemplos característicos deste tipo de equipamento são os difusores BMA-torre e o DDS (Figura 2.1).

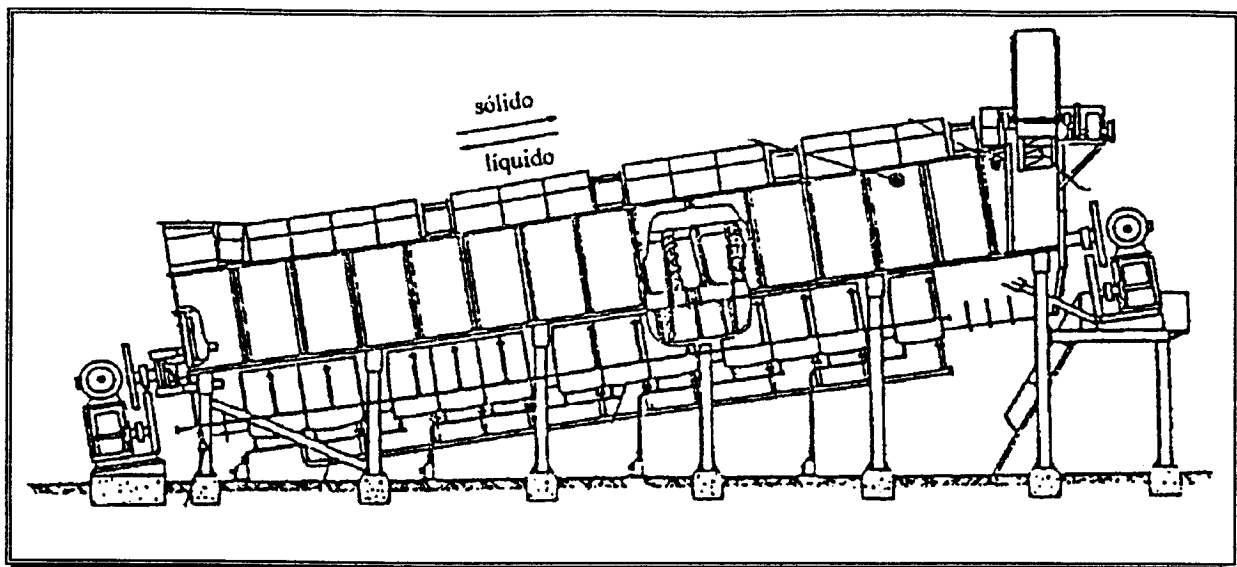


FIGURA 2.1 - Extrator DDS (SCHWARTZBERG, 1983)

b) Extratores com fluxo cruzado: o líquido percola através de um leito de sólido, que se desloca horizontalmente, é drenado para uma série de reservatórios dos quais é recirculado ao leito por meio de bombas. O líquido segue em direção contrária à do sólido.

Este movimento em contracorrente pode ser ajudado por um sistema que permita o transbordamento de um reservatório para o seguinte.

Os difusores da De Smet (Figura 2.2), o da BMA-egípcio e o Rotocel, são exemplos desse tipo de extrator.

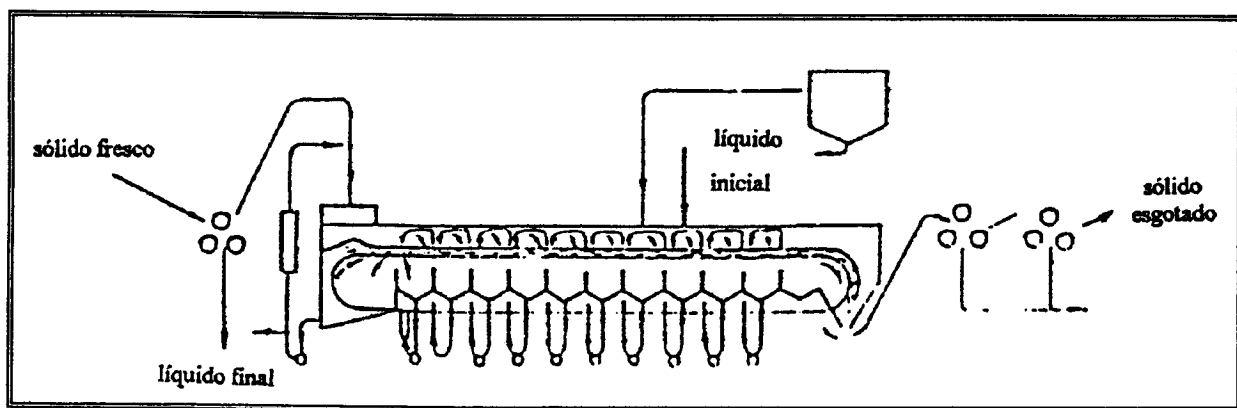


FIGURA 2.2 - Extrator De Smet (GENIE, 1983)

c) Extratores de leito fixo: os sólidos estão retidos em tanques ou colunas, o líquido percola através da coluna e o extrato é recolhido na extremidade inferior. O exemplo típico é o extrator por baterias (Figura 2.3). São sistemas de extração em multi tanques onde o extrato entra no estágio que contém o sólido mais consumido, flui sequencialmente através do leito de sólido contido nos tanques e é descarregado no estágio que contém o sólido mais fresco.

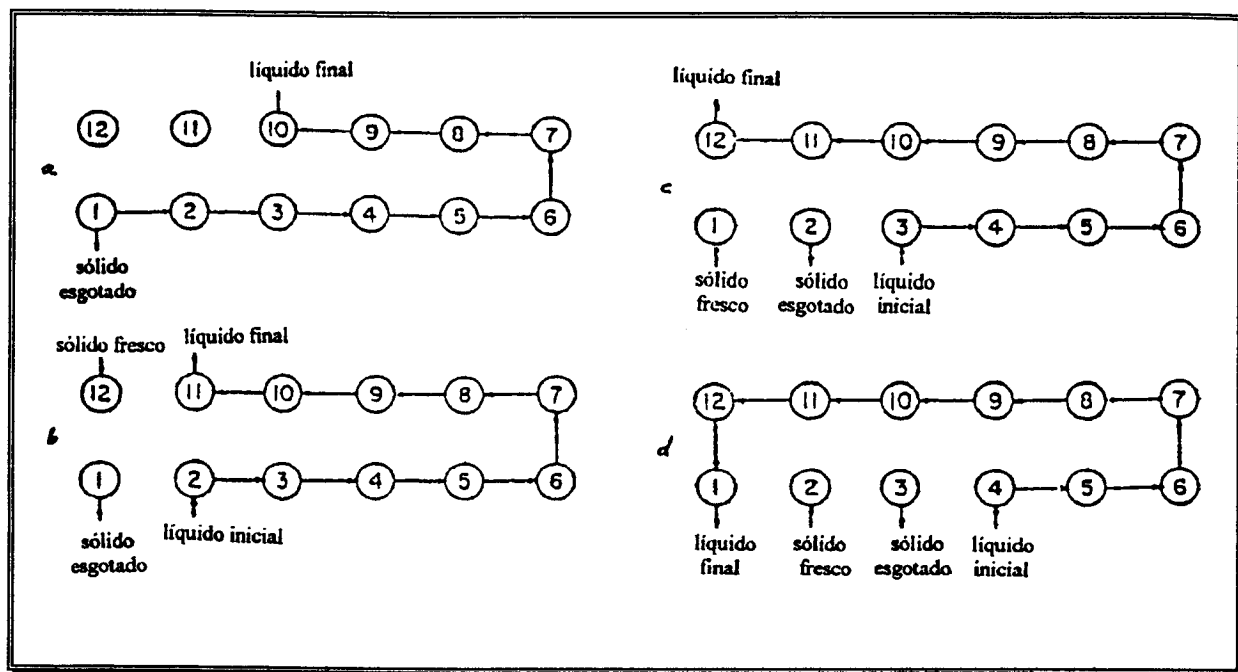


FIGURA 2.3 - Extrator por baterias (SCHWARTZBERG, 1980)

2.4.2 - Extratores por Imersão.

a) Extratores com rosca transportadora: os sólidos são levados por uma rosca através do leito líquido que caminha em sentido contrário ao sólido. Temos como exemplo os difusores Hildebrand e Detrex (Figura 2.4).

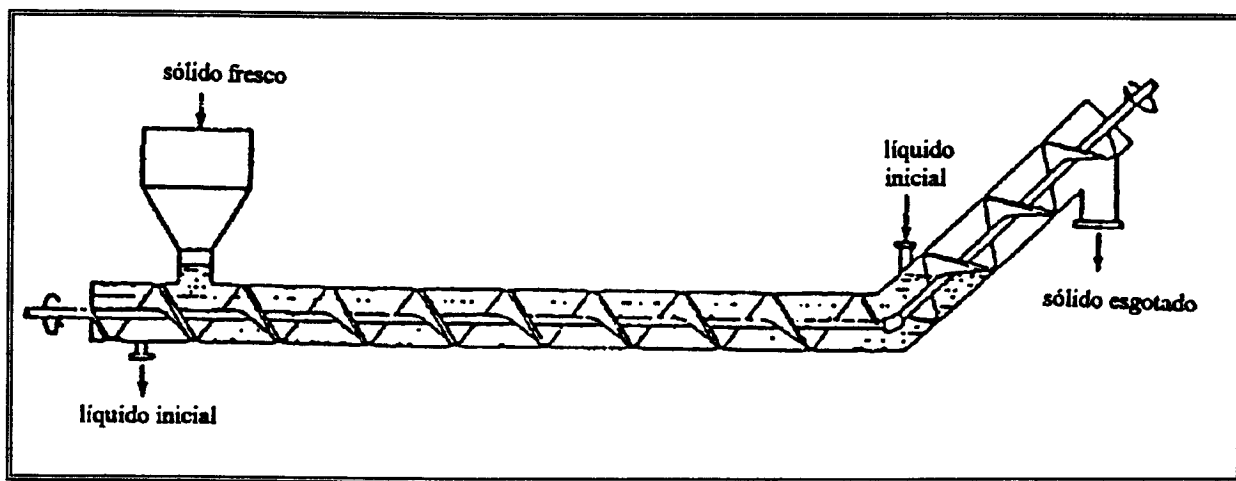


FIGURA 2.4 - Extrator Detrex (SCHWARTZBERG, 1980)

b) Extratores com placas perfuradas: este tipo de equipamento possui um sistema de placas, pás ou anteparos perfurados com a função de separar o sólido do líquido em um estágio e transportá-lo para o estágio seguinte em contra corrente com o líquido. Os exemplos característicos são os difusores Kennedy (Figura 2.5), RT e o G.

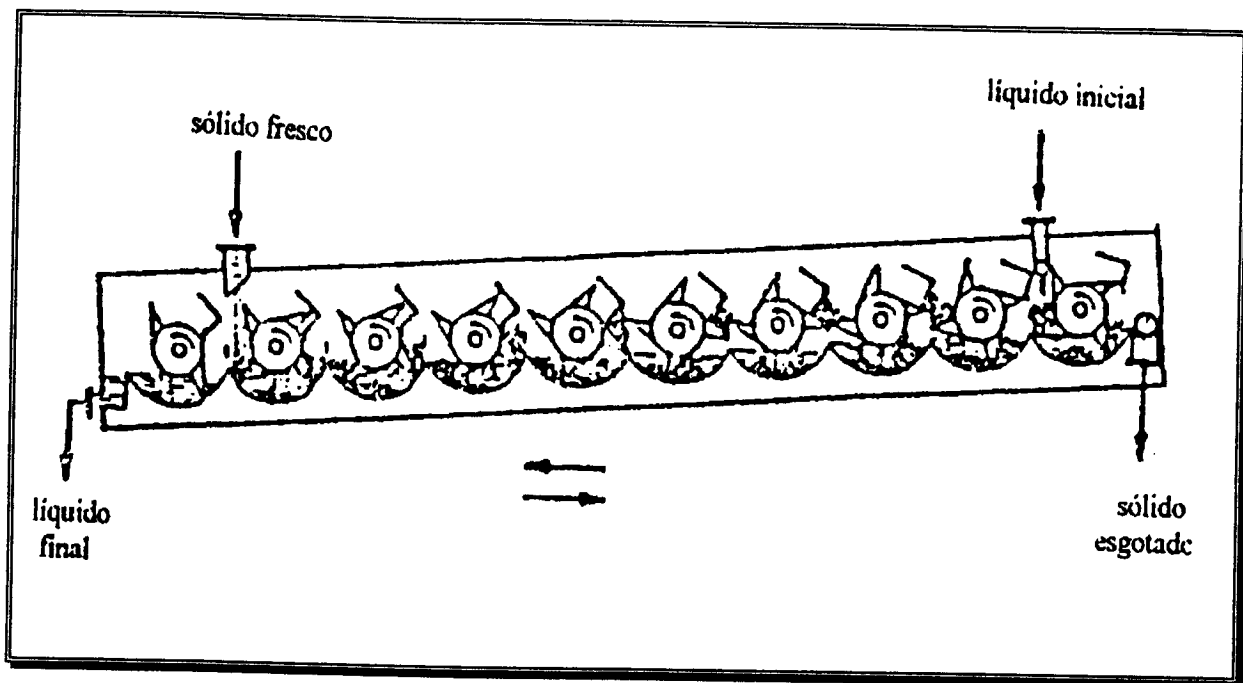


FIGURA 2.5 - Extrator Kennedy (SCHWARTZBERG, 1980)

2.4.3 - Extratores compostos.

Estes equipamentos apresentam, como já foi visto, os dois tipos de mecanismos, percolação e imersão. Temos como exemplo o Olier e o Saturno (Figura 2.6), onde placas móveis perfuradas transportam o sólido em contra corrente com o líquido. Na extremidade de entrada do líquido ocorre a etapa de percolação. Devido ao formato do corpo do difusor e do posicionamento da saída do extrato, uma região inundada é formada. Apesar de não termos encontrado na literatura consultada um modelo típico, o transporte do sólido também poderia se dar por meio de roscas. O difusor DDS, em determinadas condições, pode apresentar este tipo de comportamento.

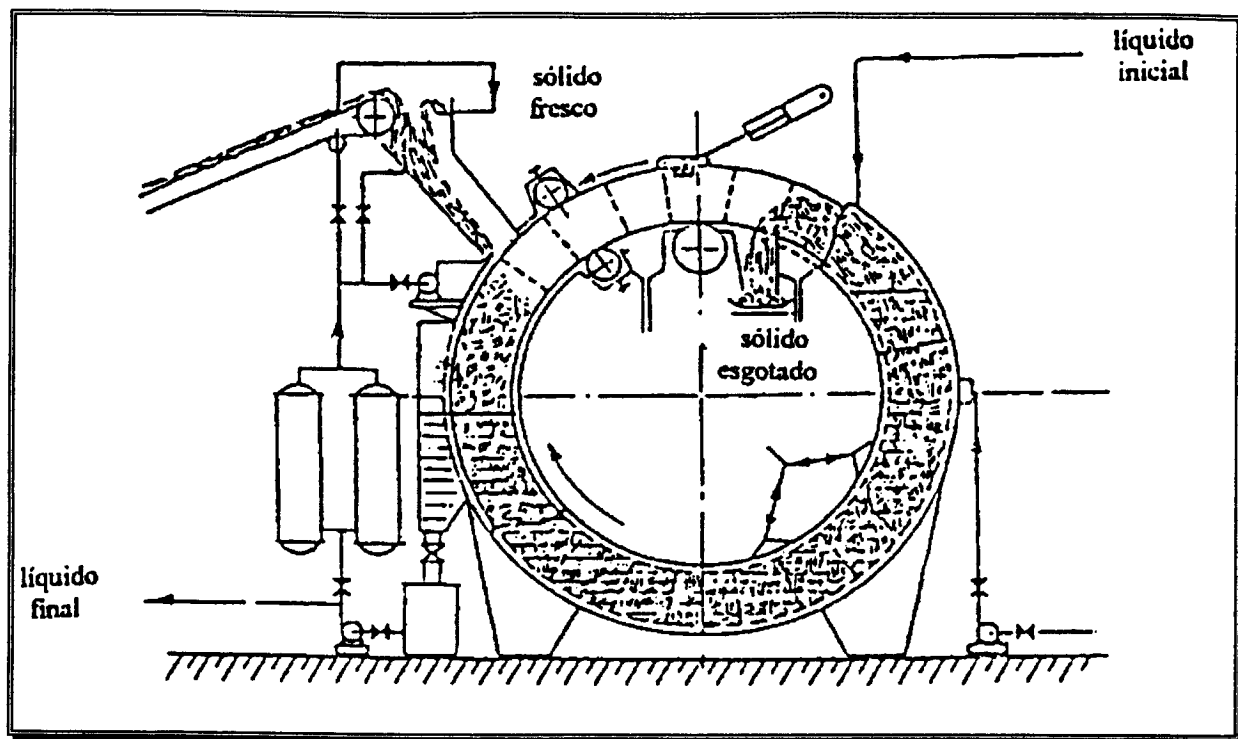


FIGURA 2.6 - Extrator Saturno (SCHWARTZBERG, 1980)

2.5 - Modelos de Análise da Extração por Difusão.

O modelo matemático aplicado a um extrator em batelada foi pesquisado por SO e MACDONALD (1986). O sistema grãos de canola - solvente é continuamente agitado. As equações referem-se a concentração do óleo no solvente como função do tempo e são deduzidas de equações de balanço de massa, equilíbrio sólido-líquido e expressões da taxa de transferência de massa. Na dedução, os dois mecanismos (lavagem e difusão) são tratados separadamente e então somados para obter a expressão final.

Dois modelos foram desenvolvidos por GUNASEKARAN et alli (1989) para prever o perfil de concentração ao longo do difusor contracorrente inclinado de rosca simples. O Modelo I considera este equipamento como uma série de tanques perfeitamente interligados e agitados através dos quais sólidos e líquidos escoam continuamente em estado estacionário e se baseia no balanço de massa para a transferência de um componente solúvel do sólido para a fase líquida. O Modelo II considera o extrator como uma série de tanques agitados em estado não estacionário, não há fluxo de sólido entrando ou saindo de cada tanque, a taxa de alimentação de líquido é constante mas a concentração de solúveis na entrada e saída do líquido depende do tempo. O tempo de residência (tempo total de contato com o líquido) é calculado como a distância percorrida dividida pela velocidade média do sólido.

A extração de substâncias solúveis do café foi estudada por ZANONI et alli (1992). Eles propuseram um modelo matemático que se caracteriza como a soma de duas etapas (lavagem e difusão). Um bom ajuste da equação para o processo de difusão foi obtido pela consideração de um valor de rendimento inicial e pela aplicação da lei da difusão para os solúveis possíveis de extração ainda retidos no sólido, sendo então, o primeiro termo, a contribuição instantânea da lavagem e o segundo termo a contribuição da difusão.

SCHWARTZBERG (1983), e em outros artigos com diversos colaboradores, desenvolveu um sistema de equações para descrever e calcular sistemas de extração em contracorrente por estágios, contínuos, controlados por difusão, levando em conta os parâmetros de transferência de massa. O modelo apresentado por Schwartzberg é o objetivo do nosso estudo e será desenvolvido abaixo.

2.6 - O Modelo de Schwartzberg

2.6.1 - Teoria da extração.

A primeira Lei de Fick fornece as bases para definição da difusividade (D) do soluto no sólido e é expressa por:

$$J_s = -D \nabla X \quad (2.1)$$

onde J_s é o fluxo de soluto, X é a concentração de soluto no sólido e ∇X é o gradiente de concentração do soluto.

O modelamento da extração por difusão é feito levando em conta a equação (2.1) na equação de balanço de massa do soluto. A equação resultante é conhecida como a segunda Lei de Fick ou EDPD (equação diferencial parcial de difusão), que para o fenômeno de difusão transiente que depende de uma única variável espacial, pode ser expressa pela equação (2.2) (SCHWARTZBERG, 1983):

$$\frac{\partial X}{\partial t} = \frac{1}{a^{v-1}} \frac{\partial}{\partial a} \left[a^{v-1} D \frac{\partial X}{\partial a} \right] \quad (2.2)$$

onde t é o tempo, X a concentração de soluto no sólido, v é um índice de geometria: $v = 1$ para placa plana infinita, $v = 2$ para cilindro infinito e $v = 3$ para esfera e a é a distância de um plano central, se $v = 1$, do eixo do sólido cilíndrico, se $v = 2$ e do centro da esfera se $v = 3$.

Considerando a concentração de soluto na solução sempre uniforme e o sólido inicial livre de soluto, CRANK (1975) propõe a seguinte solução:

$$\frac{M_t}{M_\infty} = 1 - \sum_{i=1}^{\infty} (C_i) \exp(-q_i^2 Dt/a^2) \quad (2.3)$$

onde M_t é a massa transferida no tempo t , M_∞ é a massa transferida no tempo infinito, D a difusividade do soluto no sólido, t o tempo de contato e a é um comprimento característico das partículas sólidas.

Os valores de C_i e q_i , os i-ésimos coeficientes e raízes positivas da série de solução respectivamente, dependem da geometria das partículas, do fator de diluição ($\alpha = mL/S$) e do número de Biot ($Bi = Ka/D$), onde $m = (Y/X)_\infty$ é a relação entre a concentração no líquido e no sólido no equilíbrio, K é o coeficiente de transferência de massa na interface

sólido-líquido. Equações que permitem a determinação destes valores de C_i e q_i são encontradas na tabela 2.1 (SCHWARTZBERG, 1983; SCHWARTZBERG e CHAO, 1982).

Geometria	Biot	q_i	C_i
placa plana infinita	infinito	$\frac{\tan(q_i)}{\alpha}$	$\frac{2\alpha(\alpha+1)}{\alpha^2 q_i + (\alpha+1)}$
	finito	$\frac{\tan(q_i)}{\alpha} \left(\frac{Bi + \alpha q_i^2}{Bi} \right)$	$\frac{2\alpha(\alpha+1) Bi^2}{\alpha^2 q_i^2 [Bi^2 - Bi + q_i^2] + Bi^2(\alpha+1) + 2Bi\alpha q_i^2}$
cilindro infinito	infinito	$\frac{2J_1(q_i)}{\alpha J_0(q_i)}$	$\frac{4\alpha(\alpha+1)}{\alpha^2 q_i^2 + 4(\alpha+1)}$
	finito	$\frac{2J_1(q_i)}{\alpha J_0(q_i)} \left(\frac{2Bi + \alpha q_i^2}{Bi} \right)$	$\frac{4\alpha(\alpha+1)}{\alpha^2 q_i^2 [Bi^2 - Bi + q_i^2] + 4Bi^2(\alpha+1) + 4Bi\alpha q_i^2}$
esfera	infinita	$\left(\frac{3 + \alpha q_i^2}{3} \right) \tan(q_i)$	$\frac{6\alpha(\alpha+1)}{\alpha^2 q_i^2 + 9(\alpha+1)}$
	finita	$\frac{3Bi + \alpha(1 - Bi)q_i^2}{3Bi + \alpha q_i^2} \tan(q_i)$	$\frac{6Bi^2\alpha(\alpha+1)}{\alpha^2 q_i^2 [Bi^2 - Bi + q_i^2] + 9Bi^2(\alpha+1) + 6Bi\alpha q_i^2}$

TABELA 2.1 - Equações para a determinação de q_i e C_i (SCHWARTZBERG, 1983)

2.6.2 - Sistema multiestágio contracorrente.

O sistema multiestágio contracorrente também foi estudado por SCHWARTZBERG e DESAI (1976). Neste sistema ocorre mudança na concentração externa quando o sólido se move de estágio para estágio, a concentração do soluto no extrato é composta pela infusão e efusão. Temos uma contribuição da efusão devido a concentração inicial do soluto no sólido (X_0) e contribuição inicial de infusão devido a concentração pontual entrando no primeiro estágio (Y_2). Nos estágios subsequentes as contribuições de infusão e efusão continuam, porém ocorre uma contribuição infusional adicional devido a diferença entre a concentração do líquido que está entrando no estágio e a concentração no sólido do estágio precedente. Para o segundo estágio a nova contribuição depende de ($Y_3 - Y_1$) e para um estágio geral n é dependente de ($Y_{n+1} - Y_{n-1}$) e portanto equações podem ser montadas para a concentração do extrato na saída de cada estágio.

Contribuição da infusão para Y:

$$Y = A Y_e \quad (2.4)$$

Contribuição da efusão para Y:

$$Y = R m X_o = (1 - A) m X_o \quad (2.5)$$

onde Y é a concentração no líquido que sai do estágio, Y_e a concentração que entra no estágio, X a concentração residual no sólido; m = Y/X no equilíbrio; A é a fração de soluto não retirada do sólido e R a fração retirada.

Temos, então, as seguintes equações para cada estágio:

$$\begin{aligned} Y_1 &= R_1 m X_o + A_1 Y_2 \\ Y_2 &= R_2 m X_o + A_2 Y_2 + A_1 (Y_3 - Y_1) \\ Y_3 &= R_3 m X_o + A_3 Y_2 + A_2 (Y_3 - Y_1) + A_1 (Y_4 - Y_2) \\ Y_N &= R_N m X_o + A_N Y_2 + A_{N-1} (Y_3 - Y_1) + \dots \dots + A_1 (Y_{N+1} - Y_{N-1}) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Teremos N equações para N estágios em um sistema contracorrente. Estas equações podem ser arranjadas na forma matricial resultando em uma matriz expressa da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ M_{2,1} & M_{2,2} & M_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ M_{3,1} & M_{3,2} & M_{2,2} & M_{1,2} & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ M_{N-2,1} & M_{N-2,2} & M_{N-3,2} & M_{N-4,2} & M_{1,2} & 0 \\ M_{N-1,1} & M_{N-1,2} & M_{N-2,2} & M_{N-3,2} & M_{2,2} & M_{1,2} \\ M_{N,1} & M_{N,2} & M_{N-1,2} & M_{N-2,2} & M_{3,2} & M_{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ Z_3 \\ \vdots \\ Z_{N-2} \\ Z_{N-1} \\ Z_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{1,N+1} \\ M_{2,N+1} \\ M_{3,N+1} \\ \vdots \\ M_{N-2,N+1} \\ M_{N-1,N+1} \\ M_{N,N+1} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

$$\text{onde } Z_n = \frac{(Y_n - m X_o)}{(Y_{n+1} - m X_o)} \quad (2.8)$$

O índice duplo da notação normal usada para rotular os elementos das matrizes foi modificado, pois, iniciando com a segunda coluna, todos os elementos ao longo da diagonal são os mesmos. Os elementos não zero das colunas 3 para N são rotulados com os índices que caracterizam a origem da diagonal na coluna 2. Então, o elemento M_{n,m} na notação normal tem o mesmo valor que o elemento M_{n+2-m,2} e é rotulado M_{n+2-m,2} no sistema de rotulagem usado na matriz (SCHWARTZBERG, 1983).

Em geral, quando Y_{N+1} = 0, o rendimento $\eta = \frac{L Y_1}{S X_o}$ é dado por:

$$\eta = \alpha (1 - Z_1)$$

Então, a fim de determinar o rendimento para o sistema de extração contra corrente com N estágio temos que resolver a matriz para Z_1 , o que pode ser feito utilizando o método de eliminação de Gauss (BARROS, 1976).

A tabela 2.2 lista expressões para certas funções (F_n) que caracterizam a transferência de massa no enésimo estágio e a dependência funcional dos elementos não zero da matriz com estas funções, para os três tipos de geometria, num sistema multiestágio contra-corrente, onde n é o número de estágios, θ o tempo de residência no estágio.

F_n	$M_{n,1}$	$M_{n,2}$	$M_{n,N+1}$
1, para $n = 0$	$\alpha + 1$, para $n = 1$	$-(\alpha + F_1)$, para $n = 1$	0, para $n < N$
$\sum_{i=1}^{\infty} (C_i) \exp\left(-q_i^2 \frac{Dn\theta}{a^2}\right)$, para $n \neq 0$	$(\alpha + F_{n-1})$, para $n \neq 1$	$(F_{n-2} - F_n)$, para $n > 1$	$(\alpha + F_1)$, para $n = N$

TABELA 2.2 - Funções e termos para uso em sistemas contracorrente multiestágio (SCHWARTZBERG, 1983)

3 - METODOLOGIA

3.1- Escolha do Modelo.

Este trabalho centrou-se no estudo do processo de extração por difusão multiestágio em contracorrente. Este processo compreende um conjunto de módulos de extração, denominados estágios, acoplados ou intermitentes onde o sólido é transportado na direção contrária ao escoamento de líquido quando visto de maneira global, mesmo que em cada estágio se apresente como cocorrente ou em leito fixo. Este conceito de estágios é utilizado na elaboração de modelos matemáticos com o intuito de explicar e prever o comportamento da extração e o perfil de concentração ao longo do equipamento, não só de difusores tipicamente multiestágio mas também de difusores contínuos, como mostram os modelos apresentados por GUNASEKARAN et alli (1989), utilizados na avaliação de um extrator tipo DDS.

Escolhemos como modelo base aquele proposto por SCHWARTZBERG (1983), onde o sólido se move de estágio para estágio enquanto a concentração externa a ele vai se modificando a cada passo. O efeito destes passos é apresentado como uma contribuição infusional adicional às contribuições de infusão e efusão gerando, como foi visto, o sistema abaixo:

$$\begin{aligned} Y_1 &= R_1 mX_o + A_1 Y_2 \\ Y_2 &= R_2 mX_o + A_2 Y_2 + A_1 (Y_3 - Y_1) \\ Y_3 &= R_3 mX_o + A_3 Y_2 + A_2 (Y_3 - Y_1) + A_1 (Y_4 - Y_2) \\ Y_N &= R_N mX_o + A_N Y_2 + A_{N-1}(Y_3 - Y_1) + \dots \dots + A_1 (Y_{N+1} - Y_{N-1}) \end{aligned} \quad (3.1)$$

3.2 - Definição dos Parâmetros R e A.

Como vimos, o R é a fração de soluto retirada no processo de extração por difusão.

Definindo:

$$F = \sum_{i=1}^{\infty} (C_i) \exp(-q_i^2 Dt / a^2) \quad (3.2)$$

a equação (2.3) fica:

$$\frac{M_t}{M_{\infty}} = 1 - F \quad (3.3)$$

Fazendo o balanço de massa para tempo infinito temos:

$$\begin{array}{ccc} LY \leftarrow & \boxed{} & \leftarrow LY_o \\ SX_o \rightarrow & & \rightarrow SX \end{array}$$

$$S(X_o - X_\infty) = L(Y_\infty - Y_o) = M_\infty \quad (3.4)$$

Dividindo a massa de soluto transferida pela massa inicial temos:

$$\frac{M_\infty}{S X_o} = \frac{L(Y_\infty - Y_o)}{S X_o} \quad (3.5)$$

Considerando que inicialmente o solvente fosse puro, $Y_o = 0$, e lembrando que $\alpha = Lm/S$ e $m = (Y/X)_\infty$, obtem-se:

$$\frac{M_\infty}{S X_o} = \frac{\alpha}{\alpha + 1} \quad \text{ou} \quad M_\infty = \frac{\alpha}{\alpha + 1} S X_o \quad (3.6)$$

Para um tempo t qualquer:

$$\frac{M_t}{M_\infty} = \frac{\alpha + 1}{\alpha} \frac{M_t}{S X_o} \quad (3.7)$$

$$\frac{M_t}{S X_o} = \frac{\alpha}{\alpha + 1} (1 - F_t) \quad (3.8)$$

Do balanço de massa no instante t , tem-se com $Y_o = 0$:

$$M_t = L(Y_t - Y_o) = L Y_t \quad (3.9)$$

$$\frac{M_t}{S X_o} = \frac{L Y_t}{S X_o} = \alpha \frac{Y_t}{m X_o} \quad (3.10)$$

$$\frac{Y_t}{m X_o} = R = \frac{1 - F_t}{\alpha + 1} \quad (3.11)$$

Definindo:

$$A = 1 - R$$

então:

$$A = \frac{\alpha + F_t}{\alpha + 1} \quad (3.12)$$

3.3 - Análise do Modelo de Schwartzberg

O modelo de Schwartzberg propõe a divisão da quantidade total de soluto disponível no sólido em porções específicas definidas para cada estágio. Estas porções percorrem os estágios sofrendo a ação de extração em cada estágio que passa.

A fração retirada de cada porção vai se acumulando de estágio para estágio.

A expressão para a fração retirada num estágio n (figura 2.9) pode ser obtida a partir do balanço de massa.

$$X_n = X_{n-1} - \alpha(Y_n - Y_{n+1}) \quad (3.13)$$

Como foi visto:

$$R = \frac{1}{\alpha + 1} (1 - Ft) = \frac{1}{\alpha + 1} \frac{M_t}{M_\infty} \quad (3.14)$$

Então

$$R_n = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{X_0 - X_n}{X_0 - X_\infty} \right)$$

$$R_n = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{X_0 - X_{n-1}}{X_0 - X_\infty} \right) + \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{X_{n-1} - X_n}{X_0 - X_\infty} \right) \quad (3.15)$$

$$R_n = R_{n-1} + \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{X_{n-1} - X_n}{X_0 - X_\infty} \right)$$

Para um sistema multiestágio representado na figura 3.1, as porções de soluto disponíveis para cada estágio serão $(mX_0 - Y_2)$, $(mX_1 - Y_3)$, ..., $(mX_{N-1} - Y_{N+1})$ para os estágios 1, 2, ..., N respectivamente.

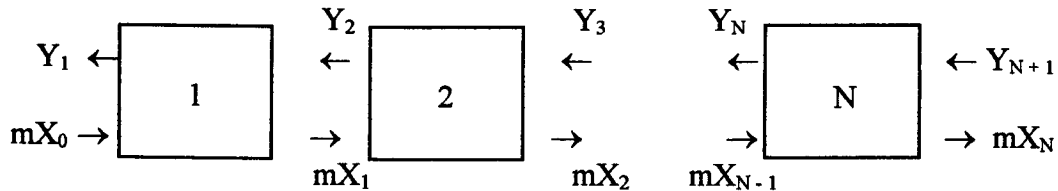


FIGURA 3.1 - Esquema de um sistema multiestágio

Se considerarmos que em cada estágio o equilíbrio é atingido temos que $Y_n = mX_n$. Assim podemos expressar o sistema de equações para um equipamento com N estágios como:

$$\begin{aligned} Y_1 &= R_1 (mX_0 - Y_2) + Y_2 \\ Y_1 &= R_2 (mX_0 - Y_2) + R_1 (Y_1 - Y_3) + Y_3 \\ Y_1 &= R_3 (mX_0 - Y_2) + R_2 (Y_1 - Y_3) + R_1 (Y_2 - Y_4) + Y_4 \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$Y_1 = R_N (mX_0 - Y_2) + R_{N-1} (Y_1 - Y_3) + \dots + R_1 (Y_{N-1} - Y_{N+1}) + Y_{N+1}$$

onde R_n é a fração retirada pela ação de n estágios.

Rearranjando o sistema sabendo que $A = 1 - R$ e considerando solvente inicialmente puro ($Y_{N+1} = 0$), obtêm-se as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}
R_1 \text{ mXo} &= Y_1 - A_1 Y_2 \\
R_2 \text{ mXo} &= A_1 Y_1 + (1 - A_2) Y_2 - A_1 Y_3 \\
R_3 \text{ mXo} &= A_2 Y_1 + (A_1 - A_3) Y_2 + (1 - A_2) Y_3 - A_1 Y_4
\end{aligned} \tag{3.17}$$

$$\begin{aligned}
R_{N-1} \text{ mXo} &= A_{N-2} Y_1 + (A_{N-3} - A_{N-1}) Y_2 + (A_{N-4} - A_{N-2}) Y_3 + \dots + (1 - A_2) Y_{N-1} - A_1 Y_N \\
R_N \text{ mXo} &= A_{N-1} Y_1 + (A_{N-2} - A_N) Y_2 + (A_{N-3} - A_{N-1}) Y_3 + \dots + (A_1 - A_3) Y_{N-1} + (1 - A_2) Y_N
\end{aligned}$$

Este sistema de equações foi colocado na forma matricial obtendo uma matriz com o mesmo formato daquela proposta por SCHWARTZBERG (1983). Nosso objetivo foi possibilitar a elaboração de um programa computacional com base nesta matriz que permita obter o perfil de concentração no equipamento e a avaliação da eficiência final de forma rápida e direta. A matriz obtida então, é mostrada abaixo:

$$\begin{bmatrix}
M_{1,1} & M_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
M_{2,1} & M_{2,2} & M_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\
M_{3,1} & M_{3,2} & M_{2,2} & M_{1,2} & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
M_{N-2,1} & M_{N-2,2} & M_{N-3,2} & M_{N-4,2} & M_{1,2} & 0 \\
M_{N-1,1} & M_{N-1,2} & M_{N-2,2} & M_{N-3,2} & M_{2,2} & M_{1,2} \\
M_{N,1} & M_{N,2} & M_{N-1,2} & M_{N-2,2} & M_{3,2} & M_{2,2}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
Y_1 \\
Y_2 \\
Y_3 \\
\vdots \\
Y_{N-2} \\
Y_{N-1} \\
Y_N
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
M_{1,N+1} \\
M_{2,N+1} \\
M_{3,N+1} \\
\vdots \\
M_{N-2,N+1} \\
M_{N-1,N+1} \\
M_{N,N+1}
\end{bmatrix}$$

onde Y_n é a concentração que deixa o estágio n , e os coeficientes da matriz são definidos como mostra a tabela abaixo:

$M_{n,1}$	$M_{n,2}$	$M_{n,N+1}$
A_{n-1} , para $\forall n$	$-A_1$, para $n = 1$ $(A_{n-2} - A_n)$, para $n > 1$	$R_n \text{ mXo}$

Analisando as expressões que geraram a matriz apresentada por Schwartzberg verificamos que cada uma das linhas da matriz corresponde a uma expressão geral que coloca a concentração de soluto no extrato final como uma somatória dos incrementos de concentração obtidos no extrato pelo contato nos estágios realizados.

$$Y_1 = R_n (\text{mXo} - Y_2) + R_{n-1} (Y_1 - Y_3) + \dots + R_1 (Y_{n-1} - Y_{n+1}) + Y_{n+1} \tag{3.18}$$

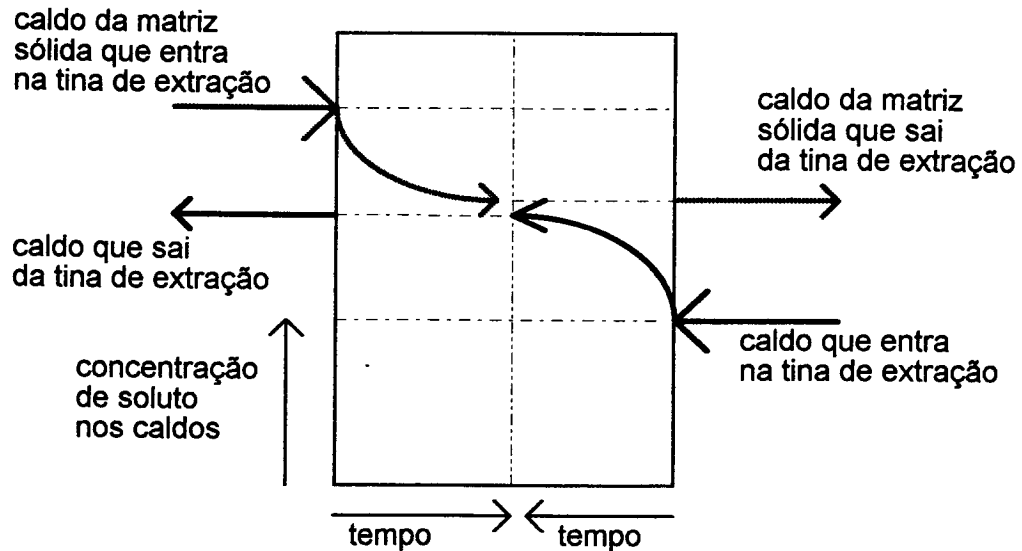
Olhando fisicamente o processo, seria de se esperar que os incrementos de cada estágio dependessem da diferença de concentrações do caldo trazido pelo sólido e do extrato que entram em contato no estágio, multiplicada pela fração capaz de ser retirada nesse estágio (que depende do tempo de contato, da difusividade, do tamanho da partícula e da relação líquido-sólido). Sendo assim, as expressões esperadas para o primeiro, segundo e enésimo estágio seriam:

$$\begin{aligned}
Y_1 &= R_1 (\text{mXo} - Y_2) + Y_2 \\
Y_1 &= R_1 (\text{mXo} - Y_2) + R_2 (Y_1 - Y_3) + Y_3
\end{aligned} \tag{3.19}$$

$$Y_1 = R_1 (mX_0 - Y_2) + R_2 (Y_1 - Y_3) + \dots + R_n (Y_{n-1} - Y_{n+1}) + Y_{n+1}$$

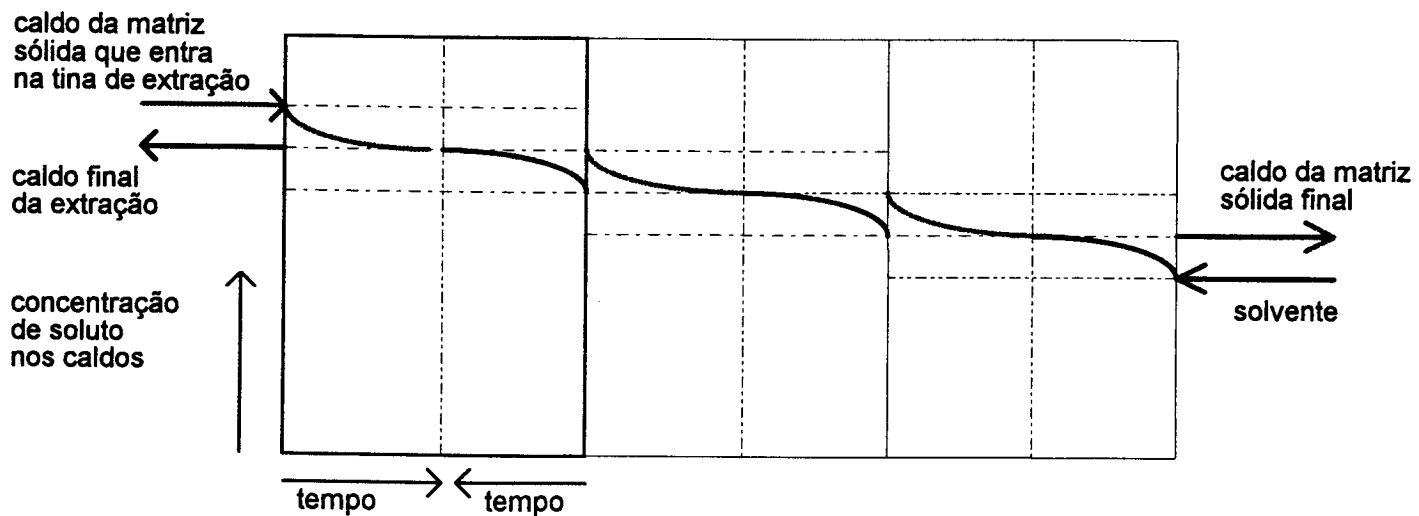
Nossa análise conduz a considerar a fração retirada no estágio como aquela realmente retirada no estágio, levando em conta apenas o tempo de residência e as condições do sistema nesse estágio.

O diagrama abaixo ilustra graficamente a expressão para um estágio.

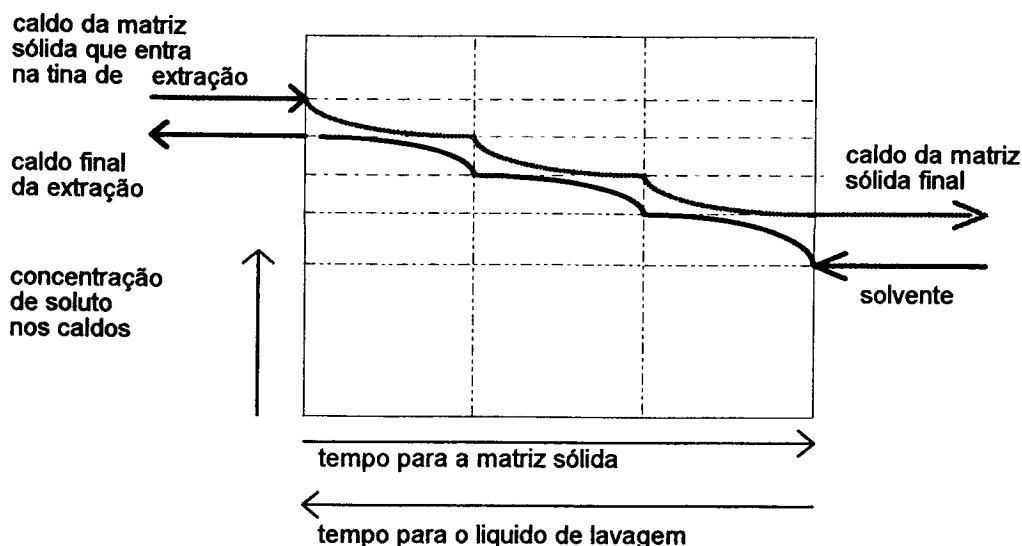


O extrato de saída pode ter ou não a mesma concentração que o caldo da matriz sólida, depende do fato de alcançar ou não o equilíbrio.

Supondo que seja atingido o equilíbrio em todos os estágios do extrator em contracorrente, o diagrama correspondente para o sistema multiestágio seria o seguinte:



Colocando os tempos de forma contínua, para cada corrente:



O diagrama resultante desta análise pode ser parecido ao diagrama de extração contínua em contracorrente, mas a explicação para sua construção levaria em conta os parâmetros de extração em batelada que existe em cada estágio. Já a proposta de Schwartzberg considera que as diferenças de concentrações sofrem a ação de todos os estágios anteriores, situação de difícil visualização e que consideramos poder levar a resultados equivocados (ver no apêndice 8.5 uma síntese da comparação dos dois modelos).

Então, decidimos desenvolver uma proposta alternativa e estudar os resultados obtidos comparando com a proposta original de Schwartzberg.

3.4 - Análise do Modelo Alternativo

Este modelo propõe a divisão da quantidade total de soluto disponível no sólido em porções específicas definidas para cada estágio. Estas porções sofrem a ação de extração nos estágios a que estão relacionadas, como se cada estágio fosse um extrator em batelada.

Portanto, para a determinação da fração retirada num estágio n leva-se em conta o tempo de contato sólido-líquido e condições iniciais no estágio, diferenciando do modelo de Schwartzberg que considera o tempo e condições iniciais no equipamento como um todo.

A expressão para a fração retirada num estágio n pode ser obtida a partir do balanço de massa.

Como foi visto:

$$X_n = X_{n-1} - \alpha (Y_n - Y_{n+1}) \quad (3.20)$$

$$R = \frac{1}{\alpha + 1} \frac{Mt}{M_\infty} \quad (3.21)$$

para um estágio n temos:

$$R_n = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{M\theta}{M\infty} \right)_n \quad (3.22)$$

então:

$$R_n = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{X_{n-1} - X_n}{X_{n-1} - X_\infty} \right) \quad (3.23)$$

Podemos expressar a quantidade de soluto retirada em um estágio ($Y_n - Y_{n+1}$), como sendo uma fração (R_n) da quantidade total possível de retirada ($mX_{n-1} - Y_{n+1}$) para este estágio, como mostra abaixo:

$$(Y_n - Y_{n+1}) = R_n (m X_{n-1} - Y_{n+1}) \quad (3.24)$$

rearranjando

$$Y_n = R_n (m X_{n-1} - Y_{n+1}) + Y_{n+1} \quad (3.25)$$

onde:

Y_n = concentração no extrato que entra no estágio n.

Y_{n+1} = concentração no extrato que deixa o estágio n.

mX_{n-1} = concentração no sólido que entra no estágio n.

R_n = fração retirada no estágio.

Se for considerado que em cada estágio o equilíbrio é atingido tem-se $Y_n = m X_n$, assim pode-se expressar o sistema de equações para um equipamento com N estágios como:

$$\begin{aligned} Y_1 &= R_1 (mX_o - Y_2) + Y_2 \\ Y_1 &= R_1 (mX_o - Y_2) + R_2 (Y_1 - Y_3) + Y_3 \\ Y_1 &= R_1 (mX_o - Y_2) + R_2 (Y_1 - Y_3) + R_3 (Y_2 - Y_4) + Y_4 \end{aligned} \quad (3.26)$$

$$Y_1 = R_1 (mX_o - Y_2) + R_2 (Y_1 - Y_3) + \dots + R_N (Y_{N-1} - Y_{N+1}) + Y_{N+1}$$

Rearranjando, sabendo que $A = 1-R$ e considerando $Y_{N+1} = 0$, temos:

$$\begin{aligned} R_1 mX_o &= Y_1 - A_1 Y_2 \\ R_1 mX_o &= A_2 Y_1 + (1 - A_1) Y_2 - A_2 Y_3 \\ R_1 mX_o &= A_2 Y_1 + (A_3 - A_1) Y_2 + (1 - A_2) Y_3 - A_3 Y_4 \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} R_1 mX_o &= A_2 Y_1 + (A_3 - A_1) Y_2 + (A_4 - A_2) Y_3 + \dots + (1 - A_2) Y_{N-1} - A_1 Y_N \\ R_1 mX_o &= A_2 Y_1 + (A_3 - A_1) Y_2 + (A_4 - A_2) Y_3 + \dots + (A_N - A_{N-2}) Y_{N-1} + (1 - A_{N-1}) Y_N \end{aligned}$$

Colocando na forma matricial temos:

$$\begin{bmatrix} M_{1,1} & M_{1,2} & 0 & 0 & 0 \\ M_{2,1} & M_{2,2} & M_{2,3} & 0 & 0 \\ M_{3,1} & M_{3,2} & M_{3,3} & M_{3,4} & 0 \\ M_{N-2,1} & M_{N-2,2} & M_{N-2,3} & M_{N-2,4} & 0 \\ M_{N-1,1} & M_{N-1,2} & M_{N-1,3} & M_{N-1,4} & M_{N-1,N} \\ M_{N,1} & M_{N,2} & M_{N,3} & M_{N,4} & M_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_{N-2} \\ Y_{N-1} \\ Y_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{1,N+1} \\ M_{2,N+1} \\ M_{3,N+1} \\ M_{N-2,N+1} \\ M_{N-1,N+1} \\ M_{N,N+1} \end{bmatrix}$$

Os elementos da matriz estão definidos na tabela abaixo:

$M_{n,1}$	$M_{n,k}$	$M_{n,N+1}$
1, para $n = 1$	$(1 - A_{n-1})$, para $k = n > 1$	R_1 mXo
A_2 , para $n > 1$	$- A_n$, para $k = n + 1$	
	$(A_{k+1} - A_{k-1})$, para $k < n$	
	0, para $k > n + 1$	

3.5 - Resolução dos Modelos.

As matrizes obtidas nos modelos acima apresentam uma forma inversa àquela conhecida como forma de Hessenberg, onde os elementos abaixo da diagonal principal são zero, exceto aqueles da primeira subdiagonal, como mostra a figura abaixo, para o caso de uma matriz 5X5 representando os elementos não zero da matriz por X:

$$\begin{bmatrix} X & X & X & X & X \\ X & X & X & X & X \\ 0 & X & X & X & X \\ 0 & 0 & X & X & X \\ 0 & 0 & 0 & X & X \end{bmatrix}$$

Uma alternativa de resolução para este tipo de matriz é o método da Eliminação de Gauss (PRESS et alli, 1986), portanto para resolução das nossas matrizes utilizamos este método, obtendo uma matriz diagonal, que no caso de um sistema com quatro estágios, por exemplo, é expressa da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} B_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ B_{2,1} & B_{2,2} & 0 & 0 \\ B_{3,1} & B_{3,2} & B_{3,3} & 0 \\ B_{4,1} & B_{4,2} & B_{4,3} & B_{4,4} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{1,5} \\ B_{2,5} \\ B_{3,5} \\ B_{4,5} \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

onde:

a) Para o Modelo de Schwartzberg:

$$\begin{aligned}
 B_{1,1} &= (A_0 + G_2 A_1 + G_2 G_1 A_2 + G_2 G_1 G_0 A_3) \\
 B_{2,1} &= (A_1 + G_1 A_2 + G_1 G_0 A_3) \\
 B_{3,1} &= (A_2 + G_0 A_3) \\
 B_{4,1} &= (A_3) \\
 B_{2,2} &= (A_0 - A_2) + G_1 (A_1 - A_3) + G_1 G_0 (A_2 - A_4) \\
 B_{3,2} &= (A_1 - A_3) + G_0 (A_2 - A_4) \\
 B_{4,2} &= (A_2 - A_4)
 \end{aligned} \tag{3.29}$$

$$\begin{aligned}
 B_{3,3} &= (A_0 - A_2) + G_0 (A_1 - A_3) \\
 B_{4,3} &= (A_1 - A_3)
 \end{aligned}$$

$$B_{4,4} = (A_0 - A_2)$$

$$\begin{aligned}
 B_{1,5} &= (R_1 + G_2 R_2 + G_2 G_1 R_3 + G_2 G_1 G_0 R_4) mX_0 \\
 B_{2,5} &= (R_2 + G_1 R_3 + G_1 G_0 R_4) mX_0 \\
 B_{3,5} &= (R_3 + G_0 R_4) mX_0 \\
 B_{4,5} &= (R_4) mX_0
 \end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned}
 G_0 &= \frac{A_1}{A_0 - A_2} \\
 G_1 &= \frac{A_1}{(A_0 - A_2) + G_0(A_1 - A_3)} \\
 G_2 &= \frac{A_1}{(A_0 - A_2) + G_1(A_1 - A_3) + G_1 G_0(A_2 - A_4)}
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

b) Para o Modelo Alternativo

$$\begin{aligned}
 B_{1,1} &= 1 + A_2 (G_2 + G_2 G_1 + G_2 G_1 G_0) \\
 B_{2,1} &= A_2 + A_2 (G_1 + G_1 G_0) \\
 B_{3,1} &= A_2 + A_2 (G_0) \\
 B_{4,1} &= A_2 \\
 B_{2,2} &= (1 - A_1) + (A_3 - A_1) (G_1 + G_1 G_0) \\
 B_{3,2} &= (A_3 - A_1) + (A_3 - A_1) (G_0) \\
 B_{4,2} &= (A_3 - A_1)
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

$$\begin{aligned}
 B_{3,3} &= (1 - A_2) + (A_4 - A_2) (G_0) \\
 B_{4,3} &= (A_4 - A_2)
 \end{aligned}$$

$$B_{4,4} = (1 - A_3)$$

$$\begin{aligned}
B_{1,5} &= (R_1 + R_1 (G_2 + G_2 G_1 + G_2 G_1 G_0)) m X_0 \\
B_{2,5} &= (R_1 + R_1 (G_1 + G_1 G_0)) m X_0 \\
B_{3,5} &= (R_1 + R_1 G_0) m X_0 \\
B_{4,5} &= (R_1) m X_0
\end{aligned}$$

onde:

$$\begin{aligned}
G_0 &= \frac{A_3}{(1 - A_3)} \\
G_1 &= \frac{A_2}{(1 - A_2) + (A_4 - A_2)G_0} \\
G_2 &= \frac{A_1}{(1 - A_1) + (A_3 - A_1)(G_1 + G_1 G_0)}
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Daí temos:

$$\begin{aligned}
Y_1 &= \frac{B_{1,5}}{B_{1,1}} \\
Y_2 &= \frac{B_{2,5} - B_{2,1} Y_1}{B_{2,2}} \\
Y_3 &= \frac{B_{3,5} - (B_{3,1} Y_1 + B_{3,2} Y_2)}{B_{3,3}} \\
Y_4 &= \frac{B_{4,5} - (B_{4,1} Y_1 + B_{4,2} Y_2 + B_{4,3} Y_3)}{B_{4,4}}
\end{aligned} \tag{3.33}$$

generalizando temos:

$$Y_n = \frac{B_{n, N+1} - \left(\sum_{i=1}^{n-1} B_{n,i} Y_i \right)}{B_{n,n}} \tag{3.34}$$

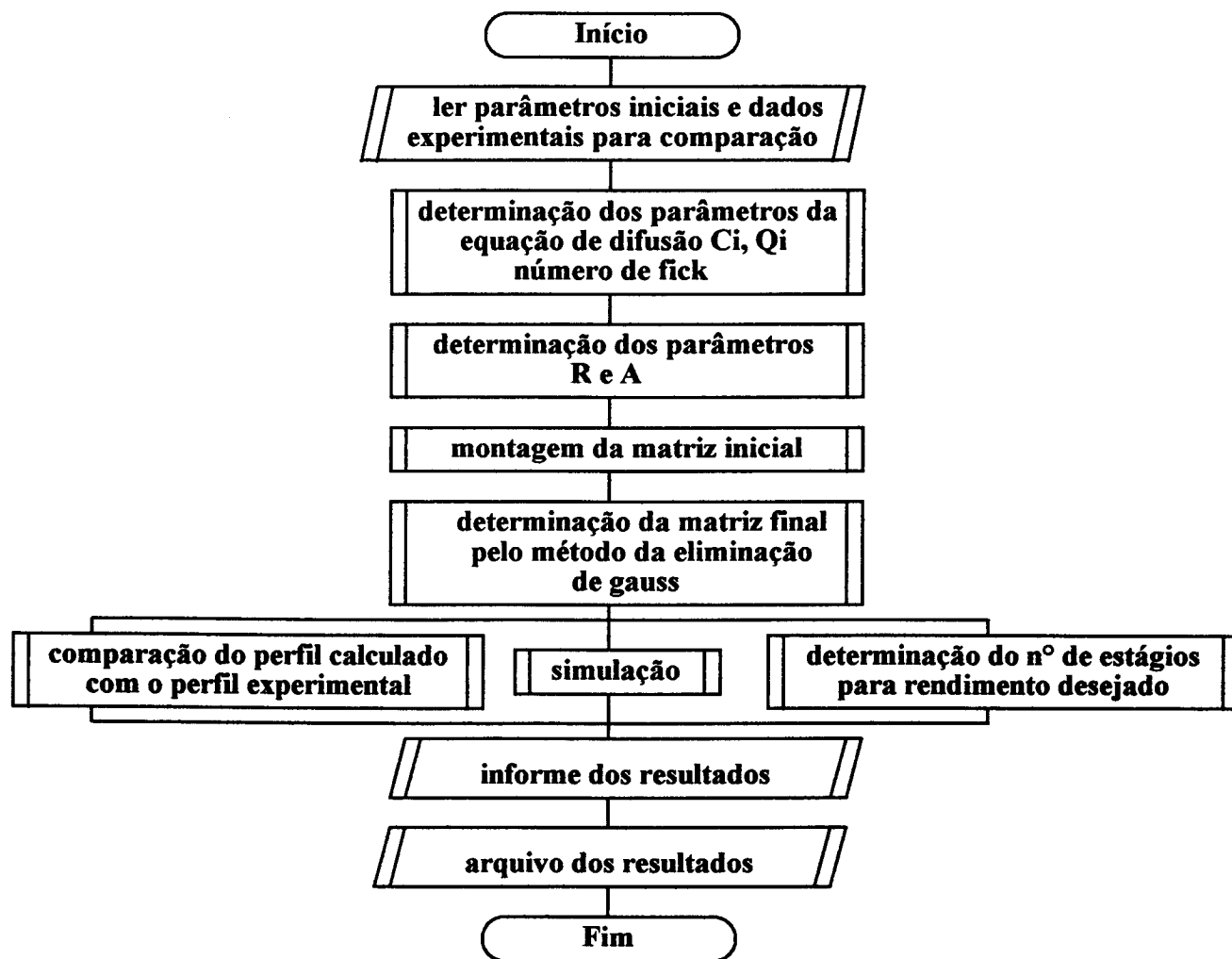
3.6 - Elaboração dos Programas.

Os programas elaborados se dirigiram para três objetivos principais.

- Testar a validade dos modelos matemáticos propostos analisando a influência da variação dos parâmetros: número de Fick (Dt/a^2 - difusividade, tempo de contato sólido-líquido e raio da partícula) e taxa de diluição, comparando os resultados calculados com resultados experimentais.
- Uma vez comprovada a validade e escolhido o melhor modelo e condições iniciais adequadas, simular o comportamento do extrator gerando curvas que possam ser usadas no dimensionamento destes equipamentos.

- Servir como ferramenta para a determinação do número de estágios e o perfil de concentração ao longo do equipamento para um determinado rendimento desejado.

Os programas elaborados têm uma etapa comum correspondendo a montagem da matriz final e determinação do perfil de concentração, seguindo a partir daí caminhos específicos de acordo com os objetivos acima citados. O fluxograma geral fica então com os seguintes passos:



Usamos linguagem BASIC na elaboração dos programas, as listagens destes programas são encontradas no Apêndice.

3.7 - Comparação entre os Perfis Calculados e o Experimental

Para aceitação do modelo, os perfis de concentração calculados devem se aproximar do perfil experimental. A verificação do grau de aproximação será feita procurando o estágio que apresenta a maior diferença entre as concentrações calculada e experimental, e determinando o erro dividindo esta diferença pela concentração experimental no estágio. O modelo será aceito se este erro for inferior a um erro máximo desejado, ou seja, é escolhido um intervalo de confiança onde só serão aceitos os modelos que apresentarem um perfil de concentração dentro deste intervalo (TAYLOR, 1990).

No nosso caso vamos considerar um erro percentual máximo de 10%. Caso o erro encontrado seja superior aos 10% escolhido, o modelo será rejeitado. O critério de escolha para os modelos aceitos, será o menor erro máximo e também a melhor aproximação da concentração experimental do extrato que deixa o equipamento YE(1).

4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a avaliação dos modelos foram utilizados dados experimentais obtidos por ORTEGA (1990) em testes utilizando um extrator tipo Kennedy de nove estágios em escala piloto.

Os dados do experimento, raio das partículas (a), tempo de contato líquido-sólido (θ), relação entre as vazões de sólido (S) e de líquido (L) e concentração de soluto no extrato (Y_E) e no sólido (X_E), são apresentados abaixo:

$$a = 6,0 \cdot 10^{-4} \text{ m}$$

$$\theta = 158,4 \text{ s}$$

estágio	EXPERIMENTAL		ABSORÇÃO LINEAR		ABSORÇÃO NÃO LINEAR	
	Y _E (Brix)	X _E (Brix)	S (estimado)	L (estimado)	S (real)	L (real)
0		0,182	12,77		12,77	
1	0,147	0,168	14,09	13,63	16,42	13,63
2	0,125	0,133	15,41	14,95	18,38	17,28
3	0,099	0,104	16,73	16,27	21,37	19,24
4	0,076	0,082	18,05	17,59	24,64	22,23
5	0,059	0,059	19,36	18,91	24,64	25,50
6	0,042	0,044	20,68	20,22	24,64	25,50
7	0,030	0,031	22,00	21,54	24,64	25,50
8	0,018	0,019	23,32	22,86	24,64	25,50
9	0,008	0,010	24,64	14,18	24,64	25,50
10	0,000			25,50		25,50

TABELA 4.1 - Dados Experimentais

A difusividade (D) foi determinada para um processo em batelada, apresentando duas fases distintas.

A primeira fase onde ocorre uma extração rápida por lixiviação, nos primeiros quatro minutos e uma segunda fase mais lenta controlada pela difusão após o quarto minuto, apresentando dois valores para a difusividade:

$$D_1 = 1,7 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s} \text{ para } \theta < 240\text{s}$$

$$D_2 = 6,0 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s} \text{ para } \theta > 240\text{s}$$

4.1 - Influência dos Parâmetros de Entrada nos Modelos

4.1.1 - Relação líquido-sólido (α)

Para utilizar os modelos devemos conhecer o α para cada estágio, ou seja, a vazão de sólido e de líquido que entram nestes estágios.

ORTEGA (1990) verificou que a diferença entre as vazões de sólido que entram (S_0) e de líquido que saem (L_1) eram iguais a diferença entre as vazões de sólido que saem (S_9) e de líquido que entram (L_{10}) no equipamento, e inicialmente estimou que esta diferença se mantivesse ao longo do equipamento, portanto absorção linear, obtendo assim as vazões intermediárias e a relação líquido-sólido que neste caso chamaremos de α estimado.

Na prática, Ortega observou que a retenção de líquido pelo sólido não se dá homogeneamente no corpo do equipamento como foi estimada, a absorção não é linear, neste caso a relação líquido-sólido será chamada de α real.

O volume do sólido aumenta substancialmente nos primeiros estágios estabilizando-se nos estágios finais. Na tabela 4.2 são mostrados os valores para α estimado (absorção linear) e α real (absorção não linear), determinados a partir da seguinte expressão:

$$\alpha = L_{n+1} / S_{n-1}$$

estágio	α	
	real	estimado
1	1,353	1,171
2	1,172	1,155
3	1,209	1,141
4	1,193	1,130
5	1,035	1,121
6	1,035	1,113
7	1,035	1,108
8	1,035	1,099
9	1,035	1,093

TABELA 4.2 - Valores de α do experimento

Analisando os perfis para os dois casos obtidos verificou-se uma melhor aproximação ao perfil experimental para α estimado quando comparado com α real. Foram testados α constantes ao longo do equipamento e para isto foram usados os valores de α do primeiro estágio para os casos estimado e real (1,171 e 1,353 respectivamente) e também $\alpha = 1,067$ que corresponde ao valor utilizado na determinação da eficiência do equipamento ($\alpha = L_1/S_0$). Observamos uma relação inversamente proporcional entre a concentração no extrato e os valores de α .

No caso do modelo de Schwartzberg o melhor ajuste se deu para α constante igual a 1,171, porém com valores de concentrações inferiores às experimentais nos estágios iniciais. Para obter concentrações no extrato na saída do equipamento (estágios iniciais) próximas a concentração experimental foi testado valores de α constantes menores que 1,171, o melhor ajuste foi para $\alpha = 1,125$, no entanto com valores maiores que os experimentais nos estágios finais.

Como a variação da concentração no extrato é inversamente proporcional à variação do valor de α , para se obter um perfil melhor ajustado ao perfil experimental seria necessária

uma variação de α ao longo do equipamento ascendente, ou seja, o sólido teria que estar absorvendo mais líquido nos estágios finais do que nos iniciais, o que na prática não ocorreu.

O modelo alternativo apresentou valores de concentração no extrato bem abaixo da concentração experimental para os α testados. Apresentou também um comportamento semelhante ao modelo de Schwartzberg com relação a variação da concentração e dos valores de α , o que nos levou a encontrar um ajuste muito bom para $\alpha = 0,885$.

Para determinação dos perfis foi considerado o número de Fick igual a 0,075 encontrado substituindo os dados experimentais: $D = 1,7 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, $\theta = 158,4 \text{ s}$ e $a = 6,0 \times 10^{-4} \text{ m}$, na expressão:

$$\text{Fick} = \frac{D t}{a^2}$$

onde $t = n \theta$ para o modelo de Schwartzberg e $t = \theta$ para o modelo alternativo.

Abaixo são mostrados os perfis de concentração no extrato obtidos experimentalmente e para os diferentes valores de α usando os modelos matemáticos:

a) Modelo de Schwartzberg

estagio	concentração experimental	concentrações obtidas para:				
		alfa est.	alfa real	alfa=1,171	alfa=1,125	alfa=1,06
1	0,147	0,146	0,145	0,143	0,147	0,152
2	0,125	0,123	0,126	0,117	0,123	0,130
3	0,099	0,103	0,106	0,096	0,103	0,111
4	0,076	0,086	0,091	0,078	0,084	0,093
5	0,059	0,069	0,076	0,061	0,067	0,076
6	0,042	0,054	0,061	0,046	0,052	0,059
7	0,030	0,039	0,045	0,036	0,037	0,043
8	0,018	0,026	0,030	0,021	0,024	0,028
9	0,008	0,012	0,015	0,010	0,011	0,014

TABELA 4.3 - Perfil de concentração para diferentes valores de α

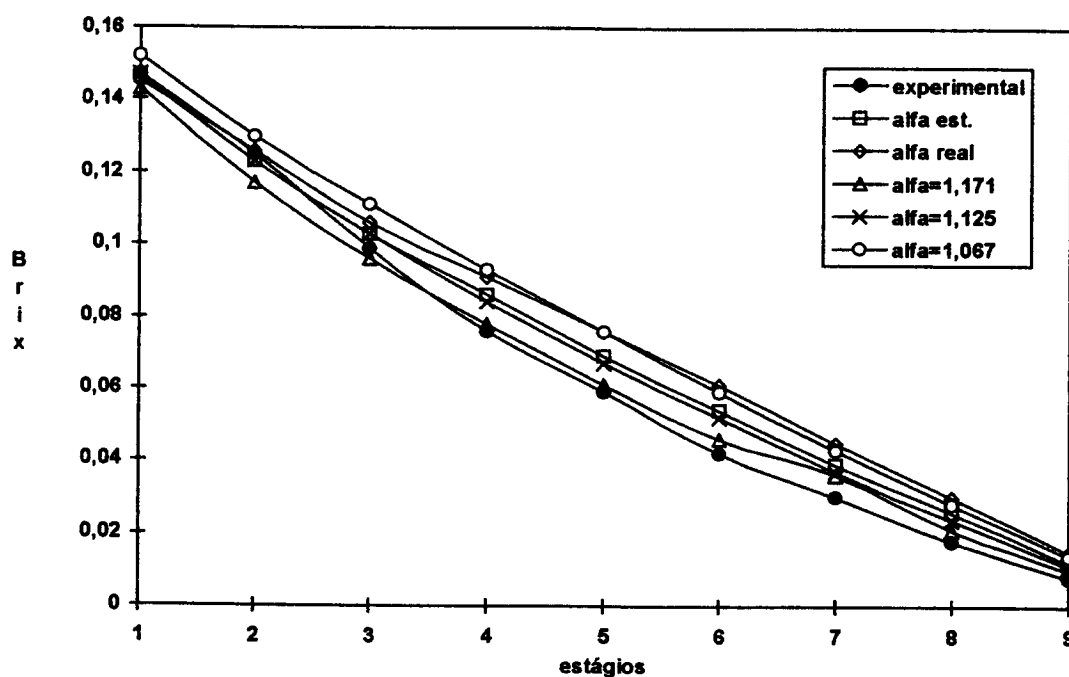


GRÁFICO 4.1 - Concentração na saída dos estágios para diferentes α - Modelo de Schwartzberg

b) Modelo alternativo

estágios	concentração	concentrações obtidas para:				
	experimental	alfa est.	alfa real	alfa=1,171	alfa=1,067	alfa=0,885
1	0,147	0,118	0,110	0,116	0,127	0,149
2	0,125	0,076	0,071	0,073	0,088	0,121
3	0,099	0,050	0,046	0,046	0,060	0,097
4	0,076	0,032	0,030	0,029	0,041	0,076
5	0,059	0,021	0,021	0,018	0,027	0,058
6	0,042	0,013	0,014	0,010	0,017	0,043
7	0,030	0,008	0,008	0,006	0,011	0,029
8	0,018	0,004	0,005	0,003	0,006	0,018
9	0,008	0,002	0,002	0,001	0,002	0,008

TABELA 4.4 - Perfil de concentração para diferentes valores de α

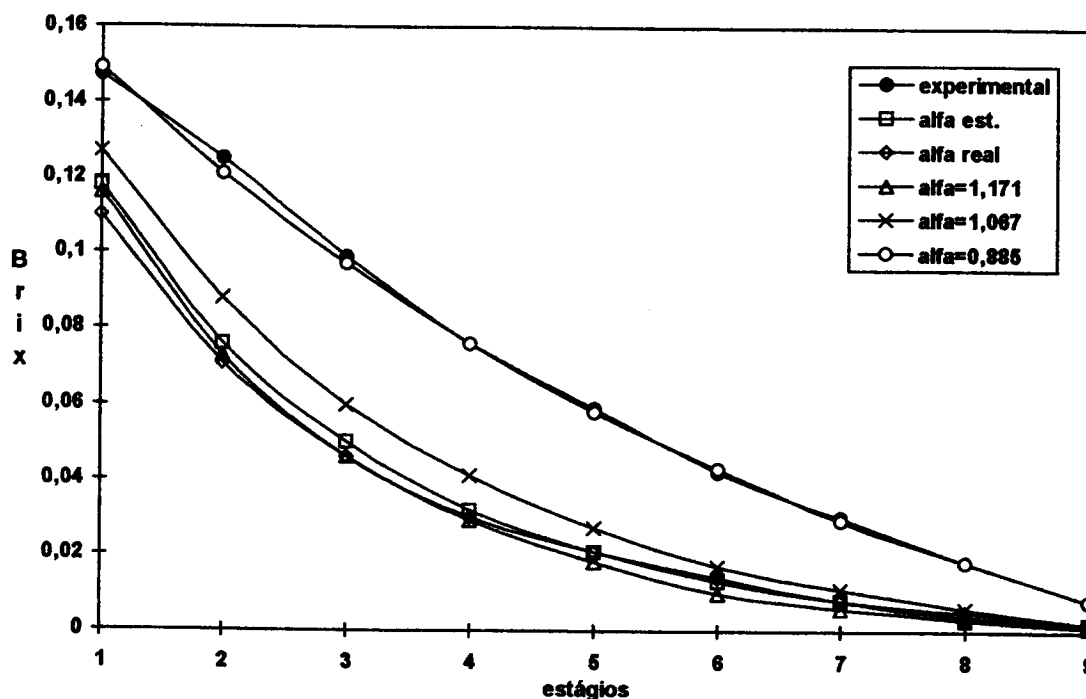


GRÁFICO 4.2 - Concentração na saída dos estágios para diferentes α - Modelo alternativo

4.1.2 - Número de Fick

Analisaremos o comportamento do perfil de concentração para diferentes números de Fick., considerando os valores para α real.

a) Modelo de Schwartzberg

estágios	concentração experimental	concentrações obtidas para:					
		Fick=.02	Fick=.075	Fick=.09	Fick=.13	Fick=.30	Fick=.90
1	0,147	0,123	0,145	0,147	0,149	0,151	0,151
2	0,125	0,104	0,125	0,126	0,127	0,128	0,128
3	0,099	0,088	0,106	0,107	0,108	0,108	0,108
4	0,076	0,076	0,091	0,091	0,092	0,092	0,092
5	0,059	0,065	0,076	0,077	0,077	0,077	0,077
6	0,042	0,051	0,061	0,061	0,061	0,061	0,061
7	0,030	0,037	0,045	0,045	0,046	0,046	0,046
8	0,018	0,025	0,030	0,030	0,030	0,030	0,030
9	0,008	0,012	0,015	0,015	0,015	0,015	0,015

TABELA 4.5 - Perfil de concentração para diferentes valores de Fick

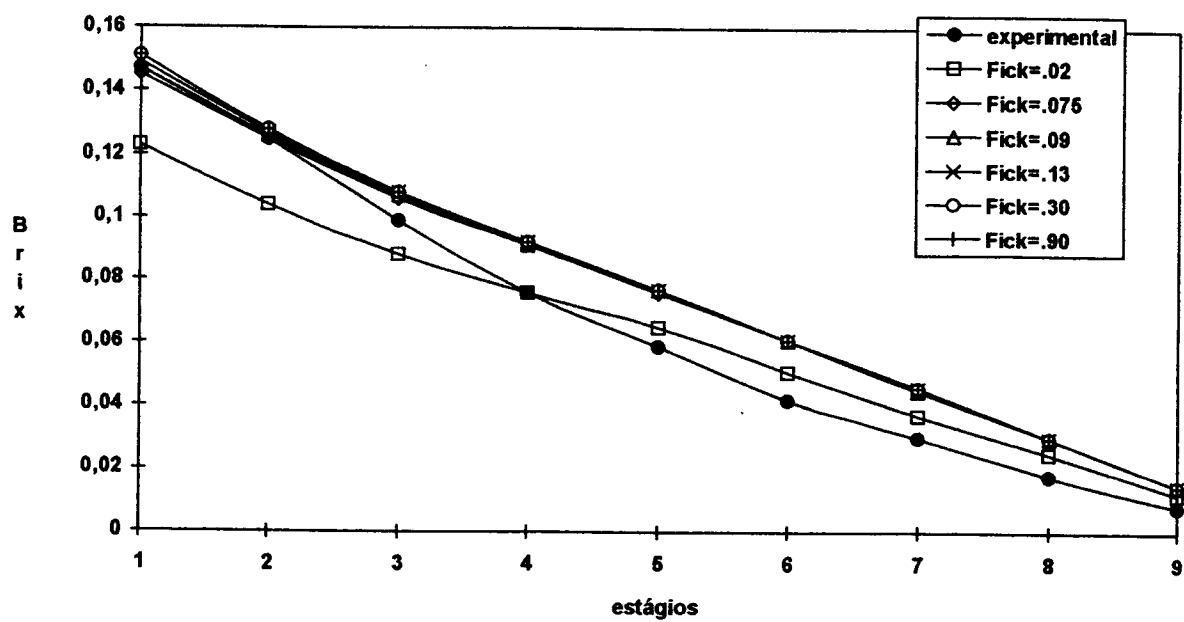


GRÁFICO 4.3 - Concentração na saída x estágios para diferentes número de Fick - Modelo de Schwartzberg

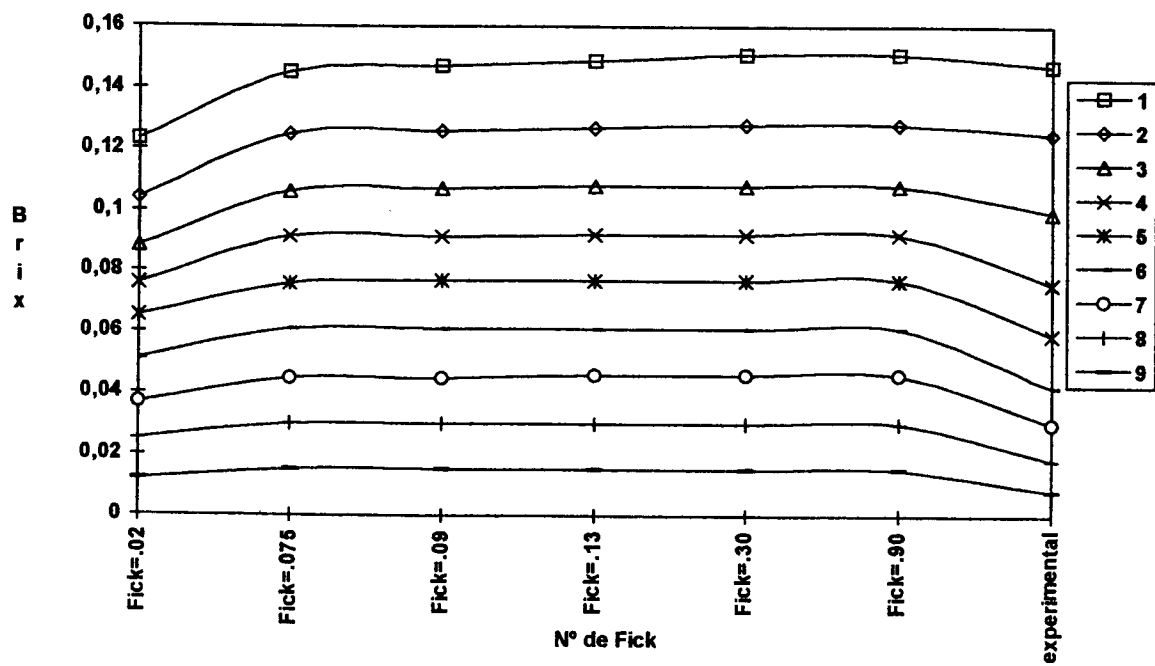


GRÁFICO 4.4 - Concentração na saída x Fick para cada estágio - Modelo de Schwartzberg

b) Modelo alternativo

estágios	concentração	concentrações obtidas para:					
	experimental	Fick=.20	Fick=.30	Fick=.35	Fick=.40	Fick=.90	Fick=2.70
1	0,147	0,141	0,146	0,147	0,147	0,148	0,148
2	0,125	0,113	0,120	0,121	0,122	0,122	0,122
3	0,099	0,090	0,098	0,099	0,100	0,101	0,101
4	0,076	0,071	0,080	0,081	0,082	0,083	0,083
5	0,059	0,057	0,065	0,066	0,067	0,068	0,068
6	0,042	0,044	0,051	0,052	0,053	0,053	0,053
7	0,030	0,031	0,037	0,038	0,039	0,039	0,039
8	0,018	0,020	0,024	0,025	0,025	0,026	0,026
9	0,008	0,010	0,012	0,012	0,012	0,013	0,013

TABELA 4.6 - Perfil de concentração para diferentes valores de Fick

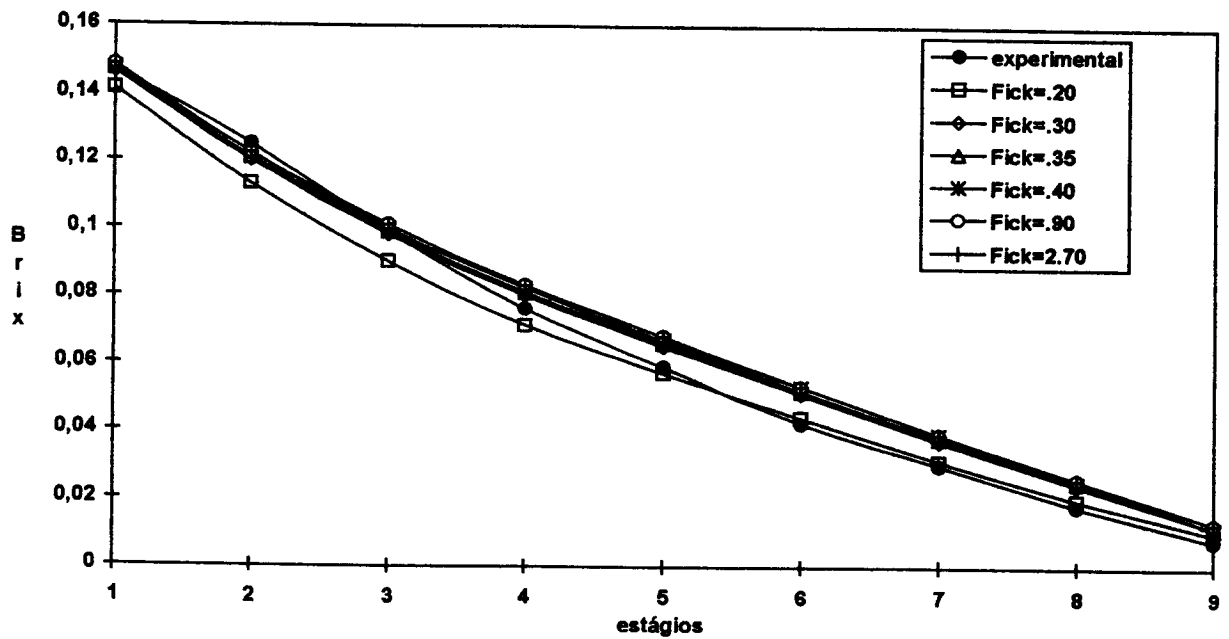


GRÁFICO 4.5 - Concentração na saída x estágios para diferentes número de Fick - Modelo alternativo

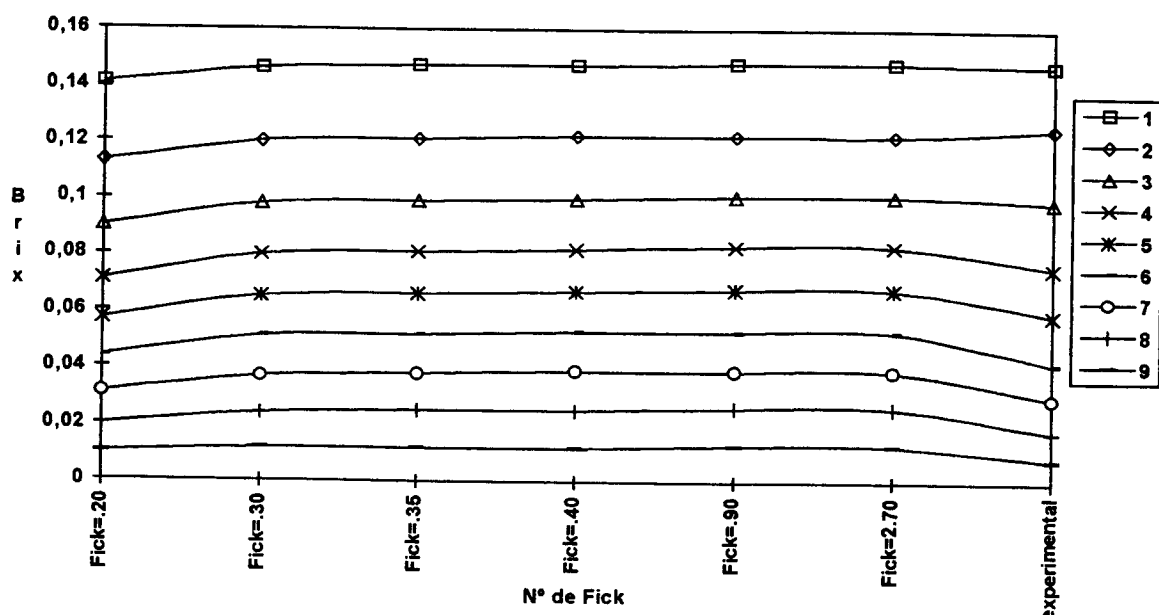


GRÁFICO 4.6 - Concentração na saída x Fick para cada estágio - Modelo II

Observamos que para o modelo I o melhor ajuste foi para valores de Fick entre 0,075 e 0,09, o que se aproxima ao Fick experimental que é de 0,075.

Para o modelo II o ajuste é melhor para Fick próximo a 0,35.

Como o tempo de contato e o raio são parâmetros fixos, previamente determinados, podemos considerar que a diferença entre os valores de Fick do modelo II com o experimental seja devida a uma maior difusividade no equipamento quando comparada com a difusividade obtida no experimento em batelada por ORTEGA (1990), o que nos leva a encontrar uma difusividade de $7,9 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, em vez de $1,7 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, o valor levantado na pesquisa experimental de extração em batelada em copo de vidro.

A variação do número Fick tem uma influência maior na concentração dos estágios iniciais. A concentração aumenta com o aumento do numero de Fick até atingir um patamar de estabilização, pouco acima do perfil experimental.

4.1.3 - Número de Biot

Para determinação de C_i e q_i , SCHWARTZBERG (1983) propõe expressões para o caso de Biot finito e para Biot infinito (tabela 2.1).

Verificamos que para $\text{Biot} < 3$ as raízes positivas q_i não convergem. Para $\text{Biot} > 3$ os valores de q_i e C_i convergem para os mesmos valores daqueles obtidos quando Biot é infinito.

Se no processo iterativo para determinação de q_i adequássemos o incremento de q_i poderíamos fazer com que os valores de q_i convergissem mesmo para $\text{Biot} < 3$.

Portanto vamos desconsiderar a influência de Biot e utilizarmos as expressões para Biot infinito.

4.1.4 - Análise da Variação de α e do Número de Fick

Como foi visto, a concentração é diretamente proporcional ao número de Fick e inversamente ao α . Variamos estes dois parâmetros verificando os melhores ajustes segundo o critério apresentado no item 3.5.

Foram identificados os perfis que apresentaram o menor erro máximo, considerando a concentração na saída do equipamento (Y_1) independente da concentração experimental (Y_{E1}) e também os perfis que apresentaram o menor erro máximo considerando Y_1 igual Y_{E1} .

Os melhores ajustes são mostrados abaixo:

a) Modelo de Schwartzberg

1) $\alpha = 1,171$

melhor ajuste para Y_1 qualquer:

ESTAGIOS	ALFA	Y MODELO	Y EXPERIMENTAL
1	1,171	0,148	0,147
2	1,171	0,120	0,125
3	1,171	0,096	0,099
4	1,171	0,076	0,076
5	1,171	0,058	0,059
6	1,171	0,043	0,042
7	1,171	0,029	0,030
8	1,171	0,018	0,018
9	1,171	0,008	0,008

O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE 3,39%, ENCONTRADO NO ESTAGIO 2
 $Fick = 0,20 \Rightarrow D = 4,544 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$

melhor ajuste para $Y_1 = Y_{E1}$

ESTAGIOS	ALFA	Y MODELO	Y EXPERIMENTAL
1	1,171	0,147	0,147
2	1,171	0,120	0,125
3	1,171	0,096	0,099
4	1,171	0,076	0,076
5	1,171	0,058	0,059
6	1,171	0,043	0,042
7	1,171	0,030	0,030
8	1,171	0,018	0,018
9	1,171	0,009	0,008

O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE 3,41%, ENCONTRADO NO ESTAGIO 2

$$\text{Fick}=0,175 \Rightarrow D = 3,976 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$$

b) Modelo alternativo

1) α estimado

melhor ajuste para Y_1 qualquer

ESTAGIOS	ALFA	Y MODELO	Y EXPERIMENTAL
1	1,171	0,149	0,147
2	1,155	0,122	0,125
3	1,141	0,098	0,099
4	1,130	0,078	0,076
5	1,121	0,061	0,059
6	1,113	0,046	0,042
7	1,108	0,032	0,030
8	1,099	0,020	0,018
9	1,093	0,010	0,008

O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE 2,42%, ENCONTRADO NO ESTAGIO 6
 $\text{Fick} = 0,27 \Rightarrow D = 6,134 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$

2) $\alpha = 1,067$

melhor ajuste para Y_1 qualquer

ESTAGIOS	ALFA	Y MODELO	Y EXPERIMENTAL
1	1,067	0,150	0,147
2	1,067	0,121	0,125
3	1,067	0,097	0,099
4	1,067	0,077	0,076
5	1,067	0,059	0,059
6	1,067	0,043	0,042
7	1,067	0,030	0,030
8	1,067	0,018	0,018
9	1,067	0,009	0,008

O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE 2,38%, ENCONTRADO NO ESTAGIO 2
 $\text{Fick} = 0,16 \Rightarrow D = 3,635 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$

		Porcentagem do erro para o modelo de Schwartzberg [%]							
Fick	D [10 ⁻¹⁰ m ² /s]	α real		α estimado		$\alpha = 1,067$		$\alpha = 1,171$	
		Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁	Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁	Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁	Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁
0,035	0,795	10,02 estágio 6							
0,090	2,045		12,91 estágio 6						
0,380	8,630			6,75 estágio 6					
0,080	1,817				7,98 estágio 6				
0,029	0,658					7,36 estágio 6			
0,050	1,136						10,55 estágio 6		
0,200	4,544							3,39 estágio 2	
0,175	3,976								3,41 estágio 2

TABELA 4.7 - Resumo dos resultados par o modelo de Schwartzberg

		Porcentagem do erro para o modelo alternativo [%]							
Fick	D [10 ⁻¹⁰ m ² /s]	α real		α estimado		$\alpha = 1,067$		$\alpha = 1,171$	
		Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁	Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁	Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁	Y ₁ ≠ YE ₁	Y ₁ = YE ₁
0,260	5,907	4,69 estágio 6							
0,324	7,361		6,40 estágio 6						
0,270	6,134			2,42 estágio 6					
0,227	5,157				4,10 estágio 2				
0,160	3,635					2,38 estágio 2			
0,145	3,294						4,67 estágio 2		
0,950	21,584							3,45 estágio 2	
0,325	7,384								4,55 estágio 2

TABELA 4.8 - Resumo dos resultados para o modelo alternativo

4.1.5 - Discussão

A partir dos resultados apresentados podemos concluir que aparentemente os dois modelos podem ser utilizados no dimensionamento de extratores multiestágios em contracorrente, como o do equipamento experimental.

Cabe agora definir qual das situações apresentadas acima melhor se enquadra no nosso objetivo, ou seja, apresente um perfil de concentração de soluto no extrato ajustado ao perfil experimental, porém, também permita obter este perfil a partir de dados de entrada de fácil determinação.

No dimensionamento de um extrator o ponto inicial é o rendimento desejado, ou seja, a eficiência de extração do equipamento:

$$\eta = \alpha Y_1 / X_0$$

onde

$$\alpha = L_1 / S_0$$

O volume inicial do sólido S_0 é conhecido, o volume final do líquido L_1 pode ser encontrado conhecendo a taxa de retenção de líquido pelo sólido e o volume inicial do líquido ou é estabelecido como uma condição a ser atingida, no nosso caso $\alpha = (L_1 / S_0) = 1,067$.

Para o Modelo alternativo o melhor ajuste se dá para $\alpha = 1,171$ constante e Fick = 0,2 com um erro máximo de 3,39%, enquanto para o Modelo de Schwartzberg o melhor ajuste foi para $\alpha = 1,067$ e Fick = 0,16 com erro máximo de 2,38%.

Nestes dois casos vemos que o número de Fick e portanto a difusividade é maior que o valor encontrado no experimento em batelada (Fick = 0,075). Quanto ao α o Modelo alternativo apresenta a vantagem de corresponder ao α utilizado na determinação da eficiência, além de ser de fácil determinação.

Uma observação bastante interessante é quanto ao fator de diluição, ou seja, a relação líquido-sólido (α). Não foi encontrado em nenhum dos artigos estudados qualquer referência a respeito da variação de α ao longo do equipamento.

Schwartzberg em seus trabalhos não considera a absorção do líquido pelo sólido, a vazão de líquido e de sólido que entram no extrator é a mesma que sai, o que não ocorre na prática.

Tanto para sistemas multiestágios como para os contínuos, propriamente ditos, o valor de α , na maioria dos autores, é determinado usando o volume de líquido e de sólido que entram no equipamento. Para o nosso caso, sistema multiestágio, esta consideração leva a um erro muito grande.

Abaixo é apresentado o melhor ajuste conseguido para esta situação ($\alpha = 2,0$ constante):

ESTÁGIOS	Y (modelo I)	Y (modelo II)	YE (experimento)
1	0,087	0,091	0,147
2	0,058	0,045	0,125
3	0,042	0,023	0,099
4	0,030	0,011	0,076
5	0,021	0,006	0,059
6	0,015	0,003	0,042
7	0,010	0,001	0,030
8	0,006	0,001	0,018
9	0,002	-	0,008

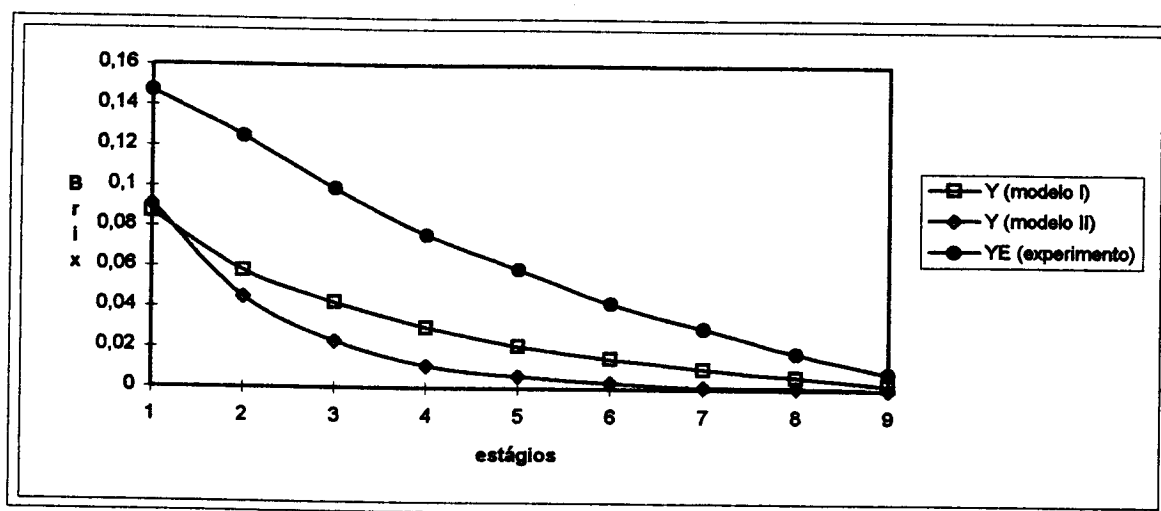


GRÁFICO 4.7 - Comparação entre os perfis de concentração dos modelos e experimental

Acreditamos que a situação mais interessante seja utilizar o Modelo alternativo com o $\alpha = 1.067$ ($\alpha = L_1 / S_0$), ressaltando que num experimento onde a agitação do meio, devido ao mecanismo de transporte do sólido no interior do equipamento, favorece a transferência de massa, seria de se esperar uma difusividade maior que aquela encontrada no experimento em batelada.

4.2 - Simulação

A partir dos resultados acima foi elaborado um programa que permite a determinação da eficiência para diferentes números de Fick e relações líquido-sólido (α).

Para obtenção dos dados estamos considerando $\underline{D}$ e $\underline{a}$ constantes, portanto a variação de Fick é dada pela somatória dos tempos de cada estágio.

Será utilizado para a simulação o Modelo alternativo considerando que os valores de α sejam constantes ao longo do equipamento e correspondam a L_1 / S_0 .

Abaixo são mostrados os resultados mais significativos:

ALFA =		0,900	0,985	1,070	1,155	1,240	1,325
FICK	ESTÁGIOS	EFICIENCIAS P/ CADA ALFA					
0,075	1	0,412	0,428	0,442	0,455	0,466	0,477
0,150	2	0,567	0,587	0,605	0,620	0,633	0,644
0,225	3	0,651	0,675	0,693	0,708	0,720	0,729
0,300	4	0,706	0,731	0,749	0,763	0,773	0,780
0,375	5	0,744	0,770	0,788	0,801	0,808	0,812
0,450	6	0,771	0,799	0,817	0,828	0,833	0,835
0,525	7	0,793	0,821	0,839	0,848	0,851	0,850
0,600	8	0,809	0,839	0,856	0,864	0,865	0,861
0,675	9	0,823	0,854	0,871	0,876	0,875	0,869
0,750	10	0,833	0,866	0,882	0,886	0,883	0,875

ALFA =		0,900	0,985	1,070	1,155	1,240	1,325
FICK	ESTÁGIOS	EFICIENCIAS P/ CADA ALFA					
0,150	1	0,453	0,473	0,491	0,508	0,523	0,537
0,300	2	0,612	0,640	0,663	0,684	0,703	0,719
0,450	3	0,694	0,725	0,752	0,774	0,793	0,809
0,600	4	0,743	0,777	0,806	0,828	0,847	0,861
0,750	5	0,776	0,813	0,842	0,864	0,881	0,894
0,900	6	0,800	0,838	0,867	0,889	0,905	0,916
1,050	7	0,817	0,857	0,887	0,908	0,922	0,931
1,200	8	0,830	0,872	0,902	0,922	0,934	0,942
1,350	9	0,841	0,884	0,914	0,933	0,944	0,949
1,500	10	0,850	0,894	0,923	0,941	0,951	0,955

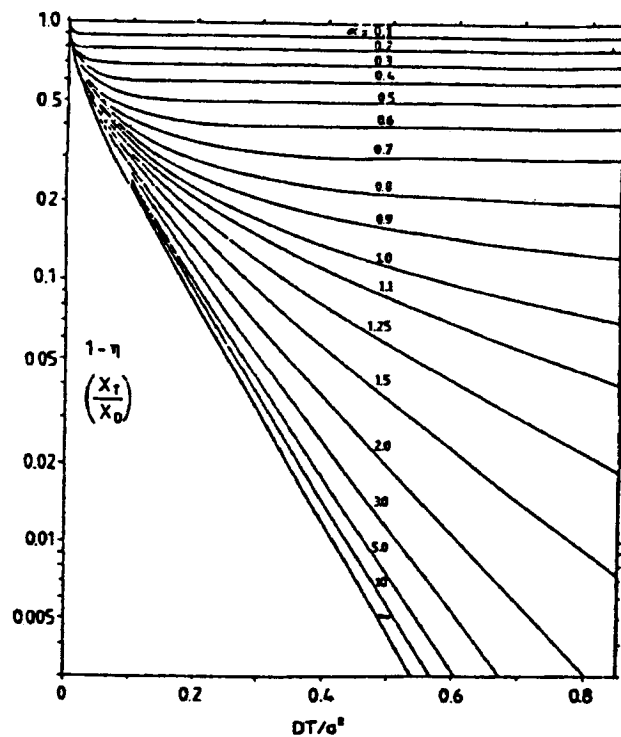
ALFA =		0,900	0,985	1,070	1,155	1,240	1,325
FICK	ESTÁGIOS	EFICIENCIAS P/ CADA ALFA					
0,300	1	0,471	0,493	0,514	0,532	0,549	0,565
0,600	2	0,629	0,659	0,686	0,710	0,731	0,750
0,900	3	0,708	0,742	0,772	0,798	0,820	0,840
1,200	4	0,754	0,792	0,824	0,850	0,872	0,890
1,500	5	0,785	0,825	0,858	0,884	0,906	0,922
1,800	6	0,807	0,849	0,883	0,908	0,928	0,943
2,100	7	0,824	0,867	0,901	0,926	0,945	0,958
2,400	8	0,836	0,881	0,915	0,939	0,957	0,968
2,700	9	0,846	0,892	0,926	0,950	0,965	0,976
3,000	10	0,854	0,901	0,935	0,958	0,972	0,981

TABELA 4.9 - Eficiências para diferentes condições iniciais

Nossa primeira intenção era obter um elenco de curvas que pudessem ser utilizadas no dimensionamento de extratores multiestágio. Porém, observamos que isto só poderia ser feito para cada condição inicial, pois como mostram as tabelas, para um mesmo número de Fick e mesmo α temos várias eficiências associadas. A diferença entre um caso e outro é o número de estágios envolvidos em cada um, embora o tempo total seja o mesmo.

O tempo de contato em cada estágio para cada situação é diferente, o número de mudanças de estágio, onde ocorre uma drenagem do líquido em excesso no sólido, influencia de modo positivo a eficiência final.

Não encontramos similaridade dos resultados desta simulação que permitissem a sobreposição dos pontos calculados no gráfico apresentado por SCHWARTZBERG (1980) usado no dimensionamento de sistemas contínuos. O gráfico é mostrado abaixo:



Podemos entender o equipamento multiestágio como uma sequência de processos em batelada onde as condições iniciais variam de estágio para estágio, ou seja, a concentração no sólido e no líquido que entram em cada estágio é diferente e depende do número total de estágios. Com a diminuição do tempo de contato em cada estágio e o mesmo tempo total, temos um número maior de estágios trabalhando dentro da faixa de maior eficiência da curva de extração em batelada que no experimento de Ortega corresponde aos primeiros quatro minutos, além de provocar uma maior agitação.

Este fato é de grande importância no dimensionamento de extratores pois está diretamente ligado ao custo do equipamento e ao custo do processo de extração. Para dimensionar e otimizar equipamentos devemos considerar o tempo total do processo para obtermos o extrato na concentração desejada, assim como o número de estágios necessários.

4.3 - Determinação do Número de Estágios de um Extrator

Foi desenvolvido um programa de computador que a partir dos dados de entrada (tempo de contato líquido-sólido (θ), raio da partícula (a), concentração inicial de soluto no sólido (X_0), difusividade (D), relação líquido-sólido (α) e eficiência desejada (η)) nos fornece o número de estágios necessários e o perfil de concentração ao longo do equipamento.

Abaixo é mostrado o perfil de concentração e o número de estágios necessários para obtermos uma eficiência de no mínimo 90 % de extração.

Neste exemplo entramos com os seguintes dados:

$$\theta = 158 \text{ s} \quad a = 6,0 \times 10^{-4} \text{ m} \quad X_0 = 0,18 \text{ Brix} \quad D = 2,0 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s} \quad \alpha = 1,06$$

obtendo o seguinte resultado:

Y(1) = 0,154	
Y(2) = 0,134	
Y(3) = 0,117	N= 10 estágios
Y(4) = 0,100	
Y(5) = 0,084	
Y(6) = 0,068	
Y(7) = 0,053	$\eta = 0,9064 = 90,64 \%$
Y(8) = 0,039	
Y(9) = 0,025	
Y(10) = 0,012	

5 - CONCLUSÕES

Colocamos a seguir as principais conclusões do trabalho organizadas em três tópicos:

a) Estudo da variação da relação líquido-sólido (α) mantendo Fick constante:

O estudo da variação de α permitiu descobrir que o modelo de extração proposto por Schwartzberg consegue representar o funcionamento do difusor Kennedy de planta piloto relativamente bem para os valores de difusividade (D) estimados em pesquisa de bancada de laboratório para os diferentes α testados (Gráfico 4.1). Mostrou uma relação inversamente proporcional entre os valores da concentração e de α , além de levar-nos a prever um ajuste ideal, quando a variação de α ao longo do equipamento fosse ascendente, ou seja, absorção de líquido pelo sólido maior nos estágios finais.

Quanto ao modelo alternativo, para a mesma difusividade de laboratório, foram obtidas concentrações inferiores à experimental para os α testados no modelo anterior, porém, conseguimos um ajuste quase que perfeito para $\alpha = 0,885$ constante ao longo do equipamento (Gráfico 4.2). Este valor de α indica que temos em todos os estágios uma entrada de líquido maior que a de sólido, o que não foi verificado experimentalmente.

b) Estudo da variação do número de Fick usando os valores de α real (obtidos experimentalmente):

O estudo da variação de Fick mostrou, para os dois modelos, ser diretamente proporcional à variação da concentração e que tem uma influência maior nos estágios iniciais. Mostrou também, que o aumento do número de Fick causa um aumento da concentração até determinado limite, se estabilizando a partir daí (Gráficos 4.4 e 4.6).

Para o modelo proposto por Schwartzberg o melhor ajuste se deu para valores de Fick próximos ao valor experimental (difusividade de laboratório). Verificou-se que o modelo alternativo proposto somente funcionava adequadamente com valores de difusividade quatro vezes e meia maiores que o obtido na pesquisa de laboratório (Gráfico 4.3 e 4.5).

c) Estudo considerando variáveis os dois parâmetros, número de Fick e α :

Modelo de Schwartzberg:

O melhor ajuste se deu para α constante igual a 1,171 (relativo ao estágio 1 para o caso de α estimado, L_2 / S_0) com um valor de difusividade aproximadamente três vezes maior que a encontrada em laboratório (Tabela 4.7). Apesar de apresentar um erro baixo (3,39%), não podemos utilizar este caso para o dimensionamento de extratores pois não teríamos o valor de L_2 sem conhecermos o equipamento.

Para este fim seria melhor usarmos o caso de α constante igual a 1,067 (L_1 / S_0), porém o erro é maior (7,36%) e a difusividade cerca de uma vez e meia menor que a de laboratório (Tabela 4.7). Este resultado dificulta sua utilização como modelo, pois, com a

agitação do sistema, seria de se esperar um efeito de extração maior que o puramente difusional do experimento de bancada de laboratório realizado.

Quando se usa α global (L_{N+1} / S_0) o modelo não se ajusta (Gráfico 4.5).

Modelo alternativo:

O melhor ajuste se deu para α constante igual a 1,067, com erro de 2,35% e difusividade cerca de duas vezes maior que a determinada em laboratório.

Da mesma forma que para o Modelo alternativo, quando usamos α global o Modelo de Schwartzberg também não se ajusta (Gráfico 4.5).

Ponderação final:

Tanto o modelo proposto por Schwartzberg como o modelo alternativo mostrou um comportamento adequado quando da variação do número de Fick e α , indicando que estes modelos podem ser usados na análise de extratores similares ao estudado.

Com a finalidade de desenvolvimento de um método de análise para dimensionamento de extratores multiestágios, contracorrente, o modelo alternativo mostrou-se o mais adequado, devido a possibilidade do uso de α utilizado no cálculo da eficiência global do equipamento (L_1 / S_0), para determinação do número de estágios a partir de uma eficiência desejada. Observando que a difusividade deve ser cuidadosamente determinada, em experimento que leve em conta as interrupções do contato líquido-sólido, de modo a se aproximar ao tipo ou sistema do equipamento a ser projetado.

6 - RECOMENDAÇÕES

Nos sistemas de extração multiestágio, como o estudado, existem fatos que ainda precisam ser pesquisados:

- A trituração do material produz partículas muito finas, nosso estudo considerou um processo difusional de extração, porém cabe analisar um processo de lavagem convectivo, em pesquisas futuras, que permitiria levar em conta a agitação e interrupções do contato líquido-sólido (drenagem ao passar o material de um estágio ao outro).
- Existe a possibilidade de que a difusividade ou a convectividade ou ambas mudem ao longo do processo.
- Seria interessante incluir nos cálculos por computador a possibilidade de usar solvente que não fosse puro e sim contendo uma certa concentração de soluto.
- Em pesquisas futuras, seria interessante usar difusores de menor tamanho para facilitar a experimentação, com equipamentos de bancada de laboratório (1 Kg/h de sólido) com aquisição automática de dados.
- Nas pesquisas futuras valeria a pena testar o sistema de extratores contínuos rotatórios sem peças móveis internas, tipos RT ou o G, mais seguros, fáceis de usar e econômicos.

7 - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BAJPAI, A.C.; MUSTOE, L.R.; WALKER, D. Matemática Avançada para Engenharia; São Paulo: Editora Hemus, 1980.
- BARROS, I.Q. Introdução ao Cálculo Numérico; São Paulo: Editor Edgar Blücher, 1976.
- BINKLEY, C. R.; WILEY, R. C. Continuous diffusion-extraction method to produce apple juice. Journal of Food Science, 43 (3), p. 1019-1023, 1978.
- CLIFF, M.; DEVER, M. C.; GAYTON, R. Juice extraction process and apple cultivar influence on juice properties. Journal of Food Science, 56 (6), p. 1617-1627, 1991.
- BRÜNICHE-OLSEN, H. Diffusion of Beet and Cane; Sugar Technology Review, 1969.
- CRANK, J. The Mathematics of Diffusion; 2. ed. England: Claredon Press, 1975.
- CUSSLER, E.L. Diffusion, Mass Transfer in Fluid Systems; New York: Cambridge University Press, 1984.
- ENCH, F. Extraction of Fruit and Vegetable; Food Process Engineering; England: editado por Linko, P.; Malkki, Y.; Olkku, P.; Larinkari, J. Applied Science Publishers, 1980. v. 1
- GENIE, G.V. Progress in Sugar Beet Extration Plants; Switzerland: Editado por Cantarelli, C.; Peri, C. Proceeding of a European Symposium "Progress in Food Engineering". Foster-VERlag A.G, 1983.
- GUNASEKARAN, S.; FISHER, R.J.; CASIMIR, D. J. Predicting Soluble Solids Extraction from Fruits in a Reversing Single Screw Counter-Current Diffusion Extractor; Journal of Food Science, v. 54, n. 5, p. 1261-1265, 1989.
- HUGOT, E. Manual de Engenharia Açucareira; São Paulo: Editora Mestre Jou, 1977. v.1
- IVERSON, C.; SCHWARTZBERG, H.G. Developments in Beet and Cane Sugar Extraction; Food Tecnology,. p. 40-44, jan. 1984.
- LAMUSSE, J.P. Practical Aspects of Cane Diffusion; Sugar Tecnology Reviews, n. 7, p. 197-253, 1980.
- LA ROVERE, L.E.; TOLMASQUIN, M.T. Sistemas Integrados de Produção de Energia e Alimentos no Brasil; In: SEMINÁRIO INTERNACIONAL "ECOSSISTEMAS, ALIMENTOS E ENERGIA", v. 1. 1984, Brasília.. Anais. CNPq/FINEP. p. 15-74.

LOPES, C.H. Difusores no Brasil. Perspectivas Econômicas de suas Implantação; Álcool e Açúcar, v. 2, p. 43-45, jan. 1982.

Mc PHERSON, A. It Was Squeeze or G, Now It's CCE. Food Tecnology in Australia, v. 39, n. 2, p. 59-60, fev. 1987.

PRESS, H. W.; FLANNERY, B. P.; TENKOLSKY, S. A.; VETTERBING, W. T. Numerical Recipes - The Art of Scientific Computing; Cambridge, University Press, p. 29-30, 1986.

ORTEGA, E. Desenvolvimento de um Difusor para Mini-Usina de Álcool. Campinas, 1990. Tese (Doutor em Engenharia de Alimentos) - Faculdade de Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas.

SACHS, Y. A Interface entre as Questões Energéticas e Alimentar; In: SEMINÁRIO "ECOSSISTEMAS, ALIMENTOS E ENERGIA", , Brasília, v. 1, 1984. Anais CNPq/FINEP. p. 5-14.

SCHWARTZBERG, H.G.; DESAI, M.H. Nom-equilibrium Countercurrent Leaching; In: FIRST INTERNATIONAL CONGRESS ON ENGINEERING AND FOOD. 1976.

SCHWARTZBERG, H.G. Continuous Counter-Current Extraction in the Food Industry; Chem. Eng. Prog., 76 (4), p. 67-85. 1980

SCHWARTZBERG, H.G. Progress and Problems in Solid-Liquid Extraction; Revista Latino Americana de Transferência de Calor e Matéria, v. 7. 1983.

SO, C.G.; MACDONALD, D.G. Kinetcs of Oil Extraction from Canola (rapeseed). The Canadian Journal of Chemical Engineering, v. 64, p. 80-86, fev, 1986.

TAYLOR, J. K. Statistical Techniques for Data Analysis; USA: Lewis Publishers, INC. 1990.

ZANONI, B.; PAGLIARINE, E.; PERI, C. Modelling the Aqueous Extraction of Soluble Substances from Ground Roasted Coffe. Journal Science Food Agriculture, v. 58, p. 275-279, 1992.

8 - APÊNDICE

Foram desenvolvidos quatro programas de computador cujas listagens são mostradas abaixo:

8.1- PERFIL1.BAS, permite o estudo da variação de α e do número de Fick comparando o perfil de concentração calculado com o perfil experimental, tem como dado de entrada os valores de α real.

```
1 *****
2 '*                               Programa PERFIL1.BAS (ALFA + 1)
3 '*                               Cálculo do perfil de concentração ao longo do equipamento e
4 '*                               comparação com perfil experimental, considerando alfa real
5 '*                               *
6 '*                               elaboração: Brian Castelli Azevedo
7 '*                               orientação: Dr. Enrique Ortega
8 *****
9 '
10 WIDTH "lpt1:", 255: PRINT CHR$(15)
11 'ENTRADA DE DADOS
15 NN = 30
20 DIM ALFA(NN),L(NN),S(NN),QN(NN),TAD(NN),F(NN),FIC(NN),BI(NN),FIN(NN),CA(NN)
30 DIM AN(NN),RN(NN),A(NN,NN),B(NN,NN),C(NN,NN),EFIC(NN),D(NN),G(NN),CC(NN)
35 DIM Y(NN),YE(NN),MA(NN),MB(NN),VAR1(NN),VAR2(NN),DY(NN),SD(NN)
40 YE(1) = .147: YE(2) = .125: YE(3) = .099: YE(4) = .076: YE(5) = .059: YE(6) = .042: YE(7) = .03
45 YE(8) = .018: YE(9) = 8.000001E-03
50 XE(1) = .168: XE(2) = .133: XE(3) = .104: XE(4) = .082: XE(5) = .059: XE(6) = .044: XE(7) = .031
55 XE(8) = .019: XE(9) = .01
65 CLOSE
67 INPUT "QUER GRAVAR OS RESULTADOS EM DISQUETE ";RESP1$
69 IF RESP1$="S" OR RESP1$="s" GOTO 73
71 GOTO 77
73 INPUT "QUAL O NOME DO ARQUIVO ";NOMEARQ$
75 OPEN NOMEARQ$ FOR OUTPUT AS#1
77 INPUT "QUER IMPRIMIR S/N ";RESP2$
79 IF RESP2$="S" OR RESP2$="s" GOTO 83
81 GOTO 90
83 OPEN "LPT1:" FOR OUTPUT AS#2
90 INPUT "ERRO ACEITAVEL (DE 0 A 1)";ERRO
92 INPUT "DIGITE 1 SE DESEJAR R ACUMULATIVO (SCHWARTZBERG) OU 2 SE DESEJAR R
INDEPENDENTE (PROPOSTA)";RESP3$
95 PRINT:PRINT "AGUARDE, PROCESSANDO":PRINT:PRINT
100 MEX=1
110 N = 9: TETA = 158.4: RAIO = 6.000001E-04: NQ = 5: XO = .182
120 D1 = 1.7E-10: D2 = D1
130 L(1) = 13.63: L(2) = 17.28: L(3) = 19.243: L(4) = 22.231: L(5) = 25.5: L(6) = 25.5: L(7) = 25.5:
    L(8) = 25.5: L(9) = 25.5: L(10) = 25.5
140 S(0) = 12.77: S(1) = 16.42: S(2) = 18.383: S(3) = 21.371: S(4) = 24.64: S(5) = 24.64: S(6) = 24.64:
    S(7) = 24.64: S(8) = 24.64: S(9) = 24.64
142 'CALCULO DE ALFA'
```

```

145 INPUT "FICK=";FICK
150 FOR I = 1 TO N
160  ALFA(I)=L(I+1)/S(I-1)
161  ALFA=ALFA(I)
162  'CALCULO DE Q'
165  Q = 3
170  FOR J = 1 TO NQ
190    F = TAN(Q) - 3 * Q / (3 + ALFA(I) * (Q ^ 2))
200    FL = (1/COS(Q))^2 + (3*ALFA(I)*(Q^2) - 9)/((3+ALFA(I)*(Q^2))^2)
205 REM PRINT "FL=";FL;"F=";F
210    A = Q
220    Q = A - F / FL
230    B = ABS(Q - A)
240    C = B / Q
245 REM PRINT "A=";A;"Q=";Q;"B=";B;"C=";C
250    IF C <= .0001 GOTO 270
260    GOTO 190
270    QN(J) = Q
280    Q = Q + 3.15
290  NEXT J
295 'CALCULO DE B, F'
300  J = 1
310  TAD(I) = FICK
320  F(I) = 0
322 IF RESP3$="2" GOTO 325
323  GOTO 330
325  FIC(J) = (QN(J) ^ 2) * TAD(I)
326  GOTO 380
330  FIC(J) = (QN(J) ^ 2) * I * TAD(I)
380  BI(J)=6*ALFA(I)*(1+ALFA(I))/(9+9*ALFA(I)+(QN(J)*ALFA(I))^2)
390  FIN(J) = BI(J) * EXP(-FIC(J))
400  F(I) = F(I) + FIN(J)
405 IF J = NQ GOTO 420
407 GOTO 420
420  J = J + 1
430  IF J > NQ GOTO 450
440  GOTO 322
445 'CALCULO DE A, R'
450  AN(I) = (ALFA(I) + F(I)) / (ALFA(I) + 1)
460  RN(I) = 1 - AN(I)
465 EFIC(I) = ALFA(I) * RN(I)
480 NEXT I
500 'MONTAGEM DA MATRIZ'
505 IF RESP3$="1" GOTO 508
506 IF RESP3$="2" GOTO 1980
507 GOTO 502
508 PRINT:PRINT "CONSIDERANDO R ACUMULATIVO,(ALFA + 1) E BIOT
INFINITO":PRINT:PRINT
509 AN(0) = 1
510 J = 1
520 I = 1
530 IF J < I + 1 GOTO 590
540  IF J = I + 1 GOTO 570
550    A(I, J) = 0

```

```

560      GOTO 630
570      A(I, J) = -AN(1)
580      GOTO 630
590      IF J = 1 GOTO 620
600      A(I, J) = AN(I - J) - AN(I + 2 - J)
610      GOTO 630
620      A(I, J) = AN(I - 1)
630 I = I + 1
640 IF I > N GOTO 655
650 GOTO 530
655 J = J + 1
660 IF J > N GOTO 690
670 GOTO 520
680 'MATRIZ AUMENTADA'
690 FOR I = 1 TO N
700 A(I, J) = RN(I) * XO * MEX
710 NEXT I
720 'ELIMINACAO DE GAUSS'
730 K = 0
740 G(K) = -A(N - 1 - K, N - K) / A(N - K, N - K)
750 FOR J = 1 TO N + 1
760 C(N, J) = A(N, J)
770 B(N - K, J) = A(N - K, J) * G(K)
775 C(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J)
780 A(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J) + B(N - K, J)
790 NEXT J
800 K = K + 1
810 IF K = N - 1 GOTO 840
820 GOTO 740
830 'DETERMINACAO DO PERFIL DE CONCENTRACAO'
840 FOR I = 1 TO N
841 FOR J=1 TO N
843 NEXT J
844 NEXT I
845 FOR I=1 TO N
850 CC(I) = 0
860 J = 2
870 IF I > 1 GOTO 890
880 GOTO 940
890 CA(J) = A(I, J - 1) * Y(J - 1)
900 CC(I) = CC(I) + CA(J)
910 IF J = I GOTO 940
920 J = J + 1
930 GOTO 890
940 Y(I) = (A(I, N + 1) - CC(I)) / A(I, I)
950 NEXT I
960 'MOSTRAR PERFIL CALCULADO'
970 FOR I = 1 TO N
975 PRINT "ALFA("; I; ")="; USING "##.###"; ALFA(I);
980 PRINT " "; "Y("; I; ")="; USING "##.###"; Y(I);
981 PRINT " "; "YE("; I; ")="; USING "##.###"; YE(I)
982 NEXT I
1030 EFICIE = L(1) * Y(1) / (S(0) * XO)
1040 PRINT:PRINT "EFICIE="; EFICIE:PRINT

```

```

1050 GOTO 1300
1120 'MEDIA'
1130 ERMA = ERRO * YE(1)
1140 SDIF = 0
1150 FOR I = 1 TO N
1160   DIF(I) = ABS(YE(I)-Y(I))
1170   SDIF = SDIF + DIF(I)
1180   ME = ME + MA(I)
1185 GOTO 1200
1190 PRINT "DIF(";I;");",DIF(I)
1200 NEXT I
1210 MDIF = SDIF/N
1220 PRINT:PRINT "MDIF";MDIF
1230 IF MDIF < ERMA GOTO 1250
1240 PRINT:PRINT "ERRO MEDIO=";MDIF;"> ERRO MAXIMO=";ERMA;"MODELO NAO
ACEITO"
1245 GOTO 1830
1250 PRINT:PRINT "ERRO MEDIO=";MDIF;"< ERRO MAXIMO=";ERMA;"MODELO ACEITO"
1300 INSE = 0
1310 FOR I=1 TO N
1320   DIF(I) = ABS(YE(I)-Y(I))
1330 IF DIF(I) > INSE GOTO 1350
1340 GOTO 1370
1350 INSE = DIF(I)
1360 CONTA = I
1370 NEXT I
1380 ERMA = (INSE/YE(1)) * 100
1390 PRINT:PRINT "O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE ";USING "##.##";ERMA;
1400 PRINT "%, ENCONTRADO NO ESTAGIO";CONTA
1490 GOTO 1830
1500 INSE = 0
1510 FOR I=1 TO N
1520   DIF(I) = ABS(YE(I)-Y(I))
1530 IF DIF(I) > INSE GOTO 1550
1540 GOTO 1570
1550 INSE = DIF(I)
1560 CONTA = I
1570 NEXT I
1580 ERMA = (INSE/YE(1)) * 100
1585 PRINT #1, " "
1590 PRINT #1, "O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE ";USING "##.##";ERMA;
1600 PRINT #1, "%, ENCONTRADO NO ESTAGIO";CONTA
1605 PRINT #1, "FICK=";FICK
1610 GOTO 1890
1830 IF RESP1$="S" OR RESP1$="s" THEN
1840 IF RESP1$="N" OR RESP1$="n" OR RESP1$=" " GOTO 1890
1850 PRINT #1,"D=";D1;"TETA=";TETA;"RAIO=";RAIO;"M=";MEX
1855 PRINT " "
1860 PRINT #1, "ESTAGIOS," " ";ALFA " ";Y MODELO " ";Y EXPERIMENTAL"
1870 FOR I=1 TO N
1880 PRINT #1, " ";I; " ";USING "##.###";ALFA(I);
1882 PRINT #1, " ";USING "##.###";Y(I);
1884 PRINT #1, " ";USING "##.###";YE(I)
1885 NEXT I

```

```

1887 GOTO 1500
1890 IF RESP2$="S" OR RESP2$="s" THEN
1895 IF RESP2$="N" OR RESP2$="n" OR RESP2$=" " GOTO 1940
1900 PRINT #2, "D=";D1;"TETA=";TETA;"RAIO=";RAIO;"M=";MEX
1905 PRINT " "
1910 PRINT #2, "ESTAGIOS";" "; "ALFA "; "Y MODELO "; "Y EXPERIMENTAL"
1915 FOR I=1 TO N
1920 PRINT #2, " ";I," ";USING "##.###";ALFA(I);
1922 PRINT #2, " ";USING "##.###";Y(I);
1924 PRINT #2, " ";USING "##.###";YE(I)
1930 NEXT I
1940 END
1980 PRINT:PRINT "CONSIDERANDO R INDEPENDENTE,(ALFA+1) E BIOT
INFINITO":PRINT:PRINT
2500 'MONTAGEM DA MATRIZ'
2505 AN(0)=0
2510 J=1
2520 I=1
2530 IF J=I GOTO 2540
2535 GOTO 2550
2540 A(I,J)=1-AN(J-1)
2545 GOTO 2630
2550 IF J<I GOTO 2560
2555 GOTO 2570
2560 A(I,J)=AN(J+1)-AN(J-1)
2565 GOTO 2630
2570 IF J=I+1 GOTO 2580
2575 GOTO 2590
2580 A(I,J)=-AN(I)
2585 GOTO 2630
2590 A(I,J)=0
2595 GOTO 2630
2630 I=I+1
2640 IF I>N GOTO 2655
2650 GOTO 2530
2655 J=J+1
2660 IF J>N GOTO 2690
2670 GOTO 2520
2680 'MATRIZ AUMENTADA'
2690 FOR I=1 TO N
2700 A(I,J)=RN(1)*XO
2710 NEXT I
2720 GOTO 720
□

```

8.2 - PERFIL2.BAS, permite o estudo da variação de α e do número de Fick comparando o perfil de concentração calculado com o perfil experimental, tem como dados de entrada os valores de α estimado.

```

1 *****
2 '*          Programa PERFIL2.BAS (ALFA +1)
3 '*      Cálculo do perfil de concentração ao longo do equipamento e comparação
4 '*          com perfil experimental, considerando alfa estimado
5 '*
6 '*      elaboração: Brian Castelli Azevedo
7 '*      orientação: Dr. Enrique Ortega
8 *****
9 '
10 WIDTH "lpt1:", 255: PRINT CHR$(15)
11 'ENTRADA DE DADOS
12 NN = 30
13 DIM ALFA(NN),L(NN),S(NN),QN(NN),TAD(NN),F(NN),FIC(NN),BI(NN),FIN(NN),CA(NN)
14 DIM AN(NN),RN(NN),A(NN,NN),B(NN,NN),C(NN,NN),EFIC(NN),D(NN),G(NN),CC(NN)
15 DIM Y(NN),YE(NN),MA(NN),MB(NN),VAR1(NN),VAR2(NN),DY(NN),SD(NN)
16 YE(1) = .147: YE(2) = .125: YE(3) = .099: YE(4) = .076: YE(5) = .059: YE(6) = .042: YE(7) = .03
17 YE(8) = .018: YE(9) = 8.000001E-03
18 XE(1) = .168: XE(2) = .133: XE(3) = .104: XE(4) = .082: XE(5) = .059: XE(6) = .044: XE(7) = .031
19 XE(8) = .019: XE(9) = .01
20 CLOSE
21 INPUT "QUER GRAVAR OS RESULTADOS EM DISQUETE ";RESP1$
22 IF RESP1$="S" OR RESP1$="s" GOTO 73
23 GOTO 77
24 INPUT "QUAL O NOME DO ARQUIVO ";NOMEARQ$
25 OPEN NOMEARQ$ FOR OUTPUT AS#1
26 INPUT "QUER IMPRIMIR S/N ";RESP2$
27 IF RESP2$="S" OR RESP2$="s" GOTO 83
28 GOTO 90
29 OPEN "LPT1:" FOR OUTPUT AS#2
30 INPUT "ERRO ACEITAVEL (DE 0 A 1)";ERRO
31 INPUT "DIGITE 1 SE DESEJAR R ACUMULATIVO (SCHWARTZBERG) OU 2 SE DESEJAR R
INDEPENDENTE (PROPOSTA)";RESP3$
32 INPUT "TECLE F PARA BIOT FINITO OU I PARA BIOT INFINITO";RESP4$
33 IF RESP4$="F" GOTO 96
34 GOTO 99
35 INPUT "BIOT=";BIOT
36 PRINT:PRINT "AGUARDE, PROCESSANDO":PRINT:PRINT
37 MEX=1
38 N = 9: TETA = 158.4: RAO = 6.000001E-04: NQ = 5: XO = .182
39 D1 = 1.7E-10: D2 = D1
40 L(1)=13.63: L(2) = 14.949: L(3) = 16.268: L(4) = 17.587: L(5) = 18.906: L(6) = 20.224:
    L(7) = 21.543: L(8) = 22.862: L(9) = 24.181: L(10) = 25.5
41 S(0) = 12.77: S(1) = 14.089: S(2) = 15.408: S(3) = 16.727: S(4) = 18.046: S(5) = 19.364:
    S(6) = 20.63: S(7) = 22.002: S(8) = 23.321: S(9)=24.64
42 'CALCULO DE ALFA'
43 INPUT "FICK=";FICK
44 FOR I = 1 TO N
45 ALFA(I)=L(I+1)/S(I-1)
46 ALFA=ALFA(I)
47 'CALCULO DE Q'
48 Q = 3
49 FOR J = 1 TO NQ
50 IF RESP4$="F" GOTO 186
51 IF RESP4$="I" GOTO 190

```

```

186 F=TAN(Q)-(3*BIOT*Q-ALFA(I)*(Q^3))/(3*BIOT-ALFA(I)*(1-BIOT)*(Q^2))
188 FL=(1/COS(Q))^2-(9*(BIOT^2)+3*BIOT*ALFA(I)*(1-BIOT)*(Q^2)-
9*BIOT*ALFA(I)*(Q^2)+(ALFA(I)^2)*(1-BIOT)*(Q^4))/((3*BIOT-ALFA(I)*(1-BIOT)*(Q^2))^2)
189 GOTO 205
190 F = TAN(Q) - 3 * Q / (3 + ALFA(I) * (Q ^ 2))
200 FL = (1/COS(Q))^2 + (3*ALFA(I)*(Q^2) - 9)/((3+ALFA(I)*(Q^2))^2)
205 REM PRINT "ALFA(";I;")=";ALFA(I);"FL=";FL;"F=";F
210 A = Q
220 Q = A - F / FL
230 B = ABS(Q - A)
240 C = B / Q
245 REM PRINT "A=";A;"Q=";Q;"B=";B;"C=";C
250 IF C <= .0001 GOTO 270
260 GOTO 190
270 QN(J) = Q
275 REM PRINT "QN(";J;")=";Q;
280 Q = Q + 3.15
283 REM PRINT
290 NEXT J
293 REM PRINT
295 'CALCULO DE B, F'
300 J = 1
310 TAD(I) = FICK
315 REM PRINT TAD(I)
320 F(I) = 0
322 IF RESP3$="2" GOTO 325
323 GOTO 330
325 FIC(J) = (QN(J) ^ 2) * TAD(I)
327 GOTO 335
330 FIC(J) = (QN(J) ^ 2) * I * TAD(I)
335 IF RESP4$="F" GOTO 340
336 GOTO 380
340 IF I>EST GOTO 380
350 BI(J)=6*BIOT^2*ALFA(I)*(ALFA(I)+1)/((ALFA(I)*Q)^2*(BIOT^2-
BIOT+Q^2)+9*BIOT^2*(ALFA(I)+1)+6*BIOT*ALFA(I)*Q^2)
360 GOTO 390
380 BI(J)=6*ALFA(I)*(ALFA(I)+1)/(9+9*ALFA(I)+(QN(J)*ALFA(I))^2)
390 FIN(J) = BI(J) * EXP(-FIC(J))
400 F(I) = F(I) + FIN(J)
405 IF J = NQ GOTO 420
407 GOTO 420
420 J = J + 1
430 IF J > NQ GOTO 450
440 GOTO 322
445 'CALCULO DE A, R'
450 AN(I) = (ALFA(I) + F(I)) / (ALFA(I) + 1)
460 RN(I) = 1 - AN(I)
465 EFIC(I) = ALFA(I) * RN(I)
480 NEXT I
500 'MONTAGEM DA MATRIZ'
505 IF RESP3$="1" GOTO 508
506 IF RESP3$="2" GOTO 1980
507 GOTO 502
508 PRINT:PRINT "CONSIDERANDO R ACUMULATIVO E (ALFA + 1)":PRINT

```

```

509 IF RESP4$="I" GOTO 512
510 PRINT "BIOT=",BIOT:PRINT:PRINT:GOTO 514
512 PRINT "BIOT INFINITO":PRINT:PRINT
514 AN(0) = 1
515 J = 1
520 I = 1
530 IF J < I + 1 GOTO 590
540 IF J = I + 1 GOTO 570
550 A(I, J) = 0
560 GOTO 630
570 A(I, J) = -AN(1)
580 GOTO 630
590 IF J = 1 GOTO 620
600 A(I, J) = AN(I - J) - AN(I + 2 - J)
610 GOTO 630
620 A(I, J) = AN(I - 1)
630 I = I + 1
640 IF I > N GOTO 655
650 GOTO 530
655 J = J + 1
660 IF J > N GOTO 690
670 GOTO 520
680 'MATRIZ AUMENTADA'
690 FOR I = 1 TO N
700 A(I, J) = RN(I) * XO * MEX
710 NEXT I
720 'ELIMINACAO DE GAUSS'
730 K = 0
740 G(K) = -A(N - 1 - K, N - K) / A(N - K, N - K)
750 FOR J = 1 TO N + 1
760 C(N, J) = A(N, J)
770 B(N - K, J) = A(N - K, J) * G(K)
775 C(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J)
780 A(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J) + B(N - K, J)
790 NEXT J
800 K = K + 1
810 IF K = N - 1 GOTO 840
820 GOTO 740
830 'DETERMINACAO DO PERFIL DE CONCENTRACAO'
840 FOR I = 1 TO N
841 FOR J=1 TO N
843 NEXT J
844 NEXT I
845 FOR I=1 TO N
850 CC(I) = 0
860 J = 2
870 IF I > 1 GOTO 890
880 GOTO 940
890 CA(J) = A(I, J - 1) * Y(J - 1)
900 CC(I) = CC(I) + CA(J)
910 IF J = 1 GOTO 940
920 J = J + 1
930 GOTO 890
940 Y(I) = (A(I, N + 1) - CC(I)) / A(I, I)

```

```

950 NEXT I
960 'MOSTRAR PERFIL CALCULADO'
970 FOR I = 1 TO N
975 PRINT "ALFA(";I;")="; USING "##.###"; ALFA(I);
980 PRINT "  "; "Y(";I;")="; USING "##.###"; Y(I);
981 PRINT "  "; "YE(";I;")="; USING "##.###"; YE(I)
982 NEXT I
1030 EFICIE = L(1) * Y(1) / (S(0) * XO)
1040 PRINT:PRINT "EFICIE="; EFICIE:PRINT
1050 GOTO 1300
1120 'MEDIA'
1130 ERMA = ERRO * YE(1)
1140 FOR I=1 TO N
1150   DIF(I) = ABS(YE(I)-Y(I))
1160   IF DIF(I) < ERMA GOTO 1190
1170   PRINT "DIF(";I;")="; DIF(I); "> ERRO MAXIMO =" ; ERMA
1180   MNA = 1
1190 NEXT I
1200   IF MNA = 1 GOTO 1230
1210 PRINT:PRINT "MODELO ACEITO, TODOS OS PONTOS ESTAO DENTRO DA FAIXA
ACEITAVEL QUE E' "; ERMA
1220 GOTO 1830
1230 PRINT:PRINT "MODELO NAO ACEITO"
1300 INSE = 0
1310 FOR I=1 TO N
1320   DIF(I) = ABS(YE(I)-Y(I))
1330   IF DIF(I) > INSE GOTO 1350
1340 GOTO 1370
1350 INSE = DIF(I)
1360 CONTA = I
1370 NEXT I
1380 ERMA = (INSE/YE(1)) * 100
1390 PRINT:PRINT "O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE "; USING "##.###"; ERMA;
1400 PRINT "%, ENCONTRADO NO ESTAGIO "; CONTA
1490 GOTO 1830
1500 INSE = 0
1510 FOR I=1 TO N
1520   DIF(I) = ABS(YE(I)-Y(I))
1530   IF DIF(I) > INSE GOTO 1550
1540 GOTO 1570
1550 INSE = DIF(I)
1560 CONTA = I
1570 NEXT I
1580 ERMA = (INSE/YE(1)) * 100
1585 PRINT #1, " "
1590 PRINT #1, "O MODELO APRESENTA UM ERRO MAXIMO DE "; USING "##.###"; ERMA;
1600 PRINT #1, "%, ENCONTRADO NO ESTAGIO "; CONTA
1605 PRINT #1, "FICK="; FICK
1610 GOTO 1890
1830 IF RESP1$="S" OR RESP1$="s" THEN
1840 IF RESP1$="N" OR RESP1$="n" OR RESP1$=" " GOTO 1890
1850 PRINT #1, "D="; D1; "TETA="; TETA; "RAIO="; RAIO; "M="; MEX
1855 PRINT " "
1860 PRINT #1, "ESTAGIOS"; "  "; "ALFA    "; "Y MODELO    "; "Y EXPERIMENTAL"

```

```

1870 FOR I=1 TO N
1880 PRINT #1," ";I;" ";USING "###.###";ALFA(I);
1882 PRINT #1," ";USING "###.###";Y(I);
1884 PRINT #1," ";USING "###.###";YE(I)
1885 NEXT I
1887 GOTO 1500
1890 IF RESP2$="S" OR RESP2$="s" THEN
1895 IF RESP2$="N" OR RESP2$="n" OR RESP2$=" " GOTO 1940
1900 PRINT #2,"D=";D1;"TETA=";TETA;"RAIO=";RAIO;"M=";MEX
1905 PRINT " "
1910 PRINT #2,"ESTAGIOS"," ";ALFA ";Y MODELO ";Y EXPERIMENTAL"
1915 FOR I=1 TO N
1920 PRINT #2," ";I;" ";USING "###.###";ALFA(I);
1922 PRINT #2," ";USING "###.###";Y(I);
1924 PRINT #2," ";USING "###.###";YE(I)
1930 NEXT I
1940 END
1980 PRINT:PRINT "CONSIDERANDO R INDEPENDENTE E (ALFA + 1)":PRINT:PRINT
1990 IF RESP4$="I" GOTO 2000
1995 PRINT "BIOT=";BIOT:PRINT:PRINT:GOTO 2500
2000 PRINT:PRINT "BIOT INFINITO":PRINT
2500 'MONTAGEM DA MATRIZ'
2505 AN(0)=0
2510 J=1
2520 I=1
2530 IF J=I GOTO 2540
2535 GOTO 2550
2540 A(I,J)=1-AN(J-1)
2545 GOTO 2630
2550 IF J<I GOTO 2560
2555 GOTO 2570
2560 A(I,J)=AN(J+1)-AN(J-1)
2565 GOTO 2630
2570 IF J=I+1 GOTO 2580
2575 GOTO 2590
2580 A(I,J)=-AN(I)
2585 GOTO 2630
2590 A(I,J)=0
2595 GOTO 2630
2630 I=I+1
2640 IF I>N GOTO 2655
2650 GOTO 2530
2655 J=J+1
2660 IF J>N GOTO 2690
2670 GOTO 2520
2680 'MATRIZ AUMENTADA'
2690 FOR I=1 TO N
2700 A(I,J)=RN(1)*XO
2710 NEXT I
2720 GOTO 720

```

□

8.3 - SIMULA.BAS, simula o comportamento do equipamento gerando uma tabela dos valores da eficiência com relação a variação de α a partir de um determinado número de Fick.

```

1 '*****
2 '*          Programa SIMULA.BAS
3 '*      Determinação do rendimento a partir do numero de Fick (D*TETA/RAIO2)
4 '*          para diferentes valores de ALFA
5 '*
6 '*      elaboração: Brian Castelli Azevedo
7 '*      orientação: Dr. Enrique Ortega
8 '*
9 '*****
10 '
11 WIDTH "lpt1:", 255: PRINT CHR$(15)
12 'ENTRADA DE DADOS
13 NN = 20
14 DIM ALFA(NN),L(NN),S(NN),QN(NN),TAD(NN),F(NN),N.FICK(NN),BI(NN),FIN(NN)
15 DIM AN(NN),RN(NN),A(NN,NN),B(NN,NN),C(NN,NN),D(NN),CC(NN),CA(NN),Y(NN),G(NN),
16 EFICIE(NN,NN)
17 CLOSE
18 PRINT "QUER GRAVAR OS RESULTADOS EM DISQUETE S/N ?"
19 INPUT RESP1$
20 IF RESP1$ = "S" OR RESP1$ = "s" GOTO 48
21 GOTO 54
22 PRINT "QUAL O NOME DO ARQUIVO ?"
23 INPUT NOMEARQ$
24 OPEN NOMEARQ$ FOR OUTPUT AS #1
25 PRINT "QUER IMPRIMIR S/N ?"
26 INPUT RESP2$
27 IF RESP2$ = "S" OR RESP2$ = "s" GOTO 62
28 GOTO 85
29 OPEN "LPT1:" FOR OUTPUT AS #2
30 GOTO 85
31 INPUT "FICK=";FICK
32 NQ=5:ME=1
33 INPUT "XO=";XO
34 INPUT "EF.FINAL=";EF.FINAL
35 M = 1
36 INPUT "ALFA.IN=";ALFA:INPUT "ALFA.FIM=";ALFA.FIM
37 INPUT "INC.ALFA=";INC.ALFA
38 FOR N = 1 TO 10
39   FIC = FICK
40   FOR I = 1 TO N
41     '
42     'CALCULO DE Q'
43     Q = 3
44     FOR J = 1 TO NQ
45       F = TAN(Q) - 3 * Q / (3 + ALFA * (Q ^ 2))
46       FL=(1/COS(Q))^2+(3*ALFA*(Q^2)-9)/((3+ALFA*(Q^2))^2)
47       A = Q
48       Q = A - F / FL
49       B = ABS(Q - A)

```

```

240      C = B / Q
250      IF C <= .0001 GOTO 270
260      GOTO 190
270      QN(J) = Q
280      Q = Q + 3.15
290      NEXT J
295 'CALCULO DE B, F'
300      J = 1
350 N.FICK(I) = FIC*I
360      F(I) = 0
370      TAD(J) = (QN(J) ^ 2) * N.FICK(I)
380      BI(J) = 6 * ALFA * (1 + ALFA) / (9 + 9 * ALFA + (QN(J) * ALFA) ^ 2)
390      FIN(J) = BI(J) * EXP(-TAD(J))
400      F(I) = F(I) + FIN(J)
420      J = J + 1
430      IF J > NQ GOTO 450
440      GOTO 370
445 'CALCULO DE A, R'
450      AN(I) = (ALFA + F(I)) / (ALFA + 1)
460      RN(I) = 1 - AN(I)
480 NEXT I
490 GOTO 2500
500 'MONTAGEM DA MATRIZ'
505 AN(0) = 1
510 J = 1
520 I = 1
530 IF J < I + 1 GOTO 590
540 IF J = I + 1 GOTO 570
550      A(I, J) = 0
560      GOTO 630
570      A(I, J) = -AN(1)
580      GOTO 630
590 IF J = 1 GOTO 620
600      A(I, J) = AN(I - J) - AN(I + 2 - J)
610      GOTO 630
620      A(I, J) = AN(I - 1)
630 I = I + 1
640 IF I > N GOTO 655
650 GOTO 530
655 J = J + 1
660 IF J > N GOTO 690
670 GOTO 520
680 'MATRIZ AUMENTADA'
690 FOR I = 1 TO N
700 A(I, J) = RN(I)*XO*ME
710 NEXT I
720 'ELIMINACAO DE GAUSS'
730 K = 0
740 G(K) = -A(N - 1 - K, N - K) / A(N - K, N - K)
750 FOR J = 1 TO N + 1
760 C(N, J) = A(N, J)
770 B(N - K, J) = A(N - K, J) * G(K)
775 C(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J)
780 A(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J) + B(N - K, J)

```

```

790 NEXT J
800 K = K + 1
810 IF K > N - 2 GOTO 840
820 GOTO 740
830 'DETERMINACAO DO PERFIL DE CONCENTRACAO'
840 FOR I = 1 TO N
850 CC(I) = 0
860 J = 2
870 IF I > 1 GOTO 890
880 GOTO 940
890 CA(J) = A(I, J - 1) * Y(J - 1)
900 CC(I) = CC(I) + CA(J)
910 IF J = I GOTO 940
920 J = J + 1
930 GOTO 890
940 Y(I) = (A(I, N + 1) - CC(I)) / A(I, I)
950 NEXT I
1030 EFICIE(N, M) = ALFA*Y(1)/(XO*ME)
1040 IF EFICIE(N, M) > EF.FINAL GOTO 1046
1045 NEXT N
1046 IF M = 1 GOTO 1048
1047 GOTO 1075
1048 N1 = N
1075 ALFA(M) = ALFA
1100 ALFA = ALFA + INC.ALFA
1110 IF ALFA > ALFA.FIM GOTO 1215
1115 M = M + 1
1120 GOTO 145
1130 END
1140 FOR I=1 TO N1-1
1150 J = 1
1160 PRINT USING "##.####", N.FICK(I);
1170 FOR J = 1 TO M
1180 PRINT " "; USING "##.####", EFICIE(I, J);
1190 NEXT J
1195 PRINT ""
1200 NEXT I
1210 GOTO 1420
1215 PRINT "D="; D; "TETA="; TETA; "RAIO="; RAIO; "XO="; XO
1216 PRINT "N.FICK"; " "; "EFICIENCIAS P/ CADA ALFA"
1218 PRINT "ALFA="; " ";
1220 FOR J = 1 TO M
1230 PRINT " "; USING "##.####", ALFA(J);
1240 NEXT J
1245 PRINT ""
1250 GOTO 1140
1260 REM IF RESP2$ = "S" OR RESP2$ = "s" THEN
1265 IF RESP2$ = "N" OR RESP2$ = "n" OR RESP2$ = " " GOTO 1130
1270 PRINT #2, "N.FICK"; " "; "EFICIENCIAS P/ CADA ALFA"
1280 PRINT #2, "ALFA="; " ";
1300 FOR J = 1 TO M
1310 PRINT #2, " "; USING "##.####", ALFA(J);
1320 NEXT J
1330 PRINT #2, ""

```

```

1350 FOR I=1 TO N1-1
1360 PRINT #2, USING "##.####"; N.FICK(I);
1370 FOR J = 1 TO M
1380 PRINT #2, " "; USING "##.####"; EFICIE(I, J);
1390 NEXT J
1395 PRINT #2, ""
1400 NEXT I
1410 GOTO 1130
1420 REM IF RESP1$ = "S" OR RESP1$ = "s" THEN
1430 IF RESP1$ = "N" OR RESP1$ = "n" OR RESP1$ = " " GOTO 1260
1450 PRINT #1, "ALFA="; " ";
1470 FOR J = 1 TO M
1480 PRINT #1, " "; USING "##.####"; ALFA(J);
1490 NEXT J
1500 PRINT #1, ""
1505 PRINT #1, "N.FICK"; " "; "EFICIENCIAS P/ CADA ALFA"
1510 FOR I=1 TO N1-1
1520 PRINT #1, USING "##.####"; N.FICK(I);
1530 FOR J = 1 TO M
1540 PRINT #1, " "; USING "##.####"; EFICIE(I, J);
1550 NEXT J
1565 PRINT #1, ""
1570 NEXT I
1580 GOTO 1260
1600 AN(0)=0
1610 J=1
1620 I=1
1630 IF J=I GOTO 1650
1640 GOTO 1670
1650 A(I,J)=1-AN(J-1)
2500 AN(0)=0
2510 J=1
2520 I=1
2530 IF J=I GOTO 2540
2535 GOTO 2550
2540 A(I,J)=1-AN(J-1)
2545 GOTO 2630
2550 IF J<I GOTO 2560
2555 GOTO 2570
2560 A(I,J)=AN(J+1)-AN(J-1)
2565 GOTO 2630
2570 IF J=I+1 GOTO 2580
2575 GOTO 2590
2580 A(I,J)=-AN(I)
2585 GOTO 2630
2590 A(I,J)=0
2595 GOTO 2630
2630 I=I+1
2640 IF I>N GOTO 2655
2650 GOTO 2530
2655 J=J+1
2660 IF J>N GOTO 2690
2670 GOTO 2520
2680 'MATRIZ AUMENTADA'

```

```

2690 FOR I=1 TO N
2700 A(I,J)= RN(1)*XO
2710 NEXT I
2720 GOTO 720

```

8.4 - ESTAGIO.BAS, calcula o número de estágios e determina o perfil de concentração ao longo do equipamento para um rendimento desejado.

```

1 *****
2 '*                                     Programa ESTAGIO.BAS
3 '*      Calculo do numero de estagios a partir da eficiencia desejada
4 '*
5 '*      Elaboração: Brian Castelli Azevedo
6 '*      Orientação: Dr. Enrique Ortega
7 *****
8 '
9 WIDTH "lpt1:", 255: PRINT CHR$(15)
10 'ENTRADA DE DADOS
11 NN = 30
12 DIM ALFA(NN), L(NN), S(NN), QN(NN), TAD(NN), F(NN), FIC(NN), BI(NN), FIN(NN)
13 DIM AN(NN), RN(NN), A(NN, NN), B(NN, NN), C(NN, NN), EFIC(NN), D(NN), CC(NN),
14 CA(NN), Y(NN), G(NN)
15 NQ=5
16 INPUT "TETA=";TETA:INPUT "RAIO=";RAIO:INPUT "XO=";XO
17 INPUT "D=";D:INPUT "ALFA=";ALFA:INPUT "EF.FINAL=";EF.FINAL
18 '
19 PRINT:PRINT:PRINT "POR FAVOR, AGUARDE ESTOU PROCESSANDO"
20 PRINT:PRINT
21 FOR N=1 TO 20
22 FOR I = 1 TO N
23     ALFA(I)=ALFA
24 '
25 'CALCULO DE Q'
26 Q = 3
27 FOR J = 1 TO NQ
28     F = TAN(Q) - 3 * Q / (3 + ALFA(I) * (Q ^ 2))
29     FL=(1/COS(Q))^2+(3*ALFA(I)*(Q^2)-9)/((3+ALFA(I)*(Q^2))^2)
30     A = Q
31     Q = A - F / FL
32     B = ABS(Q - A)
33     C = B / Q
34     IF C <= .0001 GOTO 270
35     GOTO 190
36     QN(J) = Q
37     Q = Q + 3.15
38 NEXT J
39 'CALCULO DE B, F'
40 J = 1
41 TAD(I) = D * TETA / (RAIO ^ 2)
42 F(I) = 0
43 FIC(J) = (QN(J) ^ 2) * I * TAD(I)

```

```

380 BI(J)=6*ALFA(I)*(1+ALFA(I))/(9+9*ALFA(I)+(QN(J)*ALFA(I))^2)
390 FIN(J) = BI(J) * EXP(-FIC(J))
394 GOTO 400
400 F(I) = F(I) + FIN(J)
405 IF J = NQ GOTO 420
407 GOTO 420
420 J = J + 1
430 IF J > NQ GOTO 450
440 GOTO 370
445 'CALCULO DE A, R'
450 AN(I) = (ALFA(I) + F(I)) / (ALFA(I) + 1)
460 RN(I) = 1 - AN(I)
465 EFIC(I) = ALFA(I) * RN(I)
469 GOTO 480
480 NEXT I
500 'MONTAGEM DA MATRIZ'
505 AN(0) = 1
510 J = 1
520 I = 1
530 IF J < I + 1 GOTO 590
540 IF J = I + 1 GOTO 570
550 A(I, J) = 0
560 GOTO 630
570 A(I, J) = -AN(1)
580 GOTO 630
590 IF J = 1 GOTO 620
600 A(I, J) = AN(I - J) - AN(I + 2 - J)
610 GOTO 630
620 A(I, J) = AN(I - 1)
630 I = I + 1
640 IF I > N GOTO 655
650 GOTO 530
655 J = J + 1
660 IF J > N GOTO 690
670 GOTO 520
680 'MATRIZ AUMENTADA'
690 FOR I = 1 TO N
700 A(I, J) = RN(I) * XO
710 NEXT I
720 'ELIMINACAO DE GAUSS'
730 K = 0
740 G(K) = -A(N - 1 - K, N - K) / A(N - K, N - K)
744 GOTO 750
745 PRINT "K="; K; "G(K)"; G(K)
750 FOR J = 1 TO N + 1
760 C(N, J) = A(N, J)
770 B(N - K, J) = A(N - K, J) * G(K)
775 C(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J)
780 A(N - 1 - K, J) = A(N - 1 - K, J) + B(N - K, J)
790 NEXT J
800 K = K + 1
810 IF K > N - 2 GOTO 840
820 GOTO 740
830 'DETERMINACAO DO PERFIL DE CONCENTRACAO'

```

```

840 FOR I = 1 TO N
850 CC(I) = 0
860 J = 2
870 IF I > 1 GOTO 890
880 GOTO 940
890 CA(J) = A(I, J - 1) * Y(J - 1)
900 CC(I) = CC(I) + CA(J)
910 IF J = I GOTO 940
920 J = J + 1
930 GOTO 890
940 Y(I) = (A(I, N + 1) - CC(I)) / A(I, I)
950 NEXT I
960 'MOSTRAR PERFIL CALCULADO'
970 FOR I = 1 TO N
980 PRINT "Y("; I; ")="; Y(I)
982 NEXT I
985 FOR I = 1 TO N
990   FOR J = 1 TO N + 1
999   GOTO 1010
1000  PRINT "A("; I; J; ")="; A(I, J); "C("; I; J; ")="; C(I, J)
1010  NEXT J
1020 NEXT I
1030 EFICIE = ALFA(1) * Y(1) / XO
1035 PRINT "EFICIE="; EFICIE
1040 PRINT
1041 IF EFICIE > EF.FINAL GOTO 1043
1042 NEXT N
1043 PRINT "N="; N; "TETA="; TETA; "D="; D; "RAIO="; RAIO; "ALFA="; ALFA(1)
1045 END
□

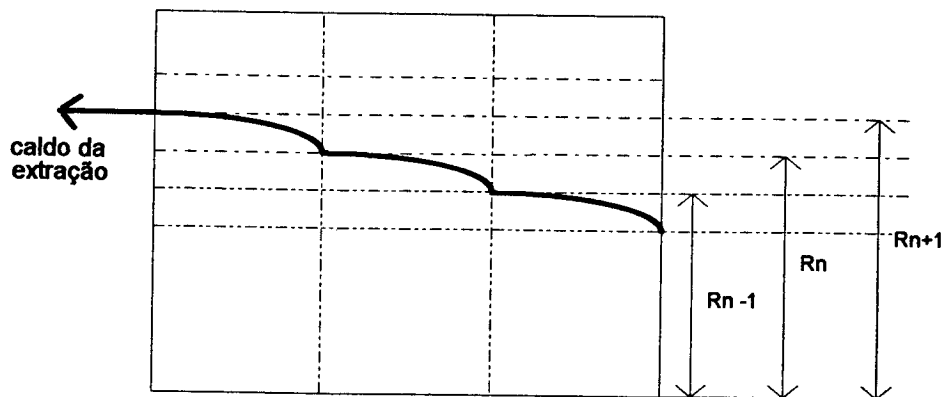
```

8.5 - Síntese da Comparação dos Dois Modelos:

A diferença básica entre o modelo proposto por Schwartzberg e o nosso modelo alternativo é o parâmetro R (fração de soluto retirada).

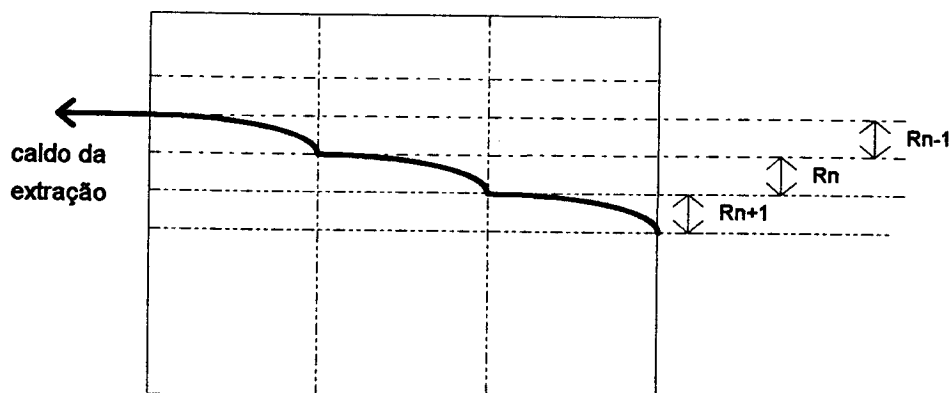
Schwartzberg considera R acumulativo, ou seja, a fração retirada num estágio n é adicionada as frações retiradas nos estágios anteriores obtendo assim o valor para R_n , que representa a fração retirada em n estágios, como é mostrado na expressão e na figura abaixo:

$$R_n = R_{n-1} + \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{X_{n-1} - X_n}{X_0 - X_\infty} \right)$$



O modelo alternativo considera R não acumulativo, ou seja, R_n representa a fração retirada no estágio n e não em n estágios como no modelo de Schwartzberg. a expressão matemática para R_n e a representação gráfica para o modelo alternativo são mostradas abaixo:

$$R_n = \frac{1}{\alpha + 1} \left(\frac{X_{n-1} - X_n}{X_{n-1} - X_\infty} \right)$$



A expressão geral para a concentração no líquido para cada um dos modelos é mostrada abaixo:

a) Modelo I (Schwartzberg)

$$Y_1 = R_N (mX_o - Y_2) + R_{N-1} (Y_1 - Y_3) + \dots + R_1 (Y_{N-1} - Y_{N+1}) + Y_{N+1}$$

b) Modelo II (alternativo)

$$Y_1 = R_1 (mX_o - Y_2) + R_2 (Y_1 - Y_3) + \dots + R_N (Y_{N-1} - Y_{N+1}) + Y_{N+1}$$